



**Universidad de Valladolid**



**ESCUELA DE INGENIERÍAS  
INDUSTRIALES**

**UNIVERSIDAD DE VALLADOLID**

**ESCUELA DE INGENIERÍAS INDUSTRIALES**

**Grado en Ingeniería Química**

**Estudio de utilización de catalizadores de  
Rutenio sobre sílices mesoporosas para la  
hidrogenación de la fracción hemicelulósica  
de biomasa**

**Autor:**

**Castrillo Gutiérrez, Juan**

**Tutores:**

**ALONSO SÁNCHEZ, GLORIA ESTHER**

**ROMERO CAMACHO, ALBERTO**

**Departamento de Ingeniería  
Química y Tecnología del Medio  
Ambiente**

**Valladolid, junio 2017**



# ÍNDICE

ÍNDICE DE FIGURAS, TABLAS Y ECUACIONES.....	5
RESUMEN Y PALABRAS CLAVE .....	11
ABSTRACT AND KEYWORDS .....	13
CAPÍTULO 1. JUSTIFICACIÓN Y OBJETIVOS .....	15
1.1. JUSTIFICACIÓN .....	17
1.2. OBJETIVOS .....	18
CAPÍTULO 2. ANTECEDENTES.....	19
2.1. BIORREFINERÍAS .....	21
2.2. RESIDUOS FORESTALES COMO MATERIAS PRIMA .....	23
2.3. LA FRACCIÓN HEMICELULÓSICA .....	28
2.4. HIDROGENACIÓN DE HEMICELULOSAS.....	30
2.5. XILITOL Y ARABITOL COMO PRODUCTOS .....	32
CAPÍTULO 3. FUNDAMENTOS .....	35
3.1. CATALIZADORES.....	37
3.2. CONDICIONES DE REACCIÓN .....	45
CAPÍTULO 4. MATERIALES Y MÉTODOS.....	49
4.1. CARACTERIZACIÓN DE LA BIOMASA EXPERIMENTAL Y OBTENCIÓN DEL EXTRACTO A HIDROGENAR.....	51
4.2. HIDRÓLISIS E HIDROGENACIONES .....	54
4.2.1 Experimentos de hidrólisis .....	55
4.2.2. Experimentos de hidrogenación .....	57
4.3. ANÁLISIS DE PRODUCTOS.....	60
4.4. CATALIZADORES.....	64
4.4.1 Método de Preparación .....	64
4.4.2 Técnicas de Caracterización .....	65

<b>CAPÍTULO 5. RESULTADOS Y DISCUSIÓN.....</b>	<b>69</b>
<b>5.1. PUESTA EN MARCHA DEL MONTAJE EXPERIMENTAL .....</b>	<b>71</b>
5.1.1. Conexión y prueba de estanqueidad .....	72
5.1.2. Prueba de presión y de calentamiento .....	73
5.1.3. Pruebas de bombeo de la alimentación.....	73
5.1.4. Prueba con una alimentación real .....	78
<b>5.2 CARACTERIZACIÓN DEL CATALIZADOR .....</b>	<b>80</b>
<b>5.3. HIDROGENACIÓN DE MONÓMEROS .....</b>	<b>87</b>
5.3.1. Hidrogenación de la D-Xilosa .....	87
5.3.1.1. Variando las condiciones de operación .....	88
5.3.1.2. Variando la cantidad de catalizador .....	100
<b>5.4. HIDROGENACIÓN DE MEZCLAS .....</b>	<b>107</b>
5.4.1. D-Xilosa + D-Glucosa .....	107
5.4.2. D-Xilosa + L-Arabinosa .....	110
5.4.3. D-Xilosa + L-Arabinosa + D-Glucosa .....	113
<b>5.5. HIDROGENACIÓN DE FRACCIÓN HEMICELULÓSICA DE CATALPA .....</b>	<b>117</b>
<b>CAPÍTULO 6. CONCLUSIONES Y LÍNEAS FUTURAS .....</b>	<b>119</b>
<b>CAPÍTULO 7. BIBLIOGRAFÍA .....</b>	<b>123</b>
<b>CAPÍTULO 8. ANEXOS.....</b>	<b>131</b>
<b>Apéndice 1: Calibrado de bomba 1. ....</b>	<b>133</b>
<b>Apéndice 2: Calibrado de bomba 2. ....</b>	<b>137</b>
<b>Apéndice 3: Reactor Berghof BR-100. ....</b>	<b>141</b>
<b>Apéndice 4: Medidores de flujo. ....</b>	<b>143</b>
<b>Apéndice 5: Tabla de experimentos. ....</b>	<b>145</b>
<b>Apéndice 6: Fichas de seguridad. ....</b>	<b>147</b>

## ÍNDICE DE FIGURAS, TABLAS Y ECUACIONES

<b>FIGURA 1.</b> ETAPAS BÁSICAS DE UNA BIORREFINERÍA. ....	22
<b>FIGURA 2.</b> PRODUCTIVIDAD ANUAL DE BIOMASA LEÑOSA EN CASTILLA Y LEÓN. ....	25
<b>FIGURA 3.</b> ETAPAS DE HIDROGENACIÓN DE BIOMASA. ....	30
<b>FIGURA 4.</b> ESTRUCTURA QUÍMICA DE LA MOLÉCULA DE XILITOL. ....	32
<b>FIGURA 5.</b> ESTRUCTURA QUÍMICA DE LA MOLÉCULA DE D-ARABITOL. ....	33
<b>FIGURA 6.</b> PROPIEDADES A TENER EN CUENTA PARA LA ELECCIÓN O DISEÑO DE UN CATALIZADOR. ....	39
<b>FIGURA 7.</b> DESARROLLO DE UNA REACCIÓN EXOTÉRMICA SIN CATALIZADOR. ....	40
<b>FIGURA 8.</b> DESARROLLO DE UNA REACCIÓN EXOTÉRMICA CON CATALIZADOR. ....	41
<b>FIGURA 9.</b> PROCESO DE SÍNTESIS DE LA MCM-48. ....	42
<b>FIGURA 10.</b> FIGURA SUPERIOR. DIAGRAMA DE DIFRACCIÓN DE RAYOS X DE LA MCM-48. FIGURA INFERIOR. ESTRUCTURA DE LA MCM-48. ....	42
<b>FIGURA 11.</b> ESQUEMA DEL MECANISMO DE REACCIÓN HETEROGÉNEA. ....	44
<b>FIGURA 12.</b> HIDROGENACIÓN HIDROLÍTICA DE XILANOS Y ARABINANOS. ....	45
<b>FIGURA 13.</b> EFECTO DEL TIEMPO DE REACCIÓN (120°C, 130°C, 140°C) EN LA CONVERSIÓN Y SELECTIVIDAD DE LA D-GLUCOSA A SORBITOL. ....	46
<b>FIGURA 14.</b> IMAGEN Y ESQUEMA DEL REACTOR UTILIZADO. ....	54
<b>FIGURA 15.</b> ESQUEMA DE LA INSTALACIÓN EXPERIMENTAL. ....	55
<b>FIGURA 16.</b> ESQUEMA DE UN CROMATÓGRAFO DE LÍQUIDOS. ....	60
<b>FIGURA 17.</b> MÉTODO SOL-GEL. ....	64
<b>FIGURA 18.</b> DIAGRAMA DE FLUJO DEL MONTAJE EXPERIMENTAL. ....	71
<b>FIGURA 19.</b> MEDIDOR Y CONTROLADOR DE FLUJO TÉRMICO UTILIZADO. ....	72
<b>FIGURA 20.</b> DIFRACTOGRAMA DE RAYOS X A BAJO ÁNGULO DEL AL-MCM-48. ....	80

<b>FIGURA 21.</b> ISOTERMAS DE ADSORCIÓN-DESORCIÓN DE N <sub>2</sub> Y DISTRIBUCIÓN DE TAMAÑO DE PORO DEL AL-MCM-48 Y DEL RU/AL-MCM-48.....	81
<b>FIGURA 22.</b> TPD-NH <sub>3</sub> LLEVADO A CABO PARA AL-MCM-48 Y RU/AL-MCM-48.....	82
<b>FIGURA 23. (A)</b> TPR-H <sub>2</sub> DE RU/AL-MCM-48 Y <b>(B)</b> PATRONES DE DRX DE AL-MCM-48, RU/AL-MCM-48 Y RU/AL-MCM-48 ACTIVADO. ....	83
<b>FIGURA 24. (A) (B)</b> IMÁGENES TEM Y <b>(C)</b> DISTRIBUCIÓN DEL TAMAÑO DE LAS PARTÍCULAS DE RU DEL RU/AL-MCM-48. ....	86
<b>FIGURA 25.</b> EVOLUCIÓN DE LA CONVERSIÓN DE LA D-XILOSA A 80°C Y 50 BAR.....	90
<b>FIGURA 26.</b> EVOLUCIÓN DE LA CONCENTRACIÓN DE LA D-XILOSA A 80°C Y 50 BAR. ....	90
<b>FIGURA 27.</b> REPRESENTACIÓN DEL LN(1-X) FRENTE AL TIEMPO DE LAS REACCIONES LLEVADAS A CABO A 80°C Y 50 BAR CON D-XILOSA COMO ALIMENTACIÓN.....	91
<b>FIGURA 28.</b> EVOLUCIÓN DE LA CONVERSIÓN DE LA D-XILOSA A 100°C Y 50 BAR. ....	93
<b>FIGURA 29.</b> EVOLUCIÓN DE LA CONCENTRACIÓN DE LA D-XILOSA A 100°C Y 50 BAR. ....	94
<b>FIGURA 30.</b> REPRESENTACIÓN DEL LN(1-X) FRENTE AL TIEMPO DE LAS REACCIONES LLEVADAS A CABO A 100°C Y 50 BAR CON D-XILOSA COMO ALIMENTACIÓN.....	94
<b>FIGURA 31.</b> EVOLUCIÓN DE LA CONVERSIÓN DE LA D-XILOSA A 120°C Y 50 BAR.....	96
<b>FIGURA 32.</b> EVOLUCIÓN DE LA CONCENTRACIÓN DE LA D-XILOSA A 120°C Y 50 BAR. ....	97
<b>FIGURA 33.</b> REPRESENTACIÓN DEL LN(1-X) FRENTE AL TIEMPO DE LAS REACCIONES LLEVADAS A CABO A 120°C Y 50 BAR CON D-XILOSA COMO ALIMENTACIÓN.....	97
<b>FIGURA 34.</b> AJUSTE MEDIANTE ARRHENIUS PARA LA HIDROGENACIÓN DE D-XILOSA. ...	99
<b>FIGURA 35.</b> VARIACIÓN DE LA CONVERSIÓN EN FUNCIÓN DE LA CANTIDAD DE CATALIZADOR EMPLEADA. ....	104
<b>FIGURA 36.</b> CROMATOGRAMA DE UNA REACCIÓN DE HIDROGENACIÓN CON ALIMENTACIÓN D-XILOSA.....	105
<b>FIGURA 37.</b> CROMATOGRAMA DE UNA REACCIÓN DE HIDROGENACIÓN CON ALIMENTACIÓN D-XILOSA/D-GLUCOSA (50%-50%). ....	109
<b>FIGURA 38.</b> CONVERSIONES Y RENDIMIENTOS DE LA REACCIÓN DE HIDROGENACIÓN DE UNA MEZCLA D-XILOSA/D-GLUCOSA (50%-50%) DURANTE 7 MINUTOS A 180°C Y 50 BAR. ....	110

<b>FIGURA 39.</b> CROMATOGRAMA DE UNA REACCIÓN DE HIDROGENACIÓN CON ALIMENTACIÓN D-XILOSA/D-GLUCOSA (80,2%-19,8%) .....	112
<b>FIGURA 40.</b> CONVERSIÓN Y RENDIMIENTO DE LA REACCIÓN DE HIDROGENACIÓN DE UNA MEZCLA D-XILOSA/L-ARABINOSA (80,2%-19,8%) DURANTE 15 MINUTOS A 120°C Y 50 BAR. ....	112
<b>FIGURA 41.</b> CROMATOGRAMA DE UNA REACCIÓN DE HIDROGENACIÓN CON ALIMENTACIÓN D-XILOSA + L-ARABINOSA + D-GLUCOSA (71,2%-17,6%-11,2%).....	115
<b>FIGURA 42.</b> CONVERSIÓN Y RENDIMIENTO DE LA REACCIÓN DE HIDROGENACIÓN DE UNA MEZCLA D-XILOSA + L-ARABINOSA + D-GLUCOSA (71,2%-17,6%-11,2%) DURANTE 15 MINUTOS A 120°C Y 50 BAR. ....	115
<b>TABLA 1.</b> PRINCIPALES ELEMENTOS DE UNA BIORREFINERÍA. ....	22
<b>TABLA 2.</b> COMPOSICIONES MEDIAS DE MADERAS DURAS Y BLANDAS. ....	27
<b>TABLA 3.</b> VENTAJAS Y DESVENTAJAS DE LA CATÁLISIS HOMOGÉNEA Y HETEROGÉNEA. ....	38
<b>TABLA 4.</b> ALIMENTACIÓN A LA PLANTA PILOTO MULTILECHO PARA FRACCIONAMIENTO DE BIOMASA. ....	51
<b>TABLA 5.</b> PRODUCTO OBTENIDO DE LA PLANTA PILOTO TRAS LA HIDRÓLISIS ÁCIDA. ....	53
<b>TABLA 6.</b> CAUDAL TEÓRICO Y REAL DE LA BOMBA KNAUER SMARTLINE PUMP 100 (CR9) A DIFERENTES FLUJOS. ....	74
<b>TABLA 7.</b> CAUDAL TEÓRICO Y REAL DE LA BOMBA KNAUER SMARTLINE PUMP 100 (CR14) A DIFERENTES FLUJOS. ....	75
<b>TABLA 8.</b> COMPARACIÓN DE TIEMPOS DE LLENADO EN FUNCIÓN DE LAS BOMBAS. ....	75
<b>TABLA 9.</b> DATOS DE LA PRUEBA DE HIDRÓLISIS REALIZADA CON UNA ALIMENTACIÓN REAL A 180°C Y 25 BAR. ....	79
<b>TABLA 10.</b> PROPIEDADES TEXTURALES Y CARGA DE RU EN LOS CATALIZADORES EMPLEADOS. ....	80
<b>TABLA 11.</b> TAMAÑO DE LA PARTÍCULA DE RU EN EL CATALIZADOR RU/AL-MCM-48 Y ACIDEZ DEL AL-MCM-48 Y DEL RU/AL-MCM-48. ....	84
<b>TABLA 12.</b> DATOS DE LAS REACCIONES DE HIDROGENACIÓN LLEVADAS A CABO UTILIZANDO D-XILOSA COMO ALIMENTACIÓN A 80°C Y 50 BAR. ....	89

<b>TABLA 13.</b> CONVERSIONES, RENDIMIENTOS Y SELECTIVIDADES DE LAS PRUEBAS REALIZADAS A 80°C Y 50 BAR CON UNA ALIMENTACIÓN DE D-XILOSA (7 G/L).....	89
<b>TABLA 14.</b> DATOS DE LAS REACCIONES DE HIDROGENACIÓN LLEVADAS A CABO UTILIZANDO D-XILOSA COMO ALIMENTACIÓN A 100°C Y 50 BAR. ....	92
<b>TABLA 15.</b> CONVERSIONES, RENDIMIENTOS Y SELECTIVIDADES DE LAS PRUEBAS REALIZADAS A 100°C Y 50 BAR CON UNA ALIMENTACIÓN DE D-XILOSA (7 G/L).....	93
<b>TABLA 16.</b> DATOS DE LAS REACCIONES DE HIDROGENACIÓN LLEVADAS A CABO UTILIZANDO D-XILOSA COMO ALIMENTACIÓN A 120°C Y 50 BAR. ....	95
<b>TABLA 17.</b> CONVERSIONES, RENDIMIENTOS Y SELECTIVIDADES DE LAS PRUEBAS REALIZADAS A 120°C Y 50 BAR CON UNA ALIMENTACIÓN DE D-XILOSA (7 G/L).....	96
<b>TABLA 18.</b> COMPARACIÓN DE LOS VALORES OBTENIDOS PARA 80°C, 100°C Y 120°C.....	99
<b>TABLA 19.</b> DATOS DE LAS REACCIONES DE HIDROGENACIÓN REALIZADAS VARIANDO LA RATIO DE CATALIZADOR A 120°C Y 50 BAR. ....	102
<b>TABLA 20.</b> CONVERSIÓN Y RENDIMIENTOS TRAS EL ANÁLISIS DE LAS PRUEBAS REALIZADAS EN FUNCIÓN DE LA CANTIDAD DE CATALIZADOR EMPLEADO. ....	103
<b>TABLA 21.</b> DATOS DE LA REACCIÓN DE HIDROGENACIÓN LLEVADA A CABO CON LA MUESTRA D-XILOSA/D-GLUCOSA (50%-50%) A 180°C Y 50 BAR.....	108
<b>TABLA 22.</b> CANTIDADES DE D-XILOSA Y L-ARABINOSA PARA LA SEGUNDA MEZCLA.....	111
<b>TABLA 23.</b> DATOS DE LA REACCIÓN DE HIDROGENACIÓN LLEVADA A CABO CON LA MUESTRA D-XILOSA/D-GLUCOSA (80,2%-19,8%) A 120°C Y 50 BAR.....	111
<b>TABLA 24.</b> CANTIDADES DE D-XILOSA, L-ARABINOSA Y D-GLUCOSA PARA LA TERCERA MEZCLA.....	113
<b>TABLA 25.</b> PORCENTAJES REALES DEL EXTRACTO UTILIZADO TENIENDO EN CUENTA EL ÁCIDO ACÉTICO.....	113
<b>TABLA 26.</b> DATOS DE LA REACCIÓN DE HIDROGENACIÓN LLEVADA A CABO CON LA MUESTRA D-XILOSA + L-ARABINOSA + D-GLUCOSA (71,2%-17,6%-11,2%) A 120°C Y 50 BAR. ....	114
<b>TABLA 27.</b> DATOS DE LAS REACCIONES DE HIDROGENACIÓN LLEVADAS A CABO CON EL EXTRACTO DE MADERA DE CATALPA (170°C) A 180°C Y 50 BAR. ....	118



<b>ECUACIÓN 1. ECUACIÓN DE ARRHENIUS.....</b>	<b>39</b>
<b>ECUACIÓN 2. ECUACIÓN DE ARRHENIUS LINEALIZADA.....</b>	<b>40</b>
<b>ECUACIÓN 3. CONVERSIÓN .....</b>	<b>59</b>
<b>ECUACIÓN 4. RENDIMIENTO .....</b>	<b>59</b>
<b>ECUACIÓN 5. SELECTIVIDAD .....</b>	<b>59</b>
<b>ECUACIÓN 6. CÁLCULO DEL DIÁMETRO PONDERADO DE SUPERFICIE .....</b>	<b>67</b>
<b>ECUACIÓN 7. ECUACIÓN DE SCHERRER .....</b>	<b>84</b>
<b>ECUACIÓN 8. ECUACIÓN PARA UNA CINÉTICA DE PRIMER ORDEN .....</b>	<b>91</b>



## RESUMEN Y PALABRAS CLAVE

### RESUMEN

En este trabajo fin de grado se evalúa la actividad del catalizador de rutenio soportado sobre Al-MCM-48 en la hidrogenación de fracciones hemicelulósicas de biomasa. El catalizador ha sido sintetizado y caracterizado utilizando diferentes técnicas: adsorción-desorción de N<sub>2</sub>, SAXS, DRX, TPR-H<sub>2</sub>, TEM y TPD-NH<sub>3</sub>. Se ha estudiado la cinética de hidrogenación de Xilosa para la obtención de xilitol a unas temperaturas comprendidas entre los 80°C y los 120°C y una presión de H<sub>2</sub> de 50 bar, obteniendo una Energía de Activación de 37 kJ/mol. Se observa que la formación de alcoholes disminuye con la cantidad de catalizador utilizado. Trabajando con mezclas de Xilosa, Arabinosa y Glucosa, se comparan conversiones y rendimientos en condiciones similares (120°C, 50 bar, 15 min). Por último, se estudia la hidrogenación hidrolítica de un extracto obtenido por fraccionamiento hidrotermal de madera de catalpa a 180°C y 50 bar H<sub>2</sub>. Ru/Al-MCM-48 resulta ser un catalizador adecuado.

### PALABRAS CLAVE

Hemicelulosas, hidrogenación, xilitol, arabitol, Ru/Al-MCM-48



## ABSTRACT AND KEYWORDS

### ABSTRACT

In the present master thesis, the catalytic activity of Ru/Al-MCM-48 was evaluated in the hydrogenation of hemicellulosic fractions from biomass- The catalyst has been prepared and characterized by means of adsorption/desorption of N<sub>2</sub>, XRD, SAXS, H<sub>2</sub>-TPR, NH<sub>3</sub>-TPD and TEM. A kinetic study of the hydrogenation of xylose towards xylitol has been developed at temperatures between 80 and 120°C, 50 bar H<sub>2</sub>, achieving an activation energy around 37 kJ/mol. In addition, it was observed that higher amounts of catalysts had a negative effect in the production of the derived alcohols. The hydrogenation of different xylose, arabinose and glucose mixture was also tested, where a comparison of the obtained conversions and yield was carried out under comparable conditions (120°C, 50 bar, 15 min). Finally, the hydrogenation of a real stream of biomass, which was produced by the hydrothermal fractionation of Catalpa at 180°C and 50 bar H<sub>2</sub>. Therefore, Ru/Al-MCM-48 has proven to be a suitable catalyst.

### KEYWORDS

Hemicelluloses, hydrogenation, xylitol, arabitol, Ru/Al-MCM-48



## Capítulo 1. JUSTIFICACIÓN Y OBJETIVOS





## **1.1. JUSTIFICACIÓN**

Este Trabajo Fin de Grado fue propuesto por la profesora Gloria Esther Alonso Sánchez, del Dpto. de Ingeniería Química y Ambiental y miembro del grupo de investigación de Ingeniería de Procesos a Presión. (IPP). Es un TFG con una elevada carga experimental en el laboratorio, donde se han realizado experimentos de hidrogenación de azúcares derivados de la fracción hemicelulósica, así como pruebas de hidrólisis e hidrogenación con un extracto de biomasa real. Este trabajo experimental se completa en el TFG con una revisión bibliográfica acerca de la importancia actual de las biorrefinerías y el aprovechamiento de la biomasa como materia prima, un estudio de los fundamentos de la catálisis heterogénea en la hidrogenación de fracciones de biomasa y una caracterización exhaustiva del catalizador utilizado. Se enmarca dentro de una línea de investigación del grupo IPP de revalorización de fracciones de biomasa utilizando procesos catalíticos heterogéneos.

El seguimiento del trabajo en el laboratorio ha sido realizado por el segundo tutor, Alberto Romero Camacho, doctorando de último año cuya tesis doctoral está centrada en la hidrogenación hidrolítica de celulosa.

El TFG ha contribuido de manera muy satisfactoria en mi formación en varios aspectos:

- a.** Estudio de una temática de enorme importancia actualmente como es la utilización de biomasa como materia prima.
- b.** Profundización en procesos de reacción catalítica heterogénea, como es la hidrogenación de azúcares.
- c.** Introducción a la metodología de trabajo experimental en el laboratorio: planificación de experimentos, trabajo de laboratorio para recogida de datos, análisis de resultados y propuesta de continuación.
- d.** Conocimiento de las técnicas de caracterización de catalizadores sólidos.

## **1.2. OBJETIVOS**

El objetivo global del trabajo es evaluar el potencial de catalizadores de rutenio soportados sobre Al-MCM-48 en la hidrogenación de fracciones hemicelulósicas de biomasa. Para ello se han planteado los siguientes objetivos parciales:

- 1.** Realizar una revisión bibliográfica acerca de la importancia de los procesos de biorrefinería, centrándose especialmente en la hidrogenación de fracciones hemicelulósicas con catalizadores heterogéneos.
- 2.** Poner en marcha un montaje de laboratorio con un volumen de reactor de 150 mL.
- 3.** Estudiar la cinética de hidrogenación de xilosa utilizando Ru/Al-MCM-48 como catalizador.
- 4.** Estudiar la cinética de hidrogenación de mezclas de azúcares Xilosa-Arabinosa-Glucosa utilizando Ru/Al-MCM-48 como catalizador.
- 5.** Estudiar la hidrogenación hidrolítica de un extracto derivado del fraccionamiento hidrotermal de madera de catalpa, utilizando Ru/Al-MCM-48 como catalizador.

## Capítulo 2. ANTECEDENTES



## 2.1. BIORREFINERÍAS

El agotamiento de los combustibles fósiles unido a los problemas derivados del calentamiento global, han motivado la utilización de biomasa como alternativa al petróleo para la producción de energía, compuestos químicos y combustibles.

La biorrefinería abarca todo el conjunto de tecnologías capaces de separar los recursos de la biomasa en sus componentes fundamentales, convirtiéndose posteriormente en productos de alto valor añadido o energía, integrando el uso de tecnologías de bajo impacto ambiental. El objetivo principal de las mismas es ser competitivos en el mercado, sustituyendo progresivamente los productos que provienen de la refinería del petróleo. (de Jong & Jungmeier, 2015)

Entre las diferentes definiciones de biorrefinería, la más exhaustiva ha sido realizada recientemente por la IEA (International Energy Agency) Bioenergy Task 42 "Biorefineries": "El biorrefinado es el procesamiento sostenible de la biomasa en un espectro de productos y energía comercializables". El Laboratorio Nacional de Energías Renovables de Estados Unidos (NREL), define también este término de la siguiente manera: Una biorrefinería es una instalación que integra los procesos y los equipos de conversión de biomasa, para producir combustibles, energía y productos químicos a partir de la misma. (de Jong & Jungmeier, 2015)

Actualmente, el principal desafío para el desarrollo de la biorrefinería es la producción eficiente y rentable de los biocombustibles de transporte, mientras que de los materiales coproducidos y bioquímicos se pueden obtener beneficios adicionales.

A diferencia de las refinerías de petróleo, que su rentabilidad depende en cierto modo de su volumen de producción, podemos encontrarnos con biorrefinerías de todo tipo de tamaños. Por ello, varias "bioindustrias" pueden combinar sus flujos materiales para lograr una utilización completa de todos los componentes de la biomasa. Además, una ventaja de estos sistemas, es la presencia de altas cantidades de biomasa en la gran mayoría de países, por lo que nos permite reducir en un alto porcentaje la dependencia nacional de los combustibles fósiles importados. (Wagemann, 2015)

Adquiere una gran importancia en este aspecto el concepto denominado "economía circular", donde se asienta el desarrollo de las biorrefinerías, en contraposición del modelo basado en "producir-usar-tirar". La economía circular tiene, como gran objetivo, reducir la entrada de los materiales y la producción de desechos, intentando aprovechar al máximo todos los recursos disponibles.

En el modelo de economía circular del que estamos hablando, los recursos se utilizan de una forma eficaz e inteligente, convirtiéndose los residuos en nuevas materias primas.

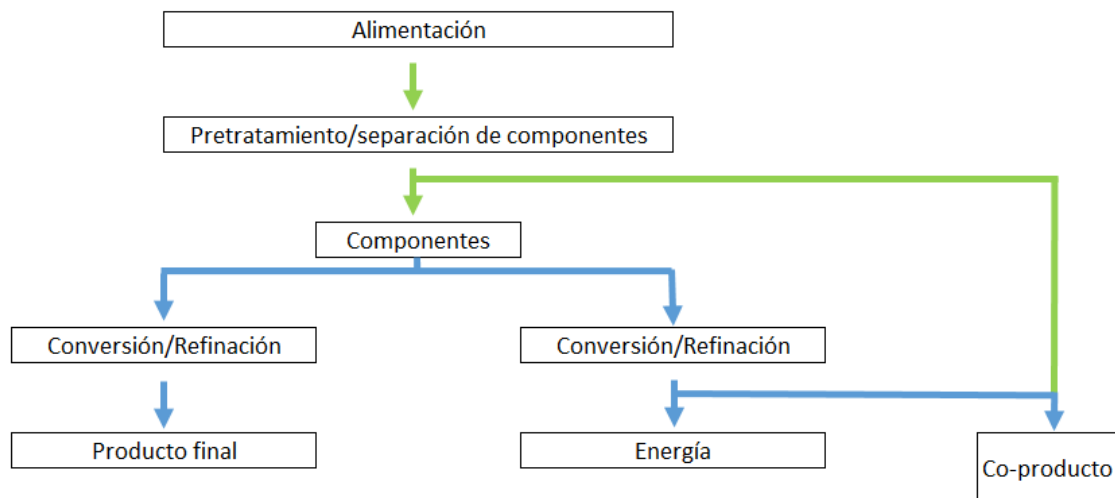
Este factor es fundamental para el modelo de sostenibilidad que se pretende crear, debiendo ser robustas y versátiles para adaptarse a cualquier variación.

La Tabla 1 muestra una clasificación de los elementos principales de una biorrefinería: (Wagemann, 2015)

**Tabla 1.** Principales elementos de una biorrefinería.

<b>Materias primas</b>	<u>Biomasa agrícola y forestal</u> Cultivos oleaginosos Cultivos de almidón Cultivos de azúcar Madera Biomasa leñosa	<u>Biomasa acuática</u> Algas	<u>Residuos biológicos y materiales de desecho</u> Residuos de la agricultura y residuos forestales Residuos procedentes del procesamiento de productos
<b>Composición</b>	Carbohidratos de bajo peso molecular (lactosa, por ejemplo) Carbohidratos poliméricos, como la pectina Proteínas Componentes lignocelulósicos (lignina, celulosa y hemicelulosa) Aceites vegetales Biogas		
<b>Productos</b>	Químicos Productos alimenticios (coproductos) Pienso (coproductos)	A partir de: →	Fuentes sólidas, líquidas y gaseosas de bioenergía Electricidad Calor
<b>Procesos</b>	Físicos, incluyendo procesos mecánicos Procesos térmicos Procesos químicos Procesos biotecnológicos		

Las etapas básicas de una biorrefinería son las siguientes (Figura 1): (Wagemann, 2015)



**Figura 1.** Etapas básicas de una biorrefinería.

Por ello, partiendo de biomasa, a través de diversos procesos de fraccionamiento podemos separar los componentes de la misma, y trabajando con ellos, obtendremos posteriormente los productos y la energía que estamos buscando. En el caso de este TFG, obtendremos alcoholes de azúcares. Además, se podrían producir otros subproductos como los alcanos de cadena corta, como resultado de la conversión posterior de los alcoholes de azúcares.

## 2.2. RESIDUOS FORESTALES COMO MATERIAS PRIMA

Se definen como materias primas a los recursos naturales que son transformados por la industria en bienes de consumo y energía. Como alternativa a los combustibles fósiles, en este trabajo se plantea la utilización de un recurso renovable como son los residuos forestales, que, además, serán la materia prima para la producción de alcoholes, evaluando su rendimiento y sus productos posteriormente.

El petróleo es la materia prima más importante en la actualidad, formada por una mezcla de hidrocarburos, y empleándose en numerosos procesos de la industria química. Sustituyó al carbón a finales del siglo XIX como fuente de energía primaria, convirtiéndose en un pilar fundamental en todo el mundo.

El petróleo es un recurso no renovable (recurso natural que no puede ser producido o regenerado a una escala que pueda sostener su tasa de consumo). Además, su utilización y explotación conlleva ciertos riesgos que es necesario evitar en la medida de lo posible, considerando fundamental su sustitución por otros métodos más seguros y más respetuosos con el medio ambiente.

Por ello, debido a la problemática actual relacionada con el agotamiento de los combustibles fósiles y el calentamiento global (factores favorecidos mediante la explotación y uso del petróleo), se prevé que la factibilidad de la explotación de petróleo disminuirá en un futuro próximo, por lo que la biomasa aparece como una de las principales alternativas para la producción de energía, combustibles y productos químicos.

Además, los elevados precios del petróleo y del gas, unidos a los problemas de emisiones de gases de efecto invernadero, han incrementado en los últimos años la demanda y el uso de recursos renovables. Se calcula que hasta el 30% de las materias primas utilizadas para la producción de sustancias químicas en el futuro provendrán de biomasa renovable. (Lv, Liu, Li, Ye, & Wang, 2015)

El informe de la Asociación Mundial de Bioenergía (WBA, 2017), expone que el potencial de la biomasa como fuente energética global es prometedor, apoyándose en estos argumentos: (Forestal, 2009)

- Es actualmente la cuarta mayor fuente de energía conocida, después del carbón, el petróleo y el gas natural.
- Es la mayor y más importante opción de energía renovable.
- Tiene muchas formas de aplicación, proporcionando todos los servicios necesarios para la sociedad moderna.
- Renovabilidad y versatilidad son, entre otras muchas, sus mayores fortalezas como fuente de energía.

Existen pruebas científicas que certifican que las emisiones de gases de efecto invernadero, como el dióxido de carbono, el metano o el óxido nitroso, perturban el clima de la Tierra. El Grupo Intergubernamental de Expertos sobre el Cambio Climático (IPCC, 2017) destacó recientemente, en su quinto Informe de Evaluación, que la creciente población mundial y la demanda de energía per cápita, están conduciendo a un rápido aumento de las emisiones de estos gases perjudiciales.

La producción de combustibles y productos de alto valor añadido a partir de la biomasa ha sido ampliamente investigada en los últimos años.

Recientemente, dentro de nuestra sociedad, se están comenzando a financiar actividades de I + D para la implementación de una economía sostenible basada en fuentes renovables.

Cada vez se tiene más constancia de que las materias primas vegetales (biomasa) tienen el potencial suficiente para sustituir gran parte de los recursos fósiles en los sectores industriales. (Cherubini, 2010)

La actividad forestal, produce una cantidad masiva de recursos y residuos diarios, encontrándose muy activa en España. Según datos de “Eurostat” (Eurostat, 2017), España ha aumentado su superficie forestal a una tasa anual de 2,19%, siendo el segundo país de Europa con mayor área forestal (únicamente por detrás de Suecia). (M. Yedro, A. Cantero, Pascual, García-Serna, & Cocero, 2015)

De acuerdo con los datos del Ministerio de Agricultura, Alimentación y Medio Ambiente, España tiene 8,6 (46,4% de área forestal) y 6,4 (34,5% de área forestal) millones de hectáreas de maderas duras y maderas blandas respectivamente, y la superficie forestal ocupa el 54% del área nacional. Desde 1975, el volumen de producción de madera aumentó de 456,7 a 927,8 millones de m<sup>3</sup> (MAPAMA, 2017). El uso de la biomasa leñosa es imprescindible para la economía mundial y España tiene los recursos para alcanzar una sociedad sostenible.

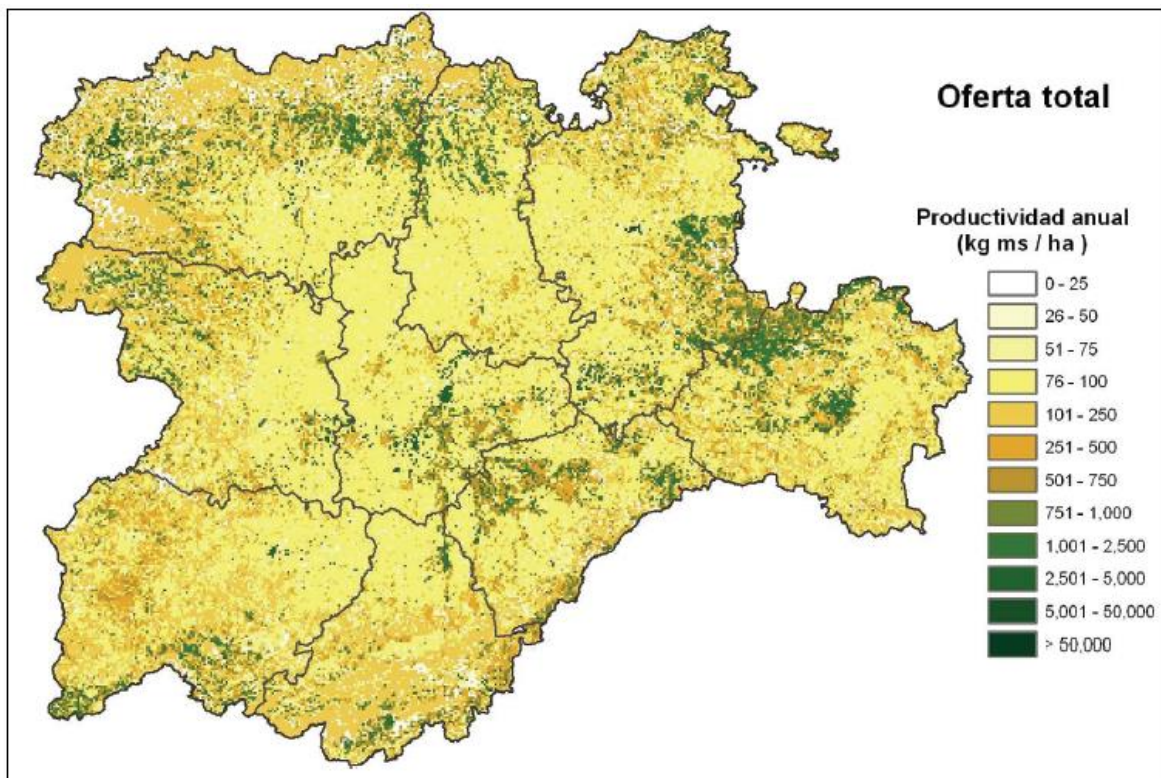
España es un país altamente dependiente de los combustibles fósiles actualmente, aunque su utilización está disminuyendo con el paso de los años. Actualmente, el peso del petróleo en nuestro país se encuentra por encima de la media europea (48,8%). (Energiza, 2017)

Dentro de las fuentes de energías renovables utilizadas en España, el consumo de energía primaria procedente de la biomasa y los residuos asciende hasta un 41,5%. Por ello, se afirma que en nuestro país el recurso renovable que más se utiliza es, con bastante diferencia, la biomasa y los residuos, ocupando el sexto lugar de la Unión Europea por detrás de Alemania, Francia, Suecia, Finlandia y Polonia.



Sin embargo, si atendemos a la producción de energía primaria a partir de biomasa sólida (en producción por habitante), España ocupa el lugar 18 dentro de la Unión Europea (UE), con una tasa de 0,013 (muy por debajo de la tasa que posee la UE de 0,158, y aún más de la de Finlandia (1,435)).

En la Figura 2 se puede observar la productividad anual de biomasa leñosa en Castilla y León, que variará en función de la zona donde nos encontremos: (Forestal, 2009)



**Figura 2.** Productividad anual de biomasa leñosa en Castilla y León.

Teniendo en cuenta estos valores tan interesantes de biomasa forestal en España y en Castilla y León en particular, en este Trabajo Fin de Grado se ha estudiado la producción de alcoholes de azúcares (xilitol y arabitol, entre otros) a partir de reacciones de hidrólisis / hidrogenación, partiendo de la fracción hemicelulósica de la biomasa.

La biomasa lignocelulósica tiene en su estructura tres componentes principales, que son: celulosa, hemicelulosa y lignina. La naturaleza de cada uno de estos biopolímeros es distinta. El contenido medio de estas tres fracciones en los materiales lignocelulósicos es el siguiente: (Romero, Alonso, Sastre, & Nieto-Márquez, 2016)

- Celulosa (34% - 50%).
- Hemicelulosa (19% - 34%).
- Lignina (11% - 30%).

Las hemicelulosas, están compuestas principalmente por monómeros de 5 carbonos, formando una cadena lineal ramificada. Los azúcares que pueden formar parte de las hemicelulosas son xilosa, arabinosa, manosa o galactosa. Por otro lado, la celulosa, es un biopolímero compuesto únicamente de unidades de glucosa. La celulosa es la biomolécula orgánica más abundante en el planeta ya que forma la mayor parte de la biomasa terrestre. Por último, la lignina es el polímero más complejo de los que componen la biomasa lignocelulósica, y está compuesto de unidades fenólicas reticuladas unidas en una red tridimensional. (José Cocero, M. Yedro, Salmi, & García-Serna, 2017)

Estos polímeros pueden interactuar entre sí, por lo que es necesario romper las interacciones entre los tres principales polímeros de biomasa para poder separarlos correctamente. (Lv, Liu, Li, Ye, & Wang, 2015)

Hay que diferenciar entre maderas duras (hardwood) y maderas blandas (softwood), ya que su composición también varía en función de la madera que se esté utilizando.

La madera dura proviene de angiospermas de las dicotiledóneas. Los árboles que poseen este tipo de madera suelen ser de hoja ancha. En latitudes templadas y boreales, son en su gran mayoría, caducifolios, mientras que en los trópicos y zonas subtropicales suelen ser perennes. La tasa de crecimiento de este tipo de maderas es bastante lenta. Durante otoño e invierno, las hojas se desprenden de los mismos. Alguno de los árboles que se caracterizan por tener este tipo de madera son el roble, el nogal o el arce.

Por otro lado, la madera blanda proviene de árboles gimnospermas, teniendo un crecimiento mucho más corto que las anteriormente mencionadas. Suelen mantener sus hojas durante todo el año. Es mucho más fácil trabajar con ellas, encontrándose entre este tipo de maderas las de pino, abeto o chopo. Alrededor del 80% de la madera utilizada es de este tipo, representando un dato muy llamativo debido a que las maderas duras son mucho más comunes que las blandas.

Comparando ambos tipos de maderas, destacamos que las maderas duras poseen una densidad mucho más alta que las maderas blandas, teniendo un precio también mayor las primeras, aunque son más difíciles de trabajar. Por otro lado, las maderas duras son mucho más resistentes a la descomposición que las maderas blandas. (Diffen, 2017)

En cuanto a la composición, las maderas blandas contienen más glucomananos que las maderas duras, mientras que estas últimas contienen más xilanos. En la Tabla 2, se observan los porcentajes de cada uno de los componentes que las forman: (Diffen, 2017)

**Tabla 2.** Composiciones medias de maderas duras y blandas.

	<b><u>Madera dura</u></b>	<b><u>Madera blanda</u></b>
<b><u>Celulosa</u></b>	40% - 44%	43% - 47%
<b><u>Hemicelulosa</u></b>	25% - 29%	25% - 35%
<b><u>Lignina</u></b>	25% - 31%	16% - 24%
<b><u>Extractivos</u></b>	1% - 5%	2% - 8%

En este trabajo de investigación se utiliza en concreto madera de Catalpa como materia prima. La Catalpa es un árbol caducifolio que se encuentra enmarcado dentro de la madera blanda en la anterior clasificación, y que puede alcanzar hasta los 15 metros de alto y 1 metro de diámetro. Posee una corteza de color rojiza, con unas hojas en torno a 30 cm de longitud. Este árbol, se puede observar con frecuencia en la mitad sur de España, aunque en la parte centro de la Península Ibérica también se encuentra. Prefiere ubicarse en zonas que posean un suelo húmedo, y que estén muy expuestas al Sol.

### 2.3. LA FRACCIÓN HEMICELULÓSICA

La biomasa lignocelulósica es una materia prima abundante donde la fracción hemicelulósica adquiere una gran importancia. Generalmente, la cantidad de hemicelulosas (en base seca) se encuentran en torno al 30 % del total, representando un importante recurso de energía y material para su bioconversión.

Las hemicelulosas son polisacáridos compuestos de xilosa, glucosa, arabinosa y manosa principalmente. La concentración de xilanos es superior en las maderas duras que en las blandas.

Dentro de la cinética de extracción de las hemicelulosas, la composición química de la biomasa influye significativamente, variando también en función de la misma los carbohidratos obtenidos.

Para la separación o fraccionamiento de la biomasa lignocelulósica son varios los métodos estudiados hasta el momento, pudiéndose clasificar de forma general en métodos mecánicos, enzimáticos o de hidrólisis ácida (homogénea y también heterogénea). Más recientemente estos métodos se han visto completados con la utilización de microondas o ultrasonidos, en lo que se denomina hidrólisis-asistidas. (Roberts, 2008)

Un método que se utiliza para la separación de hemicelulosa, celulosa y lignina es la extracción/hidrólisis en agua caliente presurizada de la biomasa, teniendo como gran ventaja el uso de esta sin tratamiento de pre-secado y obteniendo una alta recuperación de los componentes de biomasa en tiempos de tratamiento relativamente bajos. (M. Yedro, A. Cantero, Pascual, García-Serna, & Cocero, 2015)

Además, el agua es respetuosa con el medio ambiente y representa una alternativa a los solventes corrosivos y tóxicos, siendo un medio de reacción atractivo para un gran número de aplicaciones. En estos procesos hidrotermales, el agua se presuriza ligeramente para mantenerla líquida por encima de los 100°C y las principales propiedades del agua que pueden modificarse por presión y temperatura, y definir la identidad del medio son: constante dieléctrica, producto iónico, densidad, miscibilidad y propiedades de transporte. (M. Yedro, A. Cantero, Pascual, García-Serna, & Cocero, 2015)

Esta tecnología es una alternativa prometedora para realizar el fraccionamiento de la biomasa, ya que el medio de reacción permite la transformación de las diferentes fracciones de biomasa mediante la elección de las condiciones adecuadas. (M. Yedro, García-Serna, A. Cantero, Sobrón, & Cocero, 2015)

Durante este proceso hidrotermal, los grupos acetilo se liberan de las hemicelulosas, hidrolizándolas a oligómeros más cortos, disminuyendo su masa molar. Por ello, el

conocimiento de la masa molar y de la composición química de las fracciones de hemicelulosa extraídas es crucial.

Los rendimientos de recuperación hidrotermal de hemicelulosas oscilan generalmente entre el 60% y el 100% en peso. (M. Yedro, A. Cantero, Pascual, García-Serna, & Cocero, 2015)

El desafío es encontrar las condiciones experimentales, que pueden ser adaptables a todo tipo de biomasa, contribuyendo a la descentralización y versatilidad del proceso a escala industrial. (M. Yedro, A. Cantero, Pascual, García-Serna, & Cocero, 2015)

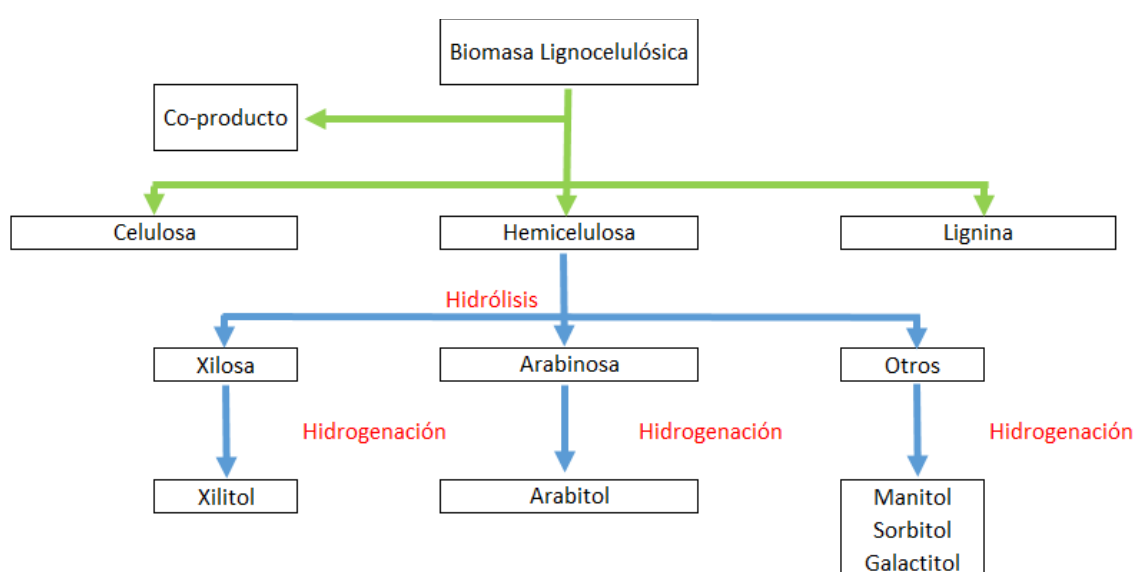
La estructura de las hemicelulosas es principalmente amorfa, y la masa molar es menor en comparación con las celulosas, siendo por ello más fáciles de hidrolizar las primeras (la hidrólisis de hemicelulosa comienza, en torno a 120°C, mientras que la hidrólisis de celulosa, requiere de al menos 200°C). Por otro lado, las hemicelulosas de madera dura pueden eliminarse / hidrolizarse a temperaturas más bajas que las hemicelulosas de madera blanda. (M. Yedro, García-Serna, A. Cantero, Sobrón, & Cocero, 2015)

También, la madera dura tiene un mayor contenido de grupos acetilo que la madera blanda, lo que aumenta la concentración de ácido acético durante la hidrólisis de hemicelulosas, siendo esta especie un catalizador en la hidrólisis de carbohidratos. (Chander Kuhada, Gupta, Pal Khasa, & Singh, 2011)

## 2.4. HIDROGENACIÓN DE HEMICELULOSAS

La química industrial, es evidente que sigue una tendencia actualmente enfocada hacia una explotación de las materias primas renovables. Es importante garantizar una transición suave hacia una industria basada en la biomasa, por lo que se están buscando rutas que permitan llegar o favorecer ese camino. Una ruta de reacción interesante es la hidrogenación que permite obtener alcoholes, que tienen gran interés como producto final (por su elevada demanda de mercado, ver apartado 2.5) pero también como producto intermedio en la obtención de combustibles o bioplásticos. (Sifontes Herrera, Rivero Mendoza, Leino, & Zolotukhin, 2016)

Se trata de un proceso de tres etapas como el recogido en la Figura 3: (Wagemann, 2015)



**Figura 3.** Etapas de hidrogenación de biomasa.

Primeramente, se debe llevar a cabo un proceso de fraccionamiento que permita en primer lugar separar o liberar las hemicelulosas contenidas en la biomasa y posterior o simultáneamente realizar la hidrólisis para obtener sus correspondientes monómeros (xilosa, arabinosa, galactosa, manosa...). La etapa de hidrogenación de los monómeros para la obtención de los correspondientes alcoholes sería la última etapa. (González-Hernández, Alvarez-Navarrete, & Zamudio Jaramillo, 2011)

La etapa de hidrólisis e hidrogenación puede llevarse a cabo bajo diversas condiciones y con distintos tipos de alimentaciones y catalizadores.

Karolin Dietrich et al. presentan una hidrólisis-hidrogenación en una única etapa, para obtener xilitol partiendo de hemicelulosas. Utilizaron una combinación de ácido orgánico derivado de la biomasa y Ru sobre carbono como catalizador. La reducción se lleva a cabo usando hidrógeno o isopropanol, a una temperatura de 140°C y 20 bar.

Usando hidrógeno como reductor obtuvo un rendimiento del 70% aproximadamente, mientras que con isopropanol aumentó hasta el 82%. (Dietrich, Hernandez-Mejia, Verschuren, & Rothenberg, 2016)

Bright T. Kusema et al. llevan a cabo una hidrogenación hidrolítica de arabinogalactanos comerciales, en un reactor discontinuo. Usaron MCM-48 incorporando también rutenio en la estructura, mostrando una alta actividad catalítica. La presión a la que se llevó a cabo es de 20 bar de hidrógeno, con una concentración inicial de arabinogalactano de 0,4% en peso, a 185°C. Esta transformación consiste en la hidrólisis del arabinogalactano en los monosacáridos correspondientes, y su posterior hidrogenación, obteniendo arabitol y galactitol. (Kusema, Faba, Kumara, & Mäki-Arvela, 2012)

También, esos mismos autores realizaron una hidrogenación catalítica de la misma hemicelulosa, utilizando zeolitas tipo USY protónicas modificadas con Ru (1-5% en peso). Estas zeolitas, se pueden considerar el catalizador más utilizado en el mundo, utilizándose sobre todo en el proceso FCC (craqueo catalítico en lecho fluido) de ruptura de hidrocarburos, gracias a su actividad y selectividad. (Sandoval Díaz, 2011). Dio como resultado, también, galactitol y arabitol. Las condiciones de operación del reactor fueron de 31 bar y 185°C. (Murzin, Kusema, Murzina, Aho, & Tokarev, 2015)

Jyri-Pekka Mikkola et al. discuten el modelado de la cinética de hidrogenación de xilosa sobre Raney Níquel en soluciones acuosas. El catalizador Raney níquel es un catalizador sólido compuesto por granos muy finos de una aleación de níquel-aluminio, utilizado en numerosos procesos industriales. Los experimentos de hidrogenación se llevaron a cabo en un reactor discontinuo con unas presiones entre 40 y 70 bar, y un rango de temperaturas de 80-140°C. La relación de catalizador a xilosa era aproximadamente 5% en peso (referenciado a la xilosa). (Mikkola, Salmi, & Sjöholm, 1999)

Mithilesh Yadav et al. estudiaron la actividad del catalizador de Ru sobre una nueva clase de soporte de TiO<sub>2</sub>, modificado con NiO, en la hidrogenación catalítica de xilosa a xilitol. Para la obtención de resultados, se prepararon diversos catalizadores con diferentes composiciones de Ru y NiO. Se llevó a cabo el estudio de los efectos de la carga de Ru y NiO, la concentración de xilosa y la temperatura (100°C, 120°C y 140°C) a 50 bar. Aunque a una temperatura mayor de 140°C, la conversión de xilosa se incrementó hasta un nivel óptimo, la selectividad de xilosa a xilitol disminuyó debido a la formación de subproductos. (Yadav, Mishra, & Hwang, 2012)

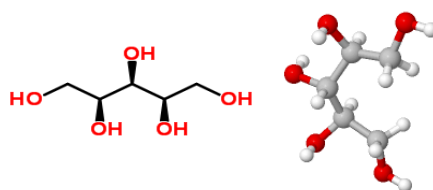
Se puede afirmar que la hidrogenación catalítica de moléculas de azúcar que aparecen naturalmente, es una ruta ambientalmente benigna para la producción, por ejemplo, de edulcorantes alternativos basados en fuentes renovables. (Sifontes Herrera, Rivero Mendoza, Leino, & Zolotukhin, 2016)

## 2.5. XILITOL Y ARABITOL COMO PRODUCTOS

Como una motivación adicional a la hora de producir este tipo de alcoholes a partir de azúcares, se puede destacar que son moléculas versátiles que han encontrado hueco en numerosas aplicaciones.

Dentro de los alcoholes generados, este trabajo se centra en dos de los obtenidos, siendo éstos el xilitol y el arabitol.

El Xilitol ( $C_5H_{12}O$ ) es un alcohol que se obtiene por hidrogenación catalítica de la xilosa. Es importante indicar que en este proceso también se pueden producir otros subproductos como la xilulosa, el arabitol o el furfural.



**Figura 4.** Estructura química de la molécula de xilitol.

El xilitol, en la actualidad, puede producirse comercialmente mediante la reducción química de la D-xilosa (como en el caso de este TFG). También, puede producirse con altos rendimientos a través de la D-xilosa reductasa, utilizando levaduras naturales o recombinantes (*Candida* o *Saccharomyces*). Se está buscando una forma de producción del mismo más eficiente y económica, debido a que las aplicaciones cada vez son mayores. (Zhu, Xu, Dai, Zhang, & Ying, 2010)

Se caracteriza por ser un edulcorante con buen sabor, utilizándose para ese fin desde la década de 1960. Debido a sus excelentes propiedades, se ha ganado la aceptación como edulcorante alternativo, reduciendo también el desarrollo de caries. (Mikkola, Salmi, & Sjöholm, 1999)

El xilitol puede utilizarse actualmente en alimentos, productos farmacéuticos y productos de salud bucal.

Las propiedades que tiene este alcohol de azúcar son las siguientes: (Yadav, Mishra, & Hwang, 2012)

- Buen sabor.
- Reduce la formación de caries y placa.
- Edulcorante similar al azúcar, con un tercio menos de calorías.
- Aumenta el flujo salival para ayudar a reparar el esmalte dental dañado.
- Combate la osteoporosis.



- Refuerza el sistema inmunitario.
- Reduce el riesgo de alergias.

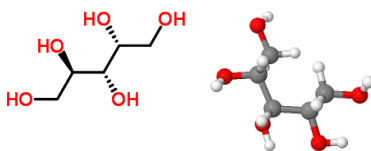
Por todas estas características, también se puede afirmar que el consumo de xilitol es muy útil en la dieta de las personas que sufren diabetes, por ejemplo. Esto se debe, a que el aumento de los niveles de glucosa e insulina en sangre en respuesta a la ingestión de glucosa, se reducen significativamente al usar xilitol.

Por ello, los productos en los cuales el xilitol reemplaza al azúcar pueden ser útiles para lograr una variedad más amplia de alternativas para las personas que sufren de esta enfermedad.

Actualmente, el mercado anual del xilitol se estima en alrededor de 320 millones de € a un precio aproximado de 5 €/kg. (Yadav, Mishra, & Hwang, 2012)

En los últimos años, la demanda del mismo ha aumentado enormemente, disminuyendo también su precio a medida que se va normalizando su uso comercial, lo que indica que es un mercado que se encuentra en pleno auge adquiriendo una gran importancia en las industrias químicas.

El D-Arabitol ( $C_5H_{12}O$ ) es un polialcohol formado a través de la hidrogenación de la arabinosa obtenida a partir de la hemicelulosa.



**Figura 5.** Estructura química de la molécula de D-Arabitol.

A partir de este compuesto, y también a partir de su enantiómero (xilitol), se pueden producir otros productos químicos como el ácido arabinoico, el ácido xilónico o el propilenglicol, muy utilizados en la industria química. Además, el D-arabitol puede emplearse como material de partida para la producción de xilitol, que tiene numerosas aplicaciones como se ha explicado anteriormente. (Yoshikawa, Habe, Morita, & Fukuoka, 2014)

El arabitol (conocido también como lixitol o arabinitol), es empleado frecuentemente en la industria de la alimentación como edulcorante bajo en calorías, aunque también puede utilizarse en análisis bioquímicos y en la industria farmacéutica, por ejemplo. Por ello, adquiere una gran importancia también el proceso de formación de D-arabitol. (Yoshikawa, Habe, Morita, & Fukuoka, 2014)

Esta sustancia, puede producirse por hidrogenación catalítica de la arabinosa, aunque también se puede obtener mediante reducción química de las lactonas del ácido arabinónico.

Por otro lado, también se puede producir mediante fermentación de glucosa y melaza con levaduras, acompañadas de otros polioles, especialmente glicerol. (Miasnikov & Povelainen, 2006)

## Capítulo 3. FUNDAMENTOS



### 3.1. CATALIZADORES

Un catalizador, es una sustancia que modifica la velocidad de una reacción química sin cambiar el producto final obtenido. Por ello, se busca una sustancia que acelere la formación de alcoholes a partir de azúcares.

La catálisis es un campo importante dentro de la química que reside en el seno de innumerables procesos químicos, tanto a escala de laboratorio como a nivel industrial.

Una gran variedad de productos tales como medicamentos, polímeros, fibras, combustibles, pinturas, lubricantes y otros productos químicos de alto valor añadido que son esenciales para el ser humano, no serían posibles en ausencia de catalizadores que se encuentran presentes en el 90% de los procesos químicos. (Pineda, 2013)

Las características de un catalizador, se podrían resumir en: (Ferrer, 2015)

- 1. Selectividad:** Capacidad que tienen estas sustancias de actuar en ciertas reacciones y de no hacerlo en otras distintas. Por ello, es de vital importancia seleccionar el catalizador adecuado para la reacción que se está estudiando.
- 2. Modificación de la velocidad de reacción:** Un catalizador favorece una reacción frente a otra, pero en ningún caso determina el equilibrio o el punto final de la misma, que vendrán siempre condicionados por cuestiones termodinámicas.
- 3. Actividad y respuesta:** La actividad de un catalizador no depende sólo de su constitución química, sino también de su estructura física o cristalina, ya que el catalizador puede perder su actividad por encima de ciertas temperaturas.
- 4. Disminución de la energía de activación:** Según la teoría del estado de transición, el catalizador reduce la barrera de energía potencial que se debe superar para que los reaccionantes pasen a productos. Esto provoca, a su vez, una disminución de energía de activación, que conlleva a un aumento de la velocidad de la reacción.

