



Universidad de Valladolid



**ESCUELA DE INGENIERÍAS
INDUSTRIALES**

UNIVERSIDAD DE VALLADOLID

ESCUELA DE INGENIERIAS INDUSTRIALES

GRADO EN INGENIERÍA QUÍMICA

**Diseño de una planta para la producción
de 60.000 t/año de tetrahydrofurano a
partir de 1,4-butanodiol**

Autor:

Gómez Labajo, Jaime

Tutor:

**Mato Chaín, Rafael Bartolomé
Departamento de Ingeniería Química
y Tecnología del Medio Ambiente**

Valladolid, septiembre de 2021.

Resumen

El tetrahidrofurano (THF) es un compuesto orgánico heterocíclico, que consta de una cadena de cuatro carbonos, cuyos extremos se encuentran unidos a un átomo de oxígeno. El THF, principalmente, se obtiene a partir de 1,4-butanodiol (BDO), por una reacción de ciclación con pérdida de agua, en presencia de catalizadores ácidos, como la zeolita ZSM-5. La producción de THF resulta interesante por sus aplicaciones como medio solvente, y por servir de intermedio para la producción de polímeros como el politetrametilen-éter-glicol (PTMEG).

Utilizando el software de simulación de procesos ASPEN Plus, y herramientas que dicho programa proporciona, se realizó un diseño preliminar que consigue más de 60000 t/año de THF (pureza del 99.9 % w/w), utilizando un reactor de lecho poroso multitubular, y una destilación azeotrópica (dos columnas a diferente presión). Este diseño conlleva un beneficio económico que podría ser incluso mejorable si se prosiguiese con el estudio del proceso.

Palabras clave: tetrahidrofurano (THF), 1,4-butanodiol (BDO), ASPEN Plus, reactor multitubular poroso, destilación azeotrópica.

Abstract

Tetrahydrofuran (THF) is an heterocyclic organic compound consisting of a four-carbon chain, the ends of which are attached to an oxygen atom. THF is mainly obtained from 1,4-butanediol (BDO) by a water-losing cyclization reaction in the presence of acid catalysts such as zeolite ZSM-5. Production of THF is interesting due to its applications as a solvent medium and as an intermediate for the production of polymers such as polytetramethylene ether glycol (PTMEG).

Using the process simulation software ASPEN Plus, and tools provided by this program, a preliminary design was made, that achieves more than 60000 t/year of THF (purity of 99.9 % w/w), using a multitubular packed bed reactor, and an azeotropic distillation system (two columns at different pressures). This design has an economic benefit that could even be enhanced by further study of the process.

Keywords: tetrahydrofuran (THF), 1,4-butanediol (BDO), ASPEN Plus, multitubular packed bed reactor, azeotropic distillation.

Contenidos

1. Objetivos.....	11
2. Introducción	12
2.1. 1,4-butanodiol: propiedades, procesos de obtención... ..	12
2.1.1. Propiedades físicas	12
2.1.2. Propiedades químicas	13
2.1.3. Proceso de producción	13
2.1.4. Aplicaciones del 1,4-butanodiol.....	14
2.2. Tetrahidrofurano: propiedades, aplicaciones.....	15
2.2.1. Propiedades físicas	15
2.2.2. Propiedades químicas	15
2.2.3. Procesos de producción	16
2.2.4. Aplicaciones del tetrahidrofurano.....	17
2.3. Interacciones 1,4 BDO, THF, agua: azeótropos, equilibrios LL... ..	19
2.3.1. 1,4-butanodiol (BDO) y tetrahidrofurano (THF).....	19
2.3.2. Tetrahidrofurano y Agua	21
2.3.3. 1,4-butanodiol y Agua:.....	22
2.3.4. Equilibrio ternario.....	24
3. Diseño del proceso de producción	27
3.1. Análisis preliminar: diagrama de bloques inicial.....	27
3.1.1. Sección de reacción.....	27
3.1.2. Sección de separación.....	33
3.2. Diagramas de proceso: PFD y P&ID	39
3.2.1. Diagrama de flujo de proceso (PFD).....	39
3.2.2. Diagrama de líneas e instrumentación	43
3.3. Diseño de equipos.....	46
3.3.1. Diseño del intercambiador de calor de carcasa y tubos CL-10246	
3.3.2. Especificaciones de las torres de destilación. Columna T-102 ..	52
3.3.3. Diseño del reactor catalítico en ASPEN.....	59
3.4. BM en límites de batería.....	67
3.5. Aspectos económicos.....	69

3.5.1.	Comparación flash / columna T-103.....	69
3.5.2.	Integración energética	72
4.	Balance económico	77
4.1.	Potencial económico	77
4.2.	Análisis económico del proyecto	79
5.	Seguridad e impacto ambiental.....	81
5.1.	Seguridad	81
5.1.1.	Peligros referidos a la naturaleza de los compuestos.....	81
5.1.2.	Seguridad en el proceso	82
5.1.3.	Análisis HAZOP	84
5.2.	Impacto ambiental	85
5.2.1.	Efectos sobre la atmósfera	86
5.2.2.	Efectos sobre el agua	87
6.	Conclusiones	89
7.	Bibliografía	90
	ANEXOS	93
1.	Diagramas de proceso.....	94
1.1.	Diagrama de bloques	95
1.2.	Diagrama de flujo	97
1.3.	P&ID.....	101
1.4.	Integración energética	113
2.	Cálculos justificativos	115
2.1.	Intercambiador de calor CL-102	116
2.2.	Reactor catalítico.....	124
2.3.	Selección del número de etapas en columnas	131
2.4.	Elección del equipo de separación de colas	135
3.	Fichas de seguridad	137
4.	Tabla de corrientes	190
5.	Hojas de especificaciones.....	197
6.	HAZOP T-101.....	205

LISTA DE ILUSTRACIONES

ILUSTRACIÓN 1. 1,4-BUTANODIOL.....	12
ILUSTRACIÓN 2. TETRAHIDROFURANO.....	15
ILUSTRACIÓN 3. SÍNTESIS DE REPPE (MÜLLER, 2011).....	16
ILUSTRACIÓN 4. OBTENCIÓN DE THF A PARTIR DE ANHÍDRIDO MALEICO (KANETAKA ET AL., 1970).....	17
ILUSTRACIÓN 5. DIAGRAMA TXY BDO-THF, A 1 BAR Y 40 BAR (INFERIOR Y SUPERIOR).....	19
ILUSTRACIÓN 6. ENERGÍA LIBRE DE GIBBS DE LA MEZCLA BDO-THF.....	20
ILUSTRACIÓN 7. DIAGRAMA TXY THF-AGUA A 1 BAR Y 5 BAR.....	21
ILUSTRACIÓN 8. ENTALPÍA LIBRE DE GIBBS DE MEZCLA.....	22
ILUSTRACIÓN 9. DIAGRAMA TXY DE LA PAREJA BDO-AGUA A 1 BAR Y 40 BAR.	22
ILUSTRACIÓN 10. ENTALPÍA LIBRE DE GIBBS DE MEZCLA.....	23
ILUSTRACIÓN 11. DIAGRAMA TERNARIO THF-BDO-AGUA (1 BAR).....	24
ILUSTRACIÓN 12. DIAGRAMA TERNARIO THF-BDO-AGUA (5 BAR).....	25
ILUSTRACIÓN 13. DIAGRAMA DE RESIDUOS DE LA MEZCLA TERNARIA (1 BAR)	25
ILUSTRACIÓN 14. DIAGRAMA DE RESIDUOS DE LA MEZCLA TERNARIA (5 BAR)	26
ILUSTRACIÓN 15. RENDIMIENTO CELULAR THF Y BDO A 350 GRADOS (VAIDYA ET AL.,2003).....	29
ILUSTRACIÓN 16. PERFIL DE CONCENTRACIÓN (FLUJO DE MEZCLA PERFECTA Y FLUJO DE PISTÓN).....	30
ILUSTRACIÓN 17. SECUENCIA DE SEPARACIÓN I.....	36
ILUSTRACIÓN 18. SECUENCIA DE SEPARACIÓN II.....	37
ILUSTRACIÓN 19. SECUENCIA DE SEPARACIÓN III.....	38
ILUSTRACIÓN 20. FACTOR DE CORRECCIÓN DE LA DIFERENCIA DE TEMPERATURA MEDIA.....	47
ILUSTRACIÓN 21. CORRELACIÓN GRÁFICA PARA OBTENER EL FACTOR JH. (R. P. CHHABRA ET AL., 2018).....	49
ILUSTRACIÓN 22. FACTOR DE FRICCIÓN POR EL LADO DE LOS TUBOS.....	51
ILUSTRACIÓN 23. FACTOR DE FRICCIÓN POR EL LADO DE LA CARCASA.....	51
ILUSTRACIÓN 24. BLOQUE RADFRAC EN ASPEN PLUS.....	52
ILUSTRACIÓN 25. OPCIONES DEL BLOQUE RADFRAC.....	52
ILUSTRACIÓN 26. CONFIGURACIÓN DE LA TORRE.....	53
ILUSTRACIÓN 27. ESPECIFICACIÓN DE CORRIENTES.....	53
ILUSTRACIÓN 28. COMPOSICIÓN DEL VAPOR EN LAS ETAPAS DE LA TORRE.....	53
ILUSTRACIÓN 29. COMPOSICIÓN DE LA ALIMENTACIÓN.....	54
ILUSTRACIÓN 30. RESUMEN DE ESPECIFICACIONES DE OPERACIÓN.....	54
ILUSTRACIÓN 31. SELECCIÓN DEL NÚMERO DE ETAPAS, T-101.....	55
ILUSTRACIÓN 32. SELECCIÓN DEL NÚMERO DE ETAPAS, T-102.....	56

ILUSTRACIÓN 33. SELECCIÓN DEL NÚMERO DE ETAPAS, T-103	56
ILUSTRACIÓN 34. DISEÑO INTERNO DE COLUMNAS.....	57
ILUSTRACIÓN 35. HYDRAULIC PLOT, ETAPA 15, T-102	58
ILUSTRACIÓN 36. ESPECIFICACIONES DE DISEÑO.....	59
ILUSTRACIÓN 37. ENTRADAS ESPECIFICACIÓN DE DISEÑO	60
ILUSTRACIÓN 38. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD I. CAÍDA DE PRESIÓN EN EL REACTOR.	61
ILUSTRACIÓN 39. ENTRADAS ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD II. CAÍDA DE PRESIÓN EN EL REACTOR	61
ILUSTRACIÓN 40. ESPECIFICACIÓN DE LA CAÍDA DE PRESIÓN.	61
ILUSTRACIÓN 41. ESPECIFICACIÓN DEL CATALIZADOR	62
ILUSTRACIÓN 42. PÉRDIDA DE CARGA SEGÚN DIÁMETRO Y NÚMERO DE TUBOS.....	62
ILUSTRACIÓN 43. PERFILES DE DUTY Y TEMPERATURA EN EL REACTOR	65
ILUSTRACIÓN 44. PERFILES DE CONCENTRACIÓN DE THF Y BDO.....	66
ILUSTRACIÓN 45. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD II. FLASH.	70
ILUSTRACIÓN 46. ENTRADAS ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD II. FLASH.....	70
ILUSTRACIÓN 47. CURVAS COMPUESTAS.	73
ILUSTRACIÓN 48. GCC.	75
ILUSTRACIÓN 49. CC Y GCC COMBINADAS	76
ILUSTRACIÓN 50. REACCIÓN DE DESHIDROCICLACIÓN.....	77
ILUSTRACIÓN 51. VALOR ACTUAL NETO	80
ILUSTRACIÓN 52. CONTROL DE LA TEMPERATURA.....	83
ILUSTRACIÓN 53. HOLGURA ENTRE CARCASA Y BANCADA DE TUBOS (CHHABRA ET AL., 2018).....	117
ILUSTRACIÓN 54. CORRELACIÓN GRÁFICA PARA OBTENER EL FACTOR JH. (CHHABRA ET AL., 2018).....	119
ILUSTRACIÓN 55.FACTOR DE FRICCIÓN POR EL LADO DE LOS TUBOS	120
ILUSTRACIÓN 56.FACTOR DE FRICCIÓN POR EL LADO DE LA CARCASA.....	121
ILUSTRACIÓN 57. PÉRDIDA DE CARGA SEGÚN EL NÚMERO DE TUBOS Y SU DIÁMETRO	124
ILUSTRACIÓN 58. SELECCIÓN DEL NÚMERO DE ETAPAS, T-101	132
ILUSTRACIÓN 59. SELECCIÓN DEL NÚMERO DE ETAPAS, T-102	133
ILUSTRACIÓN 60. SELECCIÓN DEL NÚMERO DE ETAPAS, T-103	134

LISTA DE TABLAS

TABLA 1.RESUMEN PROPIEDADES FÍSICAS DEL BDO (GRÄFJE ET AL., 2019)	13
TABLA 2. PROPIEDADES FÍSICAS DEL THF (MÜLLER, 2011)	15
TABLA 3. COMPOSICIÓN DE LOS AZEÓTROPAS THF-AGUA	21
TABLA 4. CONVERSIÓN FRENTE A TEMPERATURA (LI & CHEN, 2019).....	31
TABLA 5. CONVERSIÓN Y SELECTIVIDAD PARA DIFERENTES TEMPERATURAS (KAMIYAMA & MATANO, 1995).....	32

TABLA 6. COMPOSICIÓN DE LA CORRIENTE DE SALIDA.....	33
TABLA 7. PUNTOS DE EBULLICIÓN DE LOS COMPUESTOS PUROS	35
TABLA 8. RATIO DE PRESIÓN (EHTESHAM, 2017).....	44
TABLA 9. RESUMEN DE CORRIENTES DEL INTERCAMBIADOR DE CALOR CL-102	46
TABLA 10. ÁREA DE TRANSFERENCIA DE CALOR	48
TABLA 11. RESUMEN DE ESPECIFICACIONES DEL INTERCAMBIADOR CL-102. TODAS LAS DIMENSIONES EN METROS.....	48
TABLA 12. COEFICIENTES INDIVIDUALES DE TRANSMISIÓN DE CALOR.....	50
TABLA 13. RESUMEN DISEÑO CL-102.....	51
TABLA 14. COMPARACIÓN THF COMERCIAL Y THF DEL ESTUDIO REALIZADO	54
TABLA 15. EVALUACIÓN ECONÓMICA DE LA TORRE T-102.....	55
TABLA 16. RESUMEN ESPECIFICACIONES DE LAS TORRES	56
TABLA 17. RESUMEN GEOMETRÍA INTERNA DE LA COLUMNA T-102.....	58
TABLA 18. DIMENSIONADO DEL REACTOR	63
TABLA 19. RESUMEN PARÁMETROS DEL REACTOR.....	64
TABLA 20. BALANCE DE MATERIA EN LÍMITES DE BATERÍA	67
TABLA 21. COSTES DE INSTALACIÓN.....	69
TABLA 22. COMPARATIVA FLASH-T-103	71
TABLA 23. CORRIENTES FRÍAS DEL PROCESO.	72
TABLA 24. CORRIENTES CALIENTES DEL PROCESO.....	73
TABLA 25. POSIBILIDADES DE AHORRO DE ENERGÍA.....	74
TABLA 26. SERVICIOS GENERALES.....	75
TABLA 27. POTENCIAL ECONÓMICO DE LA REACCIÓN.....	77
TABLA 28. ANÁLISIS ECONÓMICO	79
TABLA 29. IMPACTO AMBIENTAL DE LOS COMPONENTES	85
TABLA 30. DQO DE LA CORRIENTE WW-2	87
TABLA 31. CONSTANTES EMPÍRICAS DIÁMETRO DE BANCADA	116
TABLA 32. RESUMEN DE ESPECIFICACIONES DEL INTERCAMBIADOR CL-102. TODAS LAS DIMENSIONES EN METROS.....	117
TABLA 33. COEFICIENTE INDIVIDUAL POR LOS TUBOS	118
TABLA 34. COEFICIENTE INDIVIDUAL POR LA CARCASA.....	119
TABLA 35. COEFICIENTES GLOBALES.....	120
TABLA 36. CÁLCULO DE LA CAÍDA DE PRESIÓN EN LOS TUBOS	120
TABLA 37. CAÍDA DE PRESIÓN EN LA CARCASA	121
TABLA 38. INTERCAMBIADOR DE PLACAS.....	123
TABLA 39. L Y ΔP PARA 4.5 CM DE DIÁMETRO.....	125
TABLA 40. L Y ΔP PARA 4 CM DE DIÁMETRO	125
TABLA 41. L Y ΔP PARA 3.5 CM DE DIÁMETRO.....	126
TABLA 42. L Y ΔP PARA 3 CM DE DIÁMETRO	126
TABLA 43. L Y ΔP PARA 3 CM DE DIÁMETRO	127
TABLA 44. PROPIEDADES FÍSICAS DEL VAPOR.....	127
TABLA 45. CONSTANTES EMPÍRICAS DE CARCASA	128

