



UNIVERSITAT
POLITÈCNICA
DE VALÈNCIA

CAMPUS D'ALCOI

Diseño y estudio económico de un proceso de producción de Etilbenceno utilizando ProMax

MEMORIA PRESENTADA POR:

Pau Pascual Colomina

TUTORES:

María Fernanda López Pérez

Salvador Cayetano Cardona Navarrete

GRADO DE INGENIERÍA QUÍMICA

Convocatoria de defensa: Septiembre de 2021

Resumen

En este proyecto se ha seleccionado y diseñado el proceso productivo de una planta de generación de etilbenceno. El trabajo pretende contrastar los distintos procesos industriales para la producción de etilbenceno, con el fin de establecer el método óptimo de obtención. Para la alternativa tecnológica que finalmente se escoja se establecerá el diagrama de flujo del proceso, se fijará la capacidad de producción de la planta y se determinarán las condiciones de operación y los parámetros de diseño que mejor se adapten al proceso productivo. También se analizará su viabilidad técnica y se realizará una estimación económica del proceso. Para ello se hará uso del simulador de procesos ProMax y de diferentes tipos de herramientas para realizar estimaciones económicas.

Palabras clave: Diseño de procesos; Etilbenceno; ProMax; Estudio económico

Resum

En aquest projecte s'ha seleccionat i dissenyat el procés productiu d'una planta de generació d'etilbenzé. El treball pretén contrastar els diferents processos industrials per a la producció d'etilbenzé, amb la finalitat d'establir el mètode òptim d'obtenció. Per a l'alternativa tecnològica que finalment es trie s'establirà el diagrama de flux del procés, es fixarà la capacitat de producció de la planta i es determinaran les condicions d'operació i els paràmetres de disseny que millor s'adapten al procés productiu. També s'analitzarà la seua viabilitat tècnica i es realitzarà una estimació econòmica del procés. Per a això es farà ús del simulador de processos ProMax i de diferents tipus d'eines per a realitzar estimacions econòmiques.

Paraules clau: Disseny de processos; Etilbenzé; ProMax; Estudi econòmic

Abstract

In this project, the production process of an ethylbenzene generation plant has been selected and designed. The work aims to contrast the different industrial processes for the production of ethylbenzene, in order to establish the optimal method of obtaining it. For the technological alternative that is finally chosen, the process flow diagram will be defined, the production capacity of the plant will be established and the operating conditions and design parameters that best adapt to the production process will be determined. Its technical viability will also be analyzed and cost estimation of the process will be carried out. For this, ProMax process simulator and different types of tools will be used to estimate the costs of manufacturing.

Keywords: Process design; Ethylbenzene; ProMax; Economic analysis

Índice de Contenidos

Resumen.....	2
Resum.....	2
Abstract	2
Índice de Contenidos.....	3
Índice de figuras.....	5
Índice de tablas	6
1. Introducción	7
1.1 Antecedentes	7
1.2 Usos del Etilbenceno en la industria química	9
2. Objetivo.....	10
2.1 Objetivo académico.....	10
2.2 Objetivo técnico	10
3. Procesos de obtención de Etilbenceno	11
3.1 Proceso catalizado por AlCl_3 en fase líquida	12
3.2 Proceso catalizado por zeolitas en fase vapor	16
3.3 Proceso catalizado por zeolitas en fase líquida.....	18
3.4 Proceso catalizado por zeolitas en fase mixta líquido-vapor.....	19
3.5 Proceso de producción de etilbenceno por separación de xilenos	21
4. Producción Industrial de etilbenceno mediante ruta de Alquilación	21
4.1 Descripción del proceso	21
4.2 Pretratamiento del alimento.....	24
4.2.1 Alimento	24
4.2.2 Equipos utilizados para el pretratamiento de los alimentos.....	24
4.3 Equipos utilizados para la alquilación y transalquilación.....	26
4.3.1 Diseño de reactores	27
4.4 Catalizadores utilizados en la producción de Etilbenceno.....	28
4.4.1 Catalizador de AlCl_3	28
4.4.1.1 Equipos de preparación/reemplazo del catalizador de AlCl_3	29
4.4.1.2 Equipos de tratamiento del AlCl_3 consumido.....	30
4.4.2 Catalizadores de Zeolita.....	31
4.4.2.1 Desactivación y regeneración de catalizadores de zeolita.....	34
4.5 Instalaciones de fraccionamiento	36

4.5.1	Columna de recuperación de benceno	38
4.5.2	Columna de recuperación de etilbenceno.....	38
4.5.3	Columna de recuperación de polietilbencenos	38
5.	Balances de materia y Cinéticas de reacción	39
6.	Simulación del proceso de producción de etilbenceno en ProMax.....	43
6.1	Elección del proceso de alquilación	43
6.2	Simulación proceso en ProMax.....	44
7.	Estudio económico	52
7.1	Integración energética	52
7.2	Costes de producción.....	61
7.2.1	Capital Fijo de Inversión (FCI)	62
7.2.1.1	Listado de equipos	62
7.2.2	Costes de mano de obra (C_{OL}).....	67
7.2.3	Coste de servicios (C_{UT})	67
7.2.4	Coste tratamiento de residuos (C_{WT}).....	68
7.2.5	Coste materia prima (C_{RM})	68
7.3	Análisis de rentabilidad	70
7.3.1	Análisis de rentabilidad tras integración energética	73
8.	Conclusiones.....	75
	Bibliografía	76
	Anexo I: Cálculo número de platos mínimo columnas.....	78
	Anexo II: Tabla caudales de servicios utilizados en los intercambiadores de calor	80
	Anexo III: Fichas de seguridad Química.....	81

Índice de figuras

FIGURA 1. OSCILACIÓN PRECIO DE VENTA ETILBENCENO 2015-2016 EN US CTS/LB.....	9
FIGURA 2. MOLÉCULA DE ETILBENCENO	9
FIGURA 3. PRODUCCIÓN DE ETILBENCENO CATALIZADO CON CLORURO DE ALUMINIO.....	13
FIGURA 4. PROCESO DE PRODUCCIÓN DE ETILBENCENO POR ALQUILACIÓN EN FASE LÍQUIDA HOMOGÉNEA (PROCESO MONSANTO/LUMMUS).....	15
FIGURA 5. DIAGRAMA DE FLUJO PROCESO ALKAR PARA LA PRODUCCIÓN DE ETILBENCENO	16
FIGURA 6. PROCESO DE PRODUCCIÓN DE ETILBENCENO MOBIL-BADGER DE TERCERA GENERACIÓN	17
FIGURA 7. PROCESO LUMMUS/UOP DE PRODUCCIÓN DE ETILBENCENO	19
FIGURA 8. PROCESO EBMAX DE PRODUCCIÓN DE ETILBENCENO.....	19
FIGURA 9. PROCESO DE PRODUCCIÓN DE ETILBENCENO CDTECH.....	20
FIGURA 10. AVANCES EN LAS TECNOLOGÍAS UTILIZADAS EN LOS PROCESOS DE PRODUCCIÓN DE EB	21
FIGURA 11. DIAGRAMA DE BLOQUES PARA LA PRODUCCIÓN DE ETILBENCENO CATALIZADA POR $AlCl_3$	22
FIGURA 12. DIAGRAMA DE BLOQUES PARA LA PRODUCCIÓN DE ETILBENCENO CATALIZADO POR ZEOLITAS	23
FIGURA 13. PRETRATAMIENTO ALIMENTACIÓN DE BENCENO CON INTERCAMBIADORES DE CALOR Y DECANTADOR.....	25
FIGURA 14. GUARD BED CERÁMICO DE LECHO FIJO PARA EL PRETRATAMIENTO DEL ETILENO ALIMENTADO AL PROCESO.....	26
FIGURA 15. TIPOS DE REACTORES UTILIZADOS PARA LA ALQUILACIÓN DEL BENCENO CON ETILENO EN PROCESOS CATALIZADOS CON $AlCl_3$	27
FIGURA 16. REACTORES DE ALQUILACIÓN DE ZEOLITAS PARA LA PRODUCCIÓN DE ETILBENCENO.....	28
FIGURA 17. DIAGRAMA DE FLUJO PLANTA PRODUCCIÓN EB CATALIZADO POR $AlCl_3$	31
FIGURA 18. SITIOS ÁCIDOS LEWIS-BRØNSTED EN LAS MOLÉCULAS DE CATALIZADOR DE ZEOLITA.....	31
FIGURA 19. DIAGRAMA DE BLOQUES SIMPLIFICADO PLANTA DE PRODUCCIÓN DE ETILBENCENO	42
FIGURA 20. DIAGRAMA DE FLUJO PROCESO DE PRODUCCIÓN ETILBENCENO	44
FIGURA 21. ÁRBOL DE DECISIÓN DEL PAQUETE TERMODINÁMICO DE SIMULACIÓN PARA ASPEN/PROMAX	45
FIGURA 22. DIAGRAMA DE FLUJO SIMULACIÓN PLANTA DE PRODUCCIÓN DE ETILBENCENO EN FASE VAPOR UTILIZANDO PROMAX.....	48
FIGURA 23. DATOS Y GRÁFICA CURVA COMPUESTA FRÍA	53
FIGURA 24. DATOS Y GRÁFICA CURVA COMPUESTA CALIENTE	54
FIGURA 25. CURVAS COMPUESTAS FRÍA-CALIENTE ENTRELAZADAS	54
FIGURA 26. DIAGRAMA DE INTERVALO DE TEMPERATURA	55
FIGURA 27. DIAGRAMA DE CASCADA	55
FIGURA 28. GRAN CURVA COMPUESTA Y DATOS DE ENTALPÍA	58
FIGURA 29. COSTE DE LOS EQUIPOS UTILIZADOS EN LA PLANTA DE PRODUCCIÓN DE ETILBENCENO	66
FIGURA 30. COSTE DE SERVICIOS SIN INTEGRACIÓN ENERGÉTICA.....	68
FIGURA 31. COSTES MATERIA PRIMA	68
FIGURA 32. CÁLCULO COSTE DE PRODUCCIÓN SIN DEPRECIACIÓN	69
FIGURA 33. CÁLCULO COSTE DE PRODUCCIÓN CON DEPRECIACIÓN	69
FIGURA 34. DIAGRAMA FLUJO DE CAJA DESCONTADO SIN DEPRECIACIÓN EN LOS COSTES	70
FIGURA 35. ANÁLISIS RENTABILIDAD SIN DEPRECIACIÓN EN LOS COSTES	71
FIGURA 36. DIAGRAMA FLUJO DE CAJA DESCONTADO CON DEPRECIACIÓN EN LOS COSTES	72
FIGURA 37. ANÁLISIS RENTABILIDAD CON DEPRECIACIÓN EN LOS COSTES.....	72
FIGURA 38. CÁLCULO COSTE DE PRODUCCIÓN CON INTEGRACIÓN	73
FIGURA 39. DIAGRAMA FLUJO DE CAJA DESCONTADO CON INTEGRACIÓN ENERGÉTICA	74
FIGURA 40. ANÁLISIS RENTABILIDAD CON INTEGRACIÓN ENERGÉTICA	74
FIGURA 41. CÁLCULO PLATOS MÍNIMOS DTWR-102 EN PROMAX.....	79

Índice de tablas

TABLA 1. CAPACIDADES MUNDIALES DE PRODUCCIÓN DE ETILBENCENO EN MILES DE TONELADAS ENTRE 1985 Y 1995	7
TABLA 2. CAPACIDAD MUNDIAL DE PRODUCCIÓN DE ETILBENCENO EN MILES DE TONELADAS MÉTRICAS PARA EL AÑO 2018 ...	8
TABLA 3. OSCILACIÓN DEL PRECIO DEL ETILBENCENO EN EE. UU ENTRE 1960 Y 1997 EN \$/KG.	8
TABLA 4. TECNOLOGÍAS UTILIZADAS EN LOS PROCESOS DE ALQUILACIÓN DE BENCENO EN FASE LÍQUIDA	18
TABLA 5. PROPIEDADES ZEOLITAS	32
TABLA 6. ESTRUCTURA MOLECULAR DE LAS ZEOLITAS MÁS UTILIZADAS EN LA ALQUILACIÓN DE BENCENO CON ETILENO	33
TABLA 7. TAMAÑO DE PORO MÁXIMO ZEOLITAS EN ÁNGSTROM	34
TABLA 8. PARÁMETROS Y CONSTANTES PARA EL CÁLCULO DE LAS CINÉTICAS DE REACCIÓN	40
TABLA 9. PROPIEDADES Y COMPOSICIÓN CORRIENTES DEL PROCESO SIMULADO EN PROMAX (CORRIENTES 1-18)	49
TABLA 10. PROPIEDADES Y COMPOSICIÓN CORRIENTES DEL PROCESO SIMULADO EN PROMAX (CORRIENTES 19-40)	50
TABLA 11. PROPIEDADES Y COMPOSICIÓN CORRIENTES DEL PROCESO SIMULADO EN PROMAX (CORRIENTES 41-56)	51
TABLA 12. DATOS CORRIENTES FRÍAS Y CALIENTES DEL PROCESO SIMULADO.....	53
TABLA 13. TABLA INTERVALOS DE TEMPERATURA-CALOR PARA EL DIAGRAMA DE CASCADA	56
TABLA 14. CORRIENTES POR ENCIMA Y DEBAJO DEL PUNTO PINCH.....	57
TABLA 15. DATOS CALOR PARA CORRIENTES FRÍAS Y CALIENTES	59
TABLA 16. POTENCIAL DE INTEGRACIÓN	60
TABLA 17. CALOR TOTAL Y CALOR TRAS INTEGRACIÓN	60
TABLA 18. ESPECIFICACIONES DISEÑO INTERCAMBIADORES DE CALOR	62
TABLA 19. ESPECIFICACIONES DISEÑO COLUMNAS	63
TABLA 20. ESPECIFICACIONES DISEÑO REACTORES	64
TABLA 21. ESPECIFICACIONES DISEÑO SEPARADOR BIFÁSICO	65
TABLA 22. ESPECIFICACIONES DISEÑO IMPULSORES DE FLUIDO	65
TABLA 23. CÁLCULO DEL COSTE DE MANO DE OBRA	67
TABLA 24. CAUDALES DE SERVICIOS	80

1. Introducción

1.1 Antecedentes

El etilbenceno fue producido por primera vez a escala comercial en Alemania y Estados Unidos en 1930. La industria de etilbenceno-estireno se mantuvo relativamente insignificante hasta la Segunda Guerra Mundial, cuando la demanda de caucho estireno-butadieno impulsó las mejoras tecnológicas en el sector y propició una enorme expansión de la capacidad de producción de etilbenceno y estireno a nivel mundial (Coty *et al.*, 1987).

Prácticamente todo el etilbenceno se producía comercialmente por un proceso de alquilación de benceno con etileno, tanto en fase líquida utilizando como catalizador el cloruro de aluminio ($AlCl_3$), como en fase vapor usando zeolitas sintéticas o ácido de Lewis como catalizadores (Coty *et al.*, 1987; Cannella, 1998).

Las capacidades mundiales de producción del etilbenceno entre 1985 y 1995 se presentan en la Tabla 1.

La información disponible en 1999 indica que el etilbenceno producido en Estados Unidos fue generado en 9 plantas de producción distintas, 8 en Japón, 7 en China, 4 en Corea, 2 en cada uno de los siguientes países Brasil, Canadá, Francia, Alemania, Polonia, Rumania, Rusia y Reino Unido; y 1 planta en cada uno de los siguientes Australia, Bélgica, Bulgaria, República Checa, Irán, Italia, México, Holanda, Singapur, Eslovaquia, España, Taiwán y Ucrania (Chemical Information Services, 1999).

Tabla 1. Capacidades mundiales de producción de etilbenceno en miles de toneladas entre 1985 y 1995

Location	Capacity	
	1985	1995
North America	5900	7048
South America	380	NR
Western Europe	3820	5157
Eastern Europe	1630	1841
Japan	1470	3587
Asia, Oceania and Far East (except Japan)	640	2644
Other (including the Middle East and Africa)	390	1158
Total	14 230	21 435

From Coty *et al.* (1987); Cannella (1998)
NR, not reported

La producción mundial de etilbenceno en 2018 se estima que fue de aproximadamente $39 \cdot 10^6$ Toneladas métricas (Tm). Se reporta un aumento de la producción de etilbenceno anual de entre 3%-4%, por lo que su producción en 2024 se estima que será de alrededor de las $48 \cdot 10^6$ Tm. En la Tabla 2 se muestran las capacidades de producción de etilbenceno en un espectro más actual (2018).

Tabla 2. Capacidad mundial de producción de etilbenceno en miles de toneladas métricas para el año 2018

América del Norte	12.160
Sudamérica	520
Europa Occidental	9.615
Europa Oriental	2.045
Corea/Taiwán/China	6.000
Japón	5.730
Este de África y Oriente medio	1.110
Sudeste Asiático/Australia	820
TOTAL	38.000

Al igual que en el caso del estireno, el coste de producción de etilbenceno está estrechamente ligado al coste de la materia prima. Los procesos más modernos tienen rendimientos de conversión de la materia prima $> 98 - 99\%$. Las técnicas de integración de calor generado en las reacciones exotérmicas que ocurren en los reactores de alquilación y transalquilación, hacen que sea posible una recuperación de hasta un 90% de la energía necesaria para el proceso de producción, motivo por el cual los costes de producción de etilbenceno y su valor de venta en el mercado serán proporcionales al coste de la materia prima en el momento. En la Tabla 3 se puede apreciar la variación del precio unitario de venta (en \$/kg) del etilbenceno en Estados Unidos entre 1960 y 1997:

Tabla 3. Oscilación del precio del etilbenceno en EE. UU entre 1960 y 1997 en \$/kg.

1960	0,13	1980	0,51
1965	0,09	1983	0,50
1970	0,09	1987	0,46
1973	0,11	1989	0,55
1974	0,37	1990	0,62
1975	0,20	1993	0,33
1978	0,24	1995	0,55
1979	0,35	1997	0,42

El aumento de precio en 1974 y 1980 aumenta el cambio radical en el precio del petróleo experimentado durante estos períodos, mientras que el aumento de precio en 1989/1990 y 1995 fueron indicativos de la rigidez cíclica en el suministro de etilbenceno y estireno.

En la última década, el precio del etilbenceno ha ido en aumento como se puede apreciar en la Figura 1, el precio entre septiembre del 2015 y julio de 2016 ha oscilado entre los 0,93 \$/kg (43 US CTS/lb en septiembre de 2015) y 0,62 \$/kg (28 US CTS/lb en febrero de 2016):

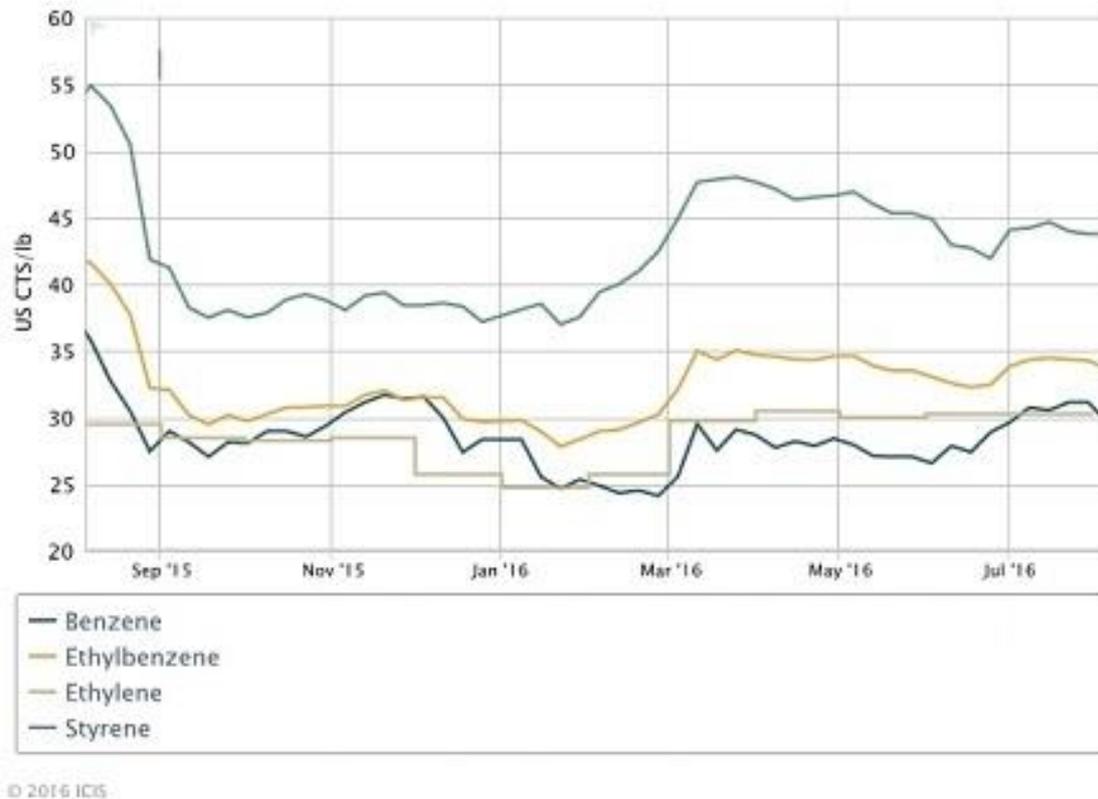


Figura 1. Oscilación precio de venta Etilbenceno 2015-2016 en US CTS/lb.

1.2 Usos del Etilbenceno en la industria química

El etilbenceno está formado por un anillo aromático y un radical etileno (Figura 2) y, presenta un olor similar a la gasolina. Se trata de un líquido inflamable e incoloro que reacciona con oxidantes fuertes. Es soluble en disolventes orgánicos pero insoluble en agua.

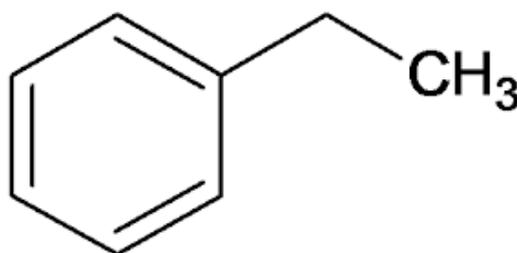


Figura 2. Molécula de Etilbenceno

El etilbenceno se utiliza principalmente para fabricar otro compuesto químico, el estireno y, por la polimerización de éste se obtiene el poliestireno que se utiliza para producir plásticos, resinas, hules, etc. Más del 99% del etilbenceno producido mundialmente se utiliza para generar el monómero de estireno. La producción de estireno utiliza el etilbenceno como materia prima de partida y supone un gasto de alrededor del 50% del benceno producido mundialmente. Mientras que el 1% restante es empleado como disolvente para combustible, barnices, pinturas y lacas, plaguicidas; o como intermediario para la producción de dietilbenceno y acetofenona.

También encontramos etilbenceno presente en las corrientes de recuperación de xilenos, que se convierte en gran parte en xilenos o benceno (Coty *et al.*, 1987; Cannella, 1998).

El etilbenceno se ha agregado en la industria del motor y de combustibles de aviación debido a su efecto antidetonante. La proporción de etilbenceno en la composición de la gasolina va desde <1% hasta 2,7%

Se utiliza también como disolvente fotorresistente negativo en la industria de los materiales semiconductores (Ladou & Rohm, 1998) y como disolvente y diluyente genérico (Angerer *et al.*, 1994). Además, el etilbenceno se encuentra presente en la composición de xilenos mixtos comerciales en proporciones de hasta el 25% y como tal, también estará presente en muchas pinturas, lacas, tintas de impresión, insecticidas y disolventes en las industrias de fabricación de caucho y productos químicos (Fishbein, 1985; ECETOC, 1986).

2. Objetivo

2.1 Objetivo académico

Este trabajo pretende llevar a la práctica las habilidades y conocimientos adquiridos en el grado de Ingeniería Química. Entre estas aptitudes adquiridas en el grado, se encuentra la realización de un proyecto individualmente que implique una revisión bibliográfica, la elección y diseño de procesos químicos, dimensionado y diseño de equipos, análisis de resultados, estudio económico, resolución de problemas y toma de decisiones.

2.2 Objetivo técnico

El objetivo técnico de este proyecto es seleccionar y diseñar el proceso productivo de una planta de generación de etilbenceno con una capacidad de producción de 80.000 t/anales. El trabajo pretende contrastar los distintos procesos industriales para la obtención del Etilbenceno, con el fin de determinar el método óptimo de producción.

Se establecerá el diagrama de flujo del proceso elegido y se determinarán las condiciones de operación y los parámetros de diseño que mejor se adapten al proceso productivo. Para la simulación del proceso de generación de etilbenceno se hará uso del simulador de procesos ProMax

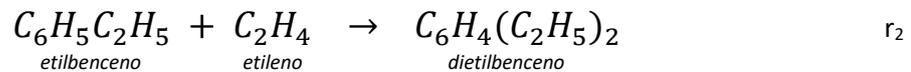
También se analizará la rentabilidad de la planta y se realizará una estimación económica del proceso utilizando diferentes tipos de herramientas.

3. Procesos de obtención de Etilbenceno

La mayor parte del etilbenceno es producido por alquilación del benceno con etileno (r_1). Las plantas de producción de etilbenceno más recientes utilizan zeolitas sintéticas para catalizar la reacción, aunque todavía es considerable la producción de etilbenceno por alquilación en la cual se utiliza el cloruro de aluminio como catalizador de la reacción. La reacción del benceno con etileno es la siguiente:



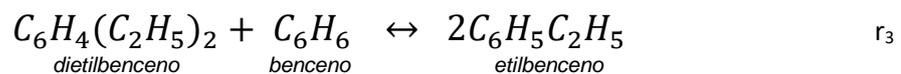
El exceso de etileno restante reacciona con el etilbenceno de la siguiente manera:



dando lugar a un producto no deseado como es el dietilbenceno. Además, se pueden dar reacciones posteriores entre el dietilbenceno y el etileno restante, formando trietilbenceno y, posteriormente tetraetilbenceno y demás polietilbencenos. Sin embargo, para minimizar estas reacciones adicionales que nos aportan productos no deseados, se mantiene una concentración de benceno superior a la del etileno, relación de fracción molar alrededor de 8:1.

El dietilbenceno se trata de un producto no deseado, ya que su presencia en la corriente de etilbenceno utilizado para producir estireno puede causar grandes problemas en el proceso. Por ello, se establecerá una cantidad máxima de DEB en la corriente de EB de 2ppm.

Para aumentar la producción de EB y reducir la cantidad de DEB, el dietilbenceno se llevará a una corriente de reciclaje mediante un separador que transportará el DEB a un reactor en el cual se añadirá una corriente en exceso de benceno para producir EB mediante la siguiente reacción de equilibrio:



Las corrientes de benceno que se introducen en el proceso contienen impurezas como es el Tolueno en pequeñas cantidades. El tolueno reacciona con el etileno para formar EB y propileno:



Las mejores conversiones de benceno y etileno se consiguen cuando los reactantes se alimentan estequiométricamente, pero esto produce que la selectividad sea mucho más baja y aumenta la probabilidad de generar polietilbencenos (Welch *et al.*, 2012), (Vora *et al.*, 2003), (Yang *et al.*, 2016), (Perego *et al.*, 2002).

La reacción de alquilación explicada anteriormente se lleva a cabo de forma rápida. Tan pronto como el etilbenceno se produce, el etileno tiende a agregarse al etilbenceno para formar dietilbenceno. Cuantos más grupos etilo presente el anillo de benceno, más reactivas serán las

moléculas, a menos que se tomen una serie de precauciones en el proceso de producción de EB, las reacciones de alquilación consecutivas nos llevarán a la generación de polietilbencenos. Afortunadamente, los polietilbencenos reaccionan fácilmente con benceno para formar etilbenceno mediante la transalquilación. Por este motivo, en la mayoría de los procesos de generación de EB se utilizan relaciones estequiométricas, en los que se utiliza entre 2 y 6 veces más benceno que etileno. La adición de una unidad de transalquilación en la producción de EB supone un aumento del 10% en el rendimiento de generación de este producto.

Las reacciones secundarias, como la formación de xilenos, dependen del diseño del reactor y de la longitud del proceso y, se consideran productos no deseados para el futuro proceso de generación de estireno. Lo mismo ocurre con cualquier propileno presente como contaminante en la corriente de alimento de etileno o, formado por el craqueo de otras impurezas no aromáticas, que pueden reaccionar para formar isopropilbenceno.

Las principales opciones que encontramos para la producción de etilbenceno industrialmente consisten en la ruta de alquilación del benceno (Friedel-Crafts), la cual puede darse en fase vapor, fase líquida o fase mixta líquido-vapor y, utilizando como catalizador zeolitas o ácido de Lewis ($AlCl_3$):

- I. Proceso catalizado por $AlCl_3$ en fase líquida
- II. Proceso catalizado por zeolitas en fase vapor
- III. Proceso catalizado por zeolitas en fase líquida
- IV. Proceso catalizado por zeolitas en fase mixta líquido-vapor
- V. Proceso de producción de etilbenceno por separación de xilenos

3.1 Proceso catalizado por $AlCl_3$ en fase líquida

La ruta de alquilación que se produce en fase líquida y utiliza como catalizador el cloruro de aluminio para la producción de etilbenceno es la más antigua, ya que fue el primer proceso que se desarrolló para la producción de forma industrial de este producto en la década de 1930 y siguió siendo la más popular hasta la década de 1980. En la actualidad siguen existiendo plantas que utilizan este proceso como método de producción de etilbenceno, en su mayoría utilizando la tecnología Monsanto/Lummus, considerada la más avanzada en los procesos de cloruro de aluminio. A pesar de esto, Lummus discontinuó la licencia de esta tecnología en la década de 1990, ya que pasaron a comercializar su nueva tecnología en fase líquida catalizada con zeolitas.

La reacción de alquilación del benceno con etileno es exotérmica ($\Delta H = -114 \text{ kJ/mol}$) y, se trata de una reacción muy rápida con rendimientos casi estequiométricos de etilbenceno cuando está presente el cloruro de aluminio en el reactor (como catalizador). Se ha utilizado una gran variedad de catalizadores ácidos de Lewis a parte del $AlCl_3$, incluyendo $AlBr_3$, $FeCl_3$, $ZrCl_4$, y BF_3 . Sin embargo, se estableció como mejor opción el uso del cloruro de aluminio, ya que los procesos que lo utilizan como catalizador también usan generalmente cloruro de etilo o cloruro de hidrógeno como promotor, los cuales reducen la cantidad de catalizador de $AlCl_3$ necesario para el proceso.

En la Figura 3, se puede apreciar el diagrama de flujo de la disposición que utilizaban las primeras plantas de producción de etilbenceno utilizando $AlCl_3$ como catalizador. Las corrientes de alimentación se introducen al proceso con una relación molar de benceno a etileno de alrededor de 3:1, para asegurar una conversión de etileno del 100% y minimizar las reacciones secundarias que generan productos secundarios no deseados. En este proceso se produce una pérdida de

rendimiento derivada de la formación de residuos, pero para minimizar esto se recircula la corriente con polietilbencenos generados en las reacciones secundarias al reactor de alquilación, en el cual se producirá una reacción de transalquilación para generar etilbenceno. Los procesos más tradicionales utilizan un único reactor para la alquilación de bencenos y la transalquilación de polietilbencenos.

La temperatura generalmente se establece en 130 °C, ya que temperaturas más elevadas suponen una rápida desactivación del catalizador y favorecen la formación de productos no aromáticos y PEBs. En cuanto a la presión, se tiene que mantener lo suficientemente alta para que los reactivos estén en fase líquida. Los productos de la agitación y mezcla intensiva de los reactantes son benceno líquido, catalizador líquido y etileno puro gaseoso. Debido a su alta tasa de conversión y su rendimiento, la ruta que utiliza el cloruro de aluminio es generalmente competitiva en términos económicos, pero la eliminación de corrientes de desechos peligrosos resultantes del uso de catalizador ácido Lewis y la severa corrosión que se genera en las tuberías y equipos resulta que sea cada vez más costosa debido a los costes de mantenimiento que supone (Welch *et al.* 2012), (Vora *et al.* 2003). Para minimizar la corrosión y alargar la vida útil de las instalaciones en estas plantas, se utilizan recubrimientos de vidrio o materiales cerámicos en los reactores y las tuberías que se utilizan son de aleaciones resistentes a la corrosión.

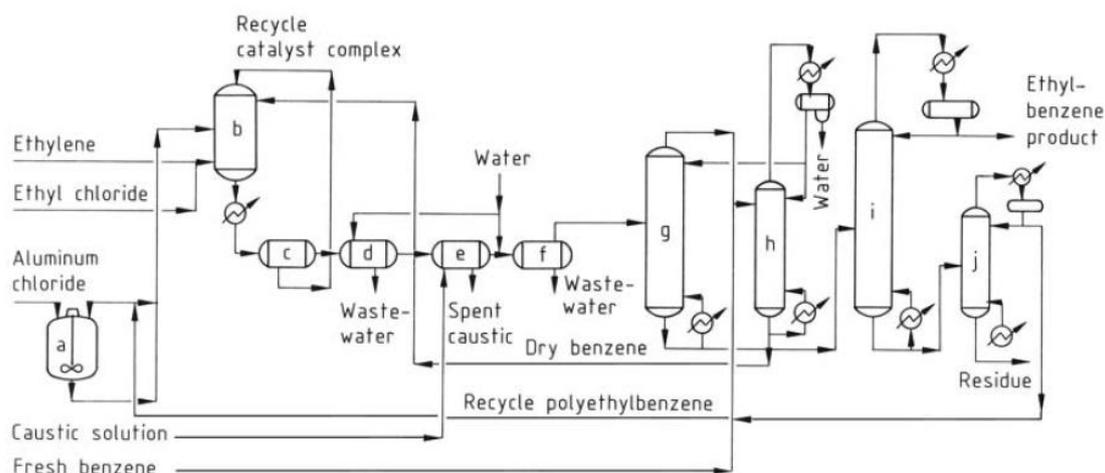


Figura 3. Producción de etilbenceno catalizado con cloruro de aluminio. a) Tanque de mezcla de catalizador; b) Reactor de alquilación; c) Tanque de decantación; d) Separador de ácidos; e) Separador de productos básicos; f) Separador de agua; g) Columna de recuperación de benceno; h) Columna de deshidratación del benceno; i) Columna de recuperación de EB; j) Columna de separación de PEBs.

En este proceso el efluente líquido del reactor se enfría antes de ser llevado al decantador (c), donde la fase pesada que contiene el catalizador se decanta de la fase orgánica líquida, para así recircular la fase que contiene el catalizador. La corriente más ligera que sigue el proceso pasa a los tanques (d y e), donde será lavado con agua y sosa para eliminar el cloruro de aluminio y el promotor disueltos.

La fase acuosa con AlCl_3 diluido que se obtiene de estos lavados se neutraliza y, posteriormente se recupera como una corriente saturada de AlCl_3 y lodo de hidróxido de aluminio. Para los productores de etilbenceno, la eliminación del catalizador disuelto en la corriente orgánica siempre ha supuesto un desafío, hasta que la compañía petroquímica CdF Chimie descubrió que se podía conseguir una recuperación completa del catalizador haciendo que la corriente orgánica entrara en contacto primero con amoníaco en lugar de sosa cáustica.

La purificación del etilbenceno se produce generalmente en una disposición de tres columnas de destilación en serie. El benceno que no reacciona se recupera en la primera columna como vapor del destilado en la cabeza. En la segunda columna se produce la separación del etilbenceno de la corriente pesada con componentes polialquilados. La corriente de fondo de la segunda columna se alimenta a una columna final donde los polietilbencenos que se van a recircular se separan de los residuos (compuestos de alto peso molecular). Este efluente de residuos, que consiste principalmente en aromáticos policíclicos, será utilizado como combustible.

El benceno que se alimenta al proceso y el que se recircula tiene que ser tratado antes de entrar al reactor, debido a que la mezcla de reactivos de alquilación no puede tolerar cantidades elevadas de agua, puesto que esto aumenta la corrosión y disminuye la actividad del catalizador. Este tratamiento se lleva a cabo en la columna de deshidratación de benceno (h).