La dificultad de separar un catalizador homogéneo de los productos de reacción ha hecho que, a pesar de las ventajas que el empleo de éstos presenta y su gran variedad de aplicaciones, muchos de estos catalizadores homogéneos no hayan sido comercializados.

Para superar este problema, químicos e ingenieros han investigado una gran variedad de estrategias entre las que el uso de un catalizador heterogéneo aparece como la solución más lógica. Los catalizadores heterogéneos ofrecen oportunidades únicas como sustitutos de ácidos o bases tipo Brønsted o Lewis, además de la posibilidad de diseñar

un catalizador de acuerdo con los requerimientos de una reacción concreta. Presentan numerosas ventajas para la industria química entre las que cabe destacar:

1. Fácil separación del catalizador de los reactivos y/o productos, mediante un filtrado.
2. Menor producción de productos no deseados.
3. Menor contaminación del producto por el catalizador.
4. Fácil adaptabilidad a un proceso continuo.

Por todo ello, existe un gran interés en la industria química para reemplazar los catalizadores homogéneos por catalizadores heterogéneos. El principal objetivo de los catalizadores heterogéneos es la sustitución de catalizadores homogéneos perjudiciales para el medioambiente, corrosivos y difíciles de separar (véase ácidos minerales y de Lewis, bases orgánicas e inorgánicas y compuestos metálicos tóxicos). La necesidad de procesos más eficientes requiere de catalizadores con actividad catalítica y selectividad mejorada.

Las ventajas e inconvenientes de utilizar un catalizador homogéneo o heterogéneo aparecen en la Tabla 3: (Aguirre, 2015)

**Tabla 3.** Ventajas y desventajas de la catálisis homogénea y heterogénea.

	Catálisis Homogénea	Catálisis Heterogénea
<b>Separación de productos y catalizador</b>	Difícil	Fácil
<b>Recuperación del catalizador</b>	Muy caro	No Requiere
<b>Estabilidad térmica del catalizador</b>	Baja	Alta
<b>Tiempo de vida del catalizador</b>	Variable	Alto
<b>Actividad</b>	Alta	Variable
<b>Selectividad</b>	Alta	Media-baja
<b>Sensibilidad al envenenamiento</b>	Baja	Alta
<b>Problemas de difusión</b>	Bajos	Importantes

Los catalizadores pueden ser sólidos o líquidos, pudiendo los primeros perder actividad catalítica con el paso del tiempo. (Ferrer, 2015)

A la hora de seleccionar o diseñar un catalizador para que funcione correctamente en una determinada reacción química, se deben de tener en cuenta multitud de variables, optimizando las propiedades físicas, químicas y catalíticas del mismo, como aparece en la Figura 6: (Introducción a la Catálisis Heterogénea, 2009)



**Figura 6.** Propiedades a tener en cuenta para la elección o diseño de un catalizador.

Por todas estas razones, el catalizador que se ha utilizado es heterogéneo, debido a que es necesario separarlo del producto una vez que se han llevado a cabo las reacciones.

Es importante indicar, que un catalizador no puede provocar una reacción que no se pueda realizar por sí misma, siendo por ello sustancias específicas que provocan que la energía de activación sea menor. (P. W. Atkins, 1999)

La energía de activación, es la energía que necesita un sistema para poder iniciar un determinado proceso. Suele utilizarse para denominar la energía mínima necesaria para que se produzca una reacción química determinada. Cuanto más baja sea la energía de activación, mayor será la velocidad de la misma. Cada sustancia precisa de una cierta energía de activación, debido a que tienen que vencer las fuerzas de repulsión, vibración o traslación que existen entre los átomos de las moléculas que van a reaccionar. (Químicas, 2015)

La ecuación de Arrhenius proporciona la base cuantitativa de la relación entre la energía de activación y la velocidad a la que se produce la reacción (Ecuación 1).

$$k = A \cdot e^{-\frac{E_a}{RT}}$$

**Ecuación 1**

Donde:

**k:** Constante de velocidad de la reacción.

**A:** Factor de frecuencia o factor preexponencial.

**$E_a$ :** Energía de activación de la reacción, normalmente dada en  $\frac{J}{mol}$

**R:** Constante de los gases ideales. Normalmente  $8,31 \frac{J}{mol \cdot K}$

**T:** Temperatura en Kelvin.

La Ecuación 1 nos indica que la constante de velocidad (k), y por tanto la velocidad de la reacción, son directamente proporcionales a la frecuencia de las colisiones. También aumentará al subir la temperatura y al disminuir la energía de activación.

Normalmente, la ecuación de Arrhenius se suele utilizar linealizada (Ecuación 2):

$$\ln k = \frac{-E_a}{R} \frac{1}{T} + \ln A$$

**Ecuación 2**

Es importante destacar que la energía de activación y la velocidad de reacción se encuentran relacionadas: (EcuRed, 2017)

**Energía de activación ↑↑ ---> Velocidad de reacción ↓↓**

**Energía de activación ↓↓ ---> Velocidad de reacción ↑↑**

Por lo tanto, si se desea aumentar la velocidad de una reacción, se puede lograr esto bajando su energía de activación, mediante la acción de un catalizador.

En la Figura 7 se observa el gráfico de desarrollo de una reacción exotérmica (desprende energía) sin catalizador. Se muestra cómo, para que tenga lugar la reacción, es preciso aportarle primero una cierta Energía de Activación ( $E_a$ ) para alcanzar el punto de complejo activado, a partir del cual se desarrolla la reacción espontáneamente, transformando los reactivos en productos. (Químicas, 2015)



**Figura 7.** Desarrollo de una reacción exotérmica sin catalizador.



Por otro lado, en la Figura 8 se observa cómo disminuye la  $E_a$  mediante la presencia de un catalizador. La presencia del mismo, hace que sea más fácil alcanzar el punto de complejo activado, haciendo que la reacción sea espontánea antes. (Químicas, 2015)



**Figura 8.** Desarrollo de una reacción exotérmica con catalizador.

Es importante indicar, que, en el punto de complejo activado, se cumplen las siguientes condiciones: (Químicas, 2015)

- Se ha suministrado la energía suficiente para romper los enlaces entre los átomos de las moléculas que reaccionan, empezándose a unir para formar los productos finales.
- La energía cinética de las moléculas es suficiente para que las colisiones entre ellas se produzcan con la fuerza suficiente para vencer las fuerzas de repulsión.

Según la IUPAC (Unión Internacional de Química Pura y Aplicada), los materiales porosos se clasifican según el diámetro de poro de la siguiente forma: (Pineda, 2013)

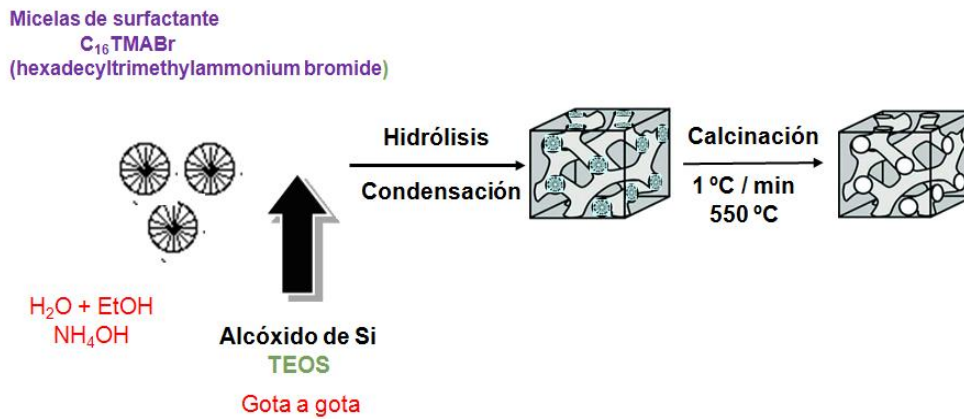
- Materiales microporosos: tamaño de poro  $< 2$  nm, como puede ser el carbono.
- Materiales mesoporosos: tamaño de poro se encuentra entre 2 nm y 50 nm (sílice o MCM-48).
- Materiales macroporosos: tamaño de poro  $> 50$  nm.

Se han utilizado dos catalizadores mesoporosos distintos para la obtención de productos mediante las etapas de hidrólisis e hidrogenación:

- Al-MCM-48.
- Ru/Al-MCM-48.

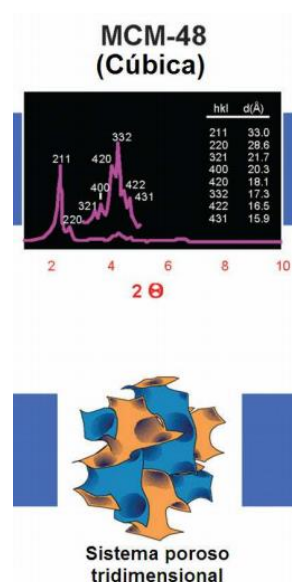
Cabe destacar que el catalizador utilizado se selecciona en función de la alimentación con la que se trabaja y del producto que se pretende obtener.

La MCM-48 es una sílice mesoporosa ordenada de la familia M41S, que la empresa Mobil Research and Development Corporation desarrolló por primera vez en 1992. Desde entonces estos materiales se han utilizado en numerosas aplicaciones como tamices moleculares mesoporosos. Se prepara mediante un proceso sol-gel alrededor del ensamblado micelar y posterior eliminación del surfactante (Figura 9).



**Figura 9.** Proceso de síntesis de la MCM-48.

La fase cúbica (MCM-48) es la más compleja, constando de dos sistemas de canales tridimensionales que se acomodan uno con otro conformando una simetría cúbica (Figura 10). El tamaño de los poros que posee, es un factor fundamental en el caso de las reacciones de este trabajo, ya que los mesoporosos permiten el acceso de oligómeros (con un cierto tamaño molecular) al interior de los poros, a diferencia de los soportes zeolíticos. (Pineda, 2013)



**Figura 10. Figura superior.** Diagrama de difracción de Rayos X de la MCM-48.

**Figura inferior.** Estructura de la MCM-48.

Los sólidos mesoporosos ordenados como el utilizado (MCM-48), tienen grandes potenciales como soportes de catalizadores. Éstos, poseen grandes ventajas sobre los soportes catalíticos convencionales, teniendo, por ejemplo, un área superficial alta que se encuentra alrededor de los 1000 m<sup>2</sup>/g que puede proporcionar una mejor distribución de componentes metálicos activos y más puntos de adsorción. (Huang, Xiao, Huang, & Eic, 2008)

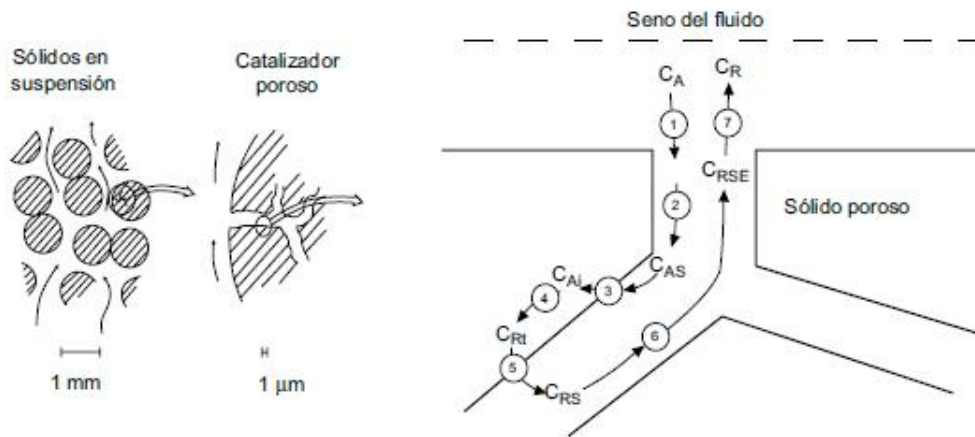
Los grupos silanol en superficie de la MCM-48 dotan a este soporte de una cierta acidez de Brønsted. En el caso del Al-MCM-48, la incorporación de aluminio en el soporte le confiere mayor acidez, estabilidad y resistencia. La incorporación de Al en materiales MCM-48, genera centros ácidos (dotándole de acidez al mismo) y acelera y promueve las reacciones de hidrólisis. Se forma así, el catalizador Al-MCM-48, exhibiendo una mayor capacidad de adsorción. (Huang, Xiao, Huang, & Eic, 2008)

Por otro lado, se trabaja con Rutenio como elemento metálico en el mismo, que favorece la hidrogenación. Al depositar el Rutenio varía un poco la acidez, pero no en valores a tener en cuenta. Es un elemento fundamental, debido a que, sin él, no se produciría la reacción que se está buscando. El Ru con el que se está trabajando, tiene un tamaño de cristal de 1,9 nm, penetrando bien en el soporte utilizado. Una vez que se tiene el Ru depositado, y el Al incorporado a la red, se forma el Ru/Al-MCM-48, utilizado en el resto de reacciones analizadas.

El tamaño del elemento metálico que se ha seleccionado, es importante que se encuentre entre los valores establecidos debido a que podría ocurrir que fuese mucho más grande que los poros del soporte, y no pudiese depositarse en los mismos.

Es fundamental la importancia de la mesoporosidad para que moléculas grandes como aquellas derivadas de hemicelulosas, puedan difundir a través de los canales del catalizador, llevándose a cabo las reacciones que se pretende.

En la Figura 11 se puede observar el mecanismo de reacción heterogénea que se lleva a cabo en el proceso: (Del Real Olivera, Prieto García, Santos López, Román Gutiérrez, & Gordillo Martínez, 2009)



**Figura 11.** Esquema del mecanismo de reacción heterogénea.

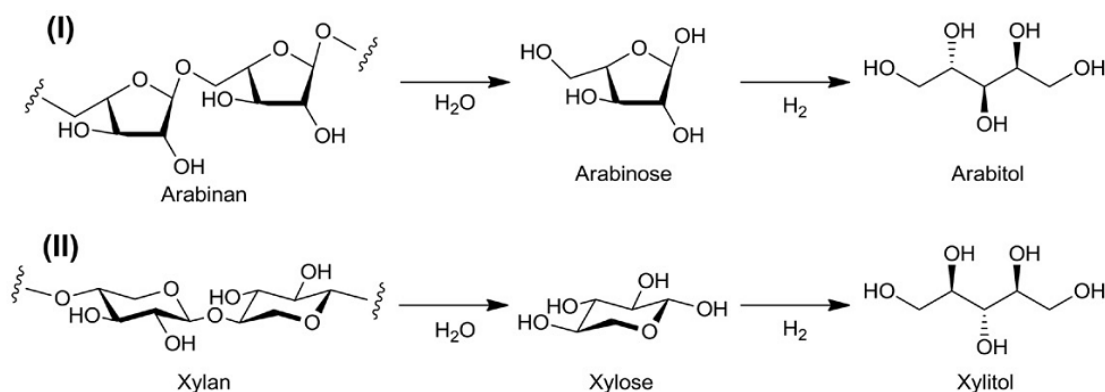
Para una reacción tipo  $A \rightarrow R$ , el proceso que se lleva a cabo es el siguiente: (Del Real Olivera, Prieto García, Santos López, Román Gutiérrez, & Gordillo Martínez, 2009)

1. Transporte del reactivo A desde el seno del líquido a la superficie catalítica, **CA**.
2. Transporte difusivo en la intrapartícula a través de los poros catalíticos, **CAS**.
3. Adsorción del reactivo A en los sitios activos del catalizador, **CAi**.
4. Reacción superficial heterogénea de A para la conversión en productos, **Crt**.
5. Desorción de los productos de los sitios activos, **CRS**.
6. Difusión del producto a través de los poros, **CRSE**.
7. Transporte del producto de la superficie catalítica al seno del líquido, **CR**.

Por ello, trabajando con este catalizador se pueden llevar a cabo las reacciones de hidrólisis e hidrogenación que se pretenden. Los oligosacáridos, tras reaccionar con el catalizador (en este caso los centros ácidos de los grupos silanol y los átomos de Al tricoordinados que favorecen la hidrólisis), formarán azúcares monoméricos como pueden ser la xilosa o la arabinosa (hemicelulosa), o la glucosa (celulosa). Por otro lado, el Ru (ayudado por el  $H_2$  introducido en el sistema) favorece la reacción de hidrogenación, formando alcoholes como sorbitol, xilitol o arabitól.

### 3.2. CONDICIONES DE REACCIÓN

Las reacciones que se han estudiado en este TFG son de hidrólisis y de hidrogenación (Figura 12), partiendo de alimentaciones de monómeros y oligosacáridos derivados de la fracción hemicelulósica de madera de Catalpa.



**Figura 12.** Hidrogenación hidrolítica de xilanos y arabinanos.

En ellas, existen tres variables fundamentales que van a modificar el rendimiento y la conversión producidas durante las mismas, utilizando el mismo montaje experimental. Éstas variables son:

- Temperatura. **(T)**
- Presión. **(P)**
- Tiempo. **(t)**

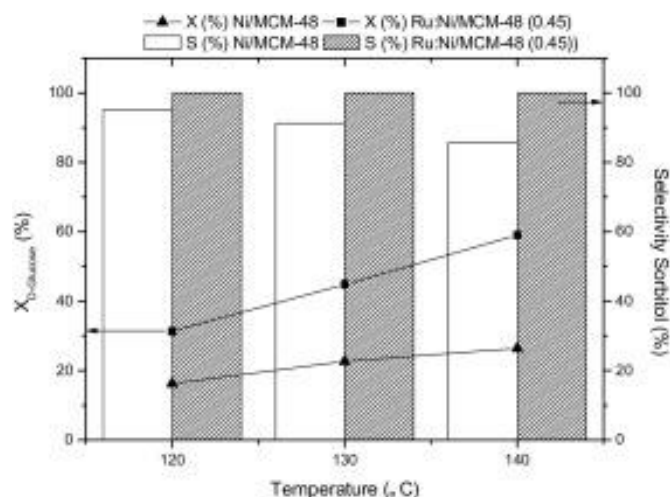
En todas las reacciones llevadas a cabo se han modificado estos tres parámetros libremente, manteniendo otros constantes, como, por ejemplo, las revoluciones del agitador (1400 rpm).

Se deben ir modificando las variables en función de lo que se desea obtener. Por ello, si se trabaja a una baja temperatura, se pueden utilizar tiempos más largos para intentar obtener los alcoholes que se pretenden. Por otro lado, si se opera con una temperatura elevada, como la velocidad de formación de alcoholes será mayor, el tiempo seleccionado será menor para evitar la degradación de los alcoholes.

La temperatura (T) es un factor fundamental en el desarrollo y evolución de una reacción de hidrólisis o de hidrogenación. Cuando se opera a elevadas temperaturas, una mayor cantidad de oligosacáridos se rompen, lo que conlleva a, en la reacción con  $\text{H}_2$ , una mayor cantidad de alcoholes formados, que es el objetivo propuesto. El principal problema que aparece al trabajar a temperaturas altas, es la posibilidad de degradación de los azúcares durante el proceso, impidiendo su conversión a alcoholes. Por ello, la temperatura de operación se encuentra en torno a los  $180^\circ\text{C}$ . Si esta variable es

pequeña, no se producirá ningún cambio en la alimentación introducida, debido a que se necesita de una temperatura mínima para que comience a romper los oligosacáridos.

Alberto Romero et al. estudiaron el efecto de la temperatura en la conversión de la D-Glucosa a sorbitol, como se muestra en la Figura 13. (Romero, Nieto-Márquez, & Alonso, 2017)



**Figura 13.** Efecto del tiempo de reacción (120°C, 130°C, 140°C) en la conversión y selectividad de la D-Glucosa a sorbitol.

Otro factor que se modifica durante el proceso es la presión (P). En la etapa de hidrólisis, la presión apenas modifica el proceso debido a que el N<sub>2</sub> es inerte y no reacciona, aunque se trabaja a una presión determinada para favorecer la etapa. Durante el proceso de hidrogenación, la presión introducida de H<sub>2</sub> es fundamental para la conversión de los azúcares, debido a que, a mayor presión en el mismo, mayor concentración de hidrógeno en la fase líquida, que favorece el proceso de hidrogenación. Cabe destacar que las hidrogenaciones se realizan con exceso de hidrógeno. Por otro lado, trabajar a presiones altas puede afectar a la seguridad del sistema, pero se encuentra bien controlado mediante dispositivos específicos, como el disco de ruptura y válvulas de seguridad.

Por último, el tiempo (t) es una variable que se encuentra relacionada con la temperatura. Como se ha indicado antes, la temperatura va a marcar la velocidad a la cual se lleva a cabo la reacción. Trabajando a elevadas temperaturas, se tendrán velocidades altas, por lo que se trabajará a tiempos cortos debido a que la conversión del 100% se obtendrá pronto. Por otro lado, a temperaturas más bajas, como la velocidad de la reacción es menor, el tiempo de reacción aumentará para lograr una conversión mayor.

También, se debe de tener en cuenta que para que se realice la hidrogenación, se necesita de un tiempo determinado para que la reacción se produzca correctamente (en

este caso la formación de alcoholes a partir de monosacáridos). Por otro lado, se debe ser cauto con el mismo, debido a que, si proponemos un tiempo demasiado elevado, se puede producir la degradación de los alcoholes que se están buscando como producto final, pudiéndose degradar el sorbitol o el arabitol en alcanos lineales de cadena corta, como hexanos o pentanos, respectivamente.

Respecto a la agitación y al tamaño de partículas, se hizo un estudio previo dentro de la misma línea de investigación, para determinar que a partir de 1400 rpm la transferencia de materia no es limitante para la agitación, mientras que para tamaños de partícula mayores a 70  $\mu\text{m}$ , la difusión de  $\text{H}_2$  no está limitada.





## Capítulo 4. MATERIALES Y MÉTODOS



#### 4.1. CARACTERIZACIÓN DE LA BIOMASA EXPERIMENTAL Y OBTENCIÓN DEL EXTRACTO A HIDROGENAR

Una gran parte de nuestro estudio se ha centrado en estudiar el comportamiento de Ru/Al-MCM-48 en la hidrogenación de azúcares y mezclas de azúcares, y son estos compuestos puros y sus mezclas los que forman las alimentaciones del reactor de hidrogenación. Sin embargo, la finalidad de nuestro estudio es estudiar la hidrogenación de una fracción rica en hemicelulosas derivada de una extracción con agua caliente presurizada de madera de Catalpa. Por ello, se debe de conocer cómo se ha obtenido la alimentación real de la que se va a partir posteriormente en el estudio de la hidrogenación de la fracción hemicelulósica.

Este proceso se lleva a cabo en una planta piloto multilecho para fraccionamiento de biomasa, donde se extraen y fraccionan en continuo compuestos solubles de la biomasa residual y no residual, utilizando como solvente agua. Para la obtención del producto con el que se va a trabajar más adelante, se parte de un sólido (madera de Catalpa), que posee un 14% de humedad.

En la Tabla 4 aparece la composición de la materia seca que se utiliza en esta planta piloto:

**Tabla 4.** Alimentación a la planta piloto multilecho para fraccionamiento de biomasa.

Extractivos	Lignina	Ceniza	Azúcares			Ácido galacturónico	Ácido acético
			Glucosa	Xilosa	Arabinosa		
20,81%	16,17%	0,27%	32,34%	16,66%	2,28%	6,78%	4,70%

La biomasa lignocelulósica se puede fraccionar en celulosa, hemicelulosa y lignina, a partir de los cuales se van a obtener los alcoholes que se tienen como objetivo en este estudio.

La planta piloto con la que se opera, permite una extracción de biopolímeros y biocompuestos a partir de biomasa, utilizando agua subcrítica de manera continua (hasta 16 bar y 200°C). Una de las principales ventajas del proceso, es el ahorro energético que se tiene gracias al sistema de intercambio de calor instalado.

Además, permite trabajar con diferentes tipos de biomasa, sin limitaciones debidas al tamaño de partículas, por ejemplo.

La planta piloto multilecho, comprende cinco reactores en disposición vertical intercomunicados entre sí por un circuito de tuberías, con una entrada de fluido líquido por la parte superior del mismo y una salida por la parte inferior. En los extremos inferiores, se encuentran unas válvulas que permiten la apertura o cierre de los reactores, siendo posible su aislamiento de forma independiente.

Las tuberías que forman parte del proceso, pueden conectar la salida de cada reactor con la entrada del siguiente, aunque también tiene un mecanismo que permite saltar alguno de ellos para favorecer el proceso continuo, obteniendo finalmente el producto.

Los reactores, están revestidos homogéneamente mediante unas resistencias que permiten su calentamiento.

La presión en el interior de los reactores se controla gracias a válvulas de contrapresión, que se encuentran situadas en las tuberías del mismo.

La planta dispone también de dos moto-bombas. La primera de ellas, se utiliza al principio del proceso, y es la que permite el llenado de los reactores, alimentándose de un fluido líquido contenido dentro de un depósito. La segunda, impulsa el fluido líquido a través del circuito de tuberías para llevar a cabo el proceso de extracción y fraccionamiento en continuo. Por lo tanto, las dos moto-bombas se alimentan de fluidos contenidos en distintos depósitos.

Inicialmente se carga la biomasa de la que se parte en unos cartuchos que se insertan en caliente en cada reactor. En este momento, la válvula se cierra, manteniéndose en este estado hasta que la extracción finalice. El fluido líquido atraviesa el cartucho con la válvula de salida cerrada, comprobando que el fluido no se escapa por el circuito de tuberías. El reactor se calienta de manera homogénea hasta una temperatura previamente fijada (170°C en este caso).

Una vez que se ha terminado, se procede a la apertura de la válvula, cayendo el cartucho por gravedad. De esta manera, la biomasa puede ser descargada de manera sencilla y rápida evitando paradas en la planta piloto. Este hecho, permite que otro cartucho pueda ser cargado de manera inmediata, reiniciando el proceso de extracción con el nuevo cartucho montado.

El flujo de líquido puede ir al siguiente reactor, o puede ser desviado con el fin de excluir al mismo.

Después de salir del último reactor, la corriente de líquido caliente transfiere calor al líquido de alimentación del sistema.

Por ello, se puede resumir el proceso en estos pasos:

- Se calienta el fluido líquido en los intercambiadores de calor y en el calentador principal.
- Se introduce el cartucho dentro del reactor en el que se quiere operar.
- La válvula de entrada del fluido líquido al reactor se abre, entrando por la parte superior del mismo.

- Se calienta el reactor hasta una temperatura determinada.
- Se extrae el fluido líquido del interior de los reactores.
- El cartucho del interior del reactor se cambia, introduciendo uno nuevo.
- Se analiza el fluido extraído, tras pasar por intercambiadores de calor.
- El fluido extraído se recoge y se comienza de nuevo el proceso.

Uno de los aspectos más importantes de la planta, es el ajuste de la temperatura del agua y el control de energía. Por ello, antes de entrar a los reactores, el agua pasa por un calentador principal que permite aumentar su temperatura. Dependiendo del compuesto que se desea extraer de los reactores, se utilizarán diferentes temperaturas.

Todo el sistema está aislado térmicamente con una capa de lana de vidrio cubierta con papel de aluminio. Esto produce un ahorro total de calor del 85%.

El producto final de la planta, que es la alimentación que se va a utilizar en las hidrogenaciones posteriores, posee la composición que aparece en la Tabla 5.

**Tabla 5.** Producto obtenido de la planta piloto tras la hidrólisis ácida.

D-Xilosa		D-Arabinosa		D-Glucosa		Ácido acético	
Oligom.	Monom.	Oligom.	Monom.	Oligom.	Monom.	Ligado	Libre
48,03%	6,87%	4,75%	8,85%	5,14%	3,46%	12,84%	10,06%

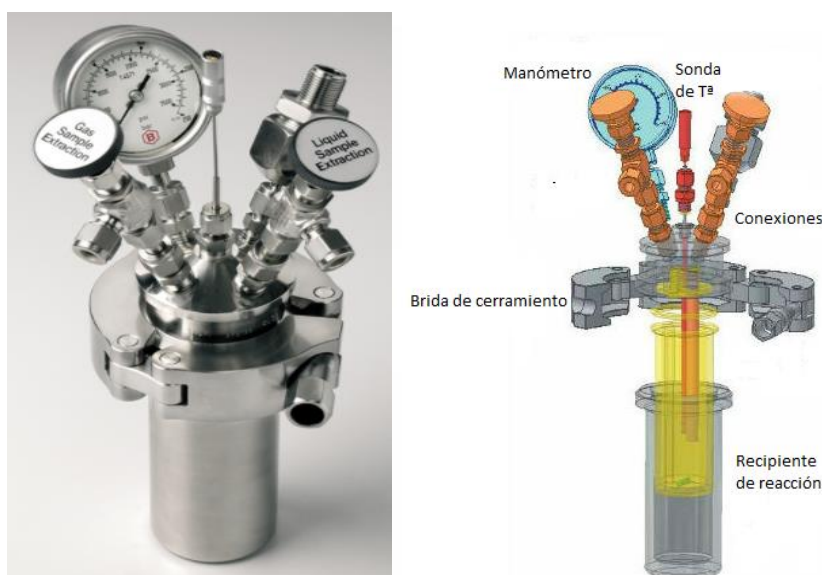
Como se recoge en esta tabla, un porcentaje muy elevado de azúcares (especialmente xilosa), se encuentra en forma oligomérica, indicando que la hidrólisis no ha sido completa en el proceso de extracción. El peso molecular medio de los oligómeros es de 1400 Da.

## 4.2. HIDRÓLISIS E HIDROGENACIONES

Para las pruebas de hidrólisis e hidrogenación catalítica realizadas en este trabajo se ha utilizado un montaje experimental, donde los elementos principales del mismo son:

- Reactor de alta presión de acero inoxidable con un volumen interno de 150 mL (Berghof BR-100), con agitación magnética. La temperatura se mide en el interior del reactor gracias a un termopar, y la presión se puede observar mediante un manómetro. Posee un cierre con una brida metálica y un disco de ruptura que evita una presión excesiva en el interior del reactor. (Berghof, 2017)
- Controlador PID que indica y controla la temperatura a la que se encuentra el interior del reactor, introduciendo un valor de “set point”, que dota a la placa calefactora de la potencia suficiente como para mantenerla estable.
- Líneas de alimentación de nitrógeno e hidrógeno.
- Válvulas de aguja (reguladoras), que permiten purgar y ventear todas las líneas de alimentación y el reactor.

En la Figura 14 se puede observar el reactor utilizado y un esquema del mismo: (Analytical Solutions, 2017)



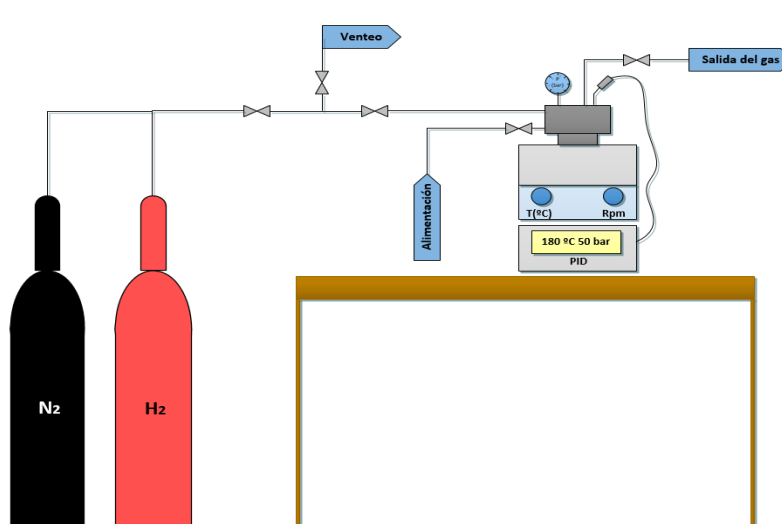
**Figura 14.** Imagen y esquema del reactor utilizado.

Aparte del reactor y de todo lo referente al mismo, también se dispone de los siguientes elementos para el buen funcionamiento de la planta:

- Campana extractora que permite la evacuación de los gases que abandonan el reactor.

- Bomba que nos proporciona una opción de alimentación al reactor (la otra opción es cargarlo directamente antes de su calentamiento).
- Software asociado a los controladores de gases, que permite variar el flujo del nitrógeno e hidrógeno empleado.

En la Figura 15 se recoge un esquema básico de la instalación:



**Figura 15.** Esquema de la instalación experimental.

El nitrógeno y el hidrógeno utilizados son suministrados por Carburos Metálicos (España), teniendo una pureza de 99,99%, fundamentales para inertizar las vías de alimentación y el reactor y para llevar a cabo las reacciones de hidrólisis e hidrogenación.

Todas las pruebas realizadas durante el estudio se encuentran en el apéndice 5.

Dichas pruebas poseen una nomenclatura determinada, comenzando todas ellas por las letras JCG. A continuación, se tienen otros tres números que indican el tipo de prueba que se ha realizado (hidrólisis, hidrogenación, variación de la ratio para modificar la cantidad de catalizador utilizado, cambio de alimentación...). Por último, se dispone de dos números más que muestran el número de pruebas realizadas para cada tipo de los que se ha explicado anteriormente.

#### 4.2.1 Experimentos de hidrólisis

En un experimento de hidrólisis típico (JCG-001-3, por ejemplo), el reactor se carga con 100 mL de nuestra alimentación (en ese caso, extracto de madera de Catalpa (170°C)), previamente filtrada, junto con 0,203 g del catalizador (en este caso, se ha utilizado Al-MCM-48, pero también se realizan pruebas con Ru/Al-MCM-48).

Una vez que se cierra el reactor, es importante que se purgue sucesivamente y se ventile con nitrógeno a temperatura ambiente, eliminando el aire del interior del mismo.

Una vez que se encuentra bajo una atmósfera de N<sub>2</sub> únicamente, el reactor se calienta a una presión de 20 bar hasta la temperatura deseada (en nuestro caso, 180°C), manteniéndose constantes todos estos parámetros durante el tiempo que dure la reacción. La presión, durante el calentamiento, puede aumentar levemente, aunque no sobrepasa en ningún momento los 25 bar. El tiempo de reacción de hidrólisis se ha mantenido constante en 15 minutos, considerando t=0 cuando la mezcla alcanzó los 180°C.

Por otro lado, es importante observar que el valor de la temperatura a la que se encuentra el sistema se encuentra en un valor lo más cercano posible al del set point (en nuestro caso, 180°C)

La velocidad de agitación se mantiene en un valor de 1400 rpm durante todo nuestro proceso de hidrólisis.

Alcanzado el tiempo de reacción final, el reactor y su contenido se enfrían con agua fría, descendiendo la temperatura bruscamente para detener la reacción de manera inminente.

Cuando la temperatura del interior del reactor, se encuentra por debajo de los 50°C, se abren las válvulas de venteo de los gases del interior suavemente.

Una vez enfriado el mismo, el producto será filtrado y almacenado en cámara fría para su posterior análisis. También, se congelan 10 mL de muestra para evitar su degradación, debido a que pueden requerirse para posteriores análisis más adelante.

La conversión de cualquiera de los azúcares con los que se trabaja se calcula de la siguiente forma:

$$\text{Conversión azúcar} = \frac{[\text{azúcar}]_0 - [\text{azúcar}]_f}{[\text{azúcar}]_0} \cdot 100$$

Se pretende conocer mediante este tipo de reacciones cómo afecta la hidrólisis al extracto con el que se está trabajando. Por ello, se llevan a cabo 3 pruebas de hidrólisis, que son las siguientes:

- Extracto de madera de Catalpa sin utilizar catalizador, con rampa de calentamiento en el interior del reactor hasta la temperatura de set point (180°C) durante 15 minutos en presencia de N<sub>2</sub>. (JCG-001-2)



- Extracto de madera de Catalpa con catalizador Al-MCM-48, con rampa de calentamiento en el interior del reactor hasta la temperatura de set point (180°C) durante 15 minutos en presencia de N<sub>2</sub>. (JCG-001-3)
- Extracto de madera de Catalpa con catalizador Ru/Al-MCM-48, con rampa de calentamiento en el interior del reactor hasta la temperatura de set point (180°C) durante 15 minutos en presencia de N<sub>2</sub>. (JCG-001-4)

Una vez realizada la etapa de hidrólisis, se desea conocer si la alimentación introducida ha sufrido algún tipo de degradación durante la rampa de calentamiento o si ha cambiado su estructura.

Lo ideal, sería que no afectase demasiado al hidrolizado utilizado, o que afectase de tal manera que separase sus componentes para una mejor etapa de hidrogenación posterior, que nos permita formar los azúcares que se están buscando.

Se han llevado a cabo experimentos de hidrólisis sin utilizar catalizador, y utilizando como catalizador Al-MCM-48 y Ru/Al-MCM-48.

#### 4.2.2. Experimentos de hidrogenación

Por otro lado, se explicará cómo se lleva a cabo un experimento de hidrogenación típico. (JCG-004-1, por ejemplo).

La preparación de alcoholes de azúcares requiere de la presencia de un catalizador sólido heterogéneo (en nuestro caso Ru/Al-MCM-48), utilizándose hidrógeno gas como fuente hidrogenante, una vez que nuestra alimentación haya alcanzado la temperatura requerida en el reactor. Es fundamental encontrarse en exceso de hidrógeno para que se lleve a cabo la reacción de manera correcta.

La cantidad de catalizador utilizado proviene de un cálculo previamente realizado, mientras que la presión de hidrógeno en el interior del reactor será uno de los parámetros a modificar. En vez de hidrógeno molecular, otra opción para reducir el grupo carbonilo en la molécula de azúcar sería utilizar un agente químico (como el borohidruro de sodio), pero esta opción no se lleva a cabo en nuestro trabajo. (Fleming, 2013)

La reacción que se lleva a cabo en el reactor es trifásica, debido a que se tiene el extracto utilizado en fase líquida, el catalizador que se encuentra en fase sólida, y el hidrógeno en forma de gas.

El reactor en el cual se lleva a cabo la hidrogenación de los azúcares de los que se dispone, es un Berghof BR-100, con agitación magnética y conectado a un PID que permite el control de la temperatura en el interior del mismo.

Las condiciones de operación, variarán en función del tipo de experiencia que se esté realizando, obteniendo una mayor o menor conversión en función de estos parámetros.

- Presión de operación: se encuentra entre los 20 bar y los 50 bar.
- Temperatura de operación: las pruebas realizadas oscilan entre una temperatura de 80°C, y una temperatura de 180°C.
- Tiempo de reacción: con el objetivo de estudiar la cinética de las reacciones, se trabajará con tiempos más cortos (1'), y tiempos más largos (90').

La tecnología referente a este tipo de reactores, se considera suficiente y eficaz para la producción de productos químicos a granel, por ejemplo.

La hidrogenación catalítica se llevó a cabo en el montaje experimental descrito anteriormente. Partiendo de una alimentación de 100 mL del mismo tipo que para la hidrólisis, e introduciendo en el reactor 0,474 g de catalizador (Ru/Al-MCM-48), se inertiza de la misma manera que la realizada en la hidrólisis y se llena el reactor de nitrógeno.

Una vez realizado este paso, se calentó el montaje hasta una temperatura de 120°C, con una presión de 20 bar, usando una velocidad de agitación de 1400 rpm.

Cabe destacar, que antes de que se lleve a cabo la reacción, el catalizador fue activado mediante una reducción manteniendo el mismo con un flujo continuo de H<sub>2</sub> durante 1 hora a una temperatura de 150°C y a una presión de 20 bar. Estas condiciones han sido optimizadas previamente con el perfil de reducción utilizando la técnica de TPR-H<sub>2</sub> (Reducción a temperatura programada).

Una vez alcanzado el punto de consigna, se extrae el N<sub>2</sub> del interior del reactor, sustituyéndolo por H<sub>2</sub>, hasta una presión de 50 bar. Consideramos como t=0 cuando el H<sub>2</sub> comienza a entrar a nuestro reactor. En este caso, el tiempo de la hidrogenación fue de 5 minutos, aunque en otras pruebas este valor varía en función de lo que estemos buscando.

Cuando finaliza el tiempo fijado, el reactor es enfriado de nuevo con agua fría hasta que lleguemos a temperatura ambiente.

Filtramos el producto, y le almacenamos para su análisis posterior.

La selectividad y el rendimiento de cada uno de los alcoholes, se realizará de la siguiente manera, tal y como indica la ecuación 3, 4 y 5:

$$\mathbf{Conversion} (\%) = \frac{[azúcar]_0 - [azúcar]_f}{[azúcar]_0} \cdot 100$$

**Ecuación 3**

$$\mathbf{Rendimiento} (\eta)(\%) = \frac{[alcohol]_f}{[azúcar]_0} \cdot 100$$

**Ecuación 4**

$$\mathbf{Selectividad} (\%) = \frac{[alcohol]_f}{[azúcar]_0 - [azúcar]_f} \cdot 100$$

$$\frac{\mathbf{Rendimiento}}{\mathbf{Conversion}} = \frac{\frac{[alcohol]_f}{[azúcar]_0}}{\frac{[azúcar]_0 - [azúcar]_f}{[azúcar]_0}} = \mathbf{Selectividad}$$

**Ecuación 5**

### 4.3. ANÁLISIS DE PRODUCTOS

Los productos obtenidos tras las reacciones llevadas a cabo en el reactor, serán analizados mediante dos métodos para conocer las transformaciones producidas en las condiciones previamente fijadas.

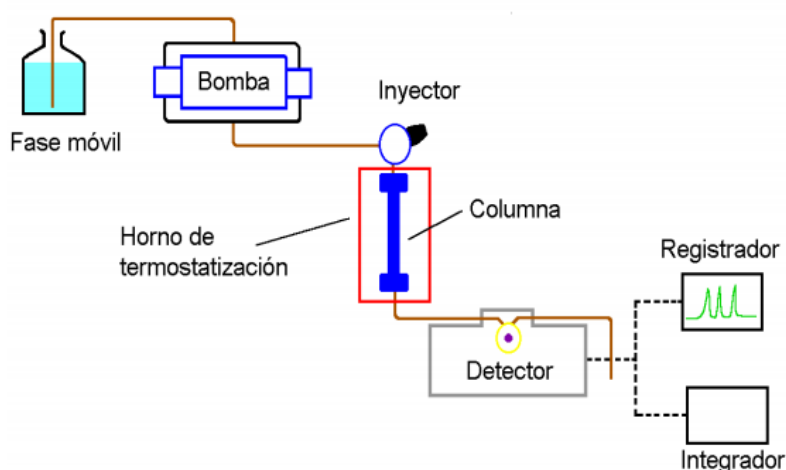
Las dos pruebas que se realizan a los productos obtenidos son: HPLC y TOC.

El HPLC (o cromatografía líquida de alto rendimiento) permite separar, identificar y cuantificar los componentes disueltos en un disolvente líquido con una alta resolución analítica. En nuestro caso, queremos conocer la cantidad de azúcares que se han transformado en alcoholes durante la hidrogenación. Este método, tiene la capacidad de separar compuestos que están presentes en cualquier muestra que puede disolverse en un líquido en concentraciones tan bajas como partes por trillón.

Para realizar una cromatografía líquida, es necesario disponer de las dos fases implicadas en el proceso y de la columna. Debido al pequeño diámetro de las partículas de fase estacionaria que se utilizan, el cromatógrafo está constituido por algunos elementos fundamentales, como pueden ser:

- Dispositivo de suministro de eluyentes. (Bomba y mezclador de eluyentes)
- Dispositivo de inyección.
- Conducciones y conexiones.
- Detector y registrador.
- Columna.

Los componentes básicos de una columna se muestran en la Figura 16: (Cromatografía Líquida de Alta Eficacia, 2017)



**Figura 16.** Esquema de un cromatógrafo de líquidos.

La columna, es el elemento fundamental de un cromatógrafo de líquidos. Es donde tiene lugar la separación, por lo que es de vital importancia una correcta elección de la misma. Las características que influyen sobre su capacidad de separación son: (Cromatografía Líquida de Alta Eficacia, 2017)

- **Diámetro interno:** La elección se realiza en función de la cantidad de muestra a separar. El gran inconveniente de las columnas de gran diámetro radica en su elevado consumo de disolvente.
- **Longitud:** La eficacia de una columna depende de la longitud de la misma. También, a mayor longitud, mayor presión tendrá que soportar el sistema, por lo que se debe elegir una longitud adecuada.
- **Conexiones:** Es una unión reductora de compresión radial, que permite una perfecta unión del tubo de la columna con el capilar que la conecta a los restantes dispositivos del cromatógrafo.
- **Relleno:** Todas las separaciones cromatográficas tienen lugar sobre la fase estacionaria, que se encuentran constituidas, generalmente por partículas de materiales rígidos o semirrígidos, y en la gran mayoría de los rellenos se suele utilizar sílice.
- **Tamaño de partícula del relleno:** Juega un papel importantísimo en la calidad y eficacia de la columna. Los mayores avances se han realizado al reducir los tamaños de las partículas del relleno a unos niveles en los que se consiguen grandes incrementos en la eficacia de la columna sin que su presión sea demasiado elevada.

Por ello, la elección del sistema cromatográfico debe realizarse en función de la naturaleza de las sustancias a separar.

El tiempo de retención de la muestra variará dependiendo de la interacción entre la fase estacionaria, las moléculas que se analizan y el disolvente utilizado.

Una vez analizado, se deberán integrar los picos obtenidos en el cromatograma, para conocer el área de cada uno de ellos y calcular su concentración. (Linde, 2017)

Para poder analizar las muestras de las que se dispone mediante este método, se deben preparar los viales de manera adecuada y metódica. Trabajando con un 65% de la fase acuosa (muestra) y un 35% de acetonitrilo de pureza HPLC, se desean preparar 3 mL de muestra.

$$3 \text{ ml} \cdot 0,65 = 1,95 \text{ ml (de fase acuosa)}$$

$$3 \text{ ml} \cdot 0,35 = 1,05 \text{ ml (de acetonitrilo)}$$

$$1,05 \text{ ml} + 1,95 \text{ ml} = 3 \text{ ml}$$

Por ello, con la ayuda de una micro-pipeta, se introducen estas cantidades de cada sustancia en un recipiente, agitando la mezcla para evitar la presencia de dos fases claramente diferenciadas.

Utilizando una jeringa de laboratorio de 1 mL y filtros, se llenan los viales de HPLC con esta mezcla, y se almacenan en el frigorífico hasta que las muestras sean analizadas.

También se debe analizar un patrón de los componentes que se prevén obtener, para conocer el tiempo de retención de los mismos y corroborar su presencia posteriormente.

Las muestras sometidas a hidrólisis fueron analizadas por la columna Shodex SH-1011 a 50°C, utilizando ácido sulfúrico (0,01 N) como fase móvil con una velocidad de 0,8 cm<sup>3</sup>/min. Se utilizó un detector Waters IR 2414 para identificar los azúcares y sus derivados.

Por otro lado, las muestras que se hidrogenaron fueron analizadas por la columna SUGAR SC-1211 de Shodex a 90 ° C y un flujo de 0,5 cm<sup>3</sup>/min usando una mezcla acetonitrilo/agua en una proporción 35/65 como fase móvil. Se utilizó un detector Waters IR 2414 para identificar azúcares, polioles y sus derivados.

El TOC es un parámetro de monitorización eficaz porque responde a todos los tipos de carbono orgánico, ya sea disuelto o suspendido en agua. (Xilem, 2017)

La medida de la cantidad de materia orgánica se puede establecer directamente a través del Carbono Orgánico Total (TOC), o bien indirectamente a partir de la capacidad reductora del carbono existente en la muestra mediante la determinación de la Demanda Bioquímica de Oxígeno (DBO) y la Demanda Química de Oxígeno (DQO).

La medida a través de TOC es una medida rápida, cuidadosa y directa del contenido orgánico, ya que no depende del estado de oxidación inicial de la materia, ni mide otros enlaces orgánicos, que pueden contribuir en la demanda de oxígeno medida. (Hach, 2017)

En el valor de TOC, contribuyen distintas sustancias (desde compuestos de origen natural, hasta compuestos sintéticos), por lo que a menudo, la cantidad de materia orgánica se relaciona con el uso que se le ha dado. (ICRA (Analizador de Carbono Orgánico Total), 2011)

Para preparar las muestras que queremos analizar en el TOC, se debe de poner 2,5 mL de cada una de ellas en los viales de TOC, enrasando con agua tipo II hasta los 25 mL. Previamente, el vial debe de ser homogeneizado para evitar errores en este análisis. Si no tienen sólidos, no se deben de filtrar.

Posteriormente, se coloca cada vial de TOC en su posición, con el nombre de la muestra correctamente indicado en el programa, a la espera de la obtención de resultados. Se tiene que indicar el vial en el que se encuentra cada muestra, para que el pinchazo y los posteriores resultados se encuentren referenciados a las muestras conocidas.

El análisis de Carbono Orgánico Total (TOC), se debe realizar, aparte de con las muestras a analizar, con un blanco (que indique si el aparato se encuentra en condiciones óptimas de uso, utilizando agua pura que no debería de contener carbono (agua tipo II)), y con un patrón previamente preparado (TOC 500 en este caso). Por ello, el orden de análisis será el siguiente:

- Blanco.
- TOC 500. (patrón de 500 ppm)
- TOC 500 diluido.
- Muestras a analizar.
- TOC 500. (patrón de 500 ppm)
- Blanco.

El analizador de Carbono Orgánico Total utilizado para el análisis de los productos obtenidos a partir de las reacciones llevadas a cabo es un Shimadzu TOC-VCSH, realizando medidas con gran precisión y sensibilidad. (Shimadzu, 2017)

Dentro de las especificaciones técnicas se pueden destacar las siguientes: (ICRA (Analizador de Carbono Orgánico Total), 2011)

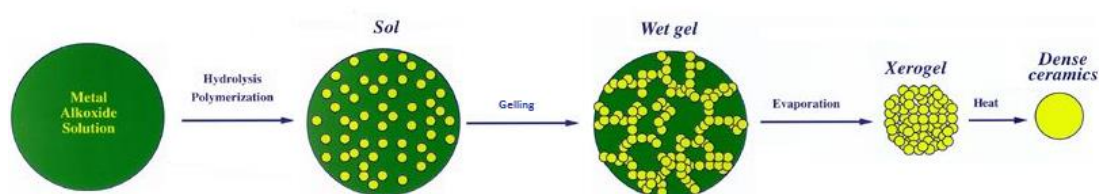
- Permite la medida de los siguientes parámetros: Carbono Total (TC), Carbono Inorgánico (IC), Carbono Orgánico Total (TOC) y Carbono Orgánico No Purgable (NPOC).
- El método de medida es el siguiente: Oxidación catalítica por combustión (680°C) con detector de infrarrojos no dispersivo.
- El intervalo de cuantificación de TOC se sitúa entre 0,03 y 1000 mg C/L.
- El tiempo de medida es el siguiente: TC = 3 min; IC = 4 min.

## 4.4. CATALIZADORES

### 4.4.1 Método de Preparación

La síntesis de Al-MCM-48 se ha llevado a cabo mediante el método sol-gel. Este proceso, es uno de los mecanismos de producción de materiales sólidos, a partir de moléculas más pequeñas. Es una ruta química que se inicia con la síntesis de una suspensión coloidal de partículas sólidas (sol), formando un material sólido lleno de solvente (gel) mediante su condensación.

Los precursores más típicos son alcóxidos metálicos y cloruros metálicos, que sufren reacciones de hidrólisis y policondensación. En función de su realización, se obtendrán materiales con diferentes propiedades, en función de las necesidades requeridas. Un esquema de este método se puede observar en la Figura 17: (UCA, 2015)



**Figura 17.** Método sol-gel.

En una síntesis convencional de los materiales que se van a estudiar, se disolvió bromuro de n-hexadecil-trimetilamonio ( $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{15}\text{N}(\text{Br})(\text{CH}_3)_3 \geq 98\%$ , Sigma – Aldrich), que es un surfactante que forma la estructura micelar entorno a la cual se irá formando la sílice. Actúa como conductor de la estructura, en la solución formada por 42 mL de agua destilada, 13 mL de amoníaco acuoso (20% como  $\text{NH}_3$ , Panreac), 18 mL de etanol absoluto (QP parcialmente desnaturalizado, Panreac) y 0,077 g de aluminato sódico ( $\text{NaAlO}_2$ , Sigma - Aldrich), teniendo una ratio Si/Al =20, encontrándose con agitación durante un tiempo de 15 minutos.

Seguidamente, se añadió gota a gota 4 mL de TEOS (Tetraetil ortosilicato) ( $\geq 99\%$  GC, Sigma – Aldrich).

La solución final obtenida, se agitó durante 18 horas en un baño hidrotérmico. El precipitado que se formó, de color blanco, se recogió por filtración a vacío, lavándose posteriormente con agua destilada hasta alcanzar un pH=7.

A continuación, éstos precipitados se secaron a  $60^\circ\text{C}$  durante toda la noche. Los precipitados, ya secos, se calcinaron en atmósfera de aire, desde una temperatura de  $80^\circ\text{C}$  hasta una de  $550^\circ\text{C}$  (a una velocidad de calentamiento de  $2^\circ\text{C}/\text{min}$ ), manteniéndose a la temperatura final durante toda la noche.



El Rutenio (Ru), se depositó sobre el Al-MCM-48, con una carga de metal que se encuentra en torno al 4%, utilizando el método convencional de impregnación húmeda. Para ello, fue utilizado cloruro de rutenio (III) anhidro (suministrado por Strem Chemicals Inc.), como precursor de metal para esta preparación.

Las cantidades deseadas de la sal metálica y el soporte se sonicaron en agua en un baño de ultrasonidos durante 10 minutos. La sonicación, es el acto de aplicar energía acústica para agitar partículas en una muestra. Se suelen utilizar frecuencias ultrasónicas (>20 kHz), dando lugar al proceso que también se conoce como ultrasonicación.

A continuación, la disolución de tricloruro de rutenio resultante y la dispersión de Al-MCM-48 en agua se mezclaron, calentándose desde la temperatura ambiente hasta los 105°C, con una velocidad de calentamiento de 1°C/min, mediante una placa de calentamiento Stuart (modelo SD162).

El proceso de impregnación termina cuando el agua se evapora por completo.

Más tarde, el producto final se seca a una temperatura de 105°C durante toda la noche.

Posteriormente, se reduce la cantidad deseada de catalizador en el reactor, con un flujo continuo de hidrógeno a 150°C y 20 bar durante una hora (condiciones seleccionadas a partir del TPR-H<sub>2</sub> de dicho material) (Romero, Díaz, Riviere, Nieto, & Alonso, 2016)

#### 4.4.2 Técnicas de Caracterización

La caracterización de un sólido mediante distintos métodos, tiene como finalidad el conocimiento cuantitativo y cualitativo de las propiedades del mismo (en este caso, del catalizador), viendo también qué tipo de transformaciones sufre como consecuencia de las reacciones químicas, por ejemplo.

La caracterización de un catalizador, nos proporciona tres tipos de información: (Técnicas de caracterización. Capítulo IV. Conceptos Generales, 2015)

- **Composición química y estructural:** Se refiere al estudio de la composición, estructura y proporciones de las fases individuales presentes.
- **Textura y propiedades mecánicas:** Se estudia la forma y el tamaño del catalizador, adquiriendo una gran importancia en este ámbito el tamaño de poro y el área superficial total. También, se analizan las propiedades mecánicas como pueden ser la dureza, la resistencia al choque térmico o la abrasión.
- **Actividad y selectividad catalítica:** Es una medida cuantitativa de la habilidad de un catalizador de acelerar una reacción química bajo condiciones específicas.

La caracterización del catalizador Ru/Al-MCM-48 se llevó a cabo mediante las técnicas que se enumeran a continuación:

La carga de Rutenio en el catalizador Ru/Al-MCM-48, se determinó por espectrofotometría de absorción atómica (AA), utilizando un analizador SPECTRA 220FS. Aproximadamente, 0,05 g de la muestra, 3 mL de HCL, 3 mL de H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> y 3 mL de HF se trataron por digestión con microondas a 250°C, midiendo la solución final en el espectrofotómetro. (Romero, Alonso, Sastre, & Nieto-Márquez, 2016)

Se realizó difracción de rayos X a bajo ángulo (SAXS), y difracción de rayos X (XRD), en un difractómetro Bruker Discover D8 Focus, utilizando la radiación Cu K $\alpha$  ( $\lambda = 0,15406$  nm). Las intensidades de difracción fueron medidas, para XRD, en un intervalo angular de  $20^\circ < 2\theta < 90^\circ$ , con un tamaño de paso de  $0,03^\circ$  y un tiempo de paso de 2 segundos. En el caso del SAXS, se seleccionó un intervalo angular de  $2^\circ < 2\theta < 6^\circ$ , con un tamaño de paso de  $0,02^\circ$  y un tiempo de paso de 1 segundo por paso.

La adsorción-desorción de nitrógeno de N<sub>2</sub> a -196°C, se realizó con el equipo ASAP 2020 (Micromeritics, USA), para obtener propiedades texturales de Al-MCM-48 y Ru/Al-MCM-48. Antes del análisis, las muestras fueron desgasificadas durante la noche a 350°C.

Los valores de área específica, se determinaron por el método BET (Brunauer, Emmett y Teller) multipunto a  $P/P_0 \leq 0,3$ , mientras que los volúmenes de poro específicos totales se evaluaron por adsorción de punto único de N<sub>2</sub> ( $P/P_0 \geq 0,99$ ).

El diámetro de poro se obtuvo mediante el promedio de adsorción de BJH ( $4 \cdot V \cdot A^{-1}$ , nm). La distribución del tamaño de poro se derivó de la rama de adsorción de la isoterma por BJH(dV/dD) Halsey: Corrección de Faas.

El perfil de reducción a temperatura programada (TPR-H<sub>2</sub>) de Ru/Al-MCM-48, se registró usando un equipo comercial Micromeritics TPD/TPR 2900. La muestra se cargó en una celda de cuarzo con forma de U (100 mm  $\cdot$  3,76 mm de diámetro interior), desde temperatura ambiente hasta una temperatura de 800°C (con una rampa de temperatura de 10°C/min), bajo un flujo de H<sub>2</sub>/N<sub>2</sub> (5% v / v, 50 mL/min, Air Liquide), y se mantuvo a la temperatura final hasta que la señal regresó a la línea base.

El consumo de Hidrógeno fue monitorizado por un detector de conductividad térmica (TCD) con adquisición/manipulación de datos usando el software ChemiSoft TPX V1.03™.

La desorción de amoníaco a temperatura programada (TPD-NH<sub>3</sub>) se realizó en el mismo equipo. En este caso, las muestras se activaron bajo condiciones TPR-H<sub>2</sub> (150°C), durante 60 minutos, saturándose más tarde con amoníaco a 100°C durante 30 minutos. El NH<sub>3</sub>

se purgó utilizando He puro, durante 60 minutos, calentándose las muestras desde una temperatura de 100°C hasta una temperatura de 600°C, con una rampa de calentamiento de 15°C/min, y manteniendo la temperatura final hasta que la señal regresó a la línea base. La cantidad de amoniaco quimisorbido se calculó de acuerdo con los volúmenes calibrados de este compuesto.

Los análisis de microscopía electrónica (TEM), utilizaron una unidad JEOL 2100 con un voltaje de aceleración de 200 kV.