TABLA 46. RESULTADOS COEFICIENTE POR EL EXTERIOR	128
TABLA 47. PROPIEDADES FÍSICAS DE REACTIVOS Y PRODUCTOS.....	129
TABLA 48. COEFICIENTES DE TRANSMISIÓN DE CALOR SEGÚN DIÁMETRO Y NÚMERO DE TUBOS.....	129
TABLA 49. EVALUACIÓN ECONÓMICA DE ASPEN.....	131
TABLA 50. SELECCIÓN DEL NÚMERO DE ETAPAS, T-101	132
TABLA 51. SELECCIÓN DEL NÚMERO DE ETAPAS, T-103	133
TABLA 52. SELECCIÓN DEL NÚMERO DE ETAPAS, T-103	134
TABLA 53. VALORACIÓN TÉCNICA T-103 Y FLASH	136
TABLA 54. VALORACIÓN ECONÓMICA T-103 Y FLASH.....	136

NOMENCLATURA Y GLOSARIO

ΔH_{ad} = entalpía de adsorción (kJ/mol).

$(-\Delta P)$ = caída de presión (mbar, kPa)

ΔT_{in} = diferencia media de temperaturas ($^{\circ}\text{C}$).

τ = tiempo de residencia (s, h).

ρ = densidad de la corriente (kg/m^3).

μ = viscosidad dinámica de la corriente ($\text{kg}/(\text{m}\cdot\text{s})$, cP).

μ_s = viscosidad dinámica del agua ($\text{kg}/(\text{m}\cdot\text{s})$, cP).

A = área de transferencia de calor (m^2)

AZ1 = azeótropo THF-Agua a 1 bar

AZ5 = azeótropo THF-Agua a 5 bar

BDO = 1,4-butanediol

C_{BDO} = concentración de BDO (mol/l)

$C_{BDO,0}$ = concentración de BDO inicial (mol/l)

c_p = capacidad calorífica ($\text{kJ}/(\text{kg}\cdot^{\circ}\text{C})$).

CC = curvas compuestas.

COVs = compuestos orgánicos volátiles.

CW = cooling water.

DB = diagrama de bloques.

d_i = diámetro interno de los tubos (m).

d_e = diámetro hidráulico equivalente (m).

D_L = diámetro de la línea (m).

d_o = diámetro exterior de los tubos (m).

d_p = diámetro de la partícula de catalizador (mm).

E = energía de activación (kJ/mol).

ELL = equilibrio líquido-líquido.

GCC = gran curva compuesta.

G_c = cantidad de vapor condensado (kg/s).

f = factor de fricción en las líneas, equivalente a j_f en el interior de tubos de un intercambiador (adim).

$f_{\Delta P}$ = factor de seguridad en diseño de líneas, respectivo a pérdida de carga (adim).

f_Q = factor de seguridad en diseño de líneas, respectivo al caudal (adim).

G_c = flujo de vapor condensante (kg/s).

h_i = coeficiente de transmisión individual por el interior de los tubos ($\text{W}/\text{m}^2\ ^{\circ}\text{C}$).

h_{id} = coeficiente de transmisión de calor debido al ensuciamiento en el interior de los tubos ($\text{W}/\text{m}^2\ ^{\circ}\text{C}$).

h_o = coef. de transmisión por la carcasa ($\text{W}/\text{m}^2\ ^{\circ}\text{C}$).

h_{od} = coeficiente de transmisión de calor debido al ensuciamiento en el exterior de los tubos ($\text{W}/\text{m}^2\ ^{\circ}\text{C}$).

HPS = vapor saturado a alta presión

j_f = factor de fricción (adim).

j_h = factor de transmisión de calor (adim).

K_{BDO} = constante de equilibrio de adsorción (l/mol).

$K_{BDO,0}$ = constante de equilibrio de adsorción a tiempo 0 de reacción (l/mol).

k = constante de velocidad ($\text{l}/(\text{g}_{\text{cat}}\cdot\text{s})$).

k_0 = constante de velocidad a tiempo 0 de reacción ($\text{l}/(\text{g}_{\text{cat}}\cdot\text{s})$).

k_L = conductividad de la mezcla líquida ($\text{W}/\text{m}\cdot^{\circ}\text{C}$).

k_w = conductividad térmica del acero ($\text{W}/\text{m}\cdot^{\circ}\text{C}$).

LPS = vapor saturado a baja presión

\dot{m} = flujo másico (kg/s).

MeOH = metanol.

M_H = parámetro I de diseño en carcasa (ec. de condensación) (kg/m·s).

MPS = vapor saturado a media presión

N_r = parámetro II de diseño en carcasa (ec. de condensación) (adim.)

Nu = número de Nusselt (adim.)

N_p = número de pasos por los tubos

P&ID = diagrama de líneas e instrumentación.

PFD = diagrama de flujo del proceso.

Pr = número de Prandtl (adim.)

PrOH = 1-propanol.

q = flujo de calor (kW).

Q = caudal volumétrico (m^3/s).

$-r_{BDO}$ = velocidad de reacción referida al BDO ($mol/(g_{cat} \cdot s)$).

R = constante de los gases ideales ($8,31 J/mol/K$).

Re = número de Reynolds (adim.).

Re_p = número de Reynolds de partícula (adim.).

S = sección (m^2).

SG = servicios generales.

T = temperatura ($^{\circ}C$).

THF = tetrahidrofurano.

U = coeficiente global de transferencia de calor ($W/(m^2 \cdot ^{\circ}C)$).

u_L = velocidad en la línea (m/s).

u_t = velocidad de la corriente por los tubos (m/s).

u_c = velocidad de la corriente por la carcasa (m/s).

WW = agua residual.

X = conversión (% , tanto por 1).

1. Objetivos

El objetivo del presente estudio es el diseño preliminar de un proceso de producción en una hipotética planta química, que permita obtener una cantidad definida, en este caso 60000 t/año, de un compuesto de interés industrial, como el tetrahidrofurano (THF), con unas condiciones de pureza determinadas, y utilizando una herramienta de simulación e integración de procesos, conocida como ASPEN Plus.

Como objetivos internos del proyecto, pueden destacarse los siguientes:

- Desarrollar el manejo de la herramienta ASPEN Plus de diseño de procesos, de manera autónoma, aprendiendo a utilizar todas sus herramientas que facilitan el diseño de procesos.
- Demostrar la capacidad del alumno para diseñar una vía de proceso, unas condiciones, y unos equipos adecuados según el producto que se quiera obtener y de la materia prima de la que se parta.
- Ser capaz de dimensionar equipos de proceso: intercambiadores de calor, reactores, sistemas de bombeo.
- Diseñar y especificar un sistema de reacción química, atendiendo a las necesidades de la reacción, para que se produzca de forma óptima.
- Poder elaborar un sistema de separación que incluya la rotura de un azeótropo, y que sea capaz de separar todos los componentes a pesar de su presencia.
- Poder incluir en el diseño el componente económico, añadiendo al proyecto principal propuestas de mejora y/o estudios que permitan elegir entre varias opciones.
- Realizar una evaluación económica, breve pero concisa, que manifieste el beneficio económico del proyecto, y que sea capaz de atraer a inversores.
- Estudiar el plausible impacto ambiental del proceso, así como la vulnerabilidad de los operarios que trabajarían en la planta proyectada si llegase a ejecutarse el proyecto.

2. Introducción

2.1. 1,4-butanodiol: propiedades, procesos de obtención...

El 1,4-butanodiol (BDO) [número CAS: 110-63-4] es un compuesto químico orgánico que pertenece a la familia de los alcoholes, (marcado en la nomenclatura con el sufijo -ol), que son compuestos orgánicos compuestos por una cadena de carbonos, lineal o ramificada, y que puede contener enlaces simples o múltiples entre carbonos, con la peculiaridad de que hay al menos un grupo hidroxilo (-OH), unido a uno o varios de los carbonos de la cadena. Más concretamente, en este caso, el sufijo -di indica que este compuesto pertenece al grupo de los dioles, que son alcoholes que tienen dos grupos hidroxilo, colocados en las posiciones 1 y 4 (la numeración lo indica al principio del nombre del compuesto).

El 1,4-butanodiol es un compuesto conformado por una cadena simple y saturada, es decir, libre de dobles o triples enlaces, de cuatro carbonos (prefijo but-), cuyas fórmula y representación (izquierda y derecha, respectivamente) son las siguientes:



Ilustración 1. 1,4-butanodiol

2.1.1. Propiedades físicas

A partir de la fórmula y de los pesos moleculares de los elementos que lo componen, el peso molecular del BDO está definido y su valor es de 90.12 g/mol. A temperatura y presión ambiente es un líquido incoloro, casi inodoro e higroscópico, es decir, es capaz de atraer el agua/la humedad de su alrededor (Ford & Wilson, 1999). Es un compuesto que, debido a su composición y a la presencia de grupos hidroxilo, es soluble fácilmente en agua (tiene, al igual que ella, interacciones intermoleculares por puentes de hidrógeno), y también en alcoholes, cetonas y éteres glicólicos. Se disuelve en menor medida en dietil éter y en ésteres, y es inmisible con hidrocarburos alifáticos y aromáticos. (Gräfje et al., 2019)

Otras propiedades físicas principales se presentan en la siguiente tabla:

Tabla 1. Resumen propiedades físicas del BDO (Gräffe et al., 2019)

Parámetro	Valor
Temp. fusión a 1 atm [°C]	20.2 ¹
Temp. ebullición a 1 atm [°C]	230.5
Temp. flash [°C]	134.0
Temp. crítica [°C]	446.0
Presión crítica [bar]	41.2
Entalpía de vaporización [kJ/mol]	68.2 (a 131.4 °C)
Entalpía de combustión [kJ/mol]	-2585 kJ/mol
Calor específico (compuesto puro) a 50 °C [kJ/kg·K]	3.4 (+2%)
Conductividad térmica (compuesto puro) a 50 °C [W/m ² K]	0.2091
Viscosidad a 20 °C [mPa·s]	91.56
Índice de refracción a 20 °C [adim.]	1.446

2.1.2. Propiedades químicas

El BDO es un compuesto que, sin ser corrosivo, es tremendamente reactivo, y da lugar a muchos compuestos de reacción según las condiciones en las que se encuentre. En medio ácido, se produce la reacción que se llevará a cabo en nuestro proceso, una ciclación del compuesto lineal con pérdida de una molécula de agua. Más adelante nos centraremos en el mecanismo de reacción que se produce. Además de esta reacción, algunos ejemplos de otras que se pueden producir son (Gräffe et al., 2019):

- En presencia de catalizadores metálicos (cobre o zinc), se produce butirolactona.
- Reacciona con ácidos carboxílicos para producir diésteres, y con dicarboxílicos, para producir poliésteres.
- A 200 °C, en presencia de hidrógeno, y sobre un catalizador metálico (níquel o cobalto), reacciona con compuestos nitrogenados, como el amoníaco, para dar lugar a pirrolidina o sus derivados.
- Puede dar lugar a divinil éter, como otros alcoholes.

2.1.3. Proceso de producción

Se produce, principalmente, a partir de la hidrogenación continua de 2-butin-1,4-diol, que tiene lugar en un reactor catalítico, en el que el catalizador es un catalizador de níquel modificado sobre un soporte de sílica gel. La mezcla reaccionante (disolución acuosa del 2-butin-1,4-diol al 30-50%, con el hidrógeno), entran al reactor a 80 °C y a 300 bar.

¹ Como la temperatura de fusión es alta, el tanque de almacenamiento se encontrará calefactado para que el BDO llegue al proceso a 25 grados.

El efluente del reactor contiene algunas impurezas, principalmente metanol y 1-propanol (MeOH y PrOH), así que se purifica, como la mayoría de los compuestos sintetizados industrialmente, por destilación fraccionada. Este proceso tiene una variante a baja presión y otra en dos etapas, pero no son tan habituales (Gräfje et al., 2019).

Existen otras opciones para producir el 1,4-butanodiol: por ejemplo, a partir de alcohol alílico y gas de síntesis, o a partir de butadieno mediante reacciones de peroxidación. El objetivo de estos procesos de producción es alcanzar una pureza de producto de entre 99.5 % y 99.8 % en peso, conteniendo como impurezas, principalmente, alcoholes ligeros. Esto le coloca con un valor en el mercado de aproximadamente 3.6 \$/kg (*Chemicals Prices & Chemical Industry Market Analysis, Insights | Echemi*, n.d.).

A finales de 2018, se habían producido unos 4.3 millones de toneladas ese año (provenientes principalmente de China, en un 53%), valor que, previsiblemente, al ser un intermedio químico tan utilizado, tiene potencial para aumentar. (ResearchAndMarkets, 2019)

2.1.4. Aplicaciones del 1,4-butanodiol

El BDO es, como se ha citado anteriormente, un intermedio, tiene aplicaciones por sí sólo, pero que principalmente se usa como materia prima en otros procesos, entre ellos, para obtener tetrahidrofurano (THF) y butirolactona. Tanto el BDO como sus derivados se usan en la industria textil, fotográfica y farmacéutica. Pero su uso principal es para obtener polímeros, como los poliuretanos, y el polibutileno trefalato, que son elastómeros. (Gräfje et al., 2019)

2.2. Tetrahidrofurano: propiedades, aplicaciones...

El tetrahidrofurano (THF), también denominado oxolano [número CAS: 109-99-9], es un compuesto químico orgánico heterocíclico conformado por una cadena de cuatro carbonos, en la que los carbonos de los extremos se encuentran unidos a un mismo grupo éter (-O-). La cadena de carbonos es una cadena de carbonos saturada, que no presenta ningún enlace doble. Debajo de este párrafo encontramos la fórmula y la representación gráfica:

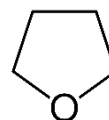
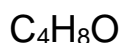


Ilustración 2. Tetrahidrofurano

2.2.1. Propiedades físicas

El THF es un compuesto que tiene un peso molecular de 72.1 gramos por mol. Como se puede apreciar, pesa aproximadamente 18 gramos menos que el BDO, algo que se explicará por la pérdida de una molécula de agua en la reacción de deshidrociclación. En condiciones normales, es un líquido volátil (ver tabla 2), transparente, y con un olor característico parecido al de la acetona. Su carácter polar hace que sea miscible con otros compuestos como el agua, los alcoholes y otros disolventes habituales.

