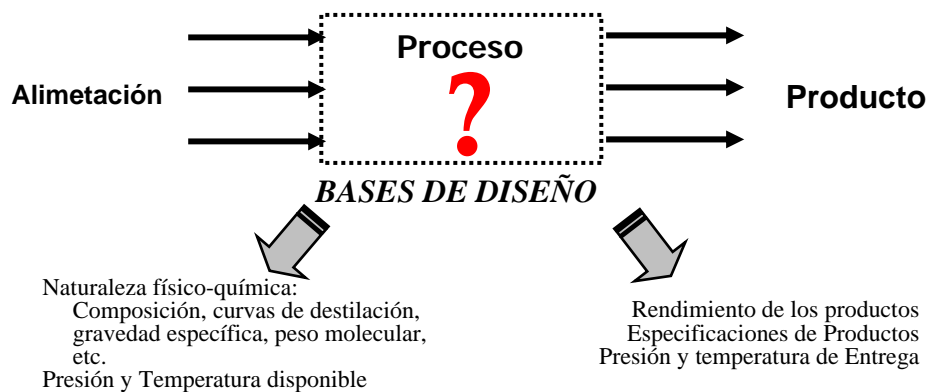


|||| Síntesis de Procesos Químicos.

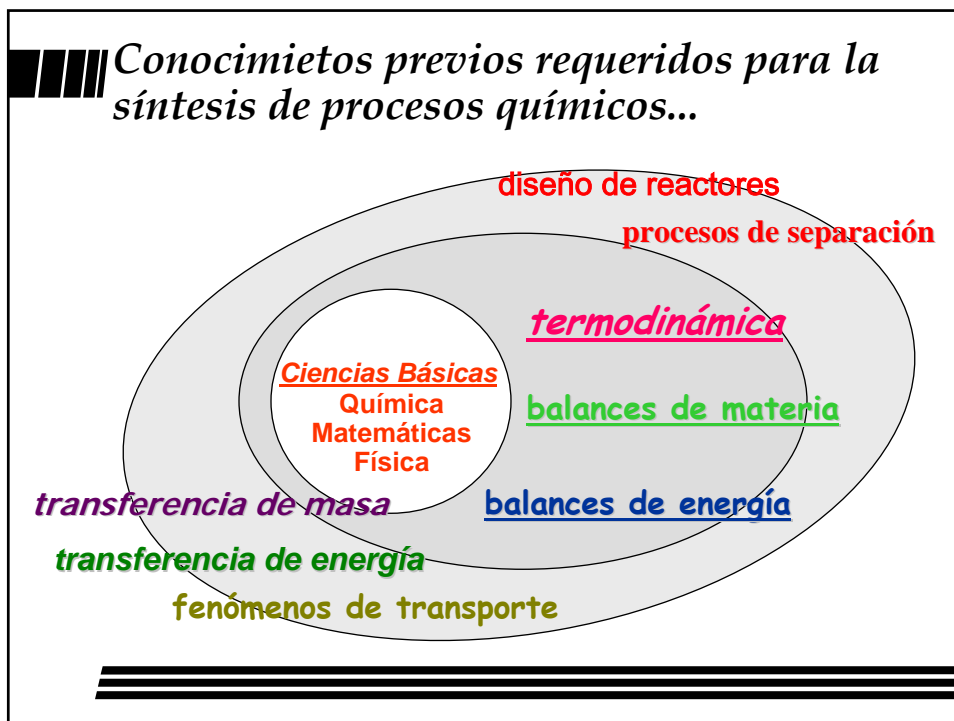
*La **SÍNTESIS** de PROCESOS QUÍMICOS es la combinación de elementos separados para la integración en un todo coherente*

*El **ANÁLISIS** de PROCESOS QUÍMICOS es la separación de un todo coherente en sus elementos para su estudio individual*

|||| *Un proceso químico es mucho mas que la simple sumatoria de operaciones unitarias...*



Selección de pasos de transformación debidamente integrados



Recopilando información...

Propiedades físico-químicas

- Gravedad específica
- Peso Molecular
- Capacidad Calorífica
- Entalpías
- Conductividad Térmicas
- Viscosidad
- Datos de Equilibrio
- Punto de Ebullición
- Punto de Fusión
- Temp. Cristalización
- Solubilidad
- Tamaño Partícula

¿Dónde?