Se preparó Ru/Al-MCM-48 por dispersión ultrasónica en acetona con una gota de la suspensión resultante, que se evaporó sobre una rejilla de carbono. Se realizó un conteo de nanopartículas de Ru a partir de imágenes TEM de Ru/Al-MCM-48. Se contaron al menos 175 nanopartículas de rutenio, expresándose el tamaño de partícula promedio como diámetro ponderado de superficie ( $\bar{d}_s$ ), que se calculó de la siguiente manera (Ecuación 6):

$$\bar{d}_s = \frac{\sum_i n_i \cdot d_i^3}{\sum_i n_i \cdot d_i^2}$$

***Ecuación 6***

siendo  $n_i$  el número de nanopartículas de rutenio con un diámetro  $d_i$ . (Romero, Alonso, Sastre, & Nieto-Márquez, 2016)



## Capítulo 5. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

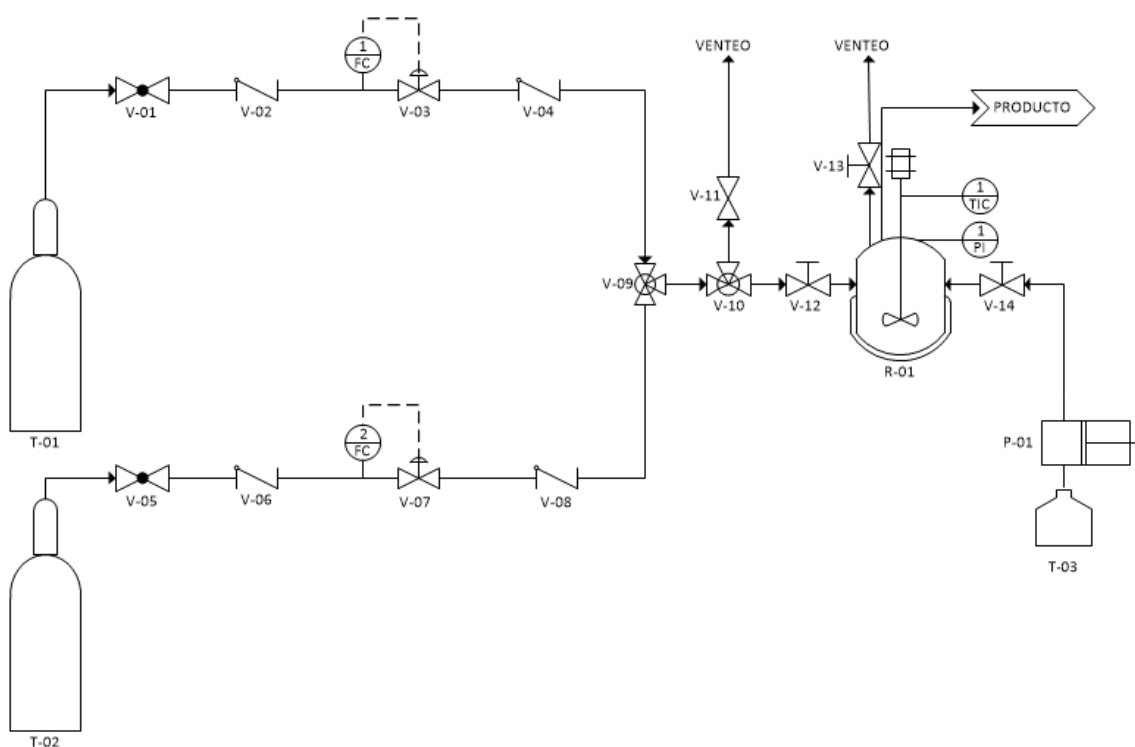


## 5.1. PUESTA EN MARCHA DEL MONTAJE EXPERIMENTAL

El montaje experimental con el que se ha trabajado, está dotado de todo lo necesario para llevar a cabo las reacciones de hidrogenación e hidrólisis que se pretenden estudiar, y analizar posteriormente las mismas para comprobar los cambios que se han producido.

Todos los equipos y dispositivos de los que se dispone están explicados y detallados en el apartado 4.2 “Hidrogenaciones e Hidrólisis”, siendo los más relevantes el reactor de tanque agitado, las líneas de alimentación de gases y la línea de despresurización y venteo.

El diagrama de flujo del montaje experimental es el que aparece en la Figura 18:



**Figura 18.** Diagrama de flujo del montaje experimental.

Se parte de dos botellas de gases (Hidrógeno y Nitrógeno), que circulan por tramos de tuberías independientes. Cada uno de ellos, tras pasar por un manorreductor, por el controlador asociado a un software y por las válvulas antirretorno correspondientes, se unen para poder alimentar el reactor. Antes de conectar con el mismo, se tiene una purga para poder ventear el conducto por el que llegan los gases.

El reactor está dotado de dos entradas de fluido (la de gas y la de líquido) y de una salida de producto. El montaje experimental también posee un venteo para poder regular la presión dentro del reactor.

El trabajo experimental realizado en este TFG se inició con la puesta a punto de un nuevo reactor, que había sido adquirido en los meses previos, y que no se había utilizado anteriormente. La puesta en marcha se ha llevado a cabo mediante una serie de pasos previos, que incluyen la conexión de los elementos, y las pruebas de arranque, puesto que se debe de tener la certeza de que todo lo relacionado con el montaje funciona correctamente.

Existe experiencia previa en el grupo de investigación del funcionamiento de un reactor similar de menores dimensiones (30 mL), utilizado para la realización de reacciones de hidrogenación de celulosa. (Romero, Alonso, Sastre, & Nieto-Márquez, 2016)

Por ello, en primer lugar, se ha recibido una formación en cuanto al protocolo de operación con ese reactor más pequeño para conocer qué valores y procedimientos pueden aprovecharse de este estudio previo, y cuáles sería necesario modificar o adaptar.

#### 5.1.1. Conexión y prueba de estanqueidad

Tras la conexión del reactor a las líneas de alimentación y venteo, el primer paso que se debe de llevar a cabo, es comprobar si las alimentaciones de hidrógeno y nitrógeno llegan de forma adecuada hasta el reactor. Por ello, se abren las botellas de los gases a utilizar, y se comprueba que los mismos llegan correctamente hasta el propio reactor, utilizando dos medidores y controladores de flujo másico por efecto térmico (FIC-101 y FIC-103), de la casa BRONKHORST HI-TEC. (Figura 19)



**Figura 19.** Medidor y controlador de flujo térmico utilizado.

La comunicación con el medidor se realiza a través de ordenador mediante el software informático suministrado por la misma casa comercial, con el que se trabaja, modificando los “canales” para referirnos a un gas o a otro, e introduciendo el flujo deseado en cada experimento como valor de consigna.



### 5.1.2. Prueba de presión y de calentamiento

Seguidamente, se realiza una prueba de calentamiento y presión en el reactor utilizando agua como alimentación, poniendo en marcha todos los dispositivos que posteriormente van a ser empleados. Para ello, se introduce en el controlador de temperatura el valor de consigna deseado y una velocidad de agitación determinada.

Desde que la temperatura en el interior del reactor es la inicial, hasta que llega al valor de consigna, se realiza una rampa de calentamiento que permite conocer la velocidad a la cual se produce el cambio de temperatura.

En este caso, la prueba se hizo a 180°C (seleccionando una temperatura elevada para comprobar que todos los equipos funcionan de manera adecuada a altas temperaturas de operación), con una velocidad de agitación de 1400 rpm (valor que se mantiene constante durante todo el estudio).

Se utiliza una bomba para introducir la alimentación en el interior del reactor, con un flujo de 50 mL/min, siendo el volumen de llenado del reactor de 100 mL. Para que se lleve a cabo el bombeo de forma correcta, la presión en la línea debe de ser mayor que en el interior del reactor, por lo que es importante tener en cuenta este dato.

Una vez que se ha comprobado que todos los elementos utilizados en la prueba funcionan correctamente, se puede seguir con la puesta en marcha del mismo.

### 5.1.3. Pruebas de bombeo de la alimentación

Una de las opciones de alimentación al reactor es mediante la utilización de una bomba, como en la prueba realizada, y como se operaba con el reactor pequeño ya estudiado. De esta forma, la alimentación se introduciría al reactor una vez acondicionado este en temperatura y presión, minimizando, por tanto, el tiempo de no estacionario hasta su estabilización a la temperatura deseada.

La bomba que se utilizaba en los experimentos previos con el reactor más pequeño, no estaba disponible y se ha evaluado la posibilidad de utilizar otras bombas disponibles en el laboratorio.

En primer lugar, se utilizó una bomba de HPLC Knauer Smartline Pump 100 (CR9), con un flujo teórico máximo de 50 mL/min, llevando a cabo la calibración de la misma para analizar su funcionamiento. (Smartline Pump 100 Manual V5010A)

Se conecta la bomba a la alimentación del reactor y se aspira agua de un vaso de precipitados con distintos flujos de impulsión. Midiendo el tiempo y el volumen impulsado, se calcula el flujo real que proporciona la misma. Para poner en marcha la

bomba, primero se tiene que llenar de fluido el conducto de aspiración. Por ello, se debe de cebar, operando de la siguiente forma:

- Se sitúa un extremo del conducto utilizado en la aspiración, en un vaso de precipitados con agua.
- El otro extremo del mismo conducto, se sitúa en una posición más baja, para que, por gravedad, se llene y pueda fluir por su interior.
- Como el orificio que tiene que atravesar para ser impulsado por la bomba es muy pequeño, se utiliza una jeringuilla de laboratorio para extraer el aire que se encuentra en el interior del mismo, permitiendo al agua atravesarlo.

Esta calibración llevada a cabo, no ha sido realizada a presión. La impulsión de un fluido al reactor cuando éste se encuentra a una presión superior, puede modificar ligeramente su funcionamiento, así como los flujos proporcionados.

Los datos de calibración recogidos de esta bomba se encuentran en el Apéndice 1.

Tras el estudio de los datos de la calibración de la bomba, se extrae que los flujos teóricos se encuentran muy alejados de los flujos reales de la misma, por lo que se deberá solucionar este impedimento para llevar a cabo el proceso adecuadamente.

Los caudales teóricos y reales aparecen indicados en la Tabla 6:

**Tabla 6.** Caudal teórico y real de la bomba Knauer Smartline Pump 100 (CR9) a diferentes flujos.

<b>Flujo teórico (mL/min)</b>	5	10	20	30	40	45	50
<b>Flujo real (mL/min)</b>	2,5	5,7	13,1	20,9	25,3	29,4	29,3

Como se puede observar en Tabla 6, aunque el flujo teórico indica que la bomba puede llegar hasta un valor de 50 mL/min, sólo se obtienen 29,3 mL/min, un valor que se encuentra muy por debajo del esperado.

Las distintas alimentaciones con las que se trabaja, permanecerán un tiempo determinado en el interior del reactor. Como éstos tiempos no son muy elevados, el flujo de alimentación al reactor debe ser lo más grande posible para minimizar el tiempo de llenado, reduciendo así el error cometido, puesto que mientras va entrando la alimentación al reactor, va reaccionando, sin tener todo el volumen en su interior.

Como se trabaja con 100 mL, operando con esta bomba a su flujo real máximo, se tardarían 3 minutos y 20 segundos hasta introducir toda la alimentación en el reactor, un tiempo demasiado elevado.

Como la diferencia entre el flujo teórico y flujo real es muy alta, se descarta el uso de esta bomba, calibrando otra bomba idéntica (Knauer Smartline Pump 100 (CR14)) con el objetivo de que el flujo real se acerque a los 50 mL/min.

El procedimiento de calibración es el mismo que para la anterior, siguiendo idénticos pasos para su posterior estudio. La calibración de esta segunda bomba utilizada se encuentra en el Apéndice 2.

De nuevo, se establece una relación entre los flujos teóricos y reales en distintos puntos, como se puede observar en la Tabla 7:

**Tabla 7.** Caudal teórico y real de la bomba Knauer Smartline Pump 100 (CR14) a diferentes flujos.

<b>Flujo teórico (mL/min)</b>	10	20	30	40	50
<b>Flujo real (mL/min)</b>	10,9	20,5	26,9	32,1	36,6

Como se puede observar, el flujo teórico esperado se encuentra también lejos del flujo real obtenido, alcanzando un valor máximo de 36,6 mL/min.

La comparación de tiempos de llenado utilizando las distintas bombas, es la que aparece a continuación en la Tabla 8, siendo la bomba 1 la bomba Knauer Smartline Pump 100 (CR9) y la bomba 2 la Knauer Smartline Pump 100 (CR14):

**Tabla 8.** Comparación de tiempos de llenado en función de las bombas.

Bomba 1:


	<b>Segundos</b>	<b>Minutos</b>
<b>Llenado de 100 mL (a máximo caudal)</b>	204,453	3,408

↓

3'24"
-------

Bomba 2:

	Segundos	Minutos
Llenado de 100 mL (a máximo caudal)	163,591	2,727



2'43"
-------

Aunque utilizando la bomba 2 se rebaja notablemente el tiempo de llenado del reactor, se siguen considerando tiempos elevados en comparación con los tiempos de reacción que se van a utilizar. Por ello, se debe estudiar más detenidamente si es realmente útil su uso para las reacciones que se van a llevar a cabo, planteándose otras alternativas más viables para este reactor.

A pesar de que inicialmente se esté tratando el problema de bombeo al reactor, se sigue teniendo la incertidumbre de la etapa previa de calentamiento del mismo.

Como se quiere que la reacción se lleve a cabo a una temperatura constante y elevada, la alimentación debe de ser precalentada hasta una temperatura a la cual no se degrade ni reaccione con el ambiente, entorpeciendo la reacción esperada.

Una posible solución, sería disponer de un depósito antes del reactor, a una temperatura y presión adecuada, que permita tener la alimentación bajo unas condiciones previamente analizadas antes del bombeo, sin encontrarse en contacto con el medio.

Sin embargo, los azúcares con los que se está trabajando se degradan con la temperatura en atmósfera oxidante, por lo que no se podrá calentar la alimentación a una temperatura mayor de los 60°C.

Como la diferencia entre el interior del reactor (en torno a 200°C), y la alimentación (60°C) es muy elevada, la temperatura en el interior del mismo disminuirá significativamente durante el llenado, por lo que se tiene que solucionar este problema si se decide operar de esta forma.

Habría que buscar un sistema de calentamiento rápido hasta la temperatura de reacción con algún calentador entre la bomba y el reactor, donde el tiempo de residencia sea corto para evitar la degradación de los azúcares.

Todas estas variables deben ser analizadas en función de las reacciones que se lleven a cabo y en función de las necesidades y posibilidades de las que se dispone, asumiendo

que el comportamiento del montaje con agua (alimentación utilizada en las pruebas), es el mismo que con las alimentaciones reales.

Como se ha comprobado mediante la puesta en marcha de la bomba y las pruebas realizadas, existen multitud de problemas derivados de su utilización en el proceso.

Se llevan a cabo tres pruebas más, para decidir la manera de operar definitiva.

Éstas, son las siguientes:

**Precalentamiento de la alimentación hasta los 60°C, bombeando la misma al reactor posteriormente con una temperatura de consigna de 180°C. (Bomba utilizada: Knauer Smartline Pump 100 (CR14))**

Las conclusiones obtenidas tras operar de este modo son:

- El caudal de bombeo disminuye significativamente debido a que se está bombeando a un recipiente que se encuentra presurizado, por lo que se tarda 6 minutos aproximadamente en bombear 100 mL de alimentación (muy por debajo de los 35 mL/min que proporcionaba la bomba CR14). Este tiempo de llenado es demasiado alto en comparación con los tiempos de reacción que se van a llevar a cabo.
- La temperatura del reactor disminuye en torno a 30°C al bombear el fluido a 60°C, y aunque no tarda mucho tiempo en recuperarse, la inercia hace que se eleve hasta una temperatura superior a la del set point (en torno a los 195°C), resultándonos demasiado difícil estabilizar la misma.

**Precalentamiento de la alimentación hasta los 60°C, bombeando la misma al reactor posteriormente con una temperatura de set point de 180°C inicialmente, disminuyendo esta temperatura del controlador hasta los 170°C y retomando los 180°C cuando se llegue a la temperatura especificada. (Bomba utilizada: Knauer Smartline Pump 100 (CR14))**

Modificando la manera de trabajar de esta forma, se obtienen las siguientes conclusiones:

- La bomba tiene un bombeo irregular. Bajo las mismas condiciones que en la prueba anterior, se tarda 4 minutos en bombear la misma cantidad de líquido (100 mL). Por ello, se está cometiendo un alto error con su utilización, debido a que el flujo que da la bomba no permanece constante bajo idénticas condiciones. Por ello, su utilización puede no resultar viable.

- Con el nuevo sistema de control de temperatura, la desviación por inercia se minimiza. El cambio de temperatura que se produce con el bombeo no es muy grande (disminuye hasta los 160°C aproximadamente, y más tarde, por inercia, sube hasta los 185°C), mejorando frente a la situación anterior.

**Calentamiento del reactor con la alimentación en el interior del mismo, evitando así la utilización de la bomba llevando a cabo una rampa de calentamiento hasta la temperatura de set point deseada.**

Como se ha comprobado que la utilización de las dos bombas disponibles es sinónimo de errores o problemas durante el proceso que se lleva a cabo, se propone otro sistema de operación, alimentando al reactor cuando todavía no se ha procedido al calentamiento.

Si se trabaja siguiendo este método, se observa lo siguiente:

- El operar de esta forma permite eliminar todos los errores y problemas derivados de la utilización de la bomba, resultando un factor clave en el análisis.
- Se produce un mejor control de la temperatura en el reactor, hasta que llega al set point. Mediante un flujo continuo de gas se puede modificar también la temperatura levemente, permitiendo corregir las ligeras desviaciones que se puedan producir.

Todas estas pruebas, se llevarán a cabo con gas nitrógeno debido a que lo que interesa es el comportamiento del montaje experimental y la variación de la temperatura y presión en cada una de las pruebas realizadas, no la hidrogenación.

Una vez barajadas y analizadas todas las opciones de las que se dispone, se decide operar sin la utilización de bomba, cargando el reactor inicialmente y llevando a cabo una rampa de calentamiento.

#### 5.1.4. Prueba con una alimentación real

Se realiza, por último, una prueba final con una alimentación real a la que se va a llamar extracto, obtenido a partir de madera de Catalpa. Todas las pruebas que se han realizado anteriormente, tenían como alimentación agua, por lo que es necesario conocer el comportamiento del montaje experimental con un fluido real.

Todavía no se introduce en el sistema H<sub>2</sub> ni el catalizador que se va a utilizar posteriormente, usando N<sub>2</sub> en estas pruebas.

Las condiciones bajo las cuales se ha llevado a cabo la prueba con el extracto real, aparecen en la Tabla 9:

**Tabla 9.** Datos de la prueba de hidrólisis realizada con una alimentación real a 180°C y 25 bar.

<b>Número de la prueba</b>	-	3
<b>Nombre de la prueba</b>	-	JCG-001-2
<b>Alimentación</b>	-	Extracto de madera de Catalpa
<b>Tiempo de operación</b>	<i>minutos</i>	15

Lo que se pretende observar, es cómo evoluciona el sistema y cómo responde el montaje experimental al trabajar con un extracto formado por oligosacáridos con una pequeña cantidad de azúcares, llevando a cabo las reacciones bajo unas condiciones fijadas previamente.

Por ello, 100 mL de esta alimentación se introducen en el reactor y se presuriza con N<sub>2</sub> hasta una presión de 20 bar. Manteniendo el punto de set point en 180°C, se deja evolucionar el sistema hasta que se mantenga estable en esa temperatura. La velocidad de calentamiento en este caso es de 7,45 °C/min.

La temperatura logra mantenerse estable e igual a la fijada, por lo que se controla de manera correcta operando de esta manera.

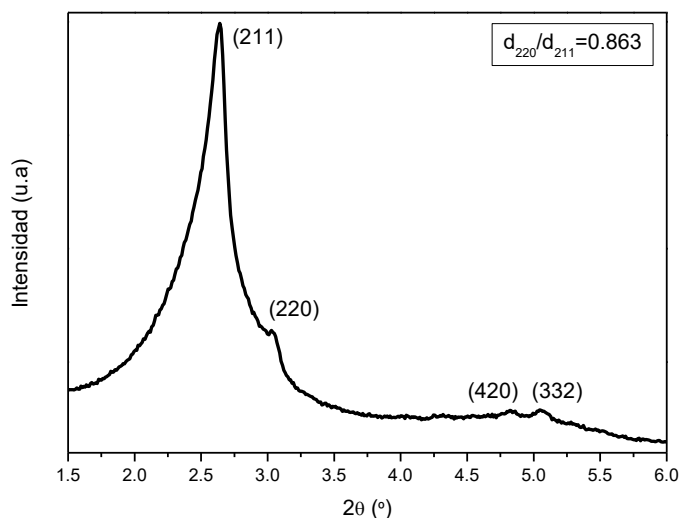
Trabajando con una alimentación real, se observa lo siguiente:

- Como no se está operando con la bomba, se simplifica el método de operación.
- El tiempo que se tarda en aumentar la temperatura desde los 31°C hasta los 180°C del set point no es demasiado elevado (20 minutos), manteniéndose estable la temperatura bajo las condiciones fijadas (7,45°C/min de velocidad de calentamiento).
- La presión en el interior del reactor aumenta al subir la temperatura, pasando de una presión de 20 bar hasta una presión de 25 bar a 180°C.

El montaje experimental reacciona de manera correcta ante una alimentación real, por lo que la puesta en marcha del sistema ha resultado satisfactoria.

## 5.2 CARACTERIZACIÓN DEL CATALIZADOR

La Figura 20 muestra el difractograma de rayos X a bajo ángulo (SAXS) de Al-MCM-48:



**Figura 20.** Difractograma de rayos X a bajo ángulo del Al-MCM-48.

El Al-MCM-48 calcinado mostró cuatro picos principales de difracción de Bragg en el intervalo  $2\theta$  de 2-5°, que pueden asignarse a los planos (211), (220), (420) y (332). Estos resultados, demostraron la alta calidad del Al-MCM-48 mesoporoso, donde la fase cúbica pertenece a una simetría  $Ia3d$ .

Las reflexiones  $d_{220}$  y  $d_{211}$  se observaron a valores aproximados de  $2\theta$  iguales a 2,6° y 3°, respectivamente. El cálculo de la ratio  $d_{220}/d_{211}$  para Al-MCM-48 fue de 0,86, que es típico de la simetría cúbica.

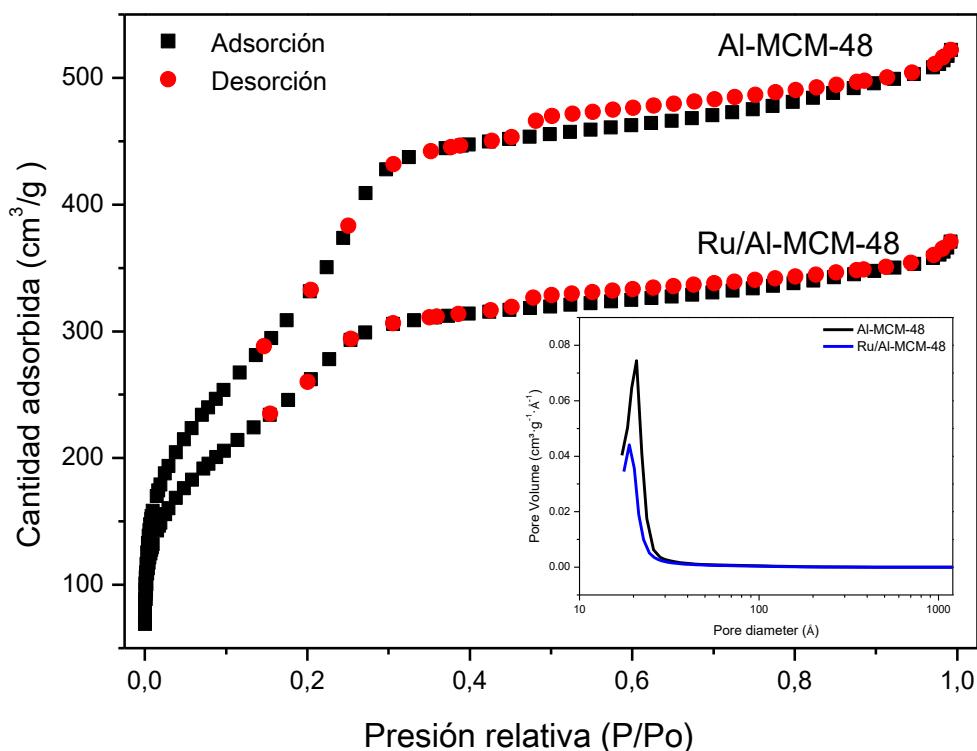
La Tabla 10 recoge las propiedades texturales y la carga metálica de los dos catalizadores utilizados en este trabajo:

**Tabla 10.** Propiedades texturales y carga de Ru en los catalizadores empleados.

Catalizador	Ru (%)	$A_{BET}$ ( $m^2/g$ )	$V_{poro}$ ( $cm^3/g$ )	$\phi_{poro}$ (nm)
Al-MCM-48	-	1352	0,81	2,5
Ru/Al-MCM-48	3,5	1028	0,57	2,7

Se determinaron las isothermas de adsorción-desorción de  $N_2$  a -196°C para estudiar los catalizadores utilizados (Al-MCM-48 y Ru/Al-MCM-48), presentándose los resultados en la Figura 21:





**Figura 21.** Isothermas de adsorción-desorción de  $N_2$  y distribución de tamaño de poro del Al-MCM-48 y del Ru/Al-MCM-48.

Se observa que, en ambos casos, los materiales presentan isothermas que tienen las características típicas de los materiales mesoporosos, pudiéndose atribuir al tipo IV referente a la clasificación IUPAC, con un fuerte aumento en la cantidad adsorbida de nitrógeno a presiones relativas ( $P/P_0$ ) aproximadamente entre 0,15 y 0,3. Este hecho, está asociado con la condensación capilar en los canales mesoestructurados de Al-MCM-48.

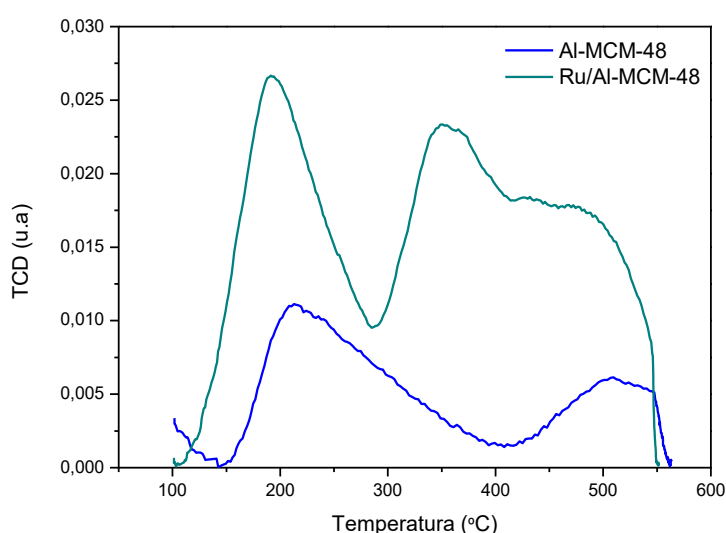
El fenómeno de condensación capilar es típico de los materiales mesoporosos, y es indicativo de la uniformidad de la estructura porosa. Este hecho se confirmó en la distribución del tamaño de poro, donde tanto el Al-MCM-48 como el Ru/Al-MCM-48 muestran una distribución monomodal de tamaño de poro centrada en torno a los 20 Å.

Por otra parte, se observó que ambas muestras, presentan un ciclo de histéresis de tipo H3 a  $P/P_0 = 0,45-0,9$ , que puede asociarse a la estructura de poros particular y tridimensional de este tipo de materiales.

La superficie específica y volumen total de poros del Al-MCM-48 fue de  $1352 \text{ m}^2/\text{g}$ , y de  $0,81 \text{ cm}^3/\text{g}$ , respectivamente. Se observa una ligera disminución en el área específica y volumen de poros de Ru/Al-MCM-48, después de la deposición de Ru en los poros de Al-

MCM-48, de 1352 a 1028 m<sup>2</sup>/g y de 0,81 a 0,57 cm<sup>3</sup>/g, respectivamente. Esto, está asociado al bloqueo parcial de la red mesoporosa del Al-MCM-48. El bloqueo parcial de la red porosa dio como resultado una ligera alteración del diámetro de poro de 2,5 a 2,7nm. La carga del metal Ru/Al-MCM-48 fue de 3,5%, determinada por AA (absorción atómica).

Con respecto a la acidez de los materiales preparados, el Al-MCM-48 y el Ru/Al-MCM-48 muestran 0,842 y 1,219 mmol<sub>NH<sub>3</sub></sub>/g, determinado por TPD-NH<sub>3</sub> (Figura 22). El valor de la acidez del Al-MCM-48 se atribuye a la presencia de grupos hidroxilo de acidez débil y aluminio tricoordinado en la estructura mesoporosa. Tras la deposición de rutenio en los poros de Al-MCM-48, se detectó un aumento en el valor de acidez en Ru/Al-MCM-48, debido a la elevada tendencia de los átomos de rutenio para adsorber amoniaco.



**Figura 22.** TPD-NH<sub>3</sub> llevado a cabo para Al-MCM-48 y Ru/Al-MCM-48.

El perfil TPR-H<sub>2</sub> para Ru/Al-MCM-48 se muestra en la Figura 23, para discutir la reducibilidad de las diferentes especies de rutenio presentadas en Al-MCM-48.

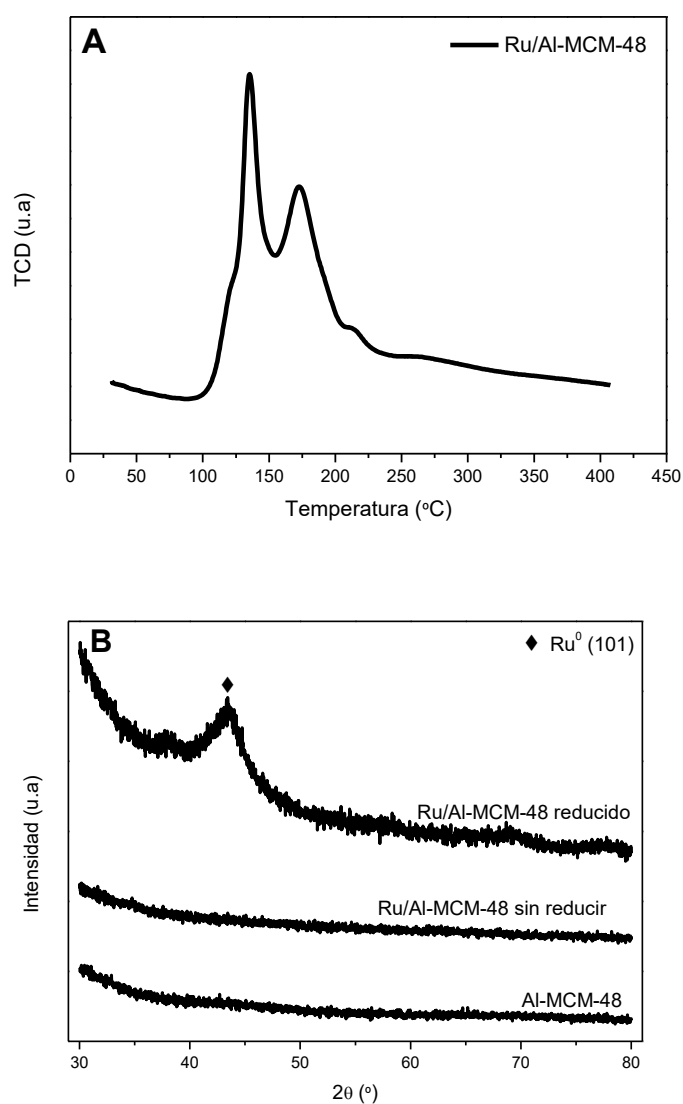
El perfil TPR-H<sub>2</sub> presenta dos picos de reducción a aproximadamente 135°C y 175°C para Ru/Al-MCM-48, lo que sugiere la existencia de dos tipos diferentes de nanopartículas de rutenio. El pico más estrecho y más intenso a aproximadamente 135°C se puede atribuir a la reducción de aglomerados de rutenio o cristales de rutenio mal distribuidos sobre el soporte Al-MCM-48.

El segundo pico, a aproximadamente 173°C se puede atribuir a la reducción de los pequeños cristales de RuCl<sub>3</sub>, que están bien distribuidos en la estructura porosa de Al-MCM-48. Además, la existencia de cristalitos más pequeños, que tienen mayor interacción metal-soporte, está asociada a temperaturas de reducción más altas. De

acuerdo con el perfil TPR-H<sub>2</sub>, Ru/Al-MCM-48 se activó a 150°C bajo atmósfera de hidrógeno durante 1 h. En trabajos anteriores, el rutenio se depositó sobre MCM-48 y solo se observó un único pico de reducción centrado a aprox. 125°C, atribuido a la reducción de Ru<sup>3+</sup> a Ru<sup>0</sup>.

Vanama et al. reportaron perfiles H<sub>2</sub> de Ru/MCM-41 para diferentes cargas de metal de rutenio (1-6% en peso). Ru/MCM-41 con un 4% en peso de Ru, mostró un pico de reducción principal a aproximadamente 200°C, relacionado con la reducción completa de las especies de RuCl<sub>3</sub> a rutenio metálico. (Vanama, Kumar, Gijnjupalli, & Komandur, 2014)

Los diagramas DRX para el soporte, el Ru/Al-MCM-48 antes de la reducción y el Ru/Al-MCM-48 después de la reducción se muestran en la Figura 23:



**Figura 23. (A)** TPR-H<sub>2</sub> de Ru/Al-MCM-48 y **(B)** Patrones de DRX de Al-MCM-48, Ru/Al-MCM-48 y Ru/Al-MCM-48 activado.

No se observaron picos de difracción en el rango de  $2\theta$  de  $30^\circ$  a  $80^\circ$  para Al-MCM-48 y Ru/Al-MCM-48 antes de la reducción, como se esperaba. Después de la reducción bajo atmósfera de hidrógeno, se observó un pico ancho de difracción relacionado con Ru<sup>0</sup> (101) a  $2\theta = 43,8^\circ$ , correspondiente a la presencia de nanopartículas de Ru<sup>0</sup> con estructura hexagonal compacta tipo (HCP). Este hecho, confirma la correcta reducción de Ru / Al-MCM-48. Además, el pico de baja intensidad y ancho asociado a la reducción del tricloruro de rutenio a rutenio metálico, sugiere la existencia de pequeñas nanopartículas de Ru<sup>0</sup> bien distribuidas en la estructura mesoporosa de Al-MCM-48.

Estos resultados concuerdan con los cálculos basados en la ecuación de Scherrer (Ecuación 7), que determinaron la presencia de nanopartículas de Ru<sup>0</sup>, con un tamaño de cristalito de 1,9 nm.

$$\beta = \frac{K \cdot \lambda}{B \cdot \cos(\theta)}$$

**Ecuación 7**

Siendo:

$\beta$  = *Tamaño promedio del cristal*

$K$  = *Factor de forma del cristal*

$\lambda$  = *Longitud de onda de la radiación utilizada*

$B$  = *Ancho medio del pico considerado para el cálculo*

$\theta$  = *Posición del pico de difracción*

El diámetro superficial y el tamaño de cristal de Ru en el catalizador Ru/Al-MCM-48 se muestran en la Tabla 11, junto a los valores de acidez expuestos anteriormente:

**Tabla 11.** *Tamaño de la partícula de Ru en el catalizador Ru/Al-MCM-48 y acidez del Al-MCM-48 y del Ru/Al-MCM-48.*

<b>Catalizador</b>	<b>Ru (nm)</b>	<b>Acidez (mmol<sub>NH3</sub>/g)</b>
Al-MCM-48	-	0,84
Ru/Al-MCM-48	1,98 <sup>a</sup> / 1,90 <sup>b</sup>	1,22

<sup>a</sup> Diámetro superficial de Ru calculado a partir de las imágenes TEM de microscopía.

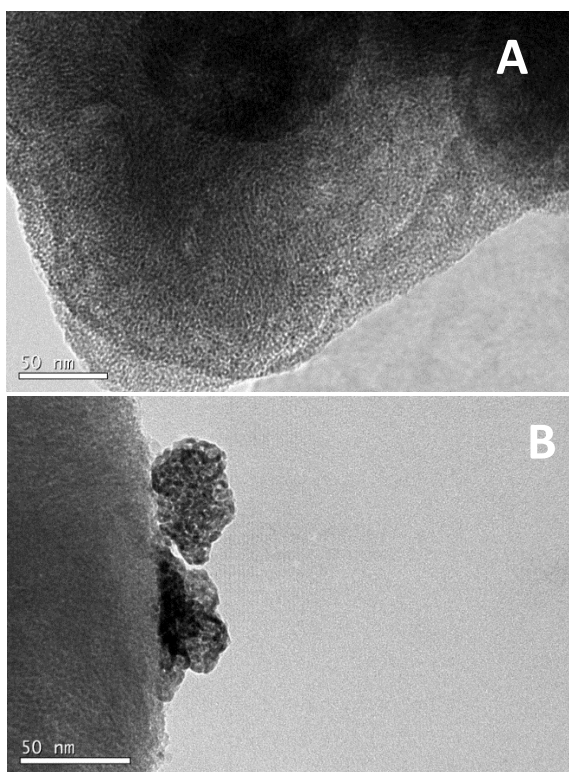
<sup>b</sup> Tamaño de cristales de Ru del análisis de DRX.

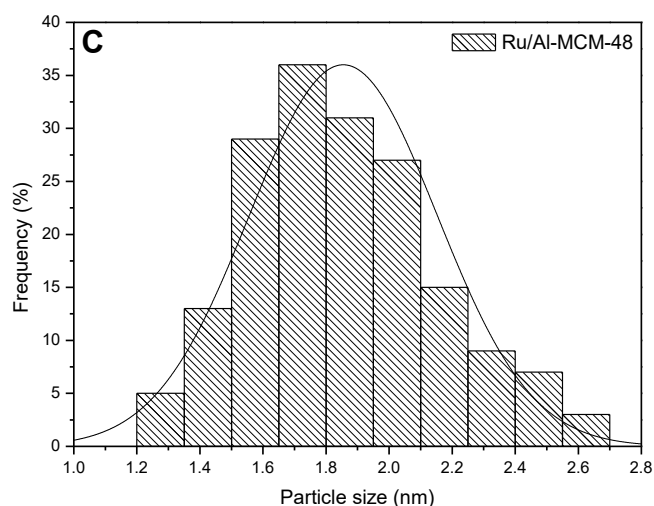
Las imágenes de TEM y la distribución de tamaño de nanopartículas de Ru para Ru/Al-MCM-48 se presentan en la figura 4. Dos áreas diferentes fueron observadas por TEM para Ru/Al-MCM-48:

- a) Regiones en las que las nanopartículas de rutenio son finamente distribuidas en los poros de Al-MCM-48 (Figura 24)
- b) Otras áreas donde se detectaron aglomerados de nanopartículas de rutenio en la superficie externa del soporte.

Este hecho confirma una correlación entre las imágenes TEM y los picos de reducción de TPR-H<sub>2</sub>, donde los aglomerados de rutenio presentados en la superficie externa de Al-MCM-48 están relacionados con el pico de reducción a menor temperatura en TPR-H<sub>2</sub>, mientras que las nanopartículas de rutenio bien distribuidas están asociadas al segundo pico de reducción observado a temperaturas más altas.

Además, se desarrolló un recuento de nanopartículas de rutenio a partir de imágenes TEM y la distribución de tamaños de nanopartículas de rutenio se presenta en la Figura 24.





**Figura 24. (A) (B) Imágenes TEM y (C) Distribución del tamaño de las partículas de Ru de Ru/Al-MCM-48.**

El histograma mostró una distribución estrecha de tamaño nanopartículas de rutenio en el rango de 1,2 - 2,5 nm, que se relaciona con nanopartículas aisladas de rutenio. El diámetro superficial de 2 nm se obtuvo a partir de cálculos basados en la Ecuación 7, que es similar al obtenido para Ru/Al-MCM-48 por la ecuación de Scherrer. (Romero, Alonso, Nieto-Márquez, & Essayem, 2017)

Como el tamaño de las partículas obtenido anteriormente (1,9 nm), es similar al tamaño de cristalito estimado por la ecuación de Scherrer, se puede decir que se está trabajando con partículas monocristalinas.

### 5.3. HIDROGENACIÓN DE MONÓMEROS

El montaje experimental con el que se ha operado, permite llevar a cabo las reacciones de hidrogenación de monómeros y de mezclas, con objeto de estudiar la cinética de hidrogenación de estos compuestos modelo.

La hidrogenación de la celulosa y hemicelulosas es muy compleja, debido a que se llevan a cabo numerosas reacciones a la vez. Por ello, la obtención de resultados cinéticos fiables mediante este tipo de reacciones es un proceso complicado.

Por esa razón, se realizan inicialmente estas reacciones utilizando monómeros como alimentación (D-Glucosa en una concentración de 7 g/l y D-Xilosa en la misma concentración) preparadas en el laboratorio.

Es fundamental, conocer la cantidad de catalizador que se debe utilizar para cada reacción llevada a cabo, debido a que los productos obtenidos van a depender en gran medida de este valor. Para la gran mayoría de las reacciones que se llevan a cabo, se utiliza una ratio de  $142 = \frac{mol C}{mol Ru}$ .

Para seleccionar estos valores con los que se trabaja de concentración y cantidad de catalizador, se ha tomado como referencia el trabajo previamente realizado en el reactor pequeño, aunque en ese estudio se estaba trabajando con glucosa, debido a que la fracción que se hidrogenaba era la de celulosa. Por ello, se toman estos valores como base para nuestro trabajo. (Romero, Nieto-Márquez, & Alonso, 2017)

#### 5.3.1. Hidrogenación de la D-Xilosa

Una vez que se comprueba que el catalizador es selectivo en la hidrogenación de monómeros, comprobando que se ha formado el alcohol que se pretendía partiendo de la D-Glucosa, se estudian nuevas reacciones utilizando como alimentación D-Xilosa con una concentración de 7 g/l.

La preparación de la alimentación de la D-Xilosa en una concentración de 7 g/l se llevará a cabo de manera similar a la anteriormente indicada para la D-Glucosa:

- Como se pretenden preparar también 500 ml de muestra, se pesan 3,5 g de D-Xilosa y se disuelven en una pequeña cantidad de agua de tipo II.
- Se enrasa hasta los 500 ml, y se homogeneiza la muestra hasta que no quede nada de sólido en la misma.

- La mezcla anteriormente preparada, se vierte en una botella de cristal y se almacena en frío.

Partiendo de esta alimentación, se llevará a cabo el estudio de los productos obtenidos tras su hidrogenación, modificando tanto las condiciones de operación como la cantidad de catalizador utilizado.

### 5.3.1.1. Variando las condiciones de operación

Inicialmente, se llevará a cabo el cálculo de la cantidad de catalizador que se utiliza en las reacciones de hidrogenación de la D-Xilosa, con un cálculo análogo al realizado con la D-Glucosa:

$$\frac{C}{Ru} = 142 \frac{mol}{mol} \rightarrow \rightarrow \rightarrow 142 = \frac{mol C}{mol Ru}$$

$$142 = \frac{mol C}{mol Ru}$$

$$142 = \frac{7 \frac{g}{l} C \cdot 0,1 l \cdot \frac{1 mol xilosa}{150,13 g} \cdot \frac{5 mol C}{1 mol xilosa}}{mol Ru}$$

$$mol Ru = 0,0001643 mol Ru$$

DATO: Pm Ru=101,07 g/mol.

$$0,0001643 mol Ru \cdot 101,07 \frac{g}{mol} = 0,0166 g Ru$$

Conociendo la carga de Ru en el catalizador Ru/Al-MCM-48 (3,5%), se obtiene la cantidad de catalizador utilizado:

$$0,0166 g Ru \cdot \frac{100 g cat}{3,5 g Ru} = 0,4745 g de catalizador$$

Una vez conocida la cantidad de catalizador necesaria para cada reacción, se lleva a cabo el procedimiento como se ha explicado en el apartado 4.2 "Hidrogenaciones e hidrólisis".

Se realiza el estudio a tres temperaturas diferentes variando el tiempo de reacción en cada una de ellas. Estas son: 80°C, 100°C y 120°C.

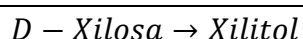
Las pruebas utilizadas para el estudio de la hidrogenación de la D-Xilosa a 80°C son las que aparecen en la Tabla 12:



**Tabla 12.** Datos de las reacciones de hidrogenación llevadas a cabo utilizando D-Xilosa como alimentación a 80°C y 50 bar.

Catalizador: Ru/Al-MCM-48 Ratio: 142 molC/molRu		Alimentación: D-Xilosa (7g/l) Cantidad de catalizador: 0,474 g		
Número de prueba	23	25	26	33
Nombre de la prueba	JCG-004-14	JCG-004-16	JCG-004-17	JCG-004-24
Tiempo de operación (min)	5	12,5	15	2,5

Tras analizar las reacciones llevadas a cabo bajo las condiciones anteriormente expuestas, se observa que el catalizador de nuevo es muy selectivo, generando únicamente un producto. La reacción que tiene lugar es la siguiente:



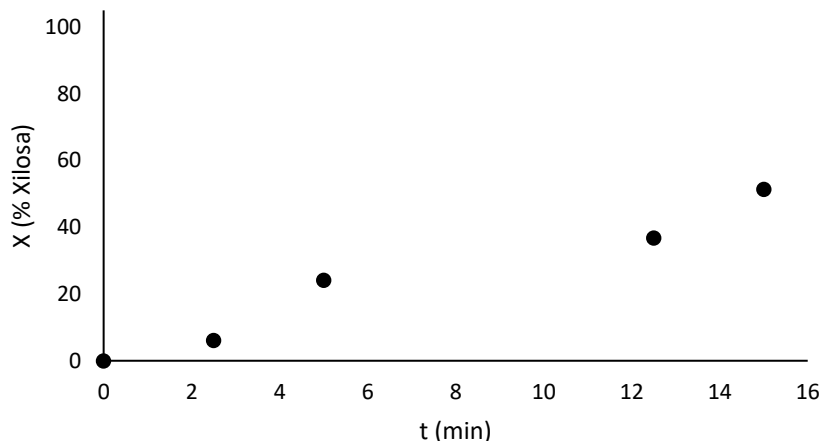
Las pruebas realizadas a 80°C y 50 bar utilizando esta alimentación, se han llevado a cabo variando el tiempo de reacción.

Como se conoce que durante la etapa de calentamiento de la D-Xilosa hasta la temperatura de reacción (80°C), no se produce ninguna transformación de la misma (tiempo cero es aquel en el que se alcanza la temperatura de reacción), se analizan las conversiones, rendimientos y selectividades en función del tiempo de reacción empleado, como muestra la Tabla 13:

**Tabla 13.** Conversiones, rendimientos y selectividades de las pruebas realizadas a 80°C y 50 bar con una alimentación de D-Xilosa (7 g/l)

Nombre de la prueba	Tiempo (min)	Conversión de D-Xilosa (%)	Rendimiento en Xilitol (%)	Selectividad en Xilitol (%)
JCG-004-24	2,5	6,12	6,12	100
JCG-004-14	5	24,12	24,12	100
JCG-004-16	12,5	36,78	36,78	100
JCG-004-17	15	51,34	51,34	100

De manera gráfica, la variación de la conversión de la D-Xilosa en función del tiempo se puede observar en la Figura 25:



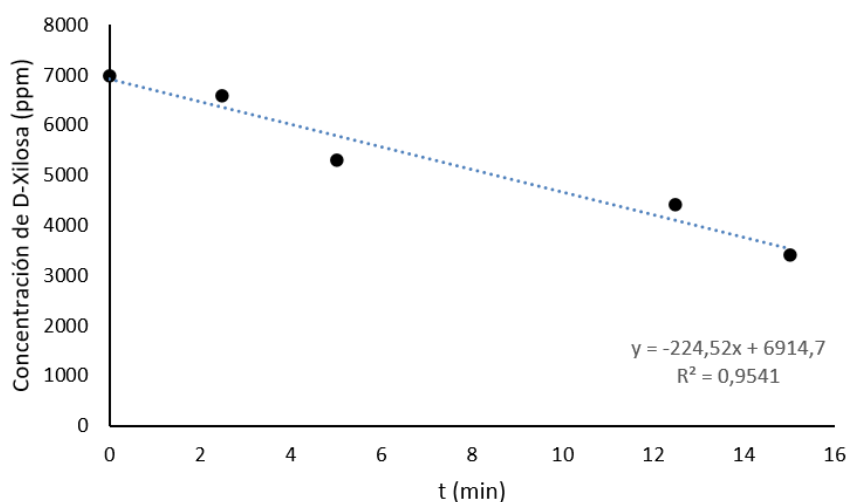
**Figura 25.** Evolución de la conversión de la D-Xilosa a 80°C y 50 bar.

Como se observa en la Tabla 13 y en la Figura 25, se ha obtenido una conversión máxima de xilosa en torno al 50% tras 15 minutos de reacción.

A temperaturas más bajas, el enfriamiento es más rápido y por lo tanto se comete menos error en las cinéticas que a mayores temperaturas, donde la etapa de enfriamiento es algo más prolongada.

Se puede observar un aumento de la conversión en función del tiempo, como era de esperar. Si se trabajasen tiempos más elevados, se obtendrían conversiones más altas, llegando a una conversión máxima o de equilibrio donde ya no aumenta, pudiendo ser esta del 100%.

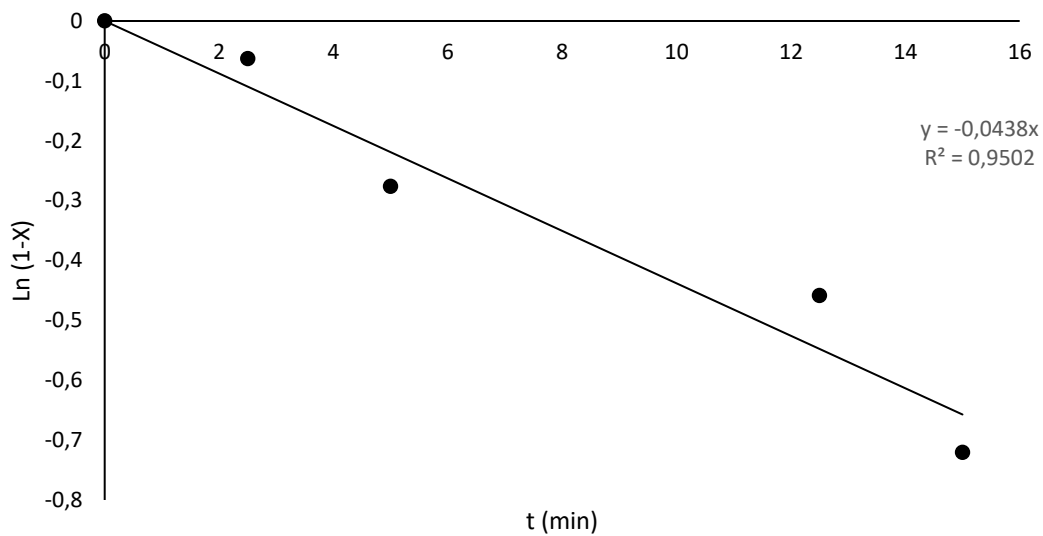
El descenso de la concentración de D-Xilosa a medida que va aumentando el tiempo de reacción, partiendo del valor inicial de 7000 ppm a tiempo  $t=0$ , se puede observar en la Figura 26:



**Figura 26.** Evolución de la concentración de la D-Xilosa a 80°C y 50 bar.

Por otro lado, como se ha indicado anteriormente, se está trabajando con un catalizador muy selectivo, por lo que sólo se genera como producto Xilitol (obteniendo también a la salida parte de D-Xilosa que no ha reaccionado). Por ello, se indica que la selectividad en Xilitol es del 100%.

Si se representa el  $\ln(1-X)$  frente al tiempo, se observa una linealidad con buen ajuste a medida que la variable tiempo va aumentando (Figura 27):



**Figura 27.** Representación del  $\ln(1-X)$  frente al tiempo de las reacciones llevadas a cabo a  $80^\circ\text{C}$  y 50 bar con D-Xilosa como alimentación.

A la vista de los resultados obtenidos bajo estas condiciones, se pueden ajustar los datos obtenidos a una cinética de pseudo primer orden (Ecuación 8):

$$-r_A = k \cdot C_A = k \cdot C_{A0} \cdot (1 - X_A)$$

**Ecuación 8**

Conociendo la pendiente de la recta, se calcula la constante cinética de la reacción de hidrogenación llevada a cabo bajo estas condiciones:

Datos

$$m = \text{pendiente} = 0,0438$$

$$m_{\text{cat}} (\text{g Ru}) = 0,0166 \text{ g cat}$$

$$V = \text{Volumen (l)} = 0,1 \text{ l} = 0,1 \text{ dm}^3$$

$$k = \frac{m \cdot V}{m_{\text{cat}}} = \frac{0,0438 \text{ min}^{-1} \cdot 0,1 \text{ dm}^3}{0,0166 \text{ g cat}} = 0,264 \frac{\text{dm}^3}{\text{gcat} \cdot \text{min}}$$

Por último, se calcula la velocidad de reacción relacionada con las reacciones llevadas a cabo a 80°C y 50 bar, utilizando la reacción JCG-004-24 para el cálculo:

$$7 \frac{g}{l} \cdot 0,0612 = 0,4284 \frac{g}{l} \text{ de Xilitol formados en 5 minutos}$$

$$0,4284 \frac{g}{l} \cdot 0,1l = 0,04284g \text{ de Xilitol}$$

$$0,04284 gXilitol \cdot \frac{1 mol Xilitol}{152,15 gXilitol} = 2,81 \cdot 10^{-4} mol Xilitol formados$$

$$r = \frac{2,81 \cdot 10^{-4} mol Xilitol}{1,643 \cdot 10^{-4} mol Ru \cdot 2,5 min} = 0,68 \frac{mol Xilitol}{mol Ru \cdot min}$$

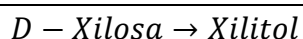
Por otro lado, también se ha llevado un análisis de las reacciones de hidrogenación a 100°C utilizando la misma alimentación, mostrando en la Tabla 14 las pruebas realizadas:

**Tabla 14.** Datos de las reacciones de hidrogenación llevadas a cabo utilizando D-Xilosa como alimentación a 100°C y 50 bar.

Catalizador: Ru/Al-MCM-48 Ratio: 142 molC/molRu		Alimentación: D-Xilosa (7g/l) Cantidad de catalizador: 0,474 g	
Número de prueba	19	20	21
Nombre de la prueba	JCG-004-10	JCG-004-11	JCG-004-12
Tiempo de operación (min)	5	10	15

Tras obtener los productos en las tres reacciones anteriores, se analiza cada una de ellas para conocer su cinética, así como también los datos de conversión.

Se observa de nuevo, en cada una de ellas, una transformación selectiva de la alimentación utilizada, a la temperatura y presión indicada (100°C y 50 bar). Por ello, tras la reacción, solo se obtiene la D-Xilosa que no se ha convertido y el alcohol correspondiente:

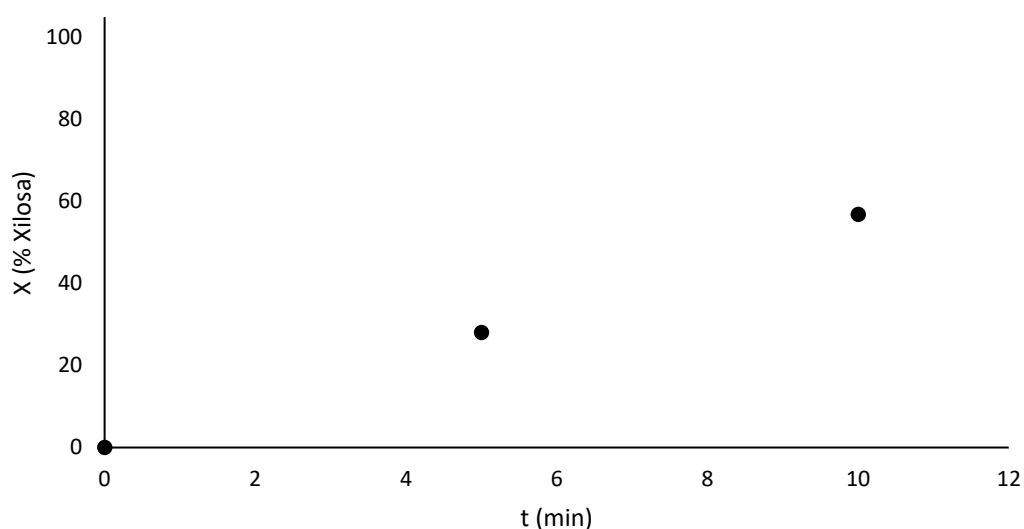


Conociendo que a tiempo t=0 (es decir, cuando la alimentación de D-Xilosa alcanza la temperatura de 100°C), no se ha convertido ningún monosacárido en el alcohol que se está buscando ni la muestra ha sufrido ningún cambio, se analizan las conversiones y selectividades del resto de pruebas realizadas a distintos tiempos, indicándose en la Tabla 15:

**Tabla 15.** Conversiones, rendimientos y selectividades de las pruebas realizadas a 100°C y 50 bar con una alimentación de D-Xilosa (7 g/l)

Nombre de la prueba	Tiempo (min)	Conversión de D-Xilosa (%)	Rendimiento en Xilitol (%)	Selectividad en Xilitol (%)
JCG-004-10	5	28,01	28,01	100
JCG-004-11	10	56,85	56,85	100
JCG-004-12	15	97,77	97,77	100

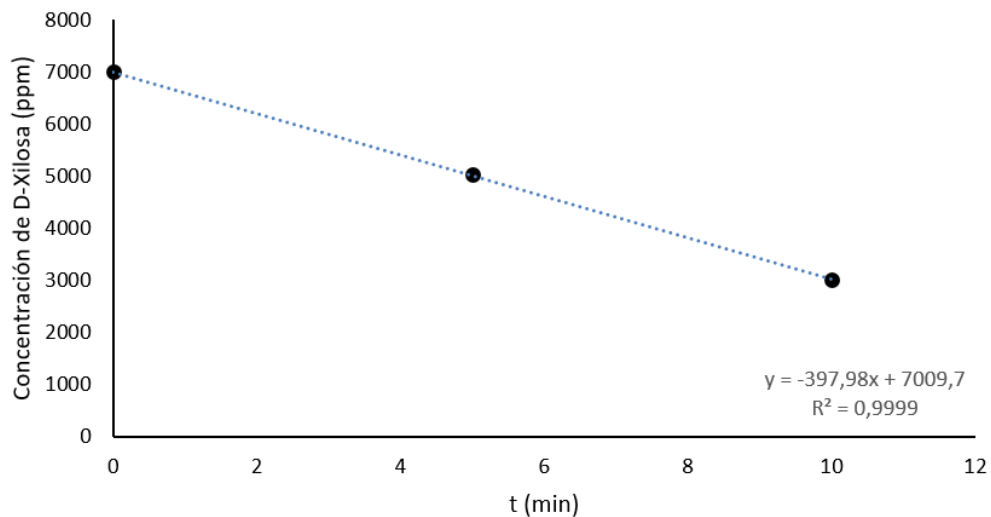
Gráficamente, se observa la evolución de la conversión frente al tiempo en la Figura 28, cuando la reacción se encuentra lejos del equilibrio:



**Figura 28.** Evolución de la conversión de la D-Xilosa a 100°C y 50 bar.

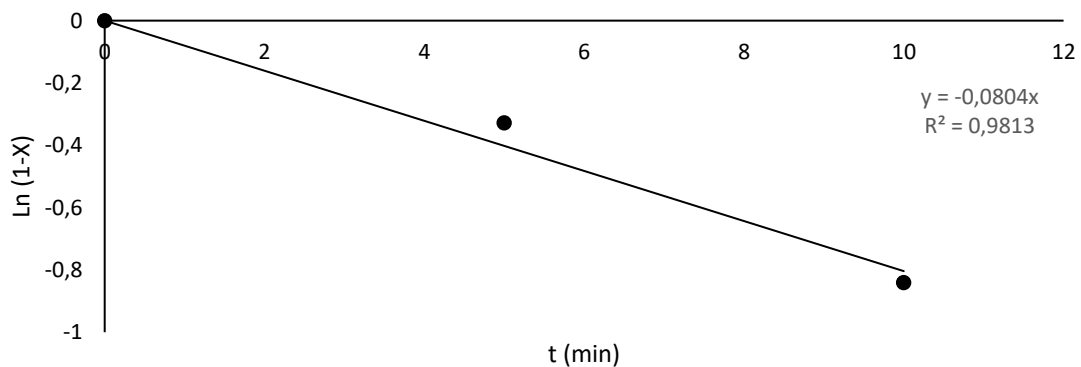
Como muestra la Tabla 15 y la Figura 28, la conversión va aumentando de manera significativa a medida que el tiempo de la reacción sube, llegando hasta una conversión casi total en la última prueba realizada. Como se ha indicado anteriormente, sólo se produce Xilitol en dichas reacciones, por lo que el rendimiento en Xilitol coincide con la conversión, provocando que la selectividad sea del 100% en todas ellas.