Tabla 2. Propiedades físicas del THF (Müller, 2011)

Parámetro	Valor
Temp. fusión a 1 atm [°C]	-128.5
Temp. ebullición a 1 atm [°C]	66.0
Temp. flash [°C]	-22.0
Temp. crítica [°C]	267.0
Presión crítica [bar]	51.9
Entalpía de vaporización [kJ/mol]	0.031
Entalpía de combustión [kJ/mol]	-2533
Calor específico (compuesto puro) a 50 °C [kJ/kg·K]	1.765
Límites de explosividad en aire a 25 °C [% vol]	1.5-12 ²
Índice de refracción a 20 °C [adim.]	1.4073

2.2.2. Propiedades químicas

El THF es un compuesto reactivo muy valioso porque, de forma análoga al BDO, como explicamos en el apartado 2.1.2, da lugar a muchas reacciones

² Los límites de explosividad superior e inferior marcan el intervalo de concentraciones en volumen en aire para el que un combustible es capaz de arder. En este caso, por debajo de un 1.5 %, hay muy poco combustible para una explosión, y por encima de un 12 %, hay demasiado como para que se pueda producir una propagación del fuego (Soler & Palau, 2008).

diferentes según el tipo de catalizador o las condiciones en las que se produzca la reacción. Algunos ejemplos son los siguientes (Müller, 2011):

- Polimeriza con cationes al abrirse su anillo y proporciona glicoles de longitud variable.
- La separación del anillo da lugar a butadieno, ácido succínico, o ácido adípico según las condiciones, si provocan una deshidratación, oxidación o carboxilación, respectivamente.
- Puede reaccionar con el oxígeno del aire para convertirse en un hidroperóxido.
- Es un buen medio para reacciones de Grignard y puede actuar como ligando en complejos de coordinación.

2.2.3. Procesos de producción

El comienzo del desarrollo del proceso de producción del THF se remonta a los años treinta. El proceso, conocido como la **síntesis de Reppe**, es el proceso más utilizado en Europa y los Estados Unidos, y parte de una reacción entre acetileno y formaldehído, que da lugar a los dioles de cuatro carbonos. El BDO, que se obtiene por reducción de los otros dioles insaturados, se cicla fácilmente perdiendo una molécula de agua, en una catálisis ácida a altas temperaturas (mayores de 100 °C):

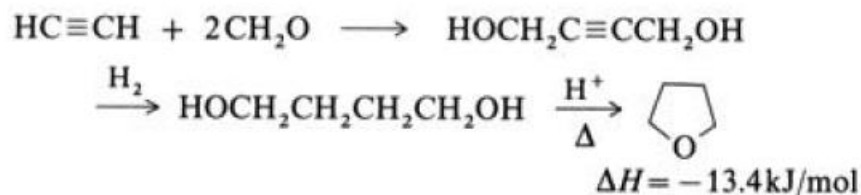


Ilustración 3. Síntesis de Reppe (Müller, 2011)

Este tipo de procesos permite una conversión de casi el 100%, y en condiciones no muy desfavorables (presión atmosférica), y de forma muy selectiva, porque no existen reacciones competitivas de gran magnitud. (Müller, 2011)

Otra opción, también desarrollada en el siglo anterior, es producir THF desde anhídrido maleico, directamente, en una etapa, y también de una forma considerablemente selectiva (más del 90% de selectividad), y con una conversión por paso del reactivo de en torno al 100%, por la producción de otros compuestos como gamma butirrolactona, y n-propanol, entre otros. En este proceso, la secuenciación de las reacciones es la siguiente (Kanetaka et al., 1970):

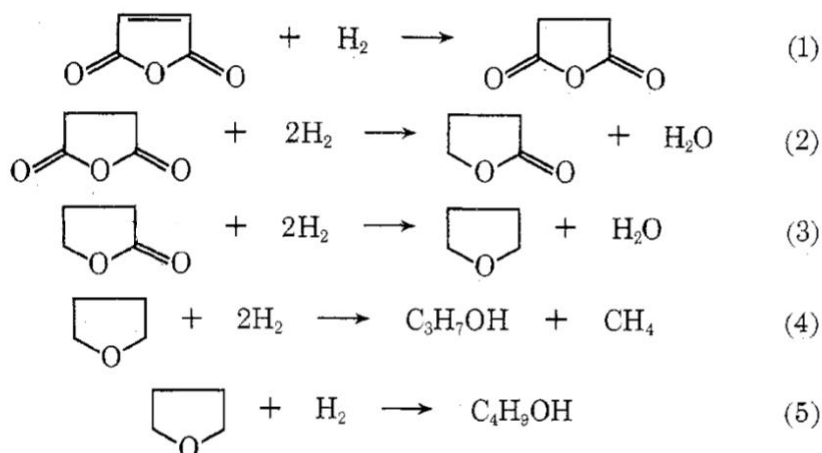


Ilustración 4. Obtención de THF a partir de anhídrido maleico (Kanetaka et al., 1970)

- 1: Hidrogenación del anhídrido maleico a anhídrido succínico.
- 2: Hidrogenación del ácido succínico a gamma butirrolactona.
- 3: Reducción de la gamma butirrolactona para producir THF.
- 4 y 5: Reducción del THF para producir n-propanol y n-butanol, respectivamente.

Otra opción, más cercana a los objetivos de economía circular actuales es la obtención de tetrahidrofurano a partir de furfural, fácilmente aprovechable de residuos agrícolas (Müller, 2011).

2.2.4. Aplicaciones del tetrahidrofurano

Principalmente, el THF se utiliza en la industria como precursor de polímeros: poliuretanos, poliésteres, y otros elastómeros. Por ejemplo, su mercado está creciendo debido a que puede actuar como monómero del politetrametilen éter glicol (PTMEG) (Aghaziarati et al., 2007), o politetrametilen glicerol, también llamado politetrahidrofurano. (Li & Chen, 2019)

El resto de la producción de THF se utiliza como disolvente, en la producción de polímeros como el policloruro de vinilo (PVC), y como medio en reacciones de Grignard y otras reacciones de síntesis orgánica (fármacos) (Li & Chen, 2019). También se usa como materia prima para obtener otros químicos, como, por ejemplo, el ácido succínico, y como fase estacionaria en columnas de cromatografía HPLC (Shinde et al., 2015).

El tratamiento Organosolv es un proceso que utiliza disolventes orgánicos para disolver la lignina y la hemicelulosa de los residuos agrícolas y de la madera. Es un proceso que se lleva a cabo a altas temperaturas y presiones, y con catalizadores o no, para que se produzca el fraccionamiento de ambas, para que luego se les pueda dar el nuevo valor.

En este caso, el THF tiene propiedades como aceptor tanto como donador, y, mezclado con agua, pueden formar un medio de disolución anfifílico y volátil, que permite una recuperación sencilla del solvente, y que favorece la precipitación de la lignina. Sin embargo, la formación de un azeótropo entre ambos, como veremos más adelante, puede incrementar los costes de operación en este proceso Organosolv (Thoresen et al., 2020).

2.3. Interacciones 1,4 BDO, THF, agua: azeótropos, equilibrios LL...

2.3.1. 1,4-butanodiol (BDO) y tetrahidrofurano (THF)

El BDO y el THF son dos compuestos miscibles, es decir, son capaces de formar una sola fase cuando se encuentran en estado líquido. Además, son dos compuestos que no forman azeótropo³ a ninguna presión ni temperatura, como se muestra en los siguientes diagramas:

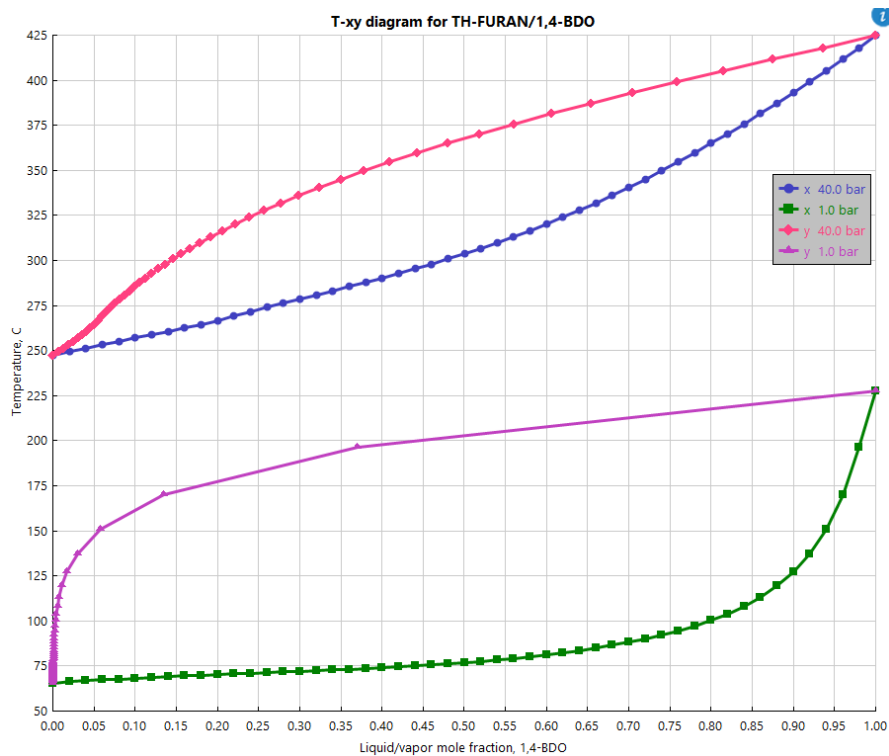


Ilustración 5. Diagrama Txy BDO-THF, a 1 bar y 40 bar (inferior y superior)

Como se puede observar en estos diagramas obtenidos con el programa de simulación ASPEN Plus, y, de acuerdo con la termodinámica, al aumentar la presión, aumenta el punto de ebullición de la mezcla. La mezcla, a 40 bares, es completamente líquida a menos de 250 °C.

En esta mezcla binaria de componentes es considerable la entalpía de mezcla⁴, al mezclarse los dos componentes se desprende energía, ya que hablamos de un proceso espontáneo en la naturaleza. Esto afecta a la temperatura de la mezcla y produce un incremento de temperatura en ella que debe ser tenido en cuenta a la hora de realizar el diseño de los equipos.

³ Un azeótropo es una composición específica de una mezcla binaria que se comporta como un compuesto puro, es decir, la mezcla se evapora completamente a una temperatura de ebullición y no de forma progresiva.

⁴ Es la energía que se desprende al mezclar dos componentes.

Reflejaremos que, a alta presión, la energía libre de Gibbs del proceso de mezclado tiene un valor considerable, y de mucho más valor (negativo, por supuesto, porque es un proceso espontáneo), cuanto mayor es la temperatura de trabajo (ver ilustración 6):

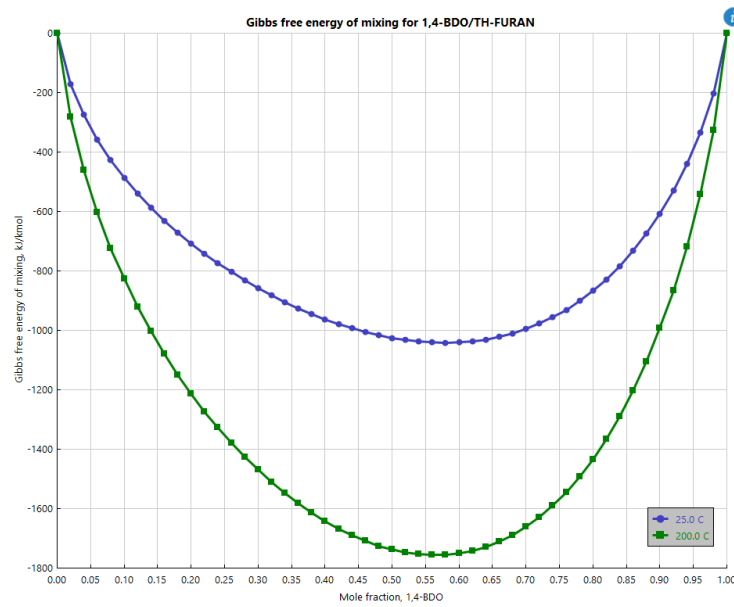


Ilustración 6. Energía libre de Gibbs de la mezcla BDO-THF

2.3.2. Tetrahidrofurano y Agua

El THF y el agua también son dos compuestos miscibles entre sí, pero, a diferencia de la pareja anterior, estos dos sí que forman un azeótropo cuando se mezclan. En el diagrama Txy posterior se ve perfectamente que hay un punto en el que el punto de rocío y el punto de burbuja coinciden y la evaporación ocurre directamente:

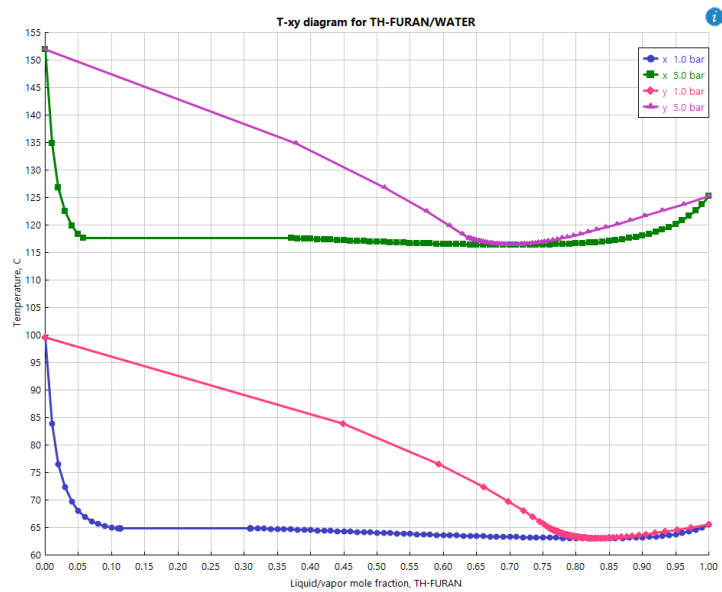


Ilustración 7. Diagrama Txy THF-Agua a 1 bar y 5 bar

Además, en la parte izquierda e inferior de los diagramas se aprecia una línea recta horizontal que indica la presencia de un equilibrio líquido-líquido, que se marcará en el diagrama ternario. Específicamente, las composiciones de los azeótropos a las presiones indicadas en el pie de la imagen son:

Tabla 3. Composición de los azeótropos THF-Agua

Presión [bar]	Temperatura [°C]	THF [%w/w]	Agua [%w/w]	THF [%mol]	Agua [%mol]
1	63.06	0.9517	0.0483	0.8313	0.1687
5	116.38	0.9039	0.0961	0.7016	0.2984

En cuanto a la entalpía de mezcla, también es un proceso espontáneo que desprende calor, pero la energía libre de Gibbs de mezcla es mucho menor:

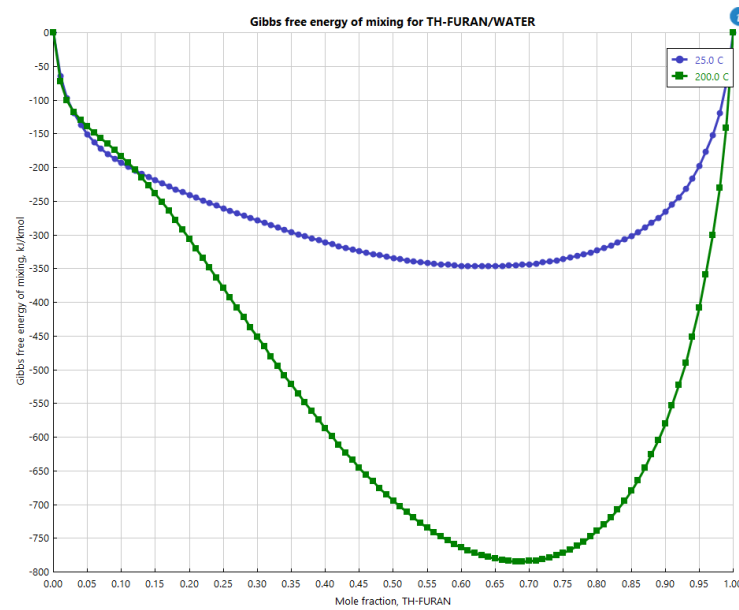


Ilustración 8. Entalpía libre de Gibbs de mezcla

2.3.3. 1,4-butanodiol y Agua:

Para completar esta información sobre la interacción binaria, analizamos también la pareja restante, el BDO y el agua, incluyendo el diagrama Txy a 1 bar y 40 bar:

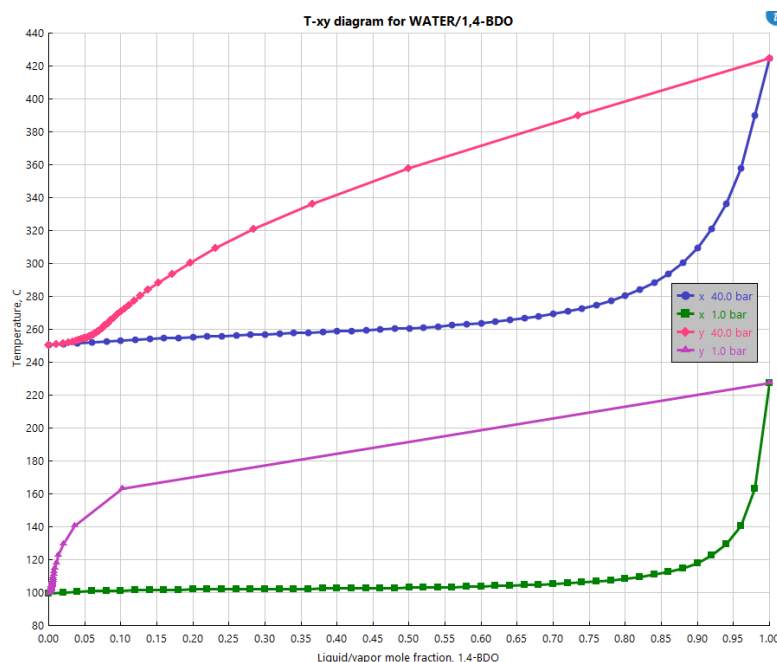


Ilustración 9. Diagrama Txy de la pareja BDO-Agua a 1 bar y 40 bar.

A diferencia de la pareja anterior, e igual que la primera pareja, se aprecia que ambos compuestos son miscibles, y que no forman azeótropo en ninguna

composición. En cuanto a la energía libre de mezcla, el diagrama resultante es el siguiente:

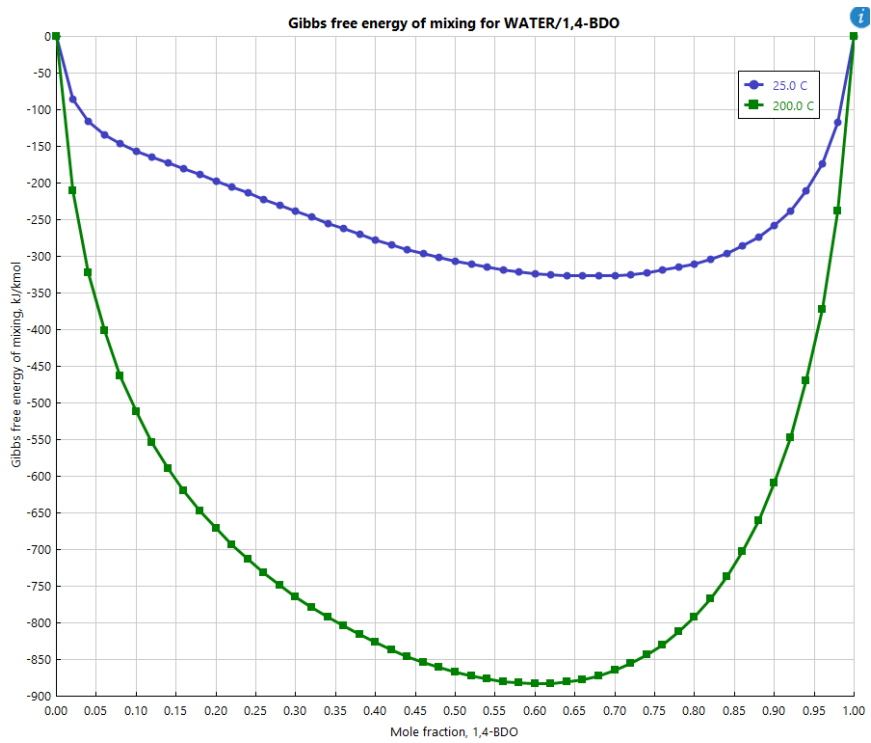


Ilustración 10. Entalpía libre de Gibbs de mezcla.

La mezcla es espontánea, porque se ve en el diagrama que la energía de Gibbs es negativa, y del orden de la de la pareja anterior, menos de 350 kJ/kmol a 25 grados, y menos de 900 kJ/kmol a 200 grados.

2.3.4. Equilibrio ternario

Los tres componentes, THF, BDO y agua, cuando se encuentran en fase líquida, interaccionan de manera que dan lugar a dos fases líquidas, una con mayor contenido en agua (mayor de un 65 %, punto “máximo” en la curva envolvente), y otra con menor contenido de agua. La recopilación de las composiciones por fase se mostrará en los siguientes diagramas ternarios.

A partir de ellos se concluye que, cuanto mayor es la presión, aumenta la temperatura de ebullición calculada en todos los puntos del diagrama (cambia la presión de vapor y los coeficientes de actividad, y a eso se deben las modificaciones), y menor tamaño tiene la zona de la segunda fase líquida pobre en BDO. En las siguientes imágenes se muestra la comparativa entre los diagramas ternarios a diferentes presiones, para que se visualicen estas diferencias explicadas:

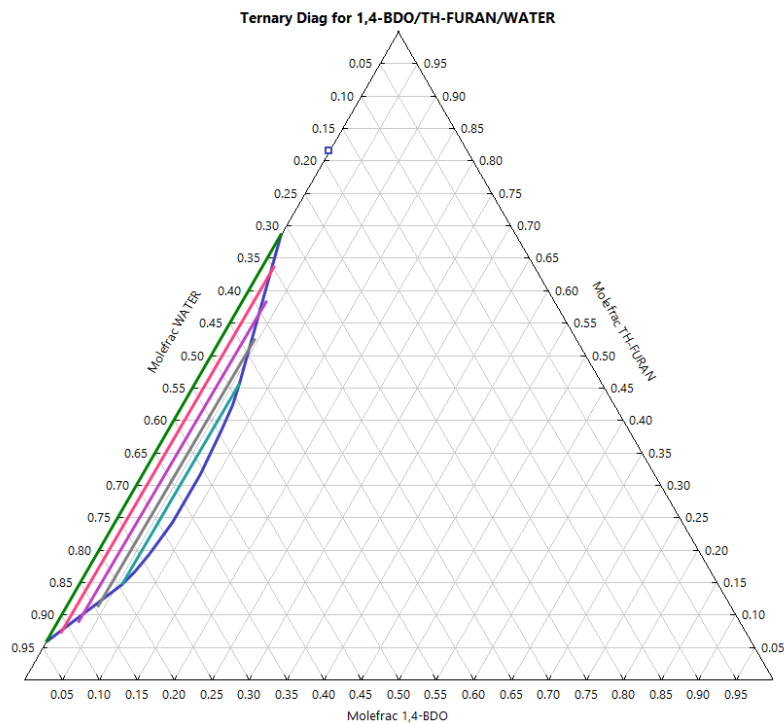


Ilustración 11. Diagrama ternario THF-BDO-Agua (1 bar)

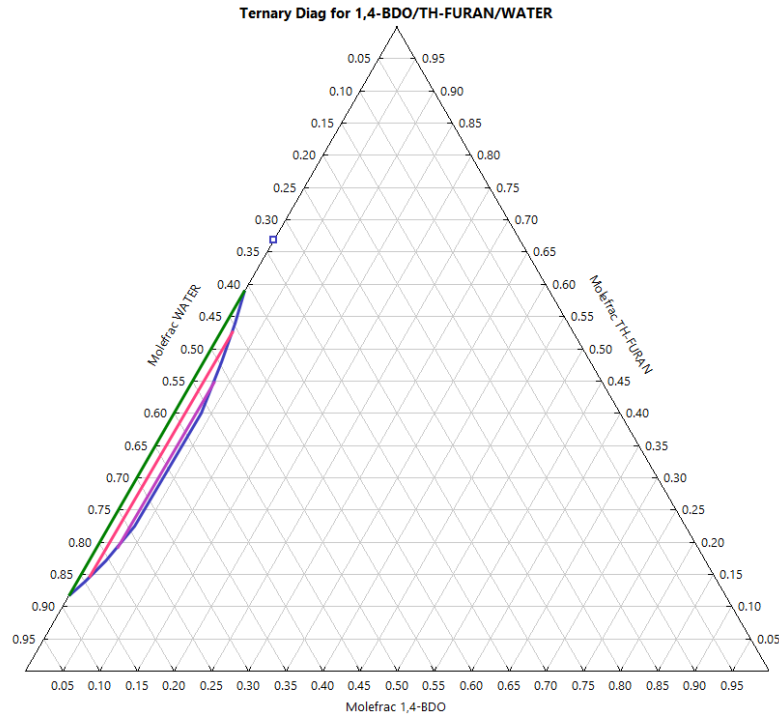


Ilustración 12. Diagrama ternario THF-BDO-Agua (5 bar)

Otro tipo de información que se puede obtener de las mezclas ternarias son los diagramas de residuos. Las curvas de residuos se muestran en diagramas ternarios, y se construyen de la siguiente forma: se pone la mezcla inicial a ebullición y se retira el vapor resultante con la composición del equilibrio, entonces, el siguiente punto de la curva vendrá dado por la composición del líquido en equilibrio con el vapor retirado. Comienzan y terminan en los nodos, que son los compuestos puros (situados en los vértices) y los azeótropos.

Los diagramas de residuos, a las mismas presiones a las que se muestran los diagramas ternarios, son los siguientes:

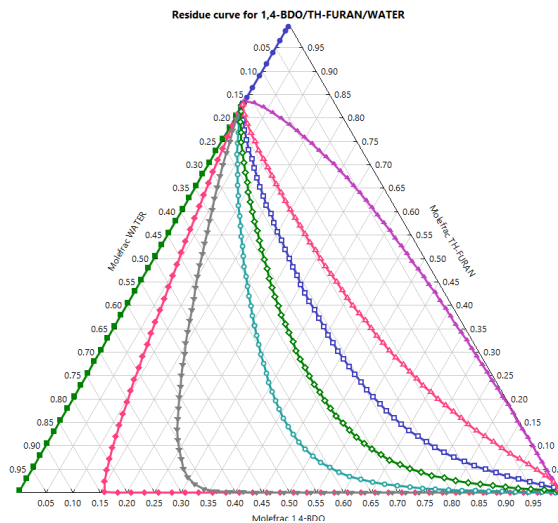


Ilustración 13. Diagrama de residuos de la mezcla ternaria (1 bar)

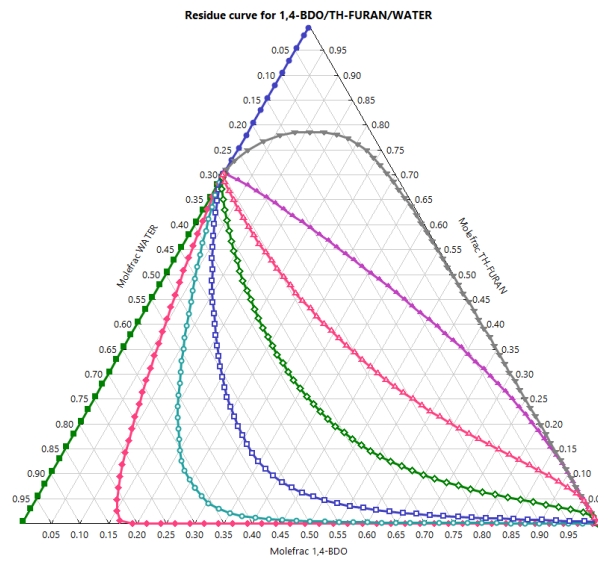


Ilustración 14. Diagrama de residuos de la mezcla ternaria (5 bar)

Los diagramas, como se explica más adelante, tienen una sola zona, así que, en una única columna, sólo se pueden obtener puros el componente más ligero, el azeótropo, y el más pesado, el BDO. Nunca podrían obtenerse puros el agua ni el THF en una única torre. Por el contrario, si el diagrama tuviese dos zonas, dependiendo de donde se situase la mezcla y de cómo se encontrasen situadas las zonas, podría ser que se obtuviesen agua o THF puros. Aun así, no es el caso.

3. Diseño del proceso de producción

3.1. Análisis preliminar: diagrama de bloques inicial

En primer lugar, se procedió a esbozar una idea general que nos proporcionó una visión preliminar del proceso que se diseñó a lo largo del trabajo. Este análisis se dividió en dos secciones: en la primera sección, la sección de reacción, el análisis se centró en la selección del reactor químico (tipo, condiciones...); en la segunda sección, la sección de separación, se eligió el sistema de purificación de THF y recuperación de BDO lo más optimizado posible.

3.1.1. Sección de reacción

Elección del catalizador

A partir de una revisión bibliográfica exhaustiva se obtuvieron numerosas rutas catalíticas, en diferentes condiciones y fases. Los catalizadores homogéneos tienen mayor actividad y selectividad, pero tienen muchos inconvenientes: muchos son tóxicos, corrosivos y, al encontrarse en la misma fase que reactivos y productos, añadirían un coste adicional debido a la etapa, o etapas, de separación necesaria para recuperarlos.

Sin embargo, además de la catálisis homogénea, se han estudiado otras vías que aceleren o faciliten la deshidrociclación del BDO, como la utilización de heteropoliácidos, como el ácido fosfotungstícico, con soporte de alúmina, o de zeolitas, como la ZSM-5 (Shinde et al., 2015).

Wu et al., 2009 estudiaron la deshidrociclación de BDO a THF mediante ácido silicotúngstico con soporte de alúmina. Obtuvieron resultados en los que la conversión y la selectividad del THF eran altas (más del 90%), sin embargo, la temperatura de reacción era también muy alta (400 °C), lo que aumenta los costes operativos del proceso, en cuanto a energía y seguridad.

Limbeck et al., 2001 y Vaidya et al., 2003 utilizaron resinas de intercambio iónico como catalizadores, pero concluyeron que la estabilidad de las resinas frente a las altas temperaturas tampoco era demasiado considerable, y, a mayores, que la eficiencia de este tipo de catalizador es baja. Por ejemplo, la resina Amberlyst-15, que se considera adecuada para muchos tipos de reacciones de síntesis, como es la formación de THF a partir de BDO, daba lugar a un ratio bajo de reacción debido a que el agua que se formaba se introducía en los sitios activos, inhibiendo la reacción y envenenando el catalizador (Shinde et al., 2015).