En 1974, se presentaron nuevos métodos de alquilación con $AlCl_3$, el conocido proceso Monsanto (Figura 4), lo que supuso una significativa reducción en el uso de este catalizador. La cantidad de catalizador necesaria se redujo al $AlCl_3$ disuelto hasta saturación en la corriente de alimentación (en el rango de 0,001 moles a 0,0025 moles por mol de etileno) controlando minuciosamente la adición de etileno y elevando las temperaturas de alquilación hasta los 160-180 °C y las presiones de 0,5 a 2 MPa. Este rango de temperaturas asegura una mejor actividad del catalizador con el beneficio adicional de que el calor de reacción se puede recuperar como vapor de agua a baja presión. En este método, la relación molar de benceno a etileno es un poco más baja que la utilizada anteriormente, de alrededor de 2:1, pero el proceso es capaz de funcionar también si el etileno se alimenta diluido. La eliminación de la fase líquida del catalizador separada y la introducción de un reactor de transalquilación adicional aumentaron la selectividad y el rendimiento global de reacción, además de reducir el problema del tratamiento del catalizador gastado y la eliminación de los residuos producidos (patente US 3848012 A, 1974).

En este proceso encontramos dos reactores separados para la alquilación y la transalquilación, pero en el reactor de transalquilación no será necesario aditar más catalizador, ya que tanto la alquilación como la transalquilación utilizan el mismo catalizador ($AlCl_3$), que ya está disuelto en el efluente del reactor de alquilación. Otra ventaja de este proceso es que la reacción es muy rápida y produce rendimientos de generación de etilbenceno casi estequiométricos con una tasa de conversión del etileno de casi el 100%.

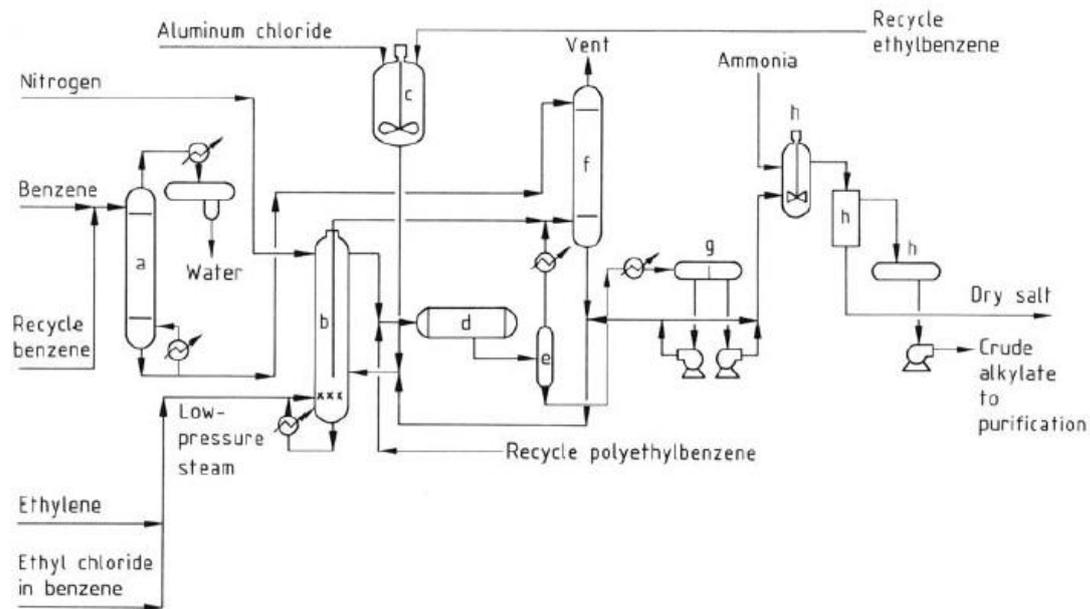


Figura 4. Proceso de producción de etilbenceno por alquilación en fase líquida homogénea (proceso Monsanto/Lummus). a) Columna de secado de Benceno; b) Reactor de alquilación; c) Tanque de pretratamiento del catalizador; d) Reactor de transalquilación; e) Separador vapor-líquido; f) Sistema de separación de gases de escape (scrubber); g) Decantador; h) Equipo de neutralización

En 1999, alrededor del 40% del etilbenceno se producía mundialmente mediante este proceso de Monsanto utilizando cloruro de aluminio como catalizador. En 1960, la compañía petroquímica UOP desarrolló otro proceso basado en catalizadores ácidos de Lewis, denominado proceso Alkar (Figura 5). En esta ruta de alquilación el catalizador utilizado era el trifluoro de boro (BF_3), pero fue desapareciendo debido al alto coste de mantenimiento que suponían los problemas de corrosión causados por pequeñas concentraciones de agua que entraban al reactor y a las tuberías adyacentes, disueltas en las corrientes de reactivos. Este es el motivo por el cual actualmente solo encontramos una planta que siga utilizando este proceso de Alkar entre los países más desarrollados tecnológicamente.

A pesar de esto, este proceso producía etilbenceno de alta pureza y podía utilizar etileno diluido como alimento. Estos problemas de corrosión se podían evitar con pretratamientos de las corrientes de alimento para eliminar su contenido en agua, pero incluso cantidades muy pequeñas de agua (<1 g/kg) producían la hidrólisis del catalizador de BF_3 .

En el reactor de alquilación se alimentaba benceno anhidro, etileno diluido y catalizador de BF_3 de reposición, manteniendo presiones más elevadas (2,5-3,5 Mpa) y temperaturas más bajas (100-150 °C). Normalmente las relaciones molares de Benceno/etileno eran de 5-6,5:1. La reacción de transalquilación se llevaba a cabo en un reactor separado al cual se alimentaba con una corriente de benceno anhidro, catalizador de BF_3 y polietilbencenos reciclados. Este reactor operaba a una temperatura mayor que el reactor de alquilación (180-230 °C). Las corrientes de efluentes de ambos reactores se combinaban antes de pasar a la columna de recuperación de benceno, en la cual se separaba el benceno para ser reciclado hacia los reactores. Por la corriente de cabeza de esta columna se extraía trifluoro de boro e hidrocarburos ligeros como vapor del destilado, el BF_3 se recirculaba al proceso. El líquido de fondo de esta columna se llevaba a una última columna de destilación de etilbenceno, en la cual se obtenía por su cabeza el etilbenceno producido con una pureza >99,9 %.

En esta última columna también se recuperaban polietilbencenos que se recirculaban al reactor de transalquilación y benceno que también se reciclaba.

El proceso Alkar podía operar con corrientes de alimentación de etileno diluido (hasta 8-10% moles de etileno), lo cual permitía la utilización de corrientes gaseosas procedentes de una gran variedad de refinerías y hornos de coque. Aunque en estas corrientes tan diluidas era necesarios llevar a cabo un pretratamiento minucioso para eliminar los componentes que pudieran causar un envenenamiento del catalizador de BF_3 , como los compuestos sulfurados, compuestos oxigenados, concentraciones de agua, etc.

Alkar salvages by-product olefins

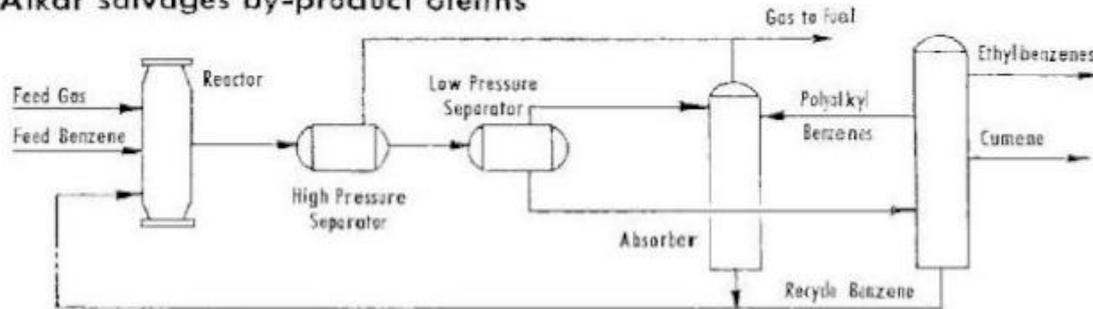


Figura 5. Diagrama de flujo proceso Alkar para la producción de etilbenceno

Las principales desventajas de este proceso de alquilación en fase líquida catalizado con ácidos de Lewis siguen siendo las crecientes limitaciones ambientales y económicas debido al catalizador que se utiliza. Aunque el manejo y la eliminación del catalizador de AlCl_3 , junto con los problemas de corrosión de los equipos y tuberías se ha reducido notablemente con respecto al proceso que se utilizaba en las primeras generaciones (1930-1960), aún representa una contribución importante en los costes de mantenimiento y operación de las plantas, los cuales seguirán aumentando debido a las crecientes preocupaciones ambientales de la sociedad.

3.2 Proceso catalizado por zeolitas en fase vapor

El proceso de producción de etilbenceno utilizando como catalizador la zeolita sintética ZSM-5 en un reactor de lecho fijo en fase vapor fue desarrollado durante la década de 1970 por Mobil-Badger. Debido a las excelentes propiedades catalíticas (estructura porosa y naturaleza ácida) y su estabilidad térmica, esta zeolita se usa ampliamente en el sector petroquímico y es adecuada para la alquilación del benceno con diferentes agentes de etilación, desde etileno puro a diluido (incluso los gases de escape producidos en el craqueo catalítico fluidizado (FCC)) o incluso etanol, lo que convierte a éste en un proceso comúnmente utilizado para aquellos casos en los que se utiliza de alimento una corriente de etileno diluido.

El diseño de primera generación llevaba a cabo la alquilación y la transalquilación en un único reactor de lecho fijo, como en el proceso mencionado anteriormente de AlCl_3 . El uso de gases de escape procedentes del craqueo catalítico en lecho fluido (FCC) y otros alimentos de etileno gaseoso diluido exige un pretratamiento de estas corrientes bastante sofisticado, para eliminar ciertas olefinas y otras impurezas que podrían reaccionar (por isomerización y otras reacciones secundarias) y formar subproductos, que provocarían un aumento en las impurezas presentes en el producto y la desactivación del catalizador. Debido a los avances en la tecnología de este

proceso, la denominada tecnología de tercera generación (Figura 6), que se introdujo en la década de 1990, se ha agregado una unidad de eliminación de propileno a la sección de pretratamiento de las corrientes de alimento y la etapa de transalquilación se realiza en un reactor separado a presiones más bajas y temperaturas más elevadas, lo cual permite que se adquiera en este proceso un rendimiento mayor al 99% y la obtención de un producto de EB de mayor calidad y con menos impurezas.

Las temperaturas de alquilación se establecen normalmente en el rango entre 350-450 °C y las presiones entre 1 y 3 MPa, lo cual permite que más del 99% del aporte de calor neto del proceso y el calor exotérmico de la reacción se recuperen como vapor de agua. El reactor opera con un exceso significativo de benceno con respecto al etileno utilizado (relación molar de 7:1).

El catalizador se desactiva gradualmente como resultado de la formación de coque (envenenamiento del catalizador) y debe ser regenerado periódicamente. La vida útil del catalizador depende en gran medida del diseño específico de la planta y de las condiciones de operación. La regeneración in situ del catalizador lleva alrededor de 36 horas para completarse y se realiza cada 6-9 meses para el reactor de alquilación y cada 18-24 meses para el reactor de transalquilación. Dado que esta regeneración conlleva bastante tiempo, la sección del reactor de la planta a menudo se duplica para mantener inalterada la eficiencia de la planta de producción.

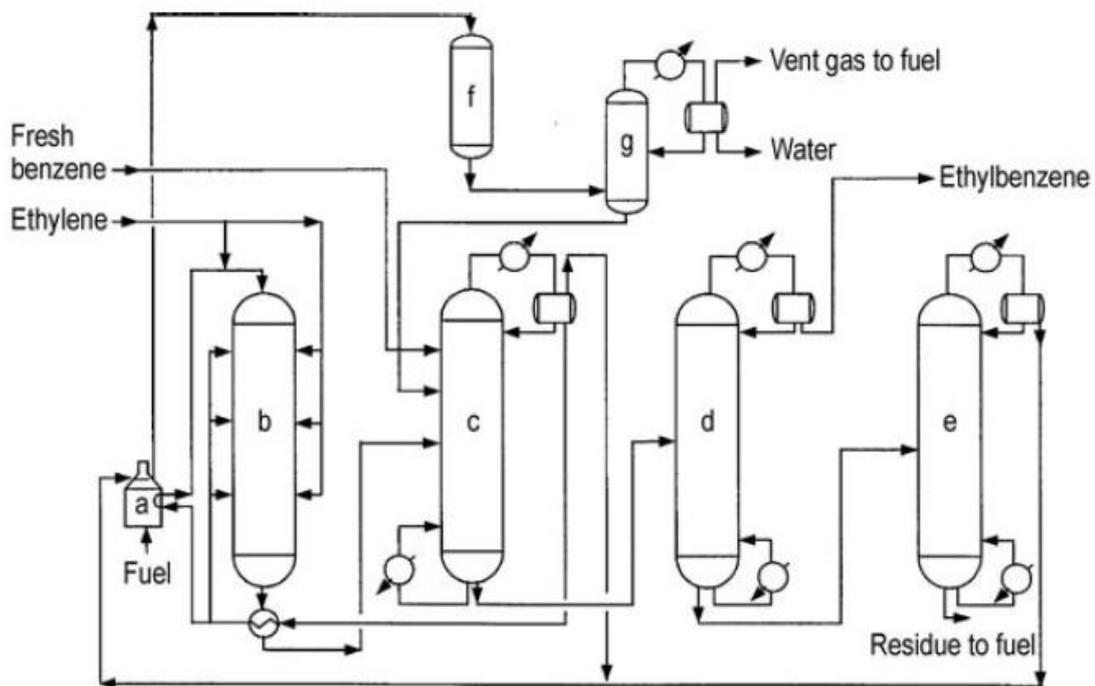


Figura 6. Proceso de producción de etilbenceno Mobil-Badger de tercera generación. a) Intercambiador de calor del alimento del reactor; b) Reactor de alquilación; c) Columna benceno; d) Columna etilbenceno; e) Columna polietilbencenos; f) Reactor de transalquilación; g) Estabilizador

Los costes de operación se añaden al alto consumo de energía de las columnas de destilación del benceno debido a la alta proporción de benceno-etileno y a las elevadas temperaturas de reacción.

3.3 Proceso catalizado por zeolitas en fase líquida

Las plantas que utilizan este proceso de alquilación en fase líquida empezaron a surgir en la década de 1990 y, utilizaban un catalizador basado en la zeolita tipo Y ultra estable. La primera planta que utilizó este proceso se originó en Oita (Japón) operada por Nippon SM, bajo licencia de ABB Lummus Global y Unlocal.

Las modificaciones más recientes de este proceso utilizan catalizadores basados en la zeolita tipo β y los basados en la zeolita MCM-22 (EBone y EBMax de la compañía Mobil-Badger, Tabla 4). Para este tipo de zeolitas se recomienda la regeneración ex situ debido a los largos ciclos de regeneración necesarios para estos catalizadores. En 1999, ya había un total de 12 plantas alrededor del mundo que utilizaban esta ruta de alquilación; aunque existen ciertas diferencias entre las distintas tecnologías que utilizan este proceso, las últimas generaciones de ambas supusieron una disminución en los costes de inversión y una mejora en la calidad del etilbenceno producido con respecto a las tecnologías previas, utilizando etileno de grado polimérico.

Tabla 4. Tecnologías utilizadas en los procesos de alquilación de benceno en fase líquida

Liquid-phase benzene alkylation processes.

Process (year of industrial application)		Lummus/Unocal/UOP (1989)	Mobil-Raythen EBMax (1995)	Lummus/UOP EBOne (1996)	Sinopec (2000)
Alkylation	Ethylation agent	Pure ethylene	Pure/dilute ethylene	Pure ethylene	Pure ethylene
	Catalyst	Y	EM3300	EBZ-500, EBZ-800TL	AEB-2, AEB-6
Transalkylation	Catalyst	Y	EM3700	EBZ-100	AEB-1
	Phase	Liquid	Liquid	Liquid	Liquid

En las primeras etapas del desarrollo de estos nuevos procesos, la alquilación se realizaba en fase líquida, mientras que la transalquilación sucedía en fase gaseosa con un catalizador basado en la zeolita del tipo ZSM-5 y, recientemente esta transalquilación ha cambiado para producirse también en fase líquida con un nuevo catalizador.

Los diagramas de flujo de ambos procesos son muy similares, como se puede apreciar en la Figura 7 y en la Figura 8, el etileno se alimenta a un reactor de alquilación de lecho fijo con múltiples etapas al cual también se le introduce benceno líquido en exceso (las relaciones molares de benceno a etileno son de 4-6:1). La vida útil del catalizador en ambos tipos de catalizadores se incrementa a unos 3 años (aunque en algunos informes se reporta que estos catalizadores han sido utilizados durante más tiempo sin ser necesaria su regeneración).

Las temperaturas de reacción se mantienen por debajo de la temperatura crítica del benceno (289 °C), generalmente en un rango dentro de los 240 °C y 270 °C y, las presiones deben ser lo suficientemente altas para mantener los reactivos en fase líquida, éstas serán del orden de los 4MPa. Los rendimientos totales de conversión del etilbenceno con estas nuevas tecnologías son mayores al 99% y el etileno que se alimenta suele tener una pureza de grado polimérico. Tanto la zeolita MCM-22 como la zeolita tipo β superan los problemas de oligomerización y craqueo, ya que se trata de catalizadores con una elevada actividad para la alquilación e inactivos para la oligomerización y el craqueo.

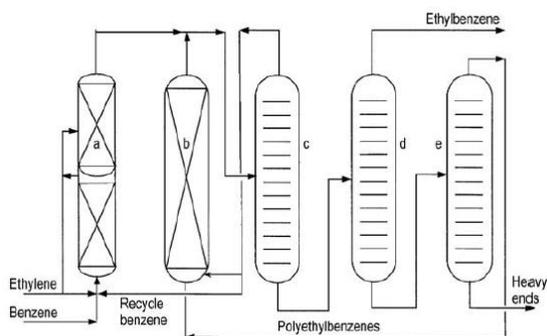


Figura 7. Proceso Lummus/UOP de producción de etilbenceno. a) Reactor de alquilación; b) Reactor de transalquilación; c) Columna arrastre benceno; d) Columna de etilbenceno; e) Columna de PEB

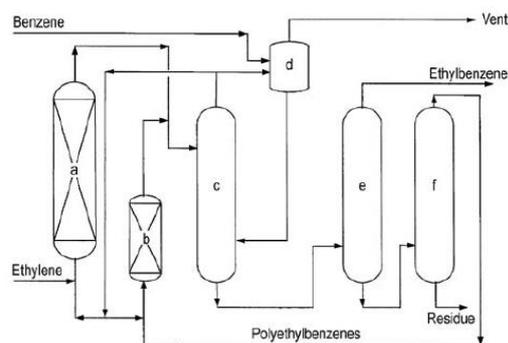


Figura 8. Proceso EBMax de producción de etilbenceno. a) Reactor de alquilación; b) Reactor de transalquilación; c) Columna arrastre benceno; d) Columna de gases de escape; e) Columna de EB; f) Columna de PEB

Este tipo de alquilación en fase líquida supone una serie de ventajas frente a la alquilación en fase vapor, como un mejor control térmico, temperaturas de reacción más bajas, menor cantidad de reacciones secundarias (y, por tanto, la formación de subproductos no deseados) y una mayor vida útil de los catalizadores. La característica más destacable de este proceso es la presencia de varios puntos de inyección del alimento de etileno en el reactor a través de diversas boquillas a lo largo de la sección de alquilación del reactor en lugar de que todo el etileno se alimente por un único punto de entrada en un reactor de lecho fijo. Esto permite que el calor de reacción sea absorbido y conducido al vapor a través de intercambiadores de calor/enfriadores, evitando así los problemas que suponen las reacciones secundarias y prolongando también la vida útil del catalizador (Welch *et al.*, 2012), (CBI/UOP, 2016).

Se requiere un aporte considerable en calor para el manejo del benceno en exceso que no reacciona (columnas de destilación de recuperación y pretratamiento), aunque la energía necesaria para mantener las temperaturas elevadas es menor que la necesaria en el proceso de alquilación en fase vapor, ya que las proporciones de benceno en exceso se reducen a la mitad para la alquilación en fase líquida. Sin embargo, ambas tecnologías presentan varias oportunidades para aprovechar el calor de la reacción exotérmica y así, reducir la demanda de energía y generar una integración energética al proceso.

3.4 Proceso catalizado por zeolitas en fase mixta líquido-vapor

Los procesos de alquilación que utilizan la destilación catalítica para la producción de etilbenceno empezaron a comercializarse en 1994, de la mano de CDTech. Esta tecnología combina la alquilación catalítica del benceno y la destilación en un reactor. Las corrientes de benceno y etileno fluyen en contracorriente en el reactor, es decir, el benceno líquido entra a la columna de destilación por la cabeza, mientras que el etileno gaseoso entra por la parte inferior de la misma. El diagrama de flujo de las plantas que utilizan este proceso se muestra en la Figura 9.

Inicialmente se usó como catalizador las zeolitas de tipo Y, pero luego se sustituyó por un catalizador basado en la zeolita tipo β . El catalizador se almacena en una especie de sacos y, a medida que el etileno gaseoso se disuelve en benceno, se va produciendo la alquilación del benceno para formar etilbenceno que va siendo transportado a las secciones superiores de la columna gracias al calor generado en la reacción exotérmica. El etileno gaseoso que se utiliza en

esta reacción proporciona una fuerza impulsora que hace que el etileno se disuelva en mayor medida con el benceno, aumentando así la velocidad de reacción de alquilación.

En la parte inferior de la columna, se recupera el etilbenceno líquido de la mezcla de productos de reacción, principalmente polietilenos, que se transalquilan en un reactor de fase líquida separado. El rango de temperaturas de reacción oscila entre los 150 °C a los 195 °C en la sección de alquilación y alrededor de los 300 °C en la sección de separación/rectificación. Las presiones oscilan entre 1,6 MPa y 2,1 MPa. La relación molar de benceno/etileno es similar a la utilizada en la fase líquida, esto es 4-5:1. El rendimiento total del etilbenceno es superior al 99%, lo que junto con el bajo consumo de energía de la destilación reactiva, la vida útil relativamente larga del catalizador (hasta 2 años) y la reducida necesidad de unidades de destilación relacionadas con el benceno, hace que este proceso sea atractivo desde el punto de vista económico. El hecho de que el etileno que se alimenta esté en fase gaseosa, hace que este proceso sea también adecuado para etileno diluido, como es el caso de los gases procedentes del craqueo catalítico (FCC) (Yang *et al.*, 2016).

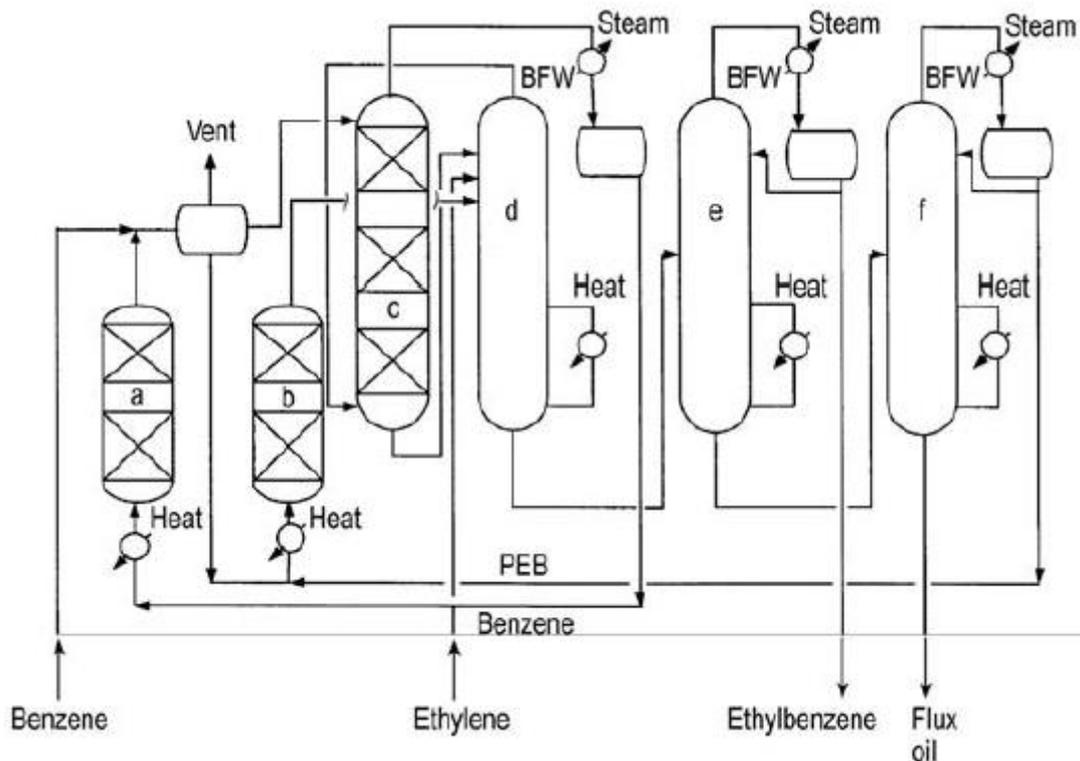


Figura 9. Proceso de producción de etilbenceno CDTech. a) Reactor final; b) Reactor de transalquilación; c) Reactor de alquilación; d) Columna recuperación benceno; e) Columna recuperación de etilbenceno; f) Columna de PEBs

La principal ventaja de los procesos en fase líquida sobre los de fase vapor es que se desarrollan a temperatura más baja y, por lo tanto, se produce menos xileno por el craqueo. El xileno es difícil separarlo del etilbenceno y produce un envenenamiento en el monómero de estireno. El contenido de xileno en etilbenceno en fase vapor es difícil de limitar por debajo de los 600 ppm, mientras que en los procesos en fase líquida se pueden alcanzar fácilmente unas concentraciones de tan solo 10 ppm de xileno en las corrientes de salida de etilbenceno. Además, la relación molar de alimentación de benceno a etileno es relativamente menor cuando se produce la alquilación en fase líquida. Esto hace que deba reciclarse y recircular una menor cantidad de benceno en exceso. Otra ventaja de la etilación en fase líquida es el mejor control

térmico del proceso y una vida útil más longeva para el catalizador utilizado, que además permite la regeneración del catalizador fuera del reactor y facilita el control de la contaminación.

3.5 Proceso de producción de etilbenceno por separación de xilenos

La alternativa a la alquilación era el proceso de extracción mediante la separación de corrientes mixtas de xilenos (este proceso suponía el 1% de la producción mundial de etilbenceno). Durante la década de 1960 se construyeron varias instalaciones en Estados Unidos, Europa y Japón que utilizaban este proceso para la producción del etilbenceno, en las que se recuperaba el etilbenceno mediante el fraccionamiento de xilenos mixtos producidos en unidades de reformado catalítico en refinerías. La separación generalmente requería tres columnas de destilación en serie, cada una con más de 100 platos (superfraccionamiento).

Este proceso de producción se ha interrumpido en gran medida debido a factores económicos, ya que los costes de energía y de inversión eran demasiado elevados, así como la aparición de procesos de producción más económicos como las rutas de alquilación con catalizadores, lo cual también propició la desaparición de este tipo de instalaciones.

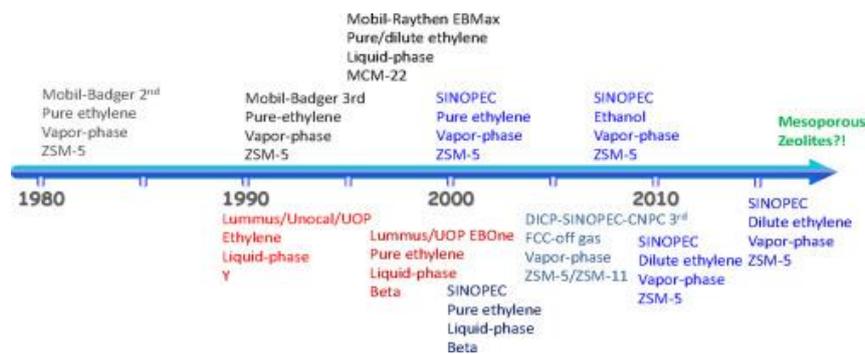


Figura 10. Avances en las tecnologías utilizadas en los procesos de producción de EB

4. Producción Industrial de etilbenceno mediante ruta de Alquilación

4.1 Descripción del proceso

Los procesos básicos en la producción industrial del etilbenceno son el pretratamiento de la materia prima, las unidades de alquilación/transalquilación y el proceso de separación de los productos en la unidad de fraccionamiento. Las plantas que utilizan como catalizador el $AlCl_3$ presentan equipos dedicados a la manipulación del catalizador (para la preparación y sustitución del catalizador, separación y eliminación del catalizador gastado de los efluentes del reactor y la recuperación o tratamiento del catalizador usado).

Los principales procesos en la producción de etilbenceno a través de la ruta de alquilación son los procesos catalizados por cloruro de aluminio o los catalizados por zeolitas. Los esquemas de bloques de ambos procesos se presentan en la Figura 11 y en la Figura 12, que muestran los principales procesos unitarios y operaciones presentados en grupos de acuerdo con su función en el proceso. A continuación, se comentan las posibles configuraciones de unidades pertenecientes a cada tecnología específica para cada tipo de catalizador utilizado y la fase en la que sucede la reacción.

La diferencia más clara entre ambos procesos es que utilizan diferentes catalizadores, lo que a su vez determina algunos equipos específicos y operaciones necesarias para controlar el proceso de producción. Por lo tanto, el proceso que utiliza el cloruro de aluminio presentará unidades adicionales relacionadas con la manipulación del catalizador, que en cambio el proceso que utiliza zeolita no necesita. Esta sección de control del catalizador se compone de (i) unidades de preparación/sustitución del catalizador y (ii) eliminación/separación del catalizador o también denominadas unidades de tratamiento del catalizador gastado. En las primeras generaciones de este proceso, los equipos de eliminación del catalizador servían tanto para (i) separar el complejo líquido de catalizador del efluente del reactor como para (ii) eliminar el catalizador disuelto en la mezcla de productos orgánicos. Sin embargo, las últimas generaciones sólo presentan la unidad para la eliminación del catalizador que viene disuelto en la mezcla de productos orgánicos. Las unidades de eliminación/separación de catalizador constan de diferentes secciones de lavado (ácido/agua, sosa cáustica) en las que la fase de producto orgánico se separa del catalizador y otros subproductos ácidos, quedando ambos neutralizados. Los efluentes acuosos de estas unidades se utilizan tanto para reciclar el catalizador de vuelta al reactor, reutilizarse en las secciones de lavado o, se concentran y se utilizan/venden para otras aplicaciones.

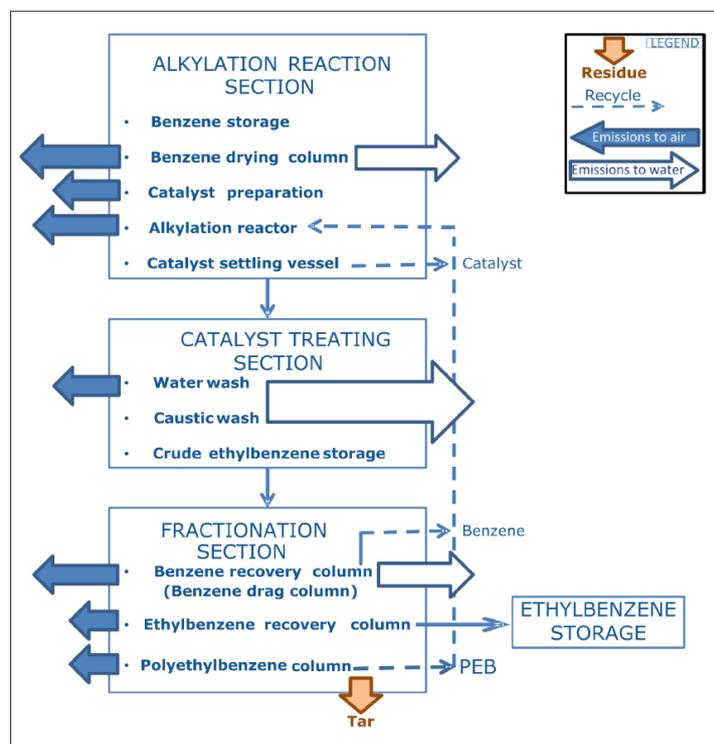


Figura 11. Diagrama de bloques para la producción de etilbenceno catalizada por $AlCl_3$

A pesar de algunas diferencias entre los procesos que utilizan $AlCl_3$ y los que usan zeolitas que surgen de la propia utilización de cada tipo de catalizador, ambos procesos de producción de etilbenceno presentan muchas etapas similares, como son las reacciones de alquilación y transalquilación que tienen lugar en ambos procesos. Estas reacciones pueden suceder dentro de un mismo reactor o en reactores separadas, siendo esta última la opción más común en la industria. Ambos procesos comparten unidades relacionadas con el tratamiento de la materia prima, ya sea para el pretratamiento/secado de las corrientes de alimento o para separar el exceso de benceno de los productos de reacción (columna de recuperación de benceno) o la alimentación de bencenos ligeros o efluentes del reactor (columna de arrastre de benceno) para recircularlos de vuelta a los reactores (tanto de alquilación como de transalquilación).

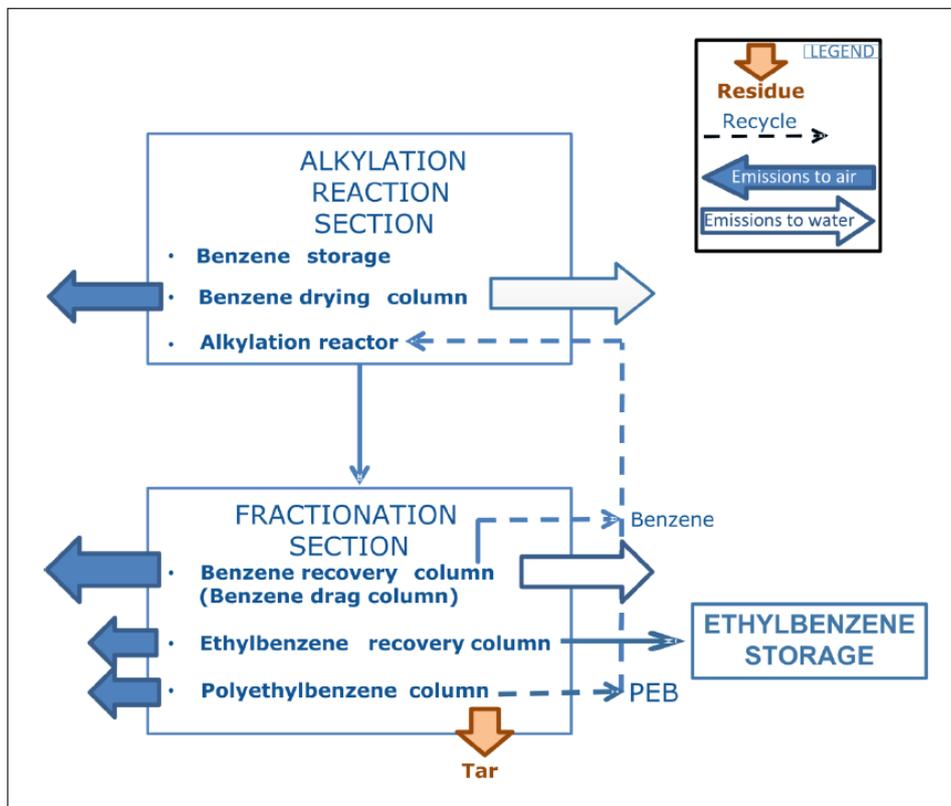


Figura 12. Diagrama de bloques para la producción de etilbenceno catalizado por zeolitas

La siguiente característica que tienen en común ambos procesos son las unidades de purificación o fraccionamiento, donde los productos de la reacción se separan de los coproductos, alimento sin reaccionar, productos secundarios y residuos. Las unidades de fraccionamiento son columnas de destilación con sedimentadores/decantadores que siguen a las secciones de condensación previas. Las columnas de separación y destilación se alinean de la siguiente manera, primero se separa el benceno sin reaccionar en la columna de recuperación del benceno, luego se separa el etilbenceno de los productos de reacción más pesados y finalmente se separan los polietilbencenos de los residuos y de otros productos secundarios más pesados y se recirculan al reactor de transalquilación, donde reaccionarán con benceno para así generar una mayor cantidad de EB.