La Figura 29 muestra el descenso de la concentración de la D-Xilosa a medida que el tiempo de reacción aumenta:



**Figura 29.** Evolución de la concentración de la D-Xilosa a 100°C y 50 bar.

Representando el  $\ln(1-X)$  frente al tiempo en la Figura 30, se podrá observar una variación lineal a medida que el tiempo de reacción aumenta, obteniendo la pendiente de la misma que será utilizada posteriormente:



**Figura 30.** Representación del  $\ln(1-X)$  frente al tiempo de las reacciones llevadas a cabo a 100°C y 50 bar con D-Xilosa como alimentación.

Una vez que se conoce la pendiente de la recta obtenida en la Figura 30, se calcula el valor de la constante cinética  $k$  para los valores que se encuentran lejos del equilibrio:

Datos

$$m = \text{pendiente} = 0,0804$$

$$m \text{ cat (g Ru)} = 0,0166 \text{ g cat}$$

$$V = \text{Volumen (l)} = 0,1\text{l} = 0,1 \text{ dm}^3$$

$$k = \frac{m \cdot V}{m_{cat}} = \frac{0,0804 \text{ min}^{-1} \cdot 0,1 \text{ dm}^3}{0,0166 \text{ g cat}} = 0,48 \frac{\text{dm}^3}{\text{gcat} \cdot \text{min}}$$

La velocidad de reacción correspondiente a la hidrogenación de D-Xilosa a 100°C y 50 bar de presión, es la siguiente, calculada para la prueba JCG-004-10:

$$7 \frac{\text{g}}{\text{l}} \cdot 0,281 = 1,967 \frac{\text{g}}{\text{l}} \text{ de Xilitol formados en 5 minutos}$$

$$1,967 \frac{\text{g}}{\text{l}} \cdot 0,1 \text{ l} = 0,1967 \text{ g de Xilitol}$$

$$0,1967 \text{ gXilitol} \cdot \frac{1 \text{ mol Xilitol}}{152,15 \text{ gXilitol}} = 1,29 \cdot 10^{-3} \text{ mol Xilitol formados}$$

$$r = \frac{1,29 \cdot 10^{-3} \text{ mol Xilitol}}{1,643 \cdot 10^{-4} \text{ mol Ru} \cdot 5 \text{ min}} = 1,57 \frac{\text{mol Xilitol}}{\text{mol Ru} \cdot \text{min}}$$

Por último, se lleva a cabo un análisis a 120°C de la D-Xilosa, realizando varias reacciones bajo distintas condiciones de operación. A continuación, en la Tabla 16, aparecen aquellas que se han utilizado para el estudio de esta reacción de hidrogenación, ordenadas por el número de prueba:

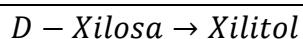
**Tabla 16.** Datos de las reacciones de hidrogenación llevadas a cabo utilizando D-Xilosa como alimentación a 120°C y 50 bar.

Catalizador: Ru/Al-MCM-48 Ratio: 142 molC/molRu		Alimentación: D-Xilosa (7g/l) Cantidad de catalizador: 0,474 g	
Número de prueba	11	12	13
Nombre de la prueba	JCG-004-2	JCG-004-3	JCG-004-4
Tiempo de operación	10	20	30

Número de prueba	16	27	29
Nombre de la prueba	JCG-004-7	JCG-004-18	JCG-004-20
Tiempo de operación	7,5	1	3

Una vez realizadas todas estas pruebas a la misma temperatura, cantidad de catalizador y presión, variando sólo el tiempo que dura la reacción, se analizan por HPLC todas y cada una de ellas para comprender cómo ha afectado al monosacárido del que se partía.

La variación de temperatura (se ha aumentado en 20°C la reacción de hidrogenación frente a la anterior), no ha afectado a la selectividad obtenida tras trabajar de nuevo con el catalizador Ru/Al-MCM-48, por lo que se sigue obteniendo como producto el Xilitol únicamente:



Para el estudio de las conversiones, rendimientos y selectividades, así como también de la cinética de la reacción, se han llevado a cabo más pruebas que para el resto de casos, debido a que 120°C es una temperatura elevada que puede originar que los parámetros a estudiar no se comporten de la manera esperada. Realizando un número mayor de reacciones, se observa el punto en el que se llega a la conversión completa.

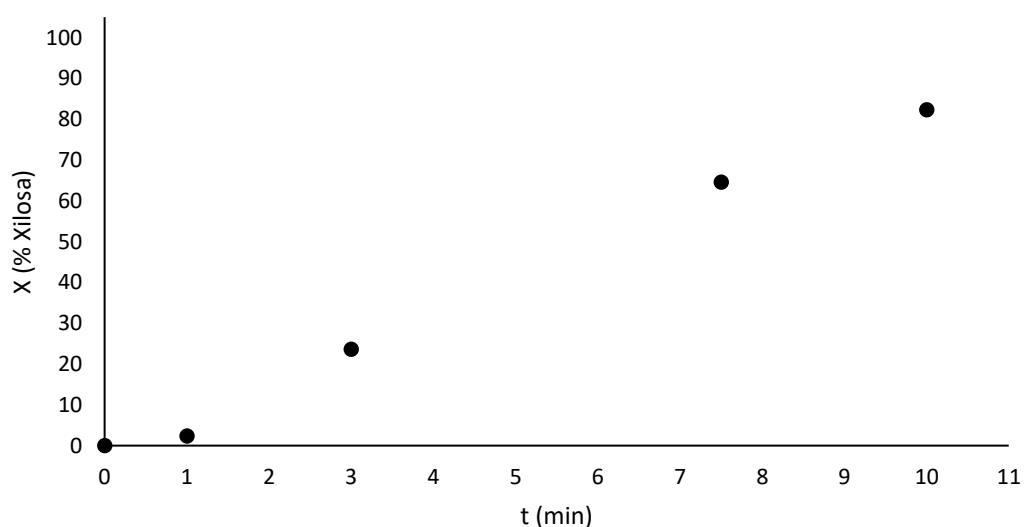
No se han utilizado todas las pruebas realizadas para el análisis de los parámetros anteriores. Los valores de conversión, rendimiento y selectividad de las pruebas que se han utilizado para el estudio de la hidrogenación de la D-Xilosa bajo estas condiciones, son las que aparecen en la Tabla 17:

**Tabla 17.** Conversiones, rendimientos y selectividades de las pruebas realizadas a 120°C y 50 bar con una alimentación de D-Xilosa (7 g/l)

Nombre de la prueba	Tiempo (min)	Conversión de D-Xilosa (%)	Rendimiento en Xilitol (%)	Selectividad en Xilitol (%)
JCG-004-18	1	2,32	2,32	100
JCG-004-20	3	23,6	23,6	100
JCG-004-7	7,5	64,58	64,58	100
JCG-004-2	10	82,3	82,3	100
JCG-004-3	20	98,8	98,8	100
JCG-004-4	30	99,57	99,57	100

A continuación, se trabaja con los puntos que se encuentran alejados de la conversión del 100%, para analizar la velocidad de conversión en la primera etapa.

La variación de la conversión frente al tiempo obtenida bajo estas condiciones, sin utilizar las pruebas de 20 minutos y 30 minutos, aparece en la Figura 31:



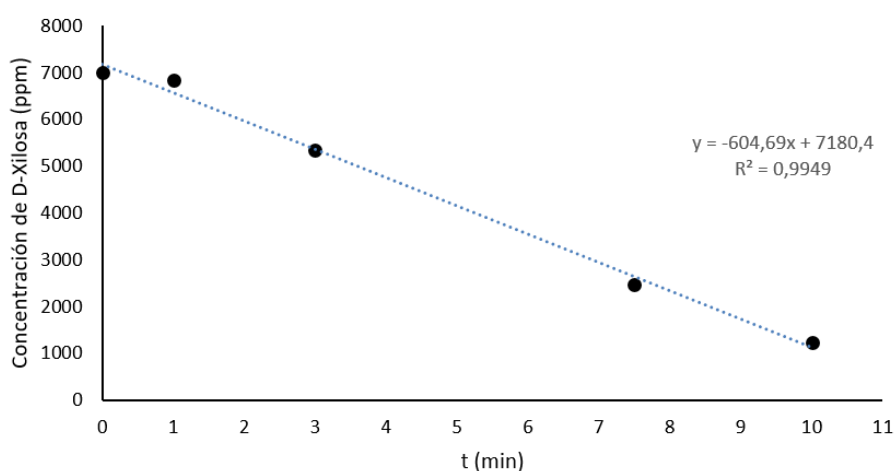
**Figura 31.** Evolución de la conversión de la D-Xilosa a 120°C y 50 bar.



Como se puede observar en la Tabla 17 y en la Figura 31, las muestras utilizadas para el análisis a esta temperatura están ordenadas de menor a mayor tiempo. Se observa cómo la conversión va aumentando a medida que sube el tiempo de reacción de la alimentación. Como sólo se produce Xilitol a partir de la D-Xilosa, el rendimiento en Xilitol coincide con la conversión, obteniendo por ello una selectividad en todas ellas del 100%.

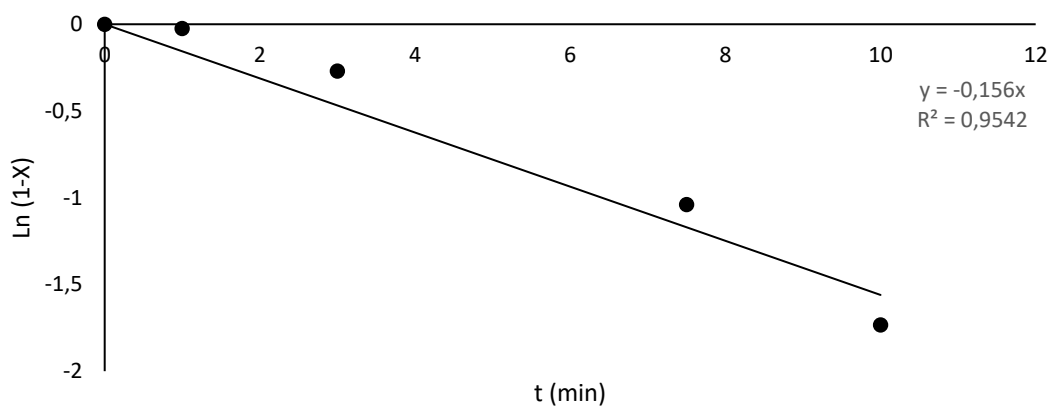
También se trabaja conociendo que a tiempo  $t=0$ , y a la temperatura y presión indicadas, no se ha modificado la D-Xilosa introducida en el reactor, y no hay nada de Xilitol en el producto. Por ello, a  $t=0$  la conversión es del 0%.

La variación de la concentración de D-Xilosa frente al tiempo aparece en la Figura 32:



**Figura 32.** Evolución de la concentración de la D-Xilosa a 120°C y 50 bar.

De la misma manera, se representa en la Figura 33 el  $\ln(1-X)$  frente al tiempo, para corroborar que la variación producida es lineal a medida que la variable que se está modificando en este caso (tiempo) aumenta:



**Figura 33.** Representación del  $\ln(1-X)$  frente al tiempo de las reacciones llevadas a cabo a 120°C y 50 bar con D-Xilosa como alimentación.

Tras conocer la pendiente, se lleva a cabo el cálculo de la constante cinética, de la misma forma que para las dos temperaturas anteriores:

Datos

$$m = \text{pendiente} = 0,156$$

$$m \text{ cat (g Ru)} = 0,0166 \text{ g cat}$$

$$V = \text{Volumen (l)} = 0,1\text{l} = 0,1 \text{ dm}^3$$

$$k = \frac{m \cdot V}{m \text{ cat}} = \frac{0,156 \text{ min}^{-1} \cdot 0,1 \text{ dm}^3}{0,0166 \text{ g cat}} = 0,94 \frac{\text{dm}^3}{\text{gcat} \cdot \text{min}}$$

Por último, se calcula la velocidad de reacción que se tiene en la conversión de este monosacárido hacia el alcohol que se tenía como objetivo, centrándose en la reacción JCG-004-20:

$$7 \frac{\text{g}}{\text{l}} \cdot 0,236 = 1,652 \frac{\text{g}}{\text{l}} \text{ de Xilitol formados en 5 minutos}$$

$$1,652 \frac{\text{g}}{\text{l}} \cdot 0,1\text{l} = 0,1652 \text{ g de Xilitol}$$

$$0,1652 \text{ gXilitol} \cdot \frac{1 \text{ mol Xilitol}}{152,15 \text{ gXilitol}} = 1,08 \cdot 10^{-3} \text{ mol Xilitol formados}$$

$$r = \frac{1,08 \cdot 10^{-3} \text{ mol Xilitol}}{1,643 \cdot 10^{-4} \text{ mol Ru} \cdot 3 \text{ min}} = 2,2 \frac{\text{mol Xilitol}}{\text{mol Ru} \cdot \text{min}}$$

A la temperatura de 120°C y 50 bar ya se habían estudiado velocidades de reacción utilizando otro catalizador de Rutenio distinto al Ru/Al-MCM-48. Llevando a cabo la hidrogenación de D-Xilosa con una concentración de 6 g/l, en un volumen de 150 ml se obtuvo una velocidad de reacción de  $3,984 \cdot 10^{-3} \frac{\text{mol Xilitol}}{\text{mol Ru} \cdot \text{min}}$ , un valor que se encuentra muy por debajo del que se ha obtenido con el catalizador de Ru/Al-MCM-48. (Ngoc Pham, Samikannu, Rautio, Juhasz, & Konya, 2016)

Comparando los valores obtenidos para las temperaturas estudiadas, se llega a la conclusión de que a medida que la temperatura sube, se produce un aumento del valor de k, y por ello, de r. A medida que la temperatura de estudio sube 20°C, el valor de las variables a estudiar crece progresivamente.

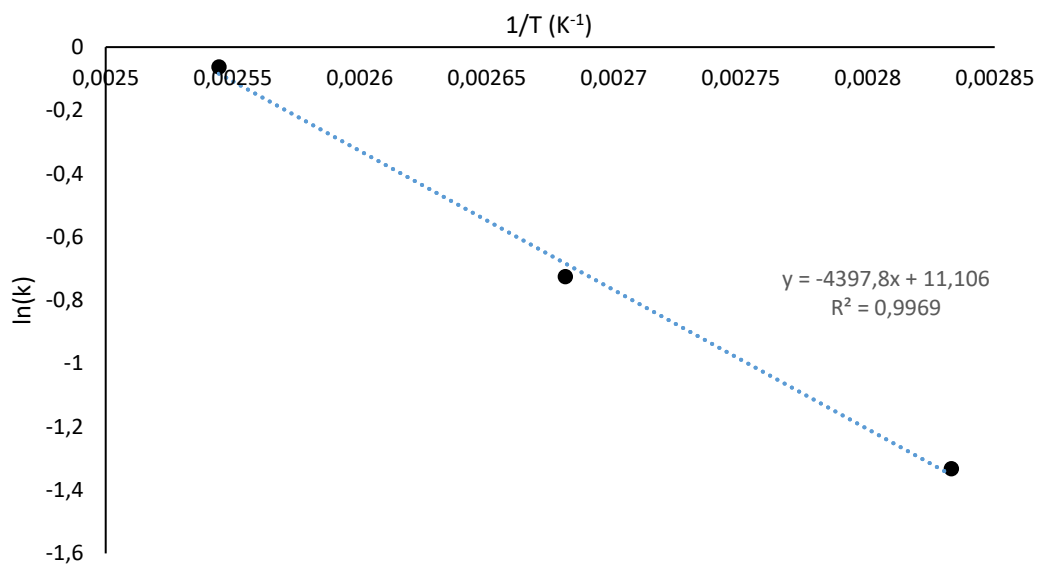
Esto significa que la reacción, a mayor temperatura, convierte una cantidad de Xilitol mayor respecto al Ru por unidad de tiempo, como se puede observar en la

Tabla 18:

**Tabla 18.** Comparación de los valores obtenidos para 80°C, 100°C y 120°C.

Temperatura	$k \left( \frac{dm^3}{gcat \cdot min} \right)$	$r \left( \frac{mol \text{ Xilitol}}{mol \text{ Ru} \cdot min} \right)$
80°C	0,264	0,68
100°C	0,484	1,57
120°C	0,94	2,2

En la Figura 34 se muestra el ajuste de Arrhenius para la hidrogenación de la D-Xilosa utilizando Ru/Al-MCM-48 como catalizador entre 80°C y 120°C:



**Figura 34.** Ajuste mediante Arrhenius para la hidrogenación de D-Xilosa.

Se observa cómo los datos calculados se ajustan perfectamente a la ecuación de Arrhenius linealizada, con un  $R^2=0,9969$ .

A continuación, conociendo la pendiente de la recta obtenida y la ordenada en el origen, se calcula la Energía de Activación ( $E_a$ ) y el factor preexponencial, utilizando la Ecuación 2:

$$\ln k = \frac{-E_a}{R} \frac{1}{T} + \ln A$$

$$y = -4397,8x + 11,106$$

$$-4397,8 = \frac{-E_a}{R} \rightarrow \rightarrow E_a = 4397,8 \cdot 8,314 = 36563,3 \frac{J}{mol} = 36,563 \frac{kJ}{mol}$$

$$11,106 = \ln A \rightarrow \rightarrow A = 66569,4 \frac{dm^3}{gcat \cdot min}$$

Por ello, tras los cálculos realizados se obtiene:

$$\text{Energía de activación de la reacción } (E_a) = 36,563 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$$

$$\text{Factor preexponencial } (A) = 66569,4 \frac{\text{dm}^3}{\text{gcat} \cdot \text{min}}$$

### 5.3.1.2. Variando la cantidad de catalizador

Otro de los estudios acerca de las hidrogenaciones de monómeros se lleva a cabo variando la ratio de catalizador utilizado. Como se ha indicado anteriormente, en todas las reacciones anteriores, se ha utilizado una ratio de  $142 = \frac{\text{mol C}}{\text{mol Ru}}$ . (Romero, Nieto-Márquez, & Alonso, 2017).

Se desea modificar este valor con el objetivo de minimizar la cantidad de catalizador utilizado en las reacciones. Como la ratio utilizada en reacciones anteriores había sido obtenida de la bibliografía, no se conoce cuál es la cantidad óptima de operación (en la cual la conversión es máxima).

Por ello, se llevará a cabo un estudio para conocer cómo afecta la cantidad de catalizador a la conversión y selectividad de los monómeros con los que se está trabajando. Esta prueba, sólo se realiza utilizando como alimentación D-Xilosa, en una concentración también de 7 g/l.

Las ratios utilizadas para el análisis son las siguientes:

1.  $142 = \frac{\text{mol C}}{\text{mol Ru}}$  (utilizada en el resto de reacciones)
2.  $210 = \frac{\text{mol C}}{\text{mol Ru}}$
3.  $285 = \frac{\text{mol C}}{\text{mol Ru}}$

Posteriormente, se puede llevar a cabo un ajuste de estos valores para la obtención de números más exactos, a la hora de hablar de la cantidad de catalizador a utilizar. Si las reacciones de hidrogenación que se van a llevar a cabo no se desarrollan de manera correcta, significaría que se está trabajando por debajo de la cantidad mínima de catalizador que proporciona alcoholes de azúcares.

Para el primer valor de ratio ya se conoce la cantidad de catalizador a utilizar en la reacción, porque ha sido calculada anteriormente (0,4745 g catalizador).

Para el segundo valor planteado, se tiene lo siguiente:

$$\left(210 = \frac{\text{mol C}}{\text{mol Ru}}\right)$$

$$\frac{C}{Ru} = 210 \frac{\text{mol}}{\text{mol}} \rightarrow \rightarrow \rightarrow 210 = \frac{\text{mol C}}{\text{mol Ru}}$$

$$210 = \frac{7 \frac{\text{g}}{\text{l}} C \cdot 0,1 \text{ l} \cdot \frac{1 \text{ mol xilosa}}{150,13 \text{ g}} \cdot \frac{5 \text{ mol C}}{1 \text{ mol xilosa}}}{\text{mol Ru}}$$

$$\text{mol Ru} = 1,11 \cdot 10^{-4} \text{ mol Ru}$$

DATO: Pm Ru=101,07 g/mol.

$$1,11 \cdot 10^{-4} \text{ mol Ru} \cdot 101,07 \frac{\text{g}}{\text{mol}} = 0,01122 \text{ g Ru}$$

Se sabe que, por cada 100 gramos de catalizador, se tienen 3,5 g de Ru. Por ello:

$$0,01122 \text{ g Ru} \cdot \frac{100 \text{ g cat}}{3,5 \text{ g Ru}} = 0,3205 \text{ g de catalizador}$$

Para redondear este valor, colocando 0,32 g de catalizador, se obtiene una ratio recalculada de 210,26, que es con la que se va a trabajar.

Por último, utilizando el tercer valor propuesto de análisis, se llega a la siguiente cantidad de catalizador utilizado:

$$\left(285 = \frac{\text{mol C}}{\text{mol Ru}}\right)$$

$$\frac{C}{Ru} = 285 \frac{\text{mol}}{\text{mol}} \rightarrow \rightarrow \rightarrow 285 = \frac{\text{mol C}}{\text{mol Ru}}$$

$$285 = \frac{7 \frac{\text{g}}{\text{l}} C \cdot 0,1 \text{ l} \cdot \frac{1 \text{ mol xilosa}}{150,13 \text{ g}} \cdot \frac{5 \text{ mol C}}{1 \text{ mol xilosa}}}{\text{mol Ru}}$$

$$\text{mol Ru} = 8,17 \cdot 10^{-5} \text{ mol Ru}$$

DATO: Pm Ru=101,07 g/mol.

$$8,17 \cdot 10^{-5} \text{ mol Ru} \cdot 101,07 \frac{\text{g}}{\text{mol}} = 8,26 \cdot 10^{-3} \text{ g Ru}$$

Como se ha indicado anteriormente, por cada 100 g de catalizador, 3,5 g son de Ru. Por tanto:

$$0,01122 \text{ g Ru} \cdot \frac{100 \text{ g cat}}{3,5 \text{ g Ru}} = 0,236 \text{ g de catalizador}$$

Colocando 0,24 g de catalizador para obtener un valor más exacto, se obtiene una ratio de 280,34, que es con la que se va a trabajar.

Se pretende llevar a cabo una comparación en función de la cantidad de catalizador utilizado durante la reacción, mediante el análisis de los productos obtenidos tras la misma (HPLC).

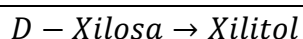
Las pruebas realizadas modificando la ratio de catalizador, son las que aparecen en la Tabla 19. Como las condiciones de operación son iguales, se puede llevar a cabo una comparación de los productos obtenidos de manera óptima.

**Tabla 19.** Datos de las reacciones de hidrogenación realizadas variando la ratio de catalizador a 120°C y 50 bar.

<b>Número de la prueba</b>	-	31	36	35
<b>Nombre de la prueba</b>	-	JCG-004-22	JCG-006-2	JCG-006-1
<b>Catalizador utilizado</b>	-	Ru / Al-MCM-48	Ru / Al-MCM-48	Ru / Al-MCM-48
<b>Ratio</b>	<i>molC/molRu</i>	142	210,26	280,34
<b>Cantidad de catalizador</b>	<i>g</i>	0,474	0,32	0,24
<b>Alimentación</b>	-	D-Xilosa (7g/l)	D-Xilosa (7g/l)	D-Xilosa (7g/l)
<b>Tiempo de operación</b>	<i>minutos</i>	5	5	5

Posteriormente, estas tres pruebas realizadas fueron analizadas por HPLC, para conocer cómo afecta la cantidad de catalizador utilizado a la conversión de la D-Xilosa en Xilitol.

Se observa de nuevo un solo producto, lo que significa que el catalizador sigue siendo efectivo bajo estas condiciones (aunque ya se había comprobado anteriormente). Sólo se genera este alcohol tras llevarse a cabo la reacción durante 5 minutos.



Inicialmente, se piensa que la cantidad de catalizador va a favorecer la formación de este alcohol partiendo del monómero de la D-Xilosa, por lo que a mayor cantidad del mismo (esto implica menor ratio), mayor conversión.

Como en todo proceso de cualquier tipo, se intenta siempre reducir costes para lograr un proceso lo más eficiente y económico posible, por lo que en las reacciones que se

han llevado a cabo, se intenta disminuir la cantidad de catalizador para conocer cómo influye este dato en la conversión obtenida.

Como es lógico, a mayor cantidad de catalizador, mayor coste del proceso, por lo que se pretende trabajar con ratios mayores que minimicen la cantidad de catalizador.

En la primera prueba realizada (JCG-004-22), partiendo de 7000 ppm de D-Xilosa (7 g/l), se han formado 1303,7 ppm de Xilitol durante los 5 minutos que dura la reacción, obteniendo también al final de la reacción 5414 ppm de D-Xilosa sin convertir, lo que representa una conversión del 19,4%.

Si se utiliza una cantidad de catalizador que se encuentra entre medias de las anteriormente mencionadas, 4334,61 ppm de Xilitol se generarán durante la reacción de hidrogenación a las condiciones previamente establecidas, siendo el resto D-Xilosa sin convertir hasta las 7000 ppm de las que se parten. La conversión en este caso es del 37,87%.

Por último, aumentando la ratio hasta los 280,34, partiendo de la misma cantidad de D-Xilosa se generan 2789,85 ppm de Xilitol en la hidrogenación del monómero, quedándose sin convertir 4140,8 ppm de D-Xilosa al final de la misma. El porcentaje de conversión en esta prueba realizada es del 59,74%.

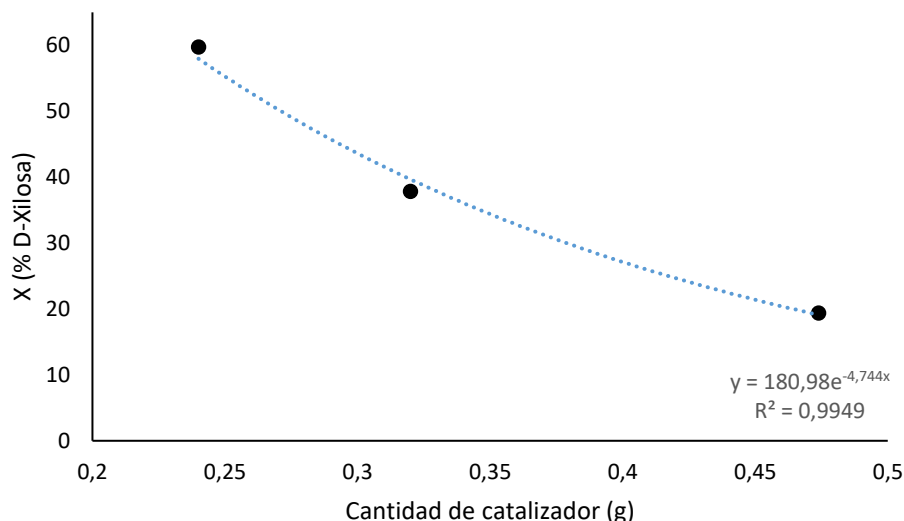
Los resultados obtenidos tras el análisis de las pruebas se muestran resumidos en la Tabla 20:

**Tabla 20.** Conversión y rendimientos tras el análisis de las pruebas realizadas en función de la cantidad de catalizador empleado.

Nombre de la prueba	Ratio	Cantidad de catalizador (g)	Conversión de D-Xilosa (%)	Rendimiento en Xilitol (%)	Selectividad en Xilitol (%)
JCG-004-22	142	0,474	19,4	19,4	100
JCG-006-2	210,26	0,32	37,87	37,87	100
JCG-006-1	280,34	0,24	59,74	59,74	100

Como se puede observar en la Tabla 20, la reacción de hidrogenación no se comporta como se había predicho anteriormente. A mayor cantidad de catalizador empleado en cada reacción, menor conversión se obtiene al final de la misma, bajo condiciones idénticas.

La Figura 35 muestra el descenso de la conversión de la D-Xilosa en Xilitol a medida que aumenta la cantidad de catalizador. La variación que sufre es exponencial:



**Figura 35.** Variación de la conversión en función de la cantidad de catalizador empleada.

En la Figura 35 se puede observar cómo la conversión aumenta aproximadamente 3 veces al pasar de 0,474 g de Ru/Al-MCM-48 a 0,24 g del catalizador, permitiendo este hecho un ahorro del mismo.

Para la prueba JCG-004-22 (Ratio=142), se obtiene la siguiente actividad específica:

$$1303,57 \frac{\text{mg Xilitol}}{\text{l}} \cdot 0,1\text{l} \cdot \frac{1\text{g}}{1000\text{mg}} \cdot \frac{1\text{mol}}{152,15\text{g}} = 8,56 \cdot 10^{-4} \text{ moles convertidos}$$

$$\frac{8,56 \cdot 10^{-4} \text{ moles convertidos}}{0,474 \text{ gcat} \cdot 5 \text{ min}} = 3,61 \cdot 10^{-4} \frac{\text{moles convertidos}}{\text{gcat} \cdot \text{min}}$$

Seguidamente, se realiza el mismo cálculo para la prueba JCG-006-1 (Ratio=280,34):

$$4140,87 \frac{\text{mg Xilitol}}{\text{l}} \cdot 0,1\text{l} \cdot \frac{1\text{g}}{1000\text{mg}} \cdot \frac{1\text{mol}}{152,15\text{g}} = 2,72 \cdot 10^{-3} \text{ moles convertidos}$$

$$\frac{2,72 \cdot 10^{-3} \text{ moles convertidos}}{0,24 \text{ gcat} \cdot 5 \text{ min}} = 2,26 \cdot 10^{-3} \frac{\text{moles convertidos}}{\text{gcat} \cdot \text{min}}$$

Por último, para la prueba JCG-006-2 (Ratio 210,26):

$$2642,19 \frac{\text{mg Xilitol}}{\text{l}} \cdot 0,1\text{l} \cdot \frac{1\text{g}}{1000\text{mg}} \cdot \frac{1\text{mol}}{152,15\text{g}} = 1,73 \cdot 10^{-3} \text{ moles convertidos}$$

$$\frac{1,73 \cdot 10^{-3} \text{ moles convertidos}}{0,32 \text{ gcat} \cdot 5 \text{ min}} = 1,08 \cdot 10^{-3} \frac{\text{moles convertidos}}{\text{gcat} \cdot \text{min}}$$



Con estos valores calculados de la actividad específica utilizando diferentes cantidades de catalizador, se puede llegar a la conclusión de que la menor cantidad de moles convertidos de D-Xilosa a Xilitol por gramo de catalizador y por minuto, ocurre cuando se utiliza la mayor cantidad de Ru/Al-MCM-48. Por otro lado, en la prueba que menos catalizador se ha utilizado (0,24 g), se tiene la mayor cantidad de moles convertidos por gramo de catalizador y minuto.

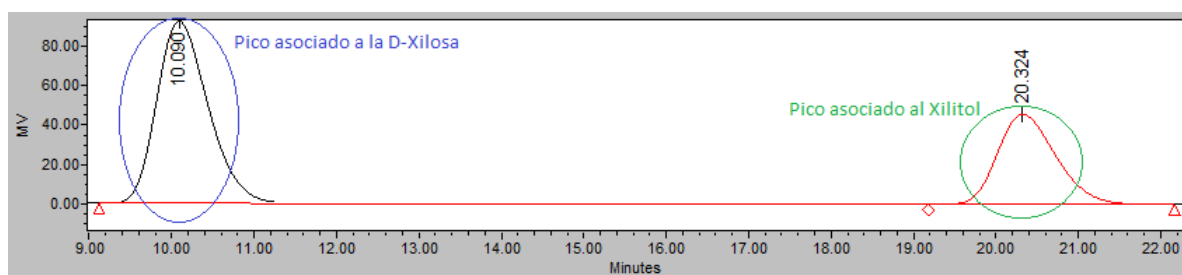
Este hecho puede deberse a una mala agitación del reactor durante la reacción, lo que hace que el catalizador se quede depositado en el fondo y parte de él no está completamente accesible a la xilosa. Como el reactor que se está utilizando tiene un tamaño elevado, y se está trabajando con 100 ml de alimentación líquida, puede ocurrir que la mala agitación del mismo dificulte el contacto entre la fase gaseosa, que en este caso es H<sub>2</sub>, y la fase sólida y líquida que se encuentra en el interior del mismo.

Por ello, cuanto mayor cantidad de catalizador se ponga en el reactor, peor va a resultar la mezcla de todo lo que se encuentre en su interior (sólo se dispone de un agitador magnético), perjudicando la obtención de Xilitol en este caso.

Gracias al análisis realizado a partir de las pruebas de hidrogenación llevadas a cabo, se llega a la conclusión de que se podría trabajar con una cantidad menor de catalizador en las reacciones de hidrogenación, aumentando la conversión del monómero utilizado como alimentación.

Este hecho, produce un ahorro muy importante de dinero. Se está utilizando una cantidad de catalizador que se encuentra por encima de la cantidad que proporciona el óptimo de conversión, por lo que se podría reducir la cantidad de catalizador incrementando así la producción de alcoholes.

El cromatograma típico del análisis de una reacción de hidrogenación de una alimentación de D-Xilosa, es el que aparece en la Figura 36:



**Figura 36.** Cromatograma de una reacción de hidrogenación con alimentación D-Xilosa.

Como se puede observar en la Figura 36, en esta prueba únicamente se ha generado un producto por lo que el catalizador ha actuado de manera muy selectiva. Gran parte de la D-Xilosa que se ha introducido en la alimentación (7000 ppm), no se ha convertido a

Xilitol, puesto que el tiempo de reacción no ha sido suficiente. Por ello, el pico referente al Xilitol tiene un área menor que el pico asociado a la D-Xilosa. No se han generado otros productos.

## 5.4. HIDROGENACIÓN DE MEZCLAS

Una vez que se ha llevado a cabo la hidrogenación de monómeros, se comienza con la hidrogenación de mezclas, utilizando D-Glucosa, D-Xilosa y L-Arabinosa en distintas proporciones.

Como el montaje experimental permite la hidrogenación correcta de los monómeros utilizados anteriormente (dato obtenido gracias al análisis de los productos por HPLC), se intenta hidrogenar mezclas más complejas operando de la misma manera que en reacciones anteriores.

Éstas mezclas, preparadas en el laboratorio, se realizaron con el fin de simular una corriente real de hidrolizados a partir del fraccionamiento de la madera de catalpa bajo condiciones de agua subcrítica.

Las mezclas que se han preparado para las hidrogenaciones han sido las siguientes:

1. D-Xilosa + D-Glucosa (50% - 50%).
2. D-Xilosa + L-Arabinosa (80,2% - 19,8%).
3. D-Xilosa + L-Arabinosa + D-Glucosa (71,2% - 17,6% - 11,2%).

Utilizando la misma cantidad de catalizador para las 3 mezclas (el calculado anteriormente para la ratio  $142 = \frac{mol\ C}{mol\ Ru}$  (0,4745 g)), se obtienen productos distintos en función de las mezclas preparadas.

### 5.4.1. D-Xilosa + D-Glucosa

La primera de ellas, que es la de D-Xilosa + D-Glucosa (50%-50%), permite comparar la velocidad de conversión de la xilosa y de la glucosa bajo unas condiciones especificadas previamente.

Además, al estar los dos monómeros en igual proporción, se podrá apreciar en su análisis la velocidad de conversión de cada uno de los azúcares presentes en sus respectivos alcoholes.

Para su preparación, se debe utilizar el valor de TOC conocido (1200 ppm=1200 mg/l).

Se comienza analizando los gramos de glucosa que se necesitan para formar la disolución, partiendo del valor obtenido anteriormente:

$$50\% = D - Xilosa$$

$$50\% = D - Glucosa$$

$$1200 \frac{mg\ C}{l} \cdot 0,5l = 600\ mg\ C$$

Por ello, como se quiere una muestra que tenga 50% de D-Xilosa y 50% de D-glucosa:

- 300 ppm C -> D-Glucosa.
- 300 ppm C-> D-Xilosa.

$$0,3\ g\ C \cdot \frac{1\ mol\ C}{12\ g\ C} = 0,025\ mol\ C$$

$$0,025\ mol\ C \cdot \frac{1\ mol\ glucosa}{6\ mol\ C} = 4,166 \cdot 10^{-3}\ mol\ de\ glucosa$$

$$4,166 \cdot 10^{-3}\ mol\ de\ glucosa \cdot \frac{180\ g\ glucosa}{mol\ glucosa} = 0,75\ g\ de\ glucosa$$

Seguidamente, se realizan los mismos cálculos para la xilosa:

$$0,3\ g\ C \cdot \frac{1\ mol\ C}{12\ g\ C} = 0,025\ mol\ C$$

$$0,025\ mol\ C \cdot \frac{1\ mol\ xilosa}{5\ mol\ C} = 5 \cdot 10^{-3}\ mol\ de\ xilosa$$

$$4,166 \cdot 10^{-3}\ mol\ de\ xilosa \cdot \frac{150,13\ g\ xilosa}{mol\ xilosa} = 0,75\ g\ de\ xilosa$$

Por ello, en medio litro de agua se diluyen 0,75 g de xilosa y 0,75 g de glucosa, formando la primera de las mezclas a utilizar.

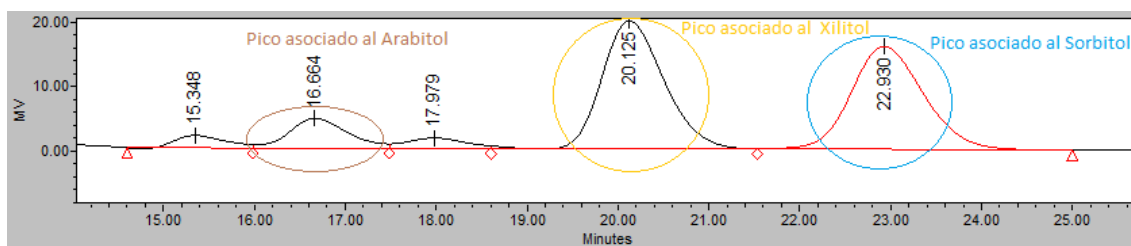
La reacción de hidrogenación que se realizó con esta muestra previamente preparada, se resume en los datos que aparecen en la Tabla 21:

**Tabla 21.** Datos de la reacción de hidrogenación llevada a cabo con la muestra D-Xilosa/D-Glucosa (50%-50%) a 180°C y 50 bar.

Número de la prueba	-	34
Nombre de la prueba	-	JCG-005-1
Catalizador utilizado	-	Ru / Al-MCM-48
Ratio	<i>molC/molRu</i>	142
Cantidad de catalizador utilizado	<i>g</i>	0,474
Alimentación	-	D-Xilosa/D-Glucosa (50%-50%)
Tiempo de operación	<i>minutos</i>	7

Esta reacción llevada a cabo durante 7 minutos, fue posteriormente analizada por cromatografía líquida de alta densidad (HPLC).

A pesar de que en la alimentación se están introduciendo únicamente dos monómeros (D-Xilosa y D-Glucosa), también se forman, como se observa en el cromatograma de la Figura 37, otros alcoholes distintos al Xilitol y al Sorbitol, respectivamente:



**Figura 37.** Cromatograma de una reacción de hidrogenación con alimentación D-Xilosa/D-Glucosa (50%-50%).

Se parte de una alimentación con una concentración de 7 g/l como las anteriores estudiadas, formándose en este caso 2335 ppm de alcoholes. Éstos, se encuentran distribuidos de la siguiente forma: 233,6 ppm de Arabitol, 78,53 ppm de Manitol, 1054,15 ppm de Xilitol y 989,23 ppm de Sorbitol. Los picos más importantes y con mayores áreas de la Figura 37, aparecen referenciados a su alcohol correspondiente.

Inicialmente, se podría pensar que partiendo de una alimentación que posee únicamente D-Xilosa y D-Glucosa, no aparecerían Manitol y Arabitol al estar trabajando con un catalizador selectivo.

Esto, es lo que ha ocurrido en reacciones anteriores, pero en este caso, no se puede comparar una hidrogenación de un monómero con una hidrogenación de una mezcla, debido a que los primeros se hidrogenan a diferentes velocidades, y al mezclarse, estas etapas se modifican, provocando interacciones y competiciones entre las moléculas y las reacciones que modifican la conversión, la selectividad y los rendimientos.

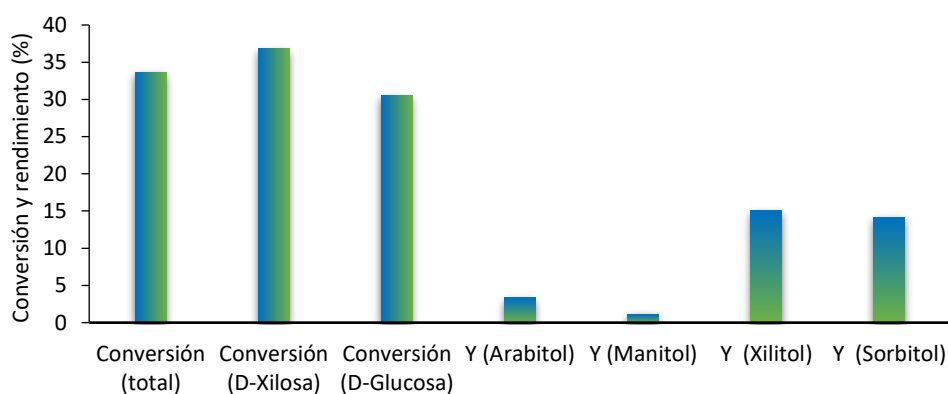
El resto hasta completar las 7000 ppm de la mezcla, corresponden a los monómeros que no han reaccionado durante los 7 minutos que dura la reacción. Por ello, se está hablando de una conversión total del 33,65%.

Analizando la conversión en función de los azúcares introducidos, la de la D-Xilosa es del 36,79%, formándose 1416 ppm de alcoholes a partir de este azúcar. Por otro lado, la conversión de la D-Glucosa para esta alimentación es del 30,55%.

Es importante el análisis de esta mezcla, debido a que los porcentajes de los monómeros que la forman son iguales. Por ello, se puede establecer una relación entre cómo

reacciona el monómero cuando se encuentra sólo en el reactor, y cómo lo hace cuando interacciona con otros monómeros dentro del mismo.

En este caso, se tienen cuatro rendimientos, referidos a cada alcohol que ha aparecido tras el análisis de la muestra. La conversión (total, de la D-Xilosa y de la D-Glucosa) y los rendimientos obtenidos para esta mezcla de cada uno de ellos son los que aparecen en la Figura 38:



**Figura 38.** Conversiones y rendimientos de la reacción de hidrogenación de una mezcla D-Xilosa/D-Glucosa (50%-50%) durante 7 minutos a 180°C y 50 bar.

#### 5.4.2. D-Xilosa + L-Arabinosa

Para la segunda de ellas (D-Xilosa + L-Arabinosa (80,2%-19,8%)), se ha intentado reproducir los porcentajes de estos azúcares en el extracto real que va a ser utilizado posteriormente en la hidrogenación, tomando en este caso el 100% como la suma de D-Xilosa y de L-Arabinosa.

$$80,2\% = D - Xilosa$$

$$19,8\% = L - Arabinosa$$

$$7 \frac{g}{l} \cdot 0,802 = 5,614 \frac{g}{l} \text{ de } D - Xilosa$$

$$7 \frac{g}{l} \cdot 0,198 = 1,386 \frac{g}{l} \text{ de } L - Arabinosa$$

Como la mezcla que se va a preparar consta de 500 ml, las cantidades de cada sustancia son las que aparecen en la Tabla 22:

**Tabla 22.** Cantidades de D-Xilosa y L-Arabinosa para la segunda mezcla.

<b>D-xilosa + L-Arabinosa (80,2%-19,8%)</b>		
<b>D-Xilosa</b>	<b>L-Arabinosa</b>	<b>Total</b>
2,807 g	0,693 g	3,5 g

La reacción que se estudió mediante la utilización de esta mezcla, se llevó a cabo bajo las condiciones que aparecen en la Tabla 23:

**Tabla 23.** Datos de la reacción de hidrogenación llevada a cabo con la muestra D-Xilosa/D-Glucosa (80,2%-19,8%) a 120°C y 50 bar.

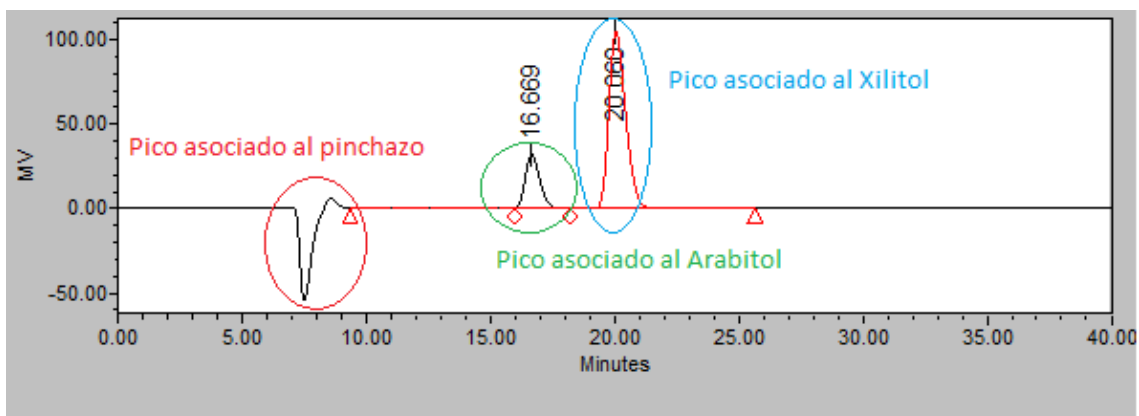
<b>Número de la prueba</b>	-	37
<b>Nombre de la prueba</b>	-	JCG-007-1
<b>Catalizador utilizado</b>	-	Ru / Al-MCM-48
<b>Ratio</b>	<i>molC/molRu</i>	142
<b>Cantidad de catalizador utilizado</b>	<i>g</i>	0,474
<b>Alimentación</b>	-	D-Xilosa/L-Arabinosa (80,2%-19,8%)
<b>Tiempo de operación</b>	<i>minutos</i>	15

Una vez realizada la prueba utilizando esta mezcla como alimentación, se analiza de la misma manera que todas las anteriores (HPLC).

En este caso, se está introduciendo D-Xilosa y L-Arabinosa al reactor, por lo que, como se conoce que el catalizador utilizado (Ru/Al-MCM-48) es muy selectivo, sólo se formarán los dos alcoholes que se esperan de dichos monómeros: Xilitol y Arabitol. En reacciones anteriores, a pesar de utilizar el mismo catalizador, se formaban otros productos distintos a los esperados.

En este caso, cuando se parte de una mezcla con una concentración de 7 g/l en estos dos monómeros, se forman 1478,38 ppm de Arabitol durante los 15 minutos que dura la reacción de hidrogenación que se lleva a cabo a 120°C y 50 bar.

Como se observa en el cromatograma de la Figura 39, absolutamente todo lo que se obtiene tras el análisis son alcoholes, siendo el resto (5511 ppm) el Xilitol formado tras la hidrogenación de la D-Xilosa. Cabe destacar, que la D-Xilosa no sólo se convierte en Xilitol, sino que aproximadamente un 1,4% de Xilosa se convirtió en Arabitol, añadiéndose por ello al mismo formado partiendo de la L-Arabinosa.

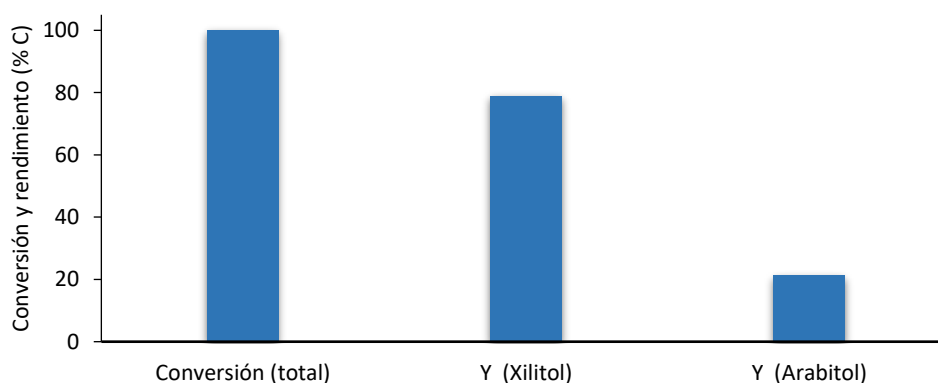


**Figura 39.** Cromatograma de una reacción de hidrogenación con alimentación D-Xilosa/D-Glucosa (80,2%-19,8%)

En este caso, se tienen dos picos referentes a los dos alcoholes que se han formado tras la reacción de hidrogenación. El primero de ellos, corresponde al Arabitol, que como se puede observar, es de menor intensidad que el segundo debido a que en la alimentación también el monosacárido del que precede se encuentra en menor porcentaje en la mezcla inicial. El segundo, a un tiempo mayor, se debe a la presencia de Xilitol en el producto obtenido.

La conversión total es por ello del 100%, no habiéndose formado otros alcoholes. Eso significa que, tras analizar el producto, no se contempla ninguna cantidad de D-Xilosa ni de L-Arabinosa. Por otro lado, el rendimiento en Xilitol es del 78,8%, mientras que el rendimiento en Arabitol es del 21,11%.

La Figura 40 muestra la conversión y rendimientos (tanto en Arabitol como en Xilitol) de la hidrogenación realizada:



**Figura 40.** Conversión y rendimiento de la reacción de hidrogenación de una mezcla D-Xilosa/L-Arabinosa (80,2%-19,8%) durante 15 minutos a 120°C y 50 bar.



### 5.4.3. D-Xilosa + L-Arabinosa + D-Glucosa

Por último, la preparación de la tercera de las mezclas (D-Xilosa + L-Arabinosa + D-Glucosa (71,2%-17,6%-11,2%)), intenta reproducir los porcentajes que posee el extracto con el que se va a trabajar posteriormente, tomando como el 100% del mismo la cantidad de D-Xilosa, L-Arabinosa y D-Glucosa, por lo que el cálculo de las cantidades a utilizar será análogo al anterior:

$$71,2\% = D - Xilosa$$

$$17,6\% = L - Arabinosa$$

$$11,2\% = D - Glucosa$$

$$7 \frac{g}{l} \cdot 0,712 = 4,984 \frac{g}{l} \text{ de } D - Xilosa$$

$$7 \frac{g}{l} \cdot 0,176 = 1,232 \frac{g}{l} \text{ de } L - Arabinosa$$

$$7 \frac{g}{l} \cdot 0,112 = 0,784 \frac{g}{l} \text{ de } D - Glucosa$$

De nuevo, como la mezcla preparada contiene 500 ml, las cantidades utilizadas son las que aparecen en la Tabla 24:

**Tabla 24.** Cantidades de D-Xilosa, L-Arabinosa y D-Glucosa para la tercera mezcla.

D-Xilosa + L-Arabinosa + D-Glucosa (71,2%-17,6%-11,2%)			
D-Xilosa	D-Arabinosa	D-Glucosa	Total
2,492 g	0,616 g	0,392 g	3,5 g

Cabe destacar que, en los datos obtenidos del extracto a hidrogenar, aparece un alto porcentaje de ácido acético, aunque le tomaremos como despreciable para utilizar únicamente las tres sustancias anteriormente indicadas.

Los porcentajes reales, incluyendo el ácido acético, son los que aparecen en la Tabla 25:

**Tabla 25.** Porcentajes reales del extracto utilizado teniendo en cuenta el ácido acético.

D-Xilosa	D-Arabinosa	D-Glucosa	Ácido acético
54,90%	13,60%	8,60%	22,90%

La reacción que se llevó a cabo utilizando esta mezcla de monómeros, viene resumida en la Tabla 26:

**Tabla 26.** Datos de la reacción de hidrogenación llevada a cabo con la muestra D-Xilosa + L-Arabinosa + D-Glucosa (71,2%-17,6%-11,2%) a 120°C y 50 bar.

<b>Número de la prueba</b>	-	38
<b>Nombre de la prueba</b>	-	JCG-007-2
<b>Catalizador utilizado</b>	-	Ru / Al-MCM-48
<b>Ratio</b>	<i>molC/molRu</i>	142
<b>Cantidad de catalizador utilizado</b>	<i>g</i>	0,474
<b>Alimentación</b>	-	D-Xilosa/L-Arabinosa/D-Glucosa (71,2%-17,6%-11,2%)
<b>Tiempo de operación</b>	<i>minutos</i>	15

Tras completar los 15 minutos que dura la reacción, bajo las condiciones indicadas anteriormente (120°C y 50 bar), se lleva a cabo un análisis del producto obtenido.

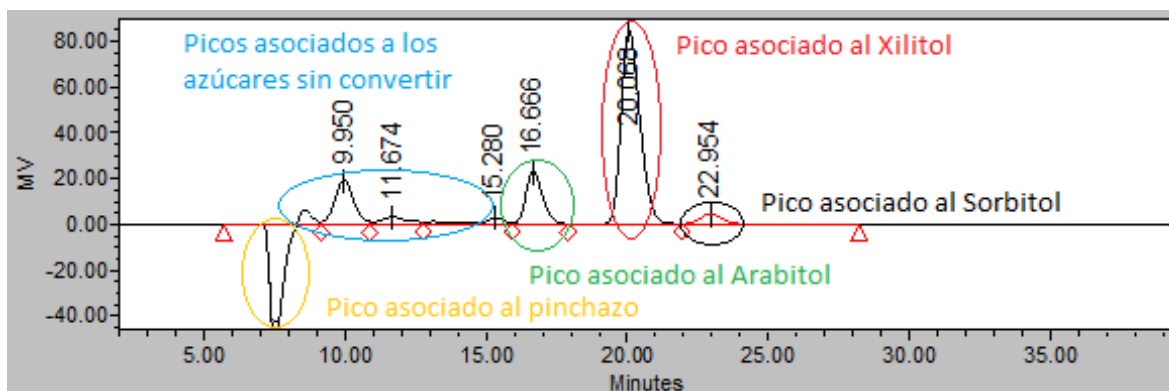
En la prueba denominada JCG-007-2, se introduce en el reactor una mezcla de D-Xilosa, L-Arabinosa y D-Glucosa, preparada con el fin de simular una corriente real de hidrolizados, en sus mismos porcentajes.

En este caso, los monómeros formarán los siguientes alcoholes: Xilitol, Sorbitol y Arabitol.

Partiendo de una mezcla con una concentración de 7 g/l como las anteriores con las que se han trabajado, se han formado 5820 ppm de los alcoholes que se estaban buscando mediante esta reacción de hidrogenación, lo que significa que bajo estas condiciones y utilizando 0,474 g de catalizador, se obtiene una conversión total del 83,1%.

Por otro lado, la conversión de la L-Arabinosa se encuentra en el mismo orden (88,7%), al igual que la de la D-Xilosa (89,43%). Por el contrario, la conversión de la D-Glucosa desciende hasta el 34,2%, por lo que, mediante esta prueba, se pone de manifiesto que la presencia de otros azúcares en la alimentación ralentiza la formación de alcoholes a partir de la D-Glucosa.

Como se ha obtenido una conversión menor que el 100%, significa que no se ha convertido todo en alcoholes, como había ocurrido en otras pruebas anteriores, apareciendo los monosacáridos de la alimentación en el cromatograma de la Figura 41:

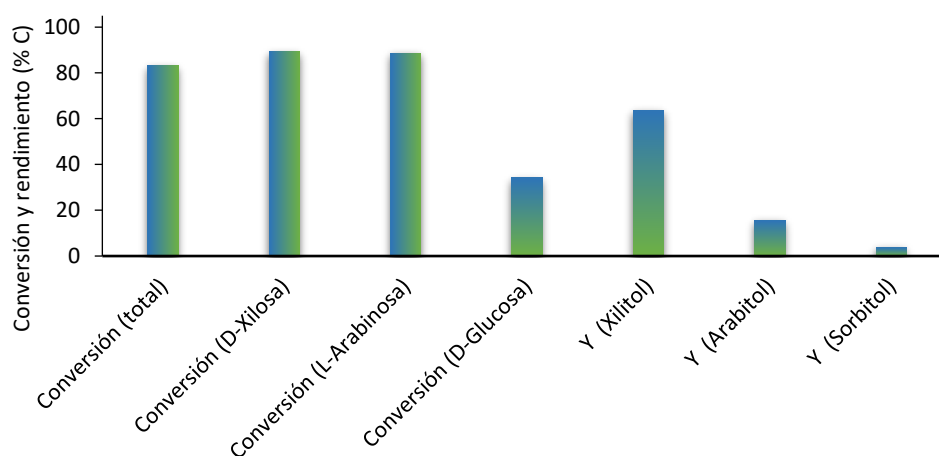


**Figura 41.** Cromatograma de una reacción de hidrogenación con alimentación D-Xilosa + L-Arabinosa + D-Glucosa (71,2%-17,6%-11,2%)

Después de los 15 minutos de reacción, han aparecido 1093 ppm de Arabitol en los productos, además de 4457 ppm de Xilitol y 268 ppm de Sorbitol. La cantidad de xilitol formado es mayor que las otras debido a que en la alimentación, se partía de un 71,2% de D-Xilosa, mientras que los otros monómeros se encontraban en menor concentración.

La concentración de los monosacáridos en el producto obtenido tras la reacción de hidrogenación llevada a cabo, es similar a la concentración de Arabitol calculada, debido a que se requieren 1200 ppm para poder cerrar el balance de materia. Si la conversión fuese del 100%, la suma de los alcoholes aparecidos debería de ser igual a 7000 ppm, pero como en este caso, se está trabajando con una conversión del 83,1%, el resto (16,9%), serán los monosacáridos que no se han convertido.

La Figura 42 muestra la conversión y rendimientos de la hidrogenación realizada en esta prueba:



**Figura 42.** Conversión y rendimiento de la reacción de hidrogenación de una mezcla D-Xilosa + L-Arabinosa + D-Glucosa (71,2%-17,6%-11,2%) durante 15 minutos a 120°C y 50 bar.

Analizando los valores obtenidos tras el análisis del producto, y comparándolo con la mezcla anterior de D-Xilosa y L-Arabinosa, se puede afirmar que la presencia de D-Glucosa se ve reflejada en un gran descenso de la conversión de los azúcares bajo condiciones similares, ralentizando la reacción de hidrogenación.

## 5.5. HIDROGENACIÓN DE FRACCIÓN HEMICELULÓSICA DE CATALPA

Una vez analizadas las reacciones llevadas a cabo a partir de monómeros y de mezclas formadas por D-Glucosa, L-Arabinosa y D-Xilosa, se llevará a cabo el análisis de las hidrogenaciones partiendo del extracto de madera de catalpa.

La respuesta de esta alimentación ante la hidrogenación será distinta a las estudiadas anteriormente, debido a que, en este caso, se deben de obtener en un primer momento los monómeros que la forman, pasando más tarde a los alcoholes correspondientes. Por tanto, en el reactor se tienen que dar consecutivamente la hidrólisis y la hidrogenación.

Inicialmente, se realiza una prueba de HPLC al extracto para conocer su composición y componentes, antes de que se lleve a cabo el calentamiento de la misma. Por ello, la muestra JCG-001-0, consta de la alimentación utilizada en posteriores pruebas de hidrogenación, sin que haya sufrido ningún tipo de transformación previa.

En este análisis al extracto que se va a utilizar como alimentación, se obtienen 60 ppm de Glucosa, 124 ppm de Xilosa, 145 ppm de Arabinosa y 182 ppm de Ácido Acético. Estos valores van a ser fundamentales a la hora de conocer si la alimentación sufre algún cambio durante el periodo de calentamiento hasta 180°C.