Las zeolitas, que son catalizadores sólidos con selectividad dependiente de la forma y tamaño de los compuestos, debido a las características de sus poros,

cada vez se están estudiando más por su efectividad en reacciones de deshidratación. En las reacciones catalizadas por zeolitas, hay dos parámetros que influyen en el comportamiento catalítico: la acidez, que al aumentar incrementa la actividad, y los tamaños de poro, que, en el caso de este estudio, es más favorable un tamaño mayor debido a la estructura cíclica del THF.

También existe el problema del envenenamiento por agua, pero no es una inhibición permanente, porque se puede recuperar el catalizador por desorción a altas temperaturas. Otra posibilidad es usar un medio solvente, pero reduciría la posibilidad de reacción y la actividad del catalizador. En consonancia con todo lo anterior, un tipo específico de zeolitas, en concreto la ZSM-5, será elegida para llevar a cabo la reacción catalítica (Aghaziarati et al., 2007).

Finalmente, otra posibilidad, aunque también descartada por el alto coste operacional de las altas temperaturas, más respetuosa con el medio ambiente, es usar agua a alta temperatura ($T > 200$ °C) como medio de reacción. Hunter et al., 2006 llevaron a cabo la transformación de BD en THF, en agua a altas temperaturas y agua supercrítica ($T > 374$ °C), sin catalizador, y llegaron a una buena selectividad, casi del 100%, pero con conversiones menores del 60% (Hunter et al., 2006).

Cinética de reacción

Como se ha especificado en el apartado anterior, para llevar a cabo la reacción se utilizó un tipo de zeolita llamada ZSM-5, cuya fórmula es $\text{Na}_n\text{Al}_n\text{Si}_{96-n}\text{O}_{192}\cdot 16\text{H}_2\text{O}$ ($0 < n < 27$), y que se utiliza principalmente para la isomerización de hidrocarburos. Fue patentada por la compañía Mobil Oil en 1988 (Chu & Lapierre, 1988).

La transformación de BDO en THF fue estudiada por Aghaziarati et al., 2007 utilizando esta zeolita combinada con amonio (NH_4 -ZSM 5) con el objetivo de aumentar la acidez de la zeolita, se cita anteriormente que la actividad catalítica mejora al mejorar la acidez del medio. Aghaziarati et al., 2007 experimentaron esta transformación en diferentes condiciones y determinaron que el modelo cinético se ajustaba a una ecuación cinética del tipo Langmuir-Hinselwood, típica estructura de ecuación en las catálisis heterogéneas. La forma de la ecuación es la siguiente:

$$-r_{BDO} = \frac{k \cdot C_{BDO}}{1 + K_{BDO} \cdot C_{BDO}} \quad (\text{Ec. 1})$$

donde $-r_{BDO}$ = velocidad de consumo del BDO, velocidad de reacción ($\text{mol}/(\text{g}_{\text{cat}}\text{s})$), k = constante de velocidad ($\text{L}/(\text{g}_{\text{cat}}\text{s})$), C_{BDO} = concentración de BDO (mol/L), and K_{BDO} = constante de equilibrio de adsorción (L/mol).

La energía de activación y la entalpía de absorción se calcularon siguiendo ecuaciones de Arrhenius, de la siguiente manera:

$$\ln k = \ln k_0 - \frac{E}{R \cdot T} \quad (\text{Ec. 2})$$

$$\ln K_{BDO} = \ln K_{BDO,0} - \frac{\Delta H_{ad}}{R \cdot T} \quad (\text{Ec. 3})$$

La energía de activación (E) y la entalpía de adsorción (ΔH_{ad}) se obtuvieron representando los logaritmos naturales de k y K_{BDO} frente al inverso de la temperatura, siendo k_0 y $K_{0,BDO}$ las constantes en las condiciones iniciales. Los valores calculados son $E = 190.26 \text{ kJ/mol}$, $k_0 = 1.21 \cdot 10^{18} \text{ mol/(g}_{cat}\text{s)}$, (ΔH_{ad}) = -33.28 kJ/mol , y $K_{0,BDO} = 2 \cdot 10^{-4} \text{ L/mol}$. (Aghaziarati et al., 2007)

La reacción, según la bibliografía, en cuanto al equilibrio termodinámico, es una reacción irreversible, aunque es necesario eliminar el agua porque inhibe al catalizador y reduce la conversión (Shinde et al., 2015). Según Li & Chen, 2019, contrastando la información anterior, la reacción es irreversible a altas temperaturas ($T > 100 \text{ }^\circ\text{C}$). Sin embargo, a temperaturas considerablemente más altas, a las que la reacción se vuelve de primer orden, puede volverse reversible:

$$K_{BDO} \cdot C_{BDO} \approx 0; -r_{BDO} = k \cdot C_{BDO} \quad (\text{Ec. 4})$$

Pero esta no es una ecuación de rigurosa veracidad. Según estudios de Hunter et al., 2006, cuando la temperatura aumenta por encima de los 200 grados la reacción se vuelve reversible, por lo que, para que la ecuación de la velocidad de reacción sea correcta es necesario seguir una serie de medidas correctivas. Por ejemplo, en la siguiente imagen podemos apreciar cómo, en agua a alta temperatura como medio de reacción, se observa que existe la reversibilidad descrita:

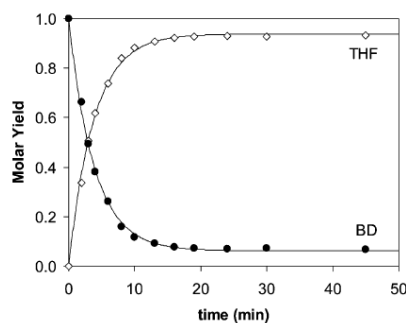


Ilustración 15. Rendimiento celular THF y BDO a 350 grados (Vaidya et al.,2003)

Al ser la reacción irreversible, a media temperatura, y tener una selectividad de aproximadamente 100%, por no haberse encontrado otras reacciones competitivas en la literatura, se consideró que la configuración del sistema de

reacción debía centrarse en la maximización de la conversión. Según la forma de la ecuación, el término del numerador es quien marca el avance de la reacción, porque:

$$k \cdot C_{BDO} \gg 1 + K_{BDO} \cdot C_{BDO} \quad (\text{Ec. 5})$$

Por esta proporcionalidad, para que la velocidad de reacción sea alta y la mayor conversión pueda alcanzarse en el menor tiempo de residencia (τ) posible, lo que daría lugar a un reactor más pequeño y reduciría los costes de equipo, es preferible utilizar reactores que permitan un modelo de flujo de tipo pistón (Plug Flow), como los lechos porosos o las sucesiones de reactores de tanque agitado, porque mantendrían la concentración de reactivo más alta a lo largo de τ , como se demuestra en las imágenes inferiores:

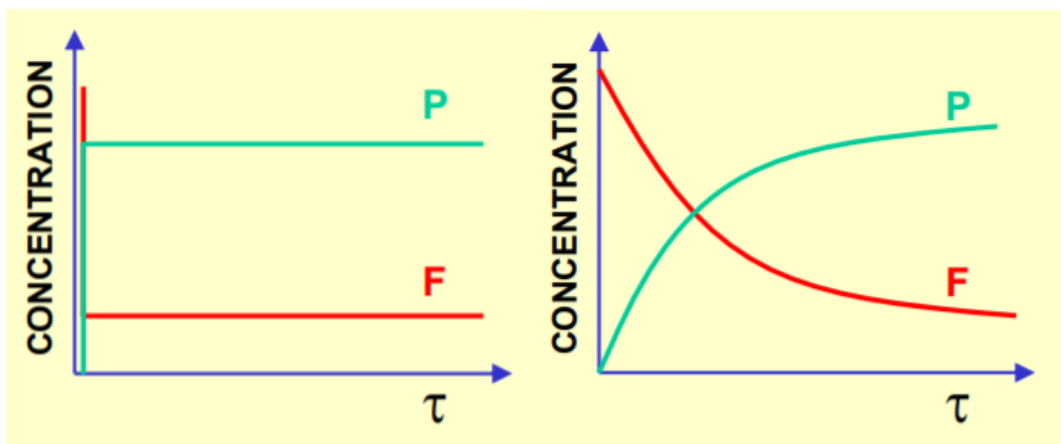


Ilustración 16. Perfil de concentración (Flujo de Mezcla Perfecta y Flujo de Pistón)

Condiciones de reacción

Si la reacción es una reacción simple y no hay reacciones competitivas cuya selectividad pueda aumentar al incrementar la temperatura, siempre es una buena idea mantener la temperatura de la mezcla de reacción lo más alta posible, porque las constantes de reacción aumentan con la temperatura y, con ellas, la velocidad. La reacción es endotérmica, según la literatura (Aghaziarati et al., 2007) y según confirmó el programa de simulación.

Aghaziarati et al., 2007, estudiaron la influencia de la temperatura en este mismo proceso, catalizado con la misma zeolita, en un reactor batch, y llegaron a la conclusión de que, a temperaturas más bajas, (150 °C) la conversión obtenida fue muy baja en un tiempo de 3 horas. En otro experimento observaron que una conversión del 80% se alcanza en la mitad de tiempo (1 hora) a 200 grados, que a 180 grados. Por eso, de acuerdo con lo expresado en el párrafo anterior, manifestaron que es adecuado subir la temperatura porque no tiene efectos negativos en la conversión, sino positivos. Sin embargo, también concluyeron que, por razones operacionales, no es conveniente llevar a cabo la reacción a más de 200 °C.

En los experimentos de otros investigadores, reforzando esta idea, como Li & Chen, 2019, o Shinde et al., 2015, también crece la conversión de BDO al aumentar la temperatura de reacción. Shinde et al., 2015, corroboraron esta posibilidad, pero constatando que las resinas que usaron tienen limitaciones en cuanto a estabilidad térmica. Li & Chen, 2019, por su parte, utilizaron otra zeolita, ZA13, y observaron los siguientes comportamientos:

Tabla 4. Conversión frente a temperatura (Li & Chen, 2019)

Temperatura	Conversión alcanzada en 3 horas de reacción
210 °C	67.8 %
220 °C	81.5 %
230 °C	88.3 %

Al ser la reacción endotérmica, para mantener la mezcla de reacción a alta temperatura, no es suficiente con introducirla en el reactor a la temperatura adecuada; por las pérdidas de calor al ambiente y por la endotermicidad de la reacción la temperatura disminuye y perdemos eficacia en la reacción.

Por esto, se decidió diseñar un sistema de reacción en el que haya una superficie a través de la cual una fuente de calor se lo aportase al medio. Por eso, para favorecer la transferencia de calor se elige un sistema de reacción multitubular frente a sistemas de tanques batch o continuos en serie, o lechos porosos simples, porque la superficie de transmisión, A , es mayor.

Se decidió trabajar a unas temperaturas cercanas a los 200 °C, así que, como fluido caloportador podemos utilizar vapor de agua, la temperatura es adecuada, no es lo suficientemente alta para necesitar que los fluidos caloportadores sean aceites térmicos ni gases de combustión procedentes de ninguna caldera de combustión.

La presión no es una condición crítica, apenas tiene efecto en la conversión de BDO. Sin embargo, es una condición de operación que hay que tener en cuenta. Se optó por trabajar en fase líquida, porque los costes de bombeo de un líquido son mucho menores y la facilidad de canalización es mucho más sencilla, así que la presión debía ser alta, porque el THF es un compuesto volátil, y se tenía que evitar su vaporización.

Se ha valorado anteriormente la utilización de disolventes para evitar que el agua ocupe los centros activos del catalizador e inhiba la reacción, pero la realidad es que cualquier disolvente que se utilice, lo que hará será reducir la concentración de BDO y hará que la reacción transcurra más lentamente y el τ se vea incrementado.

Aghaziarati et al., 2007, estudiaron que la velocidad inicial, a bajas concentraciones de BDO, aumenta linealmente con la concentración, pero a altas concentraciones, se mantiene constante. Vaidya et al., 2003, además, explicaron que la utilización de 1,4-dioxano reprime menos la reacción porque, otros disolventes, como agua o etanol, presentan grupos hidroxilo que son los que pueden adsorberse a los centros catalíticos e inhibir la reacción. La presencia de agua influye en la velocidad de reacción, de forma inversamente proporcional, cuando aumenta la concentración de agua, disminuye la velocidad.

Composición de la corriente a la salida del reactor

La reacción de deshidrociclación del BDO puede llegar a altas conversiones. En el proceso patentado por Fengliang et al, 2017, que se ha llevado a cabo con otro catalizador, se expresa que la conversión del reactivo es muy grande y la formación de subproductos es muy pequeña. (Fengliang et al., 2017)

En destilaciones extractivas, existe la posibilidad de que la conversión de BDO sea de aproximadamente el 90%, y el 10% restante se trate como un residuo al que separar de las impurezas (Cheng et al., 2018) .

En reacciones en lechos porosos, se han realizado también ensayos de reacciones a distintas temperaturas, y, de estas reacciones, se ha comprobado la conversión (creciente con la temperatura, como se especificó en páginas anteriores), y la selectividad, que es muy alta y nos permite desprestigiar reacciones secundarias.

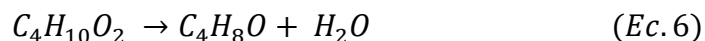
Tabla 5. Conversión y selectividad para diferentes temperaturas (Kamiyama & Matano, 1995)

Número de ensayo	Temperatura [°C]	Conversión [%]	Selectividad [%]
Ensayo 1	120	42.0	99.6
Ensayo 2	140	80.0	99.4
Ensayo 3	160	93.1	99.3
Ensayo 4	180	96.6	99.3
Ensayo 5	200	98.8	93.4

En un reactor de Plug Flow, la conversión de la reacción es dependiente directamente de la cantidad de catalizador, y, por tanto, de la longitud del reactor. Durante el análisis preliminar, se decidió diseñar un reactor de una longitud tal que la conversión del BDO alcanzase el 98%, siguiendo la tabla anterior, para que se alcance un compromiso entre la pérdida de selectividad y el aumento de la conversión.

A partir de este valor, antes de incluir las recirculaciones en los cálculos, y, suponiendo que la corriente de reactivo entra directamente al reactor, sin mezclarse con ninguna de ellas, se calculó una aproximación de la composición del efluente que sale del reactor, con el objetivo de decidir cómo será la ruta de separación de los compuestos.

La estequiometría de la reacción, si recordamos, y, como se ve en la ecuación inmediatamente inferior, es (-1 : 1 : 1).⁵



Se definió un suministro de reactivo arbitrario, compuesto en un 99.7% en volumen de BDO, un 0.1 % de 1-propanol (PrOH) y un 0.2% de metanol (MeOH). A partir de estos tres valores, la estequiometría y la conversión, se realizó el cálculo de la composición del efluente del reactor, tomando como base un mol de reactivo:

Tabla 6. Composición de la corriente de salida

⁶	BDO	THF	Water	MeOH	PrOH
Entrada (1 mol)	0.9970	--	--	0.0020	0.0010
Reacción	-0.9800	0.9800	0.9800	--	--
Salida	0.0170	0.9800	0.9800	0.0020	0.0010
Composición salida	0.0086	0.4957	0.4957	0.0010	0.0005

Se tomó como aproximación inicial, a la hora de elegir la ruta de separación, esa composición.