4.2 Pretratamiento del alimento

4.2.1 Alimento

El etileno utilizado en el proceso puede ser de grado polimérico (pureza del 99%), grado químico (pureza del 90-94%) o, a veces, dependiendo del proceso utilizado, en forma diluida como puedan ser los gases de escape del craqueo catalítico fluido (FCC) o gases residuales parcialmente purificados procedentes de las unidades de fraccionamiento de etileno de las unidades de producción de olefinas inferiores (nafta procedente del craqueo a vapor o gasóleo) que normalmente presentan una concentración de 10-25% molar de etileno. Cuando se refiere al etileno diluido significa que la materia prima contiene una concentración significativa de moléculas que no son etileno que suelen constituir entre 35-45% de la masa del etileno alimentado.

El benceno utilizado como alimento para el proceso también puede presentar distintas purezas, desde el llamado benceno crudo o impuro (con una fracción de masa de 85-96% p/p de benceno) al recuperado de otros procesos de olefinas inferiores, aromáticos o de refinería (pirogás) con purezas elevadas de hasta el 99,99% en peso de benceno.

Los otros componentes de la corriente de alimentación de benceno crudo son compuestos alifáticos o no aromáticos (ciclohexano, dimetilpentano, metilciclohexano, n-heptano, etc.) y otras impurezas como pueden ser los compuestos nitrogenados o compuestos de azufre, que pueden, dependiendo de las condiciones de reacción (T, P) causar el envenenamiento o ensuciamiento del catalizador, formar subproductos no deseados en reacciones secundarias, empeorar los casos de corrosión del equipo y de las tuberías, etc. Estos problemas se evitan en gran medida en los procesos catalizados por zeolitas (fase líquida o vapor) ya que las temperaturas empleadas en estos procesos son inferiores a las temperaturas de reacción de los procesos catalizados con $AlCl_3$.

Las impurezas de la materia prima o los componentes que no son benceno ni etileno a veces se separan en la corriente de alimentación (antes de producirse la reacción) y, en otras ocasiones, se separan de los productos/efluentes del reactor (después de producirse la reacción). Esto puede afectar en gran medida a las operaciones de procesado, al catalizador (a su actividad y vida útil), al rendimiento de la reacción, a las reacciones secundarias, los subproductos, a las emisiones de gases residuales, aguas residuales y otro tipo de residuos. Las unidades necesarias para su eliminación, separación y tratamiento posterior se analizarán a continuación.

4.2.2 Equipos utilizados para el pretratamiento de los alimentos

Para el pretratamiento del benceno que se alimenta al proceso, se utiliza normalmente una columna de secado con sedimentador o decantador. Dependiendo de los componentes de la corriente de alimento (como puedan ser los hidrocarburos ligeros/gaseosos); una columna de arrastre de benceno también puede servir como pretratamiento para la entrada de alimento. Para las corrientes de entrada que estén compuestas por benceno con muy pocas impurezas, se utiliza generalmente una columna de secado para eliminar y reducir el contenido de agua al 0.01% p/p o incluso más.

Algunas plantas de producción de etilbenceno usan diversas unidades de decantación para eliminar el contenido de agua, estos decantadores serán adicionales o sustituirán la columna de secado del benceno (Figura 13).

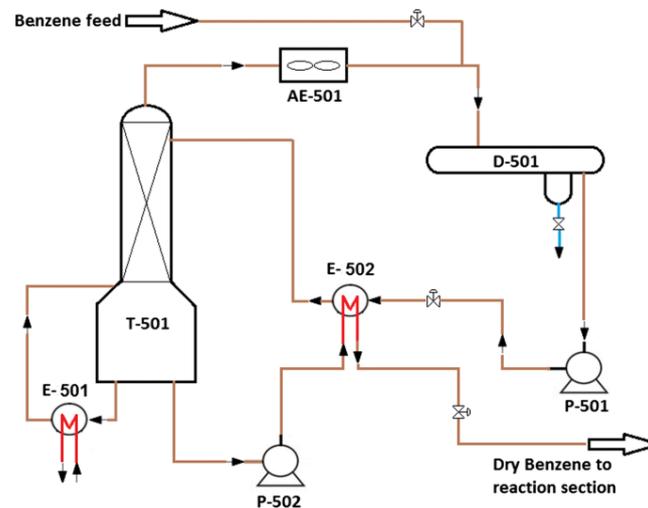


Figura 13. Pretratamiento alimentación de Benceno con intercambiadores de calor y decantador.

Para el pretratamiento de la materia prima de etileno, se utilizan filtros de resina de intercambio iónico para eliminar las impurezas que presente, como pueden ser los compuestos nitrogenados, sulfuros e hidroxilos. También se utilizan tanques de lecho fijo denominados “guard beds” que contienen material absorbente como alúmina, arcilla porosa u óxidos metálicos; que ayudan al pretratamiento de las corrientes de entrada de etileno antes de llegar al reactor. En estos procesos no es inusual que se utilice el mismo catalizador que se utiliza en los reactores de alquilación/transalquilación para capturar las impurezas del alimento mediante la adsorción y, de este modo, mejorar la vida útil del catalizador del reactor. Específicamente los catalizadores basados en zeolita son muy sensibles a la contaminación y envenenamiento por moléculas polares presentes en las corrientes de benceno y etileno.

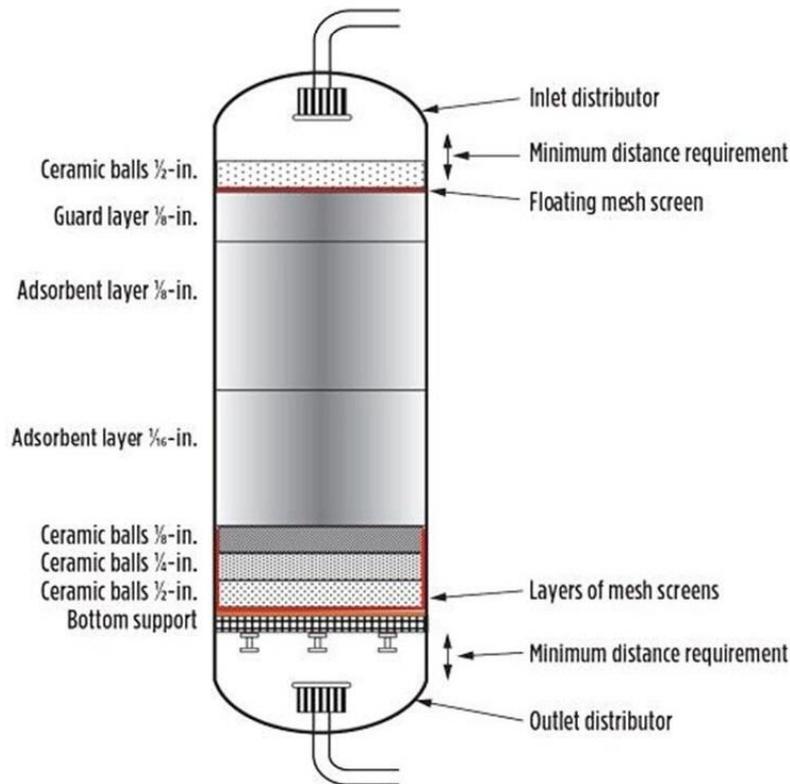


Figura 14. Guard bed cerámico de lecho fijo para el pretratamiento del etileno alimentado al proceso.

La columna de secado de benceno es una columna de destilación generalmente diseñada como una sección de extracción directa para destilación, que opera a presiones medias o bajas. El condensador de cabeza de esta columna de destilación se puede utilizar para recuperar calor y generar vapor. Se recogen dos fases en la cabeza: la fase acuosa y los hidrocarburos; y se separan mediante un decantador. El benceno recuperado se envía al reactor y al agua residual para su futuro tratamiento. Esta separación de fases de la corriente de cabeza puede, en los casos en que se utilice como materia prima el benceno diluido, también contener pequeñas cantidades de gases de escape, aunque es más común separar estos constituyentes de los efluentes del reactor en la columna de recuperación de benceno tras la alquilación.

4.3 Equipos utilizados para la alquilación y transalquilación

La reacción de alquilación se produce mezclando un exceso de benceno con etileno en presencia de catalizador en el reactor de alquilación. La reacción es exotérmica y, aunque hay un exceso de benceno y se tomen medidas específicas en el diseño del reactor para evitar las reacciones secundarias, una porción del etileno (dependiendo también de la selectividad del catalizador utilizado) reaccionará con el etilbenceno para formar isómeros de dietilbenceno y trietilbenceno y pequeñas cantidades de aromáticos más pesados (polietilbencenos más pesados).

Tener un exceso estequiométrico de benceno en el proceso minimiza la formación de polietilbencenos (PEB). Estos subproductos se separan y reciclan al reactor de transalquilación, donde en presencia habitualmente del mismo catalizador que en el reactor de alquilación, reaccionarán con el benceno para formar etilbenceno.

4.3.1 Diseño de reactores

Los reactores de alquilación de $AlCl_3$ pueden ser muy diversos en su diseño para mejorar: la transferencia de masa y la eficiencia del proceso, el control de la temperatura de los reactivos y la recuperación de calor para conseguir un mayor ahorro energético. Los reactores pueden ser simples reactores de tanque agitado continuo (CSTR) con una cámara o múltiples cámaras, con diferentes boquillas de entrada, rociadores y agitadores, o reactores de flujo pistón tubulares (PFR) con características de diseño que garanticen un flujo turbulento para una mejor mezcla y contacto de los reactivos durante la reacción. Los reactores pueden funcionar en modo de paso único o de paso múltiple para controlar las temperaturas de reacción (reacción exotérmica) y asegurar que los tiempos de contacto entre reactantes sea suficiente. En las generaciones más antiguas de estos procesos de alquilación con $AlCl_3$, la fase líquida del complejo catalítico no podía funcionar a temperaturas superiores a los $130\text{ }^\circ\text{C}$, lo que resultaba en la necesidad de tiempos de contacto/residencia de los reactantes en el reactor muy largos, de 30 a 60 minutos. En los procesos más modernos que utilizan el cloruro de aluminio como catalizador, se usan cantidades pequeñas del agente de catálisis disueltas en los reactivos, esto permite que las temperaturas sean más altas entre $150\text{-}190\text{ }^\circ\text{C}$ o incluso de más de $200\text{ }^\circ\text{C}$ y, los tiempos de contacto entre reactantes mucho más cortos (en reactores de pasos múltiples se necesita un intervalo de segundos a 1-2 minutos) (patente US 3848012 A, 1974), (patente W O9116285 A1, 1991).

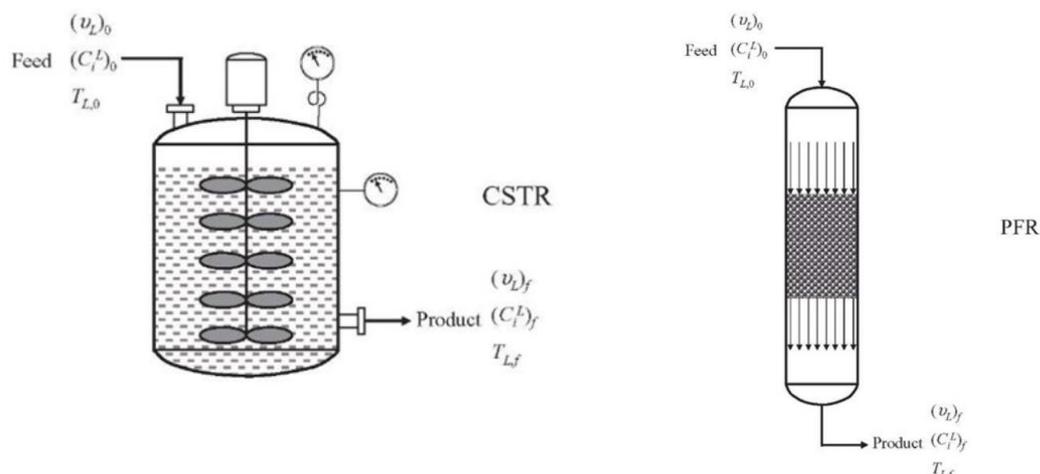


Figura 15. Tipos de reactores utilizados para la alquilación del benceno con etileno en procesos catalizados con $AlCl_3$

Debido al comportamiento corrosivo del catalizador de $AlCl_3$, se deberán utilizar materiales y recubrimientos especiales que sean resistentes a la corrosión en las partes que estén en contacto con el catalizador, como son los reactores y las tuberías de entrada y salida de los reactores. Los materiales utilizados para evitar o alargar dichos problemas incluyen aleaciones *Hastelloy*, acero inoxidable y revestimientos de vidrio o esmaltes. Algunas disposiciones de plantas de producción de etilbenceno utilizan el mismo reactor tanto para la reacción de alquilación como para la transalquilación y, otras prefieren tener reactores separados para cada reacción que pueden tener el mismo diseño o uno específico para cada caso.

Reactores de alquilación de zeolitas

Los procesos industriales a gran escala pueden emplear un reactor continuo de lecho fijo que opera con flujo ascendente o descendente o, un reactor de lecho móvil que opera con flujos de hidrocarburos y catalizador concurrentes o en contracorriente. Estos reactores pueden contener un solo lecho de catalizador o lechos múltiples y pueden estar equipados para la adición de etileno entre etapas (multipunto) y enfriamiento entre etapas (con intercambiadores de calor). Pueden funcionar en modo de paso único o de paso múltiple, según la cinética de la reacción y las características de alimentación y diseño del proceso productivo. El acero al carbono simple será en este caso el material más utilizado para los reactores y tuberías debido a la naturaleza no corrosiva de los efluentes de reacción, reactivos y catalizadores.

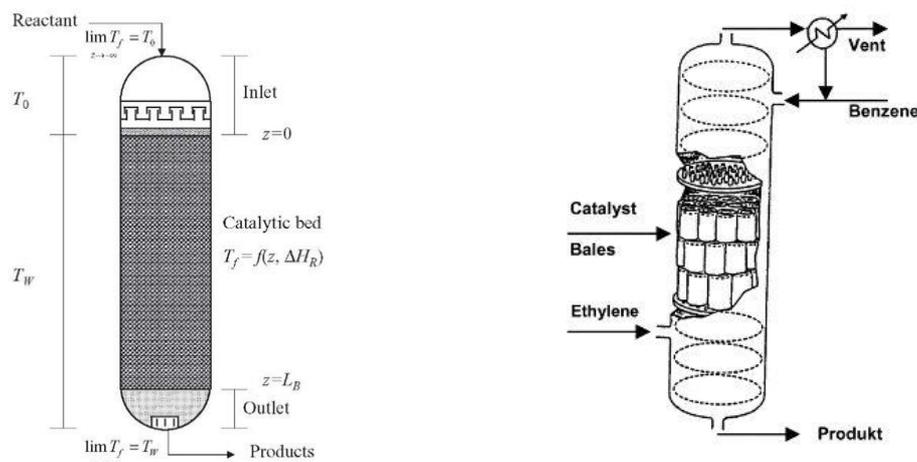


Figura 16. Reactores de alquilación de zeolitas para la producción de etilbenceno

4.4 Catalizadores utilizados en la producción de Etilbenceno

4.4.1 Catalizador de $AlCl_3$

El $AlCl_3$ anhidro es conocido como catalizador de Friedel-Crafts. Es el más representativo de los haluros de ácido (ácidos de Lewis) que presentan un átomo metálico central deficiente de electrones capaz de aceptar los electrones del agente reactivo (básico).

En muchas reacciones de Friedel-Crafts, se deben usar cantidades sustanciales de $AlCl_3$, que exceden en gran medida las cantidades usuales que se utilizan de otros catalizadores. Esto se debe a que los ácidos de Lewis o ácidos de Brønsted están ligados, ya sea formando complejos estequiométricos con los reactivos y productos (como los compuestos carbonílicos) o participando como contraiones en la formación de "aceite rojo" (sistemas compuestos por moléculas de carbocationes resultantes de la protonación o alquilación de aromáticos). En la alquilación del benceno con etileno en los procesos más antiguos, se formaba el complejo catalizador conocido como "aceite rojo", mientras que los procesos más modernos tienen como objetivo evitar la formación de estos complejos y reducir la cantidad de catalizador utilizado en el proceso.

A temperaturas superiores a los 130 °C, se produce una rápida disminución de la actividad del $AlCl_3$. Además, se pueden generar algunos hidrocarburos poliaromáticos y no aromáticos que

son de naturaleza cáustica y se disuelven preferentemente con el catalizador, ya que este tiene un pH más ácido. Con la recirculación del complejo catalítico, estos compuestos aromáticos tienden a degradarse y polimerizarse en un producto similar a un lodo denominado “flux oil” o alquitranes. La disminución gradual de la actividad catalítica se puede contrarrestar eliminando parcialmente el catalizador y reemplazándolo por catalizador nuevo.

En los procesos más modernos de producción de etilbenceno catalizador por $AlCl_3$, solo se utiliza el catalizador disuelto en el efluente de la reacción que requiere una continua adición de catalizador nuevo, haciendo así que no sea necesario el pretratamiento de la materia prima para eliminar las sustancias que producen el envenenamiento del catalizador presentes en bajas concentraciones en los reactivos que se alimentan. La única excepción será el agua presente en la composición del benceno que se alimenta al proceso, ya que se tendrá que reducir al máximo la cantidad de agua para así, reducir también un consumo excesivo de catalizador.

4.4.1.1 Equipos de preparación/reemplazo del catalizador de $AlCl_3$

El proceso que utiliza el complejo catalítico “aceite rojo” (proceso más antiguo) o la corriente de alimentación/reciclado con catalizador disuelto (proceso moderno) se preparan disolviendo el polvo granular de cloruro de aluminio anhidro (higroscópico) en la alimentación del benceno o en la corriente de reciclado (polietilbenceno). El complejo de catalizador consume hasta tres veces más cantidad de $AlCl_3$, mientras que para el caso en que el cloruro de aluminio se introduce en la corriente se necesita mucho menos catalizador. Específicamente, la solubilidad hasta saturación del $AlCl_3$ en polietilbencenos es del rango de 0.001 moles a 0.0025 moles por mol de etileno (que entra a la reacción) y la solubilidad del $AlCl_3$ en benceno es de 1.24g/100g de benceno a 80 °C y aumenta con la temperatura. Se adita cloruro de etilo (promotor), que produce HCl en el ambiente de reacción o, también se puede agregar HCl al efluente del catalizador. La mezcla de catalizador, promotor y alimento tiene lugar en un tanque/reactor separado antes de que esta corriente mezclada sea suministrada al reactor de alquilación/transalquilación. La temperatura de reacción es de entre 140-200 °C, la presión de 0.5-1 MPa y el tiempo de residencia en el reactor es de al menos 15 minutos (aunque es preferible que sea de 30-60 minutos) (patente US 3848012 A, 1974).

La manipulación y suministración del polvo de $AlCl_3$, se realiza mediante un transportador neumático, y su carga en el tanque de mezcla suponen una posible fuente de emisiones de polvo y de HCl. Además, también puede estar el HCl presente en pequeñas cantidades en los gases residuales producidos en el manejo del catalizador de $AlCl_3$ debido a la reacción que produce con el vapor de agua en el aire (humedad), o por la reacción entre el promotor (cloruro de etilo) y el catalizador debido a la mezcla y evaporación en el tanque (Reddy *et al.*, 2013).

El complejo catalítico “aceite rojo” también se puede preparar *in situ* haciendo reaccionar aluminio metálico con HCl gaseoso y disolviendo $AlCl_3$ en etilbenceno en un tanque/reactor en la siguiente proporción: polvo de aluminio sólido alimentado al 5% p/p, polietilbenceno líquido alimentado al 57% p/p y HCl gaseoso al 38% p/p, a una temperatura de 75 °C, presión de 207 kPa y con un tiempo de contacto de 30 minutos (patente W O9116285 A1 1991).

Las emisiones de polvo y de gases con HCl procedentes de los equipos de regeneración de catalizador de $AlCl_3$ pueden ser reducidas lavando con agua, que se puede reutilizar en la sección de lavado de corrientes posteriores procedentes de los reactores.

4.4.1.2 Equipos de tratamiento del $AlCl_3$ consumido

El catalizador disuelto en el efluente orgánico del reactor se elimina lavándolo primero con agua (unidad de lavado de agua), lo que hace que la mayor parte del cloruro de aluminio se disuelva en la fase acuosa. A continuación, sigue un proceso de lavado con NaOH diluido (unidad de lavado cáustica) para eliminar el catalizador disuelto restante, como se puede apreciar en el diagrama de flujo de una planta de producción de etilbenceno en la Figura 17 .

El efluente acuoso ácido procedente del lavado con agua y el efluente alcalino del baño cáustico se decantan (en el decantador/sedimentador después de cada etapa de lavado) de la fase orgánica del efluente, esta fase orgánica separada pasará posteriormente a la sección de fraccionamiento para su tratamiento. Ambos efluentes acuosos del sistema procedentes de las unidades de tratamiento de catalizador se pueden seguir tratando.

El efluente acuoso ácido es una solución acuosa compuesta por cloruros de aluminio y ácidos orgánicos, saturada con compuestos orgánicos volátiles (COVs), principalmente benceno y etilbenceno. El contenido de COV se puede reducir mediante una extracción por arrastre de vapor. En las plantas de producción de etilbenceno asociadas a otra planta de producción de monómeros de estireno, esta corriente se puede eliminar junto con el efluente de agua procedente de la sección de deshidrogenación del etilbenceno. Los gases de escape del proceso de extracción (COV) se dirigen a una unidad de combustión o de oxidación térmica.

La solución de $AlCl_3$ restante se puede concentrar evaporando una solución de HCl y agua, debido a que esta presenta un punto de ebullición más bajo. La solución concentrada de $AlCl_3$ se puede reutilizar en la EDAR (Estación Depuradora de Aguas Residuales). La fase vapor procedente de la evaporación se lava con agua para formar una solución de HCl diluido que podrá ser reutilizada en la preparación del catalizador (promotor) o como estabilizador de pH para el efluente del lavado cáustico. El gas de escape procedente del "scrubber" (lavador de gases) aún puede contener algo de HCl, pero el flujo másico y la concentración son muy bajos debido a la alta solubilidad del HCl en agua (Campbell, 1977).

El efluente alcalino procedente del lavado cáustico contiene una disolución diluida de NaOH, sal (NaCl) e hidróxido de aluminio ($Al(OH)_3$) y está saturado con hidrocarburos (benceno y etileno). Nuevamente, los hidrocarburos se pueden eliminar mediante extracción de arrastre de vapor y el efluente restante, antes de ser llevado a una EDAR común, se neutraliza con una solución de HCl que procede del proceso anterior de evaporación del $AlCl_3$ o también se puede utilizar una solución nueva de HCl.

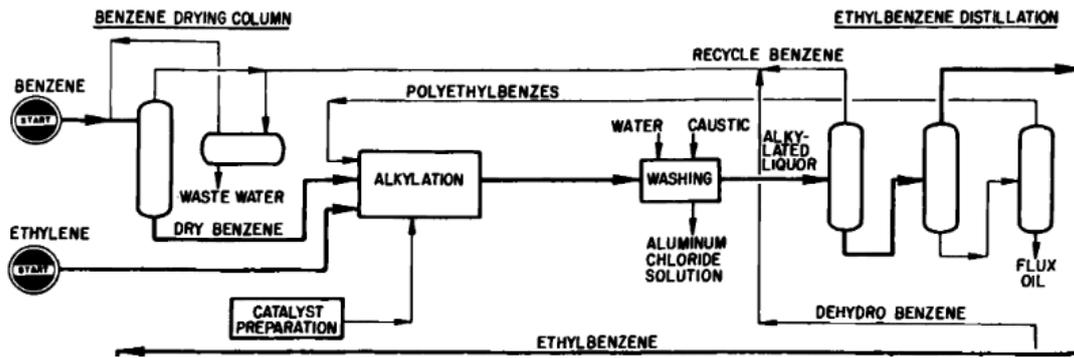


Figura 17. Diagrama de flujo planta producción EB catalizado por $AlCl_3$.

4.4.2 Catalizadores de Zeolita

La creciente preocupación por el medio ambiente y el desarrollo de procesos de producción ecológicos basados en la catálisis heterogénea son fuerzas impulsoras, no solo para la mejora de las zeolitas convencionales, sino también para el descubrimiento de nuevos catalizadores como los tamices moleculares de estructuras porosas.

La acidez en los catalizadores basados en zeolitas se debe a la teoría de la catálisis ácida de Lewis-Brønsted, que aumenta la cantidad de sitios activos en el catalizador al polarizar las moléculas e incrementar así también la actividad de éstas.

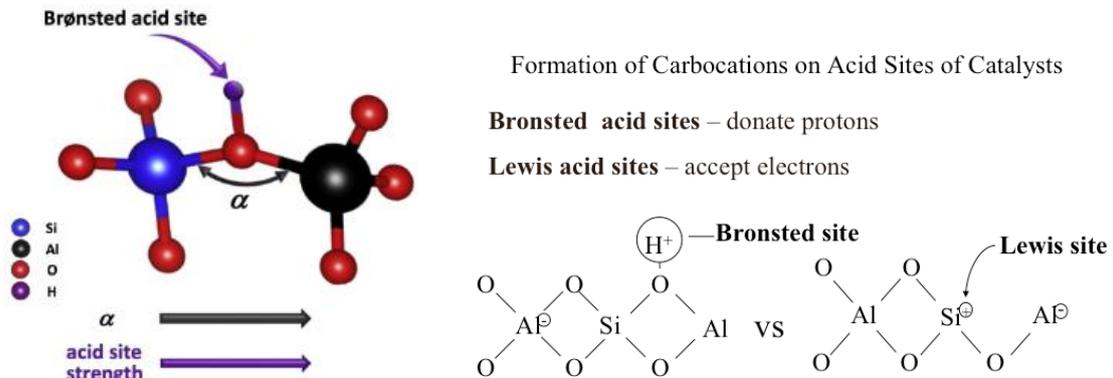


Figura 18. Sitios ácidos Lewis-Brønsted en las moléculas de catalizador de zeolita

Los ácidos de Brønsted donan protones a la molécula de catalizador, compensando el defecto cristalino que genera una carga reticular negativa en el átomo de oxígeno adyacente a un átomo de aluminio, mientras que los ácidos de Lewis promueven la aceptación de electrones en los sitios activos de la molécula de catalizador debido al defecto cristalino que presentan en su estructura molecular o por un exceso de moléculas de aluminio en la estructura del catalizador que hace que ésta sea inestable y acepte electrones.

Las zeolitas son térmicamente estables hasta $800\text{ }^{\circ}\text{C}$, lo que permite reacciones a altas temperaturas y, la regeneración térmica de los catalizadores gastados se puede realizar quemando los residuos carbonosos de las corrientes que contienen oxígeno. Las zeolitas se pueden sintetizar en una amplia variedad de tamaño de poros (como se puede apreciar en la

Tabla 5). Se pueden ajustar también el número y la fuerza de los sitios ácidos de Brønsted, así como el tamaño de los cristales.

Las dimensiones de los poros son del mismo orden de magnitud que las de las moléculas de los reactivos y los productos de la reacción. La alta selectividad de estos materiales en las reacciones de alquilación o transalquilación, como es la alquilación del benceno en etilbenceno o la transalquilación del dietilbenceno con benceno, radica tanto en las características ácidas particulares de estos catalizadores comentadas anteriormente, como en la selectividad estructural debido a la estructura porosa específica del catalizador de zeolitas favorece la accesibilidad de los reactivos o la salida de los productos.

Los aluminosilicatos con estructuras tridimensionales que consisten en tetraedros de SiO_4 y AlO_4 (estructura molecular de bloques primarios) forman 4, 5 o 6 anillos simples o dobles (estructuras moleculares de bloques secundarios), esto se trata de una característica distintiva de la estructura microporosa de las zeolitas. Los sistemas más utilizados se basan en sílice y alúmina. Sin embargo, se ha integrado una gran variedad de otros elementos químicos en la estructura de la zeolita, aportando así características específicas para cada una de ellas.

Los catalizadores de zeolita más utilizados en la industria de producción de etilbenceno son: ZSM-5, Y, beta (β) y MCM-22. Aparte del ZSM-5, que se utiliza para el proceso de producción de etilbenceno en fase vapor, el resto se utilizan para el proceso en fase líquida, a excepción de la zeolita de tipo Y, que también se utiliza para el proceso de fase mixta líquido/vapor (destilación catalítica/reactiva).

Tabla 5. Propiedades zeolitas

Molecular sieve (zeolite)	IZA code (structure)	Main window (number of rings)	Channel dimensionality	Pore / Channel size (Nm)
MCM-22	MWW	10	2D	0.40 × 0.55
ZSM-5	MFI	10	3D	0.54 × 0.56
Beta	BEA	12	3D	0.76 × 0.64
Y	FAU	12	3D	0.74

Los catalizadores de zeolita se utilizan en formulaciones que se preparan en forma de polvo o gránulos, que se adhieren o empaquetan en lechos. Las formulaciones típicas de estos catalizadores pueden contener hasta una proporción de entre el 20-50% en peso de aglutinantes como arcilla, alúmina o sílice, que liga el catalizador y le ofrece un mayor grado de porosidad e integridad estructural; y una concentración de entre el 50-80% en peso de tamiz molecular (zeolita). El catalizador puede unirse, soportarse o extraerse con cualquier material de soporte como alúmina, sílice, aluminosilicatos, titanio o arcilla, para así aumentar su resistencia mecánica y la resistencia al desgaste (Yang *et al.*, 2016), (Cejka *et al.*, 2010).

La **zeolita ZSM-5** tiene una estructura molecular del tipo MFI con una estructura porosa (porosidad media) compuesta por 10 anillos en forma tridimensional y es muy eficaz en la alquilación de benceno en fase vapor. Se trata de una zeolita con un contenido elevado átomos de sílice, es térmicamente e hidrotérmicamente estable con cantidades y concentraciones de ácidos ajustables. Debido a su estructura de poros única y propiedades ácidas, la zeolita ZSM-5 se usa ampliamente en procesos petroquímicos como el craqueo catalítico fluidizado (FCC), conversión de metanol a propileno, generación de gasolina a partir de metanol (proceso MTG), etc.

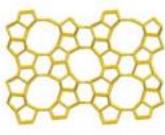
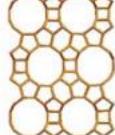
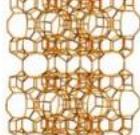
La **zeolita Y** es un tamiz molecular de faujasita (estructura tipo FAU) con una estructura de poros (tamaño de poro más grande) tridimensional de 12 anillos. Debido a su estructura nanocrystalina, con espacios intercrystalinos vacíos más grandes, gran volumen de poros, mayor número de sitios ácidos situados en las superficies externas, mayor actividad y mejor estabilidad; se utiliza a temperaturas más bajas tanto en procesos en fase líquida como en fase mixta líquido/vapor (destilación catalítica). Aunque la relación de alimentación de benceno a etileno requerida en estos procesos es alta (aprox. 7:1), la zeolita Y es competitiva debido a su estabilidad térmica y larga vida útil del complejo catalizador (alrededor de 1 año).

La **zeolita β** tiene una estructura de poros (tamaño de poro grande) tridimensional de 12 anillos (estructura tipo BEA), con una composición rica en sílice y, sitios activos de fácil acceso en los poros que están conectados mediante canales helicoidales estrechos. La zeolita β da una conversión de etileno y una selectividad de etilbenceno superior a la que ofrece la zeolita Y. Además, la relación de alimentación de benceno a etileno se reduce en comparación con la zeolita Y a 4:1, y la vida útil del catalizador se prolonga hasta los 2 años.

La **zeolita MCM-22** es la más representativa de las zeolitas de estructura de tipo MWW, se forma por el apilamiento de varias capas básicas con estructura MWW. La zeolita MCM-22 tiene una estructura peculiar que consta de dos sistemas independientes de poros accesible a través de ventanas compuestas por 10 anillos. Estos diferentes sistemas de poros juegan un papel importante en las capacidades catalíticas de esta zeolita. La zeolita MCM-22 muestra una actividad comparable a la zeolita Y en la alquilación de benceno en fase líquida, pero es menos activa que la zeolita β .

La ventaja de esta zeolita es que su selectividad de etilbenceno es mayor que la de las zeolitas Y y β , lo que da como resultado que se formen menos polietilbencenos (que se podrían transalquilar para generar etilbenceno), por lo tanto, se producen cantidades menores de EB en general durante la alquilación de benceno cuando se utilizan con MCM-22 que con zeolitas Y o β . Esto hace que este catalizador sea atractivo debido a su baja proporción de alimentación de benceno a etileno (3:1 a 4:1), su estabilidad y vida útil de más de tres años.

Tabla 6. Estructura molecular de las zeolitas más utilizadas en la alquilación de benceno con etileno

Commercial zeolites: structure and ethylbenzene processes.				
Zeolite	ZSM-5	Y	Beta	MCM-22
Structure image				
Framework type	along (010) MFI	along (111) FAU	along (100) BEA*	along (001) MWW
Ring size (# T-atoms)	10	12 (with cage, 1.3 nm × 0.74 nm)	12	10 (with cage, 1.82 nm × 7.1 nm)
Channel system	3 dimensional	3 dimensional	3 dimensional	2 dimensional
Ethylbenzene process	Vapor-phase	Liquid-phase, CD Tech	Liquid-phase	Liquid-phase

La zeolita ZSM-5 con su estructura de poro de grado medio es adecuada para procesos de fase vapor, mientras que en procesos en fase líquida su resistencia a la difusión de transferencia de masa es demasiado fuerte, por lo que se prefieren zeolitas con tamaño de poro más grandes como Y, β y MCM-22. En fase líquida, β y MCM-22 son más adecuadas que la zeolita Y, ya que los procesos catalizados por zeolita MCM-22 se pueden operar con proporciones de alimentación de benceno a etileno más bajas, y la zeolita β tiene mayor actividad catalítica y tolerancia al envenenamiento.

Tabla 7. Tamaño de poro máximo zeolitas en ángstrom

Zeolites	Maximum pore diameter (atomic radii) d_A (Å)	Maximum pore diameter (Norman radii) d_N (Å)
SAPO-34	4.3	5.0
MCM-22	5.5	6.2
ZSM-5	5.5 and 5.6	6.2 and 6.3
β zeolite	6.7 and 5.6	7.4 and 6.3
Y zeolite	7.4	8.1

4.4.2.1 Desactivación y regeneración de catalizadores de zeolita

4.4.2.1.1 Mecanismos de desactivación del catalizador

La desactivación del catalizador, la pérdida de actividad catalítica con el uso y la pérdida de selectividad, son los principales problemas que tiene que enfrentar la industria debido a los costes que supone la sustitución del catalizador y, por tanto, la parada del proceso productivo para su reemplazo.

El catalizador inevitablemente decae; sin embargo, la pérdida de actividad es un proceso que se puede controlar, ya que ocurre lentamente con el paso del tiempo y el uso del catalizador. Por otro lado, las alteraciones del proceso productivo o instalaciones con un mal diseño pueden ocasionar una falla rápida del rendimiento del catalizador.