Perry Cropley
McKetta Kirk
Kerk Maxwell

SIMULADORES

Datos de cinética de reacción

- Cinética de reacción principal
- Cinética de reacciones colaterales Deseadas o NO

Termodinámica en función de temperatura, presión y composición

T (°C)	H ₂ O/C = 4.5	H ₂ O/C = 5.0	H ₂ O/C = 5.5	H ₂ O/C = 6.0	H ₂ O/C = 6.5
740	8.0	7.0	6.0	5.0	4.0
760	7.0	6.0	5.0	4.0	3.0
780	6.0	5.0	4.0	3.0	2.0
800	5.0	4.0	3.0	2.0	1.5

■■■■ *La Síntesis se inicia con el Diseño Heurístico.*

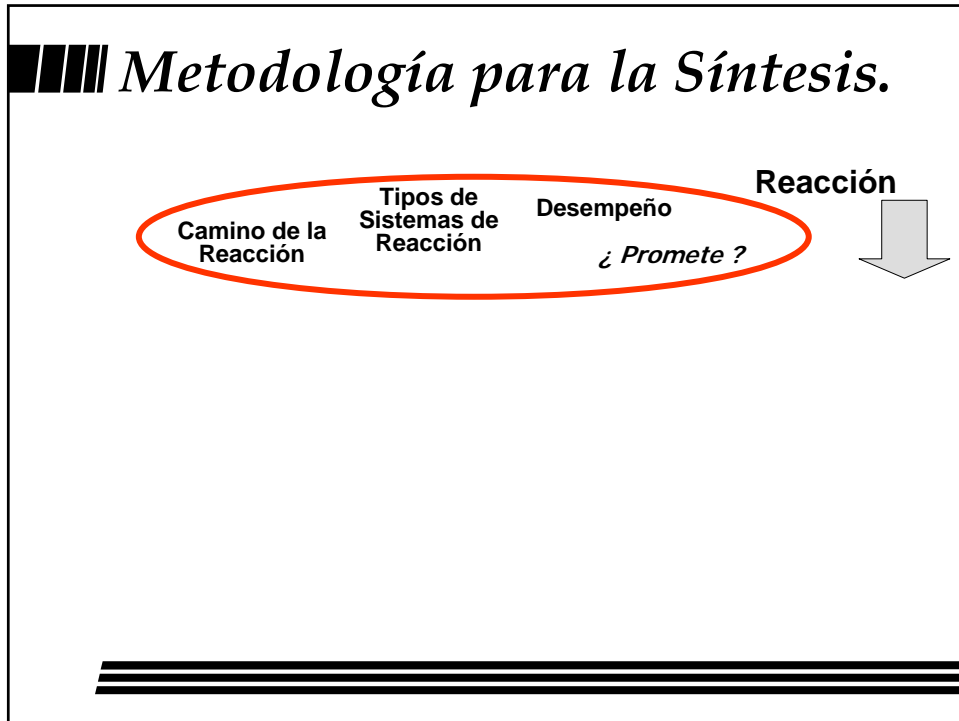
Se basa en el análisis de alternativas desarrolladas en experiencias anteriores para situaciones similares, lo que permite la deducción de una serie de reglas empíricas o heurísticas que conducen a una rápida y confiable selección de la mejor alternativa.