3.1.2. Sección de separación

Para decidir la ruta de separación de los compuestos a partir del valor de la composición obtenido en las líneas anteriores, se evaluaron los mapas de residuos de la mezcla, ilustraciones 13 y 14, y se identificaron, en primer lugar, los nodos del diagrama (que son los compuestos puros y el azeótropo que forman el agua y el THF, que, como se explica anteriormente, en el apartado de introducción, se desplaza en el lado izquierdo del triángulo. Para definir la secuencia de separación, se obvió la presencia de los alcoholes ligeros y se eligió la ruta más adecuada para la separación de los tres componentes mayoritarios: agua, BDO y THF.

⁵ La estequiometría se refiere a (BDO : THF : Agua); el signo negativo indica que el compuesto es un reactivo, y los signos positivos se refieren a productos.

⁶ Las composiciones reflejadas en la tabla 6 son composiciones en valores de fracción molar.

Se analizó la composición de la mezcla y se observó que se encontraba en la zona de equilibrio líquido-líquido en el diagrama ternario, pero realmente se decidió no aprovechar esa escisión de las dos fases líquidas porque de ninguna manera podría resultar en una separación efectiva. Analizando las rectas de reparto se vio que una escisión de la mezcla llevaría a una corriente principalmente acuosa, de casi un 95 % en volumen de agua, y otra, rica en THF, pero con una pureza de entre el 65 y el 70 % en volumen. De esta forma, se descartó un sistema de extracción y se optó por un sistema de torres de rectificación, con el que, como se mostrará seguidamente, se obtienen unas eficiencias teóricas mucho mayores.

Para diseñar de un primer vistazo una secuencia de torres de destilación, la herramienta que se utilizó fueron los diagramas de residuos. En el diagrama de residuos solamente hay una zona que se diferencie de forma notable, por lo que no hubo restricciones a las escisiones de una mezcla en dos corrientes en todo el diagrama. La metodología es la siguiente: se define el punto de mezcla en el diagrama y se traza una recta, con un extremo, preferiblemente, en uno de los nodos, el más ligero o el más pesado (se decide más adelante) y que pase por el punto de mezcla (al que se llamó P1). La recta se prolonga hasta cortar con un lado del triángulo, preferiblemente también, aunque puede no llegar a cruzarse. Los extremos de la recta marcan la composición de las corrientes que abandonan la torre. En la página siguiente se muestra con imágenes el procedimiento seguido para determinar el número de torres.

Según el libro Robyn-Smith, hay dos secuencias que se pueden seguir si se requiere un sistema de separación de varios componentes de una corriente. La secuencia directa consiste en separar el compuesto, o nodo del diagrama, más volátil, por las cabezas de la torre, como destilado, del resto de componentes más pesados, que se retiraran de la torre por las colas. La otra opción es la contraria, la secuencia inversa, que consiste en separar por las colas el componente más pesado y retirar en el destilado el resto de los componentes.

Para recordar la composición de los nodos y sus temperaturas de ebullición, se vuelve a mostrar la tabla 3, con las composiciones y temperaturas del azeótropo THF-Agua, a continuación, y en la tabla 7 se muestran los puntos de ebullición de los compuestos puros a 1 y 5 bar:

Presión [bar]	Temperatura [°C]	THF [%w/w]	Agua [%w/w]	THF [%mol]	Agua [%mol]
1	63.06	0.9517	0.0483	0.8313	0.1687
5	116.38	0.9039	0.0961	0.7016	0.2984

Tabla 7. Puntos de ebullición de los compuestos puros

Presión [bar]	Agua T. eb. [°C]	THF T. eb. [°C]	BDO T. eb. [°C]
1	99.65	65.57	227.63
5	151.92	125.27	293.35

Con estos datos, queda claro que, en ambas condiciones, el BDO es el compuesto menos volátil, y el azeótropo THF-Agua, el más volátil.

En el libro “Chemical Process Design and Integration” se sugieren unas normas heurísticas que se siguieron a la hora de decidir cuál era la ruta óptima para separar los tres componentes. Son las siguientes:

- Favorecer siempre la secuencia directa⁷.
- Separar primero el componente mayoritario. En este caso, en la mezcla hay la misma cantidad de agua y de tetrahidrofurano, y la cantidad de BDO es mucho menor, lo que nos sugiere también una secuencia directa.
- Realizar la separación más difícil al final del proceso. En este caso, contrariamente al anterior, se aconseja seguir una secuencia inversa, pues la separación más sencilla es la separación del 1,4-butanodiol, porque tiene el punto de ebullición más alto y con mayor diferencia sobre el resto.
- Favorecer la separación equimolar. En este caso, también la secuencia directa es la mejor opción, como se verá en el diagrama ternario que se muestra en la ilustración 12. Se observa que los dos brazos de la recta (el brazo que une P2 con P1 y el que une P1 y el azeótropo) tienen una longitud del mismo orden.⁸

En consonancia con estas indicaciones se optó por seguir una secuencia directa. De las cuatro pautas indicadas en el libro de Robin Smith, tres de ellas sugieren utilizarla, mientras que únicamente una de ellas indica lo contrario.

En las ilustraciones sucesivas se muestra cómo se separan las corrientes en las distintas unidades. El sistema de separación constará de tres unidades:

- En la primera unidad, por cabezas se decidió separar el azeótropo (AZ1), a baja presión, ya que luego, al presurizar el sistema, el propio azeótropo se desplaza y se vuelve más rico en agua, dejando al THF más libre. Se

⁷ La secuencia directa significa que se separa el compuesto más volátil del resto, por las cabezas de la columna.

⁸ Si se uniese P1 con el BDO (esquina inferior derecha) y se prolongase hasta cortar con el lado del triángulo, el brazo P1-BDO tendría una longitud más de 10 veces más grande que el otro brazo.

justificó esta decisión mediante los diagramas posteriores. (Ver ilustración 17).

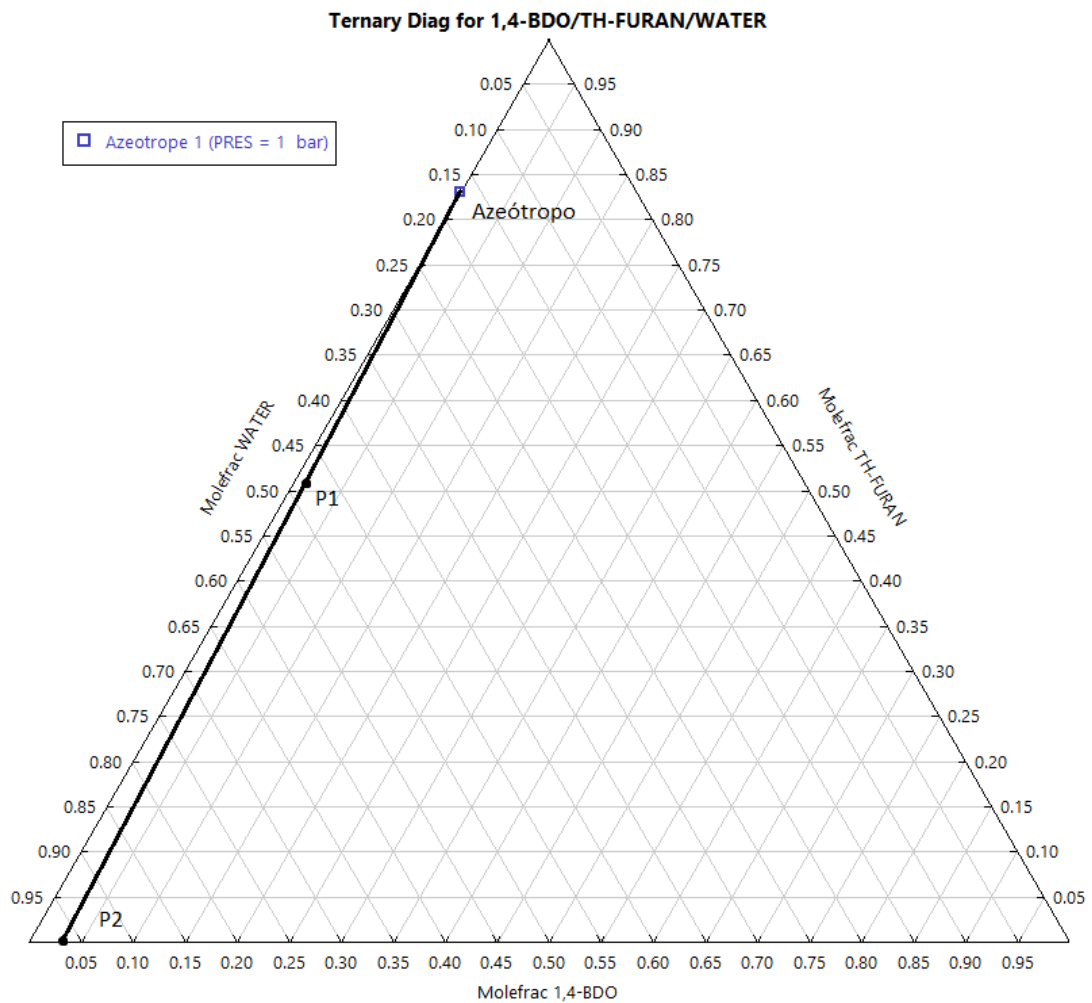


Ilustración 17. Secuencia de separación I

- El azeótropo que sale por las cabezas de la torre primaria se quiso presurizar hasta 5 bares (presión suficiente para que el azeótropo se desplace tanto para que se pueda separar sin problemas), dejando un decremento de más de un 10 % en fracción molar.

Además, con esta presurización se consigue que la diferencia entre los puntos de ebullición de THF y azeótropo aumente y se facilite la separación. La utilización de dos torres de destilación a diferente presión es una práctica habitual en la industria química, por ejemplo, en la rotura del azeótropo que forman el agua y el etanol (Tavan & Hosseini, 2013).

En este caso, de la torre de destilación, se obtiene en el destilado el azeótropo a alta presión (AZ5), al que se le baja la presión y al que se

envía de nuevo a la torre primaria, introduciéndose en la etapa más adecuada, para evitar las pérdidas de THF. Esa corriente de recirculación debe ser purgada periódicamente para evitar acumulaciones de inertes que pudiesen entrar al proceso de forma indeseada.

Aunque no es lo más adecuado, por la posible presencia de impurezas pesadas, el proceso se diseñó de manera que el producto purificado, en este caso el THF, se obtenga por las colas de la segunda columna.

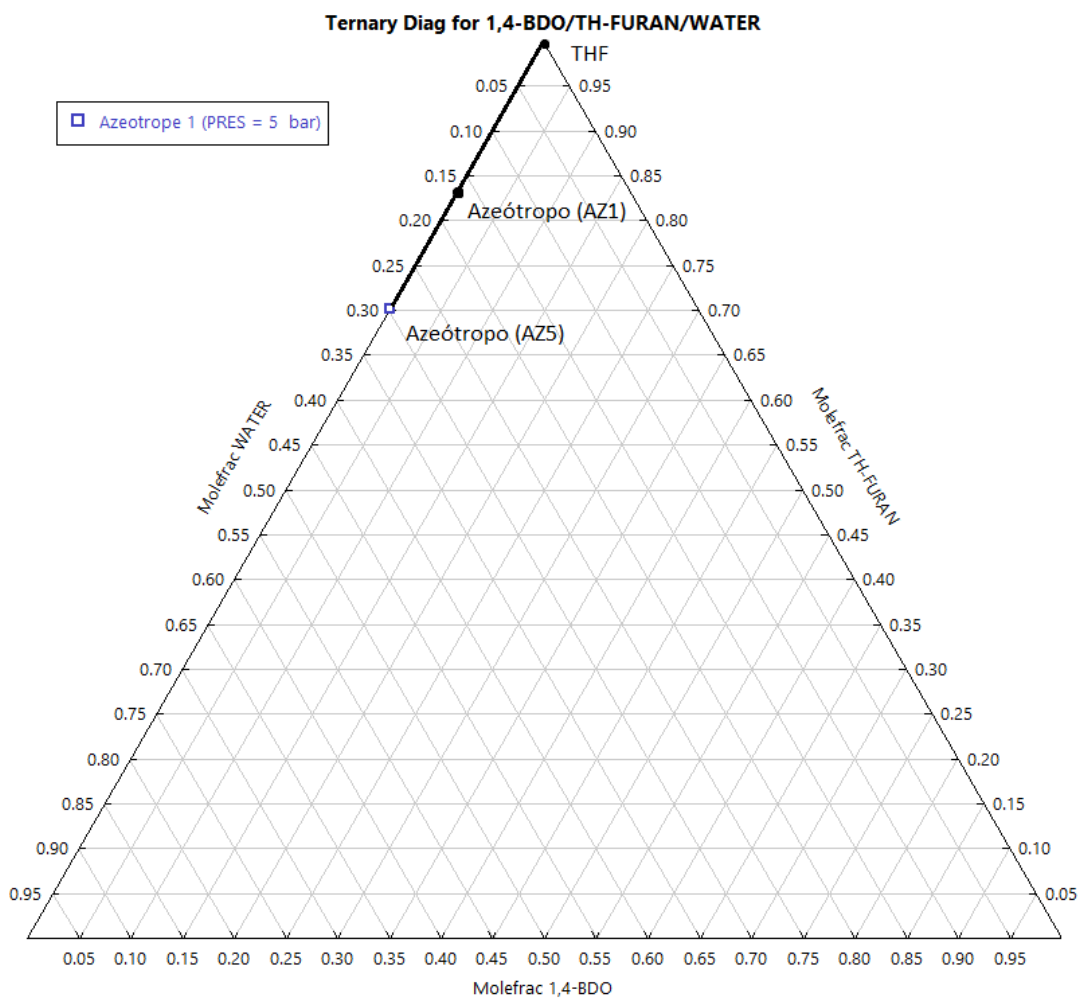


Ilustración 18. Secuencia de separación II

- En la siguiente ilustración, ilustración 19, se muestra cómo, en la tercera torre de destilación, se separan en la torre, el agua por las cabezas, y el BDO por la corriente de colas. El reactivo (BDO) se recircula al principio del proceso, para aumentar el valor de la conversión global y aproximarlo en la medida de lo posible al 100%, lo que conllevaría

menor cantidad de pérdidas de reactivo y, por tanto, menos pérdidas económicas.

De igual manera, la recirculación también debe estar provista de un sistema purgador, para evitar acumulaciones indeseadas.

Este sistema permite obtener los tres compuestos, separados, y de forma prácticamente pura, como se aprecia en las ilustraciones. El diseño de las torres que se realizó, con la ayuda de ASPEN Plus, se muestra en los apartados del proyecto que suceden al análisis preliminar. Se valoró técnica y económicamente la utilización de un sistema flash que sustituyese a la tercera torre de destilación, pero se rechazó esa alternativa por cuestiones que se explicarán en el punto 3.5.1.

Para resumir el análisis de forma visual, se construyó un diagrama de bloques que se refleja en el presente documento en el Anexo I. Diagramas de proceso.