Los mecanismos más importantes de desactivación del catalizador de zeolita en la alquilación del benceno son el envenenamiento y el ensuciamiento.

El envenenamiento es la fuerte quimisorción de reactivos, productos o impurezas en los sitios activos del catalizador, que de otro modo estarían disponibles para la catálisis en la reacción. El hecho de que una especie actúe como veneno para el catalizador depende de su fuerza de adsorción en relación con las otras especies (reactivos) que compiten por los sitios activos catalíticos. Los venenos de los catalizadores se pueden clasificar de acuerdo con su composición química, la selectividad que presenten para los sitios activos y los tipos de reacciones envenenadas. Las bases orgánicas, los hidrocarburos y los metales pesados son venenos comunes para los catalizadores de zeolita utilizados para la alquilación, debido a la presencia que tienen en su composición de sílice-alúmina.

El ensuciamiento del catalizador consiste en la deposición física (mecánica) de especies de fase fluida sobre la superficie del catalizador, lo que da como resultado una pérdida de la actividad debido al bloqueo de sitios activos y de los poros que presentan las zeolitas en su estructura.

Debido a las dimensiones limitadas de los canales de las zeolitas, en los que se encuentran los sitios ácidos (Brønsted-Lewis) y en los que reaccionan las moléculas, la desactivación es un fenómeno particularmente significativo. Puede ser causado tanto por el ensuciamiento de los sitios ácidos individuales, como también por el bloqueo físico de los canales del sistema poros. El motivo por el que sucede este bloqueo es la formación de sustancias de un elevado peso molecular que obstruyen el libre paso de los reactivos y productos y, por tanto, dificultan el proceso de la reacción. Los depósitos orgánicos son de dos tipos: fases ligeras (benceno, etileno,

etilbenceno, dietilbenceno) que se desorben fácilmente a temperaturas entre 80 °C y 350 °C; y los oligómeros pesados, productos polialquilados (PEBs) y anillos aromáticos policondensados (antracenos), que solo pueden eliminarse por combustión. Los depósitos de estas sustancias en el catalizador se denominan coque o brea. Si estas sustancias no se desorben o se eliminan por combustión, la actividad del catalizador se ve reducida con el aumento de los depósitos y, también pueden llegar a contaminar la corriente de producto, de la que se separan en columnas de destilación (como los PEBs) pasando a llamarse materiales pesados, fracciones de fondo, alquitrán o “flux oil”. (Argyle et al., 2015), (Flego et al., 1999).

4.4.2.1.2 Mecanismos de regeneración de catalizadores de zeolita

Hay dos tipos de regeneración *in situ* de catalizadores de zeolita:

- i. Tratamiento térmico con gases
- ii. Tratamiento térmico con hidrocarburos aromáticos

Tratamiento térmico con gases

El catalizador se puede regenerar *in situ* purgando con una corriente de gas caliente cuando el reactor se saca de la línea de producción. La corriente de purga (gas de regeneración) puede incluir cualquier gas inerte adecuado (por ejemplo, nitrógeno). El procedimiento de regeneración consiste en el calentamiento incremental del catalizador a temperaturas superiores a la temperatura de reacción y el paso de la corriente de purga con gas inerte.

Un ejemplo de este proceso consiste en calentar el catalizador en primera instancia hasta los 370 °C para a continuación ser purgado con gas nitrógeno que contiene aproximadamente un 2% de oxígeno en su composición, durante un período de tiempo suficiente para que la corriente de gas de escape tenga una concentración de al menos un 0,5% de oxígeno en su composición. A continuación, se incrementa la temperatura a la que se somete al catalizador (por ejemplo 50 °C más que la anterior, es decir, hasta los 420 °C) y, así sucesivamente hasta llegar a los 600 °C; durante un período de tiempo suficiente para que la composición de oxígeno de los gases de escape sea la misma que la del gas de entrada que se utiliza en la purga, es decir, 2%. Tras la regeneración, el catalizador podrá volver a ser utilizado en las reacciones de alquilación/transalquilación de la planta (patente WO 2007081923 A2, 2007).

Un procedimiento de regeneración alternativo consiste en introducir nitrógeno en el reactor a una temperatura de entre 550-575 °C y mantenerlo a esta temperatura durante todo el tratamiento, mientras que al mismo tiempo la concentración de oxígeno/aire en el gas de regeneración se va aumentando en pequeños incrementos desde el 1% hasta el 99%, dejando pequeños intervalos de tiempo entre cada incremento de la concentración. Al final de la regeneración, cuando se alcanza la misma temperatura en todo el lecho de catalizador y se llega a la concentración del 99%, se termina la inyección de aire y solo queda fluyendo el nitrógeno. Por último, la temperatura se reduce a la temperatura de reacción y el lecho de catalizador está listo para ser reutilizado en el reactor de alquilación y transalquilación (patente WO 2005042159 A1, 2015).

Tratamiento térmico con hidrocarburos aromáticos

Este procedimiento de regeneración consiste en alternar lavados cíclicos a altas temperaturas con hidrocarburos aromáticos, para el caso de la producción de etilbenceno con benceno. Se produce una reacción con la brea (o coque) de otro modo insoluble, mediante una serie de reacciones de alquilación/transalquilación catalizadas por el propio catalizador zeolítico, transformando la brea en moléculas de menor peso molecular, solubles en los hidrocarburos aromáticos (benceno) y, sobre todo, permitiendo que sean capaces estas moléculas de menor peso de difundirse a través de los poros de la zeolita.

Este tratamiento se lleva a cabo a temperaturas de entre 200 °C y 290 °C, preferiblemente de 15 a 45 horas, a una presión que varía entre 20 bar y 40 bar. Este proceso funciona para todos los tipos de zeolita utilizadas en fase líquida (γ , β , MCM-22). Es particularmente conveniente para su uso en reactores continuos catalíticos de lecho fijo en un intervalo de velocidad espacial de peso por hora (WHSV) de 2 a 8 horas⁻¹ (patente EP 1068898 B1, 2004).

Regeneración en *guard beds* en procesos de alquilación

Los *guard beds* son equipos de adsorción de lecho fijo que se utilizan para el pretratamiento de la materia prima. En las plantas de producción de etilbenceno, estos lechos de adsorción contienen un material adsorbente compuesto por zeolita y, se utilizan para eliminar los venenos del catalizador procedentes de las corrientes de olefinas (etileno) antes de su entrada en el reactor, mediante la adsorción de éstos en las moléculas de zeolita. Para asegurar la continuidad del proceso, la regeneración se lleva a cabo en un llamado sistema de oscilación en el que uno o más lechos fijos de adsorción se mantienen en funcionamiento para eliminar los contaminantes y, uno o dos *guard beds* restantes se purgan o regeneran para así mantener la efectividad de adsorción en todo momento. El medio de regeneración consiste en una corriente de producto del proceso de alquilación de olefinas / efluente del reactor que está compuesta por benceno y polietilbencenos. La regeneración se lleva a cabo a una temperatura elevada, normalmente alrededor de 150-250 °C, y presiones relativamente bajas pueden favorecer a la desorción (1000-4000 kPag o 145-580 psig).

Los contaminantes que se pueden encontrar en las corrientes de aromáticos ligeros (como el etileno que se alimenta) son compuestos sulfurados o nitrogenados, agua, compuestos oxigenados, etc.; que afectan negativamente al catalizador y, por tanto, deben ser eliminados de la corriente de alimentación antes de que entren al reactor principal. El volumen de zeolitas en el lecho fijo de adsorción no excederá el 20% del volumen total de lecho de catalizador utilizado en los reactores (patente US 20080029437, 2008).

4.5 Instalaciones de fraccionamiento

Al pasar de los reactores a las columnas de fraccionamiento, la presión y la temperatura de los efluentes de reactivos a veces tienen que ajustarse en un tanque *flash* (tanque de recuperación de condensado), donde las fracciones más ligeras (junto con algunos productos y reactivos) procedentes del efluente del reactor se vaporizan y se separan de los materiales más pesados; estos compuestos más ligeros se conducen para su reciclaje a otros equipos para su recuperación, se utilizan como alimento, se utilizan para tratamientos adicionales y/o se utilizan para combustibles. Los intercambiadores de calor se utilizan en estas operaciones de fraccionamiento para ajustar la temperatura entre las diferentes unidades en el reactor y las secciones de fraccionamiento.

El efluente de reacción típico del proceso catalizado con $AlCl_3$ tiene una composición de 45% p/p de benceno, 37% p/p de etilbenceno, 15% p/p de dietilbenceno, 2% p/p de polietilbencenos y 1% p/p de residuos alquitranados. Se separa en componentes en una columna de destilación en la sección de fraccionamiento. En estas corrientes de salida del reactor todavía quedan cantidades considerables de benceno sin reaccionar que deben separarse y recircularse (reciclarse) al reactor. En los procesos catalizados por zeolitas la cantidad de benceno en el efluente del reactor es todavía mayor, por lo que será aún más importante la recirculación. Esto se logra gracias a la columna de recuperación de benceno, la primera columna de destilación que encontramos en las instalaciones de fraccionamiento en las plantas de producción de etilbenceno. En los procesos en los que los efluentes del reactor son gaseosos (como en la alquilación en fase vapor o fase mixta líquido/vapor catalizadas por zeolitas), la purga de benceno se enfría primero y se licua en un condensador y, luego se trata en la columna de recuperación de benceno de la misma manera. La columna de recuperación de benceno suele venir acompañada por una columna de arrastre benceno o de hidrocarburos ligeros, destinada a separar las fracciones más ligeras todavía presentes en el alimento de benceno sin reaccionar después de que la columna de reciclaje lo separe de los productos de reacción.

El diseño de las instalaciones de fraccionamiento puede tener diferentes disposiciones de columnas de destilación, condensadores, sedimentadores y decantadores, de una planta a otra. En la disposición más común, la destilación consiste en tres columnas de destilación en serie. En la primera de ellas, el benceno se recupera por la cabeza para ser reciclado de vuelta a la sección de reacción (columna de recuperación de benceno). En la cabeza de la segunda columna de destilación se separa etilbenceno puro (columna de recuperación de etilbenceno). En la tercera columna de destilación, algunas veces se opera en vacío, se lleva a cabo la separación de subproductos más pesados (columna de recuperación de polietilbencenos). En esta última columna los polietilbencenos se extraen por la cabeza de la columna y se recircularan a la sección de transalquilación, mientras que por el fondo de la columna se extraen los subproductos de alto punto de ebullición (alquitranes u otros aceites pesados).

En esta corriente de materiales pesados (alquitranes), el dietilbenceno y trietilbenceno están presentes en bajas concentraciones, ya que han sido recuperados anteriormente por destilación.

Una característica clave para el diseño de las instalaciones de fraccionamiento desde el punto de vista económico y ambiental, es el rango de composiciones del alimento que puede manejar el proceso de producción, por ejemplo, el etileno que se alimenta a la planta puede ir desde diluido a puro (concentración 10% molar a 100%), y benceno 85% p/p al 100% p/p. También habrá que considerar los posibles efectos secundarios de la degradación del catalizador, el ensuciamiento o envenenamiento del catalizador, la vida útil, la selectividad, el rendimiento general del proceso, la formación de subproductos, la generación de gases de escape complejos, aguas residuales y el tratamiento de residuos. Uno de los factores más importantes en estas deliberaciones es la presencia, posible integración y compatibilidad de unos procesos con otros procesos de la planta, tratamientos *in situ* y operaciones de producción, en términos de sus flujos de materiales y energía.

Existe una amplia variación en las condiciones de funcionamiento de las columnas de destilación (número de platos, ubicación de las corrientes de alimentación en la columna, hervidores (vapor a baja presión), condensadores (agua de refrigeración), etc.); particularmente en las instalaciones mejoradas (que adopten las últimas tecnologías y procesos desarrollados) y, también hay una amplia variación en la cantidad de benceno en exceso utilizado entre las

distintas plantas. Estos detalles son, hasta cierto punto, considerados confidenciales por cada industria y por sus operadores. Se basan en la optimización del proceso y pueden dar lugar a todo tipo de flujos entrelazados, conexiones y modificaciones. Algunas de estas variaciones van desde el reciclaje de los productos de cabeza de las columnas de destilación que pueden recircularse al reactor directamente para su uso como reactivos en la reacción o recircularse a otra columna de destilación. Además, cualquier flujo del proceso puede dividirse en múltiples corrientes que entren por distintos puntos a las columnas de destilación o pueden entrar en estas columnas a través de un único punto de entrada; a su vez, las columnas de destilación pueden estar en serie o en paralelo. En algunas plantas se utilizarán equipos adicionales a lo largo del proceso de producción, como intercambiadores de calor (patente WO 2007081923 A2, 2007).

4.5.1 Columna de recuperación de benceno

Esta columna de destilación se utiliza normalmente en secciones posteriores al reactor, para eliminar de la corriente el benceno que no ha reaccionado en el reactor (Figura 6c). Se opera a presiones medias y, por lo general, estas columnas contienen alrededor de 60 platos. Las temperaturas en este proceso de recuperación del benceno por destilación son aproximadamente 130 °C en la parte de la cabeza de la columna y 170 °C en la parte inferior, y la presión puede ser la atmosférica. Los productos de reacción se encuentran en el fondo de la columna. El exceso de benceno se condensa en la parte superior de la columna, en el condensador superior que también se utiliza para la recuperación de calor/generación de vapor.

4.5.2 Columna de recuperación de etilbenceno

Esta columna está diseñada para presiones más bajas (1,1-1,7 bar), lo cual permite la recuperación de calor en el condensador y, al mismo tiempo, reduce la temperatura del fondo del hervidor (Figura 6d). Las temperaturas en la columna de destilación de recuperación de etilbenceno son de aproximadamente 120 °C en la cabeza y 240 °C en el fondo de la columna, y la presión puede variar entre 100 kPa y 300 kPa.

Los diseños actuales utilizan empaque estructurado en platos para aumentar la capacidad y el área superficial, aumentando así la capacidad de recuperación del etilbenceno.

4.5.3 Columna de recuperación de polietilbencenos

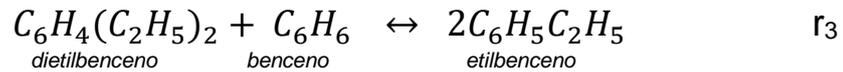
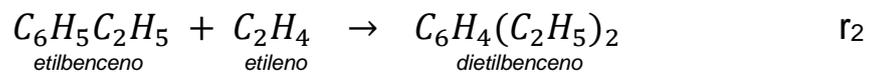
Muchos diseños de esta columna incluyen platos debido a la alta frecuencia de problemas relacionados con el ensuciamiento e incrustaciones. Aunque las corrientes de alimentación procedentes del fondo de la columna de destilación de etilbenceno tienen una baja tendencia a polimerizar, presentan altas temperaturas de ebullición. Para prevenir el ensuciamiento y el craqueo del alimento, la temperatura en esta columna de destilación se mantiene por debajo de los 300 °C, lo que se logra bajando la presión de la columna (en algunos casos se utiliza el vacío).

Las temperaturas en la columna de destilación de polietilbencenos suelen ser aproximadamente de 120 °C en la cabeza y sobre los 240 °C en la parte inferior de la misma, y la presión puede llegar a ser presión de vacío. La presión de las columnas se establece de acuerdo con la fuente de calor disponible y la integración del vapor generado en los condensadores.

La mayor parte del vapor producido en los condensadores superiores se puede utilizar en otros procesos distintos que pueda tener la planta, en aquellas en las que se utilice el etilbenceno para producir estireno, este vapor se podrá utilizar para el proceso de deshidrogenación del monómero de estireno (Figura 6e).

5. Balances de materia y Cinéticas de reacción

En el proceso global de la planta se producirán las siguientes reacciones mostradas anteriormente:



La primera reacción (r_1) es la que se lleva a cabo en el reactor de alquilación, donde a partir de la adición directa entre etileno y benceno se genera etilbenceno. La segunda (r_2) se genera al reaccionar el etilbenceno producido con el exceso de etileno, dando lugar a la producción de dietilbenceno. Esta reacción se puede minimizar alimentando al proceso con exceso de benceno, manteniendo una relación de 6-8:1 de benceno/etileno para el proceso catalizado con zeolitas del tipo ZSM-5.

Para maximizar la producción de etilbenceno en la planta, el dietilbenceno que se produce se separa y se recircula a un reactor de transalquilación en el cual el dietilbenceno reaccionará con benceno para formar dietilbenceno, como se puede apreciar en la tercera reacción (r_3).

El benceno que se utiliza como alimento no es puro, en su composición encontramos impurezas como es el tolueno. Este tolueno reaccionará con el etileno para formar etilbenceno y propileno, como vemos en la cuarta reacción (r_4).

La cinética de reacción derivada del proceso según (Turton *et al.*, 2018) es la siguiente:

$$-r_i = k_{o,i} e^{-E_i/RT} C_{\text{etileno}}^a C_{EB}^b C_{\text{tolueno}}^c C_{\text{benceno}}^d C_{DEB}^e$$

donde i es el número de reacción anterior (r_1, r_2, r_3, r_4) y se utilizarán los datos de la Tabla 8 para realizar los cálculos pertinentes.

Tabla 8. Parámetros y constantes para el cálculo de las cinéticas de reacción

i	E _i kcal/kmol	K _{o,i}	a	b	c	d	e
1	22.500	1 × 10 ⁶	1	0	0	1	0
2	22.500	6 × 10 ⁵	1	1	0	0	0
3	25.000	7,8 × 10 ⁶	0	0	0	1	1
4	20.000	3,8 × 10 ⁸	2	0	1	0	0

Las unidades para r_i y C_i serán kmol/s/m³ de reactor y kmol/m³ de gas, respectivamente. Las unidades para $k_{o,i}$ variarán dependiendo de la forma de la reacción.

La capacidad de producción fijada para la planta de producción que se va a diseñar es de 80.000 T/año de etilbenceno. La planta estará en funcionamiento 348 días al año, es decir, solamente parará 17 días, 14 días estarán dedicados a periodos vacacionales y 3 días para la regeneración del catalizador de zeolitas tipo ZSM-5 utilizado en los reactores de alquilación, para arranque y limpieza de las instalaciones tras los periodos de descanso y, para mantenimiento de equipos de la planta.

Para cumplir la producción en estos plazos, la planta tendrá que producir un caudal molar de 90,22 kmol/h de etilbenceno:

$$\begin{aligned} \text{Producción diaria} &= \frac{80.000.000 \text{ kg}}{348 \text{ días}} = 229.885 \frac{\text{kg}}{\text{día}} C_8H_{10} \\ \text{Caudal másico} &= \frac{229.885 \text{ kg/día}}{24 \text{ h}} = 9.578,54 \frac{\text{kg}}{\text{h}} C_8H_{10} \\ \text{Caudal molar} &= \frac{9.578,54 \text{ kg/h}}{106,167 \text{ kg/kmol}} = 90,22 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} C_8H_{10} \end{aligned}$$

La selectividad global del etilbenceno tras las reacciones de alquilación y transalquilación es superior al 90% según (Abichandani J. *et al.*, 1993) para el proceso Mobil-Badger de tercera generación, es decir, para la alquilación de benceno con etileno en fase vapor catalizado por zeolitas del tipo ZSM-5. Asumiremos, por tanto, la selectividad más baja (90%) y la formación de etilbenceno y dietilbenceno:

$$S_{EB} = \frac{F_{EB}}{F_{EB} + F_{DEB}} \quad (1)$$

donde S_{EB} es la selectividad del etilbenceno, F_{EB} es el flujo molar de etilbenceno y F_{DEB} es el flujo molar del dietilbenceno antes de llegar al reactor de transalquilación.

Despejamos de la ecuación (1) el flujo molar de DEB:

$$F_{DEB} = F_{EB} \times \left(\frac{1}{S_{EB}} - 1 \right) = 10,024 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} C_{10}H_{14} \quad (2)$$

En cuanto al etileno, sabemos que la conversión es del 99% ($X_{ET}=0,99$) según (Luyben, 2011), por lo que mediante la ecuación de la conversión de etileno (3) obtendremos el caudal molar del mismo:

$$X_{ET} = \frac{F_{EB} + F_{DEB}}{F_{ET,o}} \quad (3)$$

$$F_{ET,o} = \frac{F_{EB} + F_{DEB}}{X_{ET}} = \frac{90,22 + 10,024}{0,99} = 101,26 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} C_2H_4 \quad (4)$$

donde el caudal molar de alimento necesario de etileno para el proceso vendrá dado por el flujo molar de etilbenceno que se obtiene más el caudal molar de 1,4-dietilbenceno que se genera antes de ser recirculado al reactor de transalquilación, es decir, la corriente líquida de fondo que se obtendrá en la segunda columna del proceso y que se recircula al transalquilador para maximizar la producción de etilbenceno del proceso. Todo esto teniendo en cuenta la conversión global del etileno en el proceso, que es $X_{ET}=0,99$.

Esta conversión del etileno se conseguirá si mantenemos temperaturas superiores a 480 °C en los reactores de alquilación y transalquilación, ya que los volúmenes de los reactores a utilizar no sobrepasan los 40 m³.

En el proceso de tercera generación de Mobil-Badger en fase vapor, el exceso de benceno, que se alimenta a los reactores con respecto al etileno, que no reacciona se recicla al proceso para volver a ser utilizado en los reactores de alquilación y transalquilación hasta agotarse. Esto significa que el caudal molar de alimento de benceno será similar al de etilbenceno producido, teniendo en cuenta el rendimiento global del proceso.

$$F_{BC} = \frac{F_{EB}}{EB \text{ yield}} = \frac{90,22 \text{ kmol/h}}{0,9} = 100,24 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} C_6H_6 \quad (5)$$

Para evitar la formación de productos no deseados, en este proceso catalizado por zeolitas ZSM-5 se alimenta los reactores con exceso de benceno con respecto al etileno. Para el primer reactor la proporción será 8:1, es decir, el flujo molar de benceno que entra al primer reactor de alquilación será 8 veces mayor al de etileno. Para esto, la corriente de entrada al proceso de etileno se separa en 3 corrientes que serán alimentadas a los reactores de alquilación en caudales molares de (30, 36 y 36 kmol/h). Así, se mantiene el exceso de benceno en los tres reactores de alquilación con proporciones de benceno etileno de entre 6-8:1.

Con estas proporciones de etileno en los reactores se minimiza la formación de productos no deseados, como son el dietilbenceno, propileno, polietilbencenos, etc.

A continuación, se muestra un diagrama de bloques simplificado de la planta de producción de etilbenceno, con las corrientes de alimento necesarias para el proceso y la corriente de etilbenceno producida al final del proceso.

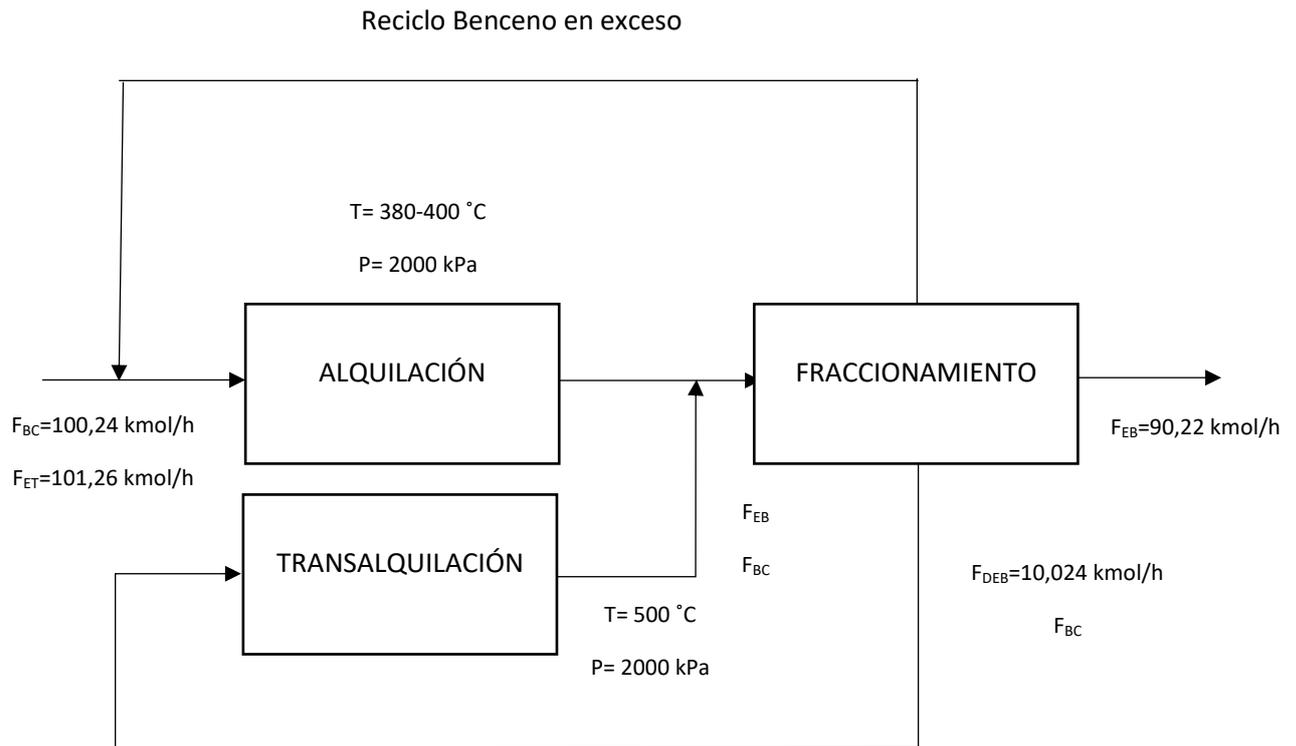


Figura 19. Diagrama de bloques simplificado planta de producción de etilbenceno

Las corrientes de alimento de benceno y etileno no son puras, la corriente de benceno presenta en su composición una concentración del 2% de tolueno. La corriente de etileno tiene una concentración del 7% de etano.

$$F_{TO} = 100,24 \times 0,02 = 2 \text{ kmol/h } C_7H_8 \quad (6)$$

$$F_{ETA} = 101,26 \times 0,07 = 7,1 \text{ kmol/h } C_2H_6 \quad (7)$$

Además, en los reactores de alquilación el tolueno reaccionará con etileno para producir etilbenceno y propileno. Todas estas impurezas serán eliminadas en el proceso para que no afecten a la calidad de la corriente de producto de etilbenceno. El tolueno reaccionará con etileno en los 2 primeros reactores de alquilación hasta agotarse. El etano y propileno se separarán en las unidades de fraccionamiento (separador bifásico) en una corriente gaseosa, que podrá ser utilizada como combustible.

6. Simulación del proceso de producción de etilbenceno en ProMax

6.1 Elección del proceso de alquilación

El proceso elegido para simular en ProMax se basa en la tercera generación de Mobil-Badger en fase vapor catalizado mediante zeolitas del tipo ZSM-5. Se ha elegido este proceso, ya que más del 40% de las plantas de producción de etilbenceno mundiales utilizan este proceso.

Es especialmente interesante cuando la planta viene acompañada por otra planta de producción de monómeros de estireno, ya que el etilbenceno producido es de gran calidad y no presenta impurezas que puedan afectar a la producción de estireno ni a los procesos de deshidrogenación. En este proceso no hay tantos problemas de corrosión como en los que utilizan AlCl_3 . Las zeolitas ZSM-5 presentan ciertas características que las hacen interesantes, como son la estabilidad térmica y estructural, es decir, aguantan temperaturas y presiones elevadas, y un precio más económico que el resto de zeolitas que compensa el hecho de que tengan una vida útil inferior a otro tipo de zeolitas. La selectividad de etilbenceno del proceso es elevada ($S_{\text{EB}}=0,9$), y la conversión del etileno es del 99%.

En este proceso los reactores de alquilación se alimentan con exceso de benceno en proporciones de 7:1 con respecto al etileno alimentado. Esto no supone un problema, ya que el exceso de benceno que no reacciona inicialmente se recircula al principio de la sección de alquilación y, otra corriente con benceno en exceso y 1,4-dietilbenceno se transporta a un reactor de transalquilación para generar etilbenceno y así maximizar su producción.

El único inconveniente de este proceso es la elevada temperatura y presión necesarias en los reactores de alquilación (380-400 °C y 2MPa) y en el reactor de transalquilación (500 °C y 2MPa). Sin embargo, debido a que las reacciones que se producen en los reactores de alquilación son exotérmicas, se genera calor y vapor de agua. Todo esto será considerado en la integración energética del proceso ya que puede suponer un ahorro considerable en el gasto energético de la planta. Además, la corriente de gas que se obtiene en el separador bifásico se puede utilizar como combustible para calentar la corriente de entrada de benceno, suponiendo así también un ahorro en el coste de servicios.

La capacidad de producción de la planta a diseñar se ha fijado en 80.000 T/año de etilbenceno.

Para la simulación de ProMax se ha tomado como referencia el siguiente diagrama de flujo del proceso de una planta de producción de etilbenceno de (Turton *et al.*, 2018):

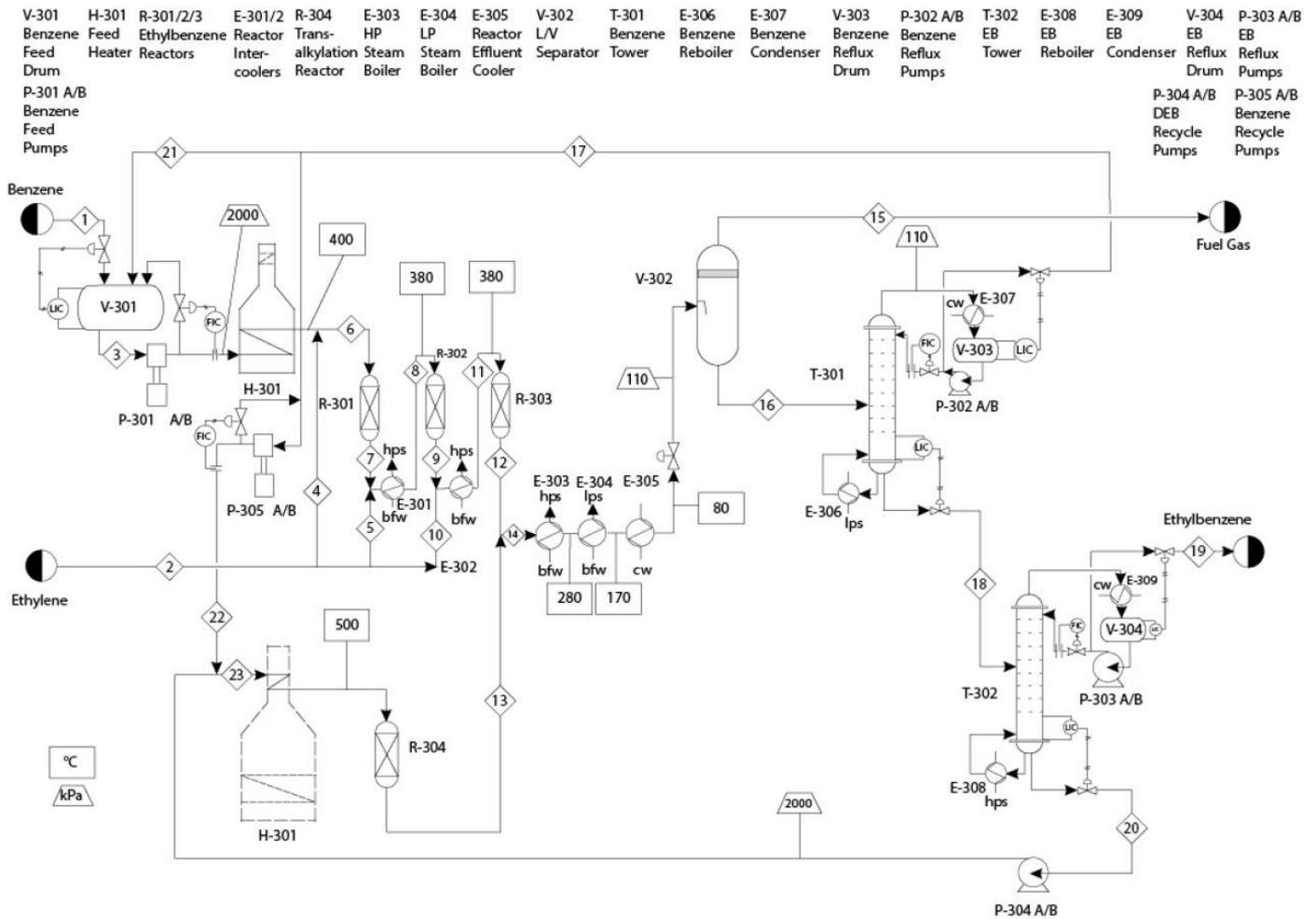


Figura 20. Diagrama de flujo proceso de producción etilbenceno

6.2 Simulación proceso en ProMax

El primer paso en la simulación del proceso productivo es la elección del entorno termodinámico. En la planta se alcanzan presiones de 20 bar (2 MPa en los reactores de alquilación/transalquilación), por lo que según el siguiente árbol de decisión del paquete termodinámico (Figura 21) elegiremos entre el paquete Peng-Robinson o SRK, ya que no disponemos de los parámetros de interacción.

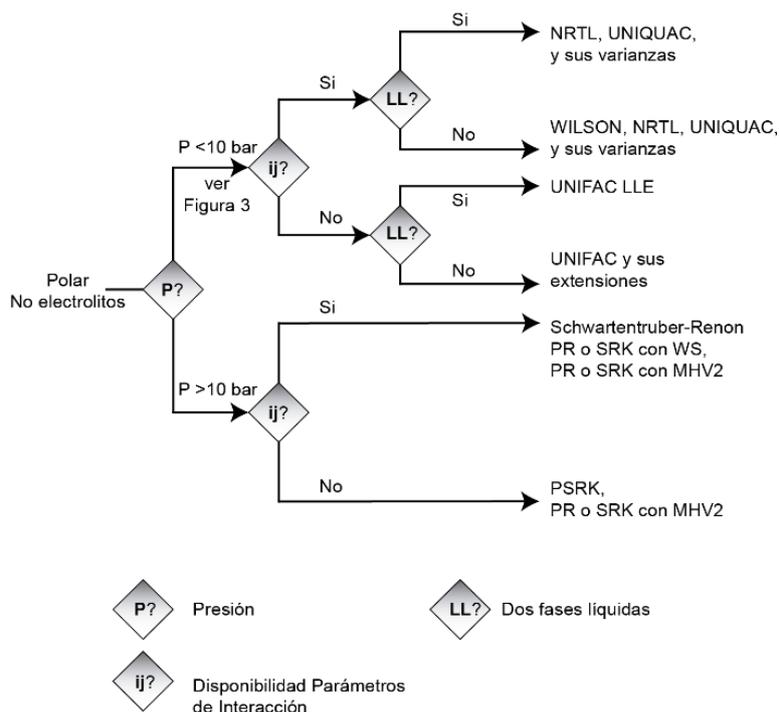


Figura 21. Árbol de decisión del paquete termodinámico de simulación para ASPEN/ProMax

Finalmente, se decide el uso del paquete termodinámico Redlich-Kwong-Soave (SRK), ya que es el entorno termodinámico más recomendable según el laboratorio químico *Diquima UPM* para simulación de plantas de procesamiento de gases, refinerías, aplicaciones petroquímicas y, en especial para el simulado del proceso de producción de etilbenceno en ProMax o ASPEN.

A continuación, se añaden los componentes químicos que entran al proceso y que se forman como productos en las reacciones (benceno, tolueno, etileno, etano, propileno, etilbenceno, 1,4-dietilbenceno, agua). También se añaden las reacciones químicas que se llevarán a cabo en los reactores de alquilación y transalquilación, sus energías de activación, conversiones y parámetros cinéticos.