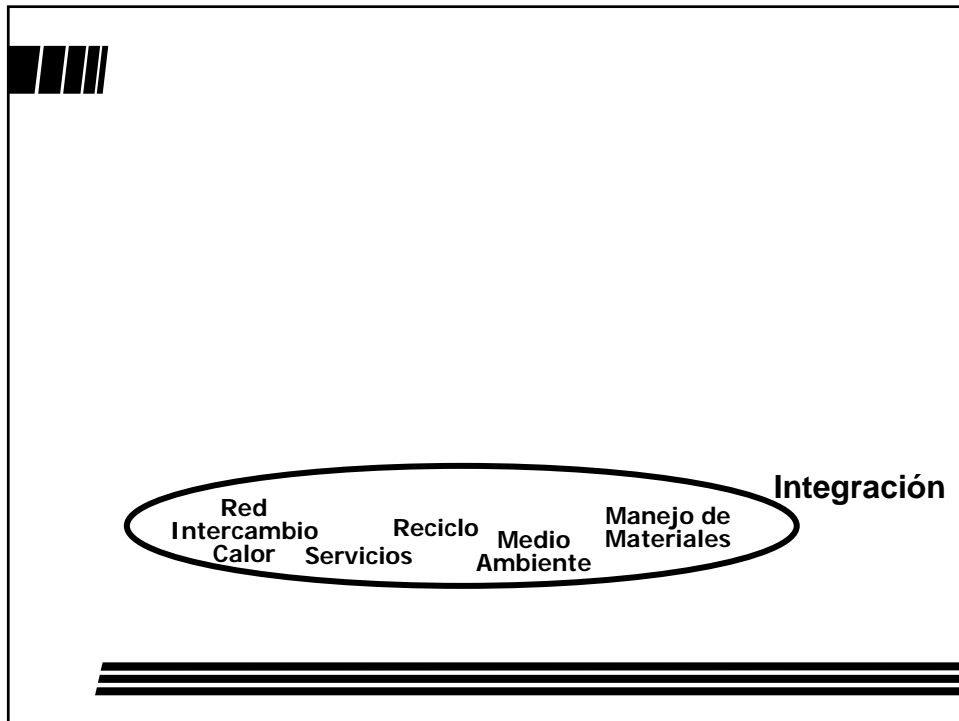
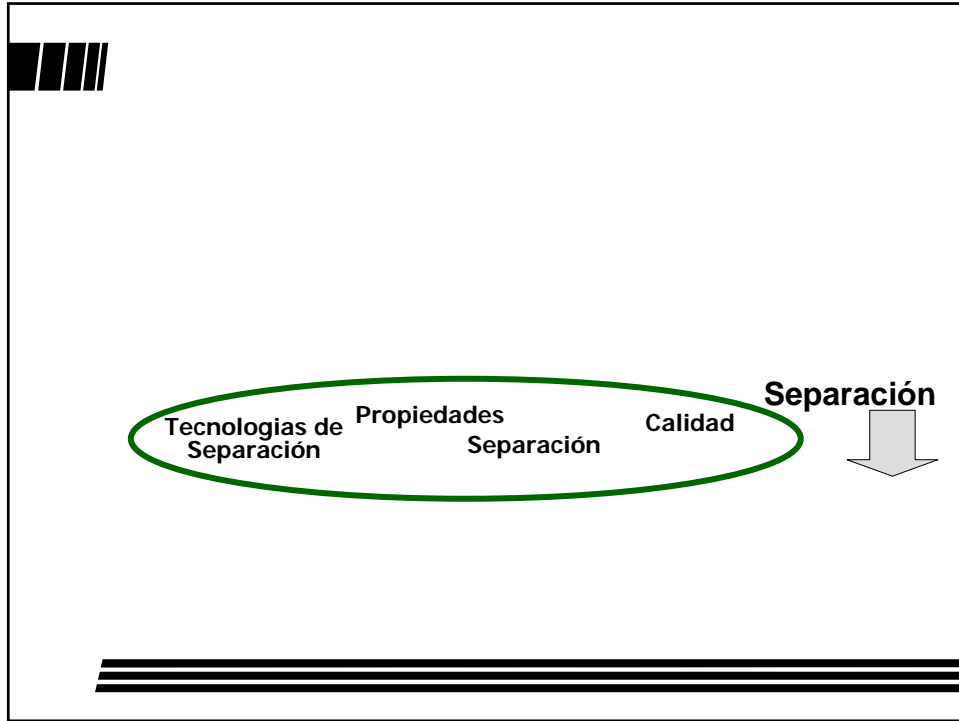
■■■■ *Heurísticas.*