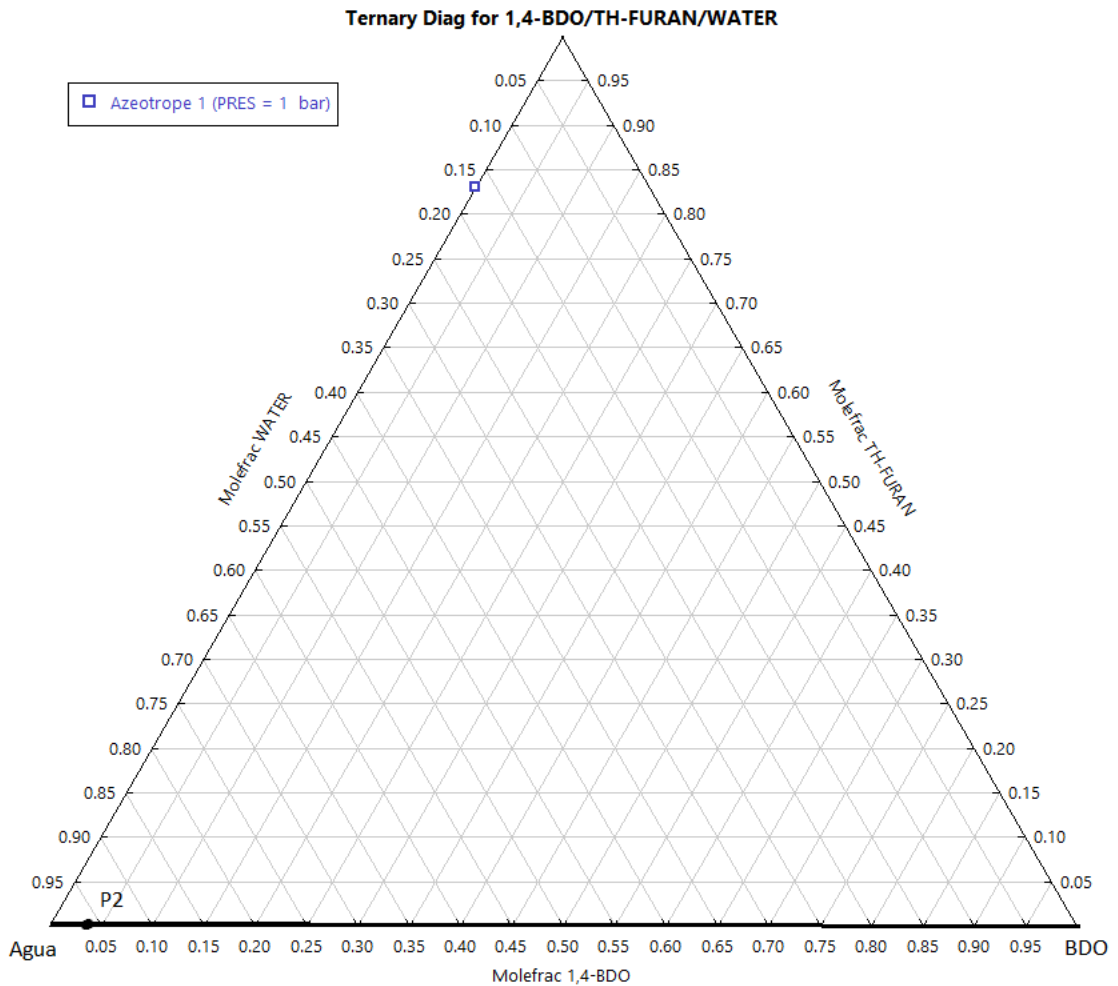


Ilustración 19. Secuencia de separación III

3.2. Diagramas de proceso: PFD y P&ID

En el Anexo I. Diagramas de proceso, se incluyeron los planos de la planta. En el primer punto, como se especifica en el apartado anterior, se enseña el diagrama de bloques del proceso, una primera visualización rápida del diseño de la planta que se quiere realizar, muy conceptual y para que sea posible analizar el proceso y comprenderlo para lectores que no se especialicen en el ámbito de la ingeniería.

3.2.1. Diagrama de flujo de proceso (PFD)

El diagrama de flujo de proceso (PFD – Process Flow Diagram) es una representación del proceso con un nivel de detalle un poco mayor que el que tiene el diagrama de bloques. En él, se representaron los equipos y sistemas principales necesarios para llevar a cabo el proceso que se diseñó, así como la definición de las corrientes y un pequeño resumen de los datos que se registrarán de ellas en el balance de materia que está en el Anexo II. Tabla de corrientes.

Simbología y nomenclatura

El diagrama que se construyó se dividió en tres páginas. La primera página es en la que se incluyeron la simbología y la nomenclatura utilizadas en el resto de las páginas. En la parte superior de ella se muestran todos los equipos que se definieron para su funcionamiento a lo largo del proceso: columnas, cambiadores de calor...

En la parte inferior hay dos tablas: a la izquierda de la pantalla se muestra la nomenclatura de cada uno de los equipos, es decir, la letra o letras que hacen referencia a ellos. Para nombrar los equipos, como la planta no va a tener la suficiente envergadura como para definir varias unidades, definimos una única unidad, la unidad 100, que abarcó la totalidad de la planta. Para nombrar los equipos, se coloca la letra correspondiente, y detrás, separada con un guion, la unidad a la que pertenecen y, finalmente, la posición que ocupan en la línea. Por ejemplo, T-102 es la segunda (2) columna (T) de destilación que se encuentra en la unidad 100.

En la tabla contigua se muestra cómo se nombran los servicios auxiliares energéticos, que son corrientes, en este caso de agua y vapor, que aportan o retiran energía al proceso y que son necesarios para su consecución, pero sin mezclarse nunca con las corrientes de proceso. También se refleja en esa tabla la nomenclatura de los dispositivos de control más genéricos, que también son necesarios para que el proceso funcione correctamente.

Sección de reacción

En la segunda página del diagrama se representó la forma en la que se lleva a cabo la reacción y la preparación de la mezcla antes de la entrada al reactor de lecho fijo. El proceso sigue la secuencia siguiente. La corriente de materia prima se mezcla con la corriente recirculada desde la destilación ternaria en un depósito agitado V-101, que, adicionalmente, se utilizará como etapa de homogeneización, para evitar perturbaciones que puedan entrar al proceso en la corriente de alimentación fresca.

Es necesario presurizar el reactivo lo máximo posible. Al ser una reacción simple e irreversible, el aumento de la temperatura provoca un aumento de la cinética y, para aumentar la temperatura sin cambios de fase, es necesario aumentar la presión.

Se decidió presurizar la corriente hasta 40 bar, no es posible añadirle más presión, porque la presión crítica del BDO son 41.2 bar, y se optó por guardar ese margen de 1.2 bar para evitar ebulliciones no deseadas, pues el sistema no está diseñado para fases gaseosas y podría tener problemas de seguridad, además de que afectaría por completo al proceso. El sistema de presión P-101 A/B se compone de tres bombas en serie. Para comprobar la posibilidad de que el sistema de bombeo fuese suficiente se utilizó el catálogo de la empresa hidráulica Alsina S.A.

Se revisó el catálogo y se comprobó la máxima altura que podría proporcionar una bomba a un caudal como el que recorre la línea (8125 l/h). La altura de la bomba, en metros de columna de agua, son casi 400 metros (397.8 m), por lo que se comprobaron varios modelos para ver si dos bombas (más de 200 metros cada una) o tres bombas (más de 136 metros cada una) eran suficientes para llegar a las necesidades.

Simplemente se comprobó la viabilidad técnica, es decir, la existencia de los modelos, pero no se realizó una valoración económica. Finalmente, como se muestra en la página 2 del P&ID, se colocaron 3 bombas en serie para alcanzar los 40 bar de presión. Para decidir cuál de las dos opciones es mejor, se debería contactar con la empresa de bombas y pedir un presupuesto que incluyese costes de instalación y operación de ambas opciones y evaluar el menor coste.

Una vez presurizada la línea se envía al calentador HT-101, donde se utilizó vapor saturado a alta presión (HPS - 400 psia, valores por defecto del software de simulación), para calentar el BDO hasta 185 grados Celsius, temperatura elevada, a menos de 200 °C, de acuerdo con lo especificado en el análisis preliminar, adecuada para alcanzar conversiones del 98% y con cierta seguridad que evite la mezcla ebulle, tanto en HT-101 como en el reactor multitubular R-101, donde se aporta más calor.

El reactor de lecho poroso multitubular (R-101) se seleccionó en el apartado anterior. Es un reactor que consta de 137 tubos de 3 centímetros de diámetro y 2.88 metros de longitud. Los tubos están rellenos de las partículas de zeolita ZSM-5, esféricas y de 3 mm de espesor, y por el exterior de la carcasa circula vapor a 12 bar que se encarga de mantener la temperatura de reacción constante, ya que la reacción es endotérmica y la mezcla pierde temperatura a lo largo del reactor de flujo de pistón. En el punto de diseño de equipos se encuentra un apartado específico que se refiere al reactor.

Sección de separación

El efluente que sale del reactor se expande en una válvula de control hasta presión ambiente, que, en el caso de estudio, se consideró 1 bar. Al expandirse, la corriente se evapora parcialmente, hasta un título de vapor del 48%. Debido a esto, cuando se valoró la opción de utilizar una turbina, se rechazó. Debería colocarse una turbina hidráulica para expandir el líquido, y retirar energía mecánica, hasta el estado de líquido saturado, y después, una válvula de control. En principio la retirada de energía no compensa la instalación de la turbina, pero en siguientes revisiones del proyecto debería estudiarse el cambio en los costes de operación e instalación, y los beneficios económicos de la retirada de energía.

Expandido, el efluente alimenta la torre de destilación primaria T-101 en la etapa 21, de las 23 de las que se compone. El diseño de las especificaciones (número de etapas, relación de reflujo...) de las torres se realizó atendiendo a criterios económicos, principalmente, y para satisfacer el balance de materia óptimo para el proceso. De igual manera que para R-101, en el apartado 3.3 de diseño de equipos se encuentra un ejemplo de diseño y especificaciones de una columna (en este caso la T-102).

El desarrollo de la operación, como operación unitaria, de la destilación es el siguiente: de la torre T-101, sale como destilado una corriente con la composición del azeótropo a 1 bar, se condensa en C-101, intercambiando calor con agua de refrigeración, para acumularse en V-102. Se bombea (P-102 A/B) el destilado para sacarlo del tanque de acumulación, y, con una válvula de control, de regula cuánto reflujo se envía de nuevo a la torre para que funcione y se produzca la separación de forma efectiva, y cuánto caudal de agua. En las colas, en el rechazo de la torre, que es la mayor parte del agua formada en la reacción, y el reactivo sobrante, el 2% de BDO que no se consume, salen como líquido por el fondo de la torre y llegan al calderín RB-101.

El calderín es de tipo kettle, en el que la ebullición se produce en una piscina de líquido, sobre unos tubos que se encuentran sumergidos en ella. El vapor que se envía de vuelta a la torre se va por una conducción de la parte superior,

atravesando un separador de gotas que retira todo el líquido que pudiese ser arrastrado de nuevo hacia la columna. La temperatura de la columna y, por tanto, la cantidad de vapor que se puede producir en el ebullidor, se controlan con vapor saturado a media presión (100 psia) que circula por el interior de los tubos sumergidos y se condensa dentro de ellos. La parte que no se evapora sale por la superficie inferior del calderín, y se envía a la destilación ternaria.

La corriente de azeótropo que sale por las cabezas se lleva a un tanque pulmón que limpie las perturbaciones posibles de la etapa de la torre, y que se coloca previo paso a una bomba centrífuga para evitar que no le llegue fluido y pueda averiarse. En la bomba se le proporciona presión a la corriente, 5 bar, suficiente para desplazar el azeótropo a un THF un 15% menos puro, y se le dirige hacia un intercambiador de calor, donde aumenta su temperatura, también a base de MPS, hasta 120°C, que es una temperatura intermedia entre la temperatura de ebullición del THF y de AZ5 a 5 bar.

El funcionamiento de la destilación secundaria es análogo a la destilación primaria. Se alimenta la torre T-102 en la etapa 10, de 20 que tiene. Por cabezas, la condensación se produce en C-102, se acumula el condensado en V-104 y P-104 A/B lo impulsa bien hacia la torre o bien lo recircula de nuevo hasta T-101, donde entra en la etapa 18, después de expandirse en una válvula de control. Del Kettle RB-102, se obtiene el THF con la pureza deseada. Se expande hasta presión ambiente en otra válvula y se enfría utilizando CW en el intercambiador CL-101.

A la columna T-103 de la destilación ternaria llega la corriente de colas que sale de RB-101. Se alimenta en la etapa 10, de 11. Por la parte superior de la torre una corriente de, en su mayoría, agua, que se condensa en C-103 y se bombea en P-105 A/B a la línea de reflujo y al enfriador CL-102, donde el agua residual se enfría con CW. Por la parte inferior, de RB-103 se recupera el BDO que no reaccionó y se recircula a V-101, donde se mezcla con la alimentación fresca. Se valoró la posibilidad de utilizar un separador flash binario, en el apartado 3.5.1 de aspectos económicos se justificó no elegir esa posibilidad.

Repitiendo lo citado, el diagrama de flujo se refleja en el punto dos del Anexo I. Diagramas de proceso.

3.2.2. Diagrama de líneas e instrumentación

Este último diagrama, tercer punto del Anexo I. Diagramas de proceso, es un diagrama más extenso y con mucho mayor nivel de detalle. El camino del proceso es el mismo, pero, a diferencia del PFD, el P&ID es un diagrama en el que no se resume nada. En él se marcaron todos los instrumentos utilizados, todos los instrumentos de control, las válvulas de seccionamiento, los tipos de aislamiento, etc.

Definición de las líneas

El diámetro de las líneas se cuantificó teniendo en cuenta unas restricciones definidas previamente, y que hacen referencia a valores típicos de velocidad y caída de presión en líneas. La velocidad en las líneas se calcula dividiendo el flujo volumétrico que las atraviesa dividida por la sección:

$$u_L = \frac{4 \cdot Q \cdot f_Q}{\pi \cdot D_L^2} \quad (\text{Ec. 6})$$

donde u_L es la velocidad del fluido por la línea (m/s), Q es el flujo volumétrico de fluido (m^3/s), f_Q es un factor de seguridad para el diseño de las líneas, y vale 1.1, y D_L es el diámetro de la línea (m). Las restricciones a la velocidad que se pusieron fueron un mínimo de 0.4 m/s, y un máximo de 2 m/s, para líquidos, y de 60 m/s, para gases. A partir de la velocidad se consigue el número de Reynolds (Re) y, con la rugosidad de la tubería, que típicamente es $rug = 0.0018$ m, entrando en el diagrama de Moody con Re y rug/D , se obtiene el factor de fricción, f , que permite calcular la caída de presión ($-\Delta P$), con la siguiente ecuación:

$$\frac{(-\Delta P)}{L} = f_{\Delta P} \cdot \left(2 \cdot f \cdot \frac{\rho \cdot u_L^2}{D_L} \right) \quad (\text{Ec. 7})$$

en la que $f_{\Delta P}$ es un factor de seguridad que se ha colocado en el diseño, y que vale 1.2, y ρ es la densidad del fluido (kg/m^3). La restricción que se colocó sobre las líneas es de un máximo de 5 bar/km de pérdida de carga, tanto para líquidos como para gases. Las ecuaciones y el procedimiento seguidos se han obtenido del libro de “Mecánica de fluidos”(Crespo Martínez, 2006) .

Además del diámetro, en la nomenclatura de las líneas se especificó el fluido conducido en ellas, la numeración, y la clasificación de las tuberías. Se propuso en la primera revisión que fuesen fabricadas de acero al carbono ASTM 105, referido con la letra B en la nomenclatura. Para este material, la ratio de presión se cuantificó utilizando la siguiente tabla:

Tabla 8. Ratio de presión (Ehtesham, 2017)

Temperature and Pressure Ratings for ASTM 105 Carbon Steel Flange							
Pressure Class	150	300	400	600	900	1500	2500
PN Number	20	50	68	100	150	250	420
Service Temperature (°C)	Maximum Non-Shock Pressure (Psig)						
100	285	740	990	1480	2200	3705	6170
200	260	675	900	1350	2025	3375	5625
300	230	655	875	1315	1970	3280	5470
400	200	635	845	1270	1900	3170	5280
500	170	600	800	1200	1795	2995	4990
600	140	550	730	1095	1640	2735	4560
650	125	535	715	1075	1610	2685	4475
700	110	535	710	1065	1600	2665	4440
750	95	505	670	1010	1510	2520	4200
800	NOT RECOMMENDED ABOVE 800						

Se añadieron 3 mm de sobreespesor al espesor de diseño de las tuberías para que estuviesen preparadas para soportar la posible corrosión, según se marca en la normativa ANSI (“American National Standards Institute”), en la sección B 31.3 - Tuberías para plantas químicas y refinerías petroleras (Para todas las tuberías dentro de los límites de las instalaciones dedicadas al procesamiento y manejo de productos petroquímicos y conexos).