El benceno se alimenta al proceso a través de la corriente 1 con un caudal molar de 100 kmol/h a 25 °C y 110 kPa; esta corriente se mezcla con el reciclo de benceno en exceso antes de pasar por la bomba (PUMP-100), que elevará la presión de la corriente hasta 20 bar (2 MPa). Esta corriente de benceno pasa a un intercambiador de calor (XCHG-100) que simula un horno industrial, el cual aumentará la temperatura de la corriente hasta la de reacción de alquilación (400 °C). El etileno se alimenta al proceso a través de la corriente 2 con un caudal molar de 100 kmol/h a una temperatura de 25 °C y a 2000 kPa. Esta corriente se divide en 3 corrientes de 30, 35 y 35 kmol/h que se llevarán a cada reactor de alquilación para mantener la proporción de benceno a etileno de 6-8:1 en los reactores de alquilación y así minimizar la formación de productos no deseados y maximizar la producción de etilbenceno. Tras el primer divisor, una corriente de 30 kmol/h de etileno se dirige a un mezclador (MIX-101) para ser mezclada con la corriente de benceno. Esta corriente estará a una temperatura de alrededor de 380 °C y se dirige al primer reactor de alquilación (REAC-100). Los tres reactores son fijos de lecho empacado y son adiabáticos.

En el primer reactor reacciona todo el etileno, por lo que se conduce una corriente de 35 kmol/h de etileno a un mezclador (MIX-102) que combinará la corriente del efluente del reactor con esta corriente de etileno. La reacción de alquilación es exotérmica, esto quiere decir, generará calor aumentando así la temperatura de la corriente de salida del reactor. Antes de pasar al segundo reactor, la corriente se enfría en un intercambiador de calor (XCHG-101) hasta los 380 °C, esto generará vapor de agua que podrá ser aprovechado posteriormente para la integración energética del proceso. En el segundo reactor de alquilación (REAC-101) reaccionará también todo el etileno, por lo que a la salida de éste también se mezclará con otra corriente de 35 kmol/h antes de pasar por otro intercambiador de calor (XCHG-102) que enfriará la corriente hasta los 380 °C, generando vapor de agua presurizado. Esta corriente se circula al tercer y último reactor de alquilación (REAC-102). Al salir del reactor, la corriente de efluente se mezcla con una corriente de reciclo, que contiene etilbenceno y benceno que no ha reaccionado en el reactor de transalquilación, en el mezclador (MIX-104).

La corriente del efluente que sale del tercer reactor contiene productos, subproductos, benceno sin reaccionar y otros gases no condensables (etano, propileno). Este efluente se enfría en dos calderas de calor residual (XCHG-103 y XCHG-104) hasta los 170 °C, en las que se genera vapor de alta y de baja presión, respectivamente. El vapor de agua generado en el enfriamiento también se puede utilizar para la integración energética del proceso de producción de etilbenceno o, en los casos en que haya una planta de producción de estireno adyacente, se podrá utilizar para el proceso de deshidrogenación del etilbenceno.

La mezcla bifásica que sale de XCHG-104 se envía a otro enfriador (XCHG-105) para disminuir la temperatura de la corriente hasta los 80 °C. Posteriormente, se dirige la corriente a un separador bifásico (VSSL-100), donde se separan los gases ligeros por la parte superior para ser utilizados como combustible para el calentador que se utiliza en la corriente de alimento de benceno. En la simulación en promax, la corriente líquida de salida del separador bifásico (corriente 24) aún presenta componentes no-condensables (etano y propileno), por lo que siguiendo los consejos de simulación de la bibliografía de Turton *et al.*, 2018, habrá que añadir un separador de componentes que consiga eliminar de la corriente el etano y propileno que puedan causar problemas en la simulación de las columnas de recuperación posteriores. Para esta función, se ha añadido una columna de destilación de 12 etapas, con especificaciones de recuperación de etano y propileno por cabeza (vapor de destilado). La corriente de fondo de esta columna (DTWR-100) ya no tendrá en su composición etano ni propileno. Según Turton *et al.*, 2018, en la práctica los componentes no condensables restantes son eliminados por la parte superior de la columna de recuperación de benceno (DTWR-101) de la corriente de vapor de destilado del tambor de reflujo de cabeza de la columna.

La corriente que sale de DTWR-100, se dirige a la columna de recuperación de benceno (DTWR-101), la cual está formada por 45 platos separados 24 pulgadas. Esto le confiere una altura de 27,45 m y un diámetro de 1,7m. Por la corriente de cabeza de la columna se obtiene el benceno en exceso que no ha reaccionado, que se recicla y se divide en 2 corrientes; una (corriente 47) se conduce al reactor de transalquilación con un caudal molar de 40 kmol/h de benceno para que reaccione en exceso con el 1,4-dietilbenceno y genere más etilbenceno. La otra corriente en que se divide el reciclo de benceno (corriente 48) tiene un caudal molar de 130 kmol/h y se dirige al principio del proceso de producción donde se mezcla con la corriente de alimento de benceno.

La corriente de fondo de DTWR-101 se dirige a una segunda columna de destilación (DTWR-102), esta es, la columna de recuperación de etilbenceno. Esta segunda columna está formada por 76 platos separados 15 pulgadas entre ellos, esto le confiere una altura de 28,96 m y tendrá un diámetro de 1,5 m. Por la corriente de cabeza de esta columna, como vapor de destilado, se obtendrá la corriente de etilbenceno producido con una pureza del 99,8% y un 0,2% de benceno. La corriente de cola de la columna compuesta por un 98% de 1,4-dietilbenceno se lleva hasta la bomba (PUMP-101) que aumentará la presión de la corriente hasta 2000 kPa, que será la presión adecuada para la reacción de transalquilación. Esta corriente presurizada de DEB se mezcla con la corriente de reciclo de benceno que también ha sido previamente presurizada hasta los 2 MPa en la bomba (PUMP-102). Esta corriente de 1,4-dietilbenceno con benceno (corriente 50) se dirige hacia unos intercambiadores de calor en serie.

Según la bibliografía, la mejor alternativa para calentar esta corriente hasta la temperatura de reacción de transalquilación (500 °C) es mediante 2 intercambiadores de calor y 1 horno. El primer calentador (XCHG-107) elevará la temperatura de la corriente hasta la temperatura de burbuja (237,7 °C); el segundo intercambiador de calor (XCHG-108) evaporará la corriente hasta la temperatura de rocío (266,8 °C). El tercer intercambiador de calor (XCHG-109) aumentará la temperatura de la corriente hasta la temperatura de transalquilación (500 °C).

La corriente 54 se dirige al reactor de transalquilación (REAC-103), en el cual reaccionará todo el 1,4-dietilbenceno con benceno para formar etilbenceno. El exceso de benceno y el etilbenceno producido salen por la corriente de efluente del reactor y son recirculados al proceso y mezclados (MIX-103) con la corriente de salida del tercer reactor.

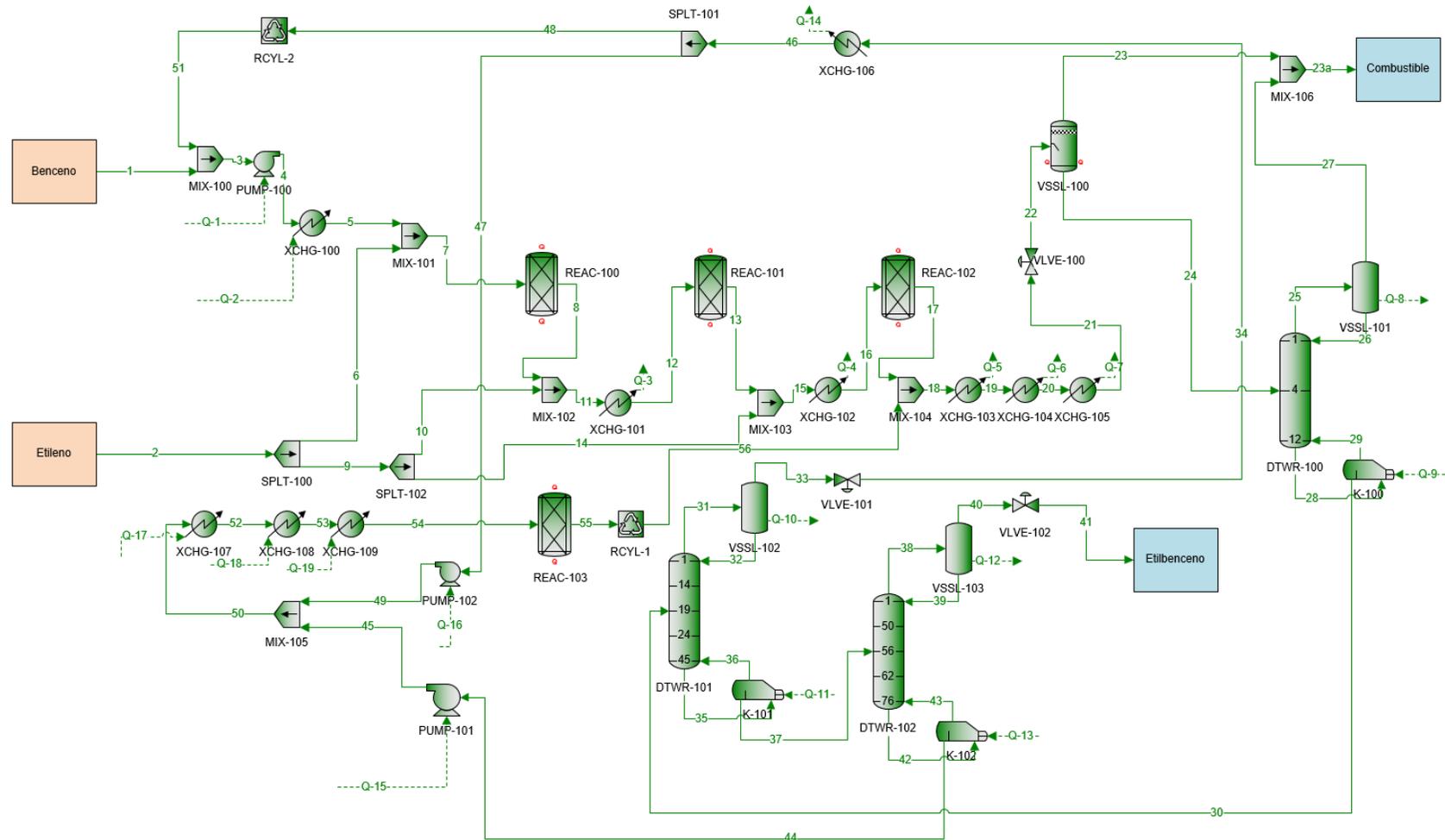


Figura 22. Diagrama de flujo simulación planta de producción de etilbenceno en fase vapor utilizando ProMax.

Tabla 9. Propiedades y composición corrientes del proceso simulado en ProMax (corrientes 1-18)

Corriente	1 (Benceno)	2 (Etileno)	3	4	5	6
Temperatura (°C)	25,00	25,00	33,55	34,36	400,00	25,00
Presión (kPa)	110,00	2000,00	105,00	2000,00	1985,00	2000,00
Fracción molar vapor	0,00	1,00	0,00	0,00	1,00	1,00
Caudal molar (kmol/h)	100,00	100,00	230,20	230,20	230,20	30,00
Caudal másico (kg/h)	7839,52	2819,43	18011,43	18011,43	18011,43	845,83
Flujo molar componentes (kmol/h)						
Benceno	97,98	0,00	228,12	228,12	228,12	0,00
Etileno	0,00	93,00	0,00	0,00	0,00	27,90
Etano	0,00	7,00	0,00	0,00	0,00	2,10
Propileno	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Tolueno	2,02	0,00	2,02	2,02	2,02	0,00
Etilbenceno	0,00	0,00	0,06	0,06	0,06	0,00
1,4-dietilbenceno	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00

Corriente	7	8	9	10	11	12
Temperatura (°C)	382,60	445,09	25,00	25,00	424,13	380,00
Presión (kPa)	1985,00	1970,00	2000,00	2000,00	1970,00	1960,00
Fracción molar vapor	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00
Caudal molar (kmol/h)	260,20	234,24	70,00	35,00	269,24	269,24
Caudal másico (kg/h)	18857,26	18857,26	1973,60	986,80	19844,06	19844,06
Flujo molar componentes (kmol/h)						
Benceno	228,12	204,11	0,00	0,00	204,11	204,11
Etileno	27,90	0,00	65,10	32,55	32,55	32,55
Etano	2,10	2,10	4,90	2,45	4,55	4,55
Propileno	0,00	1,94	0,00	0,00	1,94	1,94
Tolueno	2,02	0,08	0,00	0,00	0,08	0,08
Etilbenceno	0,06	26,00	0,00	0,00	26,00	26,00
1,4-dietilbenceno	0,00	0,01	0,00	0,00	0,01	0,01

Corriente	13	14	15	16	17	18
Temperatura (°C)	452,83	25,00	432,81	380,00	448,58	458,24
Presión (kPa)	1945,00	2000,00	1945,00	1935,00	1920,00	1920,00
Fracción molar vapor	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00
Caudal molar (kmol/h)	236,77	35,00	271,77	271,77	239,22	291,11
Caudal másico (kg/h)	19844,06	986,80	20830,86	20830,86	20830,86	25460,99
Flujo molar componentes (kmol/h)						
Benceno	175,38	0,00	175,38	175,38	149,35	180,69
Etileno	0,00	32,55	32,55	32,55	0,00	0,00
Etano	4,55	2,45	7,00	7,00	7,00	7,00
Propileno	2,02	0,00	2,02	2,02	2,02	2,02
Tolueno	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Etilbenceno	51,15	0,00	51,15	51,15	70,65	91,20
1,4-dietilbenceno	3,67	0,00	3,67	3,67	10,20	10,20

Tabla 10. Propiedades y composición corrientes del proceso simulado en ProMax (corrientes 19-40)

Corriente	19	20	21	22	23	23a (Combustible)
Temperatura (°C)	289,96	170,00	80,00	74,73	74,73	75,46
Presión (kPa)	1920,00	1920,00	1920,00	110,00	110,00	110,00
Fracción molar vapor	1,00	0,00	0,00	0,05	1,00	1,00
Caudal molar (kmol/h)	291,11	291,11	291,11	291,11	14,06	18,38
Caudal másico (kg/h)	25460,99	25460,99	25460,99	25460,99	784,81	1045,56
Flujo molar componentes (kmol/h)						
Benceno	180,69	180,69	180,69	180,69	6,39	8,70
Etileno	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Etano	7,00	7,00	7,00	7,00	5,77	7,00
Propileno	2,02	2,02	2,02	2,02	1,40	2,02
Tolueno	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Etilbenceno	91,20	91,20	91,20	91,20	0,48	0,64
1,4-dietilbenceno	10,20	10,20	10,20	10,20	0,02	0,02

Corriente	24	25	26	27	28	29
Temperatura (°C)	74,73	79,52	77,73	77,73	97,03	98,73
Presión (kPa)	110,00	110,00	110,00	110,00	110,00	110,00
Fracción molar vapor	0,00	1,00	0,00	1,00	0,00	1,00
Caudal molar (kmol/h)	277,06	4,41	0,09	4,32	308,73	35,99
Caudal másico (kg/h)	24676,18	268,80	8,05	260,75	27320,59	2905,16
Flujo molar componentes (kmol/h)						
Benceno	174,31	2,38	0,06	2,32	204,77	32,78
Etileno	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Etano	1,23	1,23	0,00	1,23	0,00	0,00
Propileno	0,62	0,62	0,00	0,62	0,00	0,00
Tolueno	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Etilbenceno	90,72	0,18	0,03	0,15	93,66	3,09
1,4-dietilbenceno	10,18	0,01	0,00	0,00	10,30	0,12

Corriente	30	31	33	34 (reciclo)	37	40
Temperatura (°C)	98,73	83,59	83,20	83,09	141,92	139,44
Presión (kPa)	110,00	110,00	110,00	105,00	110,00	110,00
Fracción molar vapor	0,00	1,00	1,00	1,00	0,00	1,00
Caudal molar (kmol/h)	272,73	242,21	171,74	171,74	101,00	90,64
Caudal másico (kg/h)	24415,43	18932,41	13417,21	13417,21	10998,22	9613,20
Flujo molar componentes (kmol/h)						
Benceno	171,99	241,76	171,65	171,65	0,34	0,34
Etileno	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Etano	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Propileno	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Tolueno	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Etilbenceno	90,57	0,45	0,09	0,09	90,48	90,30
1,4-dietilbenceno	10,18	0,00	0,00	0,00	10,18	0,00

Tabla 11. Propiedades y composición corrientes del proceso simulado en ProMax (corrientes 41-56)

Corriente	41 (Etilbenceno)	44	45	46	47	48
Temperatura (°C)	139,24	185,40	186,31	80,00	80,00	80,00
Presión (kPa)	100,00	110,00	2000,00	105,00	105,00	105,00
Fracción molar vapor	1,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Caudal molar (kmol/h)	90,64	10,36	10,36	171,73	41,53	130,20
Caudal másico (kg/h)	9613,20	1385,02	1385,02	13416,94	3244,85	10172,09
Flujo molar componentes (kmol/h)						
Benceno	0,34	0,00	0,00	171,64	41,51	130,13
Etileno	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Etano	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Propileno	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Tolueno	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Etilbenceno	90,30	0,18	0,18	0,09	0,02	0,07
1,4-dietilbenceno	0,00	10,18	10,18	0,00	0,00	0,00

Corriente	49	50	51	52	53	54
Temperatura (°C)	80,98	114,60	80,00	237,70	266,80	500,00
Presión (kPa)	2000,00	2000,00	105,00	2000,00	2000,00	2000,00
Fracción molar vapor	0,00	0,00	0,00	0,00	1,00	1,00
Caudal molar (kmol/h)	41,53	51,89	130,20	51,89	51,89	51,89
Caudal másico (kg/h)	3244,85	4630,12	10172,09	4630,12	4630,12	4630,12
Flujo molar componentes (kmol/h)						
Benceno	41,51	41,51	130,13	41,51	41,51	41,51
Etileno	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Etano	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Propileno	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Tolueno	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Etilbenceno	0,02	0,20	0,07	0,20	0,20	0,20
1,4-dietilbenceno	0,00	10,18	0,00	10,18	10,18	10,18

Corriente	55	56
Temperatura (°C)	501,34	501,34
Presión (kPa)	1988,00	1988,00
Fracción molar vapor	1,00	1,00
Caudal molar (kmol/h)	51,89	51,89
Caudal másico (kg/h)	4630,12	4630,13
Flujo molar componentes (kmol/h)		
Benceno	31,33	31,34
Etileno	0,00	0,00
Etano	0,00	0,00
Propileno	0,00	0,00
Tolueno	0,00	0,00
Etilbenceno	20,56	20,55
1,4-dietilbenceno	0,00	0,00

La corriente 41 es el etilbenceno producido por la planta diseñada, el caudal molar es de 90,3 kmol/h de etilbenceno, ligeramente superior al calculado en el apartado del balance de materia. Esto significa que, con los parámetros establecidos en la simulación de ProMax se cumplirá la capacidad anual de producción de etilbenceno fijada para la planta (80.000 T/año).

7. Estudio económico

En este apartado se va a estudiar la viabilidad económica de la planta de producción de etilbenceno. Para esto, será necesario realizar un estudio de la inversión inicial, los costes de materias primas, mano de obra y mantenimiento, costes de servicios, costes generales, costes de empresas auxiliares, impuestos y tasas, etc.

Este análisis de rentabilidad se realizará para la planta con una previsión de venta de la totalidad del etilbenceno producido (80.000 toneladas/año) y con una actividad de 16 años tras 2 años en fase de construcción.

Para realizar el estudio económico de los costes de la planta de producción de etilbenceno diseñada, se ha utilizado el valor de índice de CEPCI de marzo de 2021 (**CEPCI = 655,9**). El CEPCI se trata de un valor que permite ajustar los costes de construcción de plantas químicas de un tiempo a otro. Este índice va aumentando o disminuyendo con el tiempo dependiendo de los costes que supone en cada momento la construcción de una planta, dentro de estos costes contempla la mano de obra de construcción, terreno y edificios, ingeniería y supervisión.

7.1 Integración energética

La mayor desventaja del proceso elegido para la producción de etilbenceno, son las altas temperaturas necesarias para la reacción de alquilación y transalquilación. Esto supone un gasto energético elevado para calentar las corrientes frías y para enfriar las corrientes calientes a la salida de los reactores, en los que aumenta aún más la temperatura debido a que la reacción de alquilación de benceno es altamente exotérmica.

Para reducir este gasto energético, nos basaremos en el método “*Pinch*” de (Ray Sinott y Gavin Towler, 2020), cuyo objetivo es optimizar la recuperación energética en el proceso químico. Para esto, el análisis *pinch* indica de qué modo se pueden aprovechar las corrientes calientes y frías de la planta, para intercambiar calor entre ellas, minimizando así el uso de servicios de calentamiento o enfriamiento.

Para empezar con la integración energética, es necesario determinar las corrientes que deben calentarse o enfriarse en el proceso, para determinar en cada caso la corriente fría y la corriente caliente, estas corrientes están detalladas en la Tabla 12. Se determinará en cada caso, el calor intercambiado (Q) y las temperaturas de entrada (T_e) y de salida (T_s). A continuación, siguiendo la ecuación (9) se obtiene el producto del caudal másico por la capacidad calorífica (FCP), dividiendo el calor intercambiado en las corrientes entre la variación de temperaturas de entrada y salida. La ecuación (8) pertenece a la bibliografía de (Ian C Kemp, 2006).

$$Q = \int_{T_e}^{T_s} F C p dT = F C p (T_s - T_e) = \Delta H \quad (8)$$

$$F C p = \frac{Q}{\Delta T} \quad (9)$$

En la Tabla 12 se muestran las corrientes calientes y frías, caudales máscos y capacidades caloríficas. A estas temperaturas de suministro y temperaturas objetivo se les aplica un gradiente o incremento de temperatura mínimo (suele ser de 10 °C para el método *pinch*), con el fin de calcular las necesidades mínimas de energía para calentar o enfriar las corrientes.

Tabla 12. Datos corrientes frías y calientes del proceso simulado

Corriente	Intercambiador	Te (°C)	Ts (°C)	Q (kJ/h)	FCp (kJ/h°C)	FCp (kW/°C)	Q (MJ/h)	F (kg/h)	Cp (kJ/kg°C)
4 (fría)	XCHG-100	57.93	400	1.785E+07	5.217E+04	14.49	17845.83	18011.61	2.90
35 (fría)	K-101	140.31	141.92	8.203E+06	5.102E+06	1417.27	8203.36	34868.51	146.33
42 (fría)	K-102	182.28	185.40	7.876E+06	2.524E+06	701.18	7875.64	26508.45	95.22
50 (fría)	XCHG-107	114.60	237.70	1.345E+06	1.092E+04	3.03	1344.73	4630.12	2.36
52 (fría)	XCHG-108	237.70	266.80	1.372E+06	4.715E+04	13.10	1372.05	4630.12	10.18
53 (fría)	XCHG-109	266.80	500.00	2.550E+06	1.093E+04	3.04	2550.00	4630.12	2.36
11 (caliente)	XCHG-101	424.13	380.00	2.043E+06	4.631E+04	12.86	2043.37	19844.24	2.33
15 (caliente)	XCHG-102	432.81	380.00	2.615E+06	4.953E+04	13.76	2615.31	20831.04	2.38
18 (caliente)	XCHG-103	458.24	289.96	1.005E+07	5.972E+04	16.59	10048.68	25461.17	2.35
19 (caliente)	XCHG-104	289.96	170.00	1.343E+07	1.119E+05	31.09	13428.31	25461.17	4.40
20 (caliente)	XCHG-105	170	80.00	4.786E+06	5.317E+04	14.77	4785.62	25461.17	2.09
34 (caliente)	XCHG-106	83.09	80	5.370E+06	1.740E+06	483.36	5370.07	13416.95	129.70
31 (caliente)	VSSL-102	83.59	83.20	2.185E+06	5.556E+06	1543.32	2184.67	18932.29	293.46
38 (caliente)	VSSL-103	139.48	139.44	4.527E+06	1.210E+08	33622.97	4527.22	22897.73	5286.23

Para el análisis *pinch* del proceso se recomienda en la bibliografía de Ray (Sinott y Gavin Towler, 2020) la utilización del software HENSAD para el cálculo, sin embargo, este programa ha quedado desfasado y ya no se puede utilizar en los equipos actuales.

Por este motivo, se utilizará una herramienta en línea para el cálculo *pinch* diseñada por Jeffrey S. Umbach. Esta herramienta nos permite obtener los cálculos numéricos, pero tampoco podrá dibujar las gráficas debido a que también está desfasada y la versión php ya no es compatible con los equipos más actuales. Por tanto, para las gráficas se utilizarán los datos obtenidos en esta herramienta en línea y se representarán en Excel. También se hará uso de un programa basado en HENSAD programado con Python para obtener el diagrama en cascada y el diagrama de intervalos de temperatura. Se establece un incremento de temperatura mínimo (ΔT_{min}) de 10 °C para realizar el cálculo *pinch*. Los resultados obtenidos para el análisis *pinch* se exponen a continuación:

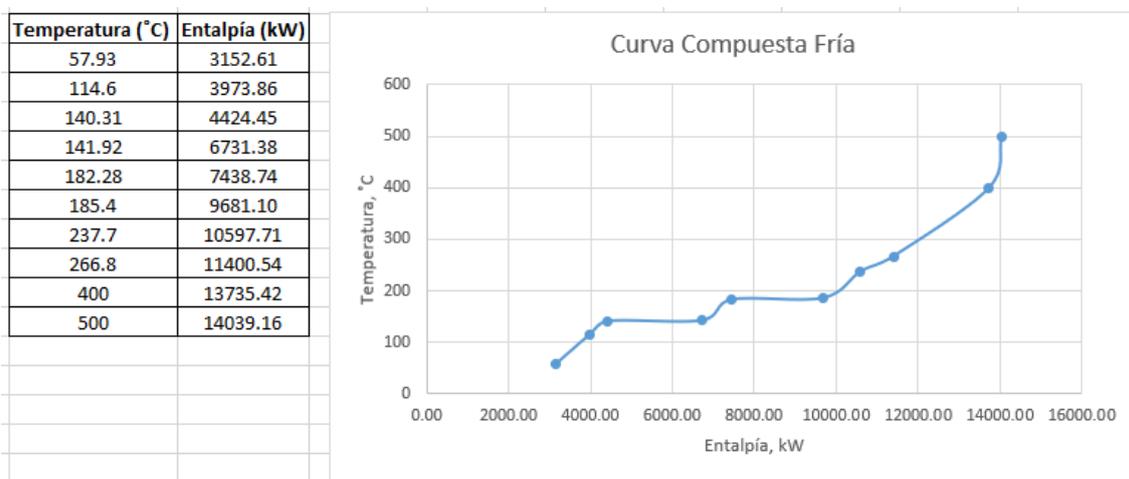


Figura 23. Datos y gráfica curva compuesta fría

Temperatura (°C)	Entalpía (kW)
80	0.00
83.09	1537.33
83.2	1538.96
83.59	2151.57
139.44	2976.50
139.48	4234.65
170	4685.44
289.96	8415.53
380	9909.05
424.13	11815.71
432.81	12079.10
458.24	12500.91

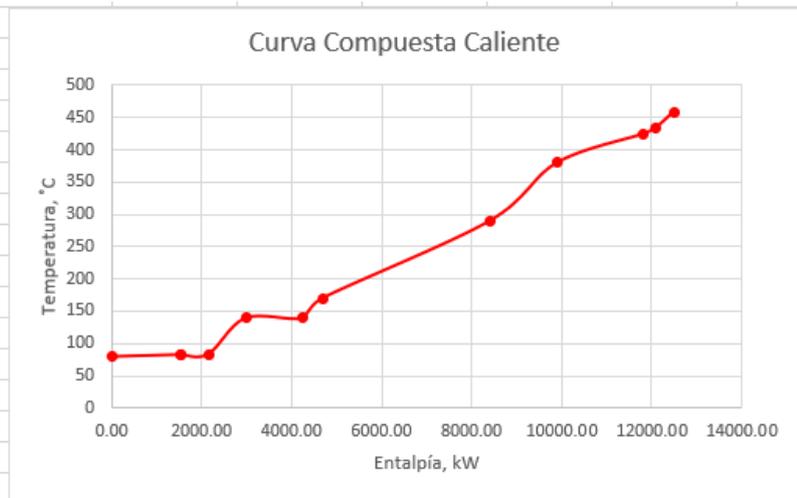


Figura 24. Datos y gráfica curva compuesta caliente

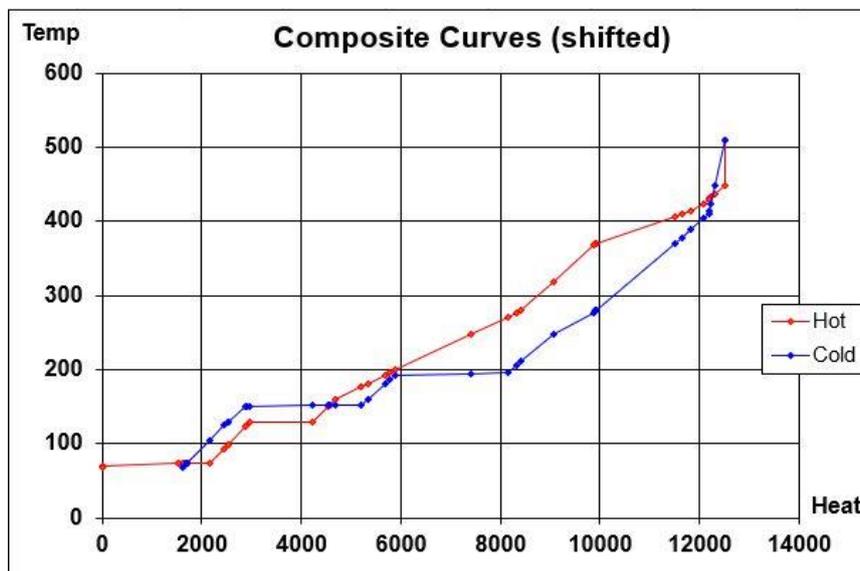


Figura 25. Curvas compuestas fría-caliente entrelazadas

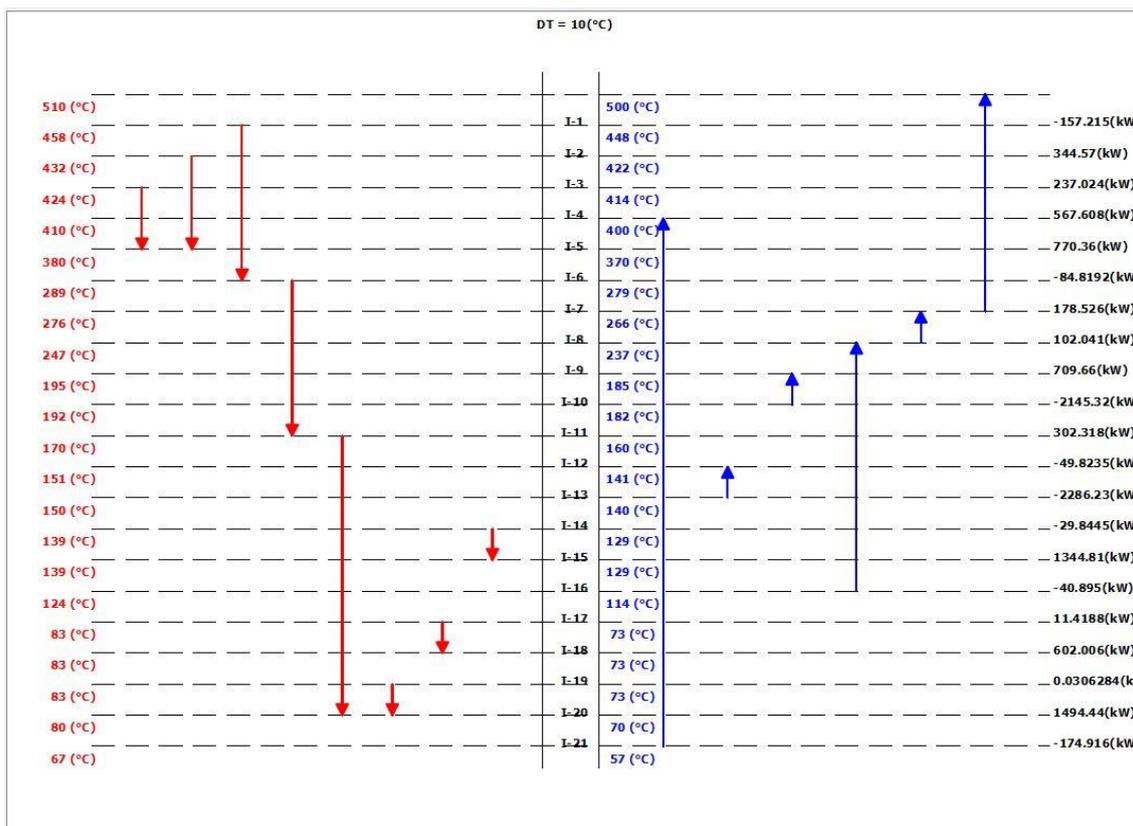


Figura 26. Diagrama de intervalo de temperatura

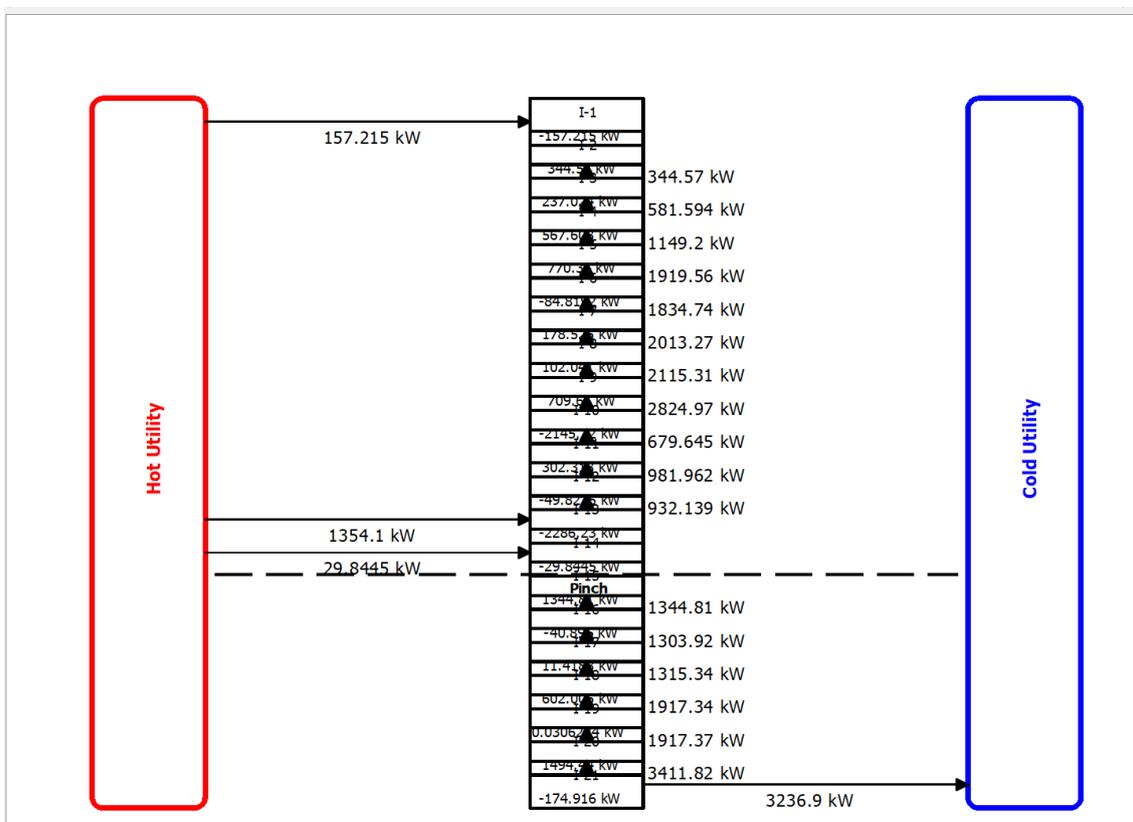


Figura 27. Diagrama de cascada

Como no se pueden apreciar correctamente los valores del diagrama de cascada, debido a que se trata de una herramienta alternativa a HENSAD programada por un usuario, se detalla a continuación en la Tabla 13 los valores de exceso de calor y calor acumulado.