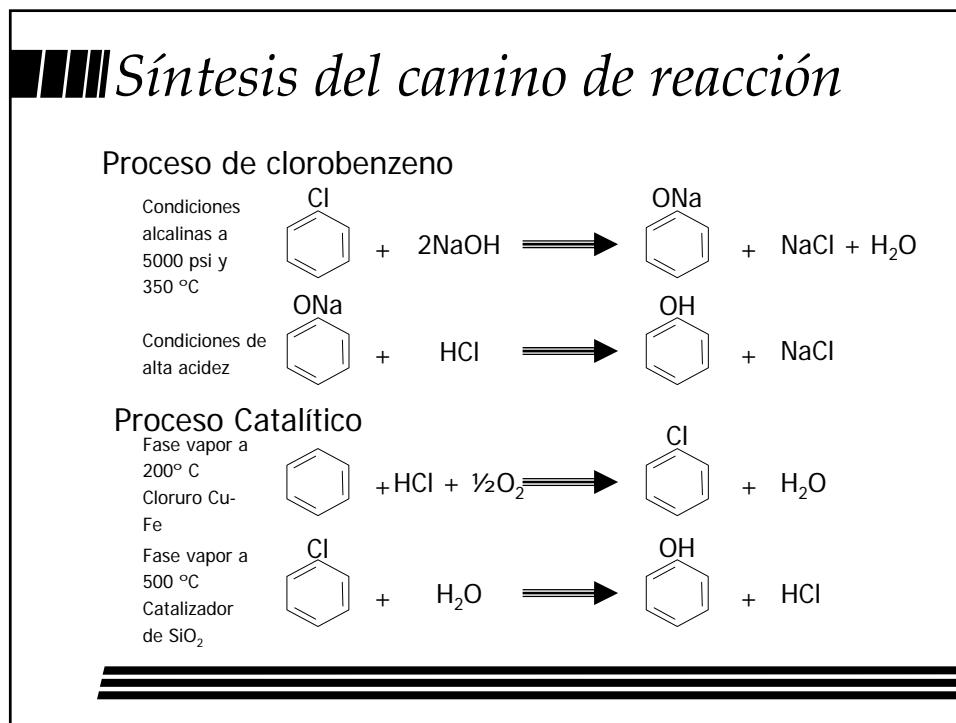
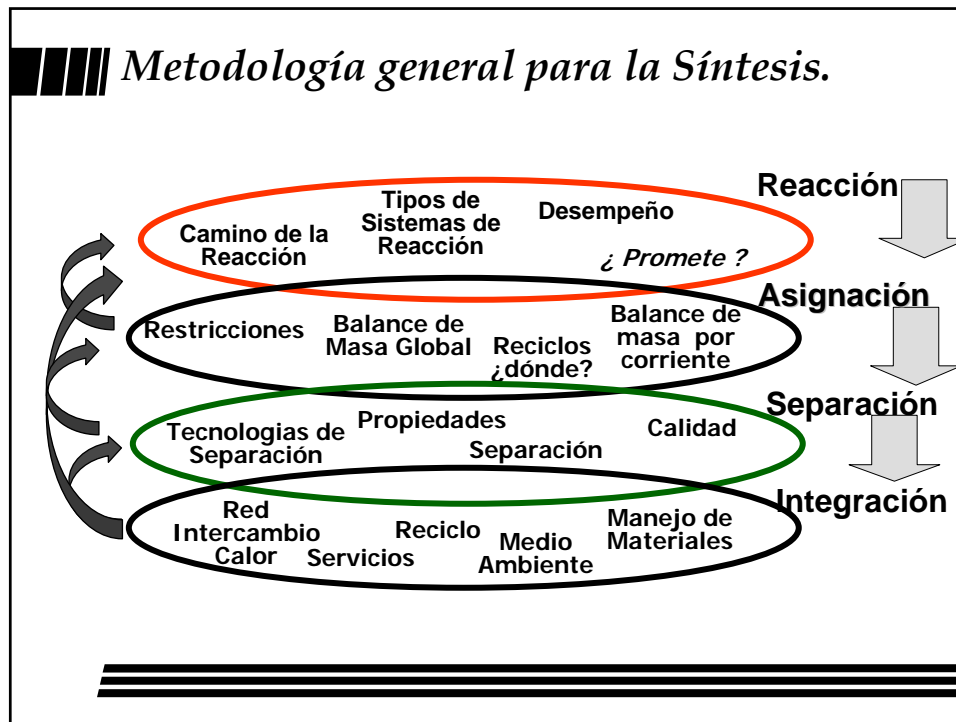
Son métodos de estimación o diseño rápido basados en la experiencia.