Realizando únicamente este paso de calentar la alimentación hasta esta temperatura, se observa que apenas se han sufrido cambios en la misma, encontrándose todos los valores anteriores en el mismo rango (prueba JCG-001-1). Este dato es fundamental, debido a que se puede hidrogenar el extracto conociendo que los cambios en la alimentación comienzan cuando se introduce el H<sub>2</sub> por primera vez, sin afectarle para nada la etapa de calentamiento.

Primeramente, se debe de calcular la cantidad de catalizador empleada para llevar a cabo estas reacciones, las cuales han sido precedidas de unas reacciones de hidrólisis para conocer cómo afecta al extracto esta etapa:

$$\frac{C}{Ru} = 142 \frac{mol}{mol} \rightarrow \rightarrow \rightarrow 142 = \frac{mol C}{mol Ru}$$

$$142 = \frac{TOC}{mol Ru}$$

$$142 = \frac{1,2 \frac{g}{l} C \cdot 0,1 l}{12 \frac{g}{mol} C \cdot mol Ru}$$

$$mol Ru = 7,04 \cdot 10^{-5} mol Ru$$

DATO: Pm Ru=101,07 g/mol.

$$7,04 \cdot 10^{-5} \text{ mol Ru} \cdot 101,07 \frac{\text{g}}{\text{mol}} = 7,12 \cdot 10^{-3} \text{ g Ru}$$

Por cada 100 g de catalizador, se conoce que se posee una cantidad de Ru de 3,5g, por lo que se obtiene lo siguiente:

$$7,12 \cdot 10^{-3} \text{ g Ru} \cdot \frac{100 \text{ g cat}}{3,5 \text{ g Ru}} = 0,2033 \text{ g de catalizador}$$

Utilizando la misma ratio que para las hidrogenaciones de monómeros y mezclas, se observa que la cantidad de catalizador con la que se trabaja es mucho menor (en anteriores hidrogenaciones se trabajaba con 0,474g de Ru/Al-MCM-48).

Las hidrogenaciones que se han realizado utilizando como alimentación el extracto de madera de Catalpa (170°C), se han llevado a cabo bajo las condiciones que aparecen en la Tabla 27:

**Tabla 27.** Datos de las reacciones de hidrogenación llevadas a cabo con el extracto de madera de Catalpa (170°C) a 180°C y 50 bar.

Catalizador: Ru/Al-MCM-48 Ratio: 142 molC/molRu		Alimentación: Extracto de madera de Catalpa Cantidad de catalizador: 0,203 g		
Número de prueba	6	7	8	39
Nombre de la prueba	JCG-002-1	JCG-002-2	JCG-002-3	JCG-008-1
Tiempo de operación	15	7	22	90

Tras realizar estas tres pruebas utilizando como alimentación el extracto de madera de catalpa, se analizan por HPLC.

Se observa, en todas ellas, que la hidrogenación que se pretendía llevar a cabo no ha funcionado de la manera adecuada. Partiendo de esta alimentación, bajo las condiciones de operación seleccionadas no se han detectado alcoholes monoméricos: sorbitol, xilitol o arabitol.

Existen varias explicaciones a este resultado:

1. El tiempo de reacción puede ser que no haya sido suficiente, por lo que no ha dado tiempo a hidrogenar de manera correcta la mezcla.
2. El rendimiento de hidrólisis haya sido muy pequeño y no se han formado monómeros, ni, por tanto, sus respectivos alcoholes monoméricos.
3. La presencia de ácido acético ha inhibido la actividad del catalizador.

## Capítulo 6. CONCLUSIONES Y LÍNEAS FUTURAS





## CONCLUSIONES Y LÍNEAS FUTURAS

En este trabajo se ha evaluado el potencial de catalizadores de Ru/Al-MCM-48 en la hidrogenación de azúcares y mezclas de monómeros.

Las principales conclusiones de este trabajo son:

- Los resultados de este trabajo muestran el buen comportamiento catalítico del Ru/Al-MCM-48 en la hidrogenación de xilosa y en mezclas de azúcares monoméricos.
- La revisión bibliográfica realizada ha puesto de manifiesto el interés de la temática estudiada en este trabajo, así como el estado del arte de la hidrogenación de hemicelulosas con catalizadores heterogéneos.
- Se ha puesto en marcha un montaje de laboratorio con un volumen de reactor de 150 mL, si bien es verdad que habría que resolver los problemas de bombeo de la alimentación y optimizar la cantidad de catalizador.
- Se ha estudiado la cinética de hidrogenación de xilosa utilizando Ru/Al-MCM-48 como catalizador a 80°C, 100°C y 120°C.

Los resultados obtenidos permiten definir las siguientes líneas de trabajo futuro:

- Optimización de la cantidad de catalizador.
- Bombeo y precalentamiento de la alimentación.
- Continuar con la hidrogenación del extracto de madera de catalpa:
  - Estudiando tiempos más largos de reacción,
  - Cuantificando, no sólo alcoholes monoméricos, sino también oligoméricos.
  - Eliminando el ácido acético de la alimentación antes de hidrogenar.



## Capítulo 7. BIBLIOGRAFÍA



## BIBLIOGRAFÍA

Aguirre, M. M. (2015). *Catálisis Heterogénea*.

*Analytical Solutions*. (3 de junio de 2017). BR-100 High Pressure Reactor: [http://www.analyticalsolns.com.au/product/br100\\_high\\_pressure\\_reactor.html#](http://www.analyticalsolns.com.au/product/br100_high_pressure_reactor.html#)

*Berghof*. (3 de junio de 2017). High pressure reactor: <http://www.berghof-instruments.com/en/laboratory-equipment/reactors/high-pressure-reactors/br-100/>

Chander Kuhada, R., Gupta, R., Pal Khasa, Y., & Singh, A. (2011). Bioethanol production from pentose sugars: Current status and future prospects. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, Volume 15, 4950–4962.

Cherubini, F. (2010). The biorefinery concept: Using biomass instead of oil for producing energy and chemicals. *Energy Conversion and Management*, Volumen 51, 1412-1421.

CONAMA. *13º Congreso Nacional del Medio Ambiente*. 13º Congreso Nacional del Medio Ambiente.:

<http://www.conama2016.org/web/generico.php?idpaginas=&lang=es&menu=370&id=343&op=view>

*Cromatografía Líquida de Alta Eficacia*. (12 de mayo de 2017). Instrumentación: [http://www.mncn.csic.es/docs/repositorio/es\\_ES/investigacion/cromatografia/cromatografia\\_liquida\\_de\\_alta\\_eficacia.pdf](http://www.mncn.csic.es/docs/repositorio/es_ES/investigacion/cromatografia/cromatografia_liquida_de_alta_eficacia.pdf)

de Jong, E., & Jungmeier, G. (2015). *Biorefinery Concepts in Comparison*.

Del Real Olivera, J., Prieto García, F., Santos López, E. M., Román Gutiérrez, A. D., & Gordillo Martínez, A. J. (2009). Mathematical simulation of an anaerobic shaken type tank digester for the treatment of residual spills. *Revista Internacional de Contaminacion Ambiental*, 33-41.

Dietrich, K., Hernandez-Mejia, C., Verschuren, P., & Rothenberg, G. (2016). One-Pot Selective Conversion of Hemicellulose to Xylitol. 165–170.

*Diffen*. (2 de mayo de 2017). Hardwood vs Softwood: [http://www.diffen.com/difference/Hardwood\\_vs\\_Softwood](http://www.diffen.com/difference/Hardwood_vs_Softwood)

Dong-Can Lv, Y.-Q. L.-R.-Y. (2015). One-pot production of hydrocarbons from xylitol by hydroiodic acid reduction. *Fuel Processing Technology*, 325-329.

*EcuRed*. (25 de mayo de 2017). Energía de activación: [https://www.ecured.cu/Energ%C3%ADa\\_de\\_activaci%C3%B3n](https://www.ecured.cu/Energ%C3%ADa_de_activaci%C3%B3n)

Energiza. (27 de marzo de 2017). *Energiza*. Biomasa en España: <http://www.energiza.org/eolica/20-biomasa/938-biomasa-en-espa%C3%B1a>

*EU Science Hub*. (2016). The European Commission's science and knowledge service.

*Eurostat*. (2017). Eurostat: <http://ec.europa.eu/eurostat/web/forestry/statistics-illustrated>

Ferrer, J. A. (2015). *Reactores catalíticos heterogéneos*. Alicante.

Fleming, S. A. (2013). *Organic Chemistry Fifth Edition*.

Forestal, D. (2009). *Evaluación de Recursos Leñosos para Usos Energéticos*. Castilla y León.

González-Hernández, J. C., Alvarez-Navarrete, M., & Zamudio Jaramillo, M. A. (2011). Producción y Aplicaciones Biotecnológicas del Xilitol. Volumen 15, Número 2.

*Hach*. (2 de Febrero de 2017). Analizador de Laboratorio de Carbono Orgánico Total QbD1200:

[https://www.interempresas.net/FeriaVirtual/Catalogos\\_y\\_documentos/87050/Qbd1200\\_DOC052.61.25005.pdf](https://www.interempresas.net/FeriaVirtual/Catalogos_y_documentos/87050/Qbd1200_DOC052.61.25005.pdf)

Huang, L., Xiao, H., Huang, Q., & Eic, M. (2008). Al-MCM-48 as a potential hydrotreating catalyst support: I – Synthesis and adsorption study. *Microporous and Mesoporous Materials*, Volumen 111, 404-410.

(2011). *ICRA (Analizador de Carbono Orgánico Total)*. Analizador de Carbono Orgánico Total (TOC): [http://www.icra.cat/files/equipment/SCT-UAQ%2005\\_2.pdf](http://www.icra.cat/files/equipment/SCT-UAQ%2005_2.pdf)

(2009). *Introducción a la Catálisis Heterogénea*.

*IPCC*. (13 de mayo de 2017). Intergovernmental Panel on Climate Change: [http://www.ipcc.ch/home\\_languages\\_main\\_spanish.shtml](http://www.ipcc.ch/home_languages_main_spanish.shtml)

José Cocero, M., M. Yedro, F., Salmi, T., & García-Serna, J. (2017). Chemical composition and extraction kinetics of Holm oak (*Quercus ilex*) hemicelluloses using subcritical water. *The Journal of Supercritical Fluids*.

Kusema, B. T., Faba, L., Kumara, N., & Mäki-Arvela, P. (2012). Hydrolytic hydrogenation of hemicellulose over metal modified mesoporous catalyst. *Catalysis Today*, Volume 196, 26–33.

*Linde*. (2017). High performance liquid chromatography (HPLC).

Lv, D.-C., Liu, Y.-Q., Li, S.-R., Ye, Y.-Y., & Wang, D. (2015). One-pot production of hydrocarbons from xylitol by hydroiodic acid reduction. *Fuel Processing Technology*, Volumen 131, 325–329.

M. Yedro, F., A. Cantero, D., Pascual, M., García-Serna, J., & Cocero, M. J. (2015). Hydrothermal fractionation of woody biomass: Lignin effect on sugars recovery. *Bioresource Technology*, Volumen 191, 124-132.

M. Yedro, F., García-Serna, J., A. Cantero, D., Sobrón, F., & Cocero, M. J. (2015). Hydrothermal fractionation of grape seeds in subcritical water to produce oil extract, sugars and lignin. *Catalysis Today*, Volumen 257, Parte 2, 160-168.

MAPAMA. (25 de abril de 2017). MAPAMA. Ministerio de Agricultura y Pesca, Alimentación y Medio Ambiente: <http://www.mapama.gob.es/es/estadistica/temas/default.aspx>

Miasnikov, A. N., & Povelainen, M. (2006). Production of D-arabitol by a metabolic engineered strain of *Bacillus subtilis*. *Biotechnology Journal*, Volumen 1, 214-219.

Mikkola, J.-P., Salmi, T., & Sjöholm, R. (1999). Kinetic and Mass-transfer Effects in the Hydrogenation of Xylose to Xylitol. *Studies in Surface Science and Catalysis*, Volumen 122, 351-358.

Mikkola, J.-P., Salmi, T., & Sjöholm, R. (1999). Kinetic and Mass-transfer Effects in the Hydrogenation of Xylose to Xylitol. *Studies in Surface Science and Catalysis*, Volumen 122, 351–358.

Murzin, D. Y., Kusema, B., Murzina, E. V., Aho, A., & Tokarev, A. (2015). Hemicellulose arabinogalactan hydrolytic hydrogenation. *Journal of Catalysis*, Volumen 330, 93-105.

Ngoc Pham, T., Samikannu, A., Rautio, A.-R., Juhasz, K. L., & Konya, Z. (2016). Catalytic Hydrogenation of D-Xylose Over Ru Decorated Carbon Foam Catalyst in a SpinChem Rotating Bed Reactor. *Topic in Catalysis*, 1165-1177.

P. W. Atkins, J. d. (1999). *Fisicoquímica*. Barcelona: Omega.

Pineda, A. P. (2013). *Silicatos y alúminosilicatos mesoporosos funcionalizados como catalizadores en reacciones de interés en química fina*. Córdoba.

*Químicas*. (2015). La Energía de Activación.

Roberts, V. M. (2008). *Homogeneous and heterogeneous catalyzed*. Múnich.

Romero, A., Alonso, E., Nieto-Márquez, A., & Essayem, N. (2017). One-pot catalytic hydrolysis/hydrogenation of cellobiose into hexitols over Ru/Al-MCM-48.

Romero, A., Alonso, E., Sastre, Á., & Nieto-Márquez, A. (2016). Conversion of biomass into sorbitol: Cellulose hydrolysis on MCM-48 and d-Glucose hydrogenation on Ru/MCM-48. *Microporous and Mesoporous Materials*, Volumen 224, 1-8.

Romero, A., Cantero, D. A., Nieto-Márquez, A., & Martínez, C. (2016). Supercritical water hydrolysis of cellulosic biomass as effective pretreatment to catalytic production of hexitols and ethylene glycol over Ru/MCM-48. *Green Chemistry*.

Romero, A., Díaz, J. A., Riviere, M., Nieto, A., & Alonso, E. (2016). Catalytic hydrogenolysis of cellobiose into hexitols over Ru/Al-MCM-48. *5th Portuguese Young Chemists Meeting (5th PYChem) and 1st European Young Chemists Meeting (1st EYChem)*. Guimaraes (Portugal).

Romero, A., Nieto-Márquez, A., & Alonso, E. (2017). Bimetallic Ru: Ni/MCM-48 catalysts for the effective hydrogenation of d-glucose into sorbitol. *Applied Catalysis A: General*, Volumen 529, 49-59.

Sandoval Díaz, L. E. (2011). *Activación de n-butano en Zeolitas USY: Influencia de la composición del catalizador y de la contaminación por sodio y vanadio*. Bogotá.

Shimadzu. (17 de mayo de 2017). Shimadzu: <http://www.shimadzu.com/an/toc/lab/tocv-csh.html>

Sifontes Herrera, V., Rivero Mendoza, D., Leino, A.-R., & Zolotukhin. (2016). Sugar hydrogenation in continuous reactors: From catalyst particles towards structured catalysts. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, Volumen 109, 1-10.

*Smartline Pump 100 Manual V5010A*. (s.f.). Knauer.

*Técnicas de caracterización. Capítulo IV. Conceptos Generales*. (2015).

(2015). UCA. Método Sol-Gel: <http://www2.uca.es/grup-invest/geles/paginas/intro.html>

Vanama, P. K., Kumar, A., Ginjupalli, S. R., & Komandur, V. C. (2014). Vapor-phase hydrogenolysis of glycerol over nanostructured Ru/MCM-41 catalysts. *Catalysis Today*.

Wagemann, K. (2015). *Biorefineries Roadmap*. Berlín.

WBA. (15 de mayo de 2017). World Bioenergy Association: [http://www.worldbioenergy.org/uploads/WBA%20Report\\_Bioenergy%20in%20European%20Cities\\_lowres.pdf](http://www.worldbioenergy.org/uploads/WBA%20Report_Bioenergy%20in%20European%20Cities_lowres.pdf)



Xilem. (29 de marzo de 2017). Total Organic Carbon (TOC): <http://www.xylem-analytics.com.au/parametersdetail.php?Total-Organic-Carbon-TOC-22>

Yadav, M., Mishra, D. K., & Hwang, J.-S. (2012). Catalytic hydrogenation of xylose to xylitol using ruthenium catalyst on NiO. *Applied Catalysis A: General*, Volumen 425–426, 110-116.

Yadav, M., Mishra, D. K., & Hwang, J.-S. (2012). Catalytic hydrogenation of xylose to xylitol using ruthenium catalyst on NiO modified TiO<sub>2</sub> support. *Applied Catalysis A: General*, Volumen 425–426, 110–116.

Yoshikawa, J., Habe, H., Morita, T., & Fukuoka, T. (2014). Production of d-arabitol from raw glycerol by *Candida quercitrusa*. *Applied Microbiology and Biotechnology*, 2947–2953.

Zhu, H.-Y., Xu, H., Dai, X.-Y., Zhang, Y., & Ying, H.-J. (2010). Production of d-arabitol by a newly isolated *Kodamaea ohmeri*. *Bioprocess and Biosystems Engineering*, 565-571.



## CAPÍTULO 8. ANEXOS

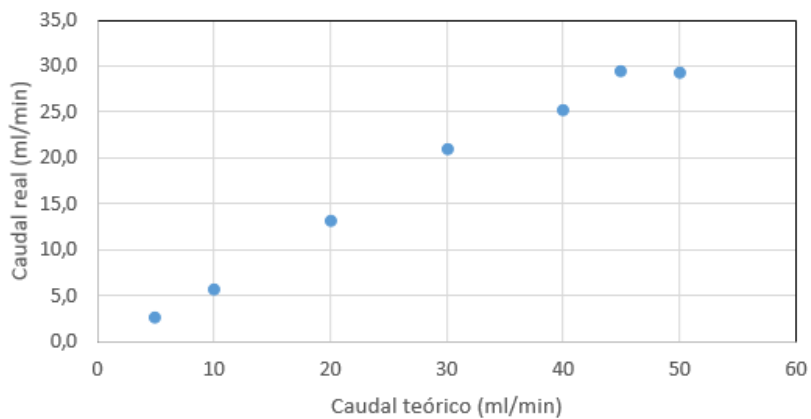


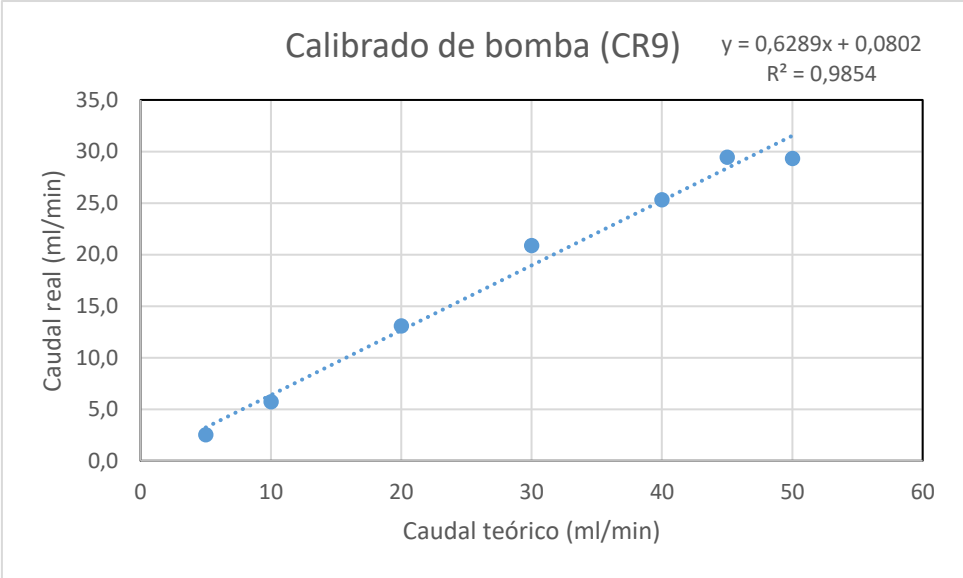
*Apéndice 1: Calibrado de bomba 1.*



Caudal teórico (mL/min)	Tiempo (seg)	Tiempo (min)	Volumen (mL)	Caudal real (mL/min)	Media caudal real (mL/min)
5	221,37	3,690	10	2,710	2,5200
	251,6	4,193		2,385	
	243,41	4,057		2,465	
10	105,47	1,758	10	5,689	5,7196
	103,93	1,732		5,773	
	105,32	1,755		5,697	
20	90,13	1,502	20	13,314	13,0816
	90,35	1,506		13,282	
	94,87	1,581		12,649	
30	57,22	0,954	20	20,972	20,8822
	56,5	0,942		21,239	
	58,72	0,979		20,436	
40	46,93	0,782	20	25,570	25,3285
	48,13	0,802		24,932	
	47,09	0,785		25,483	
45	39,28	0,655	20	30,550	29,4682
	41,75	0,696		28,743	
	41,22	0,687		29,112	
50	66,12	1,102	30	27,223	29,3467
	62,54	1,042		28,782	
	63,95	1,066		28,147	
	54,16	0,903		33,235	

Calibrado de bomba (CR9)





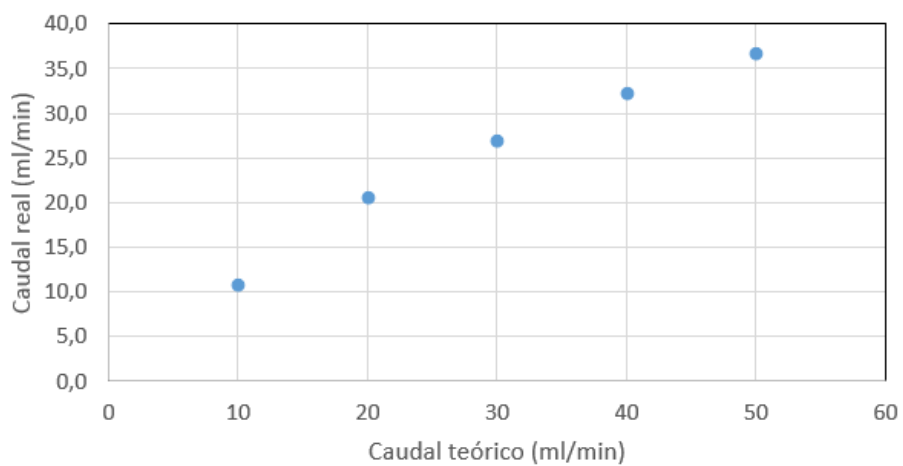


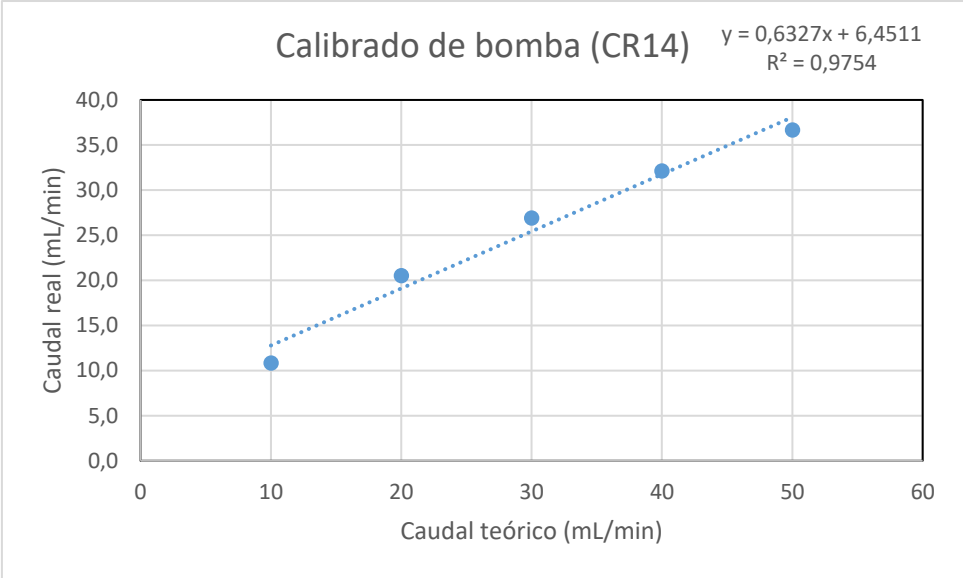
*Apéndice 2: Calibrado de bomba 2.*



Caudal teórico (mL/min)	Tiempo (seg)	Tiempo (min)	Volumen (mL)	Caudal real (mL/min)	Media caudal real (mL/min)
10	110,53	1,842	20	10,857	10,8608
	110,19	1,837		10,890	
	110,75	1,846		10,835	
20	57,5	0,958	20	20,870	20,5229
	59,19	0,987		20,274	
	58,75	0,979		20,426	
30	44,15	0,736	20	27,180	26,9372
	44,66	0,744		26,870	
	44,84	0,747		26,762	
40	36,13	0,602	20	33,213	32,1563
	37,57	0,626		31,940	
	38,32	0,639		31,315	
50	32,44	0,541	20	36,991	36,6768
	32,69	0,545		36,708	
	33,03	0,551		36,331	

Calibrado de bomba (CR14)





*Apéndice 3: Reactor Berghof BR-100.*



# BERGHOF

The Next  
Generation

## High Pressure

highpreactor



BR-25  
BR-100  
BR-300  
BR-1000  
BR-4000

## Reactors



PRODUCTS + INSTRUMENTS

ZUNDEL Holding Enterprise

*realizing  
your  
ideas.*

# The Next Generation

## Greater Value

BERGHOF high pressure reactors are constructed of the highest quality materials. Each reactor is the product of our experience in laboratory instrument design and construction, gained in over 25 years. Continuous product evaluation and innovative development mean that BERGHOF high pressure reactors are up-to-date products.

**THE NEXT GENERATION** stands for both the expansion of our product line to include smaller volumes (down to 25ml) as well as for more flexibility of essential product features. For the first time, all high pressure reactors are now available as pure stainless steel or Hastelloy reactors, as well as with complete PTFE lining; a feature unique to BERGHOF. All fittings are also available in these materials.

Thanks to the high quality of the employed materials and the high precision during manufacturing, BERGHOF high pressure reactors offer above average service lives.

All reactor vessels are individually tested and certified.

Naturally, individual customer needs will continue to be met with special designs.

This is “added value” you can comprehend: technically safe and reliable; economical in use, and; simple with regard to handling.

## Greater Stirring Force

The selection ranges from economical magnetic bar stirrers for low-volume high pressure reactors, up to magnetic couplings with a variety of drives and torque levels. Special designs with torque values up to 12 Nm are also available for use with particularly viscous media such as melts. The magnetic couplings are made of either stainless steel or Hastelloy and can be outfitted with PTFE, stainless steel, or Hastelloy stirrers in a wide variety of shapes and designs.



## Greater Comfort

The high pressure reactors are equipped with clamping rings or clamping chains for quick and easy opening without the need for tools.

All fittings are designed to have no dead spaces. Cross- and T-pieces are no longer required. This results in a significant reduction of the contamination risk and makes the high pressure reactors easy to handle and to maintain.

The user can easily remove and reinstall all fittings for cleaning and service.



## Greater Safety

The reactor vessels, made of either stainless steel or Hastelloy, are individually tested and certified.





### Greater Flexibility Fittings

With regard to the various fittings used with high pressure reactors, the choice is yours: Aside from the wide selection of standard fittings, special fittings are also available, for example, for liquid injection under operating pressure or for electrode connections. The modular design allows these to be supplemented by additional fittings at any time.

All fitting components are available in either stainless steel or Hastelloy.

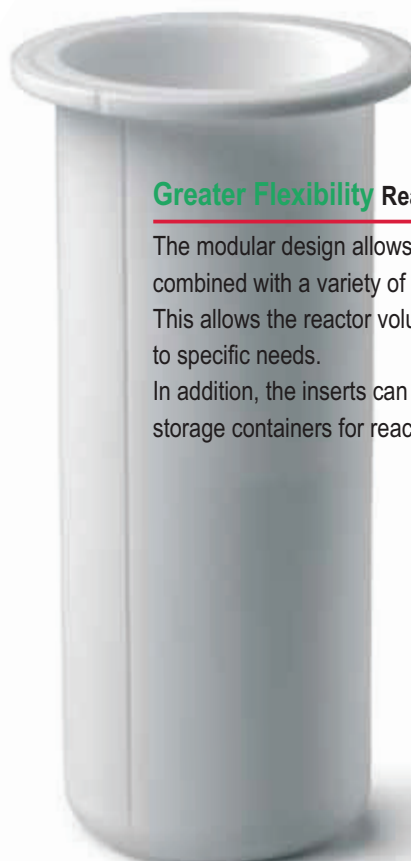
### Greater Flexibility Materials

The integrated material concept of BERGHOF high pressure reactors makes it easy to find the material best suited for any reaction medium.

The high pressure reactors and fittings come in either pure stainless steel or Hastelloy.

The outstanding characteristic of BERGHOF high pressure reactors lies in the unique, complete PTFE lining of the reactor vessels and lids.

The heavy-walled, several millimeter thick inserts and linings offer effective protection against even the most corrosive materials such as acids and bases.



### Greater Flexibility Reactor Vessels

The modular design allows any reactor head to be combined with a variety of reactor vessels and inserts. This allows the reactor volume to be optimally adapted to specific needs.

In addition, the inserts can also serve as practical storage containers for reaction solutions.

# The Next Generation

## The Details

BERGHOF high pressure reactors come in a wide range, allowing you to individually configure your particular reactor system. The flexibility when it comes to reactor selection combined with the available material combinations guarantee that the right reactor system can be configured for practically any reaction mixture and preparation size.

BERGHOF offers a well-rounded reactor program: A comprehensive line of accessories such as heaters, temperature controllers, stirrers offering a variety of torque levels, stand systems, data loggers, software, and much more make laboratory work easier and more comfortable.

Authorized dealers provide knowledgeable advice in the selection of just the right products. Our technical service offers rapid response and assistance for any questions.

We use workshops and individual demonstrations to impart the necessary "know-how". Our web pages contain application examples for downloading.

## Safety

BERGHOF high pressure reactors are designed, built, and tested in compliance with the 97/23/EG equipment guideline, based on the AD-2000 body of regulations.

Acting as an independent specialist, the TÜV inspects the design and carries out pressure testing where required for CE qualification.

Each BERGHOF high pressure reactor is hydrostatically pressure-tested at 1.6-times its maximum operating pressure and undergoes a leak test with nitrogen. Only after passing these tests and prior to delivery do BERGHOF high pressure reactors receive the associated plant certificate to document their faultless function. On request we can also provide explosion-proof pressure sensors and manometers.

BERGHOF Products + Instruments GmbH is certified in accordance with DIN EN ISO 9001:2000.

## Sealing

Reliable reactor sealing is provided by a conical flange lock and an O-ring made of PTFE, Viton®, or Kalrez®.

Easy-to-use, quick-release clamping chains or clamping rings are used for tool-free opening and closing.

The various materials used for the O-rings have different, application-specific characteristics:

PTFE offers unsurpassed resistance to practically all chemicals and permits operating temperatures up to 230°C to be employed.

Viton® and Kalrez® are true elastomers and are suitable for operating temperatures up to 230°C and 300°C, respectively.

In contrast to PTFE, Viton® has a very limited chemical resistance while, as a fluoro-elastomer, Kalrez® is resistant to most chemicals.

## Reactor Vessels

All BERGHOF high pressure reactor vessels are available in either stainless steel or Hastelloy.

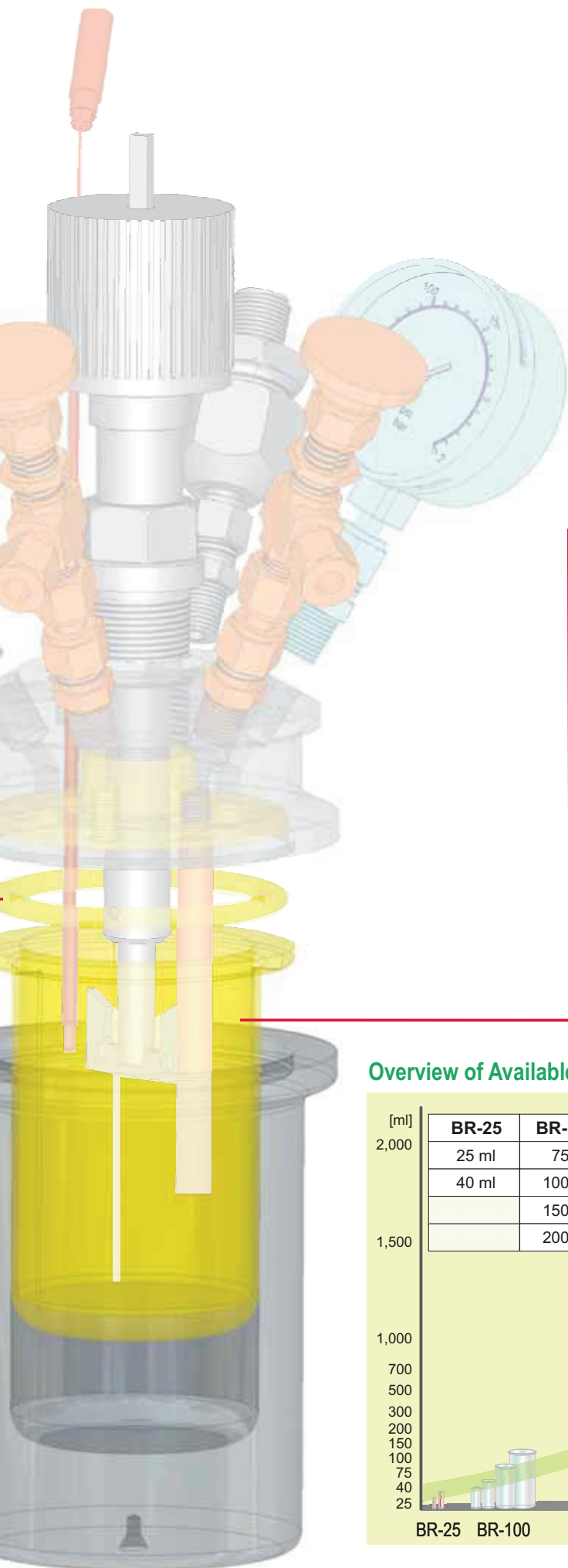
Stainless steel reactors are ideally suited for applications involving organic solvents and most organic acids.

These reactors can be fully lined with PTFE.

The lining consists of a removable PTFE insert with a wall thickness between 1.6 mm and 7.4 mm together with an at least 3.7 mm-thick PTFE liner in the reactor lid.

Together, these provide effective corrosion protection for all reactor components which come into contact with the medium.

We recommend reactors and fittings made entirely of Hastelloy to provide corrosion protection for applications involving strong mineral acids or aggressive gases.



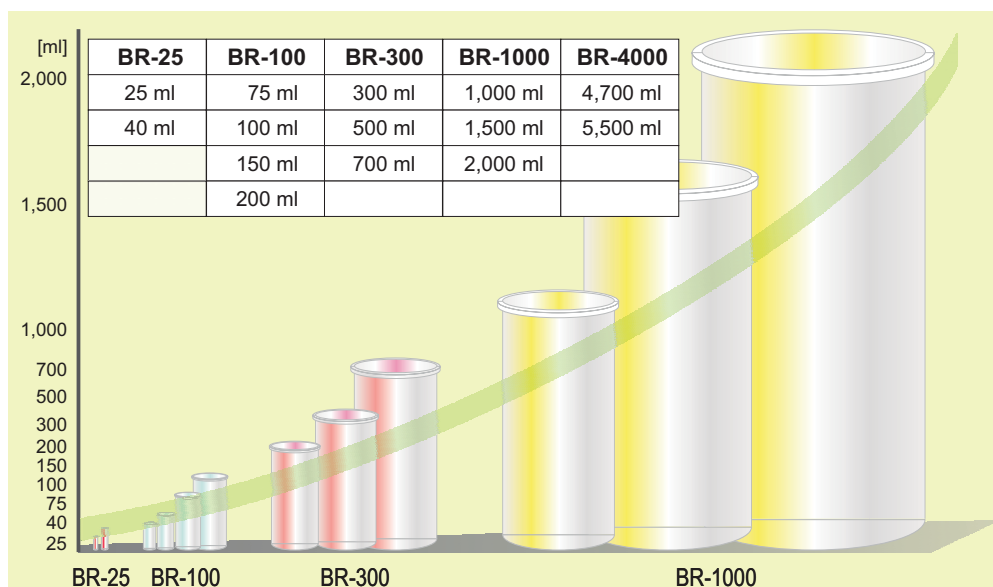
### Inserts

Only BERGHOF high pressure reactors offer the optional PTFE lining feature for corrosion protection. For this feature, a PTFE insert with a wall thickness between 1.6 mm and 7.4 mm is placed in the reactor vessel.

The variable insert wall thicknesses also permit precise graduation of the reactor volume.

Tip: The PTFE inserts can also serve as practical storage containers for reaction solutions.

### Overview of Available PTFE Inserts



# The Next Generation

## Standard Fittings

All standard fittings are available in either stainless steel or Hastelloy. A standard fitting consists of a gas valve to vent the reactor and a rupture disc to provide protection against over-pressure.

Optionally, an overflow valve can also be installed as a redundant over-pressure protection device. The over-pressure valves are equipped with a coupling for pressure lines to harmlessly carry off released gases and vapors.

Standard fittings can be modified for connection to systems for liquid and gas sampling.

All fittings are equipped with smoothly operating, screw-on clamping rings. This makes BERGHOF high pressure reactors extremely service and maintenance friendly.

## Special Fittings

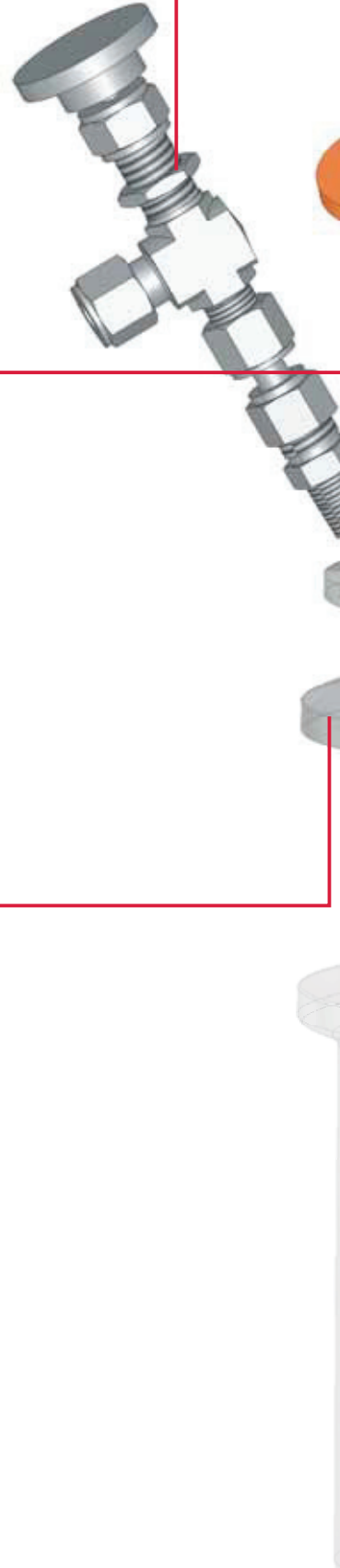
Special fittings available on request include systems for liquids and solids injection at operating pressure, electrode inserts, and view ports.

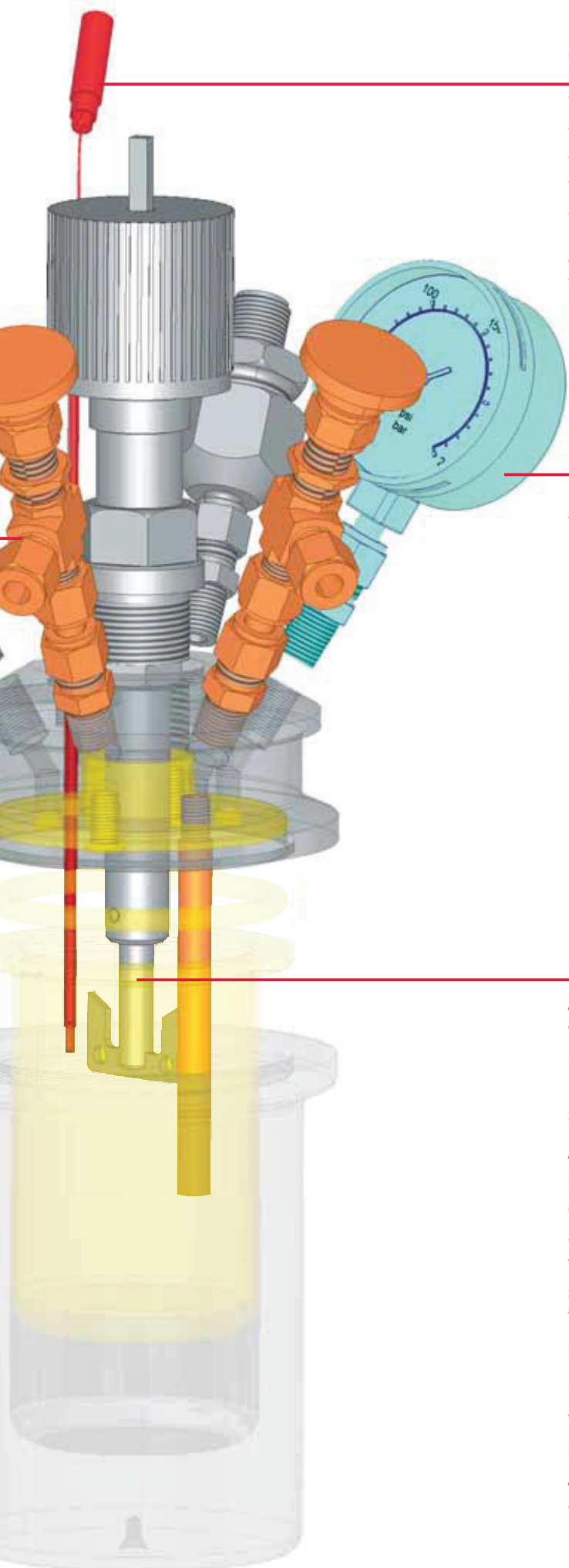
In addition, test reactors can be adapted to include cameras and interior lighting for material testing.

## Reactor Lids

The reactor lid is made of stainless steel and can be effectively protected against corrosion by means of an at least 3.7 mm-thick PTFE lining.

For applications involving strong mineral acids or aggressive gases, we recommend that all components which come into contact with gases (fittings), or even the entire reactor be made of Hastelloy.





## Temperature Sensing and Regulation

The internal reactor temperature is continuously measured with the aid of a temperature probe. The temperature probe is inserted into a submersion tube made of stainless steel, stainless steel with a PFA jacket, or Hastelloy. We offer a freely programmable PID temperature controller for heater control.

A second, independent temperature probe can also be installed to protect the reactor against overheating.

## Pressure Measurement

Either a manometer or an electric pressure sensor can be factory-installed for pressure measurement.

Manometers for a variety of pressure ranges are available.

Pressure transducer made of either stainless steel or Hastelloy can be installed to protect the pressure measuring system against aggressive media. The pressure transducer transfers the reactor pressure to the sensor or the manometer, without these components themselves having to come into direct contact with the aggressive media.

Explosion-proof pressure sensors and manometers are also available on request.

## Stirrer Technology

A variety of stirring techniques are employed, depending on the vessel volume and the medium being stirred.

Small-volume reactors are stirred with the aid of magnetic bar stirrers. Reactors with volumes greater than 300 ml are stirred by means of a stirrer shaft.

A variety of paddle shapes permit an effective adaptation to the media being stirred. Stirring force is transferred via a removable magnetic coupling in the reactor lid. In turn, this coupling is mechanically coupled to an external stirrer motor. With available torque levels ranging from 20 Ncm to 90 Ncm, solutions with viscosities of up to 4000 m Pa s can be easily stirred.

The product line is rounded out by a number of stirrer motors in various power classes, together with their matching mounting stands.

Special models are available if higher torque values are required.

The rotational speed of the working shaft which is held by a sliding bearing made of PTFE / carbon is measured by a contactless sensor. An additional valve can also be installed for cleaning the internal magnetic coupling.

**The "Little One" from BERGHOF:**

Ideal for the smallest test samples using raw materials which are expensive or difficult to produce.



<b>Stainless Steel SS 316TI:</b>	25 ml or 40 ml
<b>Hastelloy C-4:</b>	25 ml or 40 ml
<b>Stainless Steel SS 316TI with PTFE Insert:</b>	25 ml or 40 ml
<b>Max. operating pressure:</b>	200 bar / 2,900 psi
<b>Max. temperature:</b>	230°C PTFE and Viton® seal 300°C FFPM seal (e.g. Kalrez®)
<b>Stirring:</b>	Magnetic stirrer
<b>Heating:</b>	Hot plate BLH-800 + Heater block

**Brief Description**

The high pressure reactor is available in Stainless Steel SS 316TI, Hastelloy C-4, or Stainless Steel SS 316TI with a PTFE insert and with no lid liner.

The useable reactor volume can be varied by the employment of different reactor vessels ranging from 25 ml to 40 ml. Smaller volumes are available on request.

To close the reactor, the vessel is simply screwed into the lid by hand.

The reactor is sealed by means of a conical flange lock and an O-ring made of PTFE, Viton®, or Kalrez®.

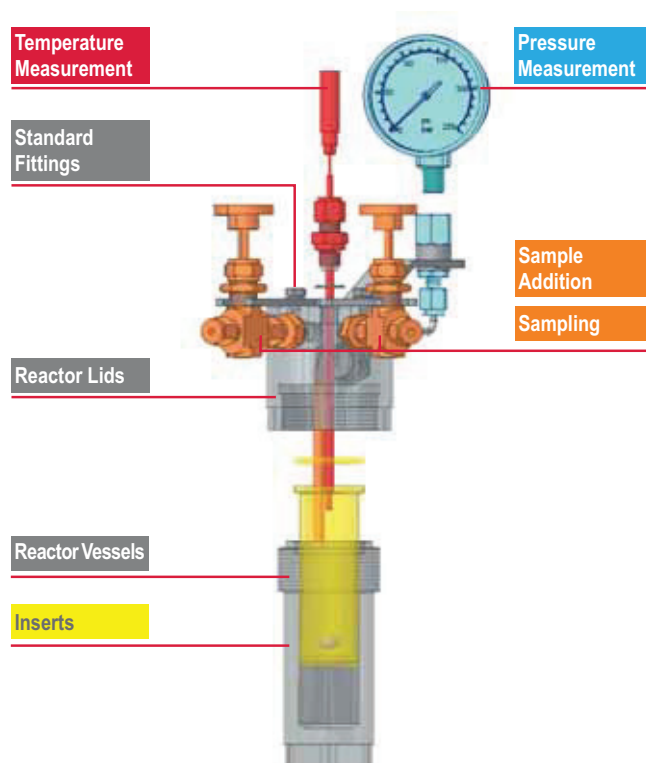
The matching fittings sets are available in Stainless Steel SS 316TI or Hastelloy C-4.

The lid offers a total of six connections which can be employed as follows:

- 1 x temperature probe submersion tube;
- 1 x metal rupture disc to safely limit the maximum pressure;
- 1 x pressure indicator;
- 1 x pressure relief valve;
- 2 x for any other purpose, e.g., a gas sampling valve or liquid sampling.

Temperature regulation is by means of a temperature probe in a submersion tube to measure the internal reactor temperature.

Optionally, a second temperature probe can be employed to provide over-temperature protection.



## The “Handy One” from BERGHOF:

The standard reactor for day-to-day laboratory applications.



## Brief Description

The high pressure reactor is available in Stainless Steel SS 316TI, Hastelloy C-4, or Stainless Steel SS 316TI with a PTFE lining closed on all sides.

The reactor is locked with a quick-lock chain that is manually applied, without the need for tools.

The reactor is sealed by means of a conical flange lock and an O-ring made of PTFE, Viton®, or Kalrez®.

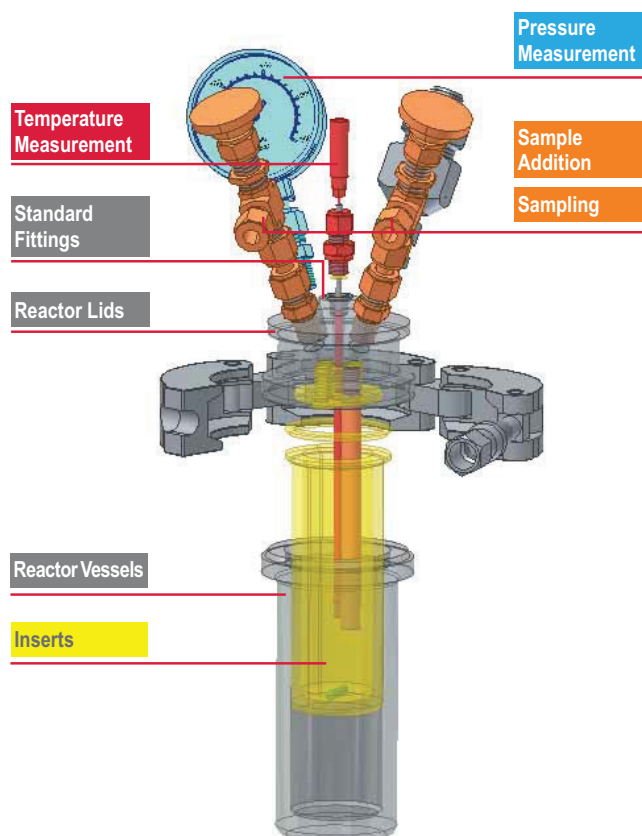
The matching fittings sets are available in Stainless Steel SS 316TI or in Hastelloy C-4.

The lid offers a total of six connections which can be employed as follows:

- 1 x temperature probe submersion tube;
- 1 x metal rupture disc to safely limit the maximum pressure;
- 1 x pressure indicator;
- 1 x pressure relief valve;
- 2 x for any other purpose, e.g., a gas sampling valve or liquid sampling.

Temperature regulation is by means of a temperature probe in a submersion tube to measure the internal reactor temperature. Optionally, a second temperature probe can be employed to provide over-temperature protection.

<b>Stainless Steel SS 316TI:</b>	150 ml or 200 ml
<b>Hastelloy C-4:</b>	150 ml or 200 ml
<b>Stainless Steel SS 316TI with PTFE Insert:</b>	75 ml, 100 ml, 150 ml or 200 ml
<b>Max. operating pressure:</b>	200 bar / 2,900 psi
<b>Max. temperature:</b>	230°C PTFE and Viton® seal 300°C FPM seal (e.g. Kalrez®)
<b>Stirring:</b>	Magnetic stirrer
<b>Heating:</b>	Hot plate BLH-800 + Heater block



### The "Universal One" from BERGHOF:

Persuasive with its wide variety of stirring and heating options.



<b>Stainless Steel SS 316Ti:</b>	350 ml, 600 ml or 900 ml
<b>Hastelloy C-4:</b>	350 ml, 600 ml or 900 ml
<b>Stainless Steel SS 316Ti with PTFE Insert:</b>	300 ml, 500 ml or 700 ml
<b>Max. operating pressure:</b>	200 bar / 2,900 psi
<b>Max. temperature:</b>	230°C PTFE and Viton® seal 300°C FFPM seal (e.g. Kalrez®)
<b>Stirring:</b>	Magnetic stirrer or Magnetic coupling
<b>Heating:</b>	Hot plate BLH-800 + Heater block  Heating jacket BHM-300, BHM-500, BHM-700  Thermostatic jacket BTM-300, BTM-500, BTM-700

### Brief Description

The high pressure reactor is available in Stainless Steel SS 316Ti, Hastelloy C-4, or Stainless Steel SS 316Ti with a PTFE lining closed on all sides.

The reactor is locked with a quick-lock clamp that is manually applied, without the need for tools.

The reactor is sealed by means of a conical flange lock and an O-ring made of PTFE, Viton® or Kalrez®.

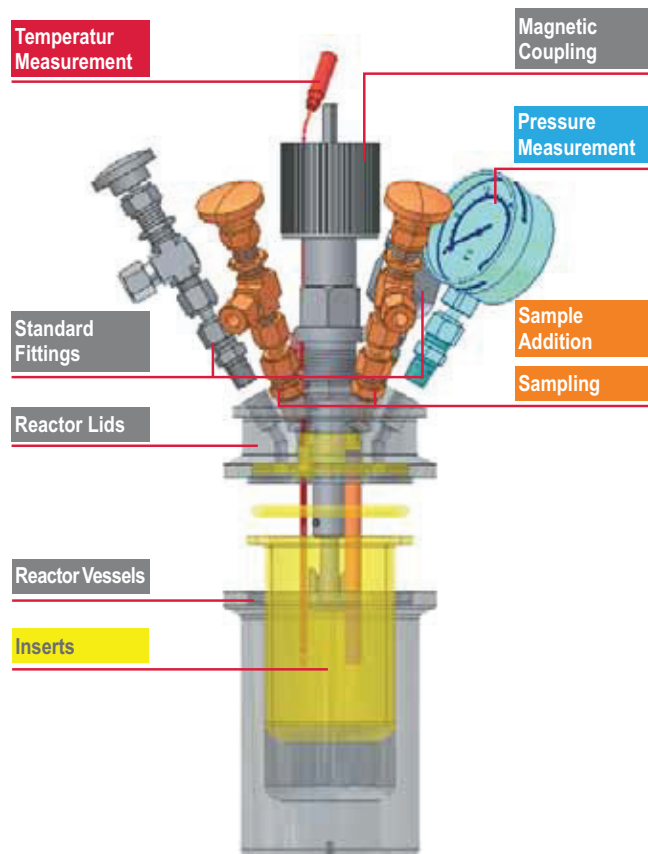
The matching fittings sets are available in Stainless Steel SS 316Ti or in Hastelloy C-4.

The lid offers a total of six connections which can be employed as follows:

- 1 x temperature probe submersion tube;
- 1 x metal rupture disc to safely limit the maximum pressure;
- 1 x pressure indicator;
- 1 x pressure relief valve;
- 2 x for any other purpose, e.g., a gas sampling valve or liquid sampling.

Temperature regulation is by means of a temperature probe in a submersion tube to measure the internal reactor temperature. Optionally, a second temperature probe can be employed to provide over-temperature protection.

A matching stand system is available for mounting the stirrer drive.





## The “Big One” from BERGHOF:

Exactly right for larger test samples.



<b>Stainless Steel SS 316TI:</b>	1,100 ml, 1,700 ml or 2,300 ml
<b>Hastelloy C-4:</b>	1,100 ml, 1,700 ml or 2,300 ml
<b>Stainless Steel SS 316TI with PTFE Insert:</b>	1,000 ml, 1,500 ml or 2,000 ml
<b>Max. operating pressure:</b>	200 bar / 2,900 psi
<b>Max. temperature:</b>	230°C PTFE and Viton® seal 300°C FFPM seal (e.g. Kalrez®)
<b>Stirring:</b>	Magnetic coupling
<b>Heating:</b>	Heating jacket BHM-1000, BHM-1500/2000 Thermostatic jacket BTM-100, BTM-1500/2000

## Brief Description

The high pressure reactor is available in Stainless Steel SS 316TI, Hastelloy C-4 or Stainless Steel SS 316TI with a PTFE lining closed on all sides.

The reactor is locked with a quick-lock chain that is manually applied, without the need for tools.

The reactor is sealed by means of a conical flange lock and an O-ring made of PTFE, Viton® or Kalrez®.

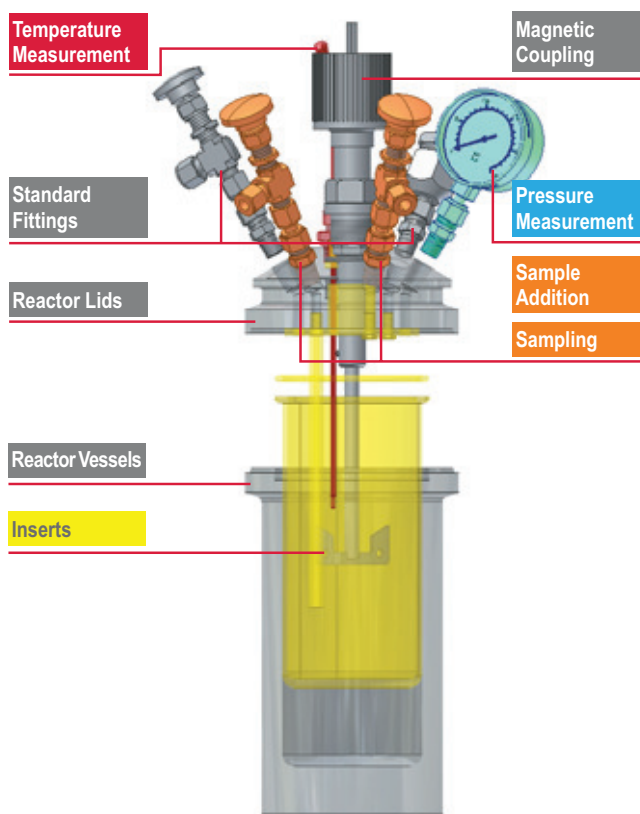
The matching fittings sets are available in Stainless Steel SS 316TI or in Hastelloy C-4.

The lid offers a total of six connections which can be employed as follows:

- 1 x temperature probe submersion tube;
- 1 x metal rupture disc to safely limit the maximum pressure;
- 1 x pressure indicator;
- 1 x pressure relief valve;
- 2 x for any other purpose, e.g., a gas sampling valve or liquid sampling.

Temperature regulation is by means of a temperature probe in a submersion tube to measure the internal reactor temperature. Optionally, a second temperature probe can be employed to provide over-temperature protection.

A matching stand system is available for mounting the stirrer drive.



### The “Strong One” from BERGHOF:

Exactly right for your kilo-lab.



**Stainless Steel SS 316TI:** 5,500 ml

**Hastelloy C-4:** on request

**Stainless Steel SS 316TI  
with PTFE Insert:** 4,700 ml

**Max. operating pressure:** 150 bar/2,175 psi

**Max. temperature:** 230°C FPM and Viton® seal  
300°C FFPM seal (e.g. Kalrez®)

**Stirring:** Magnetic coupling

**Heating:** Heating jacket BHM-4000  
Thermostatic jacket  
BTM-4000  
Internal heating/cooling coil

### Brief Description

The high pressure reactor is available in Stainless Steel SS 316TI, Hastelloy C-4 or Stainless Steel SS 316TI with a PTFE lining closed on all sides.

The reactor is locked with a quick-lock chain that is manually applied.

The reactor is sealed by means of a conical flange lock and an O-ring made of Viton® or FPM sheathed Viton®.

The matching fittings sets are available in Stainless Steel SS 316TI or in Hastelloy C-4 on request.

The lid offers a total of eight connections which can be employed as follows:

- 1 x temperature probe submersion tube;
- 1 x metal rupture disc to safely limit the maximum pressure and exhaust ventilation;
- 1 x pressure indicator;
- 1 x pressure relief valve;
- 2 x Heating/cooling coil;
- 2 x for any other purpose, e.g., a gas sampling valve or liquid sampling.

Temperature regulation is by means of a temperature probe in a submersion tube to measure the internal reactor temperature. Optionally, a second temperature probe can be employed to provide over-temperature protection.

Reactor is mounted on a laboratory cart with crane and stand system for mounting the stirrer drive.

BERGHOF offers a variety of heating systems. They are all matched to the volumes of the various reactors.

For small reactors up to 300 ml, economical laboratory hot plates with heating block attachments can be employed. Reactors with a nominal volume of 300 ml or greater are heated by means of heating jackets in the form of either an electric or thermostat-equipped jacket connected to a recirculating thermostat.

The BTC-3000 universal regulating unit with integrated data logging function provides process security and secure access as the process progresses.

The reactor systems up to 2 liters are designed as easily operated tabletop units with a stand on which to mount stirrer motors.

## Electric Heating Jackets BHM-300 to BHM-4000



The electrically heated BERGHOF heating jackets are equipped with an insulated hood made of coated stainless steel.

This allows the removable reactors to be efficiently and economically heated up to their maximum internal temperature.

The overtemperature protection built into the heating jacket can be adjusted to temperatures between 50°C and 300°C.