Tabla 13. Tabla intervalos de temperatura-calor para el diagrama de cascada

Intervalo	Temperatura Inicial (°C)	Temperatura final (°C)	Exceso de Calor (kW)	Calor acumulado (kW)
I-1	510	458.24	-157.215	-157.215
I-2	458.24	432.81	344.570	187.355
I-3	432.81	424.13	237.024	424.379
I-4	424.13	410	567.608	991.987
I-5	410	380	770.360	1762.347
I-6	380	289.96	-84.819	1677.528
I-7	289.96	276.8	178.526	1856.054
I-8	276.8	247.7	102.041	1958.095
I-9	247.7	195.4	709.660	2667.755
I-10	195.4	192.28	-2145.320	522.435
I-11	192.28	170	302.318	824.753
I-12	170	151.92	-49.824	774.929
I-13	151.92	150.31	-2286.230	-1511.301
I-14	150.31	139.48	-29.845	-1541.145
I-15	139.48	139.44	1344.810	-196.335
I-16	139.44	124.6	-40.895	-237.230
I-17	124.6	83.59	11.419	-225.811
I-18	85.59	83.2	602.006	376.195
I-19	83.2	83.09	0.031	376.225
I-20	83.09	80	1494.440	1870.665
I-21	80	67.93	-174.916	1695.749

La temperatura *pinch* obtenida en el análisis es de 139,48 °C (punto de cruce Figura 25), esto significa que cuando una corriente se encuentra por encima del *pinch*, se aporta calor externo al proceso y, cuando su temperatura sea inferior a la de *pinch* se elimina el calor del proceso, de modo que se encuentre la estabilidad térmica en el sistema.

Las corrientes de salida de los reactores de alquilación tienen que ser enfriadas en los intercambiadores de calor para continuar en el proceso; para los servicios de enfriamiento se utiliza agua de alimentación de caldera o agua de refrigeración, que al estar en contacto con la corriente del proceso en el interior de los intercambiadores de calor va generando vapor de alta presión (VHP) y vapor de baja presión (VBP). Este vapor VHP y VBP puede ser utilizado para calentar la corriente que va al reactor de transalquilación, suponiendo así un ahorro en el coste de servicios.

También se puede utilizar la propia corriente caliente a la salida del último reactor de alquilación, se hace pasar por el intercambiador de calor de carcasas y tubos que se encuentra antes del reactor de transalquilación, para así ceder calor a la corriente fría.

Tabla 14. Corrientes por encima y debajo del punto pinch

Corrientes calientes por encima del pinch				
Corriente	Tmín. (°C)	Tmáx. (°C)	Q (kW)	FCp (kW/°C)
11	380.00	424.13	567.60	12.86
15	380.00	432.81	726.48	13.76
18	289.96	458.24	2791.30	16.59
19	170.00	289.96	3730.09	31.09
20a	139.48	170.00	450.79	14.77

Corrientes frías por encima del pinch				
Corriente	Tmín. (°C)	Tmáx. (°C)	Q (kW)	FCp (kW/°C)
4b	129.48	400.00	3920.29	14.49
35	140.31	141.92	2278.71	1415.35
42	182.28	185.40	2187.68	701.18
50b	129.48	237.70	328.39	3.03
52	237.70	266.80	381.12	13.10
53	266.80	500.00	708.33	3.04

Corrientes calientes por debajo del pinch				
Corriente	Tmín. (°C)	Tmáx. (°C)	Q (kW)	FCp (kW/°C)
20b	80.00	139.48	878.55	14.77
34	80.00	83.09	1491.69	482.75
31	83.20	83.59	606.85	1556.03
38	139.44	139.48	1257.56	31439.00

Corrientes frías por debajo del pinch				
Corriente	Tmín. (°C)	Tmáx. (°C)	Q (kW)	FCp (kW/°C)
4a	57.93	129.48	1036.88	14.49
50a	114.60	129.48	45.15	3.03

Finalmente, como se puede observar en la Tabla 15, obtenemos como resultados que el calor total necesario para calentar las corrientes frías es de 10.886,55 kW y el calor necesario para enfriar las corrientes calientes es de 12.500,91 kW. Como se puede apreciar en los datos de la tabla que aparece en la Figura 28, se puede utilizar un servicio frío de 67,93 °C para eliminar del proceso en condiciones ideales una cantidad de calor equivalente a 3152,61 kW, mientras que se podría usar un servicio caliente de 510 °C para producir en condiciones ideales un calentamiento equivalente a 1538,25 kW. Esto también se puede observar en la gráfica de la gran curva compuesta, primer y último punto (Figura 28).

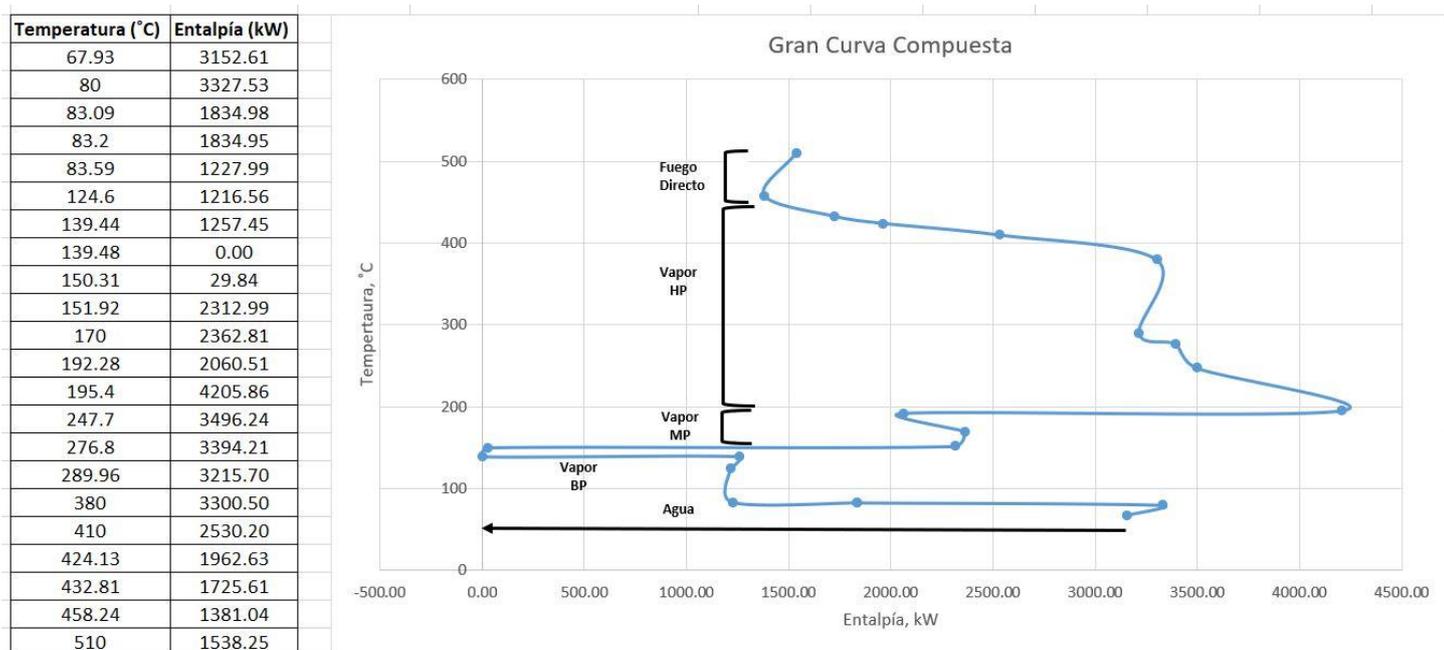


Figura 28. Gran curva compuesta y datos de entalpía

La gráfica de la gran curva compuesta nos permite definir las zonas de transferencia de calor entre las corrientes del proceso y si necesitaremos servicios fríos o calientes para controlar la temperatura de las corrientes. De esta gráfica extraemos que será necesario como servicio frío agua de refrigeración para las corrientes de salida de los reactores de alquilación que necesitan ser enfriadas. También se observa la generación de vapor de baja presión que podrá ser utilizado en la planta o ser vendido a empresas externas para obtener beneficio.

En cuanto a los servicios calientes, para alcanzar las temperaturas más elevadas se necesitará fuego directo bajas proporciones, vapor de alta presión entre 195,4 °C y 458, 24 °C y, por último, vapor de media presión para la sección de temperaturas de 139,48 °C a 192,28 °C.

El vapor de baja presión (BP) generado en el proceso, en el intervalo de temperaturas 139,44 °C y 139,48 °C, genera un calor equivalente a 1257,45 kW que podrá ser utilizado para servicios calientes en el proceso o para venta a empresas externas.

Tabla 15. Datos calor para corrientes frías y calientes

Corrientes	Tmin (°C)	Tmax (°C)	Q (kW)	FCp (kW/°C)
4 (fría)	57.93	400	4957.17	14.49
35 (fría)	140.31	141.92	2278.71	1415.35
42 (fría)	182.28	185.4	2187.68	701.18
50 (fría)	114.6	237.7	373.54	3.03
52 (fría)	237.7	266.8	381.12	13.10
53 (fría)	266.8	500	708.33	3.04
Calor total corrientes frías (kW)			10886.55	
Calor mínimo requerido (kW)			1538.25	
Corrientes	Tmin (°C)	Tmax (°C)	Q (kW)	FCp (kW/°C)
11 (caliente)	380	424.13	567.6	12.86
15 (caliente)	380	432.81	726.48	13.76
18 (caliente)	289.96	458.24	2791.3	16.59
19 (caliente)	170	289.96	3730.09	31.09
20 (caliente)	80	170	1329.34	14.77
34 (caliente)	80	83.09	1491.69	482.75
31 (caliente)	83.2	83.59	606.85	1556.03
38 (caliente)	139.44	139.48	1257.56	31439.00
Calor total corrientes calientes (kW)			12500.91	
Calor mínimo requerido (kW)			3152.61	

Tabla 16. Potencial de integración

Potencial de integración	
T (°C)	Q (kW)
510.00	0.00
448.24	-187.61
422.81	156.96
414.13	394.02
410.00	559.74
370.00	1586.90
279.96	1502.10
276.80	1544.94
247.70	1646.96
195.40	2356.60
192.28	211.26
160.00	649.25
151.92	626.98
150.31	-1656.16
129.48	-1713.58
129.44	-456.12
124.60	-469.46
73.59	-455.25
73.20	151.71
73.09	151.74
70.00	1644.28
67.93	1614.35

Tabla 17. Calor total y calor tras integración

Qtotal Caliente (kW)	10886.55
Qtotal frío (kW)	12500.91
Qtotal (kW)	23387.46
Q encima pinch (kW)	18070.78
Q debajo pinch (kW)	5316.68
Qtotal (kW)	23387.46
Qtotal integración (kW)	13527.86

La integración energética en este proceso de producción de etilbenceno supone un ahorro importante en el coste de servicio, pues el calor necesario para llevar a cabo el proceso pasará de ser 23.387,46 kW a ser 13.527,86 kW.

Este ahorro se consigue utilizando como combustible del calentador a fuego directo, el combustible de gases ligeros (propileno y etano) obtenido en el separador bifásico de la planta. También se utilizará el vapor de alta y baja presión generado en los enfriamientos posteriores a los reactores de alquilación para llevar a cabo el calentamiento de la corriente de entrada al reactor de alquilación. Esto supone un gran ahorro en el coste de servicios calientes. Además, las corrientes de salida de los reactores de alquilación pueden circular en contracorriente por los intercambiadores de calor anteriores al reactor de alquilación para producir un enfriamiento en las corrientes calientes y, un calentamiento en las corrientes frías.

Los costes en servicios pasarán de ser de 1.093.400 € a ser de 632.500 € anuales.

7.2 Costes de producción

Los costes de producción de una planta química se pueden dividir en 3 grandes categorías:

1. **Costes directos de fabricación:** estos costes representan gastos que varían con la tasa de producción. Cuando la demanda del producto cae, la tasa de producción se reduce con respecto a la capacidad de producción diseñada inicialmente para la planta. Con estas tasas más bajas de producción, una reducción de los factores que componen los costes directos de fabricación sería de esperar. Estas reducciones pueden ser directamente proporcionales a la tasa de producción, como es el caso de la materia prima utilizada, o pueden reducirse ligeramente los costes de mantenimiento o de mano de obra. En esta categoría encontramos los costes de materia prima, tratamiento de aguas, gasto energético, mano de obra, costes de mantenimiento, supervisión de la planta, análisis de laboratorio, patentes, etc.
2. **Costes fijos:** estos costes son independientes de los cambios en la tasa de producción. Entre ellos se incluye la depreciación, tasas e impuestos locales, seguros, gastos de empresas externas que apoyan a la planta, etc.; que son cobrados con tasas fijas independientemente de que la planta esté o no esté operando.
3. **Gastos generales:** estos costes representan una carga general que es necesario tener en cuenta para los intereses comerciales. En esta categoría se incluyen las funciones de gestión, ventas, financiación, marketing, investigación e innovación. Sin embargo, algunos de estos gastos pueden desaparecer, como es el caso de la investigación y desarrollo, cuando hay períodos prolongados de baja demanda.

La ecuación utilizada para evaluar el coste de producción que tiene en cuenta todos estos costes es la siguiente:

$$\text{Coste de Producción (COM)} = \text{Costes Directos (DMC)} + \text{Costes Fijos (FMC)} + \text{Gastos Generales (GE)}$$

Para calcular el coste de producción (COM), se tendrán que conocer previamente los siguientes costes:

1. Capital Fijo de Inversión (FCI) (C_{TM} o C_{GR})
2. Coste de mano de obra (C_{OL})
3. Coste de servicios (C_{UT})
4. Coste de tratamiento de residuos (C_{WT})
5. Coste materia prima (C_{RM})

Las ecuaciones para el cálculo de cada uno de los costes que componen el coste de producción son las siguientes:

$$DMC = C_{RM} + C_{WT} + C_{UT} + 1.33C_{OL} + 0.069FCI + 0.03COM \quad (10)$$

$$FMC = 0.708C_{OL} + 0.068FCI + \text{depreciación} \quad (11)$$

$$GE = 0.177C_{OL} + 0.009FCI + 0.16COM \quad (12)$$

El coste total de producción se puede obtener combinando estas tres ecuaciones y despejando el coste total de producción (COM). La ecuación obtenida es la siguiente:

$$COM = 0.280FCI + 2.73C_{OL} + 1.23(C_{UT}C_{WT}C_{RM}) \quad (13)$$

La ecuación (13) tiene en cuenta la depreciación; el coste de producción sin tener en cuenta la depreciación (COM_d) será el siguiente:

$$COM_d = 0.180FCI + 2.73C_{OL} + 1.23(C_{UT}C_{WT}C_{RM}) \quad (14)$$

Par el cálculo del capital fijo de inversión (FCI), se utilizará la estimación de *Grass Roots* (C_{GR}) que se utiliza en plantas nuevas que van a ser construidas. Este coste incluye costes de desarrollo de la distribución de planta, servicios de empresas auxiliares y demás factores necesarios para la construcción de una planta de producción química.

7.2.1 Capital Fijo de Inversión (FCI)

Este coste se basa en la inversión que suponen los equipos necesarios para el proceso de producción de etilbenceno de la planta diseñada. El estudio económico de los equipos se va a realizar mediante el uso de CAPCOST, que se trata de una herramienta en Excel para el cálculo de costes en procesos químicos recomendada en la bibliografía de (Turton *et al.*, 2018). A continuación, se expone un listado de tablas con las especificaciones de los equipos utilizados en el proceso.

El coste del calentador de fuego directo que se emplea para calentar la corriente de entrada de benceno se ha calculado a través de la herramienta en línea de estimación de costes de McGraw Hill, ya que CAPCOST generaba un error en el cálculo, así que ha tenido que ser implementado en el software de CAPCOST manualmente. A continuación, se expone un listado completo de los equipos utilizados en la planta de producción de etilbenceno y la estimación de los costes totales.

7.2.1.1 Listado de equipos

INTERCAMBIADORES DE CALOR

Los intercambiadores de calor utilizados en el proceso son de carcasa y tubos, a excepción de XCHG-100 que será un calentador a fuego directo.

Tabla 18. Especificaciones diseño intercambiadores de calor

	Intercambiadores de Calor			
	XCHG-101	XCHG-102	XCHG-103	XCHG-104
A (m²)	62,6	80,1	546	1567
Q (MJ/h)	2043,37	2615,31	10048,68	13428,31
Tipo	Cabezal flotante	Cabezal flotante	Cabezal flotante	Cabezal flotante
Material	Acero inox. 316	Acero inox. 316	Acero inox. 316	Acero al carbono
Pmáx. (kPa)	2200	2200	2200	2200
	XCHG-105	XCHG-106	K-101	VSSL-102
A (m²)	348	21,4	57,8	54,6
Q (MJ/h)	4785,62	5370,07	8203,35	2184,66
Tipo	Cabezal fijo	Cabezal flotante	Rehervidor	Cabezal flotante
Material	Acero al carbono	Acero al carbono	Acero al carbono	Acero al carbono
Pmáx. (kPa)	2200	200	200	200

	Intercambiadores de Calor			
	K-102	VSSL-103	XCHG-107	XCHG-108
A (m ²)	22,6	17,5	12,92	55,54
Q (MJ/h)	7875,64	4527,22	1344,73	1372,05
Tipo	Rehervidor	Cabezal flotante	Cabezal fijo	Cabezal fijo
Material	Acero al carbono	Acero al carbono	Acero inox. 316	Acero inox. 316
Pmáx. (kPa)	200	200	2200	2200
	Int. Calor		Calentador Fuego Directo	
	XCHG-109		XCHG-100	
A (m ²)	12,93	Eficiencia Térmica	75%	
Q (MJ/h)	2548,85	Q (MJ/h)	17845,83	
Tipo	Cabezal flotante	Qmáx. (MJ/h)	35000	
Material	Acero inox. 316	Material (tubos)	Acero inox. 316	
Pmáx. (kPa)	2200	Pmáx. (kPa)	2200	

COLUMNAS

Tabla 19. Especificaciones diseño columnas

Columnas de destilación	
DTWR-101	
Función	Columna de recuperación de benceno
Material	Acero al carbono
Número de platos	45 platos perforados de acero inox.
Eficiencia de los platos	42%
Alimento	Plato 19
Valor reflujo	0,3874
Espaciado entre platos (m)	0,61
Altura columna (m)	27,45
Diámetro (m)	1,7
Presión máxima (kPa)	300
DTWR-102	
Función	Columna de recuperación de etilbenceno
Material	Acero al carbono
Número de platos	76 platos perforados de acero inox.
Eficiencia de los platos	45%
Alimento	Plato 56
Valor reflujo	0,6608
Espaciado entre platos (m)	0,38
Altura columna (m)	28,96
Diámetro (m)	1,5
Presión máxima (kPa)	300

REACTORES

Tabla 20. Especificaciones diseño reactores

Alquilación	
REAC-100	
Tipo	Reactor de lecho empacado
Catalizador	Tamiz molecular ZSM-5
Material	Acero inoxidable 316
Volumen (m³)	20
Longitud (m)	11
Diámetro (m)	1,72
Presión máxima (kPa)	2200
Temperatura máxima (°C)	500
REAC-101	
Tipo	Reactor de lecho empacado
Catalizador	Tamiz molecular ZSM-5
Material	Acero inoxidable 316
Volumen (m³)	25
Longitud (m)	12
Diámetro (m)	1,85
Presión máxima (kPa)	2200
Temperatura máxima (°C)	500
REAC-102	
Tipo	Reactor de lecho empacado
Catalizador	Tamiz molecular ZSM-5
Material	Acero inoxidable 316
Volumen (m³)	30
Longitud (m)	12
Diámetro (m)	1,97
Presión máxima (kPa)	2200
Temperatura máxima (°C)	500
Transalquilación	
REAC-103	
Tipo	Reactor de lecho empacado
Catalizador	Tamiz molecular ZSM-5
Material	Acero inoxidable 316
Volumen (m³)	1,67
Longitud (m)	5
Diámetro (m)	0,95
Presión máxima (kPa)	2200
Temperatura máxima (°C)	525

SEPARADOR BIFÁSICO LÍQUIDO-VAPOR

El separador tendrá en su interior un desnebulizador de acero inoxidable, utilizado para separar las gotas de líquido más finas que pueda presentar la corriente de vapor que entra al separador mediante el fenómeno físico denominado coalescencia.

Tabla 21. Especificaciones diseño separador bifásico

	VSSL-100
Material	Acero al carbono
Orientación	Vertical
Volumen (m³)	10
L/D	3
Presión máxima (kPa)	250

IMPULSORES DE FLUIDO

Tabla 22. Especificaciones diseño impulsores de fluido

	PUMP-100
Tipo	Desplazamiento positivo
Eficiencia	75%
Potencia (kW)	15,1
Material	Acero al Carbono
	PUMP-101
Tipo	Centrífuga
Eficiencia	80%
Potencia (kW)	1,27
Material	Acero al Carbono
	PUMP-102
Tipo	Centrífuga
Eficiencia	75%
Potencia (kW)	2,8
Material	Acero al Carbono

DISEÑO Y ESTUDIO ECONÓMICO DE UN PROCESO DE PRODUCCIÓN DE ETILBENCENO UTILIZANDO PROMAX

Exchangers	Exchanger Type	Shell Pressure (barg)	Tube Pressure (barg)	MOC	Area (square meters)	Purchased Equipment Cost	Bare Module Cost	Base Equipment Cost	Base Bare Module Cost
XCHG-101	Floating Head	22	22	Stainless Steel / Stainless Steel	62.6	€ 104,600	€ 231,000	€ 35,400	€ 116,400
XCHG-102	Floating Head	22	22	Stainless Steel / Stainless Steel	80.1	€ 113,000	€ 251,000	€ 38,300	€ 126,000
XCHG-103	Floating Head	22	22	Stainless Steel / Stainless Steel	546	€ 379,000	€ 838,000	€ 128,000	€ 421,000
XCHG-104	Floating Head	22	22	Carbon Steel / Carbon Steel	1570	€ 390,000	€ 1,230,000	€ 360,000	€ 1,180,000
XCHG-105	Fixed, Sheet, or U-Tube	22	22	Carbon Steel / Carbon Steel	348	€ 73,000	€ 231,000	€ 67,300	€ 221,000
XCHG-106	Floating Head	2	2	Carbon Steel / Carbon Steel	21.4	€ 30,200	€ 99,500	€ 30,200	€ 99,500
K-101	Kettle Reboiler	2	2	Carbon Steel / Carbon Steel	57.8	€ 95,600	€ 315,000	€ 95,600	€ 315,000
VSSL-102	Floating Head	2	2	Carbon Steel / Carbon Steel	54.6	€ 34,100	€ 112,000	€ 34,100	€ 112,000
K-102	Kettle Reboiler	2	2	Carbon Steel / Carbon Steel	22.6	€ 49,300	€ 162,000	€ 49,300	€ 162,000
VSSL-103	Floating Head	2	2	Carbon Steel / Carbon Steel	17.5	€ 30,400	€ 100,000	€ 30,400	€ 100,000
XCHG-107	Fixed, Sheet, or U-Tube	22	22	Stainless Steel / Stainless Steel	12.9	€ 75,700	€ 167,000	€ 25,600	€ 84,100
XCHG-108	Fixed, Sheet, or U-Tube	22	22	Stainless Steel / Stainless Steel	55.5	€ 96,100	€ 212,000	€ 32,500	€ 107,000
XCHG-109	Floating Head	22	22	Stainless Steel / Stainless Steel	12.9	€ 92,800	€ 205,000	€ 31,400	€ 103,000

Heater	Type	Heat Duty (MJ/h)	Steam Superheat (°C)	MOC	Pressure (barg)	Purchased Equipment Cost	Bare Module Cost	Base Equipment Cost	Base Bare Module Cost
XCHG-100	Process Heater	17800	500	Stainless Steel	22	808,961.00 €	808,961.00 €	808,961.00 €	808,961.00 €

Pump	Type	Power (kilowatts)	# Spares	Discharge Pressure (barg)	MOC	Purchased Equipment Cost	Bare Module Cost	Base Equipment Cost	Base Bare Module Cost
PUMP-100	Positive Displacement	15.1	1	19	Carbon Steel	€ 37,000	€ 92,700	€ 22,700	€ 73,400
PUMP-101	Centrifugal	1.27	1	18.9	Carbon Steel	€ 16,400	€ 37,600	€ 8,230	€ 26,700
PUMP-102	Centrifugal	2.8	1	19	Carbon Steel	€ 18,300	€ 42,000	€ 9,180	€ 29,800

Reactors	Type	Volume (cubic meters)	Length (meters)	Diameter (meters)	MOC	Pressure (barg)	Purchased Equipment Cost	Bare Module Cost	Base Equipment Cost	Base Bare Module Cost
REAC-100	Jacketed Non-Agitated	20	11	1.7	Stainless Steel	20	32,597.00 €	130,388.00 €	32,597.00 €	130,388.00 €
REAC-101	Jacketed Non-Agitated	25	12	1.9	Stainless Steel	20	38,366.00 €	153,464.00 €	38,366.00 €	153,464.00 €
REAC-102	Jacketed Non-Agitated	30	12	2	Stainless Steel	20	43,833.00 €	175,332.00 €	43,833.00 €	175,332.00 €
REAC-103	Jacketed Non-Agitated	1.67	5	1	Stainless Steel	20	11,873.00 €	47,492.00 €	11,873.00 €	47,492.00 €

Towers	Tower Description	Height (meters)	Diameter (meters)	Tower MOC	Demister MOC	Pressure (barg)	Purchased Equipment Cost	Bare Module Cost	Base Equipment Cost	Base Bare Module Cost
DTWR-101	45 Stainless Steel Sieve Trays	27.5	1.7	Carbon Steel		3	€ 212,000	€ 432,000	€ 192,000	€ 418,000
DTWR-102	76 Stainless Steel Sieve Trays	29	1.5	Carbon Steel		3	€ 258,000	€ 467,000	€ 232,000	€ 423,000

Vessels	Orientation	Length/Height (meters)	Diameter (meters)	MOC	Demister MOC	Pressure (barg)	Purchased Equipment Cost	Bare Module Cost	Base Equipment Cost	Base Bare Module Cost
VSSL-100	Vertical	5.4	1.8	Carbon Steel	Stainless Steel	2.5	€ 34,200	€ 114,000	€ 28,200	€ 99,400

Totals						€ 3,075,330	€ 6,654,437	€ 2,386,040	€ 5,532,937
Total Module Cost						€ 7,850,000			
Total Grass Roots Cost						€ 10,620,000			
Total Equipment Cost						€ 3,075,330			
Lang Factor						4.74			
Lang Factor Cost						€ 14,600,000			

Figura 29. Coste de los equipos utilizados en la planta de producción de etilbenceno

7.2.2 Costes de mano de obra (C_{OL})

Para el coste de mano de obra, se tendrá que calcular previamente el número de operarios necesarios para la planta y, el salario que tendrá cada uno de ellos.

El número de operarios (N_{OL}) necesario por turno puede ser estimado mediante la ecuación de (Alkhayat y Gerrard, 1984), la cual se basa en el estudio de cinco grandes compañías químicas:

$$N_{OL} = (6.29 + 31.7P^2 + 0.23N_{np})^{0.5} \quad (15)$$

donde

N_{OL} es el número de operarios trabajando por turno.

P es el número de pasos que involucran el manejo de sólidos (transporte, control de tamaño de partículas, remoción de partículas, etc.)

N_{np} es el número de procesos de la planta que no supone el manejo de sólidos, incluyendo compresión, calentamiento, enfriamiento, mezcla, separación y reacción; pero sin contar las bombas y depósitos.

Ahora se número de operarios totales teniendo en cuenta los turnos por año (N_{Op}):

$$N_{Op} = N_{OL} \times \frac{\text{turnos por año}}{\text{turnos por operador}} \quad (16)$$

Finalmente se calcula el coste de mano de obra (C_{OL}) de la siguiente ecuación:

$$C_{OL} = N_{Op} \times \text{salario} \quad (17)$$

Se van a realizar 1044 turnos por año (348 días / 3 turnos al día), cada operario trabajará 294 turnos (6 turnos/semana durante 49 semanas/año) y el salario medio será de 3.100 € brutos mensuales.

Tabla 23. Cálculo del coste de mano de obra

N_{OL}	7
N_{Op}	24,8 \cong 25
Salario anual	37.200 €
C_{OL}	930.000€

7.2.3 Coste de servicios (C_{UT})

En esta categoría se tienen en cuenta los gastos de calefacción y enfriamiento de corrientes y los gastos energéticos reales de las bombas (kW reales).

En el apartado de eficiencia de las bombas en CAPCOST se ha fijado la eficiencia en 1, porque el valor de potencia introducido es el gasto real, es decir, ya está contemplada la eficiencia en ese valor.

Name	Total Module Cost	Grass Roots Cost	Utility Used	Efficiency	Actual Usage	Annual Utility Cost
XCHG-101	€ 225,601	€ 274,000	Cooling Water		2040 MJ/h	€ 6,400
XCHG-102	€ 296,000	€ 359,000	Cooling Water		2620 MJ/h	€ 8,300
XCHG-103	€ 988,000	€ 1,200,000	Cooling Water		10000 MJ/h	€ 31,700
XCHG-104	€ 1,457,000	€ 2,050,000	Cooling Water		13400 MJ/h	€ 42,000
XCHG-105	€ 270,000	€ 383,000	Refrigerated Water		4790 MJ/h	€ 190,700
XCHG-106	€ 117,000	€ 167,000	Cooling Water		5370 MJ/h	€ 17,000
K-101	€ 371,000	€ 529,000	Low-Pressure Steam		8200 MJ/h	€ 139,100
VSSL-102	€ 132,000	€ 188,000	Refrigerated Water		2190 MJ/h	€ 87,000
K-102	€ 192,000	€ 273,000	High-Pressure Steam		7880 MJ/h	€ 372,300
VSSL-103	€ 118,000	€ 168,000	Cooling Water		4530 MJ/h	€ 14,300
XCHG-107	€ 197,000	€ 239,000	Low Thermal Source		1340 MJ/h	€ 44,400
XCHG-108	€ 251,000	€ 304,000	Medium Thermal Source		1370 MJ/h	€ 45,300
XCHG-109	€ 242,000	€ 294,000	High Thermal Source		2550 MJ/h	€ 84,100
PUMP-100	€ 109,000	€ 146,000	Electricity	1	15.1 kilowatts	€ 8,500
PUMP-101	€ 44,400	€ 57,800	Electricity	1	1.27 kilowatts	€ 715
PUMP-102	€ 49,600	€ 64,000	Electricity	1	2.8 kilowatts	€ 1,580
Totals	\$ 5,100,000	\$ 6,700,000				\$ 1,093,400

Figura 30. Coste de servicios sin integración energética

No se incluye en los costes de servicios el calentador de fuego directo (XCHG-100) y, esto es debido a que utiliza como combustible el que se genera en el proceso (corriente 23a) que contiene propileno y etano.

7.2.4 Coste tratamiento de residuos (C_{WT})

En esta categoría se han asumido unos costes de 0 \$/y debido a que no se genera ninguna corriente de residuo en el proceso de producción de etilbenceno.

7.2.5 Coste materia prima (C_{RM})

El precio del benceno en Europa en Julio de 2021 es de 1070 \$/ton (1,07 \$/kg).

El precio del etileno en Julio de 2021 es de 164.49 USD/MT (como va en alza, se aproxima a 0,17 \$/kg).

El precio de venta de etilbenceno es de (1,33 \$/kg).

Se producen también gases ligeros, que son separados de la corriente en el separador bifásico (VSSL-100). Esta corriente de gas se utiliza como combustible en el calentador de fuego directo que se utiliza para calentar la corriente de alimento de benceno.

Material Name	Classification	Price (\$/kg)	Flowrate (kg/h)	Annual Cost
Benzene	Raw Material	\$ 1.07	7839.52	€ 70,058,968
Ethylene	Raw Material	\$ 0.17	2819.43	€ 4,003,139
Ethylbenzene	Product	\$ (1.33)	9613.49	€ (106,788,185)

Figura 31. Costes materia prima

Finalmente, se calcula el coste de producción teniendo en cuenta los costes calculados anteriormente:

Economic Options

Cost of Land	\$	10,000,000
Taxation Rate		45%
Annual Interest Rate		10%
Salvage Value	\$	1,062,000
Working Capital	\$	8,560,000
FCIL	\$	10,620,000
Total Module Factor		1.18
Grass Roots Factor		0.50

Economic Information Calculated From Given Information

Revenue From Sales	\$	106,788,185
C _{RM} (Raw Materials Costs)	\$	74,062,108
C _{UT} (Cost of Utilities)	\$	1,095,100
C _{WT} (Waste Treatment Costs)	\$	-
C _{OL} (Cost of Operating Labor)	\$	930,000

Factors Used in Calculation of Cost of Manufacturing (COM_d)

$$\text{Comd} = 0.18 \cdot \text{FCIL} + 2.76 \cdot \text{COL} + 1.23 \cdot (\text{CUT} + \text{CWT} + \text{CRM})$$

Multiplying factor for FCIL	0.18
Multiplying factor for C _{OL}	2.76
Facotrs for C _{UT} , C _{WT} , and C _{RM}	1.23
COM_d	\$ 96,921,765

Factors Used in Calculation of Working Capital

$$\text{Working Capital} = A \cdot \text{C}_{\text{RM}} + B \cdot \text{FCIL} + C \cdot \text{C}_{\text{OL}}$$

A	0.10
B	0.10
C	0.10

Project Life (Years after Startup)	16
------------------------------------	----

Construction period	2
---------------------	---

Distribution of Fixed Capital Investment (must sum to one)

End of year One	60%
End of year Two	40%
End of year Three	
End of year Four	
End of year Five	

Figura 32. Cálculo coste de producción sin depreciación

Economic Options

Cost of Land	\$	10,000,000
Taxation Rate		45%
Annual Interest Rate		10%
Salvage Value	\$	1,062,000
Working Capital	\$	8,560,000
FCIL	\$	10,620,000
Total Module Factor		1.18
Grass Roots Factor		0.50

Economic Information Calculated From Given Information

Revenue From Sales	\$	106,788,185
C _{RM} (Raw Materials Costs)	\$	74,062,108
C _{UT} (Cost of Utilities)	\$	1,093,400
C _{WT} (Waste Treatment Costs)	\$	-
C _{OL} (Cost of Operating Labor)	\$	930,000

Factors Used in Calculation of Cost of Manufacturing (COM_d)

$$\text{Comd} = 0.28 \cdot \text{FCIL} + 2.76 \cdot \text{COL} + 1.23 \cdot (\text{CUT} + \text{CWT} + \text{CRM})$$

Multiplying factor for FCIL	0.28
Multiplying factor for C _{OL}	2.76
Facotrs for C _{UT} , C _{WT} , and C _{RM}	1.23
COM_d	\$ 97,981,674

Factors Used in Calculation of Working Capital

$$\text{Working Capital} = A \cdot \text{C}_{\text{RM}} + B \cdot \text{FCIL} + C \cdot \text{C}_{\text{OL}}$$

A	0.10
B	0.10
C	0.10

Project Life (Years after Startup)	16
------------------------------------	----

Construction period	2
---------------------	---

Distribution of Fixed Capital Investment (must sum to one)

End of year One	60%
End of year Two	40%
End of year Three	
End of year Four	
End of year Five	

Figura 33. Cálculo coste de producción con depreciación

En la Figura 32 se encuentra calculado el coste de producción de la planta (COM_d) sin tener en cuenta la depreciación, mientras que a la derecha en la Figura 33 se haya el coste de producción de la planta (COM) teniendo en cuenta la depreciación.