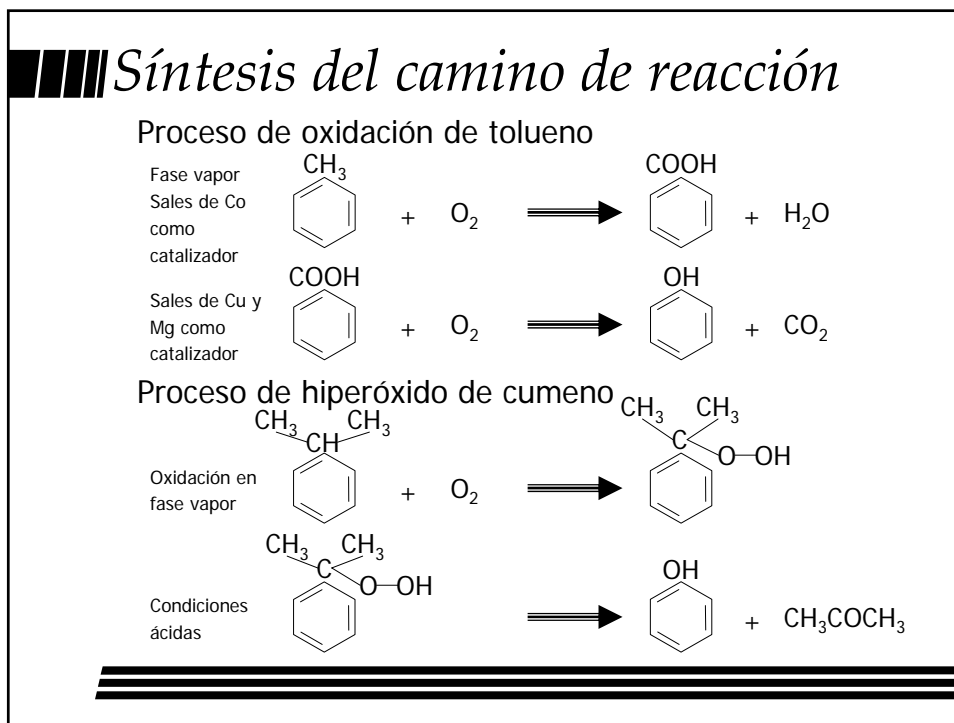
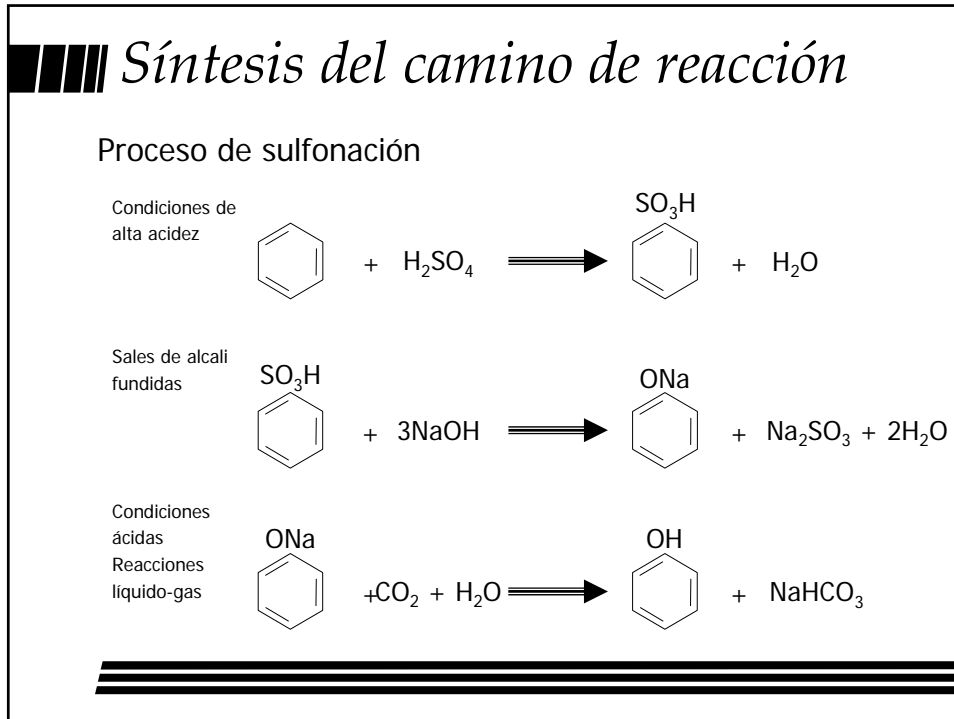
Sin embargo debe tenerse en cuenta que...

- Son útiles para reducir el tiempo de resolución del problema.
 - No garantizan una solución.
 - Distintas heurísticas pueden ser contradictorias entre sí.
 - Su aceptación está condicionada por el contexto mas que por estándares absolutos.
-
-











Criterios para síntesis del camino de la reacción.

- **Análisis de generación-consumo**

- Método sistemático para sintetizar rutas de reacción que impliquen reacciones químicas múltiples.

- **Criterio de economía del átomo**

$$\text{economía fraccional del átomo} = \frac{\text{masa de producto deseado}}{\text{masa total de reactivos}}$$

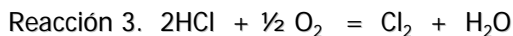
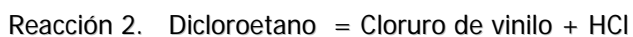
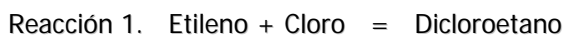
- **Criterio de economía del proceso**

- Combinación de los criterios anteriores con aspectos económicos (costos de reactivos, productos y subproductos)



Economía del proceso

Beneficio anual = Valor anual del producto manufacturado - Costo anual de materias primas - Costo anual de amortización, mantenimiento, operación, servicios, mano de obra y otros factores. **Beneficio Bruto**



Reacción	Especies						
	Etileno	Cloro	Dicloroetano	Cloruro de vinilo	HCl	O ₂	H ₂ O
1	-1(2)	-1(2)	+1(2)				
2			-1(2)	+1(2)	+1(2)		
3		+1			-2	-1/2	+1
Neto	-2	-1	0	+2	0	-1/2	+1

//// Economía del proceso (Cont...)