### Temperature regulation

The temperature progression of a BERGHOF high pressure reactor is guided based on the reactor's internal temperature as measured by the thermal element in the reactor's immersion tube.

The temperature is controlled and monitored by the BTC-3000 temperature controller. All process data can be saved to an external PC.

**Power supply:** 230V / 50Hz

### Output:

BHM-300, BHM-500, BHM-700 1,000 W

BHM-1000, BHM-1500/2000 2,000 W

BHM-4000 3,000 W

**Operating temperature:** 0 – 350 °C

**Overtemperature protection:** 50 – 300 °C, adjustable

**Temperature probe:** NiCrNi, DIN 43710

**Heater connection:** To the controller, 230 V / 50 Hz using a 3-pin plug-in connector

**Protection:** IP 54

# Heating and Stirring

## BLH-800 Laboratory Hot plate With Built-In Magnetic Stirrer for Small Reactors



Heating block attachments have no active heating elements. Heating is by means of a laboratory hot plate. The heating block's insulating hood is made of coated stainless steel. It permits the reactors to be efficiently heated up to their maximum internal temperature without excessive radiant heat. The magnetic stirrer integrated into the laboratory hot plate permits touch-free control of the magnetic stirring rod in the reactor.

### Temperature regulation

In the simplest case, the temperature is regulated by adjusting the temperature of the laboratory hot plate. In such cases, the reactor's internal temperature should be monitored with an optionally available temperature display. The internal temperature can, however, be controlled and regulated much more precisely using the BTC-3000 temperature controller.

<b>Power supply:</b>	230 V / 50 Hz
<b>Output:</b>	850 W
<b>Speed:</b>	0 – 1,250 rpm
<b>Temperature probe:</b>	NiCrNi, DIN 43710
<b>Dimensions (L x W x H):</b>	200 x 230 x 250 mm
<b>Hot plate diameter:</b>	145 mm
<b>Weight:</b>	approx. 4,000 g

## Thermostatic Jacket BTM-300 to BTM-4000



Thermostatic jackets do not have any active heating elements. The stainless steel double jackets are heated or cooled by means of liquid flowing between the jacket sections. The reactors are not welded to the thermostatic jackets. Instead, they are simply placed into them and can thus be removed at any time. This results in a significant decrease in the weight of the reactor and the double jacket. Handling is also correspondingly simplified.

### Temperature regulation

The temperature is regulated by means of a recirculating thermostat. This thermostat is not part of the standard delivery. Thermostatic jackets are preferable to electric heating jackets wherever constant heating or cooling is required but where heating programs are not necessary.

<b>Operating temperature:</b>	-20 – +350°C
-------------------------------	--------------

## BTC-3000 Temperature Controller

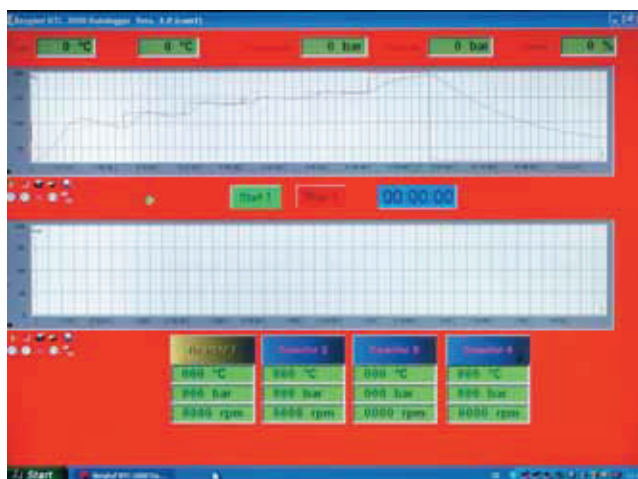


<b>Power supply:</b>	90 - 240 V
<b>Max. switching current:</b>	16 A
<b>Max. heat output:</b>	3,000 W
<b>Fusing:</b>	Automatic cutout in the mains power plug
<b>Temperature probe:</b>	NiCrNi, DIN 43710
<b>Temp. probe break indicator:</b>	Yes
<b>Measuring range:</b>	0 to 500 °C, depending on the employed sensor
<b>Display accuracy:</b>	+/- 1 °C
<b>Measuring accuracy:</b>	+/- 3 °C across the entire measurement range
<b>Type of regulation:</b>	PID controller
<b>Temperature program:</b>	Max. of six steps comprising warm-up time, hold time and setpoint temperature, pressure monitoring
<b>Max. program duration:</b>	400 hr or approx. 17 days
<b>Pressure sensor signal input:</b>	0 – 20 mA or 4 – 20 mA
<b>Pressure sensor break indicator:</b>	Yes, for 4 – 20 mA sensors
<b>Display accuracy Pressure signal:</b>	+/- 1 bar

The easy-to-use BERGHOF temperature controller unites all control and regulating parameters in a single, compact unit. All process parameters are easily accessible. The built-in data logger allows the parameters to be documented on a PC.

- The heating programs are programmed and controlled in up to six steps comprising warm-up time, hold time and temperature. The PID (Proportional Integral Derivative) controller's regulating parameters are freely programmable. The temperature progression can be graphically monitored on the built-in display.
- The BTC-3000 regulating unit can be employed as a universal temperature controller for devices with a power consumption of up to 3,000 W.
- The actual stirring speed can also be regulated. A REED relay provides touch-free measurement and regulation of the speed of the internal stirrer.
- Connecting a second temperature probe allows a second, independent overtemperature protection to be implemented. An own temperature sensor and a separate, independent electronic circuit allow the greatest possible degree of process security to be obtained.

The software included as part of the standard delivery permits data from up to eight channels to be recorded to an external PC. The software can be used, for example, to record the temperature and pressure progression of up to four reactors while simultaneously regulating the temperature. Or the temperature and pressure progression of two reactors can be recorded together with the stirring speed.



<b>Overtemperature protection:</b>	Preset at: 300 °C 50 – 300°C, adjustable
<b>Speed:</b>	0 – 2,000 rpm
<b>Display:</b>	62 x 42 mm, 128 x 64 pixels sw LCD
<b>External dimensions (L x W x H):</b>	280 x 170 x 125 mm
<b>Weight:</b>	approx. 1,600 g

## Overview: Reactor – Heating systems – Temperature Controller BTC-300

	BR-25	BR-100	BR-300	BR-1000	BR-4000
Laboratory hot plate w. built-in magnetic stirrer	X	X	X (300 ml only)		
Electric heating jacket w. controller unit for temperature, stirring and pressure			X	X	X
Thermostatic jacket			X	X	X
X = Possible reactor and heating method combination					
= Regulation using the BTC-3000 is possible					

### Customer/Operator's Responsibility

The greatest care has been taken in the manufacture and testing of all BERGHOF high pressure reactors in order to ensure safe operation within their specified range of characteristics.

However, the customer/operator must still exercise proper care in the employment of BERGHOF high pressure reactors.

The customer/operator is solely responsible for the selection of the proper reactor. The customer/operator must ensure that the reactor is adequately dimensioned for the intended application and that the employed materials are suitable.

BERGHOF will be happy to advise you on these and any other questions and, on request, will be pleased to provide appropriate informational material.

53-0047-96-00-01-002.cdr © BERGHOF Products + Instruments GmbH, ZVF 10/07, Printed in Germany.



*realizing  
your  
ideas.*

PRODUCTS + INSTRUMENTS

ZUNDEL Holding Enterprise

**BERGHOF**  
**Products + Instruments GmbH**  
 Harretstrasse 1  
 72800 Eningen  
 Germany

info@berghof-instruments.de  
<http://www.berghof-instruments.de>  
 Tel.: +49 7121 894-202  
 Fax: +49 7121 894-300



*Apéndice 4: Medidores de flujo.*





# EL-FLOW®

## Digital Thermal Mass Flow Meters and Controllers for Gases

### > Introduction

Bronkhorst High-Tech B.V., the European market leader in thermal Mass Flow Meters/Controllers and Electronic Pressure Controllers, has more than 25 years experience in designing and manufacturing precise and reliable measurement and control devices. With a wide range of instruments, Bronkhorst High-Tech offers innovative solutions for many different applications in many different markets. The instruments are made to customers' specification, in various styles, suitable for use in laboratory, industrial and hazardous areas, in such diverse applications as semiconductor and analytical installations, to name but two.

### > EL-FLOW® series for Laboratory and Instrumentation

EL-FLOW® series Mass Flow Meters and Controllers for gas applications have a housing designed for laboratory and clean processing conditions. The instruments are truly unique in their capability to measure and control flow ranges between 0,014...0,7 ml<sub>r</sub>/min and 8...1670 l<sub>r</sub>/min with pressure rating between vacuum and 400 bar – all in one range of instruments. This versatility in flow ranges and in operating conditions has ensured that the EL-FLOW® series remains our most popular and field proven of instruments.

### > State of the art digital design

Today's EL-FLOW® series are equipped with a digital pc-board, offering high accuracy, excellent temperature stability and fast response (settling times  $t_{90}$  down to 500 msec). The main digital pc-board contains all of the general functions needed for measurement and control. The latest EL-FLOW® design features Multi Gas / Multi Range functionality, providing (OEM-) customers with optimal flexibility and process efficiency. For more information see our 'MASS-FLOW *Select*' leaflet.

In addition to the standard RS232 output the instruments also offer analog I/O. Furthermore, an integrated interface board provides DeviceNet™, PROFIBUS-DP®, Modbus-RTU or FLOW-BUS protocols. The latter is a fieldbus based RS485, specifically designed by Bronkhorst High-Tech for their mass flow metering and control solutions, and with which the company has many years of experience with digital communication.



### > Mass Flow Controllers for every application

The control valve can be furnished as integral part of an EL-FLOW® MFC, or as separate component. It is a proportional, electro-magnetic control valve with extremely fast and smooth control characteristics. With reference to the specific field of application there are different series of control valves. There is a standard direct acting valve for common applications, a pilot operated valve for high flow rates, the so-called Vary-P valve that can cope with 6 up to 400 bar  $\Delta P$  and a bellows valve for applications with very low differential pressure.

### > General EL-FLOW® features

- ◆ fast response, excellent repeatability
- ◆ high accuracy
- ◆ virtually pressure and temperature independent
- ◆ pressure ratings up to 400 bar
- ◆ optional metal sealed and downported constructions

### > Digital features

- ◆ DeviceNet™, PROFIBUS-DP®, Modbus-RTU or FLOW-BUS slave; RS232 interface
- ◆ optional Multi Gas / Multi Range functionality up to 10 bar
- ◆ storage of max. 8 calibration curves
- ◆ alarm and counter functions
- ◆ control characteristics user-configurable



**Bronkhorst®**  
HIGH-TECH

## > Technical specifications

### Measurement / control system

Accuracy (incl. linearity)	: standard: $\pm 0,8\%$ Rd plus $\pm 0,2\%$ FS; optional: $\pm 0,5\%$ Rd plus $\pm 0,1\%$ FS
(based on actual calibration)	( $\pm 1\%$ FS for ranges 3...5 ml <sub>r</sub> /min; $\pm 2\%$ FS for ranges < 3 ml <sub>r</sub> /min)
Turndown	: 1 : 50 (in digital mode up to 1:187,5)
Repeatability	: < 0,2% Rd
Settling time (controller)	: standard: 1...2 seconds option: down to 500 msec
Control stability	: < $\pm 0,1\%$ FS (typical for 1 l <sub>r</sub> /min N <sub>2</sub> )
Operating temperature	: -10...+70°C
Temperature sensitivity	: zero: < 0,05% FS/°C; span: < 0,05% Rd/°C
Pressure sensitivity	: 0,1%/bar typical N <sub>2</sub> ; 0,01%/bar typical H <sub>2</sub>
Leak integrity, outboard	: tested < 2 x 10 <sup>-9</sup> mbar l/s He
Attitude sensitivity	: max. error at 90° off horizontal 0,2% at 1 bar, typical N <sub>2</sub>
Warm-up time	: 30 min. for optimum accuracy 2 min. for accuracy $\pm 2\%$ FS

### Mechanical parts

Material (wetted parts)	: stainless steel 316L or comparable
Surface quality (wetted parts)	: Ra = 0,8 µm typical
Process connections	: compression type or face seal couplings
Seals	: standard: Viton; options: EPDM, Kalrez (FFKM)
Ingress protection (housing)	: IP40

### Electrical properties

Power supply	: +15...24 Vdc
Power consumption	: meter: 70 mA; controller: max. 320 mA; add 50 mA for Profibus, if applicable
Analog output/command	: 0...5 (10) Vdc or 0 (4)...20 mA (sourcing output)
Digital communication	: standard: RS232 options: Profibus-DP®, DeviceNet™, Modbus-RTU, FLOW-BUS
Electrical connection	
Analog/RS232	: 9-pin D-connector (male);
Profibus-DP®	: bus: 9-pin D-connector (female); power: 9-pin D-connector (male);
DeviceNet™	: 5-pin M12-connector (male);
Modbus-RTU/FLOW-BUS	: RJ45 modular jack

Technical specifications and dimensions subject to change without notice.



F-111B Mass Flow Meter

## > Models and flow ranges (based on Air)

### Mass Flow Meters (MFM); PN100 (pressure rating 100 bar)

Model	min. flow	max. flow
F-110C	0,014...0,7 ml <sub>r</sub> /min	0,06...9 ml <sub>r</sub> /min
F-111B	0,16...8 ml <sub>r</sub> /min	0,16...25 l <sub>r</sub> /min
F-111AC	0,4...20 l <sub>r</sub> /min	0,6...100 l <sub>r</sub> /min
F-112AC	0,8...40 l <sub>r</sub> /min	1,4...250 l <sub>r</sub> /min
F-113AC	4...200 l <sub>r</sub> /min	8...1670 l <sub>r</sub> /min

For ranges of 200 or 400 bar rated MFMs see model number identification.

### Mass Flow Controllers (MFC); PN64 / PN100

Model	min. flow	max. flow
F-200CV/F-210CV <sup>1)</sup>	0,014...0,7 ml <sub>r</sub> /min	0,06...9 ml <sub>r</sub> /min
F-201CV/F-211CV <sup>1)</sup>	0,16...8 ml <sub>r</sub> /min	0,16...25 l <sub>r</sub> /min
F-201AV/F-211AV <sup>1)</sup>	0,4...20 l <sub>r</sub> /min	0,6...100 l <sub>r</sub> /min
F-202AV/F-212AV <sup>2)</sup>	0,8...40 l <sub>r</sub> /min	1,4...250 l <sub>r</sub> /min
F-203AV/F-213AV <sup>3)</sup>	4...200 l <sub>r</sub> /min	8...1670 l <sub>r</sub> /min

<sup>1)</sup> K<sub>v</sub>-max = 6,6 x 10<sup>-2</sup>

<sup>2)</sup> K<sub>v</sub>-max = 0,4

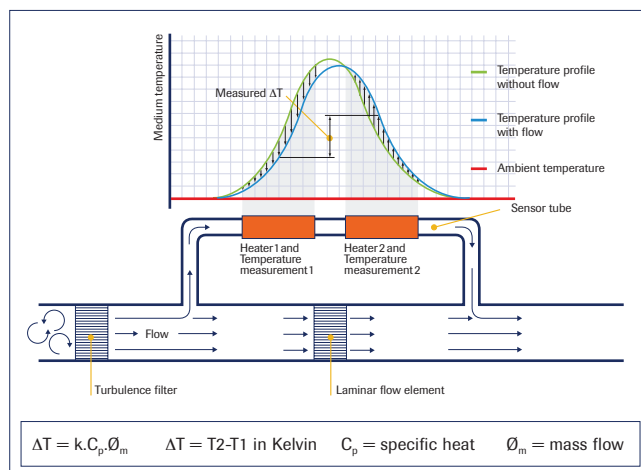
<sup>3)</sup> K<sub>v</sub>-max = 1,5

### MFCs for high-pressure / high-ΔP applications; PN400

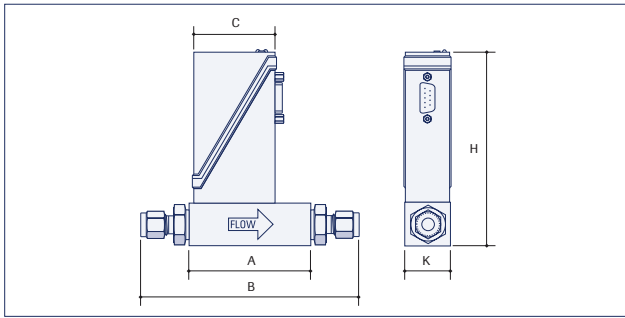
Model	min. flow	max. flow
F-230M	0,2...10 ml <sub>r</sub> /min	10...500 ml <sub>r</sub> /min
F-231M	10...500 ml <sub>r</sub> /min	0,2...10 l <sub>r</sub> /min
F-232M	0,2...10 l <sub>r</sub> /min	2...100 l <sub>r</sub> /min

## > Thermal mass flow measuring principle

The heart of the thermal mass flow meter/controller is the sensor, that consists of a stainless steel capillary tube with resistance thermometer elements. A part of the gas flows through this bypass sensor, and is warmed up by heating elements. Consequently the measured temperatures T<sub>1</sub> and T<sub>2</sub> drift apart. The temperature difference is directly proportional to mass flow through the sensor. In the main channel Bronkhorst High-Tech applies a patented laminar flow element consisting of a stack of stainless steel discs with precision-etched flow channels. Thanks to the perfect flow-split the sensor output is proportional to the total mass flow rate.



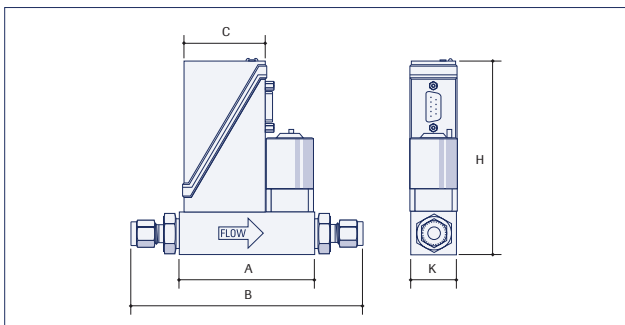
## > Dimensions



### Mass Flow Meter

Model	A	B	C	H	K	Weight (kg)
F-110C (1/8")	47	98	47	111	25	0,4
F-111B (1/4")	69	126	47	111	25	0,5
F-111AC (1/4")	69	126	47	123	26	0,6
F-112AC (1/2")	65	130	47	139	59	1,3
F-113AC (1/2")	112	179	47	153	74	3,0

Dimensions in mm.



### Mass Flow Controller

Model	A	B	C	H	K	Weight (kg)
F-200CV/F-210CV (1/8")	77	128	47	111	25	0,6
F-201CV/F-211CV (1/4")	77	134	47	111	25	0,6
F-201AV/F-211CV (1/4")	78	135	47	123	26	0,7
F-202AV/F-212AV (1/2")	112	169	47	139	59	2,1
F-203AV/F-213AV (1/2")	171	238	47	153	74	4,9
F-230M/F-231M/F-232M (1/4")	115	172	47	163	69	3,4

Dimensions in mm.

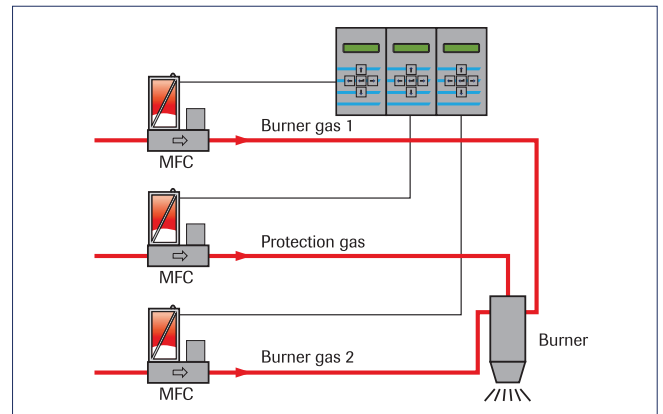
## > Fields of application

The EL-FLOW® series have been successfully applied in a wide variety of both OEM and laboratory applications in the following markets (typically):

- Semiconductor processing
- Analysis and environmental measurements
- Burner control
- Vacuum technology
- Surface treatment installations
- Process control in food, pharmaceutical and (petro-) chemical industries

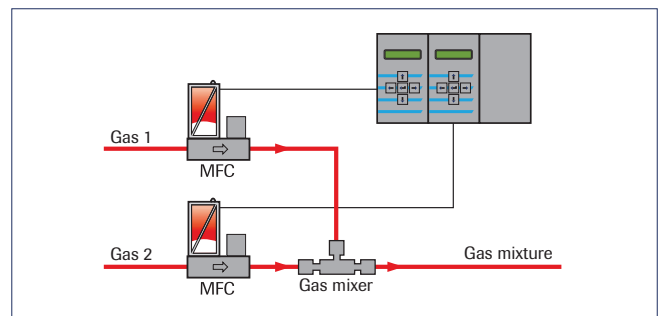
To give an impression of the many varied applications, we hereby sketch some basic examples. In reality, these applications are commonly far more complex and with far more variations and adaptations.

## > Burner control



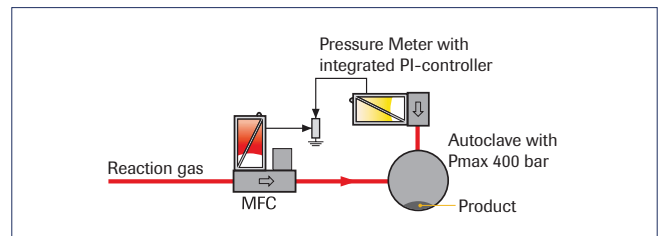
Burner control using Mass Flow Controllers brings many advantages compared to conventional systems, where flow is adjusted through needle valves. When burner orifices get clogged or when gas supply pressure varies, an MFC will automatically adapt to the changed conditions. For the control of relatively large flows with low differential pressure, which is typical for natural gas or CH<sub>4</sub>, Bronkhorst High-Tech offers mass flow meters with separate pressure compensated bellows valves.

## > Making gas mixtures



MFC's are often used to make precise and stable mixtures of two or more gases. A Bronkhorst PS/Readout system can be applied to maintain the ratio of mixed gases by operating in master-slave mode. In the example above, the flow range of gas 1 is much smaller than the other. For this purpose Bronkhorst High-Tech developed a gas mixer, to guarantee a homogeneous gas mixture.

## > Feeding of reactors



Flow control is often combined with the control of reactor pressure, using an EL-PRESS back pressure controller, or as depicted, an EL-PRESS Pressure Meter with integrated PI-controller. Typical applications: high pressure hydrogenation systems and autoclave processes using a 400 bar rated Mass Flow Controller with Vary-P control valve.

## > Model number identification

F - N N NAA - NNN - A A A - NN - A

### Base

0	Valve only
1	Meter
2	Controller

### Pressure rating

0	64 bar
1	100 bar
2	200 bar
3	400 bar

### Ranges

#### for PN64/PN100 Flow Meters/Controllers

0C/0CV	0...0,7 / 0...9 ml <sub>v</sub> /min
1B/1CV	0...8 / 0...25000 ml <sub>v</sub> /min
1AC/1AV	0...20 / 0...100 l <sub>v</sub> /min
2AC/2AV	0...40 / 0...250 l <sub>v</sub> /min
3AC/3AV	0...200 / 0...1670 l <sub>v</sub> /min

#### for PN200/PN400 Flow Meters

0M	0...10 / 0...15 ml <sub>v</sub> /min
1M	0...15 / 0...20000 ml <sub>v</sub> /min
2M	0...10 / 0...250 l <sub>v</sub> /min
3M	0...200 / 0...1250 l <sub>v</sub> /min

#### for PN400 Flow Controllers

0M	0...10 / 0...500 ml <sub>v</sub> /min
1M	0...0,5 / 0...10 l <sub>v</sub> /min
2M	0...10 / 0...100 l <sub>v</sub> /min

### Nominal range

Factory selected

### Communication (I/O)

A	RS232 + analog (n/c control)
B	RS232 + analog (n/o control)
D	RS232 + DeviceNet™ (n/c control)
E	RS232 + DeviceNet™ (n/o control)
M	RS232 + Modbus-RTU (n/c control)
N	RS232 + Modbus-RTU (n/o control)
P	RS232 + Profibus-DP® (n/c control)
Q	RS232 + Profibus-DP® (n/o control)
R	RS232 + FLOW-BUS (n/c control)
S	RS232 + FLOW-BUS (n/o control)

### Analog output

A	0...5 Vdc
B	0...10 Vdc
F	0...20 mA sourcing
G	4...20 mA sourcing

### Supply voltage

B	+24 Vdc (DeviceNet)
D	+15...24 Vdc (analog, FLOW-BUS, Profibus, Modbus)

### Connections (in/out)

1	1/8" OD compression type
2	1/4" OD compression type
3	6 mm OD compression type
4	12 mm OD compression type
5	1/2" OD compression type
6	20 mm OD compression type
8	1/4" Face seal male
9	other

### Internal seals

V	Viton (factory standard)
E	EPDM
K	Kalrez (FFKM)



F-203AV Mass Flow Controller for high flow applications

F-112AC Mass Flow Meter

F-231M Mass Flow Controller for high pressure applications



**Bronkhorst®**  
HIGH-TECH

Nijverheidsstraat 1a, NL-7261 AK Ruurlo Netherlands

T +31(0)573 45 88 00 F +31(0)573 45 88 08 I www.bronkhorst.com E info@bronkhorst.com



*Apéndice 5: Tabla de experimentos.*



Nº	Nombre de prueba	Catalizador utilizado	Cantidad de catalizador (g)	Alimentación	Temperatura de Set Point (°C)	Presión durante el calentamiento (bar)	Presión de operación (bar)	Gas (calent)	Gas (reacción)	Ratio (molC/molRu)	Tiempo (min)	Reacción	Fecha
1	JCG-001-0	-	-	*1	-	-	-	-	-	-	-	-	14/02/2017
2	JCG-001-1	-	-	*1	180	20	-	N <sub>2</sub>	-	-	-	Sólo calentamiento	14/02/2017
3	JCG-001-2	-	-	*1	180	20	25	N <sub>2</sub>	N <sub>2</sub>	-	15	Hidrólisis	17/02/2017
4	JCG-001-3	Al-MCM-48	0,203	*1	180	20	25	N <sub>2</sub>	N <sub>2</sub>	142	15	Hidrólisis	20/02/2017
5	JCG-001-4	Ru/Al MCM-48*	0,203	*1	180	20	25	N <sub>2</sub>	N <sub>2</sub>	142	15	Hidrólisis	20/02/2017
6	JCG-002-1	Ru/Al MCM-48*	0,203	*1	180	20	50	N <sub>2</sub>	H <sub>2</sub>	142	15	Hidrogenación	21/02/2017
7	JCG-002-2	Ru/Al MCM-48*	0,203	*1	180	20	50	N <sub>2</sub>	H <sub>2</sub>	142	7	Hidrogenación	21/02/2017
8	JCG-002-3	Ru/Al MCM-48*	0,203	*1	180	20	50	N <sub>2</sub>	H <sub>2</sub>	142	22	Hidrogenación	22/02/2017
9	JCG-003-1	Ru/Al MCM-48*	0,474	*2	120	20	25	N <sub>2</sub>	H <sub>2</sub>	142	20	Hidrogenación	27/02/2017
10	JCG-004-1	Ru/Al MCM-48*	0,474	*3	120	20	50	N <sub>2</sub>	H <sub>2</sub>	142	5	Hidrogenación	28/02/2017
11	JCG-004-2	Ru/Al MCM-48*	0,474	*3	120	20	50	N <sub>2</sub>	H <sub>2</sub>	142	10	Hidrogenación	28/02/2017
12	JCG-004-3	Ru/Al MCM-48*	0,474	*3	120	20	50	N <sub>2</sub>	H <sub>2</sub>	142	20	Hidrogenación	28/02/2017
13	JCG-004-4	Ru/Al MCM-48*	0,474	*3	120	20	50	N <sub>2</sub>	H <sub>2</sub>	142	30	Hidrogenación	01/03/2017
14	JCG-004-5	Ru/Al MCM-48*	0,474	*3	120	20	50	N <sub>2</sub>	H <sub>2</sub>	142	60	Hidrogenación	01/03/2017
15	JCG-004-6	Ru/Al MCM-48*	0,474	*3	120	20	-	N <sub>2</sub>	-	142	0	Sólo calentamiento	13/03/2017
16	JCG-004-7	Ru/Al MCM-48*	0,474	*3	120	20	50	N <sub>2</sub>	H <sub>2</sub>	142	7,5	Hidrogenación	13/03/2017
17	JCG-004-8	Ru/Al MCM-48*	0,474	*3	120	20	50	N <sub>2</sub>	H <sub>2</sub>	142	12,5	Hidrogenación	13/03/2017
18	JCG-004-9	Ru/Al MCM-48*	0,474	*3	100	20	50	N <sub>2</sub>	-	142	0	Sólo calentamiento	14/03/2017
19	JCG-004-10	Ru/Al MCM-48*	0,474	*3	100	20	50	N <sub>2</sub>	H <sub>2</sub>	142	5	Hidrogenación	14/03/2017
20	JCG-004-11	Ru/Al MCM-48*	0,474	*3	100	20	50	N <sub>2</sub>	H <sub>2</sub>	142	10	Hidrogenación	15/03/2017
21	JCG-004-12	Ru/Al MCM-48*	0,474	*3	100	20	50	N <sub>2</sub>	H <sub>2</sub>	142	15	Hidrogenación	15/03/2017
22	JCG-004-13	Ru/Al MCM-48*	0,474	*3	80	20	50	N <sub>2</sub>	-	142	0	Sólo calentamiento	20/03/2017
23	JCG-004-14	Ru/Al MCM-48*	0,474	*3	80	20	50	N <sub>2</sub>	H <sub>2</sub>	142	5	Hidrogenación	20/03/2017
24	JCG-004-15	Ru/Al MCM-48*	0,474	*3	80	20	50	N <sub>2</sub>	H <sub>2</sub>	142	10	Hidrogenación	20/03/2017
25	JCG-004-16	Ru/Al MCM-48*	0,474	*3	80	20	50	N <sub>2</sub>	H <sub>2</sub>	142	12,5	Hidrogenación	21/03/2017
26	JCG-004-17	Ru/Al MCM-48*	0,474	*3	80	20	50	N <sub>2</sub>	H <sub>2</sub>	142	15	Hidrogenación	21/03/2017
27	JCG-004-18	Ru/Al MCM-48*	0,474	*3	120	20	50	N <sub>2</sub>	H <sub>2</sub>	142	1	Hidrogenación	27/03/2017
28	JCG-004-19	Ru/Al MCM-48*	0,474	*3	120	20	50	N <sub>2</sub>	H <sub>2</sub>	142	2	Hidrogenación	27/03/2017
29	JCG-004-20	Ru/Al MCM-48*	0,474	*3	120	20	50	N <sub>2</sub>	H <sub>2</sub>	142	3	Hidrogenación	27/03/2017
30	JCG-004-21	Ru/Al MCM-48*	0,474	*3	120	20	50	N <sub>2</sub>	H <sub>2</sub>	142	4	Hidrogenación	27/03/2017
31	JCG-004-22	Ru/Al MCM-48*	0,474	*3	120	20	50	N <sub>2</sub>	H <sub>2</sub>	142	5	Hidrogenación	28/03/2017
32	JCG-004-23	Ru/Al MCM-48*	0,474	*3	100	20	50	N <sub>2</sub>	H <sub>2</sub>	142	5	Hidrogenación	28/03/2017
33	JCG-004-24	Ru/Al MCM-48*	0,474	*3	80	20	50	N <sub>2</sub>	H <sub>2</sub>	142	2,5	Hidrogenación	28/03/2017
34	JCG-005-1	Ru/Al MCM-48*	0,474	*4	180	20	50	N <sub>2</sub>	H <sub>2</sub>	142	7	Hidrogenación	03/03/2017
35	JCG-006-1	Ru/Al MCM-48*	0,24	*3	120	20	50	N <sub>2</sub>	H <sub>2</sub>	280,34	5	Hidrogenación	03/04/2017
36	JCG-006-2	Ru/Al MCM-48*	0,32	*3	120	20	50	N <sub>2</sub>	H <sub>2</sub>	210,26	5	Hidrogenación	03/04/2017
37	JCG-007-1	Ru/Al MCM-48*	0,474	*5	120	20	50	N <sub>2</sub>	H <sub>2</sub>	142	15	Hidrogenación	04/04/2017
38	JCG-007-2	Ru/Al MCM-48*	0,474	*6	120	20	50	N <sub>2</sub>	H <sub>2</sub>	142	15	Hidrogenación	04/04/2017
39	JCG-008-1	Ru/Al MCM-48*	0,474	*1	180	20	50	N <sub>2</sub>	H <sub>2</sub>	142	90	Hidrogenación	23/05/2017

*1	Extracto de madera de Catalpa (170°C)
*2	D- Glucosa (7g/l)
*3	D-Xilosa (7g/l)
*4	D-Xilosa/D-Glucosa (50%-50%)
*5	D-Xilosa/L-Arabinosa (80,2%-19,8%)
*6	D-Xilosa/L-Arabinosa/D-Glucosa (71,2%-17,6%-11,2%)

**\*Activación de catalizador**

Nº	Catalizador activado	Cantidad de catalizador activado (g)	Temperatura de Set Point (°C)	Presión durante el calentamiento	Presión de activación (bar)	Gas utilizado	Tipo de flujo	Tiempo (min)	Fecha
1	Ru/Al MCM-48	0,203	150	20	20	H <sub>2</sub>	Continuo	60	20/02/2017
2	Ru/Al MCM-48	1,95	150	20	20	H <sub>2</sub>	Continuo	60	21/02/2017
3	Ru/Al MCM-48	1,3	150	20	20	H <sub>2</sub>	Continuo	60	27/02/2017
4	Ru/Al MCM-48	1,8	150	20	20	H <sub>2</sub>	Continuo	60	28/02/2017
5	Ru/Al MCM-48	2	150	20	20	H <sub>2</sub>	Continuo	60	02/03/2017
6	Ru/Al MCM-48	2,2	150	20	20	H <sub>2</sub>	Continuo	60	13/03/2017
7	Ru/Al MCM-48	1	150	20	20	H <sub>2</sub>	Continuo	60	15/03/2017
8	Ru/Al MCM-48	3	150	20	20	H <sub>2</sub>	Continuo	60	20/03/2017
9	Ru/Al MCM-48	2,8	150	20	20	H <sub>2</sub>	Continuo	60	27/03/2017
10	Ru/Al MCM-48	2,85	150	20	20	H <sub>2</sub>	Continuo	60	28/03/2017
11	Ru/Al MCM-48	3	150	20	20	H <sub>2</sub>	Continuo	60	03/04/2017
12	Ru/Al MCM-48	0,5	150	20	20	H <sub>2</sub>	Continuo	60	23/05/2017



*Apéndice 6: Fichas de seguridad.*



## FICHAS DE SEGURIDAD

1. SiO<sub>2</sub>.
2. RuCl<sub>3</sub>.
3. Hidrógeno.
4. Nitrógeno.
5. D-Glucosa.
6. D-Xilosa.
7. L-Arabinosa.
8. Xilitol.
9. Sorbitol.
10. Arabitol.
11. Manitol.



## HOJA DE DATOS DE SEGURIDAD

Nombre del Producto: **DIOXIDO DE SILICIO**  
Fecha de Revisión: Junio 2016 – Revisión.2



NFPA

### SECCION 1 : IDENTIFICACION DEL PRODUCTO Y DE LA COMPAÑÍA

#### PRODUCTO

**Nombre Químico:** DIOXIDO DE SILICIO  
**Número CAS:** 112926-00-8  
**Sinónimos:** Sílice amorfa precipitada

**COMPAÑÍA:** GTM

#### Teléfonos de Emergencia

México : +52 55 5831 7905– SETIQ 01 800 00 214 00  
Guatemala: +502 6628 5858  
El Salvador: +503 2251 7700  
Honduras: +504 2564 5454  
Nicaragua: +505 2269 0361 – Toxicología MINSA: +505 22897395  
Costa Rica: +506 2537 0010 – Emergencias 9-1-1. Centro Intoxicaciones +506 2223-1028  
Panamá: +507 512 6182 – Emergencias 9-1-1  
Colombia: +018000 916012 Cisproquim / (571) 2 88 60 12 (Bogotá)  
Perú: +511 614 65 00  
Ecuador: +593 2382 6250 – Emergencias (ECU) 9-1-1  
Argentina +54 11 4611 2007  
Brasil: +55 21 3591-1868

### SECCION 2 : COMPOSICION / INFORMACION SOBRE LOS INGREDIENTES

**DIOXIDO DE SILICIO**

**CAS: 112926-00-8**

### SECCION 3 : IDENTIFICACION DE PELIGROS

**Clasificación NFPA:** Salud: 1      Inflamabilidad: 0      Reactividad: 0

#### **Clasificación de la sustancia o la mezcla**

Clasificación de acuerdo con NBR 14725-3  
Material no clasificado como peligroso.

#### **Elementos de la etiqueta**

Etiquetado de acuerdo con NBR 14725-3  
Material no clasificado como peligroso.

### Otros peligros que no dan lugar a la clasificación

Irritante respiratorio ligero

Por efecto mecánico

Ligeramente irritante para los ojos y la piel.

No presenta riesgo particular de incendio o explosión.

Posible acumulación de cargas electrostáticas en agitación, transporte neumático, rebosamiento, etc.

## SECCION 4 : MEDIDAS DE PRIMEROS AUXILIOS

### Descripción de los primeros auxilios:

#### Si es inhalado:

Sacar al aire libre.

Mantener en reposo.

Si es necesario consultar a un médico.

#### Contacto con la piel:

Si está en la piel, aclare bien con agua.

Si es necesario consultar a un médico.

#### Contacto con los ojos:

Enjuagar inmediatamente con abundante agua, también debajo de los párpados, al menos durante 15 minutos.

Si persiste la irritación ocular, consulte a un médico.

#### Ingestión:

Enjuague la boca con agua.

Si es necesario consultar a un médico.

### Principales Síntomas y efectos, agudos y retardados

#### Riesgos:

El socorrista necesita protegerse a sí mismo.

### Indicación de toda atención médica y de los tratamientos especiales que deban dispensarse inmediatamente

Sin datos disponibles.

## SECCION 5 : MEDIDAS PARA EXTINCION DE INCENDIOS

#### Punto de inflamación:

No aplicable (Sólido no inflamable).

#### Temperatura de auto-inflamación:

No aplicable

#### Inflamabilidad / Límite explosivo:

Límites inferior de explosividad: no aplicable

Límite superior de explosividad: no aplicable

### Medios de extinción:

#### Medios de extinción apropiados:

Todos los agentes de extinción son utilizables.

#### Medios de extinción no apropiados:

Ninguna conocida.

El agua de extinción debe recogerse por separado, no debe penetrar en el alcantarillado.

### Peligros específicos derivados de la sustancia o la mezcla

**Peligros específicos en la lucha** No combustible.  
**Contra incendios:**

### Recomendaciones para el personal de lucha contra incendios

**Equipo de protección especial para:** Guantes  
**El personal de lucha contra incendios** Gafas  
Botas  
Si es necesario, usar equipo de respiración autónomo para la lucha contra el fuego.

**Métodos específicos de lucha** Utilizar los medios adecuados para combatir los incendios  
**Contra incendios:** contiguos.

## SECCION 6: MEDIDAS PARA FUGAS ACCIDENTALES

### Precauciones personales, equipo de protección y procedimientos de emergencia

**Precauciones personales, equipo** Evítese el contacto con los ojos.  
**De protección y procedimientos** Equipo de protección  
**De emergencia.** Protección respiratoria.  
Gafas de seguridad ajustadas al contorno del rostro.

### Precauciones relativas al medio ambiente

**Precauciones relativas al** No se conocen ni esperan daños ecológicos bajo uso normal.  
**Medio ambiente:**

**Métodos y material de contención** Usar un aspirador adecuado.  
**Y de limpieza:**

**Descontaminación / Limpieza:** Eliminar lavado con mucha agua.  
Recuperar las aguas de lavado para su posterior eliminación.

**Eliminación:** Tratar el material recuperado como está descrito en la sección "Consideraciones de eliminación".

## SECCION 7: MANEJO Y ALMACENAMIENTO

### Precauciones para una manipulación segura

**Consejos de manejo y uso seguro:** Evite la formación de polvo

### Condiciones de almacenamiento seguro, incluidas posibles incompatibilidades

**Medidas técnicas para el** No apile los big-bags  
**almacenamiento:**

**Condiciones de almacenamiento**

**Recomendados:** Proteger contra la humedad.

**Condiciones de embalaje** Polipropileno, Bolsas de papel  
**Materiales de embalaje –**  
**Recomendados**

**Temperatura de almacenamiento:** Sin datos disponibles.

**SECCION 8: CONTROLES DE EXPOSICION Y PROTECCION PERSONAL**

**Parámetros de control:**

No estamos al corriente de ningún límite de exposición nacional.

**Controles de exposición:**

**MEDIDAS DE CONTROL**

**Disposiciones de ingeniería:** Aplicar las medidas técnicas para cumplir con los límites profesionales de exposición.

**PROTECCION PERSONAL**

**Protección respiratoria:** Utilice un equipo respiratorio con filtro apropiado si una valoración del riesgo indica que es necesario.

**Protección de las manos:** Guantes impermeables.  
Los guantes deben enjuagarse muy bien después de su uso.  
Los guantes deben ser descartados y sustituidos si existe alguna indicación de degradación o perforación química.

**Protección de los ojos:** Gafas de seguridad ajustada al contorno del rostro.

**Medidas de higiene:** Manipular con las precauciones de higiene industrial adecuadas, y respetar las prácticas de seguridad.

**Medidas de protección:** La selección del equipo de protección personal adecuado, debe basarse en una evaluación de las características de funcionamiento del equipo de protección en relación con la tarea (s) a realizar, las condiciones actuales, la duración de uso, y los peligros y/o riesgos potenciales que se pueden encontrar durante el uso.  
Manipular con las precauciones de higiene industrial adecuadas, y respetar las prácticas de seguridad.

**CONTROLES DE EXPOSICION MEDIOAMBIENTAL**

**Recomendaciones Generales:** No se conocen ni esperan daños ecológicos bajo uso normal.



## SECCION 9: PROPIEDADES FISICAS Y QUIMICAS

### Información sobre propiedades físicas y químicas básicas.

<b>Aspecto:</b>	Forma: Polvo amorfo Estado físico: sólido Color: blanco
<b>Tamaño de partícula:</b>	aprox. 10-20 µm
<b>Olor:</b>	Ninguno (a)
<b>Umbral olfativo:</b>	No aplicable.
<b>PH</b>	6,5 – 7,5 (5% (m/v)) (suspensión acuosa)
<b>Punto / intervalo de fusión:</b>	> 1.700 °C
<b>Punto / intervalo de ebullición:</b>	no aplicable
<b>Punto de sublimación:</b>	no aplicable
<b>Punto de inflamación:</b>	No aplicable (Sólido no inflamable)
<b>Tasa de evaporación:</b>	no aplicable
<b>Inflamabilidad (sólido, gas):</b>	no aplicable
<b>Inflamabilidad / Límite explosivo:</b>	Límites inferior de explosividad: no aplicable Límites superior de explosividad: no aplicable.
<b>Temperatura de auto-inflamación:</b>	No aplicable
<b>Presión de vapor:</b>	No aplicable
<b>Densidad de vapor:</b>	No aplicable
<b>Masa volumétrica:</b>	2,1 g/cm <sup>3</sup> Densidad aparente: aprox. 200 – 230 kg/m <sup>3</sup> Producto vibrado
<b>Solubilidad:</b>	Solubilidad en agua: aprox. 0,1 g/l Solubilidad en otros disolventes: Disolventes orgánicos habituales: insoluble.
<b>Coefficiente de reparto n-octanol/agua:</b>	No aplicable
<b>Descomposición térmica:</b>	No aplicable
<b>Viscosidad:</b>	Viscosidad, dinámica: no aplicable Viscosidad, cinemática: no aplicable.
<b>Propiedades explosivas:</b>	No aplicable
<b>Propiedades comburentes:</b>	No comburente según criterios CE.
<b><u>Otra información</u></b>	
<b>Potencial óxido/reducción</b>	No aplicable
<b>Peso molecular</b>	60.2 g/mol

## SECCION 10 : ESTABILIDAD Y REACTIVIDAD

### **Reactividad:**

Sin datos disponibles.

**Estabilidad Química:**

**Estabilidad química:**

Estable a temperatura ambiente.

**Posibilidad de reacciones peligrosas:**

Sin datos disponibles

**Condiciones que deben evitarse**

**Condiciones que deben evitarse:**

No se conoce reacciones peligrosas bajo condiciones de uso normales.

**Materiales incompatibles:**

**Materiales que deben evitarse:**

Ninguna reacción peligrosa conocida con los productos usuales.

**Productos de descomposición peligrosos**

Sin datos disponibles.

**SECCION 11 : INFORMACION TOXICOLOGICA**

**Información sobre los efectos toxicológicos**

**TOXICIDAD AGUDA**

**Toxicidad oral aguda:**

DL50: >5.000 mg / kg – rata  
Informes no publicados.

**Toxicidad aguda por inhalación:**

Riesgo de oclusión mecánica de las vías respiratorias superiores.  
Por analogía.  
Una LC50/inhalación/4h/rata no puede ser determinada porque no se ha observado una mortalidad de las ratas a las concentraciones máximas logradas.

**Toxicidad cutánea aguda:**

DL50: >5.000 mg/kg – conejo  
Informes no publicados.

**Toxicidad aguda**

**(Otras vías de administración)**

Sin datos disponibles.

**CORROSION O IRRITACIÓN CUTÁNEAS**

**Irritación de la piel:**

En caso de contacto prolongado o repetido, puede provocar una ligera irritación de la piel.  
Informes no publicados.

**LESIONES O IRRITACION OCULAR GRAVES**

**Irritación ocular:**

Irritación ocular leve  
Informes no publicados

## **SENSIBILIZACION RESPIRATORIA O CUTANEA**

**Sensibilización:** Humanos  
No se ha observado ninguna reacción de sensibilización cutánea.  
Informes no publicados

## **MUTAGENICIDAD**

**Genotoxicidad in vitro:** Las pruebas in vitro no demostraron efectos mutágenos.  
Informes no publicados

**Genotoxicidad in vitro:** Las pruebas in vitro no demostraron efectos mutágenos.  
Informes no publicados

## **CARCINOGENICIDAD**

**Carcinogenicidad** Rata  
Exposición oral  
Los ensayos con animales no mostraron ningún efecto carcinógeno.  
Informes no publicados

Ratón  
Exposición oral  
Los ensayos con animales no mostraron ningún efecto carcinógeno.  
Informes no publicados.

## **TOXICIDAD PARA LA PREPRODUCCION Y EL DESARROLLO**

**Toxicidad para la preproducción / fertilidad:** Los ensayos sobre fertilidad y de toxicidad para el desarrollo, no revelaron ningún efecto sobre la reproducción.  
Datos bibliográficos.

**Toxicidad para el desarrollo / Teratogenicidad:** Sin datos disponibles.

## **STOT**

**Toxicidad específica en Determinados órganos (STOT)-Exposición úni** Evaluación Toxicológica:  
La sustancia o mezcla no se clasifica como tóxica específica de órganos diana, exposición única.

**Toxicidad específica en Determinados órganos (STOT)-Exposición repeti** Evaluación Toxicológica:  
La sustancia o mezcla no se clasifica como tóxica específica de órganos diana, exposición repetida.

Si es inhalado en los tests de toxicidad por inhalación no se han observado efectos irreversibles ni síntomas de silicosis.  
Informes no publicados.

Exposición oral: No se han observado ningún efecto irreversible en los tests de toxicidad crónica por vía oral. Informes no publicados.

#### **EFFECTOS NEUROLOGICOS**

**Efectos neurológicos:** Ningún efecto neurotóxico observado.

#### **EXPERIENCIAS CON EXPOSICION DE SERES HUMANOS**

**Experiencia con exposición de Seres humanos: Inhalación** Irritante respiratorio ligero. Informes no publicados.

#### **TOXICIDAD POR ASPIRACION**

**Toxicidad por aspiración:** No aplicable.

### **SECCION 12 : INFORMACION ECOLOGICA**

#### **TOXICIDAD**

##### **Compartimiento acuático (incluidos los sedimentos)**

**Toxicidad aguda para los peces:** CL50 – 96 h: > 10.000 mg/l – Danio rerio (pez zebra)  
Informes no publicados.

**Toxicidad aguda para la dafnia y Otros invertebrados acuáticos:** CE50 – 24 h: >1.000 mg/l – Daphia magna (Pulga de mar grande)  
Informes no publicados.

##### **Evaluación de ecotoxicidad**

**Toxicidad acuática aguda** Producto que no presenta efectos nefastos conocidos en los organismos acuáticos objeto de ensayo.

#### **PERSISTENCIA Y DEGRADABILIDAD**

##### **Biodegradabilidad**

**Biodegradabilidad:** No aplicable (producto mineral)

##### **Potencia de bioacumulación**

**Factor de bioconcentración (FBC)** No bioacumulable  
Datos bibliográficos

##### **Movilidad en el suelo**

**Distribución conocida en los Diferentes compartimentos Ambientales:** Destino final habitual del producto: Suelo  
Destino final habitual del producto: Sedimento

##### **Resultados de la valoración PBT Y mPmB**

Sin datos disponibles.

**Otros factores adversos:**

Sin datos disponibles.

**SECCION 13 : CONSIDERACIONES SOBRE DISPOSICION**

**Métodos para el tratamiento de residuos**

**Destrucción / Eliminación**

Interdicción: No debe liberarse en el medio ambiente.

Consejos de eliminación: Disponer como desechos peligrosos de acuerdo con las regulaciones locales y nacionales.  
Eliminar el contenido/ el recipiente en una planta de eliminación de residuos aprobada.

**Consejos de limpieza y eliminación del embalaje**

**Consejos** No necesita limpieza previa a la eliminación.  
Eliminar el contenido / el recipiente en una planta de incineración autorizada.

**Otros datos** Eliminar, observando las normas locales en vigor.

**SECCION 14 : INFORMACION SOBRE TRANSPORTE**

**ANTT** No regulado

**DOT** No regulado

**TDG** No regulado

**RID** No regulado

**ADR** No regulado

**IMDG** No regulado

**IATA** No regulado

**SECCION 15 : INFORMACION REGLAMENTARIA**

Esta hoja de seguridad cumple con la normativa legal de:

México: NOM-018-ST5-2000

Guatemala: Código de Trabajo, decreto 1441

Honduras: Acuerdo Ejecutivo No. STSS-053-04

Costa Rica: Decreto Nº 28113-S

Panamá: Resolución #124, 20 de marzo de 2001

Colombia: NTC 445 22 de Julio de 1998

Ecuador: NTE INEN 2 266:200

## SECCION 16 : INFORMACION ADICIONAL

La información relacionada con este producto puede ser no válida si éste es usado en combinación con otros materiales o en otros procesos. Es responsabilidad del usuario la interpretación y aplicación de esta información para su uso particular. La información contenida aquí se ofrece solamente como guía para la manipulación de este material específico y ha sido elaborada de buena fe por personal técnico. Esta no es intentada como completa, incluso la manera y condiciones de uso y de manipulación pueden implicar otras consideraciones adicionales.

### **CONTROL DE REVISIONES Y CAMBIOS DE VERSIÓN:**

Marzo 2016. Confección de la Hoja de Datos de Seguridad.



The Power to Question

# FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

Santa Cruz Biotechnology, Inc.

Fecha de revisión 10-feb-2017

Versión 1.4

## 1. IDENTIFICACIÓN DEL PRODUCTO Y DE LA EMPRESA

**Nombre del producto** Ruthenium(III) chloride

**Código del producto** SC-253439

**Uso recomendado** Solo para investigación. No destinado para diagnosis o uso terapéutico.

**Empresa**  
 Santa Cruz Biotechnology, Inc.  
 10410 Finnell Street  
 Dallas, TX 75220  
 831.457.3800  
 800.457.3801  
 scbt@scbt.com

**Teléfono de emergencia**  
 Chemtrec  
 1.800.424.9300 (Within USA)  
 +1.703.527.3887 (Outside USA)

## 2. IDENTIFICACIÓN DE LOS PELIGROS

**Palabras de advertencia** Peligro

**Resumen Para Emergencias** Nocivo por inhalación  
 Nocivo en contacto con la piel  
 corrosivo  
 El producto provoca quemaduras en los ojos, la piel y las membranas mucosas  
 Nocivo por inhalación, por ingestión y en contacto con la piel

**Estatus normativo según la OSHA** Este material se considera peligroso según la norma sobre comunicación de riesgos de la OSHA (29 CFR 1910.1200)

**Posibles efectos sobre la salud**

ojos Provoca quemaduras. Corrosivo para los ojos y puede provocar lesiones graves, como ceguera. Riesgo de lesiones oculares graves.

piel Nocivo en contacto con la piel. Provoca quemaduras.

Inhalación Nocivo por inhalación.

Ingestión Nocivo en caso de ingestión. La ingestión provoca quemaduras en el tubo digestivo superior y en las vías aéreas. Puede quemar la boca, la garganta y el estómago.

Toxicidad crónica La exposición crónica a humo o gases corrosivos puede provocar desgaste dental, seguida por necrosis mandibular. Es frecuente la irritación bronquial con tos crónica y los ataques de neumonía. También pueden observarse molestias digestivas. Evitar la exposición repetida. Posibilidad de efectos irreversibles.

**Peligros no clasificados de otra manera (HNOC)**  
 Peligros no clasificados de otra manera (HNOC) No es aplicable

**Peligro para el medio ambiente** Nocivo para los organismos acuáticos, puede provocar a largo plazo efectos negativos en el medio ambiente acuático. Ver la Sección 12: INFORMACIÓN ECOLÓGICA.

<b>NFPA</b>	Peligros para la salud	3		<b>HMIS</b>	Peligros para la salud	3
	Inflamabilidad	0			Inflamabilidad	0
	Estabilidad	0			Peligros físicos	0
	Propiedades físicas y químicas	-			Protección individual	-



### 3. COMPOSICIÓN/INFORMACIÓN SOBRE LOS COMPONENTES

<b>Nombre del producto</b>	Ruthenium(III) chloride
<b>Peso molecular</b>	207.43
<b>Fórmula</b>	$\text{RuCl}_3 \cdot x\text{H}_2\text{O}$

### 4. PRIMEROS AUXILIOS

Consejo general	Se necesita atención médica inmediata.
Contacto con los ojos	Se necesita atención médica inmediata. Enjuagar inmediatamente con abundante agua, también bajo los párpados, durante al menos 15 minutos. Mantener el ojo bien abierto durante el enjuague. No frotar la zona afectada.
Contacto con la piel	Se necesita atención médica inmediata. Lavar inmediatamente con jabón y abundante agua y quitarse la ropa y el calzado contaminados.
Inhalación	Transportar a la víctima al exterior. Llamar inmediatamente a un médico o a un centro de información toxicológica. Si no respira, realizar técnicas de respiración artificial. Si la respiración es difícil, proporcionar oxígeno.
Ingestión	Se necesita atención médica inmediata. NO provocar el vómito. Beber abundante agua. Nunca dar nada por boca a una persona inconsciente. Alejarse de la fuente de exposición, tumbarse en el suelo. Limpiar la boca con agua y beber a continuación abundante agua. Llamar inmediatamente a un médico o a un centro de información toxicológica.
Nota para el personal médico	El producto es un material corrosivo. El lavado gástrico o los vómitos están contraindicados. Debe investigarse una posible perforación del estómago o el esófago. No suministrar antídotos químicos. Puede producirse asfixia por edema de glotis. Puede producirse un marcado descenso de la presión sanguínea con estertores húmedos, esputo espumoso y presión arterial elevada. Tratar los síntomas.
Equipo de protección para el personal de primeros auxilios	Utilizar el equipo de protección individual obligatorio. Evitar el contacto con la piel, los ojos o la ropa.

### 5. MEDIDAS DE LUCHA CONTRA INCENDIOS

#### Medios de extinción apropiados

Medios de extinción apropiados      Productos químicos secos, CO<sub>2</sub>, agua pulverizada o espuma resistente al alcohol.

#### Peligros específicos que presenta el producto químico

Peligros específicos que presenta el producto químico      El producto provoca quemaduras en los ojos, la piel y las membranas mucosas. La descomposición térmica puede provocar una emisión de gases y vapores irritantes y tóxicos. En caso de incendio o explosión, no respirar el humo.

Propiedades inflamables      No se ha determinado.  
Punto de inflamación °C      No hay información disponible

#### Datos de explosión

Sensibilidad a impactos mecánicos      No hay información disponible.  
Sensibilidad a descargas estáticas      No hay información disponible.

#### Equipo de protección y medidas de precaución para el personal de lucha contra incendios

Equipo de protección y medidas de precaución para el personal de lucha contra incendios      Como en cualquier incendio, llevar un aparato de respiración autónomo de presión a demanda MSHA/NIOSH (aprobado o equivalente) y todo el equipo de protección necesario.





## 6. MEDIDAS EN CASO DE VERTIDO ACCIDENTAL

Precauciones individuales	Evacuar al personal a zonas seguras. Utilizar el equipo de protección individual obligatorio. Evitar el contacto con la piel, los ojos o la ropa. Mantener alejadas a las personas y en dirección contraria al viento en una fuga o vertido.
Precauciones relativas al medio ambiente	No permitir que se introduzca en ningún tipo de alcantarilla, en el terreno ni en ningún cuerpo de agua. No debe liberarse en el medio ambiente. Prevenir más fugas o vertidos si se puede hacer de forma segura. Prevenir la penetración del producto en desagües. Para obtener más información ecológica, ver el apartado 12.
Métodos de contención	Prevenir más fugas o vertidos si se puede hacer de forma segura.
Métodos de limpieza	Recoger por medios mecánicos y depositar en recipientes apropiados para su eliminación. Limpiar concienzudamente la superficie contaminada. Utilizar el equipo de protección individual obligatorio. Cubrir los derrames de polvo con una lámina de plástico o una lona para minimizar su expansión y mantener el polvo seco. Evitar la generación de polvo. Contener. Después de limpiar, eliminar los restos con agua.

## 7. MANIPULACIÓN Y ALMACENAMIENTO

Recomendaciones para una manipulación sin peligro	Utilizar el equipo de protección individual obligatorio. Evitar el contacto con la piel, los ojos o la ropa. Asegurar una ventilación adecuada, especialmente en áreas confinadas. En caso de ventilación insuficiente, úsese equipo respiratorio adecuado. Utilizar únicamente con ventilación adecuada y en sistemas cerrados.
Condiciones de almacenamiento	Mantener el contenedor perfectamente cerrado y en un lugar seco y bien ventilado. Manténgase fuera del alcance de los niños. Mantener los contenedores perfectamente cerrados en un lugar fresco, seco y bien ventilado. Mantener en contenedores etiquetados adecuadamente. Proteger de la humedad.

## 8. CONTROLES DE EXPOSICIÓN/PROTECCIÓN INDIVIDUAL

### Controles de la exposición

Controles técnicos	Duchas Estaciones de lavado de ojos Sistemas de ventilación
--------------------	-------------------------------------------------------------------

### Equipo de protección personal (PPE por sus siglas en inglés)

Protección ocular y de la cara:	Gafas de seguridad bien ajustadas. Escudo de protección facial.
Protección de la piel y el cuerpo	Guantes de plástico o de caucho. Botas de caucho. Ropa de protección adecuada. Llevar ropa protectora impermeable, como botas, guantes, bata de laboratorio, delantal o bata de trabajo, según proceda, para evitar el contacto con la piel. Utilizar indumentaria resistente a productos químicos, tal como guantes, delantales, botas o monos de cuerpo completo hechos de neopreno, como resulte apropiado.
Protección respiratoria	Asegurar una ventilación adecuada, especialmente en áreas confinadas.
Consideraciones generales sobre higiene	No comer, ni beber, ni fumar durante su utilización. Lavar las prendas contaminadas antes de volver a usarlas. Manténgase lejos de alimentos, bebidas y piensos. Las prendas de trabajo contaminadas no podrán sacarse del lugar de trabajo. Se recomienda realizar una limpieza periódica de los equipos así como la zona y la indumentaria de trabajo. Evitar el contacto con la piel, los ojos o la ropa. Quitarse todas las prendas contaminadas y lavarlas antes de volver a usarlas. Úsense guantes adecuados y protección para los ojos/la cara.