7.3 Análisis de rentabilidad

El balance total del proceso diseñado será la suma de ingresos procedente de la venta del etilbenceno producido en la planta menos los costes de producción (COM). Para conocer la rentabilidad de la planta, se van a estudiar dos parámetros económicos, el VAN (Valor Actual Neto) y el TIR (Tasa Interna de Retorno). En el análisis de rentabilidad se va a asumir que el tiempo de construcción de la planta ha sido de 2 años y, el proyecto se va a estudiar hasta 16 años después de la construcción.

En la Figura 34 se puede apreciar la gráfica del flujo de caja de la planta. Los dos primeros años, la curva de beneficios es descendente debido a que es el período de construcción de la planta y no habrá beneficios, solamente se ven reflejadas las inversiones en el coste de terrenos, costes fijos en equipos, gastos generales, etc.

A partir del segundo año la pendiente de la gráfica cambia a ser ascendente debido a la rentabilidad de la planta, que genera más beneficios que gastos (VAN positivo). No ocurre hasta el décimo año la completa recuperación de la inversión en la planta, punto a partir del cual los beneficios serán netos. En la gráfica del flujo de caja están descontados del beneficio los impuestos y tasas, y los intereses anuales.

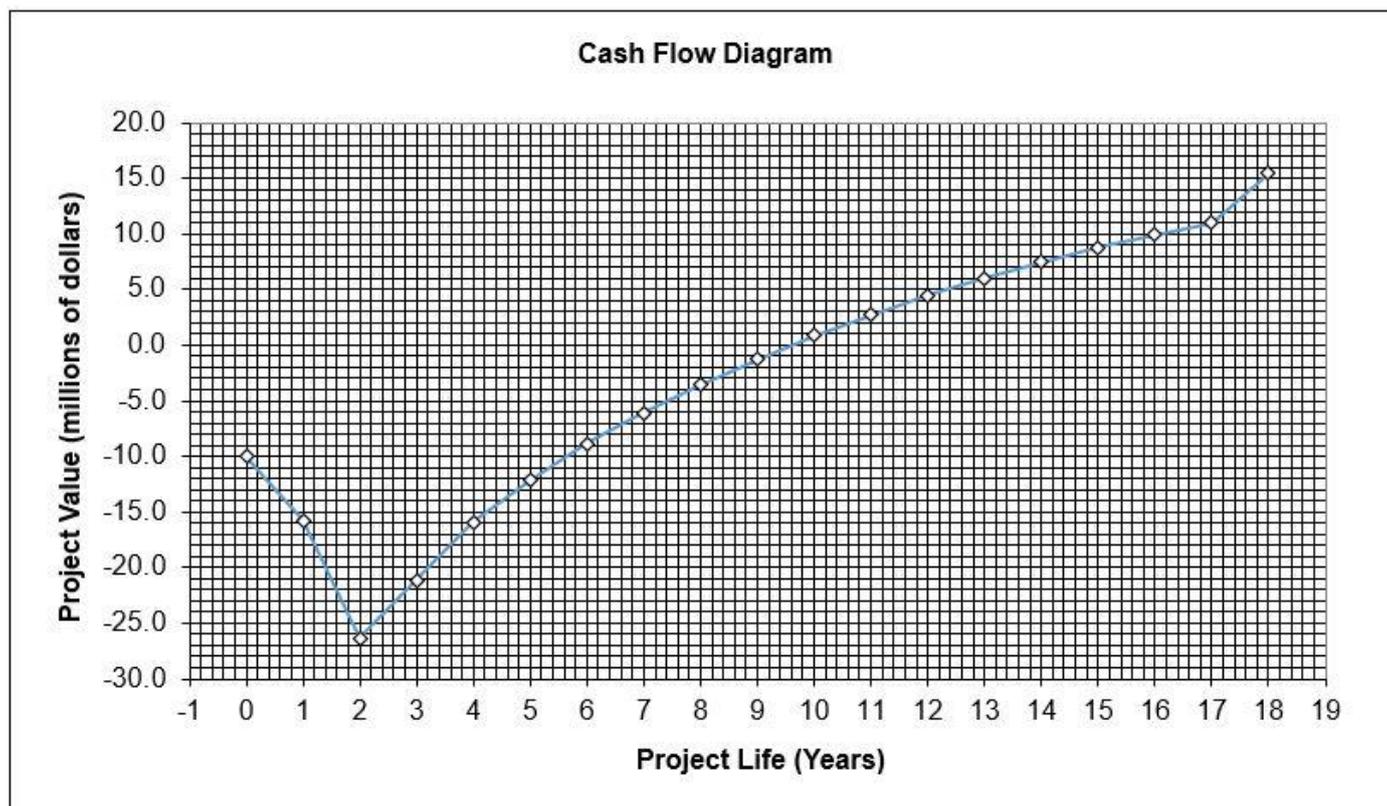


Figura 34. Diagrama flujo de caja descontado sin depreciación en los costes

En la Figura 35 se puede ver el análisis de rentabilidad de la planta, el cual incluye el flujo de caja considerando las tasas e impuestos del país. En la última fila, correspondiente al año 18 del proyecto, de la columna de flujo de caja descontado, encontramos el valor del VAN de nuestro proyecto (**VAN = 15,44 millones €**). Este valor consiste en el valor económico generado por la empresa tras 18 años desde el comienzo del proyecto. En este valor están descontados los impuestos y tasas y los intereses anuales, así que se trata del beneficio neto de la planta tras 18 años.

El valor de TIR obtenido es de 17,25% y el tiempo de retorno es de 9 años y 7 meses.

Discounted Profitability Criterion

Net Present Value (millions)	15.44
Discounted Cash Flow Rate of Return	17.25%
Discounted Payback Period (years)	1.8

Non-Discounted Profitability Criteria

Cumulative Cash Position (millions)	81.57
Rate of Return on Investment	48.00%
Payback Period (years)	1.5

Year	Investment	d_k	$FCI_L - Sd_k$	R	COM_d	$(R - COM_d - d_k) * (1 - t) + d_k$	Cash Flow (Non-discounted)	Cash Flow (discounted)	Cumulative Cash Flow (discounted)	Cumulative Cash Flow (Non-discounted)
0	10.00		10.62					(10.00)	(10.00)	(10.00)
1	6.37		10.62					(6.37)	(5.79)	(15.79)
2	12.81		10.62					(12.81)	(10.59)	(26.38)
3		3.54	7.08		106.79	96.92	7.02	7.02	5.27	(21.11)
4		4.73	2.36		106.79	96.92	7.55	7.55	5.16	(15.95)
5		1.57	0.79		106.79	96.92	6.13	6.13	3.81	(12.14)
6		0.79	-		106.79	96.92	5.78	5.78	3.26	(8.87)
7		-	-		106.79	96.92	5.43	5.43	2.78	(6.09)
8		-	-		106.79	96.92	5.43	5.43	2.53	(3.56)
9		-	-		106.79	96.92	5.43	5.43	2.30	(1.26)
10		-	-		106.79	96.92	5.43	5.43	2.09	0.83
11		-	-		106.79	96.92	5.43	5.43	1.90	2.74
12		-	-		106.79	96.92	5.43	5.43	1.73	4.47
13		-	-		106.79	96.92	5.43	5.43	1.57	6.04
14		-	-		106.79	96.92	5.43	5.43	1.43	7.47
15		-	-		106.79	96.92	5.43	5.43	1.30	8.77
16		-	-		106.79	96.92	5.43	5.43	1.18	9.95
17		-	-		106.79	96.92	5.43	5.43	1.07	11.02
18		-	-		106.79	96.92	6.01	24.57	4.42	15.44

Figura 35. Análisis rentabilidad sin depreciación en los costes

A continuación, en la Figura 36 se puede observar la gráfica del flujo de caja descontado del mismo proyecto, pero teniendo en cuenta la depreciación en el cálculo de los costes de producción (COM_d). El VAN obtenido para este escenario será de **11,67 millones de €** y el TIR del **15,58%**, como se puede apreciar en la Figura 37.

En este caso, no será hasta principios del doceavo año cuando se recuperarán los costes de inversión de la planta y los beneficios generados serán netos.

Cash Flow Diagram

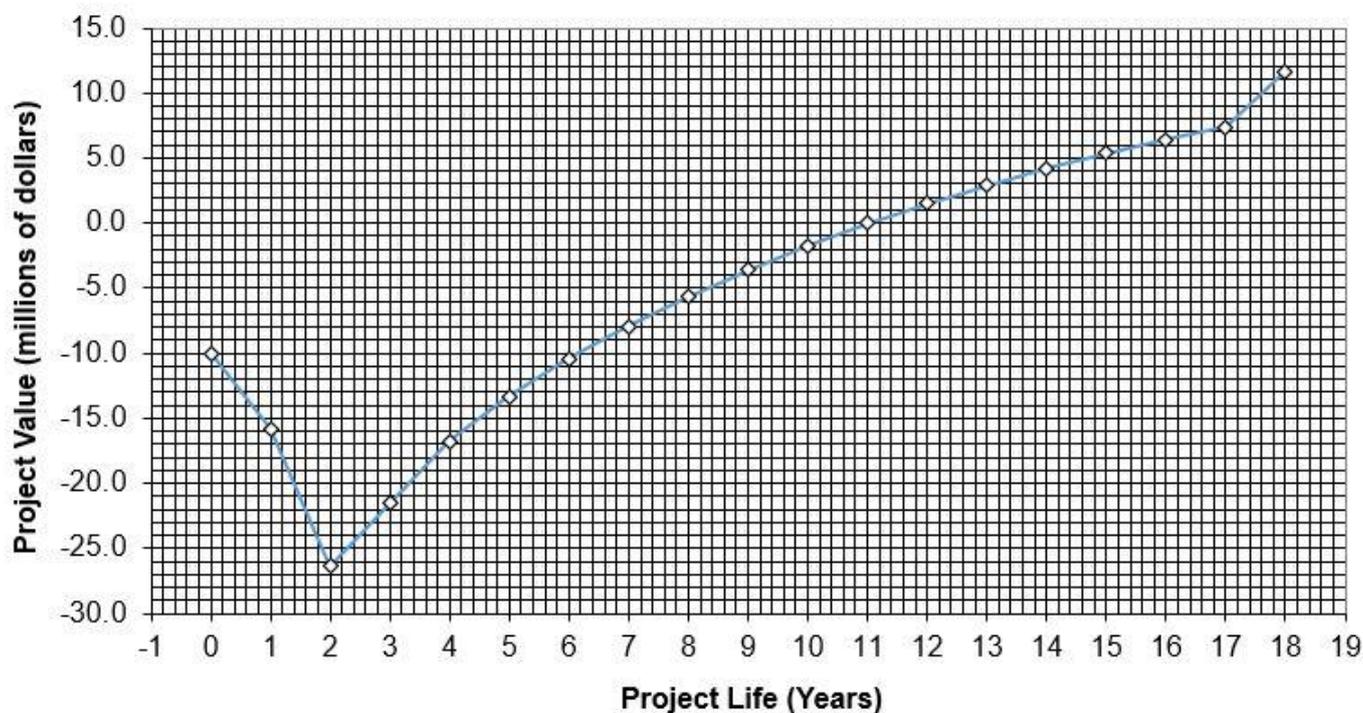


Figura 36. Diagrama flujo de caja descontado con depreciación en los costes

Discounted Profitability Criterion

Net Present Value (millions)	11.67
Discounted Cash Flow Rate of Return	15.58%
Discounted Payback Period (years)	1.9

Non-Discounted Profitability Criteria

Cumulative Cash Position (millions)	72.24
Rate of Return on Investment	42.51%
Payback Period (years)	1.6

Year	Investment	d_k	$FCL-Sd_k$	R	COM_d	$(R-COM_d-d_k)*(1-t)+d_k$	Cash Flow (Non-discounted)	Cash Flow (discounted)	Cumulative Cash Flow (discounted)	Cumulative Cash Flow (Non-discounted)
0	10.00		10.62				(10.00)	(10.00)	(10.00)	(10.00)
1	6.37		10.62				(6.37)	(5.79)	(15.79)	(16.37)
2	12.81		10.62				(12.81)	(10.59)	(26.38)	(29.18)
3		3.54	7.08	106.79	97.98	6.43	6.43	4.83	(21.54)	(22.75)
4		4.73	2.36	106.79	97.98	6.97	6.97	4.76	(16.78)	(15.77)
5		1.57	0.79	106.79	97.98	5.55	5.55	3.45	(13.34)	(10.22)
6		0.79	-	106.79	97.98	5.20	5.20	2.93	(10.40)	(5.03)
7		-	-	106.79	97.98	4.84	4.84	2.49	(7.92)	(0.18)
8		-	-	106.79	97.98	4.84	4.84	2.26	(5.66)	4.66
9		-	-	106.79	97.98	4.84	4.84	2.05	(3.60)	9.50
10		-	-	106.79	97.98	4.84	4.84	1.87	(1.74)	14.35
11		-	-	106.79	97.98	4.84	4.84	1.70	(0.04)	19.19
12		-	-	106.79	97.98	4.84	4.84	1.54	1.51	24.03
13		-	-	106.79	97.98	4.84	4.84	1.40	2.91	28.88
14		-	-	106.79	97.98	4.84	4.84	1.28	4.18	33.72
15		-	-	106.79	97.98	4.84	4.84	1.16	5.34	38.57
16		-	-	106.79	97.98	4.84	4.84	1.05	6.40	43.41
17		-	-	106.79	97.98	4.84	4.84	0.96	7.36	48.25
18		-	-	106.79	97.98	5.43	23.99	4.31	11.67	72.24

Figura 37. Análisis rentabilidad con depreciación en los costes

7.3.1 Análisis de rentabilidad tras integración energética

Finalmente, se ha realizado un estudio económico de la planta de producción de etilbenceno, teniendo en cuenta la integración energética del proceso en los costes de servicios.

Tras la integración energética se ha conseguido una disminución en los costes de servicios que han pasado de ser de 1.093.400 € anuales a ser de 632.500 € al año, como se puede ver en la Figura 38.

Los resultados obtenidos con la integración son los siguientes:

VAN = 13,69 millones de €

TIR = 16,48 %

El período de retorno se puede apreciar en la gráfica de la Figura 39, será de **10 años y 3 meses**, para conseguir una recuperación total de las inversiones y obtener beneficios netos.

Economic Options

Cost of Land	\$	10,000,000
Taxation Rate		45%
Annual Interest Rate		10%
Salvage Value	\$	1,062,000
Working Capital	\$	8,560,000
FCIL	\$	10,620,000
Total Module Factor		1.18
Grass Roots Factor		0.50

Economic Information Calculated From Given Information

Revenue From Sales	\$	106,788,185
C_{RM} (Raw Materials Costs)	\$	74,062,108
C_{UT} (Cost of Utilities)	\$	632,500
C_{WT} (Waste Treatment Costs)	\$	-
C_{OL} (Cost of Operating Labor)	\$	930,000

Factors Used in Calculation of Cost of Manufacturing (COM_d)

$$Comd = 0.28*FCIL + 2.76*COL + 1.23*(CUT + CWT + CRM)$$

Multiplying factor for FCIL	0.28
Multiplying factor for C_{OL}	2.76
Factors for C_{UT} , C_{WT} , and C_{RM}	1.23
COM_d	\$ 97,414,767

Factors Used in Calculation of Working Capital

$$\text{Working Capital} = A*C_{RM} + B*FCIL + C*C_{OL}$$

A	0.10
B	0.10
C	0.10

Project Life (Years after Startup)	16
------------------------------------	----

Construction period	2
---------------------	---

Distribution of Fixed Capital Investment (must sum to one)

End of year One	60%
End of year Two	40%
End of year Three	
End of year Four	
End of year Five	

Figura 38. Cálculo coste de producción con integración

Cash Flow Diagram

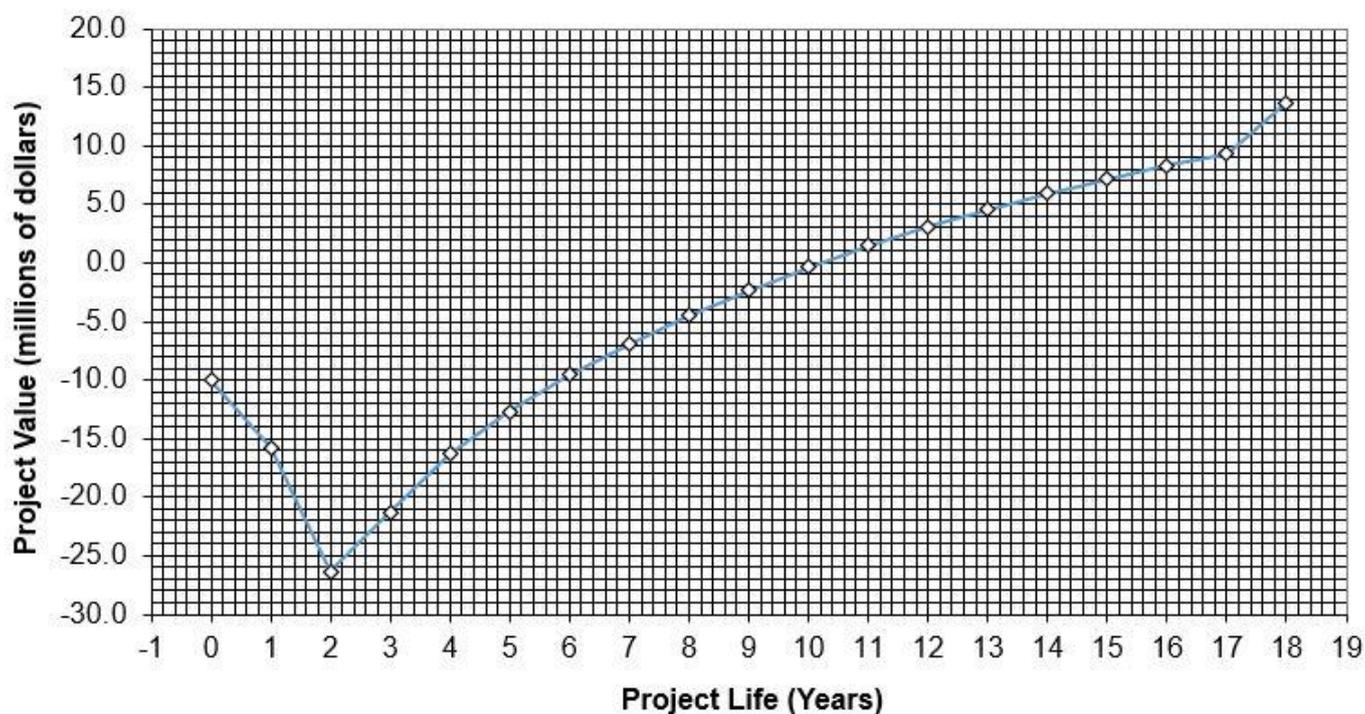


Figura 39. Diagrama flujo de caja descontado con integración energética

Discounted Profitability Criterion

Net Present Value (millions)	13.69
Discounted Cash Flow Rate of Return	16.48%
Discounted Payback Period (years)	1.9

Non-Discounted Profitability Criteria

Cumulative Cash Position (millions)	77.23
Rate of Return on Investment	45.45%
Payback Period (years)	1.5

Year	Investment	d_k	$FCI_t - Sd_k$	R	COM_d	$(R - COM_d - d_k) * (1 - t) + d_k$	Cash Flow (Non-discounted)	Cash Flow (discounted)	Cumulative Cash Flow (discounted)	Cumulative Cash Flow (Non-discounted)
0	10.00		10.62					(10.00)	(10.00)	(10.00)
1	6.37		10.62				(6.37)	(5.79)	(15.79)	(16.37)
2	12.81		10.62				(12.81)	(10.59)	(26.38)	(29.18)
3		3.54	7.08	106.79	97.41	6.75	6.75	5.07	(21.31)	(22.43)
4		4.73	2.36	106.79	97.41	7.28	7.28	4.97	(16.34)	(15.15)
5		1.57	0.79	106.79	97.41	5.86	5.86	3.64	(12.69)	(9.29)
6		0.79	-	106.79	97.41	5.51	5.51	3.11	(9.59)	(3.78)
7		-	-	106.79	97.41	5.16	5.16	2.65	(6.94)	1.38
8		-	-	106.79	97.41	5.16	5.16	2.41	(4.53)	6.53
9		-	-	106.79	97.41	5.16	5.16	2.19	(2.35)	11.69
10		-	-	106.79	97.41	5.16	5.16	1.99	(0.36)	16.84
11		-	-	106.79	97.41	5.16	5.16	1.81	1.45	22.00
12		-	-	106.79	97.41	5.16	5.16	1.64	3.09	27.15
13		-	-	106.79	97.41	5.16	5.16	1.49	4.58	32.31
14		-	-	106.79	97.41	5.16	5.16	1.36	5.94	37.46
15		-	-	106.79	97.41	5.16	5.16	1.23	7.17	42.62
16		-	-	106.79	97.41	5.16	5.16	1.12	8.30	47.77
17		-	-	106.79	97.41	5.16	5.16	1.02	9.32	52.93
18		-	-	106.79	97.41	5.74	24.30	4.37	13.69	77.23

Figura 40. Análisis rentabilidad con integración energética

8. Conclusiones

Para finalizar el trabajo, se podría concluir que, en la realización de éste se han trabajado diversas aptitudes y competencias aprendidas en el grado de Ingeniería Química y, se han ampliado algunas de ellas. La elaboración de este proyecto ha implicado:

- Estudio del etilbenceno: usos en la industria química, análisis de mercado, antecedentes, métodos de obtención, etc.
- Revisión bibliográfica para ampliar los conceptos sobre procesos de producción en la industria química, concretamente la alquilación del benceno con etileno para producir etilbenceno.
- Comparación y elección del mejor proceso de generación de etilbenceno.
- Diseño del proceso de producción de etilbenceno escogido, que consiste en la alquilación en fase vapor catalizado por zeolitas del tipo ZSM-5.
- Realización de balances de materia y cálculo de cinéticas de reacción para el proceso escogido con el objetivo de alcanzar la capacidad de producción fijada de 80.000 t anuales de etilbenceno.
- Simulación en ProMax del proceso diseñado.
- Estudio económico y estimación de los costes del proceso.
- Propuesta de integración energética para conseguir abaratar los costes de servicios y aumentar la rentabilidad de la planta.
- Análisis de la rentabilidad de la planta diseñada y cálculo de valores económicos, como el VAN y el TIR.

En definitiva, este trabajo cumple con el objetivo de aplicar los conocimientos y aptitudes adquiridos durante el grado de Ingeniería Química, a la vez que ampliarlos en ámbitos que no se habían estudiado anteriormente, más enfocados al mundo laboral y a la rentabilidad económica.

Bibliografía

- Alkhatat, W. A., and A. M. Gerrard, Estimating Manning Levels for Process Plants, AACE Transactions, I.2.1–I.2.4, 1984.
- Angerer, J., Gendel, J., Knecht, U. & Korn, M. (1994) Analyses of Hazardous Substances in Biological Materials, Vol. 4, New York, VCH Publishers, pp. 107–126.
- Čejka et al., 'Zeolites and Other Micro- and Mesoporous Molecular Sieves', *Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology*, 2010.
- Coty, R.R., Welch, V.A., Ram, S. & Singh, J. (1987) Ethylbenzene. In: Gerhartz, W., Yamamoto, Y.S., Kaudy, L., Rounsaville, J.F. & Schulz, G., eds, Ullmann's Encyclopedia of Chemical Technology, 5th rev. Ed., Vol. A10, New York, VCH Publishers, pp. 35–43.
- Heino Falcke, Simon Holbrook, Iain Clenahan, Alfredo López Carretero, Teoman Sanalan, Thomas Brinkmann, Joze Roth, Benoit Zerger, Serge Roudier, Luis Delgado Sancho; Best Available Techniques (BAT) Reference Document for the Production of Large Volume Organic Chemicals; EUR 28882 EN; Publications Office of the European Union, Luxembourg, 2017, ISBN 978-92-79-76589-6, doi:10.2760/77304, JRC109279
- IBRAR UL SAMAD, KHAWLA HASIBA, ASEEL AWADALLA, SARA MAHMOUD; Design of Ethylbenzene production process, 2020, <https://doi.org/10.37516/global.j.sci.eng.2020.117>
- KEMP, I.C., 2007. Pinch analysis and process integration: a user guide on process integration for the efficient use of energy. 2nd. ed. Amsterdam [etc.: Elsevier. ISBN 978-0-75068-260-2.
- LUYBEN, W.L., 2011. Principles and case studies of simultaneous design. Hoboken: John Wiley & Sons. ISBN 978-0-470-92708-3.
- PALČIĆ, A. y VALTCHEV, V., 2020. Analysis and control of acid sites in zeolites. *Applied catalysis. A, General*, vol. 606, pp. 117795-. ISSN 0926-860X. DOI 10.1016/j.apcata.2020.117795.
- Pedro G. Junqueira, Igor N. Caxiano, Patrick V. Mangili, Diego M. Prata, Environ-economic analysis of conceptual intensification alternatives applied to the ethylbenzene production, *Computers & Chemical Engineering*, Volume 136, 2020, 106783, ISSN 0098-1354, <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2020.106783>.
- Patent EP 1068898 B1, Process for the regeneration of zeolitic catalysts used in (trans)alkylation, 2004.
- Patent US 3848012 A, Alkylation process, 1974.
- Patent US 20080029437, Olefin upgrading process with guard bed regeneration, 2008.
- Patent W O9116285 A1, Turbulent flow process and monoalkyl aromatic production, 1991.
- Patent WO 2007081923 A2, Zeolitic transalkylation with aluminum chloride alkylation, 2007.
- Patent WO 2005042159 A1, Alkylation and catalyst regenerative process, 2015.
- Perego et al., 'Recent advances in the industrial alkylation of aromatics: new catalysts and new processes', *Catalysis Today*, Vol. 73, 2002, pp. 3-22.

PETERS, M.S., WEST, R.E. y TIMMERHAUS, K.D., 2003. Plant design and economics for chemical engineers. 5th ed. New York: McGraw-Hill. ISBN 9780072392661.

Reddy et al., 'Friedel-Crafts Reactions', *Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology*, 2013.

SINNOTT, R.K. y TOWLER, G.P., 2020. Chemical engineering design [electronic resource]. 6th ed. Oxford: Butterworth-Heinemann. ISBN 0-08-102600-5.

TURTON, R., SHAEIWITZ, J.A., BHATTACHARYYA, D. y WHITING, W.B., 2018. Analysis, synthesis, and design of chemical processes. Fifth edition. Boston: Prentice Hall. ISBN 9780134177502.

Ulyev, L.M.; Kanischev, M.V.; Chibisov, R.E.; Vasilyev, M.A. Heat Integration of an Industrial Unit for the Ethylbenzene Production. *Energies* 2021, 14, 3839.

<https://doi.org/10.3390/en14133839>

Vora et al., 'Alkylation', *Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology*, 2003.

Weimin Yang, Zhendong Wang, Hongmin Sun, Bin Zhang, Advances in development and industrial applications of ethylbenzene processes, *Chinese Journal of Catalysis*, Volume 37, Issue 1, 2016, Pages 16-26, ISSN 1872-2067, [https://doi.org/10.1016/S1872-2067\(15\)60965-2](https://doi.org/10.1016/S1872-2067(15)60965-2).

W. J. Cannella: Xylenes and Ethylbenzene, "Kirk Othmer Encyclopedia of Chemical Technology", 5th edition, John Wiley & Sons, Hoboken, NJ, online
DOI:10.1002/0471238961.2425120503011414.a01.pub2.

Welch, V.A., Fallon, K.J. and Gelbke, H.-P. (2005). Ethylbenzene. In Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry, (Ed.). https://doi.org/10.1002/14356007.a10_035.pub2

Yang et al., 'Review (Special Column on New Porous Catalytic Materials): Advances in development and industrial applications of ethylbenzene processes', *Chinese Journal of Catalysis*, Vol. 37, 2016, pp. 16-26.

Benzene price market analysis (2021, julio):

https://www.echemi.com/productsInformation/pid_Seven2868-benzene.html

Ethene price market analysis (2021, julio):

https://www.echemi.com/productsInformation/pid_Rock16565-ethene.html

McGraw Hill Online Cost Estimator:

<http://www.mhhe.com/engcs/chemical/peters/data/ce.html>

<https://www.formulacionquimica.com/areno-c8h10-2/>

<https://www.encyclopedia.com/science/academic-and-educational-journals/ethylbenzene>

Anexo I: Cálculo número de platos mínimo columnas

Para calcular el número mínimo de platos que necesita la columna de recuperación de benceno (DTWR-101), se tiene que calcular previamente la volatilidad relativa del benceno/etilbenceno siguiendo las siguientes ecuaciones:

$$P_{Bc} = X_{Bc} \times P_T = 0.694$$

$$P_{Eb} = X_{Eb} \times P_T = 0.3653$$

$$\alpha_{AB} = \frac{P_{Bc}}{P_{Eb}} = 1.90$$

$$N_{mín} = \frac{\ln \left[\frac{\left(\frac{X_A}{X_B}\right)_{dest.}}{\left(\frac{X_A}{X_B}\right)_{cola}} \right]}{\ln \alpha_{AB}}$$

En las especificaciones de la columna de recuperación de benceno se establece una recuperación del 99,9% del benceno en el vapor de destilado, que será el exceso de benceno que se recicla para ser utilizado nuevamente en los reactores de alquilación. Por el líquido de fondo, la fracción molar de benceno será de 0,001.

$$N_{mín.} = \frac{\ln \left[\frac{\left(\frac{0.999}{0.001}\right)_{dest.}}{\left(\frac{0.001}{0.999}\right)_{cola}} \right]}{\ln(1.9)} = 21,52 \text{ platos}$$

En la columna de recuperación de benceno obtenemos un resultado de número mínimo de platos de 21,52, que se redondea a 22 platos. No obstante esto, en las plantas de producción químicas se recomienda utilizar el doble de platos en las columnas al número de platos mínimos obtenido en su diseño. Según los resultados obtenidos, el número de platos para la columna sería de 44. Finalmente se ha establecido en 45 el número de platos, ya que en la bibliografía de (Turton *et al.*, 2018) se propone este número de platos para la columna de recuperación de benceno.

Para el cálculo del número de etapas mínimas de la columna de recuperación de etilbenceno (DTWR-102) se va a utilizar ProMax. Se van a probar distintas configuraciones de platos en la columna, hasta que se consiga cumplir la especificación de recuperación de etilbenceno de 99,8% en el vapor de destilado.

El número mínimo de platos obtenido en ProMax para esta columna es de 34 platos, como se puede apreciar en la Figura 41. Sin embargo, los valores de relación de reflujo y del rehervidor son inaceptables. Según la bibliografía de Turton *et al.*, 2018, la eficiencia de los platos para esta columna es del 45%, así que para calcular los platos de la columna de recuperación de etilbenceno habrá que dividir el número de platos mínimo obtenido en ProMax entre la eficiencia de los platos:

$$N_{platos} = \frac{N_{mín}}{eficiencia} = \frac{34}{0.45} = 75,55 \cong 76 \text{ platos}$$

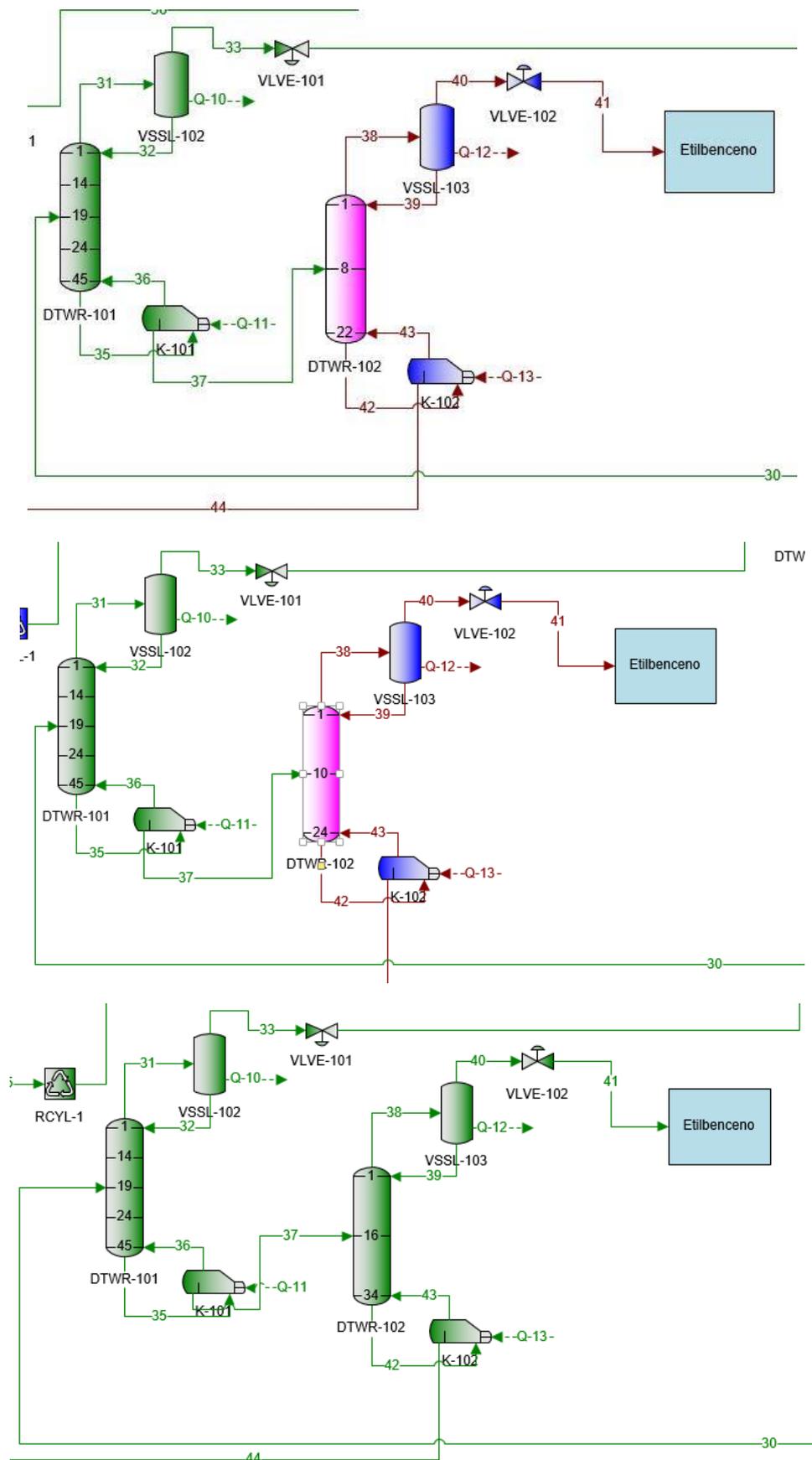


Figura 41. Cálculo platos mínimos DTWR-102 en ProMax.