Reacción	Especies						
	Etileno	Cloro	Dicloro etano	Cloruro de vinilo	HCl	O ₂	H ₂ O
1	-1(2)	-1(2)	+1(2)				
2			-1(2)	+1(2)	+1(2)		
3		+1			-2	-½	+1
Neto	-2	-1	0	+2	0	-½	+1

Especies	Peso Molecular	\$/lb*	\$/lbmol
Etileno	28	0.03	0.84
Cloro	70	0.04	2.80
Cloruro de Vinilo	62	0.05	3.10

$$3.10 - 0.84 - \frac{1}{2} \cdot 2.80 = \$ 0.86/\text{lbmol de cloruro de vinilo}$$

//// Tipos de sistemas de reacción

- Reacciones simples:

ALIMENTACIÓN → PRODUCTO

ALIMENTACIÓN → PRODUCTO + SUBPRODUCTO

ALIMENTACIÓN1 + ALIMENTACION2 → PRODUCTO

- Reacciones múltiples en paralelo

{ ALIMENTACIÓN → PRODUCTO

{ ALIMENTACIÓN → SUBPRODUCTO

{ ALIMENTACIÓN → PRODUCTO + SUBPRODUCTO1

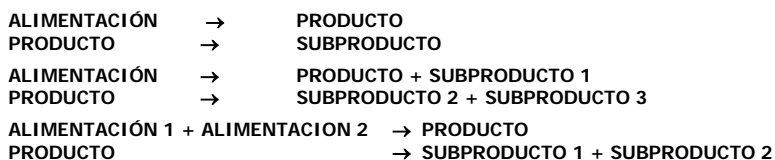
{ ALIMENTACIÓN → SUBPRODUCTO2 + SUBPRODUCTO3

{ ALIMENTACIÓN1 + ALIMENTACION2 → PRODUCTO

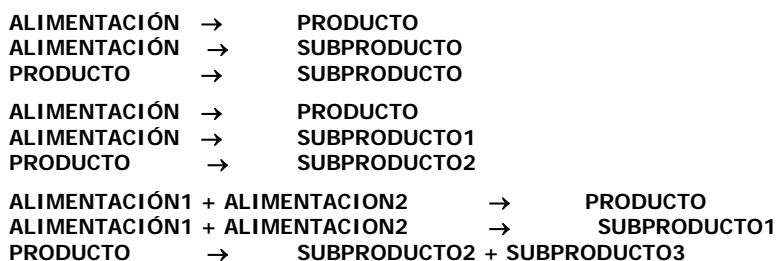
{ ALIMENTACIÓN1 + ALIMENTACION 2 → SUBPRODUCTO

Tipos de sistemas de reacción

Reacciones múltiples en serie



Reacciones múltiple en serie y paralelo



Heurísticas para la selección de reacciones químicas

1. Intente maximizar la incorporación de átomos de los reactivos en el producto final. Elija materias primas que sean tan cercanas como sea posible a la estructura química del producto final. Evite síntesis químicas que utilicen modificación química temporal de los reactivos. Evite introducir elementos que no estén incorporados en el producto final.
2. Elegir reactivos que minimicen riesgos de explosión, incendios o liberación de materiales tóxicos. Si el uso de materiales peligrosos es inevitable, diseñe para un volumen mínimo de reactor. En síntesis que requieran reactores múltiples, evite el almacenamiento de materiales peligrosos.

Heurísticas para la selección de reacciones químicas (Cont...)

3. Utilizar materias primas de alta pureza para minimizar reacciones colaterales no deseadas. Considerar, si es posible, la purificación de las materias primas antes de introducirlas en un reactor.
4. Favorecer los esquemas de reacción que requieran menos etapas.
5. Si fuera posible, utilizar un catalizador.
6. Elegir reacciones que procedan de manera espontánea a temperaturas y presiones tan similares a las condiciones de ambiente como sean posible. Las temperaturas y presiones superiores a las del ambiente son preferibles a las inferiores.

Estrategias relativas a Conversión de especies:

- Identifique la estructura química del producto químico deseado.
- Basándose en analogías estructurales, identifique posible productos de partida y/o que puedan aparecer como intermediarios o productos colaterales.
- Diseñe los caminos de reacción que puedan servir para la obtención de los productos deseados. Elimine aquellos caminos impracticables por consideraciones termodinámicas o cinéticas.
- Establezca el orden de procedencia de las reacciones químicas e identifique las posibles de más de un camino de reacción u orden de precedencia.
- Identifique posibles productos intermedios o finales secundarios
- Jerarquice las alternativas en orden de complejidad y elimine las más complejas.