## 9. PROPIEDADES FÍSICAS Y QUÍMICAS

Estado físico	sólido
Aspecto	polvo o cristalino
Olor	acre



<b>Propiedad</b>	<b>Valores</b>
pH	No hay información disponible
Punto de fusión/punto de congelación	500 °C
Punto de ebullición	No hay información disponible
Punto de inflamación	No hay información disponible
Densidad	3.11 g/cm <sup>3</sup>
Tasa de evaporación	No hay información disponible
Límites de inflamabilidad superiores	No hay información disponible
Límite inferior de inflamabilidad	No hay información disponible
Presión de vapor	No hay información disponible
Densidad de vapor	No hay información disponible
Densidad relativa	3.11
Solubilidad en el agua	No hay información disponible
Solubilidad en otros disolventes	No hay información disponible
Coefficiente de partición	No hay información disponible
Temperatura de autoignición	No hay información disponible
Temperatura de descomposición	500 °C
Viscosidad cinemática	No hay información disponible
Propiedades explosivas	No hay información disponible
Propiedades comburentes	No hay información disponible

## 10. ESTABILIDAD Y REACTIVIDAD

Reactividad	No es aplicable
Estabilidad	Estable en las condiciones de almacenamiento recomendadas.
Materiales incompatibles	Incompatible con bases y ácidos fuertes. Incompatible con agentes oxidantes.
Condiciones que deben evitarse	Exposición al aire o a la humedad durante largos periodos.
Productos de descomposición peligrosos	La descomposición térmica puede provocar una emisión de gases y vapores irritantes y tóxicos.
Polimerización peligrosa	No se produce ninguna polimerización peligrosa

## 11. INFORMACIÓN TOXICOLÓGICA

### Toxicidad aguda

Información del producto El producto no presenta riesgo de toxicidad aguda según la información conocida o suministrada.

### Toxicidad crónica

Toxicidad crónica La exposición crónica a humo o gases corrosivos puede provocar desgaste dental, seguida por necrosis mandibular. Es frecuente la irritación bronquial con tos crónica y los ataques de neumonía. También pueden observarse molestias digestivas. Evitar la exposición repetida. Posibilidad de efectos irreversibles.

Efectos en órganos diana Ninguno conocido.

## 12. INFORMACIÓN ECOLÓGICA

### Ecotoxicidad

Ecotoxicidad Nocivo para los organismos acuáticos. Nocivo para los organismos acuáticos, puede provocar a largo plazo efectos negativos en el medio ambiente acuático.

Persistencia y degradabilidad No hay información disponible.

Bioacumulación No hay información disponible.



### 13. CONSIDERACIONES RELATIVAS A LA ELIMINACIÓN

Consideraciones relativas a la eliminación	La eliminación debe realizarse conforme a las leyes y normativas regionales, nacionales y locales aplicables.
Embalaje contaminado	No reutilizar el recipiente.
Número de residuo de la EPA (EE.UU.)	D002

### 14. INFORMACIÓN RELATIVA AL TRANSPORTE

#### DOT

Nº ID/ONU	UN3260
Clase de peligro	8
Grupo de embalaje	II
Designación oficial de transporte	Sólido corrosivo, ácido, inorgánico, n.e.p
Descripción	UN3260, Sólido corrosivo, ácido, inorgánico, n.e.p (Ruthenium(III) chloride), 8, II
Número de la Guía de respuestas de emergencia	154

#### IATA

Nº ID/ONU	UN3260
Clase de peligro	8
Grupo de embalaje	II
Designación oficial de transporte	Sólido corrosivo, ácido, inorgánico, n.e.p
Descripción	UN3260, Sólido corrosivo, ácido, inorgánico, n.e.p (Ruthenium(III) chloride), 8, II
Disposiciones particulares	A3, A803

#### IMDG

Nº ID/ONU	UN3260
Clase de peligro	8
Grupo de embalaje	II
Designación oficial de transporte	Sólido corrosivo, ácido, inorgánico, n.e.p
Descripción	UN3260, Sólido corrosivo, ácido, inorgánico, n.e.p (Ruthenium(III) chloride), 8, II
Nº EMS	F-A, S-B

### 15. INFORMACIÓN REGLAMENTARIA

#### Inventarios internacionales

**Todos los componentes del producto se encuentran en los siguientes inventarios** TSCA (Estados Unidos): Canadá (DSL/NDSL) Europa (EINECS/ELINCS/NLP) Australia (AICS) Corea del Sur (KECL): China (IECSC) ENCS (Japón):

#### *X - Incluido*

*TSCA - Ley de control de sustancias tóxicas (Toxic Substances Control Act) estadounidense, apartado 8(b), Inventario*

*DSL/NDSL - Lista de sustancias domésticas/no domésticas de Canadá*

*EINECS/ELINCS - Inventario Europeo de Sustancias Químicas Existentes/ Lista europea de sustancias químicas notificadas*

*ENCS - Sustancias químicas existentes y nuevas de Japón*

*IECSC - Inventario de sustancias químicas existentes de China*

*KECL - Sustancias químicas existentes y evaluadas de Corea*

*PICCS - Inventario de productos químicos y sustancias químicas de Filipinas*

#### Normativas federales de EE.UU

**SARA 313**

Sección 313 del título III de la Ley de enmiendas y reautorización del super fondo de 1986 (SARA). Este producto no contiene ninguna sustancia química sujeta a los requisitos de creación de informes de la ley y del título 40 del Código de regulaciones federales, parte 372.

**Categorías de riesgos SARA 311/312**

Peligro agudo para la salud	Sí
Peligro crónico para la salud	Sí
Peligro de incendio	No
Peligro de liberación brusca de presión	No
Riesgo de reacción	No

**CWA (Ley del agua limpia, Clean Water Act)**

Este producto no contiene ninguna sustancia regulada como contaminantes según la Ley de Agua Limpia (40 CFR 122.21 y 40 CFR 122.42).

**Normativas estatales de EE.UU****Proposición 65 de California**

Este producto no contiene ninguna sustancia química de la Proposición 65.

**Normativas estatales de derecho a la información de los EE.UU**

Este producto no contiene ninguna sustancia regulada por las normativas estatales de derecho a la información

**México INFORMACIÓN REGLAMENTARIA****CANADÁ INFORMACIÓN REGLAMENTARIA**

Este producto se ha clasificado de acuerdo con los criterios de riesgo del Reglamento de productos controlados (CPR) y la FDS contiene toda la información que requiere el CPR

Clase de peligro WHMIS                      No controlado

**16. OTRA INFORMACIÓN**

**Fecha de revisión**                              10-feb-2017


**Nota de revisión**                              No hay información disponible

**Descargo de responsabilidad**

La información suministrada en esta ficha de datos de seguridad es correcta según los conocimientos, datos y opiniones de que disponemos a día de esta publicación. La información suministrada está diseñada solo como guía de manipulación, uso, procesado, almacenamiento, transporte, eliminación y liberación seguros y no debe considerarse como una garantía o especificación de calidad. La información solo hace referencia al material específico designado y puede no ser válida para dicho material cuando se usa en combinación con cualquier otro material o proceso, a menos que el texto lo especifique.

**Fin de la ficha de datos de seguridad**

# Fichas Internacionales de Seguridad Química

<b>HIDROGENO</b>			<b>ICSC: 0001</b>
			Marzo 2002
<b>CAS:</b>	1333-74-0	<b>H<sub>2</sub></b>	
<b>RTECS:</b>	MW8900000	<b>Masa molecular: 2.0</b>	
<b>NU:</b>	1049		
<b>CE Índice Anexo I:</b>	001-001-00-9		
<b>CE / EINECS:</b>	215-605-7		

TIPO DE PELIGRO / EXPOSICIÓN	PELIGROS AGUDOS / SÍNTOMAS	PREVENCIÓN	PRIMEROS AUXILIOS / LUCHA CONTRA INCENDIOS
<b>INCENDIO</b>	Extremadamente inflamable. Muchas reacciones pueden producir incendio o explosión.	Evitar las llamas, NO producir chispas y NO fumar.	Cortar el suministro; si no es posible y no existe riesgo para el entorno próximo, dejar que el incendio se extinga por sí mismo; en otros casos apagar con agua pulverizada, polvo, dióxido de carbono.
<b>EXPLOSIÓN</b>	Las mezclas gas/aire son explosivas.	Sistema cerrado, ventilación, equipo eléctrico y de alumbrado a prueba de explosión. Utilícense herramientas manuales no generadoras de chispas. No manipular las botellas con las manos grasientas.	En caso de incendio: mantener fría la botella rociando con agua. Combatir el incendio desde un lugar protegido.

EXPOSICIÓN			
<b>Inhalación</b>	Asfixia.	Sistema cerrado y ventilación.	Aire limpio, reposo. Respiración artificial si estuviera indicada. Proporcionar asistencia médica.
<b>Piel</b>	Congelación grave.	Guantes aislantes del frío.	Proporcionar asistencia médica.
<b>Ojos</b>		Gafas de protección de seguridad.	
<b>Ingestión</b>			

DERRAMES Y FUGAS	ENVASADO Y ETIQUETADO
Eliminar toda fuente de ignición Evacuar la zona de peligro. Consultar a un experto. Ventilar. Eliminar el vapor con agua pulverizada.	<b>Clasificación UE</b> Símbolo: F+ R: 12 S: (2-)9-16-33 <b>Clasificación NU</b> Clasificación de Peligros NU: 2.1
RESPUESTA DE EMERGENCIA	ALMACENAMIENTO
Ficha de emergencia de transporte (Transport Emergency Card): TEC (R)-20S1049 Código NFPA: H 0; F 4; R 0;	A prueba de incendio. Mantener en lugar fresco.

IPCS  
International  
Programme on  
Chemical Safety



Preparada en el Contexto de Cooperación entre el IPCS y la Comisión Europea © IPCS, CE 2005

VÉASE INFORMACIÓN IMPORTANTE AL DORSO

# Fichas Internacionales de Seguridad Química

**HIDROGENO****ICSC: 0001**

## DATOS IMPORTANTES

**ESTADO FÍSICO; ASPECTO:**

Gas comprimido inodoro e incoloro.

**PELIGROS FÍSICOS:**

El gas se mezcla bien con el aire, formándose fácilmente mezclas explosivas. El gas es más ligero que el aire.

**PELIGROS QUÍMICOS:**

El calentamiento intenso puede originar combustión violenta o explosión. Reacciona violentamente con aire, oxígeno, halógenos y oxidantes fuertes, originando peligro de incendio y explosión. Los metales catalizadores tales como el platino o el níquel aumentan este tipo de reacciones.

**LÍMITES DE EXPOSICIÓN:**

TLV: asfixiante simple (ACGIH 2002).

**VÍAS DE EXPOSICIÓN:**

La sustancia se puede absorber por inhalación.

**RIESGO DE INHALACIÓN:**

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

**EFFECTOS DE EXPOSICIÓN DE CORTA DURACIÓN:**

Asfixiante simple. Véanse Notas.

## PROPIEDADES FÍSICAS

Punto de ebullición: -253 °C

Densidad relativa de vapor (aire = 1): 0.07

Punto de inflamación: gas inflamable

Temperatura de autoignición: 500-571 °C

Límites de explosividad, % en volumen en el aire: 4-76

## 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. A concentraciones tóxicas no hay alerta por el olor. Medir concentraciones de hidrógeno con un detector de gas adecuado (un detector de gas inflamable normal no es adecuado).

## INFORMACIÓN ADICIONAL

Límites de exposición profesional (INSHT 2011):

Notas: Asfixiante simple

**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.

# Fichas Internacionales de Seguridad Química

## NITROGENO (gas comprimido)

ICSC: 1198



NITROGENO (gas comprimido)

Azoe  
(botella)

N<sub>2</sub>

Masa molecular: 28.01

N° CAS 7727-37-9

N° RTECS QW9700000

N° ICSC 1198

N° NU 1066



TIPOS DE PELIGRO/ EXPOSICION	PELIGROS/ SINTOMAS AGUDOS	PREVENCION	PRIMEROS AUXILIOS/ LUCHA CONTRA INCENDIOS
<b>INCENDIO</b>	No combustible. El calentamiento intenso puede producir aumento de la presión con riesgo de estallido.		En caso de incendio en el entorno: están permitidos todos los agentes extintores.
<b>EXPLOSION</b>			En caso de incendio: mantener fría la botella rociando con agua.
<b>EXPOSICION</b>			
• <b>INHALACION</b>	Debilidad, pérdida del conocimiento, asfixia (véanse Notas).	Ventilación.	Aire limpio, reposo, respiración artificial si estuviera indicada y proporcionar asistencia médica.
• <b>PIEL</b>			
• <b>OJOS</b>			
• <b>INGESTION</b>			
DERRAMAS Y FUGAS	ALMACENAMIENTO	ENVASADO Y ETIQUETADO	
Ventilar. (Protección personal adicional: equipo autónomo de respiración).	A prueba de incendio, si está en local cerrado. Mantener en lugar fresco y bien ventilado.	Clasificación de Peligros NU: 2.2	
VEASE AL DORSO INFORMACION IMPORTANTE			
<b>ICSC: 1198</b>	Preparada en el Contexto de Cooperación entre el IPCS y la Comisión de las Comunidades Europeas © CCE, IPCS, 2005		

# Fichas Internacionales de Seguridad Química

## NITROGENO (gas comprimido)

ICSC: 1198

<b>D A T O S I M P O R T A N T E S</b>	<b>ESTADO FISICO; ASPECTO</b> Gas comprimido incoloro, inodoro e insípido.	<b>VIAS DE EXPOSICION</b> La sustancia se puede absorber por inhalación.
	<b>PELIGROS FISICOS</b> El gas se mezcla fácilmente con el aire.	<b>RIESGO DE INHALACION</b> Al producirse pérdidas en zonas confinadas este gas puede originar asfixia por disminución del contenido de oxígeno del aire (véanse Notas).
	<b>LIMITES DE EXPOSICION</b> TLV: asfixiante simple (ACGIH 2004). MAK: no establecido.	

<b>PROPIEDADES FISICAS</b>	Punto de ebullición: -196°C Punto de fusión: -210°C	Solubilidad en agua: escasa Densidad relativa de vapor (aire = 1): 0.97
----------------------------	--------------------------------------------------------	----------------------------------------------------------------------------

<b>DATOS AMBIENTALES</b>	
--------------------------	--

### 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.

Ficha de emergencia de transporte (Transport Emergency Card): TEC (R)-20G1A

### INFORMACION ADICIONAL

FISQ: 4-156  
NITROGENO (gas comprimido)

Los valores LEP pueden consultarse en línea en la siguiente dirección:  
[www.insht.es](http://www.insht.es)

**ICSC: 1198**

**NITROGENO (gas comprimido)**

© CCE, IPCS, 2005

<b>NOTA LEGAL IMPORTANTE:</b>	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.
-------------------------------	-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------



**FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD**

de acuerdo el Reglamento (CE) No. 1907/2006

Fecha de revisión 21.04.2015

Versión 5.9

**SECCIÓN 1. Identificación de la sustancia o la mezcla y de la sociedad o la empresa****1.1 Identificador del producto**

Artículo número	104074
Denominación	D(+)-Glucosa monohidrato para fines bioquímicos
Número de registro REACH	No hay disponible un número de registro para esta sustancia, ya que la sustancia o su uso están exentos del registro; según el artículo 2 del Reglamento REACH (CE) núm. 1097/2006, el tonelaje anual no requiere registro o dicho registro está previsto para una fecha posterior.
No. CAS	14431-43-7

**1.2 Usos pertinentes identificados de la sustancia o de la mezcla y usos desaconsejados**

Usos identificados	Investigación y análisis bioquímicos, Análisis químico Para informaciones adicionales a usos refiérase al portal Merck Chemicals ( <a href="http://www.merckgroup.com">www.merckgroup.com</a> ; for USA/Canada <a href="http://www.emdgroup.com">www.emdgroup.com</a> ).
--------------------	-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

**1.3 Datos del proveedor de la ficha de datos de seguridad**

Compañía	Merck KGaA * 64271 Darmstadt * Alemania * Tel: +49 6151 72-0
Departamento Responsable	LS-QHC * e-mail: <a href="mailto:prodsafe@merckgroup.com">prodsafe@merckgroup.com</a>

**1.4 Teléfono de emergencia Instituto Nacional de Toxicología \* Madrid \* Tel: 91 562 04 20****SECCIÓN 2. Identificación de los peligros****2.1 Clasificación de la sustancia o de la mezcla**

Esta sustancia no es clasificada como siendo peligrosa según la legislación de la Unión Europea.

**2.2 Elementos de la etiqueta****Etiquetado (REGLAMENTO (CE) No 1272/2008)**

No es una sustancia o mezcla peligrosa de acuerdo con el Reglamento (CE) No. 1272/2008.

**2.3 Otros peligros**

Ninguno conocido.

**SECCIÓN 3. Composición/información sobre los componentes****3.1 Sustancia**

Formula	$C_6H_{12}O_6 \cdot H_2O$ (Hill)
No. CE	200-075-1
Masa molar	198,17 g/mol

Observaciones	Ningún ingrediente peligroso según la Reglamento (CE) No. 1907/2006.
---------------	----------------------------------------------------------------------

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD  
de acuerdo el Reglamento (CE) No. 1907/2006

Artículo número 104074  
Denominación D(+)-Glucosa monohidrato para fines bioquímicos

---

### 3.2 Mezcla

No aplicable

---

## SECCIÓN 4. Primeros auxilios

### 4.1 Descripción de los primeros auxilios

Tras inhalación: aire fresco.

En caso de contacto con la piel: Quitar inmediatamente todas las prendas contaminadas.  
Aclararse la piel con agua/ ducharse.

Tras contacto con los ojos: aclarar con abundante agua.

Tras ingestión: hacer beber agua (máximo 2 vasos), en caso de malestar consultar al médico.

### 4.2 Principales síntomas y efectos, agudos y retardados

No nos consta una descripción de síntomas tóxicos.

### 4.3 Indicación de toda atención médica y de los tratamientos especiales que deban dispensarse inmediatamente

No hay información disponible.

---

## SECCIÓN 5. Medidas de lucha contra incendios

### 5.1 Medios de extinción

*Medios de extinción apropiados*

Agua, Dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>), Espuma, Polvo seco

*Medios de extinción no apropiados*

No existen limitaciones de agentes extinguidores para esta sustancia/mezcla.

### 5.2 Peligros específicos derivados de la sustancia o la mezcla

Inflamable.

En caso de incendio posible formación de gases de combustión o vapores peligrosos.

Riesgo de explosión del polvo.

### 5.3 Recomendaciones para el personal de lucha contra incendios

*Equipo de protección especial para el personal de lucha contra incendios*

En caso de fuego, protéjase con un equipo respiratorio autónomo.

*Otros datos*

Impedir la contaminación de las aguas superficiales o subterráneas por el agua que ha servido a la extinción de incendios.

---

## SECCIÓN 6. Medidas en caso de vertido accidental

### 6.1 Precauciones personales, equipo de protección y procedimientos de emergencia

Indicaciones para el personal que no forma parte de los servicios de emergencia: Evitar la inhalación de polvo. Evacúe el área de peligro, respete los procedimientos de emergencia, consulte con expertos.

Consejos para el personal de emergencia:

Equipo protector véase sección 8.

### 6.2 Precauciones relativas al medio ambiente

No dejar que el producto entre en el sistema de alcantarillado.

---

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD  
de acuerdo el Reglamento (CE) No. 1907/2006

Artículo número 104074  
Denominación D(+)-Glucosa monohidrato para fines bioquímicos

---

### 6.3 Métodos y material de contención y de limpieza

Cubra las alcantarillas. Recoja, una y aspire los derrames. Observe posibles restricciones de materiales (véanse indicaciones en las secciones 7 o 10). Recoger en seco y proceder a la eliminación de residuos. Aclarar. Evitar la formación de polvo.

### 6.4 Referencia a otras secciones

Para indicaciones sobre el tratamiento de residuos, véase sección 13.

---

## SECCIÓN 7. Manipulación y almacenamiento

### 7.1 Precauciones para una manipulación segura

*Consejos para una manipulación segura*  
Observar las indicaciones de la etiqueta.

*Medidas de higiene*

Sustituir la ropa contaminada. Lavar manos al término del trabajo.

### 7.2 Condiciones de almacenamiento seguro, incluidas posibles incompatibilidades

*Condiciones de almacenamiento*

Bien cerrado. Seco.

Temperatura de almacenaje recomendada indicada en la etiqueta del producto.

### 7.3 Usos específicos finales

Fuera de los usos indicados en la sección 1.2 no se previenen aplicaciones finales adicionales.

---

## SECCIÓN 8. Controles de exposición/protección individual

### 8.1 Parámetros de control

No contiene sustancias con valores límites de exposición profesional.

### 8.2 Controles de la exposición

#### Disposiciones de ingeniería

Medidas técnicas y observación de métodos adecuados de trabajo tienen prioridad ante el uso de equipos de protección personal.

Véase sección 7.1.

#### Medidas de protección individual

Los tipos de auxiliares para protección del cuerpo deben elegirse específicamente según el puesto de trabajo en función de la concentración y cantidad de la sustancia peligrosa. Debería aclararse con el suministrador la estabilidad de los medios protectores frente a los productos químicos.

*Protección de los ojos / la cara*

Gafas de seguridad

*Protección de las manos*

Sumerción:

Material del guante:	Caucho nitrilo
Espesor del guante:	0,11 mm
tiempo de penetración:	> 480 min

Salpicaduras:

Material del guante:	Caucho nitrilo
Espesor del guante:	0,11 mm
tiempo de penetración:	> 480 min

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD  
de acuerdo el Reglamento (CE) No. 1907/2006

Artículo número 104074  
Denominación D(+)-Glucosa monohidrato para fines bioquímicos

---

Los guantes de protección indicados deben cumplir con las especificaciones de la Directiva 89/686/EEC y con su norma resultante EN374, por ejemplo KCL 741 Dermatrill® L (Sumerción), KCL 741 Dermatrill® L (Salpicaduras).

Los tiempos de ruptura mencionados anteriormente han sido determinados con muestras de material de los tipos de guantes recomendados en mediciones de laboratorio de KCL según EN374.

Esta recomendación solo es válida para el producto mencionado en la ficha de datos de seguridad, suministrado por nosotros y para el fin indicado. Al disolver o mezclar en otras sustancias y cuando las condiciones difieran de las indicadas en EN374, debe dirigirse al suministrador de guantes con distintivo CE (por ejem. KCL GmbH, D-36124 Eichenzell, Internet: [www.kcl.de](http://www.kcl.de))

*Protección respiratoria*

necesaria en presencia de polvo.

Tipo de Filtro recomendado: Filtro P 1

El empresario debe garantizar que el mantenimiento, la limpieza y la prueba técnica de los protectores respiratorios se hagan según las instrucciones del productor de las mismas. Estas medidas deben ser documentadas debidamente.

**Controles de exposición medioambiental**

No dejar que el producto entre en el sistema de alcantarillado.

---

**SECCIÓN 9. Propiedades físicas y químicas**

**9.1 Información sobre propiedades físicas y químicas básicas**

Forma	sólido
Color	incolore
Olor	inodoro
Umbral olfativo	No hay información disponible.
pH	6 - 7 a 100 g/l 20 °C
Punto de fusión	aprox. 83 °C
Punto de ebullición	No hay información disponible.
Punto de inflamación	No hay información disponible.
Tasa de evaporación	No hay información disponible.
Inflamabilidad (sólido, gas)	No hay información disponible.
Límite de explosión, inferior	No hay información disponible.
Límite de explosión, superior	No hay información disponible.
Presión de vapor	No hay información disponible.
Densidad relativa del vapor	No hay información disponible.

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD  
de acuerdo el Reglamento (CE) No. 1907/2006

Artículo número 104074  
Denominación D(+)-Glucosa monohidrato para fines bioquímicos

---

Densidad	No hay información disponible.
Densidad relativa	No hay información disponible.
Solubilidad en agua	1.000 g/l a 20 °C
Coefficiente de reparto n-octanol/agua	log Pow: -3,29 (sustancia anhidra) No es de esperar una bioacumulación. (Literatura)
Temperatura de auto-inflamación	No hay información disponible.
Temperatura de descomposición	No hay información disponible.
Viscosidad, dinámica	No hay información disponible.
Propiedades explosivas	No clasificado/a como explosivo/a.
Propiedades comburentes	ningún

#### 9.2 Otros datos

Temperatura de ignición	aprox. 500 °C
Densidad aparente	aprox.630 kg/m <sup>3</sup>

---

### SECCIÓN 10. Estabilidad y reactividad

#### 10.1 Reactividad

Riesgo de explosión del polvo.

#### 10.2 Estabilidad química

eliminación de agua de cristalización por calefacción

#### 10.3 Posibilidad de reacciones peligrosas

Reacción exotérmica con:

Agentes oxidantes fuertes

#### 10.4 Condiciones que deben evitarse

información no disponible

#### 10.5 Materiales incompatibles

información no disponible

#### 10.6 Productos de descomposición peligrosos

información no disponible

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD  
de acuerdo el Reglamento (CE) No. 1907/2006

Artículo número 104074  
Denominación D(+)-Glucosa monohidrato para fines bioquímicos

---

## SECCIÓN 11. Información toxicológica

### 11.1 Información sobre los efectos toxicológicos

*Toxicidad oral aguda*

DL50 Rata: 25.800 mg/kg

(sustancia anhidra) (RTECS)

*Toxicidad aguda por inhalación*

Esta información no está disponible.

*Toxicidad cutánea aguda*

Esta información no está disponible.

*Irritación de la piel*

Esta información no está disponible.

*Irritación ocular*

Esta información no está disponible.

*Sensibilización*

Esta información no está disponible.

*Mutagenicidad en células germinales*

Esta información no está disponible.

*Carcinogenicidad*

Esta información no está disponible.

*Toxicidad para la reproducción*

Esta información no está disponible.

*Teratogenicidad*

Esta información no está disponible.

*Toxicidad específica en determinados órganos - exposición única*

Esta información no está disponible.

*Toxicidad específica en determinados órganos - exposiciones repetidas*

Esta información no está disponible.

*Peligro de aspiración*

Esta información no está disponible.

### 11.2 Otros datos

No se conocen riesgos por la propia experiencia con el producto.

Sustancia presente en la naturaleza

Manipular con las precauciones de higiene industrial adecuadas, y respetar las prácticas de seguridad.

Sustancia presente en el cuerpo humano bajo condiciones fisiológicas.

---

## SECCIÓN 12. Información ecológica

### 12.1 Toxicidad

*Toxicidad para los peces*

CL0 peces: 60.000 mg/l

(sustancia anhidra) (Ficha de datos de Seguridad externa)

### 12.2 Persistencia y degradabilidad

*Biodegradabilidad*

48 %; 5 d

OECD TG 301D

(Ficha de datos de Seguridad externa)

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD  
de acuerdo el Reglamento (CE) No. 1907/2006

Artículo número 104074  
Denominación D(+)-Glucosa monohidrato para fines bioquímicos

---

Fácilmente biodegradable.

**12.3 Potencial de bioacumulación**

*Coefficiente de reparto n-octanol/agua*

log Pow: -3,29

(sustancia anhidra) No es de esperar una bioacumulación. (Literatura)

**12.4 Movilidad en el suelo**

No hay información disponible.

**12.5 Resultados de la valoración PBT y mPmB**

Una valoración PBT y MPMB no se hizo, debido al hecho de que una evaluación de peligro químico no es necesaria o no existe.

**12.6 Otros efectos adversos**

*Información ecológica complementaria*

Manteniendo las condiciones adecuadas de manejo no deben esperarse problemas ecológicos.

---

**SECCIÓN 13. Consideraciones relativas a la eliminación**

*Métodos para el tratamiento de residuos*

Los residuos deben eliminarse de acuerdo con normativas locales o nacionales. Deje los productos químicos en sus recipientes originales. No los mezcle con otros residuos. Maneje los recipientes sucios como el propio producto.

Consulte en [www.retrologistik.com](http://www.retrologistik.com) sobre procesos relativos a la devolución de productos químicos o recipientes, o contáctenos si tiene más preguntas.

Directiva sobre residuos 2008/98 nota / CE.

---

**SECCIÓN 14. Información relativa al transporte**

**Transporte por carretera (ADR/RID)**

14.1 - 14.6 Producto no peligroso según los criterios de la reglamentación del transporte.

**Transporte fluvial (ADN)**

No relevante

**Transporte aéreo (IATA)**

14.1 - 14.6 Producto no peligroso según los criterios de la reglamentación del transporte.

**Transporte marítimo (IMDG)**

14.1 - 14.6 Producto no peligroso según los criterios de la reglamentación del transporte.

**14.7 Transporte a granel con arreglo al anexo II del Convenio Marpol 73/78 y del Código IBC**

No relevante

---

**SECCIÓN 15. Información reglamentaria**

**15.1 Reglamentación y legislación en materia de seguridad, salud y medio ambiente específicas para la sustancia o la mezcla**

*Disposiciones legales de la CE*

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD  
de acuerdo el Reglamento (CE) No. 1907/2006

Artículo número 104074  
Denominación D(+)-Glucosa monohidrato para fines bioquímicos

---

Legislación de Peligro de Accidente Importante Alemán 96/82/EC  
La directiva 96/82/EC no se aplica

Reglamento 1005/2009/CE relativo a sustancias que agotan la capa de ozono no regulado

Reglamento (CE) nº 850/2004 del Parlamento Europeo y del Consejo de 29 de abril de 2004 sobre contaminantes orgánicos persistentes que modifica la Directiva 79/117/CEE no regulado

Reglamento (CE) No 689/2008 relativo a la exportación e importación de productos químicos peligrosos no regulado

Sustancias extremadamente preocupantes (SVHC) Este producto no contiene sustancias extremadamente preocupantes por encima del límite legal de concentración correspondiente ( $\geq 0,1$  % p/p) según la normativa CE n.º 1907/2006 (REACH), artículo 57.

*Legislación nacional*

Clase de almacenamiento 10 - 13

## 15.2 Evaluación de la seguridad química

Para este producto no se realizó una valoración de la seguridad química.

---

## SECCIÓN 16. Otra información

### Consejos relativos a la formación

Debe disponer a los trabajadores la información y la formación práctica suficientes.

### Etiquetado (67/548/CEE o 1999/45/CE)

El producto no necesita ser etiquetado de acuerdo con las directivas de la Comunidad Europea o las respectivas leyes nacionales.

### Una explicación de las abreviaturas y los acrónimos utilizados en la ficha de datos de seguridad

Puede consultar las abreviaturas y acrónimos utilizados en [www.wikipedia.org](http://www.wikipedia.org).

### Representante regional

Merck Chemical and Life Science, S.A.  
C/ María de Molina, 40 | 28006 Madrid - España |  
Tel: +34 935655500 | Fax: +34 935440000 | email: [SCM.Chemicals.ES@merckgroup.com](mailto:SCM.Chemicals.ES@merckgroup.com) |  
[www.merck.es](http://www.merck.es)

---

*Los datos suministrados en esta ficha de seguridad se basan a nuestro actual conocimiento. Describen tan sólo las medidas de seguridad en el manejo de este producto y no representan una garantía sobre las propiedades descritas del mismo.*



## FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo el Reglamento (CE) No. 1907/2006

Fecha de revisión 09.05.2011

Versión 5.1

### SECCIÓN 1. Identificación de la sustancia o la mezcla y de la sociedad o la empresa

#### 1.1 Identificador del producto

Artículo número	108692
Denominación	D(+)-Xilosa Ph Eur,BP
Número de registro REACH	No hay disponible un número de registro para esta sustancia, ya que la sustancia o su uso están exentos del registro; según el artículo 2 del Reglamento REACH (CE) núm. 1097/2006, el tonelaje anual no requiere registro o dicho registro está previsto para una fecha posterior.

#### 1.2 Usos pertinentes identificados de la sustancia o de la mezcla y usos desaconsejados

Usos identificados	Producción farmacéutica, Materia prima para cosméticos Para informaciones adicionales a usos refiérase al portal Merck Chemicals ( <a href="http://www.merck-chemicals.com">www.merck-chemicals.com</a> ).
--------------------	---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

#### 1.3 Datos del proveedor de la ficha de datos de seguridad

Compañía	Merck KGaA * 64271 Darmstadt * Alemania * Tel: +49 6151 72-0
Departamento Responsable	LS-QHC * e-mail: <a href="mailto:prodsafe@merckgroup.com">prodsafe@merckgroup.com</a>

#### 1.4 Teléfono de emergencia Instituto Nacional de Toxicología \* Madrid \* Tel: 91 562 04 20

### SECCIÓN 2. Identificación de los peligros

#### 2.1 Clasificación de la sustancia o de la mezcla

Esta sustancia no es clasificada como siendo peligrosa según la legislación de la Unión Europea.

#### 2.2 Elementos de la etiqueta

##### Etiquetado (REGLAMENTO (CE) No 1272/2008)

No es una sustancia peligrosa según SGA.

##### Etiquetado (67/548/CEE o 1999/45/CE)

El producto no necesita ser etiquetado de acuerdo con las directivas de la Comunidad Europea ó las respectivas leyes nacionales.

#### 2.3 Otros peligros

Ninguno conocido.

### SECCIÓN 3. Composición/información sobre los componentes

Formula	C <sub>5</sub> H <sub>10</sub> O <sub>5</sub> (Hill)
No. CAS	58-86-6
No. CE	200-400-7
Masa molar	150,13 g/mol

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD  
de acuerdo el Reglamento (CE) No. 1907/2006

Artículo número 108692  
Denominación D(+)-Xilosa Ph Eur,BP

---

---

## SECCIÓN 4. Primeros auxilios

### 4.1 Descripción de los primeros auxilios

Tras inhalación: aire fresco.

Tras contacto con la piel: aclarar con abundante agua. Eliminar ropa contaminada.

Tras contacto con los ojos: aclarar con abundante agua.

Tras ingestión (grandes cantidades): consultar al médico si subsiste malestar.

### 4.2 Principales síntomas y efectos, agudos y retardados

Trastornos del estómago/intestinales

La sustancia actúa como purgante.

### 4.3 Indicación de toda atención médica y de los tratamientos especiales que deban dispensarse inmediatamente

No hay información disponible.

---

## SECCIÓN 5. Medidas de lucha contra incendios

### 5.1 Medios de extinción

*Medios de extinción apropiados*

Agua, Dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>), Espuma, Polvo seco

*Medios de extinción no apropiados*

No existen limitaciones de agentes extinguidores para esta sustancia/mezcla.

### 5.2 Peligros específicos derivados de la sustancia o la mezcla

Material combustible

En caso de incendio posible formación de gases de combustión o vapores peligrosos.

### 5.3 Recomendaciones para el personal de lucha contra incendios

*Equipo de protección especial para el personal de lucha contra incendios*

En caso de fuego, protéjase con un equipo respiratorio autónomo.

---

## SECCIÓN 6. Medidas en caso de vertido accidental

### 6.1 Precauciones personales, equipo de protección y procedimientos de emergencia

Indicaciones para el personal que no forma parte de los servicios de emergencia: Evitar la inhalación de polvo. Evacúe el área de peligro, respete los procedimientos de emergencia, consulte con expertos.

Consejos para el personal de emergencia: Equipo protector véase sección 8.

### 6.2 Precauciones relativas al medio ambiente

No son necesarias medidas especiales.

### 6.3 Métodos y material de contención y de limpieza

Observe posibles restricciones de materiales (véanse indicaciones en las secciones 7.2 o 10.5)

Recoger en seco y proceder a la eliminación de residuos. Aclarar. Evitar la formación de polvo.

### 6.4 Referencia a otras secciones

Para indicaciones sobre el tratamiento de residuos, véase sección 13.

---

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD  
de acuerdo el Reglamento (CE) No. 1907/2006

Artículo número 108692  
Denominación D(+)-Xilosa Ph Eur,BP

---

---

## SECCIÓN 7. Manipulación y almacenamiento

### 7.1 Precauciones para una manipulación segura

Observar las indicaciones de la etiqueta.

### 7.2 Condiciones de almacenamiento seguro, incluidas posibles incompatibilidades

Bien cerrado. Seco.

Almacenar entre +15°C y +25°C.

### 7.3 Usos específicos finales

Fuera de los usos indicados en la sección 1.2 no se previenen aplicaciones finales adicionales.

---

## SECCIÓN 8. Controles de exposición/protección individual

### 8.1 Parámetros de control

No contiene sustancias con valores límites de exposición profesional.

### 8.2 Controles de la exposición

#### Disposiciones de ingeniería

Medidas técnicas y observación de métodos adecuados de trabajo tienen prioridad ante el uso de equipos de protección personal.

Véase sección 7.1.

#### Medidas de protección individual

Los tipos de auxiliares para protección del cuerpo deben elegirse específicamente según el puesto de trabajo en función de la concentración y cantidad de la sustancia peligrosa. Debería aclararse con el suministrador la estabilidad de los medios protectores frente a los productos químicos.

#### *Medidas de higiene*

Sustituir la ropa contaminada. Lavar manos al término del trabajo.

#### *Protección de los ojos / la cara*

Gafas de seguridad

#### *Protección de las manos*

Sumerción:

Material del guante:	Caucho nitrilo
Espesor del guante:	0,11 mm
Tiempo de perforación:	> 480 min

Salpicaduras:

Material del guante:	Caucho nitrilo
Espesor del guante:	0,11 mm
Tiempo de perforación:	> 480 min

Los guantes de protección indicados deben cumplir con las especificaciones de la Directiva 89/686/EEC y con su norma resultante EN374, por ejemplo KCL 741 Dermatrill® L (Sumerción), KCL 741 Dermatrill® L (Salpicaduras).

Los tiempos de ruptura mencionados anteriormente han sido determinados con muestras de material de los tipos de guantes recomendados en mediciones de laboratorio de KCL según EN374.

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD  
de acuerdo el Reglamento (CE) No. 1907/2006

Artículo número 108692  
Denominación D(+)-Xilosa Ph Eur, BP

---

Esta recomendación solo es válida para el producto mencionado en la ficha de datos de seguridad, suministrado por nosotros y para el fin indicado. Al disolver o mezclar en otras sustancias y cuando las condiciones difieran de las indicadas en EN374, debe dirigirse al suministrador de guantes con distintivo CE (por ejem. KCL GmbH, D-36124 Eichenzell, Internet: [www.kcl.de](http://www.kcl.de))

*Protección respiratoria*  
necesaria en presencia de polvo.

---

## SECCIÓN 9. Propiedades físicas y químicas

### 9.1 Información sobre propiedades físicas y químicas básicas

Estado físico	sólido
Color	blanco
Olor	inodoro
Umbral olfativo	No hay información disponible.
pH	6,0 - 6,5 a 100 g/l 20 °C
Punto de fusión	146 - 152 °C
Punto de ebullición	No hay información disponible.
Punto de inflamación	No hay información disponible.
Tasa de evaporación	No hay información disponible.
Inflamabilidad (sólido, gas)	No hay información disponible.
Límite de explosión, inferior	No hay información disponible.
Límite de explosión, superior	No hay información disponible.
Presión de vapor	No hay información disponible.
Densidad relativa del vapor	No hay información disponible.
Densidad relativa	1,53 g/cm <sup>3</sup> a 20 °C
Solubilidad en agua	550 g/l a 20 °C
Coefficiente de reparto n-octanol/agua	log Pow: -1,98 (calculado) No es de esperar una bioacumulación. (Literatura)
Temperatura de auto-inflamación	No hay información disponible.

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD  
de acuerdo el Reglamento (CE) No. 1907/2006

Artículo número 108692  
Denominación D(+)-Xilosa Ph Eur,BP

---

Temperatura de descomposición No hay información disponible.

Viscosidad, dinámica No hay información disponible.

Propiedades explosivas No hay información disponible.

Propiedades comburentes No hay información disponible.

## 9.2 Otros datos

Densidad aparente aprox.450 kg/m<sup>3</sup>

---

## SECCIÓN 10. Estabilidad y reactividad

### 10.1 Reactividad

Válido en general para sustancias y preparaciones orgánicas combustibles: en caso de división fina, en estado arremolinado, debe contarse en general con peligro de explosión.

### 10.2 Estabilidad química

El producto es químicamente estable bajo condiciones normales (a temperatura ambiental).

### 10.3 Posibilidad de reacciones peligrosas

Posibles reacciones violentas con:

Agentes oxidantes fuertes

### 10.4 Condiciones que deben evitarse

información no disponible

### 10.5 Materiales incompatibles

información no disponible

### 10.6 Productos de descomposición peligrosos

información no disponible

---

## SECCIÓN 11. Información toxicológica

### 11.1 Información sobre los efectos toxicológicos

#### *Toxicidad oral aguda*

Síntomas: Consecuencias posibles:, Trastornos del estómago/intestinales, La sustancia actúa como purgante.

#### *Genotoxicidad in vitro*

Prueba de Ames

Salmonella typhimurium

Resultado: negativo

(Literatura)

#### *Toxicidad específica en determinados órganos - exposición única*

La sustancia o mezcla no se clasifica como tóxica específica de órganos blanco, exposición única.

#### *Toxicidad específica en determinados órganos - exposiciones repetidas*

La sustancia o mezcla no se clasifica como tóxica específica de órganos blanco, exposición repetida.

#### *Peligro de aspiración*

Los datos disponibles no permiten efectuar una clasificación.

---

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD  
de acuerdo el Reglamento (CE) No. 1907/2006

Artículo número 108692  
Denominación D(+)-Xilosa Ph Eur,BP

---

### 11.2 Otros datos

No nos constan datos cuantitativos sobre la toxicidad de este producto.

Otras indicaciones:

Sustancia presente en la naturaleza

Manipular con las precauciones de higiene industrial adecuadas, y respetar las prácticas de seguridad.

---

## SECCIÓN 12. Información ecológica

### 12.1 Toxicidad

No hay información disponible.

### 12.2 Persistencia y degradabilidad

No hay información disponible.

### 12.3 Potencial de bioacumulación

*Coefficiente de reparto n-octanol/agua*

log Pow: -1,98

(calculado)

No es de esperar una bioacumulación. (Literatura)

### 12.4 Movilidad en el suelo

No hay información disponible.

### 12.5 Resultados de la valoración PBT y mPmB

Una valoración PBT y MPMB no se hizo, debido al hecho de que una evaluación de peligro químico no es necesaria o no existe.

### 12.6 Otros efectos adversos

*Información ecológica complementaria*

Manteniendo las condiciones adecuadas de manejo no deben esperarse problemas ecológicos.

---

## SECCIÓN 13. Consideraciones relativas a la eliminación

*Métodos para el tratamiento de residuos*

Los residuos deben eliminarse de acuerdo con la directiva sobre residuos 2008/98/CE así como con otras normativas locales o nacionales. Deje los productos químicos en sus recipientes originales. No los mezcle con otros residuos. Maneje los recipientes sucios como el propio producto.

Consulte en [www.retrologistik.com](http://www.retrologistik.com) sobre procesos relativos a la devolución de productos químicos o recipientes, o contáctenos si tiene más preguntas.

---

## SECCIÓN 14. Información relativa al transporte

Producto no peligroso según los criterios de la reglamentación del transporte.

---

## SECCIÓN 15. Información reglamentaria

### 15.1 Reglamentación y legislación en materia de seguridad, salud y medio ambiente específicas para la sustancia o la mezcla

*Disposiciones legales de la CE*

Legislación de Peligro de 96/82/EC

Accidente Importante La directiva 96/82/EC no se aplica

Alemania

Clase de almacenamiento 10 - 13

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD  
de acuerdo el Reglamento (CE) No. 1907/2006

Artículo número	108692
Denominación	D(+)-Xilosa Ph Eur,BP

---

### 15.2 Evaluación de la seguridad química

Para éste producto no se realizo una valoración de la seguridad química.

---

## SECCIÓN 16. Otra información

### Consejos relativos a la formación

Debe disponer a los trabajadores la información y la formación práctica suficientes.

### Una explicación de las abreviaturas y los acrónimos utilizados en la ficha de datos de seguridad

Puede consultar las abreviaturas y acrónimos utilizados en [www.wikipedia.org](http://www.wikipedia.org).

### Representante regional

Merck Chemical and Life Science, S.A. |  
C/ María de Molina, 40 | 28006 Madrid - España |  
Tel: +34 935655500 | Fax: +34 935440000 | email: [SCM.Chemicals.ES@merckgroup.com](mailto:SCM.Chemicals.ES@merckgroup.com) |  
[www.merck.es](http://www.merck.es)

---

*Los datos suministrados en ésta ficha de seguridad se basan a nuestro actual conocimiento. Describen tan sólo las medidas de seguridad en el manejo de éste producto y no representan una garantía sobre las propiedades descritas del mismo.*

## FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo el Reglamento (CE) No. 1907/2006

Fecha de revisión 22.04.2013

Versión 3.3

### SECCIÓN 1. Identificación de la sustancia o la mezcla y de la sociedad o la empresa

#### 1.1 Identificador del producto

Artículo número	101492
Denominación	L(+)-Arabinosa para microbiología
Número de registro REACH	No hay disponible un número de registro para esta sustancia, ya que la sustancia o su uso están exentos del registro; según el artículo 2 del Reglamento REACH (CE) núm. 1097/2006, el tonelaje anual no requiere registro o dicho registro está previsto para una fecha posterior.

#### 1.2 Usos pertinentes identificados de la sustancia o de la mezcla y usos desaconsejados

Usos identificados	Investigación y análisis bioquímicos Para informaciones adicionales a usos refiérase al portal Merck Chemicals ( <a href="http://www.merck-chemicals.com">www.merck-chemicals.com</a> ).
--------------------	---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

#### 1.3 Datos del proveedor de la ficha de datos de seguridad

Compañía	Merck KGaA * 64271 Darmstadt * Alemania * Tel: +49 6151 72-0
Departamento Responsable	LS-QHC * e-mail: <a href="mailto:prodsafe@merckgroup.com">prodsafe@merckgroup.com</a>

#### 1.4 Teléfono de emergencia Instituto Nacional de Toxicología \* Madrid \* Tel: 91 562 04 20

### SECCIÓN 2. Identificación de los peligros

#### 2.1 Clasificación de la sustancia o de la mezcla

Esta sustancia no es clasificada como siendo peligrosa según la legislación de la Unión Europea.

#### 2.2 Elementos de la etiqueta

##### Etiquetado (REGLAMENTO (CE) No 1272/2008)

No es una sustancia o mezcla peligrosa de acuerdo con el Reglamento (CE) No. 1272/2008.

##### Etiquetado (67/548/CEE o 1999/45/CE)

El producto no necesita ser etiquetado de acuerdo con las directivas de la Comunidad Europea ó las respectivas leyes nacionales.

#### 2.3 Otros peligros

Ninguna conocida.

### SECCIÓN 3. Composición/información sobre los componentes

#### 3.1 Sustancia

Formula	C <sub>5</sub> H <sub>10</sub> O <sub>5</sub> (Hill)
No. CAS	5328-37-0
No. CE	226-214-6
Masa molar	150,13 g/mol

Para el texto integro de las Declaraciones-H mencionadas en esta sección, véase la Sección 16.



FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD  
de acuerdo el Reglamento (CE) No. 1907/2006

Artículo número 101492  
Denominación L(+)-Arabinosa para microbiología

---

Observaciones Ningún ingrediente peligroso según la Reglamento (CE) No. 1907/2006

**3.2 Mezcla**  
no aplicable

---

**SECCIÓN 4. Primeros auxilios**

**4.1 Descripción de los primeros auxilios**

Tras inhalación: aire fresco.

Tras contacto con la piel: aclarar con abundante agua. Eliminar ropa contaminada.

Tras contacto con los ojos: aclarar con abundante agua.

Tras ingestión: hacer beber agua (máximo 2 vasos), en caso de malestar consultar al médico.

**4.2 Principales síntomas y efectos, agudos y retardados**

No nos consta una descripción de síntomas tóxicos.

**4.3 Indicación de toda atención médica y de los tratamientos especiales que deban dispensarse inmediatamente**

No hay información disponible.

---

**SECCIÓN 5. Medidas de lucha contra incendios**

**5.1 Medios de extinción**

*Medios de extinción apropiados*

Agua, Dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>), Espuma, Polvo seco

*Medios de extinción no apropiados*

No existen limitaciones de agentes extinguidores para esta sustancia/mezcla.

**5.2 Peligros específicos derivados de la sustancia o la mezcla**

Inflamable.

En caso de incendio posible formación de gases de combustión o vapores peligrosos.

**5.3 Recomendaciones para el personal de lucha contra incendios**

*Equipo de protección especial para el personal de lucha contra incendios*

En caso de fuego, protéjase con un equipo respiratorio autónomo.

---

**SECCIÓN 6. Medidas en caso de vertido accidental**

**6.1 Precauciones personales, equipo de protección y procedimientos de emergencia**

Indicaciones para el personal que no forma parte de los servicios de emergencia: Evitar la inhalación de polvo. Evacúe el área de peligro, respete los procedimientos de emergencia, consulte con expertos.

Consejos para el personal de emergencia: Equipo protector véase sección 8.

**6.2 Precauciones relativas al medio ambiente**

No son necesarias medidas especiales.

**6.3 Métodos y material de contención y de limpieza**

Observe posibles restricciones de materiales (véanse indicaciones en las secciones 7 o 10).

Recoger en seco y proceder a la eliminación de residuos. Aclarar. Evitar la formación de polvo.

---

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD  
de acuerdo el Reglamento (CE) No. 1907/2006

Artículo número 101492  
Denominación L(+)-Arabinosa para microbiología

---

#### 6.4 Referencia a otras secciones

Para indicaciones sobre el tratamiento de residuos, véase sección 13.

---

### SECCIÓN 7. Manipulación y almacenamiento

#### 7.1 Precauciones para una manipulación segura

*Consejos para una manipulación segura*

Observar las indicaciones de la etiqueta.

*Medidas de higiene*

Sustituir la ropa contaminada. Lavar manos al término del trabajo.

#### 7.2 Condiciones de almacenamiento seguro, incluidas posibles incompatibilidades

*Condiciones de almacenamiento*

Bien cerrado. Seco. Protejido de la luz.

Almacenar entre +15°C y +25°C.

#### 7.3 Usos específicos finales

Fuera de los usos indicados en la sección 1.2 no se previenen aplicaciones finales adicionales.

---

### SECCIÓN 8. Controles de exposición/protección individual

#### 8.1 Parámetros de control

No contiene sustancias con valores límites de exposición profesional.

#### 8.2 Controles de la exposición

##### Disposiciones de ingeniería

Medidas técnicas y observación de métodos adecuados de trabajo tienen prioridad ante el uso de equipos de protección personal.

Véase sección 7.1.

##### Medidas de protección individual

Los tipos de auxiliares para protección del cuerpo deben elegirse específicamente según el puesto de trabajo en función de la concentración y cantidad de la sustancia peligrosa. Debería aclararse con el suministrador la estabilidad de los medios protectores frente a los productos químicos.

*Protección de los ojos / la cara*

Gafas de seguridad

*Protección de las manos*

Sumerción:

Material del guante:	Caucho nitrilo
Espesor del guante:	0,11 mm
Tiempo de perforación:	> 480 min

Salpicaduras:

Material del guante:	Caucho nitrilo
Espesor del guante:	0,11 mm
Tiempo de perforación:	> 480 min

Los guantes de protección indicados deben cumplir con las especificaciones de la Directiva 89/686/EEC y con su norma resultante EN374, por ejemplo KCL 741 Dermatrill® L (Sumerción), KCL 741 Dermatrill® L (Salpicaduras).

Los tiempos de ruptura mencionados anteriormente han sido determinados con muestras de material de los tipos de guantes recomendados en mediciones de laboratorio de KCL según EN374.

---

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD  
de acuerdo el Reglamento (CE) No. 1907/2006

Artículo número 101492  
Denominación L(+)-Arabinosa para microbiología

---

Esta recomendación solo es válida para el producto mencionado en la ficha de datos de seguridad, suministrado por nosotros y para el fin indicado. Al disolver o mezclar en otras sustancias y cuando las condiciones difieran de las indicadas en EN374, debe dirigirse al suministrador de guantes con distintivo CE (por ejem. KCL GmbH, D-36124 Eichenzell, Internet: [www.kcl.de](http://www.kcl.de))

*Protección respiratoria*

necesaria en presencia de polvo.

Tipo de Filtro recomendado: Filtro P1

El empresario debe garantizar que el mantenimiento, la limpieza y la prueba técnica de los protectores respiratorios se hagan según las instrucciones del productor de las mismas. Éstas medidas deben ser documentadas debidamente.

---

## SECCIÓN 9. Propiedades físicas y químicas

### 9.1 Información sobre propiedades físicas y químicas básicas

Forma	sólido
Color	incolore
Olor	inodoro
Umbral olfativo	no aplicable
pH	6,5 - 7,0 a 100 g/l 20 °C
Punto de fusión	158 - 160 °C
Punto de ebullición	No hay información disponible.
Punto de inflamación	No hay información disponible.
Tasa de evaporación	No hay información disponible.
Inflamabilidad (sólido, gas)	No hay información disponible.
Límite de explosión, inferior	No hay información disponible.
Límite de explosión, superior	No hay información disponible.
Presión de vapor	No hay información disponible.
Densidad relativa del vapor	No hay información disponible.
Densidad relativa	No hay información disponible.
Solubilidad en agua	a 20 °C soluble
Coefficiente de reparto n-octanol/agua	No hay información disponible.
Temperatura de auto-inflamación	No hay información disponible.

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD  
de acuerdo el Reglamento (CE) No. 1907/2006

Artículo número 101492  
Denominación L(+)-Arabinosa para microbiología

---

Temperatura de descomposición No hay información disponible.

Viscosidad, dinámica No hay información disponible.

Propiedades explosivas no aplicable

Propiedades comburentes ningún

## 9.2 Otros datos

ningún

---

## SECCIÓN 10. Estabilidad y reactividad

### 10.1 Reactividad

Válido en general para sustancias y mezclas orgánicas combustibles: en caso de esparcimiento fino, en estado arremolinado, debe contarse en general con peligro de explosión.

### 10.2 Estabilidad química

El producto es químicamente estable bajo condiciones normales (a temperatura ambiental).

### 10.3 Posibilidad de reacciones peligrosas

Posibles reacciones violentas con:

Agentes oxidantes fuertes

### 10.4 Condiciones que deben evitarse

Exposición a la luz.

### 10.5 Materiales incompatibles

información no disponible

### 10.6 Productos de descomposición peligrosos

información no disponible

---

## SECCIÓN 11. Información toxicológica

### 11.1 Información sobre los efectos toxicológicos

#### *Toxicidad oral aguda*

Esta información no está disponible.

#### *Toxicidad aguda por inhalación*

Esta información no está disponible.

#### *Toxicidad cutánea aguda*

Esta información no está disponible.

#### *Irritación de la piel*

Esta información no está disponible.

#### *Irritación ocular*

Esta información no está disponible.

#### *Sensibilización*

Esta información no está disponible.

#### *Mutagenicidad en células germinales*

Esta información no está disponible.

#### *Carcinogenicidad*

Esta información no está disponible.

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD  
de acuerdo el Reglamento (CE) No. 1907/2006

Artículo número 101492  
Denominación L(+)-Arabinosa para microbiología

---

*Toxicidad para la reproducción*

Esta información no está disponible.

*Teratogenicidad*

Esta información no está disponible.

*Toxicidad específica en determinados órganos - exposición única*

Esta información no está disponible.

*Toxicidad específica en determinados órganos - exposiciones repetidas*

Esta información no está disponible.

*Peligro de aspiración*

Esta información no está disponible.

### 11.2 Otros datos

Sustancia presente en la naturaleza

No pueden excluirse características peligrosas, pero son poco probables si su manipulación es adecuada.

Manipular con las precauciones de higiene industrial adecuadas, y respetar las prácticas de seguridad.

---

## SECCIÓN 12. Información ecológica

### 12.1 Toxicidad

No hay información disponible.

### 12.2 Persistencia y degradabilidad

No hay información disponible.

### 12.3 Potencial de bioacumulación

No hay información disponible.

### 12.4 Movilidad en el suelo

No hay información disponible.

### 12.5 Resultados de la valoración PBT y mPmB

Una valoración PBT y MPMB no se hizo, debido al hecho de que una evaluación de peligro químico no es necesaria o no existe.

### 12.6 Otros efectos adversos

La descarga en el ambiente debe ser evitada.

---

## SECCIÓN 13. Consideraciones relativas a la eliminación

*Métodos para el tratamiento de residuos*

Los residuos deben eliminarse de acuerdo con la directiva sobre residuos 2008/98/CE así como con otras normativas locales o nacionales. Deje los productos químicos en sus recipientes originales. No los mezcle con otros residuos. Maneje los recipientes sucios como el propio producto.

Consulte en [www.retrologistik.com](http://www.retrologistik.com) sobre procesos relativos a la devolución de productos químicos o recipientes, o contáctenos si tiene más preguntas.

---

## SECCIÓN 14. Información relativa al transporte

### Transporte por carretera (ADR/RID)

14.1 - 14.6 Producto no peligroso según los criterios de la reglamentación del transporte.

### Transporte fluvial (ADN)

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD  
de acuerdo el Reglamento (CE) No. 1907/2006

Artículo número 101492  
Denominación L(+)-Arabinosa para microbiología

---

No relevante

**Transporte aéreo (IATA)**

**14.1 - 14.6** Producto no peligroso según los criterios de la reglamentación del transporte.

**Transporte marítimo (IMDG)**

**14.1 - 14.6** Producto no peligroso según los criterios de la reglamentación del transporte.

**14.7 Transporte a granel con arreglo al anexo II del Convenio Marpol 73/78 y del Código IBC**

No relevante

---

**SECCIÓN 15. Información reglamentaria**

**15.1 Reglamentación y legislación en materia de seguridad, salud y medio ambiente específicas para la sustancia o la mezcla**

*Disposiciones legales de la CE*

Legislación de Peligro de 96/82/EC  
Accidente Importante La directiva 96/82/EC no se aplica  
Alemania

Reglamento 1005/2009/CE relativo a sustancias que agotan la capa de ozono no regulado

Reglamento (CE) nº 850/2004 del Parlamento Europeo y del Consejo de 29 de abril de 2004 sobre contaminantes orgánicos persistentes que modifica la Directiva 79/117/CEE no regulado

Reglamento (CE) No 689/2008 relativo a la exportación e importación de productos químicos peligrosos no regulado

Sustancias extremadamente preocupantes (SVHC) Este producto no contiene sustancias extremadamente preocupantes por encima del límite legal correspondiente (> 0,1 % (p/p) normativa CE n.º 19 07/2006 (REACH), artículo 57).

*Legislación nacional*

Clase de almacenamiento 10 - 13

**15.2 Evaluación de la seguridad química**

Para este producto no se realizó una valoración de la seguridad química.

---

**SECCIÓN 16. Otra información**

**Consejos relativos a la formación**

Debe disponer a los trabajadores la información y la formación práctica suficientes.

**Una explicación de las abreviaturas y los acrónimos utilizados en la ficha de datos de seguridad**

Puede consultar las abreviaturas y acrónimos utilizados en [www.wikipedia.org](http://www.wikipedia.org).

---

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD  
de acuerdo el Reglamento (CE) No. 1907/2006

Artículo número	101492
Denominación	L(+)-Arabinosa para microbiología

---

**Representante regional**

Merck Chemical and Life Science, S.A. |

C/ María de Molina, 40 | 28006 Madrid - España |

Tel: +34 935655500 | Fax: +34 935440000 | email: SCM.Chemicals.ES@merckgroup.com |

www.merck.es

---

*Los datos suministrados en ésta ficha de seguridad se basan a nuestro actual conocimiento. Describen tan sólo las medidas de seguridad en el manejo de éste producto y no representan una garantía sobre las propiedades descritas del mismo.*



The Power to Question

# FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

Santa Cruz Biotechnology, Inc.