Anexo II: Tabla caudales de servicios utilizados en los intercambiadores de calor

Tabla 24. Caudales de servicios

	Tipo de servicio	Caudal másico (kg/h)
XCHG-101	AAC	851
XCHG-102	AAC	1121
XCHG-103	AAC	4341
XCHG-104	AAC	5424
XCHG-105	AR	118300
K-101	VBP	4362
VSSL-102	AR	174100
K-102	VHP	3124
VSSL-103	AR	125900
XCHG-106	AR	3568
XCHG-107	VBP	2604.18
XCHG-108	VMP	11262.93
XCHG-109	VHP	2615.98

Agua de alimentación de caldera = **AAC**
 Agua de refrigeración = **AR**
 Vapor de baja presión = **VBP**
 Vapor de alta presión = **VHP**
 Vapor de media presión = **VMP**

Anexo III: Fichas de seguridad Química

Fichas Internacionales de Seguridad Química

BENCENO

ICSC: 0015



Ciclohexatrieno
Benzol
C₆H₆
Masa molecular: 78.1

Nº ICSC 0015
Nº CAS 71-43-2
Nº RTECS CY1400000
Nº NU 1114
Nº CE 601-020-00-8



TIPOS DE PELIGRO/ EXPOSICION	PELIGROS/ SINTOMAS AGUDOS	PREVENCION	PRIMEROS AUXILIOS/ LUCHA CONTRA INCENDIOS
INCENDIO	Altamente inflamable.	Evitar las llamas, NO producir chispas y NO fumar.	Polvo, AFFF, espuma, dióxido de carbono.
EXPLOSION	Las mezclas vapor/aire son explosivas. Riesgo de incendio y explosión: véanse Peligros Químicos.	Sistema cerrado, ventilación, equipo eléctrico y de alumbrado a prueba de explosión. NO utilizar aire comprimido para llenar, vaciar o manipular. Utilícese herramientas manuales no generadoras de chispas. Evitar la generación de cargas electrostáticas (por ejemplo, mediante conexión a tierra).	En caso de incendio: mantener fríos los bidones y demás instalaciones rociando con agua.
EXPOSICION		¡EVITAR TODO CONTACTO!	
• INHALACION	Vértigo. Somnolencia. Dolor de cabeza. Náuseas. Jadeo. Convulsiones. Pérdida del conocimiento.	Ventilación, extracción localizada o protección respiratoria.	Aire limpio, reposo. Proporcionar asistencia médica.
• PIEL	¡PUEDE ABSORBERSE! Piel seca. Enrojecimiento. Dolor. Para mayor información, véase Inhalación.	Guantes protectores. Traje de protección.	Quitar las ropas contaminadas. Aclarar la piel con agua abundante o ducharse. Proporcionar asistencia médica.
• OJOS	Enrojecimiento. Dolor.	Pantalla facial, o protección ocular combinada con la protección respiratoria.	Enjuagar con agua abundante durante varios minutos (quitar las lentes de contacto si puede hacerse con facilidad), después proporcionar asistencia médica.
• INGESTION	Dolor abdominal. Dolor de garganta. Vómitos. (Para mayor información, véase Inhalación).	No comer, ni beber, ni fumar durante el trabajo.	Enjuagar la boca. NO provocar el vómito. Proporcionar asistencia médica.
DERRAMES Y FUGAS		ALMACENAMIENTO	ENVASADO Y ETIQUETADO

<p>Eliminar toda fuente de ignición. 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. NO verterlo al alcantarillado. NO permitir que este producto químico se incorpore al ambiente. (Protección personal adicional: traje de protección completa incluyendo equipo autónomo de respiración).</p>	<p>A prueba de incendio. Separado de alimentos y piensos, oxidantes y halógenos.</p>	<p>NU (transporte): Ver pictograma en cabecera. No transportar con alimentos y piensos. Clasificación de Peligros NU: 3 Grupo de Envasado NU: II</p> <p>CE: Nota: E símbolo F símbolo T R: 45-11-48/23/24/25 S: 53-45</p> <div style="display: flex; justify-content: space-around;">   </div>
VEASE AL DORSO INFORMACION IMPORTANTE		
<p>ICSC: 0015 Preparada en el Contexto de Cooperación entre el IPCS y la Comisión Europea © CE, IPCS, 2003</p>		

Fichas Internacionales de Seguridad Química

BENCENO

ICSC: 0015

D A T O S I M P O R T A N T E S	<p>ESTADO FISICO: ASPECTO: Líquido incoloro, de olor característico.</p> <p>PELIGROS FISICOS: El vapor es más denso que el aire y puede extenderse a ras del suelo; posible ignición en punto distante. Como resultado del flujo, agitación, etc., se pueden generar cargas electrostáticas.</p> <p>PELIGROS QUIMICOS: Reacciona violentamente con oxidantes, ácido nítrico, ácido sulfúrico y halógenos,) originando peligro de incendio y explosión. Ataca plásticos y caucho.</p> <p>LIMITES DE EXPOSICION: TLV: 0.5 ppm como TWA; 2.5 ppm como STEL; (piel); A1; BEI disponible; (ACGIH 2003). MAK: H (absorción dérmica); Cancerígeno categoría: 1; Mutágeno categoría: 3A; (DFG 2003).</p>	<p>VIAS DE EXPOSICION: La sustancia se puede absorber por inhalación, a través de la piel y por ingestión.</p> <p>RIESGO DE INHALACION: Por evaporación de esta sustancia a 20°C se puede alcanzar muy rápidamente una concentración nociva en el aire.</p> <p>EFFECTOS DE EXPOSICION DE CORTA DURACION: La sustancia irrita los ojos, la piel y el tracto respiratorio. La ingestión del líquido puede dar lugar a la aspiración del mismo por los pulmones y la consiguiente neumonitis química. La sustancia puede causar efectos en sistema nervioso central, dando lugar a disminución del estado de alerta. La exposición muy por encima del valor límite de exposición profesional puede producir pérdida del conocimiento y muerte.</p> <p>EFFECTOS DE EXPOSICION PROLONGADA O REPETIDA: El líquido desengrasa la piel. La sustancia puede afectar a la médula ósea y al sistema inmune, dando lugar a una disminución de células sanguíneas. Esta sustancia es carcinógena para los seres humanos.</p>
PROPIEDADES FISICAS	<p>Punto de ebullición: 80°C Punto de fusión: 6°C Densidad relativa (agua = 1): 0.88 Solubilidad en agua, g/100 ml a 25°C: 0.18 Presión de vapor, kPa a 20°C: 10 Densidad relativa de vapor (aire = 1): 2.7</p>	<p>Densidad relativa de la mezcla vapor/aire a 20°C (aire = 1): 1.2 Punto de inflamación: -11°C c.c. Temperatura de autoignición: 498°C Límites de explosividad, % en volumen en el aire: 1.2-8.0 Coeficiente de reparto octanol/agua como log Pow: 2.13 Energía mínima de ignición: 0.2 mJ (no en la ficha)</p>
DATOS AMBIENTALES	<p>La sustancia es muy tóxica para los organismos acuáticos.</p>	
NOTAS		

Fichas Internacionales de Seguridad Química

ETILENO, PURO

ICSC: 0475

 <p style="text-align: center;">ETILENO, PURO Eteno (botella) C₂H₄ Masa molecular: 28.5</p> <p>Nº CAS 74-85-1 Nº RTECS KU5340000 Nº ICSC 0475 Nº NU 1962 Nº CE 601-010-00-3</p> 			
TIPOS DE PELIGRO/ EXPOSICION	PELIGROS/ SINTOMAS AGUDOS	PREVENCION	PRIMEROS AUXILIOS/ LUCHA CONTRA INCENDIOS
INCENDIO	Extremadamente inflamable.	Evitar llama abierta, NO producir chispas y NO fumar.	Cortar el suministro; si no es posible y no existe riesgo para el entorno próximo, deje que el incendio se extinga por sí mismo; en otros casos se apaga con pulverización con agua.
EXPLOSION	Las mezclas gas/aire son explosivas.	Sistema cerrado, ventilación, equipo eléctrico y de alumbrado a prueba de explosiones. Evitar la generación de cargas electrostáticas (por ejemplo, mediante conexión a tierra). Utilídense herramientas manuales no generadoras de chispa.	En caso de incendio: mantener fría la botella por pulverización con agua. Combatir el incendio desde un lugar protegido.
EXPOSICION			
• INHALACION	Vértigo, pérdida de conocimiento.	Ventilación.	Aire limpio, reposo, respiración artificial si estuviera indicado y someter a atención médica.
• PIEL			
• OJOS			
• INGESTION			
DERRAMAS Y FUGAS	ALMACENAMIENTO	ENVASADO Y ETIQUETADO	
Evacuar la zona de peligro. Ventilación. Eliminar las fuentes de ignición y cortar si es posible el aporte de gas en el foco. (Protección personal adicional: traje de protección química incluyendo equipo autónomo de respiración).	A prueba de incendio. Separado de oxidantes fuertes.	símbolo F+ R: 12-67 S: (2-)9-16-33-46 Clasificación de Peligros NU: 2.1 CE:	
VEASE AL DORSO INFORMACION IMPORTANTE			
ICSC: 0475		Preparada en el Contexto de Cooperación entre el IPCS y la Comisión de las Comunidades Europeas © CCE, IPCS, 2005	



Fichas Internacionales de Seguridad Química

ETILENO, PURO

ICSC: 0475

D A T O S I M P O R T A N T E S	ESTADO FÍSICO; ASPECTO Gas comprimido incoloro, de olor característico.	VIAS DE EXPOSICION La sustancia se puede absorber por inhalación.
	PELIGROS FÍSICOS El gas es más ligero que el aire. Como resultado del flujo de agitación, etc., se pueden generar cargas electrostáticas.	RIESGO DE INHALACION Al producirse pérdidas en zonas confinadas este gas puede originar asfixia por disminución del contenido de oxígeno del aire.
	PELIGROS QUÍMICOS La sustancia puede polimerizarse para formar compuestos aromáticos debido al calentamiento intenso por encima de 600°C. Reacciona con oxidantes fuertes originando riesgo de incendio y de explosión.	EFFECTOS DE EXPOSICION DE CORTA DURACION La exposición podría causar disminución de la consciencia.
	LIMITES DE EXPOSICION TLV: 200 ppm como TWA, A4 (ACGIH 2005) MAK: Carcinógeno: categoría 3B (DFG 2005).	EFFECTOS DE EXPOSICION PROLONGADA O REPETIDA
PROPIEDADES FÍSICAS	Punto de ebullición a 101.3 kPa: -104°C Punto de fusión: -169.2°C Solubilidad en agua: ninguna Presión de vapor, kPa a 15°C: 8100	Densidad relativa de vapor (aire = 1): 0.98 Punto de inflamación: gas inflamable Temperatura de autoignición: 490°C Límites de explosividad, % en volumen en el aire: 2.7-36.0
DATOS AMBIENTALES		
NOTAS		
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. Código NFPA: H 1; F 4; R 2		
INFORMACION ADICIONAL		
FISQ: 2-091 ETILENO, PURO	Los valores LEP pueden consultarse en línea en la siguiente dirección: http://www.insht.es/	
ICSC: 0475	© CCE, IPCS, 2005	ETILENO, PURO
NOTA LEGAL IMPORTANTE:	Ni la CCE ni la IPCS ni sus representantes son responsables del posible uso de esta información. Esta ficha contiene la opinión colectiva del Comité Internacional de Expertos del IPCS y es independiente de requisitos legales.	

© INSHT

Fichas Internacionales de Seguridad Química

TOLUENO

ICSC: 0078



TOLUENO
Metilbenceno
Fenilmetanol
Toluol
 $C_6H_5CH_3/C_7H_8$
Masa molecular: 92.1

Nº CAS 108-88-3
Nº RTECS XS5250000
Nº ICSC 0078
Nº NU 1294
Nº CE 601-021-00-3



TIPOS DE PELIGRO/ EXPOSICION	PELIGROS/ SINTOMAS AGUDOS	PREVENCION	PRIMEROS AUXILIOS/ LUCHA CONTRA INCENDIOS
INCENDIO	Altamente inflamable.	Evitar las llamas, NO producir chispas y NO fumar.	Polvo, AFFF, espuma, dióxido de carbono.
EXPLOSION	Las mezclas vapor/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). NO utilizar aire comprimido para llenar, vaciar o manipular.	En caso de incendio: mantener fríos los bidones y demás instalaciones rociando con agua.
EXPOSICION		¡HIGIENE ESTRICTA! ¡EVITAR LA EXPOSICION DE MUJERES (EMBARAZADAS)!	
• INHALACION	Vértigo, somnolencia, dolor de cabeza, náuseas, pérdida del conocimiento.	Ventilación, extracción localizada o protección respiratoria.	Aire limpio, reposo, respiración artificial si estuviera indicada y proporcionar asistencia médica.
• PIEL	Piel seca, enrojecimiento.	Guantes protectores.	Quitar las ropas contaminadas, aclarar y lavar la piel con agua y jabón y proporcionar asistencia médica.
• OJOS	Enrojecimiento, dolor.	Gafas ajustadas de seguridad o pantalla facial.	Enjuagar con agua abundante durante varios minutos (quitar las lentes de contacto si puede hacerse con facilidad) y proporcionar asistencia médica.
• INGESTION	Dolor abdominal, sensación de quemazón (para mayor información, véase Inhalación).	No comer, ni beber, ni fumar durante el trabajo.	Enjuagar la boca, dar a beber una papilla de carbón activado y agua, NO provocar el vómito y proporcionar asistencia médica.
DERRAMAS Y FUGAS		ALMACENAMIENTO	ENVASADO Y ETIQUETADO

<p>Recoger el líquido procedente de la fuga en recipientes precintables, absorber el líquido residual en arena o absorbente inerte y trasladarlo a un lugar seguro. NO verterlo al alcantarillado, (Protección personal adicional: equipo autónomo de respiración).</p>	<p>A prueba de incendio. Separado de oxidantes fuertes.</p>	<p>símbolo F símbolo Xn R: 11-20 S: (2-)16-25-29-33 Clasificación de Peligros NU: 3 Grupo de Envasado NU: II CE:</p>
 		
<p>VEASE AL DORSO INFORMACION IMPORTANTE</p>		
<p>ICSC: 0078</p>	<p>Preparada en el Contexto de Cooperación entre el IPCS y la Comisión de las Comunidades Europeas © CCE, IPCS, 1994</p>	

Fichas Internacionales de Seguridad Química

TOLUENO

ICSC: 0078

<p>D A T O S I M P O R T A N T E S</p>	<p>ESTADO FISICO; ASPECTO Líquido incoloro, de olor característico.</p> <p>PELIGROS FISICOS El vapor es más denso que el aire y puede extenderse a ras del suelo; posible ignición en punto distante. Como resultado del flujo, agitación, etc., se pueden generar cargas electrostáticas.</p> <p>PELIGROS QUIMICOS Reacciona violentamente con oxidantes fuertes, originando peligro de incendio y explosión.</p> <p>LIMITES DE EXPOSICION TLV (como TWA): 50 ppm; 188 mg/m³ (piel) (ACGIH 1995-1996). MAK: 50 ppm; 190 mg/m³ (1996).</p>	<p>VIAS DE EXPOSICION La sustancia se puede absorber por inhalación, a través de la piel y por ingestión.</p> <p>RIESGO DE INHALACION Por evaporación de esta sustancia a 20°C se puede alcanzar bastante rápidamente una concentración nociva en el aire.</p> <p>EFFECTOS DE EXPOSICION DE CORTA DURACION La sustancia irrita los ojos y el tracto respiratorio. La exposición podría causar depresión del sistema nervioso central. La exposición a altas concentraciones puede producir arritmia cardíaca, pérdida del conocimiento y muerte.</p> <p>EFFECTOS DE EXPOSICION PROLONGADA O REPETIDA El contacto prolongado o repetido con la piel puede producir dermatitis. La sustancia puede afectar al sistema nervioso central, dando lugar a desórdenes psicológicos y dificultad en el aprendizaje. La experimentación animal muestra que esta sustancia posiblemente cause efectos tóxicos en la reproducción humana.</p>
<p>PROPIEDADES FISICAS</p>	<p>Punto de ebullición: 111°C Punto de fusión: -95°C Densidad relativa (agua = 1): 0.87 Solubilidad en agua: Ninguna Presión de vapor, kPa a 20°C: 2.9 Densidad relativa de vapor (aire = 1): 3.2</p>	<p>Densidad relativa de la mezcla vapor/aire a 20°C (aire = 1): 1.06 Punto de inflamación: 4°C (c.c.) Temperatura de autoignición: 480°C Límites de explosividad, % en volumen en el aire: 1.1-7.1 Coeficiente de reparto octanol/agua como log Pow: 2.69</p>
<p>DATOS AMBIENTALES</p>		
<p>NOTAS</p>		
<p>Está indicado examen médico periódico dependiendo del grado de exposición.</p> <p style="text-align: right;">Ficha de emergencia de transporte (Transport Emergency Card): TEC (R)-31 Código NFPA: H 2; F 3; R 0;</p>		

Fichas Internacionales de Seguridad Química

ETANO		ICSC: 0266 Abril 2006	
CAS:	74-84-0	C ₂ H ₆ / CH ₃ CH ₃	
RTECS:	KH3800000	Masa molecular: 30,1	
NU:	1035		
CE Índice Anexo I:	601-002-00-X		
CE / EINECS:	200-814-8		
TIPO DE PELIGRO / EXPOSICIÓN	PELIGROS AGUDOS / SÍNTOMAS	PREVENCIÓN	PRIMEROS AUXILIOS / LUCHA CONTRA INCENDIOS
INCENDIO	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 agua pulverizada, polvo.
EXPLOSIÓN	Las mezclas gas/aire son explosivas.	Sistema cerrado, ventilación, equipo eléctrico y de alumbrado a prueba de explosión. Evitar la generación de cargas electrostáticas (p. ej. mediante conexión a tierra) si aparece en estado líquido. 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.
EXPOSICIÓN			
Inhalación	Asfixia. Ver Notas.	Ventilación, extracción localizada o protección respiratoria.	Aire limpio, reposo. Respiración artificial si estuviera indicada. Proporcionar asistencia médica.
Piel	EN CONTACTO CON LÍQUIDO: CONGELACIÓN.	Guantes aislantes del frío. Traje de protección.	EN CASO DE CONGELACIÓN: aclarar con agua abundante, NO quitar la ropa. Proporcionar asistencia médica.
Ojos	EN CONTACTO CON LÍQUIDO: CONGELACIÓN.	Pantalla facial.	Enjuagar con agua abundante durante varios minutos (quitar las lentes de contacto si puede hacerse con facilidad), después proporcionar asistencia médica.
Ingestión			
DERRAMES Y FUGAS		ENVASADO Y ETIQUETADO	
Protección personal: equipo autónomo de respiración. ¡Evacuar la zona de peligro! Consultar a un experto. Eliminar toda fuente de ignición. Ventilar. NO verter NUNCA chorros de agua sobre el líquido.		Clasificación UE Símbolo: F+ R: 12; S: (2-)9-16-33 Clasificación NU Clasificación de Peligros NU: 2.1 Clasificación GHS Peligro. Gas extremadamente inflamable. Contiene gas a presión; puede explotar si se calienta.	
RESPUESTA DE EMERGENCIA		ALMACENAMIENTO	
Ficha de Emergencia de Transporte (Transport Emergency Card): TEC (R)-20S1035. Código NFPA: H1; F4; R0;		A prueba de incendio. Mantener en lugar fresco. Separado de oxidantes fuertes y halógenos.	
IPCS 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			

Fichas Internacionales de Seguridad Química

ETANO		ICSC: 0266
DATOS IMPORTANTES		
<p>ESTADO FÍSICO; ASPECTO: Gas licuado comprimido incoloro, inodoro si es puro.</p> <p>PELIGROS FÍSICOS: El gas se mezcla bien con el aire, formándose fácilmente mezclas explosivas. Como resultado del flujo, agitación, etc., se pueden generar cargas electrostáticas.</p> <p>PELIGROS QUÍMICOS: Reacciona violentamente con halógenos y oxidantes fuertes, originando peligro de incendio y explosión.</p> <p>LÍMITES DE EXPOSICIÓN: TLV (como Hidrocarburos Alifáticos Alcanos (C1-C4), gases): 1000 ppm; (ACGIH 2006). MAK no establecido.</p>	<p>VÍAS DE EXPOSICIÓN: La sustancia se puede absorber por inhalación.</p> <p>RIESGO DE INHALACIÓN: Al producirse pérdidas en zonas confinadas, este líquido se evapora muy rápidamente originando una saturación total del aire con grave riesgo de asfixia.</p> <p>EFFECTOS DE EXPOSICIÓN DE CORTA DURACIÓN: La evaporación rápida del líquido puede producir congelación.</p>	
PROPIEDADES FÍSICAS		
<p>Punto de ebullición: -89°C Punto de fusión: -183°C Solubilidad en agua, ml/100 ml a 20°C: (muy pobre) Presión de vapor, kPa a 20°C: 3850 Densidad relativa de vapor (aire = 1): 1,05</p>	<p>Punto de inflamación: gas inflamable Temperatura de autoignición: 472°C Límites de explosividad, % en volumen en el aire: 3,0-12,5 Coeficiente de reparto octanol/agua como log Pow: 1,81</p>	
DATOS AMBIENTALES		
NOTAS		
<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. 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. Otro número NU: 1961 (líquido refrigerado), Clasificación de peligro: 2.1. Esta ficha ha sido parcialmente actualizada en Julio 2007: ver Límites de exposición y clasificación GHS.</p>		
INFORMACIÓN ADICIONAL		
<p>Límites de exposición profesional (INSHT 2011):</p> <p>VLA-ED: (como Hidrocarburos alifáticos alcanos (C₁-C₄) y sus mezclas, gases) 1000 ppm</p>		
Nota legal	<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 2006		

Fichas Internacionales de Seguridad Química

PROPILENO

ICSC: 0559



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



MINISTERIO DE TRABAJO Y ASUNTOS SOCIALES ESPAÑA
INSTITUTO NACIONAL DE SEGURIDAD E HIGIENE EN EL TRABAJO

TIPOS DE PELIGRO/ EXPOSICION	PELIGROS/ SINTOMAS AGUDOS	PREVENCION	PRIMEROS AUXILIOS/ LUCHA CONTRA INCENDIOS
INCENDIO	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.
EXPLOSION	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.
EXPOSICION			
• INHALACION	Somnolencia. Sofocación (Véanse Notas).	Ventilación.	Aire limpio, reposo. Respiración artificial si estuviera indicada. Proporcionar asistencia médica.
• PIEL	EN CONTACTO CON LÍQUIDO: CONGELACION.	Guantes aislantes del frío.	EN CASO DE CONGELACION: aclarar con agua abundante, NO quitar la ropa. Proporcionar asistencia médica.
• OJOS	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.
• INGESTION		No comer, ni beber, ni fumar durante el trabajo.	

DERRAMES Y FUGAS	ALMACENAMIENTO	ENVASADO Y ETIQUETADO

<p>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).</p>	<p>A prueba de incendio. Mantener en lugar fresco.</p>	<p>NU (transporte): Clasificación de Peligros NU: 2.1 CE: símbolo F+ R: 12 S: 2-9-16-33</p> 
<p>VEASE AL DORSO INFORMACION IMPORTANTE</p>		
<p>ICSC: 0559 Preparada en el Contexto de Cooperación entre el IPCS y la Comisión Europea © CE, IPCS, 2003</p>		

Fichas Internacionales de Seguridad Química

PROPILENO

ICSC: 0559

<p>D A T O S I M P O R T A N T E S</p>	<p>ESTADO FISICO; ASPECTO Gas licuado comprimido incoloro.</p> <p>PELIGROS FISICOS 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.</p> <p>PELIGROS QUIMICOS Reacciona violentamente con oxidantes originando peligro de incendio y explosión.</p> <p>LIMITES DE EXPOSICION TLV: A4 (ACGIH 2003) MAK no establecido.</p>	<p>VIAS DE EXPOSICION La sustancia se puede absorber por inhalación.</p> <p>RIESGO DE INHALACION Al producirse pérdidas en zonas confinadas este gas puede originar asfixia por disminución del contenido de oxígeno del aire.</p> <p>EFECTOS DE EXPOSICION DE CORTA DURACION La evaporación rápida del liquido puede producir congelación. La sustancia puede causar efectos en el sistema nervioso central. La exposición podría causar disminución de la consciencia. Véanse Notas.</p>
<p>PROPIEDADES FISICAS</p>	<p>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</p>	<p>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</p>
<p>DATOS AMBIENTALES</p>		
<p>NOTAS</p>		
<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. 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.</p> <p style="text-align: right;">Ficha de emergencia de transporte (Transport Emergency Card): TEC (R)-137. Código NFPA: H 1; F 4; R 1;</p>		

Fichas Internacionales de Seguridad Química

ETILBENCENO		ICSC: 0268 Noviembre 2007	
CAS:	100-41-4	Etilbenzol	    
RTECS:	DA0700000	Feniletano	
NU:	1175	EB	
CE Índice Anexo I:	601-023-00-4	C ₈ H ₁₀ /C ₈ H ₅ C ₂ H ₅	
CE / EINECS:	202-849-4	Masa molecular: 106,2	
TIPO DE PELIGRO / EXPOSICIÓN	PELIGROS AGUDOS / SÍNTOMAS	PREVENCIÓN	PRIMEROS AUXILIOS / LUCHA CONTRA INCENDIOS
INCENDIO	Altamente inflamable.	Evitar las llamas, NO producir chispas y NO fumar.	Polvo. Espuma. Dióxido de carbono.
EXPLOSIÓN	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.
EXPOSICIÓN		EVITAR LA FORMACIÓN DE NIEBLAS DEL PRODUCTO	
Inhalación	Tos. Dolor de garganta. Vértigo. Somnolencia. Dolor de cabeza.	Ventilación, extracción localizada o protección respiratoria.	Aire limpio, reposo. Proporcionar asistencia médica.
Piel	Enrojecimiento.	Guantes de protección.	Quitar las ropas contaminadas. Aclarar y lavar la piel con agua y jabón.
Ojos	Enrojecimiento. Dolor.	Gafas ajustadas de seguridad	Enjuagar con agua abundante durante varios minutos (quitar las lentes de contacto si puede hacerse con facilidad), después proporcionar asistencia médica.
Ingestión	Sensación de quemazón en la garganta y el pecho. (Ver Inhalación).	No comer, ni beber, ni fumar durante el trabajo.	Enjuagar la boca. NO provocar el vómito. Proporcionar asistencia médica.
DERRAMES Y FUGAS		ENVASADO Y ETIQUETADO	
Protección personal complementaria: filtro para gases y vapores orgánicos adaptado a la concentración de la sustancia en el aire. Ventilar. Recoger el líquido procedente de la fuga en recipientes tapados. Absorber el líquido residual en arena o absorbente inerte y trasladarlo a un lugar seguro. NO verterlo en el alcantarillado. NO permitir que este producto químico se incorpore al ambiente.		Clasificación UE Símbolo: F, Xn R: 11-20 S: (2-)16-24/25-29 Clasificación NU Clasificación de Peligros NU: 3 Grupo de Envasado NU: II Clasificación GHS Peligro Líquido y vapores muy inflamables. Puede ser nocivo en caso de ingestión. Nocivo si se inhala el vapor. Provoca una leve irritación ocular. Provoca irritación ocular. Susceptible de provocar cáncer. Puede provocar irritación respiratoria. Puede provocar somnolencia o vértigo. Puede ser nocivo en caso de ingestión y de penetración en la vías respiratorias. Tóxico para los organismos acuáticos.	
RESPUESTA DE EMERGENCIA		ALMACENAMIENTO	
Ficha de Emergencia de Transporte (Transport Emergency Card): TEC (R)-305 1135 o 30GF1- I+II Código NFPA: H2; F3; R0;		A prueba de incendio. Separado de oxidantes fuertes. Medidas para contener el efluente de extinción de incendios. Almacenar en un área sin acceso a desagües o alcantarillas.	
Preparada en el Contexto de Cooperación entre el IPCS y la Comisión Europea © CE, IPCS, 2008			
IPCS International Programme on Chemical Safety	  		 

Fichas Internacionales de Seguridad Química

ETILBENCENO		ICSC: 0268
DATOS IMPORTANTES		
<p>ESTADO FÍSICO; ASPECTO Líquido incoloro, de olor aromático.</p> <p>PELIGROS FÍSICOS El vapor se mezcla bien con el aire, formándose fácilmente mezclas explosivas.</p> <p>PELIGROS QUÍMICOS Reacciona con oxidantes fuertes. Ataca al plástico y al caucho.</p> <p>LÍMITES DE EXPOSICIÓN TLV: 100 ppm como TWA, 125 ppm como STEL; A3 (cancerígeno animal); BEI establecido; (ACGIH 2007). EU OEL: 442 mg/m³ 100 ppm como TWA; 884 mg/m³ 200 ppm como STEL; (piel); (EU 2006).</p>	<p>VÍAS DE EXPOSICIÓN La sustancia se puede absorber por inhalación del vapor y por ingestión.</p> <p>RIESGO DE INHALACIÓN Por evaporación de esta sustancia a 20°C se puede alcanzar bastante lentamente una concentración nociva en el aire.</p> <p>EFFECTOS DE EXPOSICIÓN DE CORTA DURACIÓN La sustancia irrita los ojos, la piel y el tracto respiratorio. La ingestión del líquido puede dar lugar a la aspiración del mismo por los pulmones y a la consiguiente neumonitis química. La sustancia puede afectar al sistema nervioso central. La exposición por encima del OEL podría causar disminución del estado de alerta.</p> <p>EFFECTOS DE EXPOSICIÓN PROLONGADA O REPETIDA Esta sustancia es posiblemente carcinógena para los seres humanos. La sustancia puede afectar al riñón y al hígado, dando lugar a alteraciones funcionales. El contacto repetido con la piel puede causar sequedad y grietas.</p>	
PROPIEDADES FÍSICAS		
<p>Punto de ebullición: 136°C Punto de fusión: -95°C Densidad relativa (agua = 1): 0,9 Solubilidad en agua, g/100 ml a 20°C: 0,015 Presión de vapor, kPa a 20°C: 0,9 Densidad relativa de vapor (aire = 1): 3,7</p>	<p>Densidad relativa de la mezcla vapor/aire a 20°C (aire = 1): 1,02 Punto de inflamación: 18°C c.c. Temperatura de autoignición: 432°C Límites de explosividad, % en volumen en el aire: 1,0-6,7 Coeficiente de reparto octanol/agua como log Pow: 3,1 Viscosidad, mm²/s a 25 °C: 0,6</p>	
DATOS AMBIENTALES		
La sustancia es tóxica para los organismos acuáticos. Evítese de forma efectiva que el producto químico se incorpore al ambiente.		
NOTAS		
La alerta por el olor cuando se supera el límite de exposición es insuficiente.		
INFORMACIÓN ADICIONAL		
<p>Límites de exposición profesional (INSHT 2011):</p> <p>VLA-ED: 100 ppm; 441 mg/m³</p> <p>VLA-EC: 200 ppm; 884 mg/m³</p> <p>Notas: vía dérmica</p> <p>VLB: 700 mg/g creatinina en orina de suma del ácido mandélico y el ácido fenilglicólico.</p>		
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.	
© IPCS, CE 2008		

Fichas Internacionales de Seguridad Química

DIETILBENCENO (Mezcla de isómeros)			ICSC: 0445 Noviembre 2010
CAS: RTECS: NU: CE / EINECS:	25340-17-4 GZ5600000 2049 246-874-9	$C_6H_4(C_2H_5)_2$ / $C_{10}H_{14}$ Masa molecular: 134.2	
TIPO DE PELIGRO / EXPOSICIÓN	PELIGROS AGUDOS / SÍNTOMAS	PREVENCIÓN	PRIMEROS AUXILIOS / LUCHA CONTRA INCENDIOS
INCENDIO	Inflamable.	Evitar las llamas, NO producir chispas y NO fumar. NO poner en contacto con superficies calientes.	Espuma, agua pulverizada, polvo o dióxido de carbono.
EXPLOSIÓN	Por encima de 56°C pueden formarse mezclas explosivas vapor/aire.	Por encima de 56°C, sistema cerrado, ventilación y equipo eléctrico a prueba de explosión. Evitar la generación de cargas electrostáticas (p. ej., mediante conexión a tierra).	En caso de incendio: mantener fríos los bidones y demás instalaciones rociando con agua.
EXPOSICIÓN			
Inhalación	Tos. Vértigo. Dolor de cabeza. Somnolencia.	Extracción localizada o protección respiratoria.	Aire limpio y reposo. Proporcionar asistencia médica.
Piel	Enrojecimiento. Dolor.	Guantes de protección.	Quitar las ropas contaminadas. Aclarar la piel con agua abundante o ducharse.
Ojos	Enrojecimiento. Dolor.	Gafas de protección de seguridad o protección ocular combinada con protección respiratoria.	Enjuagar con agua abundante durante varios minutos (quitar las lentes de contacto si puede hacerse con facilidad), después proporcionar asistencia médica.
Ingestión	Náuseas. Vómitos. Diarrea. Descoordinación. (Ver Inhalación).	No comer, ni beber, ni fumar durante el trabajo.	Enjuagar la boca. NO provocar el vómito. Dar a beber uno o dos vasos de agua. Proporcionar asistencia médica.
DERRAMES Y FUGAS		ENVASADO Y ETIQUETADO	
Protección personal: filtro para gases y vapores orgánicos adaptado a la concentración de la sustancia en el aire. 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.		Clasificación NU Clasificación de Peligros NU: 3 Grupo de Envasado NU: III Clasificación GHS Atención Líquidos y vapores inflamables. Nocivo si se inhala. Puede ser nocivo en caso de ingestión. Puede ser nocivo en contacto con la piel. Muy tóxico para los organismos acuáticos.	
RESPUESTA DE EMERGENCIA		ALMACENAMIENTO	
		Separado de oxidantes fuertes. Almacenar en un área sin acceso a desagües o alcantarillas.	
Preparada en el Contexto de Cooperación entre el IPCS y la Comisión Europea © CE, IPCS, 2011			
 IPCS International Programme on Chemical Safety	 WHO	 ILO	 UNEP
	 MINISTERIO DE TRABAJO E INMIGRACION	 INSTITUTO NACIONAL DE SEGURIDAD E HIGIENE EN EL TRABAJO	

VÉASE INFORMACIÓN IMPORTANTE AL DORSO

Fichas Internacionales de Seguridad Química

DIETILBENCENO (Mezcla de isómeros)		ICSC: 0445
DATOS IMPORTANTES		
<p>ESTADO FÍSICO; ASPECTO Líquido incoloro, de olor característico.</p> <p>PELIGROS FÍSICOS Como resultado del flujo, agitación, etc., se pueden generar cargas electrostáticas.</p> <p>PELIGROS QUÍMICOS La sustancia se descompone al arder, produciendo humos tóxicos y corrosivos, incluyendo monóxido de carbono y formaldehído. Reacciona con oxidantes.</p> <p>LÍMITES DE EXPOSICIÓN TLV no establecido. MAK no establecido.</p>	<p>VÍAS DE EXPOSICIÓN La sustancia se puede absorber por inhalación del vapor y por inhalación del aerosol y por ingestión.</p> <p>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.</p> <p>EFFECTOS DE EXPOSICIÓN DE CORTA DURACIÓN La sustancia irrita los ojos y la piel. La sustancia puede afectar al sistema nervioso central.</p> <p>EFFECTOS DE EXPOSICIÓN PROLONGADA O REPETIDA La sustancia puede afectar al hígado y a los riñones. (Ver Notas).</p>	
PROPIEDADES FÍSICAS		
<p>Punto de ebullición: 180-182°C Punto de fusión: -75°C Densidad relativa (agua = 1): 0.86 Solubilidad en agua: ninguna Presión de vapor, kPa a 20°C: 0.13 Densidad relativa de vapor (aire = 1): 4.6</p>	<p>Densidad relativa de la mezcla vapor/aire a 20°C (aire = 1): 1.0 Punto de inflamación: 56°C c.c. Temperatura de autoignición: 395°C Coeficiente de reparto octanol/agua como log Pow: 4-4.6 (estimado)</p>	
DATOS AMBIENTALES		
La sustancia es muy tóxica para los organismos acuáticos. Se aconseja firmemente impedir que el producto químico se incorpore al ambiente.		
NOTAS		
El Dietilbenceno (DEB) está comercialmente disponible sólo como una mezcla de isómeros: 1,2 DEB (CAS 135-01-3), 1,3 DEB (CAS 141-93-5) y 1,4 DEB (CAS 105-05-5), con una pureza mayor del 92,3% (v/v). La distribución de isómeros es: 1,3 DEB (60-65%), 1,4 DEB (27-30%) y 1,2 DEB (4-5%). Las propiedades físico-químicas pueden variar en función de la composición química. Las medidas preventivas para los componentes individuales pueden ser diferentes a la mezcla de isómeros. Sólo se han registrado efectos sobre los riñones y el hígado para el 1,4 DEB.		
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.	
© IPCS, CE 2011		