Variables de diseño del reactor

- Temperatura y presión del reactor
- Volumen del reactor
- Tiempo de residencia
- Adición de reactivos
- Catalizadores
- Modo de operación
- Patrones de mezclado

Reactor: Estableciendo el caso base

- ¿En que fase toma lugar la reacción?
- ¿Cuál es el rango de temperatura y presión requerido por el reactor?
- ¿Quién controla la reacción, la cinética o el equilibrio?
- ¿Se requiere catalizador? ¿Cuáles son sus propiedades? ¿La reacción requiere un catalizador sólido o ésta es homogénea?
- ¿Es la reacción principal exotérmica o endotérmica?
- ¿Cómo son los requerimiento energéticos?
- ¿La reacción principal compite con reacciones que termodinámicamente se mueven en la misma dirección?
- ¿Para qué lado se desplaza la reacción?
- ¿Cuál es la selectividad de la reacción deseada?
- ¿Cuál es la conversión en un paso?
- ¿Cuáles son las propiedades físicas, químicas, de seguridad y toxicidad de todos los materiales involucrados incluyendo especies intermedias?

Desempeño del reactor

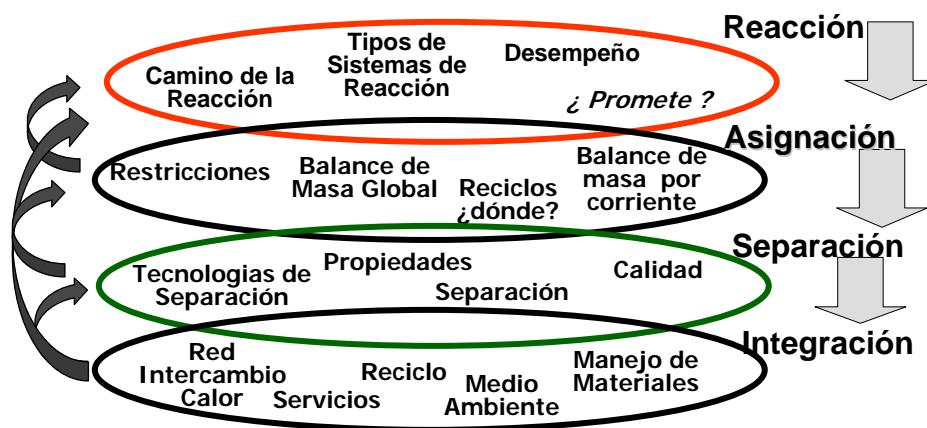
$$\text{Conversión} = \frac{(\text{Reactante consumido en el reactor})}{(\text{Reactante alimentado al reactor})}$$

$$\text{Selectividad} = \frac{(\text{Producto deseado producido})}{(\text{Reactante consumido en el reactor})} \times \delta$$

$$\text{Rendimiento} = \frac{(\text{Producto deseado producido})}{(\text{Reactante alimentado al reactor})} \times \delta$$

$\delta = \text{Factor Estequiométrico}$

Metodología general para la Síntesis.

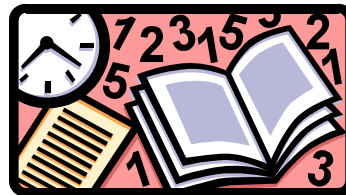


Asignación de especies

Las RESTRICCIONES representan los límites operacionales del proceso, de calidad del producto y del medio ambiente.

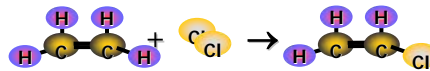
"Checklist"

- ✓ especificaciones de calidad,
- ✓ restricciones ambientales,
- ✓ limitaciones operacionales,
- ✓ limitaciones de servicios,
- ✓ de catalizador
- ✓ cinética,
- ✓ termodinámica,
- ✓ conversión en un paso.