Fecha de revisión 03-oct-2016

Versión 1.1

## Sección 1: IDENTIFICACIÓN DE LA SUSTANCIA O LA MEZCLA Y DE LA SOCIEDAD O LA EMPRESA

---

### 1.1 Identificador del producto

Nombre del producto	Xylitol
Código del producto	SC-280193
Nº CE	201-788-0
Nº CAS	87-99-0
Sustancia/mezcla pura	Sustancia

### 1.2. Usos pertinentes identificados de la sustancia o de la mezcla y usos desaconsejados

Solo para investigación. No destinado para diagnóstico o uso terapéutico.

### 1.3. Datos del proveedor de la ficha de datos de seguridad

Santa Cruz Biotechnology, Inc. 10410 Finnell Street Dallas, TX 75220 831.457.3800 800.457.3801 scbt@scbt.com	Santa Cruz Biotechnology, Inc. Bergheimer Str. 89-2 69115 Heidelberg, Germany +49.6221.4503 0 +1.800.457.3801 europe@scbt.com
-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

### 1.4. Teléfono de emergencia

Chemtrec  
1.800.424.9300 (Within USA)  
+1.703.527.3887 (Outside USA)

## Sección 2: IDENTIFICACIÓN DE LOS PELIGROS

---

### 2.1. Clasificación de la sustancia o de la mezcla

Reglamento (CE) N° 1272/2008

Esta mezcla está clasificada como no peligrosa conforme al Reglamento (CE) 1272/2008 [SGA]

Clasificación conforme a 67/548/CEE

Símbolos de peligro	Xi - Irritante
Código(s) R	Xi;R36/37/38

### 2.2. Elementos de la etiqueta

Esta mezcla está clasificada como no peligrosa conforme al Reglamento (CE) 1272/2008 [SGA]

Palabras de advertencia	No está clasificado
Símbolos/Pictogramas	No está clasificado

Indicaciones de peligro	No está clasificado
-------------------------	---------------------

### 2.3. Otros peligros

Riesgos generales	No es aplicable
-------------------	-----------------



### Sección 3: COMPOSICIÓN/INFORMACIÓN SOBRE LOS COMPONENTES

Peso molecular 152.15  
 Fórmula  $C_5H_{12}O_5$

#### 3.1 Sustancias

Nombre químico	Nº CE	Nº CAS	% en Peso	Clasificación conforme a 67/548/CEE	Clasificación conforme al Reglamento (CE) N° 1272/2008 [CLP]
Xylitol	Present	87-99-0	100	Xi;R36/37/38	-

Texto completo de las frases R: ver la sección 16

Texto completo de las frases H y EUH: ver la sección 16

### Sección 4: PRIMEROS AUXILIOS

#### 4.1. Descripción de los primeros auxilios

Consejo general	Si persisten los síntomas, llamar a un médico.
Inhalación	Transportar a la víctima al exterior. Si persisten los síntomas, llamar a un médico. Puede ser necesario el uso de respiración artificial u oxígeno. Llamar a un médico. No se necesita atención médica inmediata. Trasladarse al exterior en caso de inhalar los vapores accidentalmente.
Contacto con la piel	Lavar inmediatamente con abundante agua durante al menos 15 minutos. Si persiste la irritación cutánea, llamar a un médico. Lavar las prendas contaminadas antes de volver a usarlas. Lavar inmediatamente con abundante agua. No se necesita atención médica inmediata. Lavar inmediatamente con jabón y abundante agua y quitarse la ropa y el calzado contaminados.
Contacto con los ojos	Enjuagar inmediatamente con abundante agua, también bajo los párpados, durante al menos 15 minutos. Si persisten los síntomas, llamar a un médico. Lavar inmediatamente con abundante agua. Después del lavado inicial, quitar las lentillas de contacto si las hubiera y volver a lavar durante al menos 15 minutos. Mantener el ojo bien abierto durante el enjuague.
Ingestión	No se necesita atención médica inmediata. Enjuagarse la boca. Beber abundante agua. NO provocar el vómito. Limpiar la boca con agua y beber a continuación abundante agua. Nunca dar nada por boca a una persona inconsciente. Llamar a un médico.
Equipo de protección para el personal de primeros auxilios	Utilizar el equipo de protección individual obligatorio.

#### 4.2. Principales síntomas y efectos, agudos y retardados

Síntomas No hay información disponible.

#### 4.3. Indicación de toda atención médica y de los tratamientos especiales que deban dispensarse inmediatamente

Nota para el personal médico Tratar los síntomas.

### Sección 5: MEDIDAS DE LUCHA CONTRA INCENDIOS

#### 5.1 Medios de extinción

Medios de extinción apropiados Utilizar medidas de extinción adecuadas a las circunstancias locales y al entorno.

#### 5.2. Peligros específicos derivados de la sustancia o la mezcla

Peligros específicos que presenta el producto químico No hay información disponible

Productos de combustión peligrosos Óxidos de carbono.

#### 5.3. Recomendaciones para el personal de lucha contra incendios

Equipo de protección especial para el personal de lucha contra incendios Como en cualquier incendio, llevar un aparato de respiración autónomo de presión a demanda MSHA/NIOSH (aprobado o equivalente) y todo el equipo de protección necesario.

## Sección 6: MEDIDAS EN CASO DE VERTIDO ACCIDENTAL

### 6.1. Precauciones personales, equipo de protección y procedimientos de emergencia

Precauciones individuales Utilizar el equipo de protección individual obligatorio. Evitar el contacto con los ojos y la piel. Evacuar al personal a zonas seguras. Mantener alejadas a las personas y en dirección contraria al viento en una fuga o vertido.

Para el personal de emergencia Utilizar las medidas de protección personal recomendadas en la sección 8.

### 6.2. Precauciones relativas al medio ambiente

Precauciones relativas al medio ambiente Impedir su introducción en cursos de agua, alcantarillas, sótanos o zonas confinadas. No arrojar a las aguas superficiales ni al sistema de alcantarillado. Prevenir más fugas o vertidos si se puede hacer de forma segura. Prevenir la penetración del producto en desagües. Para obtener más información ecológica, ver el apartado 12.

### 6.3. Métodos y material de contención y de limpieza

Métodos de contención Prevenir más fugas o vertidos si se puede hacer de forma segura.

Métodos de limpieza Utilizar el equipo de protección individual obligatorio. Cubrir los derrames de polvo con una lámina de plástico o una lona para minimizar su expansión y mantener el polvo seco. Recoger por medios mecánicos y depositar en recipientes apropiados para su eliminación. Evitar la generación de polvo. Limpiar concienzudamente la superficie contaminada. Absorber con material absorbente inerte. Contener. Recoger y transferir a contenedores etiquetados de forma apropiada. Barrer y recoger en contenedores apropiados para su eliminación. Después de limpiar, eliminar los restos con agua. Evítese la acumulación de cargas electrostáticas.

### 6.4. Referencia a otras secciones

Ver la Sección 12: INFORMACIÓN ECOLÓGICA.

## Sección 7: MANIPULACIÓN Y ALMACENAMIENTO

### 7.1 Precauciones para una manipulación segura

Recomendaciones para una manipulación sin peligro Asegurar una ventilación adecuada, especialmente en áreas confinadas. Utilizar el equipo de protección individual obligatorio. Utilizar con ventilación por extracción local. No respirar el polvo/el humo/el gas/la niebla/los vapores/el aerosol.

Consideraciones generales sobre higiene No comer, ni beber, ni fumar durante su utilización. Lavar las prendas contaminadas antes de volver a usarlas. Se recomienda realizar una limpieza periódica de los equipos así como la zona y la indumentaria de trabajo.

### 7.2 Condiciones de almacenamiento seguro, incluidas posibles incompatibilidades

Condiciones de almacenamiento Mantener el recipiente herméticamente cerrado. Manténgase fuera del alcance de los niños. Mantener los contenedores perfectamente cerrados en un lugar fresco y bien ventilado. Mantener en contenedores etiquetados adecuadamente. Proteger de la humedad.

### 7.3. Usos específicos finales

Medidas de gestión de riesgos (MGR) La información requerida se encuentra en esta ficha de datos de seguridad.

## Sección 8: CONTROLES DE EXPOSICIÓN/PROTECCIÓN INDIVIDUAL

### 8.1. Parámetros de control

Límites de exposición Este producto, tal y como se ha suministrado, no contiene ningún material peligroso con límites de exposición laboral establecidos por las organismos reguladores específicos de la región.

Nivel sin efecto derivado (DNEL) No hay información disponible

Concentración prevista sin efecto (PNEC) No hay información disponible.

## 8.2. Controles de la exposición

Controles técnicos	Duchas Estaciones de lavado de ojos Sistemas de ventilación
Protección ocular y de la cara:	Gafas de seguridad bien ajustadas. Escudo de protección facial.
Protección de la piel y el cuerpo	Ropa de protección adecuada. Delantal. Guantes de plástico o de caucho.
Protección respiratoria	Si se superan los límites de exposición o se experimenta irritación, debe llevarse una protección respiratoria aprobada por NIOSH/MSHA. Pueden ser necesarias máscaras de presión positiva si existen concentraciones elevadas de contaminantes en aire. Debe suministrarse una protección respiratoria de acuerdo con las normativas locales en vigor.
Controles de exposición medioambiental	No permitir que se introduzca en ningún tipo de alcantarilla, en el terreno ni en ningún cuerpo de agua.

## Sección 9: PROPIEDADES FÍSICAS Y QUÍMICAS

Estado físico	sólido
Aspecto	crystalino polvo
Olor	No hay información disponible

### Propiedad

pH	No hay información disponible
Punto de fusión/punto de congelación	94 °C
Punto de ebullición	No hay información disponible
Punto de inflamación	No hay información disponible
Densidad	No hay información disponible
Tasa de evaporación	No hay información disponible
Límites de inflamabilidad superiores	No hay información disponible
Límite inferior de inflamabilidad	No hay información disponible
Presión de vapor	No hay información disponible
Densidad de vapor	No hay información disponible
Densidad relativa	No hay información disponible
Solubilidad en el agua	No hay información disponible
Solubilidad en otros disolventes	No hay información disponible
Coefficiente de partición	No hay información disponible
Temperatura de autoignición	No hay información disponible
Temperatura de descomposición	No hay información disponible
Viscosidad cinemática	No hay información disponible
Propiedades explosivas	No hay información disponible
Propiedades comburentes	No hay información disponible

### Valores

## Sección 10: ESTABILIDAD Y REACTIVIDAD

### 10.1. Reactividad

Reactividad No es aplicable

### 10.2. Estabilidad química

Estabilidad	Estable en las condiciones de almacenamiento recomendadas.
Sensibilidad a impactos mecánicos	No hay información disponible.
Sensibilidad a descargas estáticas	No hay información disponible.

### 10.3. Posibilidad de reacciones peligrosas

Polimerización peligrosa	No hay información disponible.
Posibilidad de reacciones peligrosas	Ninguno durante un proceso normal.

### 10.4. Condiciones que deben evitarse

Condiciones que deben evitarse	Exposición al aire o a la humedad durante largos periodos.
--------------------------------	------------------------------------------------------------

**10.5. Materiales incompatibles**

Materiales incompatibles Agentes oxidantes fuertes.

**10.6. Productos de descomposición peligrosos**

Productos de descomposición peligrosos Óxidos de carbono.

**Sección 11: INFORMACIÓN TOXICOLÓGICA****11.1. Información sobre los efectos toxicológicos****Toxicidad aguda**

Información del producto El producto no presenta riesgo de toxicidad aguda según la información conocida o suministrada.

Toxicidad aguda desconocida 0% de la mezcla consiste en uno o varios componentes de toxicidad desconocida.

**Los siguientes valores se han calculado basándose en el capítulo 3.1 del documento de GHS**

ATEmix (oral) 16,500.00 mg/kg

Nombre químico	DL50 oral	DL50 cutánea	CL50 por inhalación
Xylitol	= 16500 mg/kg ( Rat )		

**Sección 12: INFORMACIÓN ECOLÓGICA****12.1. Toxicidad**

Ecotoxicidad Puede ser nocivo para los organismos acuáticos, con efectos nocivos duraderos.

Toxicidad acuática desconocida Un 100% de la mezcla está formado por componente(s) de riesgos desconocidos para los organismos acuáticos.

**12.2. Persistencia y degradabilidad**

Persistencia y degradabilidad No hay información disponible.

**12.3. Potencial de bioacumulación**

Bioacumulación No hay información disponible.

**12.4. Movilidad en el suelo**

Movilidad No hay información disponible.

**12.5. Resultados de la valoración PBT y mPmB**

Evaluación PBT y mPmB No hay información disponible.

**12.6. Otros efectos adversos**

Otros efectos adversos No hay información disponible

**Sección 13: CONSIDERACIONES RELATIVAS A LA ELIMINACIÓN****13.1. Métodos para el tratamiento de residuos**

Restos de residuos/productos sin usar La eliminación debe realizarse conforme a las leyes y normativas regionales, nacionales y locales aplicables.

Embalaje contaminado No reutilizar el recipiente.

Otra Información El usuario debe asignar códigos de residuos basándose en la aplicación para la que se utilizó el producto.

## Sección 14. INFORMACIÓN RELATIVA AL TRANSPORTE

	<u>RID / ADR</u> No regulado	<u>IMDG</u> No regulado	<u>OACI (aéreo) / IATA</u> No regulado
14.1 N° ID/ONU	-	-	-
14.2 Designación oficial de transporte	-	-	-
14.3 Clase de peligro	-	-	-
Clase de peligro subsidiario / Etiquetas	-	-	-
14.4 Grupo de embalaje	-	-	-
14.5 Peligro para el medio ambiente	-	-	-
14.6 Disposiciones particulares	-	-	-

## Sección 15: INFORMACIÓN REGLAMENTARIA

### 15.1. Reglamentación y legislación en materia de seguridad, salud y medio ambiente específicas para la sustancia o la mezcla

#### Reglamentos nacionales

##### Unión Europea

Tome nota de la Directiva 98/24/CE relativa a la protección de la salud y la seguridad de los trabajadores contra los riesgos relacionados con los agentes químicos durante el trabajo

#### Inventarios internacionales

Todos los componentes del producto se encuentran en los siguientes inventarios

TSCA (Estados Unidos): Canadá (DSL/NDSL) Europa (EINECS/ELINCS/NLP) Australia (AICS) Corea del Sur (KECL): China (IECSC) ENCS (Japón): Filipinas (PICCS)

Nombre químico	TSCA	DSL	NDSL	EINECS	ELINCS	ENCS	IECSC	KECL	PICCS	AICS
Xylitol	X	-	X	X	-	X	X	X	X	X

#### X - Incluido

*TSCA - Ley de control de sustancias tóxicas (Toxic Substances Control Act) estadounidense, apartado 8(b), Inventario*

*DSL/NDSL - Lista de sustancias domésticas/no domésticas de Canadá*

*EINECS/ELINCS - Inventario Europeo de Sustancias Químicas Existentes/ Lista europea de sustancias químicas notificadas*

*ENCS - Sustancias químicas existentes y nuevas de Japón*

*IECSC - Inventario de sustancias químicas existentes de China*

*KECL - Sustancias químicas existentes y evaluadas de Corea*

*PICCS - Inventario de productos químicos y sustancias químicas de Filipinas*

### 15.2. Evaluación de la seguridad química

Informe de seguridad química No hay información disponible

## Sección 16: OTRA INFORMACIÓN

Texto completo de frases R a las que se hace referencia en las secciones 2 y 3 No hay información disponible  
R36/37/38 - Irrita los ojos, la piel y las vías respiratorias  
Nota de revisión No hay información disponible.

**Esta ficha de datos de seguridad cumple los requisitos del Reglamento (CE) nº 1907/2006**

**Descargo de responsabilidad**

La información suministrada en esta ficha de datos de seguridad es correcta según los conocimientos, datos y opiniones de que disponemos a día de esta publicación. La información suministrada está diseñada solo como guía de manipulación, uso, procesado, almacenamiento, transporte, eliminación y liberación seguros y no debe considerarse como una garantía o especificación de calidad. La información solo hace referencia al material específico designado y puede no ser válida para dicho material cuando se usa en combinación con cualquier otro material o proceso, a menos que el texto lo especifique.

**Fin de la ficha de datos de seguridad**



The Power to Question

# FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

Santa Cruz Biotechnology, Inc.

Fecha de revisión 19-feb-2015

Versión 19.4

## Sección 1: IDENTIFICACIÓN DE LA SUSTANCIA O LA MEZCLA Y DE LA SOCIEDAD O LA EMPRESA

---

### 1.1 Identificador del producto

Nombre del producto	D-Sorbitol
Código del producto	SC-203278
Nº CE	200-061-5
Nº CAS	50-70-4
Sustancia/mezcla pura	Sustancia

### 1.2 Usos pertinentes identificados de la sustancia o de la mezcla y usos desaconsejados

Solo para investigación. No destinado para diagnóstico o uso terapéutico.

### 1.3. Datos del proveedor de la ficha de datos de seguridad

Santa Cruz Biotechnology, Inc. 10410 Finnell Street Dallas, TX 75220 831.457.3800 800.457.3801 scbt@scbt.com	Santa Cruz Biotechnology, Inc. Bergheimer Str. 89-2 69115 Heidelberg, Germany +49.6221.4503 0 +1.800.457.3801 europe@scbt.com
-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

### 1.4. Teléfono de emergencia

Chemtrec  
1.800.424.9300 (Within USA)  
+1.703.527.3887 (Outside USA)

## Sección 2: IDENTIFICACIÓN DE LOS PELIGROS

---

### 2.1. Clasificación de la sustancia o de la mezcla

Reglamento (CE) N° 1272/2008

Esta mezcla está clasificada como no peligrosa conforme al Reglamento (CE) 1272/2008 [SGA]

Clasificación conforme a 67/548/CEE

Símbolos de peligro	T+ - Muy tóxico
Código(s) R	Repr. cat. 3;R62 - Repr. cat. 3;R63 - T+;R28 - Xi;R41 - Xi;R38

### 2.2. Elementos de la etiqueta

Esta mezcla está clasificada como no peligrosa conforme al Reglamento (CE) 1272/2008 [SGA]

Palabras de advertencia	No está clasificado
-------------------------	---------------------

Símbolos/Pictogramas	No está clasificado
----------------------	---------------------

Indicaciones de peligro	No está clasificado
-------------------------	---------------------

### 2.3. Otros peligros

Riesgos generales	No es aplicable
-------------------	-----------------

### Sección 3: COMPOSICIÓN/INFORMACIÓN SOBRE LOS COMPONENTES

Peso molecular 182.17  
 Fórmula  $C_6H_{14}O_6$

#### 3.1 Sustancias

Nombre químico	Nº CE	Nº CAS	% en Peso	Clasificación conforme a 67/548/CEE	Clasificación conforme al Reglamento (CE) N° 1272/2008 [CLP]
D-Sorbitol	Present	50-70-4	100	Xn;R48 Xi;R38-41 T+;R28 Repr.Cat.3;R62-63	-

Texto completo de las frases R: ver la sección 16

Texto completo de las frases H y EUH: ver la sección 16

### Sección 4: PRIMEROS AUXILIOS

#### 4.1. Descripción de los primeros auxilios

Consejo general	Se necesita atención médica inmediata. Si persisten los síntomas, llamar a un médico.
Inhalación	Se necesita atención médica inmediata. Transportar a la víctima al exterior. Si no respira, realizar técnicas de respiración artificial. Evitar el contacto directo con la piel. Utilizar medios de barrera para practicar la reanimación boca a boca. Trasladarse al exterior en caso de inhalar los vapores accidentalmente. Si persisten los síntomas, llamar a un médico.
Contacto con la piel	Se necesita atención médica inmediata. Lavar inmediatamente con jabón y abundante agua y quitarse la ropa y el calzado contaminados. Lavar las prendas contaminadas antes de volver a usarlas. Lavar inmediatamente con abundante agua. Si persiste la irritación cutánea, llamar a un médico.
Contacto con los ojos	Lavar inmediatamente con abundante agua. Después del lavado inicial, quitar las lentillas de contacto si las hubiera y volver a lavar durante al menos 15 minutos. Mantener el ojo bien abierto durante el enjuague. Llamar inmediatamente a un médico. Enjuagar bien con abundante agua durante al menos 15 minutos, levantando los párpados superior e inferior. Consultar con un médico. Si persisten los síntomas, llamar a un médico.
Ingestión	NO provocar el vómito. Llamar inmediatamente a un médico o a un centro de información toxicológica. Nunca dar nada por boca a una persona inconsciente. Beber abundante agua. Limpiar la boca con agua y beber a continuación abundante agua. Llamar a un médico.
Equipo de protección para el personal de primeros auxilios	Utilizar el equipo de protección individual obligatorio. Evitar el contacto con la piel, los ojos o la ropa. Asegurarse de que el personal médico sea consciente de los materiales implicados, tomando precauciones para protegerse a sí mismos y para evitar extender la contaminación.

#### 4.2. Principales síntomas y efectos, agudos y retardados

Síntomas No hay información disponible.

#### 4.3. Indicación de toda atención médica y de los tratamientos especiales que deban dispensarse inmediatamente

Nota para el personal médico Tratar los síntomas.

### Sección 5: MEDIDAS DE LUCHA CONTRA INCENDIOS

#### 5.1 Medios de extinción

Medios de extinción apropiados Utilizar medidas de extinción adecuadas a las circunstancias locales y al entorno.

#### 5.2. Peligros específicos derivados de la sustancia o la mezcla

Peligros específicos que presenta el producto químico No hay información disponible

Productos de combustión peligrosos Óxidos de carbono.



### 5.3. Recomendaciones para el personal de lucha contra incendios

Equipo de protección especial para el personal de lucha contra incendios Llevar un equipo de protección respiratoria individual y un traje de protección. Si fuera necesario llevar un aparato de respiración autónomo para apagar el incendio.

## Sección 6: MEDIDAS EN CASO DE VERTIDO ACCIDENTAL

### 6.1. Precauciones personales, equipo de protección y procedimientos de emergencia

Precauciones individuales Utilizar el equipo de protección individual obligatorio. Mantener alejadas a las personas y en dirección contraria al viento en una fuga o vertido. Evacuar al personal a zonas seguras.

Para el personal de emergencia Utilizar las medidas de protección personal recomendadas en la sección 8.

### 6.2. Precauciones relativas al medio ambiente

Precauciones relativas al medio ambiente Prevenir más fugas o vertidos si se puede hacer de forma segura. Prevenir la penetración del producto en desagües. No arrojar a las aguas superficiales ni al sistema de alcantarillado. Para obtener más información ecológica, ver el apartado 12.

### 6.3. Métodos y material de contención y de limpieza

Métodos de contención Prevenir más fugas o vertidos si se puede hacer de forma segura. Cubrir los derrames de polvo con una lámina de plástico o una lona para minimizar su expansión. Formar un dique a una distancia considerable del vertido de líquido para su posterior eliminación.

Métodos de limpieza Utilizar el equipo de protección individual obligatorio. Cubrir los derrames de polvo con una lámina de plástico o una lona para minimizar su expansión y mantener el polvo seco. Recoger por medios mecánicos y depositar en recipientes apropiados para su eliminación. Evitar la generación de polvo. Limpiar concienzudamente la superficie contaminada. Absorber con material absorbente inerte. Contener. Recoger y transferir a contenedores etiquetados de forma apropiada. Barrer y recoger en contenedores apropiados para su eliminación. Después de limpiar, eliminar los restos con agua. Evítese la acumulación de cargas electroestáticas.

### 6.4. Referencia a otras secciones

Ver la Sección 12: INFORMACIÓN ECOLÓGICA.

## Sección 7: MANIPULACIÓN Y ALMACENAMIENTO

### 7.1 Precauciones para una manipulación segura

Recomendaciones para una manipulación sin peligro Evitar el contacto con la piel, los ojos o la ropa. Utilizar el equipo de protección individual obligatorio. Lavar las prendas contaminadas antes de volver a usarlas. No respirar el polvo/el humo/el gas/la niebla/los vapores/el aerosol. No comer, beber ni fumar durante su utilización. Utilizar con ventilación por extracción local.

Consideraciones generales sobre higiene No comer, ni beber, ni fumar durante su utilización. Se recomienda realizar una limpieza periódica de los equipos así como la zona y la indumentaria de trabajo. Evitar el contacto con la piel, los ojos o la ropa. Lavarse las manos concienzudamente tras la manipulación. Manténgase lejos de alimentos, bebidas y piensos.

### 7.2 Condiciones de almacenamiento seguro, incluidas posibles incompatibilidades

Condiciones de almacenamiento Mantener el contenedor perfectamente cerrado y en un lugar seco y bien ventilado. Manténgase fuera del alcance de los niños. Mantener los contenedores perfectamente cerrados en un lugar fresco y bien ventilado. Mantener en contenedores etiquetados adecuadamente. Proteger de la humedad.

### 7.3. Usos específicos finales

Medidas de gestión de riesgos (MGR) La información requerida se encuentra en esta ficha de datos de seguridad.

## Sección 8: CONTROLES DE EXPOSICIÓN/PROTECCIÓN INDIVIDUAL

### 8.1. Parámetros de control

Límites de exposición Este producto, tal y como se ha suministrado, no contiene ningún material peligroso con límites de exposición laboral establecidos por las organismos reguladores específicos de la región.

Nivel sin efecto derivado (DNEL) No hay información disponible  
 Concentración prevista sin efecto (PNEC) No hay información disponible.

## 8.2. Controles de la exposición

Controles técnicos Duchas  
 Estaciones de lavado de ojos  
 Sistemas de ventilación

Protección ocular y de la cara: Gafas de seguridad bien ajustadas. Escudo de protección facial.  
 Protección de la piel y el cuerpo Guantes de plástico o de caucho. Ropa de protección adecuada. Ropa de protección adecuada. Delantal.

Protección respiratoria Si se superan los límites de exposición o se experimenta irritación, debe llevarse una protección respiratoria aprobada por NIOSH/MSHA. Pueden ser necesarias máscaras de presión positiva si existen concentraciones elevadas de contaminantes en aire. Debe suministrarse una protección respiratoria de acuerdo con las normativas locales en vigor.

Controles de exposición medioambiental No hay información disponible.

## Sección 9: PROPIEDADES FÍSICAS Y QUÍMICAS

Estado físico sólido  
 Aspecto polvo  
 Olor inodoro

<b>Propiedad</b>	<b>Valores</b>
pH	No hay información disponible
Punto de fusión/punto de congelación	98 °C
Punto de ebullición	494.9 °C
Punto de inflamación	292.50 °C
Densidad	1.49 g/cm <sup>3</sup>
Tasa de evaporación	No hay información disponible
Límites de inflamabilidad superiores	No hay información disponible
Límite inferior de inflamabilidad	No hay información disponible
Presión de vapor	0.1

Densidad de vapor No hay información disponible

Densidad relativa No hay información disponible  
 Solubilidad en el agua No hay información disponible  
 Solubilidad en otros disolventes No hay información disponible  
 Coeficiente de partición No hay información disponible  
 Temperatura de autoignición No hay información disponible  
 Temperatura de descomposición No hay información disponible  
 Viscosidad cinemática No hay información disponible  
 Propiedades explosivas No hay información disponible  
 Propiedades comburentes No hay información disponible

## Sección 10: ESTABILIDAD Y REACTIVIDAD

### 10.1. Reactividad

Reactividad No es aplicable

### 10.2. Estabilidad química

Estabilidad Estable en las condiciones de almacenamiento recomendadas.  
 Sensibilidad a impactos mecánicos No hay información disponible.  
 Sensibilidad a descargas estáticas No hay información disponible.

### 10.3. Posibilidad de reacciones peligrosas

Polimerización peligrosa No hay información disponible.

Posibilidad de reacciones peligrosas Ninguno durante un proceso normal.

#### 10.4. Condiciones que deben evitarse

Condiciones que deben evitarse Exposición al aire o a la humedad durante largos periodos.

#### 10.5. Materiales incompatibles

Materiales incompatibles Agentes oxidantes fuertes.

#### 10.6. Productos de descomposición peligrosos

Productos de descomposición peligrosos Óxidos de carbono.

### Sección 11: INFORMACIÓN TOXICOLÓGICA

#### 11.1. Información sobre los efectos toxicológicos

##### Toxicidad aguda

Información del producto El producto no presenta riesgo de toxicidad aguda según la información conocida o suministrada.

Toxicidad aguda desconocida 0% de la mezcla consiste en uno o varios componentes de toxicidad desconocida.

### Sección 12: INFORMACIÓN ECOLÓGICA

#### 12.1. Toxicidad

Ecotoxicidad Puede ser nocivo para los organismos acuáticos, con efectos nocivos duraderos.

Toxicidad acuática desconocida Un 100% de la mezcla está formado por componente(s) de riesgos desconocidos para los organismos acuáticos.

#### 12.2. Persistencia y degradabilidad

Persistencia y degradabilidad No hay información disponible.

#### 12.3. Potencial de bioacumulación

Bioacumulación No hay información disponible.

#### 12.4. Movilidad en el suelo

Movilidad No hay información disponible.

#### 12.5. Resultados de la valoración PBT y mPmB

Evaluación PBT y mPmB No hay información disponible.

#### 12.6. Otros efectos adversos

Otros efectos adversos No hay información disponible

### Sección 13: CONSIDERACIONES RELATIVAS A LA ELIMINACIÓN

#### 13.1. Métodos para el tratamiento de residuos

Restos de residuos/productos sin usar La eliminación debe realizarse conforme a las leyes y normativas regionales, nacionales y locales aplicables.

Embalaje contaminado No reutilizar el recipiente.

Otra Información El usuario debe asignar códigos de residuos basándose en la aplicación para la que se utilizó el producto.

## Sección 14. INFORMACIÓN RELATIVA AL TRANSPORTE

	<u>RID / ADR</u>	<u>IMDG</u>	<u>OACI (aéreo) / IATA</u>
	No regulado	No regulado	No regulado
14.1 N° ID/ONU	-	-	-
14.2 Designación oficial de transporte	-	-	-
14.3 Clase de peligro	-	-	-
Clase de peligro subsidiario / Etiquetas	-	-	-
14.4 Grupo de embalaje	-	-	-
14.5 Peligro para el medio ambiente	-	-	-
14.6 Disposiciones particulares	-	-	-

## Sección 15: INFORMACIÓN REGLAMENTARIA

### 15.1. Reglamentación y legislación en materia de seguridad, salud y medio ambiente específicas para la sustancia o la mezcla

#### Reglamentos nacionales

##### Unión Europea

Tome nota de la Directiva 98/24/CE relativa a la protección de la salud y la seguridad de los trabajadores contra los riesgos relacionados con los agentes químicos durante el trabajo

#### Inventarios internacionales

Todos los componentes del producto se encuentran en los siguientes inventarios

TSCA (Estados Unidos): Canadá (DSL/NDSL) Europa (EINECS/ELINCS/NLP) Australia (AICS) Corea del Sur (KECL): China (IECSC) ENCS (Japón): Filipinas (PICCS)

Nombre químico	TSCA	DSL	NDSL	EINECS	ELINCS	ENCS	IECSC	KECL	PICCS	AICS
D-Sorbitol	X	X	-	X	-	X	X	X	X	X

#### X - Incluido

*TSCA - Ley de control de sustancias tóxicas (Toxic Substances Control Act) estadounidense, apartado 8(b), Inventario*

*DSL/NDSL - Lista de sustancias domésticas/no domésticas de Canadá*

*EINECS/ELINCS - Inventario Europeo de Sustancias Químicas Existentes/ Lista europea de sustancias químicas notificadas*

*ENCS - Sustancias químicas existentes y nuevas de Japón*

*IECSC - Inventario de sustancias químicas existentes de China*

*KECL - Sustancias químicas existentes y evaluadas de Corea*

*PICCS - Inventario de productos químicos y sustancias químicas de Filipinas*

### 15.2. Evaluación de la seguridad química

Informe de seguridad química No hay información disponible

## Sección 16: OTRA INFORMACIÓN

Texto completo de frases R a las que se hace referencia en las secciones 2 y 3	R63 - Posible riesgo durante el embarazo de efectos adversos para el feto R62 - Posible riesgo de perjudicar la fertilidad R28 - Muy tóxico por ingestión R41 - Riesgo de lesiones oculares graves R38 - Irrita la piel R48 - Riesgo de efectos graves para la salud en caso de exposición prolongada
Nota de revisión	No hay información disponible.

**Esta ficha de datos de seguridad cumple los requisitos del Reglamento (CE) nº 1907/2006****Descargo de responsabilidad**

La información suministrada en esta ficha de datos de seguridad es correcta según los conocimientos, datos y opiniones de que disponemos a día de esta publicación. La información suministrada está diseñada solo como guía de manipulación, uso, procesado, almacenamiento, transporte, eliminación y liberación seguros y no debe considerarse como una garantía o especificación de calidad. La información solo hace referencia al material específico designado y puede no ser válida para dicho material cuando se usa en combinación con cualquier otro material o proceso, a menos que el texto lo especifique.

**Fin de la ficha de datos de seguridad**

# FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

(de acuerdo con el Reglamento (UE) 2015/830)

## 101220-L(-)-Arabitol

Versión: 3

Fecha de revisión: 15/04/2016



Página 1 de 7

Fecha de impresión: 15/04/2016

### SECCIÓN 1: IDENTIFICACIÓN DE LA SUSTANCIA Y DE LA SOCIEDAD O LA EMPRESA.

#### 1.1 Identificador del producto.

Nombre del producto:	L(-)-Arabitol
Código del producto:	101220
Nombre químico:	L(-)-Arabitol
N. CAS:	7643-75-6
N. CE:	231-582-6
N. registro:	N/D

#### 1.2 Usos pertinentes identificados de la sustancia y usos desaconsejados.

Exclusivamente para uso en fabricación, reenvasado, procesado o laboratorio

##### Usos desaconsejados:

Usos distintos a los aconsejados.

#### 1.3 Datos del proveedor de la ficha de datos de seguridad.

Empresa:	<b>DC FINE CHEMICALS Ltd.</b>
Dirección:	Hill Top, 88
Población:	NW11 6DY London (United Kingdom)
Teléfono:	+44 (20) 7586 6800
Fax:	+44 (20) 7504 1701
E-mail:	info@dcfinechemicals.com
Web:	www.dcfinechemicals.com

**1.4 Teléfono de emergencia:** Instituto Nacional de Toxicología - Madrid - Tel. 915 620 420  
(Sólo disponible en horario de oficina)

### SECCIÓN 2: IDENTIFICACIÓN DE LOS PELIGROS.

#### 2.1 Clasificación de la sustancia.

El producto no está clasificado como peligroso según el Reglamento (EU) No 1272/2008.

#### 2.2 Elementos de la etiqueta.

Contiene:  
L(-)-Arabitol

#### 2.3 Otros peligros.

En condiciones de uso normal y en su forma original, el producto no tiene ningún otro efecto negativo para la salud y el medio ambiente.

### SECCIÓN 3: COMPOSICIÓN/INFORMACIÓN SOBRE LOS COMPONENTES.

#### 3.1 Sustancias.

Nombre químico:	L(-)-Arabitol
N. CAS:	7643-75-6
N. CE:	231-582-6
N. registro:	N/D

#### 3.2 Mezclas.

No Aplicable.

### SECCIÓN 4: PRIMEROS AUXILIOS.

#### 4.1 Descripción de los primeros auxilios.

Debido a la composición y a la tipología de las sustancias presentes en el preparado, no se necesitan advertencias particulares.

# FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

(de acuerdo con el Reglamento (UE) 2015/830)

## 101220-L(-)-Arabitol

Versión: 3

Fecha de revisión: 15/04/2016



Página 2 de 7

Fecha de impresión: 15/04/2016

### **Inhalación.**

Situar al accidentado al aire libre, mantenerle caliente y en reposo, si la respiración es irregular o se detiene, practicar respiración artificial. No administrar nada por la boca. Si está inconsciente, ponerle en una posición adecuada y buscar ayuda médica.

### **Contacto con los ojos.**

En caso de llevar lentes de contacto, quitarlas. Lavar abundantemente los ojos con agua limpia y fresca durante, por lo menos, 10 minutos, tirando hacia arriba de los párpados y buscar asistencia médica.

### **Contacto con la piel.**

Quitar la ropa contaminada. Lavar la piel vigorosamente con agua y jabón o un limpiador de piel adecuado. **NUNCA** utilizar disolventes o diluyentes.

### **Ingestión.**

Si accidentalmente se ha ingerido, buscar inmediatamente atención médica. Mantenerle en reposo. **NUNCA** provocar el vómito.

### **4.2 Principales síntomas y efectos, agudos y retardados.**

No se conocen efectos agudos o retardados derivados de la exposición al producto.

### **4.3 Indicación de toda atención médica y de los tratamientos especiales que deban dispensarse inmediatamente.**

En los casos de duda, o cuando persistan los síntomas de malestar, solicitar atención médica. No administrar nunca nada por vía oral a personas que se encuentre inconscientes.

## **SECCIÓN 5: MEDIDAS DE LUCHA CONTRA INCENDIOS.**

### **5.1 Medios de extinción.**

#### **Medios de extinción recomendados.**

Polvo extintor o CO<sub>2</sub>. En caso de incendios más graves también espuma resistente al alcohol y agua pulverizada. No usar para la extinción chorro directo de agua.

### **5.2 Peligros específicos derivados de la sustancia.**

#### **Riesgos especiales.**

El fuego puede producir un espeso humo negro. Como consecuencia de la descomposición térmica, pueden formarse productos peligrosos: monóxido de carbono, dióxido de carbono. La exposición a los productos de combustión o descomposición puede ser perjudicial para la salud.

### **5.3 Recomendaciones para el personal de lucha contra incendios.**

Refrigerar con agua los tanques, cisternas o recipientes próximos a la fuente de calor o fuego. Tener en cuenta la dirección del viento. Evitar que los productos utilizados en la lucha contra incendio, pasen a desagües, alcantarillas o cursos de agua.

#### **Equipo de protección contra incendios.**

Según la magnitud del incendio, puede ser necesario el uso de trajes de protección contra el calor, equipo respiratorio autónomo, guantes, gafas protectoras o máscaras faciales y botas.

## **SECCIÓN 6: MEDIDAS EN CASO DE VERTIDO ACCIDENTAL.**

### **6.1 Precauciones personales, equipo de protección y procedimientos de emergencia.**

Para control de exposición y medidas de protección individual, ver epígrafe 8.

### **6.2 Precauciones relativas al medio ambiente.**

Producto no clasificado como peligroso para el medio ambiente, evitar en la medida de lo posible cualquier vertido.

### **6.3 Métodos y material de contención y de limpieza.**

La zona contaminada debe limpiarse inmediatamente con un descontaminante adecuado. Echar el descontaminante a los restos y dejarlo durante varios días hasta que no se produzca reacción, en un envase sin cerrar.

### **6.4 Referencia a otras secciones.**

Para control de exposición y medidas de protección individual, ver epígrafe 8.

Para la eliminación de los residuos, seguir las recomendaciones del epígrafe 13.

# FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

(de acuerdo con el Reglamento (UE) 2015/830)

## 101220-L(-)-Arabitol

Versión: 3

Fecha de revisión: 15/04/2016

Página 3 de 7

Fecha de impresión: 15/04/2016

### SECCIÓN 7: MANIPULACIÓN Y ALMACENAMIENTO.

#### 7.1 Precauciones para una manipulación segura.

El producto no requiere medidas especiales de manipulación, se recomiendan las siguientes medidas generales:

Para la protección personal, ver epígrafe 8. No emplear nunca presión para vaciar los envases, no son recipientes resistentes a la presión.

En la zona de aplicación debe estar prohibido fumar, comer y beber.

Cumplir con la legislación sobre seguridad e higiene en el trabajo.

Conservar el producto en envases de un material idéntico al original.

#### 7.2 Condiciones de almacenamiento seguro, incluidas posibles incompatibilidades.

El producto no requiere medidas especiales de almacenamiento.

Como condiciones generales de almacenamiento se deben evitar fuentes de calor, radiaciones, electricidad y el contacto con alimentos.

Mantener lejos de agentes oxidantes y de materiales fuertemente ácidos o alcalinos.

Almacenar según la legislación local. Observar las indicaciones de la etiqueta.

El producto no se encuentra afectado por la Directiva 2012/18/UE (SEVESO III).

#### 7.3 Usos específicos finales.

### SECCIÓN 8: CONTROLES DE EXPOSICIÓN/PROTECCIÓN INDIVIDUAL.

#### 8.1 Parámetros de control.

El producto NO contiene sustancias con Valores Límite Ambientales de Exposición Profesional. El producto NO contiene sustancias con Valores Límite Biológicos.

#### 8.2 Controles de la exposición.

##### Medidas de orden técnico:

Proveer una ventilación adecuada, lo cual puede conseguirse mediante una buena extracción-ventilación local y un buen sistema general de extracción.

<b>Concentración:</b>	<b>100 %</b>		
<b>Usos:</b>	<b>Exclusivamente para uso en fabricación, reenvasado, procesado o laboratorio</b>		
<b>Protección respiratoria:</b>			
Si se cumplen las medidas técnicas recomendadas no es necesario ningún equipo de protección individual.			
<b>Protección de las manos:</b>			
EPI:	Guantes de protección		
Características:	Marcado «CE» Categoría II.		
Normas CEN:	EN 374-1, En 374-2, EN 374-3, EN 420		
Mantenimiento:	Se guardarán en un lugar seco, alejados de posibles fuentes de calor, y se evitará la exposición a los rayos solares en la medida de lo posible. No se realizarán sobre los guantes modificaciones que puedan alterar su resistencia ni se aplicarán pinturas, disolventes o adhesivos.		
Observaciones:	Los guantes deben ser de la talla correcta, y ajustarse a la mano sin quedar demasiado holgados ni demasiado apretados. Se deberán utilizar siempre con las manos limpias y secas.		
Material:	PVC (Cloruro de polivinilo)	Tiempo de penetración (min.):	> 480
		Espesor del material (mm):	0,35
<b>Protección de los ojos:</b>			
EPI:	Pantalla facial		
Características:	Marcado «CE» Categoría II. Protector de ojos y cara contra salpicaduras de líquidos.		
Normas CEN:	EN 165, EN 166, EN 167, EN 168		
Mantenimiento:	La visibilidad a través de los oculares debe ser óptima para lo cual estos elementos se deben limpiar a diario, los protectores deben desinfectarse periódicamente siguiendo las instrucciones del fabricante. Se vigilará que las partes móviles tengan un accionamiento suave.		
Observaciones:	Las pantallas faciales deben tener un campo de visión con una dimensión en la línea central de 150 mm como mínimo, en sentido vertical una vez acopladas en el armazón.		
<b>Protección de la piel:</b>			
EPI:	Ropa de protección		
Características:	Marcado «CE» Categoría II. La ropa de protección no debe ser estrecha o estar suelta para que no interfiera en los movimientos del usuario.		





# FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

(de acuerdo con el Reglamento (UE) 2015/830)

## 101220-L(-)-Arabitol



Versión: 3

Fecha de revisión: 15/04/2016

Página 4 de 7

Fecha de impresión: 15/04/2016

Normas CEN:	EN 340
Mantenimiento:	Se deben seguir las instrucciones de lavado y conservación proporcionadas por el fabricante para garantiza una protección invariable.
Observaciones:	La ropa de protección debería proporcionar un nivel de confort consistente con el nivel de protección que debe proporcionar contra el riesgo contra el que protege, con las condiciones ambientales, el nivel de actividad del usuario y el tiempo de uso previsto.
EPI:	Calzado de trabajo
Características:	Marcado «CE» Categoría II.
Normas CEN:	EN ISO 13287, EN 20347
Mantenimiento:	Estos artículos se adaptan a la forma del pie del primer usuario. Por este motivo, al igual que por cuestiones de higiene, debe evitarse su reutilización por otra persona.
Observaciones:	El calzado de trabajo para uso profesional es el que incorpora elementos de protección destinados a proteger al usuario de las lesiones que pudieran provocar los accidentes, se debe revisar los trabajos para los cuales es apto este calzado.

### SECCIÓN 9: PROPIEDADES FÍSICAS Y QUÍMICAS.

#### 9.1 Información sobre propiedades físicas y químicas básicas.

Aspecto: Sólido

Color: N.D./N.A.

Olor: N.D./N.A.

Umbral olfativo: N.D./N.A.

pH: N.D./N.A.

Punto de Fusión: 104 °C

Punto/intervalo de ebullición: N.D./N.A.

Punto de inflamación: N.D./N.A.

Tasa de evaporación: N.D./N.A.

Inflamabilidad (sólido, gas): N.D./N.A.

Límite inferior de explosión: N.D./N.A.

Límite superior de explosión: N.D./N.A.

Presión de vapor: N.D./N.A.

Densidad de vapor: N.D./N.A.

Densidad relativa: N.D./N.A.

Solubilidad: N.D./N.A.

Liposolubilidad: N.D./N.A.

Hidrosolubilidad: N.D./N.A.

Coefficiente de reparto (n-octanol/agua): N.D./N.A.

Temperatura de autoinflamación: N.D./N.A.

Temperatura de descomposición: N.D./N.A.

Viscosidad: N.D./N.A.

Propiedades explosivas: N.D./N.A.

Propiedades comburentes: N.D./N.A.

N.D./N.A. = No Disponible/No Aplicable debido a la naturaleza del producto.

#### 9.2. Información adicional.

Contenido de COV (p/p): N.D.

### SECCIÓN 10: ESTABILIDAD Y REACTIVIDAD.

#### 10.1 Reactividad.

El producto no presenta peligros debido a su reactividad.

#### 10.2 Estabilidad química.

Estable bajo las condiciones de manipulación y almacenamiento recomendadas (ver epígrafe 7).

#### 10.3 Posibilidad de reacciones peligrosas.

El producto no presenta posibilidad de reacciones peligrosas.

#### 10.4 Condiciones que deben evitarse.

Evitar cualquier tipo de manipulación incorrecta.

# FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

(de acuerdo con el Reglamento (UE) 2015/830)

## 101220-L(-)-Arabitol

Versión: 3

Fecha de revisión: 15/04/2016



Página 5 de 7

Fecha de impresión: 15/04/2016

### 10.5 Materiales incompatibles.

Mantener alejado de agentes oxidantes y de materiales fuertemente alcalinos o ácidos, a fin de evitar reacciones exotérmicas.

### 10.6 Productos de descomposición peligrosos.

No se descompone si se destina a los usos previstos.

## SECCIÓN 11: INFORMACIÓN TOXICOLÓGICA.

### 11.1 Información sobre los efectos toxicológicos.

El contacto repetido o prolongado con el producto, puede causar la eliminación de la grasa de la piel, dando lugar a una dermatitis de contacto no alérgica y a que se absorba el producto a través de la piel. Las salpicaduras en los ojos pueden causar irritación y daños reversibles.

a) toxicidad aguda;

Datos no concluyentes para la clasificación.

b) corrosión o irritación cutáneas;

Datos no concluyentes para la clasificación.

c) lesiones o irritación ocular graves;

Datos no concluyentes para la clasificación.

d) sensibilización respiratoria o cutánea;

Datos no concluyentes para la clasificación.

e) mutagenicidad en células germinales;

Datos no concluyentes para la clasificación.

f) carcinogenicidad;

Datos no concluyentes para la clasificación.

g) toxicidad para la reproducción;

Datos no concluyentes para la clasificación.

h) toxicidad específica en determinados órganos (STOT) - exposición única;

Datos no concluyentes para la clasificación.

i) toxicidad específica en determinados órganos (STOT) - exposición repetida;

Datos no concluyentes para la clasificación.

j) peligro de aspiración;

Datos no concluyentes para la clasificación.

## SECCIÓN 12: INFORMACIÓN ECOLÓGICA.

### 12.1 Toxicidad.

No se dispone de información relativa a la Ecotoxicidad.

### 12.2 Persistencia y degradabilidad.

No existe información disponible sobre la persistencia y degradabilidad del producto.

### 12.3 Potencial de Bioacumulación.

No se dispone de información relativa a la Bioacumulación.

### 12.4 Movilidad en el suelo.

No existe información disponible sobre la movilidad en el suelo.

No se debe permitir que el producto pase a las alcantarillas o a cursos de agua.

Evitar la penetración en el terreno.

### 12.5 Resultados de la valoración PBT y mPmB.

No existe información disponible sobre la valoración PBT y mPmB del producto.

# FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

(de acuerdo con el Reglamento (UE) 2015/830)

## 101220-L(-)-Arabitol

Versión: 3

Fecha de revisión: 15/04/2016



Página 6 de 7

Fecha de impresión: 15/04/2016

### 12.6 Otros efectos adversos.

No existe información disponible sobre otros efectos adversos para el medio ambiente.

## SECCIÓN 13: CONSIDERACIONES RELATIVAS A LA ELIMINACIÓN.

### 13.1 Métodos para el tratamiento de residuos.

No se permite su vertido en alcantarillas o cursos de agua. Los residuos y envases vacíos deben manipularse y eliminarse de acuerdo con las legislaciones local/nacional vigentes.

Seguir las disposiciones de la Directiva 2008/98/CE respecto a la gestión de residuos.

## SECCIÓN 14: INFORMACIÓN RELATIVA AL TRANSPORTE.

No es peligroso en el transporte. En caso de accidente y vertido del producto actuar según el punto 6.

### 14.1 Número ONU.

No es peligroso en el transporte.

### 14.2 Designación oficial de transporte de las Naciones Unidas.

No es peligroso en el transporte.

### 14.3 Clase(s) de peligro para el transporte.

No es peligroso en el transporte.

### 14.4 Grupo de embalaje.

No es peligroso en el transporte.

### 14.5 Peligros para el medio ambiente.

No es peligroso en el transporte.

### 14.6 Precauciones particulares para los usuarios.

No es peligroso en el transporte.

### 14.7 Transporte a granel con arreglo al anexo II del Convenio Marpol 73/78 y del Código IBC.

No es peligroso en el transporte.

## SECCIÓN 15: INFORMACIÓN REGLAMENTARIA.

### 15.1 Reglamentación y legislación en materia de seguridad, salud y medio ambiente específicas para la sustancia.

El producto no está afectado por el Reglamento (CE) nº 1005/2009 del Parlamento Europeo y del Consejo, de 16 de septiembre de 2009, sobre las sustancias que agotan la capa de ozono.

El producto no se encuentra afectado por la Directiva 2012/18/UE (SEVESO III).

El producto no está afectado por el Reglamento (UE) No 528/2012 relativo a la comercialización y el uso de los biocidas.

El producto no se encuentra afectado por el procedimiento establecido en el Reglamento (UE) No 649/2012, relativo a la exportación e importación de productos químicos peligrosos.

### 15.2 Evaluación de la seguridad química.

No se ha llevado a cabo una evaluación de la seguridad química del producto.

## SECCIÓN 16: OTRA INFORMACIÓN.

Epígrafes modificados respecto a la versión anterior:

1,16

Se recomienda utilizar el producto únicamente para los usos contemplados.

Abreviaturas y acrónimos utilizados:

CEN: Comité Europeo de Normalización.

EPI: Equipo de protección personal.

# FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

(de acuerdo con el Reglamento (UE) 2015/830)

## 101220-L(-)-Arabitol

Versión: 3

Fecha de revisión: 15/04/2016



Página 7 de 7

Fecha de impresión: 15/04/2016

Principales referencias bibliográficas y fuentes de datos:

<http://eur-lex.europa.eu/homepage.html>

<http://echa.europa.eu/>

Reglamento (UE) 2015/830.

Reglamento (CE) No 1907/2006.

Reglamento (EU) No 1272/2008.

La información facilitada en esta ficha de Datos de Seguridad ha sido redactada de acuerdo con el REGLAMENTO (UE) 2015/830 DE LA COMISIÓN de 28 de mayo de 2015 por el que se modifica el Reglamento (CE) nº 1907/2006 DEL PARLAMENTO EUROPEO Y DEL CONSEJO de 18 de diciembre de 2006 relativo al registro, la evaluación, la autorización y la restricción de las sustancias y preparados químicos (REACH), por el que se crea la Agencia Europea de Sustancias y Preparados Químicos, se modifica la Directiva 1999/45/CE y se derogan el Reglamento (CEE) nº 793/93 del Consejo y el Reglamento (CE) nº 1488/94 de la Comisión así como la Directiva 76/769/CEE del Consejo y las Directivas 91/155/CEE, 93/67/CEE, 93/105/CE y 2000/21/CE de la Comisión.

La información de esta Ficha de Datos de Seguridad del Producto está basada en los conocimientos actuales y en las leyes vigentes de la CE y nacionales, en cuanto que las condiciones de trabajo de los usuarios están fuera de nuestro conocimiento y control. El producto no debe utilizarse para fines distintos a aquellos que se especifican, sin tener primero una instrucción por escrito, de su manejo. Es siempre responsabilidad del usuario tomar las medidas oportunas con el fin de cumplir con las exigencias establecidas en las legislaciones.

# Ficha de Datos de Seguridad

# ACOFARMA

Conforme al Reglamento (CE) N° 1907/2006 (REACH)

Denominación: Manitol

## 1.- Identificación de la sustancia o del preparado y de la sociedad o empresa

*Identificación de la sustancia o del preparado*

**Denominación:** Manitol

*Identificación de la sociedad o empresa:* Acofarma Distribución S.A.  
Llobregat, 20  
08223-Terrassa. España.  
Tel: 93 736 00 88 / Fax: 93 785 93 62

Teléfono de urgencias: Instituto Nacional de Toxicología. Madrid. Tel: 91 562 04 20

## 2.- Identificación de los peligros

### Clasificación de la sustancia o de la mezcla

No es una sustancia o mezcla peligrosa de acuerdo con el Reglamento (CE) n° 1272/2008  
Esta sustancia no está clasificada como peligrosa según la Directiva 67/548/CEE.

### Elementos de la etiqueta

El producto no necesita ser etiquetado de acuerdo con las directivas de la Comunidad Europea ó las respectivas leyes nacionales.

**Otros Peligros** - ninguno(a)

## 3.- Composición/información sobre los componentes

CAS-N°:69-65-8

EINECS-N°:200-711-8

PM: 182,17

Fórmula molecular: C<sub>6</sub>H<sub>14</sub>O<sub>6</sub>

## 4.- Primeros auxilios

**Inhalación:** Llevar al aire libre en caso de exposición excesiva al polvo, consultar a un medico en caso de tos persistente.

**Contacto con los ojos:** Enjuagar con mucha agua, consultar un especialista en caso de irritación persistente.

**Contacto con la piel:** Lavar con agua y jabón.

**Ingestión:** Producto sin peligro en caso de ingestión, consultar a un medico si es necesario en caso de ingestión masiva provoca laxación y diarrea.

## 5.- Medidas de lucha contra incendios

# Ficha de Datos de Seguridad

# ACOFARMA

Conforme al Reglamento (CE) N° 1907/2006 (REACH)

Denominación: Manitol

**Medios de extinción recomendados:** Agua pulverizada

**Medios de extinción a excluir:** CO<sub>2</sub>: Inactivo.

Polvo: riesgo de formación de una nube de polvo.

## 6.- Medidas a tomar en caso de vertido accidental

Precauciones individuales: Respetar las consignas de protección \$8

Protección del ambiente: Producto sin riesgo para el medio ambiente (biodegradable).

Métodos de limpieza: Recoger por medios mecánicos, aspirar, y luego limpiar con agua para la eliminación de residuos, ver \$ 13

## 7.- Manipulación y almacenamiento

### Manipulación

**Medidas técnicas:** Respetar las consignas de protección individuales \$8. Los locales en los que puedan producirse polvo deben identificarse por zonas y acondicionarse según la Directiva ATEX. (\*)

**Precauciones:** Evitar la formación o la dispersión de polvo en la atmosfera.

**Consejos de utilización:** Recomendaciones generales relativas a la manipulación de productos en polvo. Toda manipulación y/o almacenamiento de productos deben adaptarse a las características de explosividad de cada producto, considerándose como conocidas por el cliente, este sigue siendo el único responsable y debe, por consiguiente, tomar las medidas necesarias para evitar el riesgo de accidente /en particular de explosión) y/o alteración de dicho producto. (\*)

### Almacenamiento

**Medidas técnicas:** Los silos de almacenamiento a granel deben estar en conformidad con la Directiva ATEX. (\*)

**Condiciones de almacenamiento:** Almacenar en lugar seco y fresco.

**Materias incompatibles:** Oxidantes fuertes.

**Materiales de embalaje:** Contenedor flexible, bidón de cartón y polietileno, saco de polietileno y papel.

## 8.- Controles de exposición/protección personal

**Parámetros de exposición:** Respetar la reglamentación nacional aplicable al polvo total no específico.

# Ficha de Datos de Seguridad

ACOFARMA

Conforme al Reglamento (CE) N° 1907/2006 (REACH)

Denominación: Manitol

VME:  $\leq 10 \text{ mg/m}^3$

## Equipamientos de protección individual

**Protección respiratoria:** Llevar una mascarilla en caso de formación de polvo.

**Protección de los ojos:** Llevar gafas adecuadas en caso de formación de polvo.

**Protección de las manos:** No necesario.

**Protección cutánea:** No hay protección específica.

**Medidas de higiene específica:** Medidas generales de higiene relativas a la manipulación de productos químicos.

## 9.- Propiedades físicas y químicas

Estado físico: Polvo

Color: Blanco

Olor: Neutro

pH (Concentración): 5,5 – 6,5 al 20%

Temperatura de ebullición: No aplicable

Temperatura de auto inflamación: 460 grados C (GG en polvo)

Características de explosividad: energía min. De inflamación: 31 mJ aprox.

Presión Max. De explosión: 8,6 bar aprox.

KST : 133 bar m/s aprox.

Clase (VID 3673 ST) : 1

Concentración min. de explosión : 30 a 60 g/m<sup>3</sup>

(Fuente INERIS, por analogía al manitol 35)

Masa volumétrica: 0,60 kg/l aprox.

Solubilidad: soluble a 20 grados C (250 g/l aprox)

## 10.- Estabilidad y reactividad

**Estabilidad:** Estable así se respeta las condiciones de almacenamiento §7

**Reacciones peligrosas:** Mezcla aire/polvo (riesgo de explosión)

**Materias a evitar:** Oxidantes fuertes

**Productos de descomposición peligrosos:** Productos típicos de descomposición: mono y dióxido de carbono, agua y oxígeno.

## 11.- Información toxicológica

**Toxicidad aguda:** DL50: No disponible

**Efectos locales:** Ligeramente irritante por roces mecánicos en la piel para personas sensibles.

**Otros datos:** No se le conoce toxicidad.

# Ficha de Datos de Seguridad

# ACOFARMA

Conforme al Reglamento (CE) N° 1907/2006 (REACH)

Denominación: Manitol

## 12.- Informaciones ecológicas

**Persistencia/Degradabilidad:** Producto biodegradable

**Bioacumulacion:** No aplicable, producto metabolizado por los organismos.

**Ecotoxicidad:** CL50: No disponible

## 13.- Consideraciones relativas a la eliminación

**Tratamiento de los residuos:** Puede ser eliminado como desecho solido (desecho industrial común) o incinerado en una instalación autorizada de acuerdo con la legislación vigente.

**Envases contaminados:** Envase de uso único a valorizar o eliminar según condiciones locales aplicables.

## 14.- Información relativa al transporte

**Reglamentación transporte:** No aplicable

**Numero ONU:** No afectado

	<u>RID/ADR</u>	<u>RTMDR</u>	<u>IMDG</u>	<u>IATA/OACI</u>
Clase:	n a	n a	n a	n a
Grupo, cifra, página:				
Etiquetas:				
Código peligroso:				
Código materia:				

## 15.- Información Reglamentaria

La hoja técnica de seguridad cumple con los requisitos de la Reglamento (CE) No. 1907/2006.

## 16.- Otras informaciones

**Texto de códigos H y frases R mencionadas en la sección 2**

Fecha de emisión: 04/09/2013

Los datos suministrados en esta ficha de seguridad se basan en nuestro actual conocimiento. Describen tan sólo las medidas de seguridad en el manejo de este producto y no representan una garantía sobre las propiedades descritas del mismo.