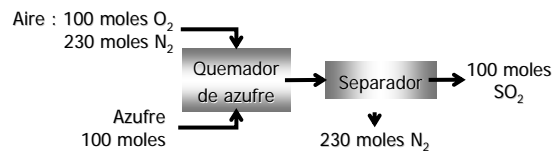


Tareas para la síntesis de proceso

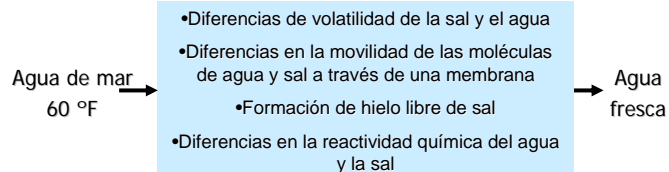
1) Camino de la reacción:



2) Localización o asignación de especies:



3) Separación:



4) Integración:

Balance de masa global

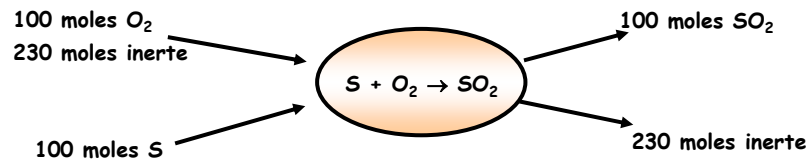
Objetivo:

Establecer cantidad de materia prima para una cantidad de producto.

Tomando en cuenta:

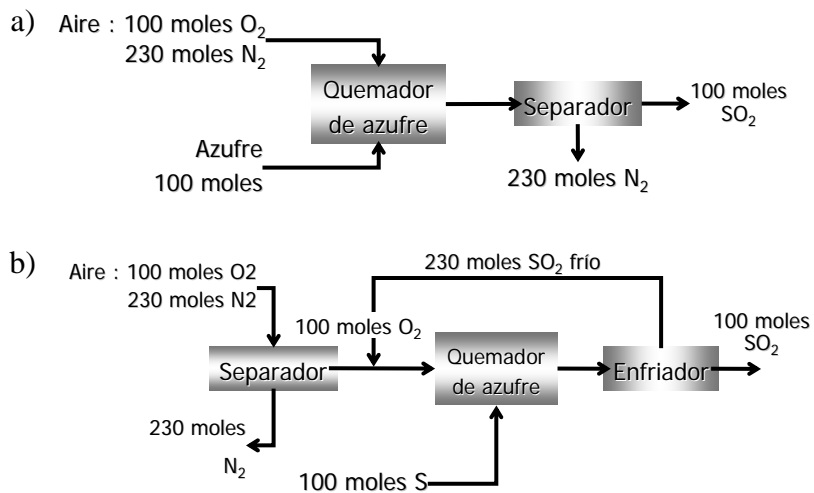
- » Todas las reacciones involucradas en el proceso
- » La cantidad de cada subproducto generado
- » La conversión global para el producto principal

Ejemplo: Obtención de SO_2 por oxidación del azufre



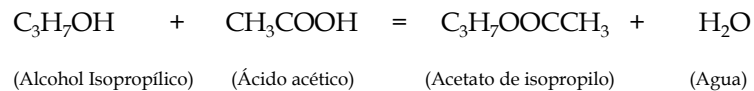
Localización de especies

Ejemplo: $\text{S} + \text{O}_2 \rightarrow \text{SO}_2$



Consideremos otro caso...

El acetato de isopropilo es un solvente industrial y agente de extracción que puede ser producido por reacción de esterificación entre el alcohol isopropílico y el ácido acético.



Esta reacción es reversible y tiene una conversión del 60%.

¿Es rentable el proceso?

Para el sistema sin reciclo...

Alcohol + ácido = 0.6 acetato + 0.6 agua + 0.4 alcohol + 0.4 ácido

Especies						
	Alcohol	Ácido	Acetato	H ₂ O	Alcohol	Ácido
Reacción	-1	-1	0.6	0.6	0.4	0.4
Neto	-1	-1	0.6	0.6	0.4	0.4

Especies	\$/lb*	\$/lbmol
Alcohol Isopropílico	0.07	4.20
Ácido Acético	0.09	5.40
Acetato de isopropilo	0.12	12.25

$$0.6(12.25) - 1.0(4.20) - 1.0(5.40) = -1.25\$/\text{mol de acetato}$$

■■■■ Incorporando un reciclo...

Alcohol + ácido = 0.6 acetato + 0.6 agua + 0.4 alcohol + 0.4 ácido

Especies						
	Alcohol	Ácido	Acetato	H ₂ O	Alcohol	Ácido
Reacción	-1	-1	0.6	0.6	0.4	0.4
Reciclo	0.32	0.32	0	0	-0.32	-0.32
Neto	-0.68	-0.68	0.6	0.6	0.08	0.08

$$0.6(12.25) - 0.68(4.20) - 0.68(5.40) = +0.63 \text{ \$/mol de acetato}$$

■■■■ Metodología general para la Síntesis.