Finalmente se decidió incluir en el nombre el tipo de aislamiento térmico si lo hubiese. Dependiendo de si fuese necesario para el proceso que la temperatura sea muy elevada o, si, por el contrario, no fuese crítico para el proceso que la línea no se enfriase, se elegirá el aislamiento para conservar calor (heat conservation – HC) o para proteger a los operarios (personel protection – PP).

Control de proceso

En el P&ID se incluyó también el control de la planta. En campo, muchos puntos del proceso hay situados transmisores, que son instrumentos que miden una variable del proceso que debe ser controlada, la transforman en señal eléctrica, y la envían hacia otro instrumento, un regulador que es el que, cuando le llega la señal, la compara con una consigna y emite la señal correctora en dirección a una válvula de control.

Conectados a los controladores, se instalaron sistemas de alarma, con el objetivo de realizar el proceso de forma segura y adecuada. Las alarmas se encuentran en el panel de control, de modo que, si saltan, el trabajador que se encontrase en el punto de control podría actuar de forma inmediata.

En este diagrama se incorporó también una propuesta mínima de una implantación de un sistema de control distribuido (Distributed Control System – DCS). El DCS tiene dos funciones principales: la primera, referida al funcionamiento, la de colocar el proceso y las líneas de bombeo en posición A o B, para realizar operaciones de mantenimiento y limpieza en la línea que no trabaje, y la segunda, referida al funcionamiento, la llevan a cabo los interruptores, que se encargan de parar completamente la planta en caso de

que un valor de una variable alcance un valor muy inferior o superior a los estimados para un funcionamiento correcto.

Valvulería – Mantenimiento y seguridad

Finalmente, en el diagrama se insertó toda la instrumentación que se instala directamente en las líneas. Se incluyen elementos de seccionamiento, como válvulas de retención, y figuras en 8 que impiden el paso del fluido, y válvulas de mariposa, que normalmente se encuentran abiertas, y que permiten cortar las líneas manualmente en cualquier instante.

Las válvulas de control, al ser críticas para la operatividad efectiva del proceso, deben funcionar siempre a pleno rendimiento, así que, como operación de mantenimiento habitual, se reponen periódicamente. Por eso, se coloca un bypass, para que no sea necesario parar la planta cada vez que se requiera uno de esos recambios. En cada bypass se colocó una válvula de globo, que consigue una mayor estanqueidad, ya que es un conducto que, normalmente, no debe dejar pasar nada de fluido, pues eso haría que el control no fuese efectivo.

Para el mantenimiento de líneas y equipos propuso instalar drenajes y venteos que permitan retirar fluido. En caso de que las corrientes no se compongan exclusivamente de agua, el fluido retirado se envía a un drenaje de químicos (DQ), si fuese líquido, o a una llama de quemados (FL), si se encontrase en estado gaseoso, para que se produjese una combustión y se emitiese a la atmósfera en forma de CO₂ y vapor de agua, que son menos contaminantes.

3.3. Diseño de equipos

En el desarrollo de la ingeniería del proyecto actual, se incluyó el diseño de los principales equipos que se presentan en el diagrama de flujo, como el reactor catalítico, las torres de destilación y los intercambiadores de calor. En la presente memoria se muestra el camino seguido en el diseño de algunos de ellos, con un ejemplo para los intercambiadores de calor y otro para las torres, pues el procedimiento de cálculo y diseño de las unidades del mismo tipo es exactamente el mismo. Se incluyó, de forma complementaria, la primera revisión de algunas hojas de especificaciones en el Anexo V. Hojas de especificaciones.

3.3.1. **Diseño del intercambiador de calor de carcasa y tubos CL-102**

El intercambiador de calor CL-102 es un enfriador del agua residual (Wastewater, WW) del proceso, colocado aguas abajo de la torre T-103, y cuya finalidad es enfriar el agua que sale por las cabezas de la torre (corriente WW-1), que se envía directamente a la zona de tratamiento de agua de la que está dotada la planta. El agua que sale como destilado, según la información proporcionada por el simulador, lo hace a, casi, 98 °C, y se definió un sistema de intercambio de calor que pudiese reducirla hasta la temperatura ambiente, 25 °C.

Realizar esta operación de retirada de calor implica retirar de la corriente prácticamente 150 kilovatios. Para ello, se propuso utilizar agua de refrigeración (Cooling Water, CW). Ante la dificultad de usar CW a tan baja temperatura, debería valorarse la posibilidad de utilizar agua subenfriada (Chilled water) o, si fuese posible, agua de cauce natural o del mar, que se encontrasen a menor temperatura y no requiriesen la instalación de un sistema de refrigeración. Para los cálculos, se supuso que se suministrase la refrigeración a 15 grados al proceso, y se calentase hasta 25, lo que implica la utilización de unos 3.5 kg/s de CW.

Tabla 9. Resumen de corrientes del intercambiador de calor CL-102

	WW	CW
Temperatura de entrada (°C)	97.97	15
Temperatura de salida (°C)	25	25
DUTY (kW)	-148.7	148.7
Flujo másico (kg/s)	0.479	3.55

El cálculo del flujo másico se realizó a partir de la ecuación 8, donde q es el DUTY, \dot{m} es el flujo másico, c_p es la capacidad calorífica media, y ΔT es la diferencia de temperaturas entre la salida y la entrada del equipo, todas referidas al CW:

$$q = \dot{m} \cdot \bar{c}_p \cdot \Delta T \tag{Ec. 8}$$

Para dimensionar el cambiador de calor, se van a seguir las indicaciones marcadas por el capítulo 1 del libro “*Coulson and Richardson’s chemical engineering: volume 1B: heat and mass transfer: fundamentals and applications*” (R. P. Chhabra et al., 2018), complementado con los estándares del código TEMA⁹. Se barajó la posibilidad de utilizar un intercambiador de placas, más compacto, versátil, y económico, y con buen coeficiente de transferencia de calor, o un intercambiador de carcasa y tubos.

Se rechazó esa opción porque el flujo es muy alto y genera muchos problemas de pérdida de carga, con el mínimo tamaño comercial de placas (Kolmetz, 2020), del orden de más de 1 bar. Se muestra este resultado en el Anexo II de cálculos justificativos.

Para definir el área de intercambio de calor, y así, conocer las posibilidades de dimensionado se aplicó la ecuación 9 de transferencia de calor, en la cual, U (W/m² °C) es el coeficiente global de transferencia de calor, A (m²) es el área de transmisión de calor, F es un factor de corrección para intercambiadores de varios pasos, y ΔT_{lm} (°C) es la media de temperaturas logarítmica:

$$q = U \cdot A \cdot F \cdot \Delta T_{lm} \tag{Ec. 9}$$

La temperatura media logarítmica se calcula:

$$\Delta T_{lm} = \frac{(\Delta T_{lado 1} - \Delta T_{lado 2})}{\ln \frac{\Delta T_{lado 1}}{\Delta T_{lado 2}}} \tag{Ec. 10}$$

Y el factor F se calcula utilizando los gráficos de la figura 1.81 del capítulo 1 del libro de Coulson:

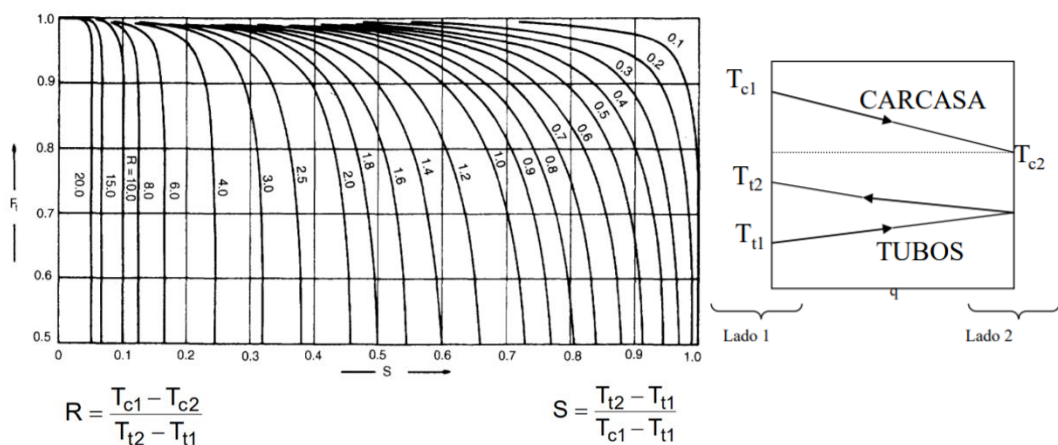


Ilustración 20. Factor de corrección de la diferencia de temperatura media

⁹ Tubular Exchangers Manufacturer’s Association

Para calcular el área de transferencia de calor y dimensionar el cambiador fue necesario realizar una previa estimación del valor de U. Como la composición de las dos corrientes es muy similar, y es la del agua, en la tabla 1.22 del capítulo 1 del libro de Coulson se muestran los valores típicos de U para estos intercambiadores, que oscilan entre 900 y 1700 W/m² °C, realizamos una estimación inicial de 1200 W/m² °C.

Tabla 10. Área de transferencia de calor

R	0.137
S	0.879
F	0.97
ΔT_{lm} (°C)	31.68
U (W/m ² °C)	1200
A (m ²)	4.032

A partir de este valor del área, fijamos la longitud y el diámetro de los tubos, empleando los valores estándar (R. P. Chhabra et al., 2018) de forma que la caída de presión a lo largo del intercambiador, tubos y carcasa, y el coeficiente de transmisión sean adecuados. El objetivo del diseño es minimizar el área para minimizar el coste.

Se cuantificó el número de tubos a partir del área, el diámetro y la longitud, y obtenido ese valor, se dedujeron los valores del diámetro de carcasa, de la bancada de tubos, y demás especificaciones que se resumirán en la tabla posterior:

Tabla 11. Resumen de especificaciones del intercambiador CL-102. Todas las dimensiones en metros.

Longitud	4.878	Diámetro de la bancada de tubos	0.141
Diámetro exterior	0.0160	Diámetro de la carcasa	0.191
Espesor de los tubos	0.0016	Espacio entre placas deflectoras	0.076
Diámetro interior	0.0144	Corte de placas deflectoras	25%
Número de tubos	17	Número de pasos por los tubos	4

La utilización de estas especificaciones se justifica en el Anexo II de cálculos justificativos: Como breve resumen, se destaca la utilización de un cambiador de cabezal flotante para facilitar las operaciones de limpieza de los tubos, de 4 pasos por los tubos, para aumentar la velocidad, favorecer el régimen de turbulencia y mejorar la transmisión de calor, además de que de esta manera se alcanza un valor cercano, aunque inferior (0.72 m/s) a 1 m/s que es el valor típico de velocidad de flujo en tubos (R. P. Chhabra et al., 2018).

La disposición del intercambiador se especificó en horizontal, para evitar mayores costes de bombeo a mayores de los necesarios para salvaguardar la

caída de presión, con el agua residual por el interior de los de los tubos, porque es un fluido que puede arrastrar sólidos de otras partes de la planta, lo que implica suciedad. A mayores, es un fluido menos viscoso y está más caliente. El CW, por lo tanto, se condujo a través de la carcasa.

Seguidamente, se tomaron las propiedades físicas de WW y CW, a la entrada y a la salida, y se calculó el promedio de ellas, para medir el coeficiente de transmisión de calor individual promedio en tubos y carcasa a partir de correlaciones presentes en el libro de Coulson y Richardson.

Para el interior de los tubos, la correlación empleada es la siguiente:

$$Nu = \frac{h_i \cdot d_i}{k_l} = 0.023 \cdot Re^{0.8} \cdot Pr^{0.33} \tag{Ec. 11}$$

donde Nu es el número de Nusselt, Re es el número de Reynolds y Pr es el número de Prandtl, números adimensionales; h_i (W/m² °C) es el coeficiente de transmisión de calor en el interior de los tubos, d_i (m) es el diámetro interno y k_l (W/m°C) es la conductividad de la mezcla de la corriente.

Por el exterior de los tubos, es decir, por la carcasa, se utilizó el método abreviado de diseño de cambiadores, o método de Kern, que utiliza la siguiente correlación:

$$Nu = \frac{h_o \cdot d_e}{k_l} = j_h \cdot Re \cdot Pr^{0.33} \tag{Ec. 12}$$

donde j_h es un factor de transmisión de calor dependiente del número de Reynolds y del corte de placas deflectoras, que se obtiene a partir de esta correlación gráfica:

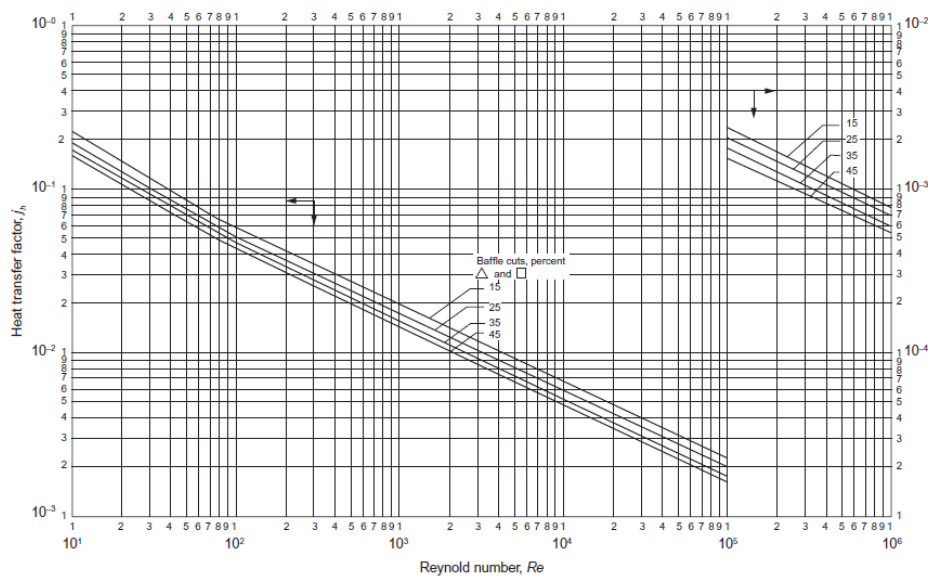


Ilustración 21. Correlación gráfica para obtener el factor j_h . (R. P. Chhabra et al., 2018)

y donde h_o ($W/m^2 \text{ } ^\circ C$) es el coeficiente individual de transferencia por la carcasa y d_e (m) es el diámetro hidráulico equivalente de la zona de la carcasa (se explica el cálculo debidamente en el Anexo II de cálculos justificativos).

Tabla 12. Coeficientes individuales de transmisión de calor

	Carcasa	Tubos
Reynolds	17505	16652
Prandtl	7.11	4.25
Nusselt	141.35	88.33
Coef. individual ($W/m^2 \text{ } ^\circ C$)	7443	3697

Finalmente, calculados los coeficientes individuales de transmisión de calor, se tomaron los valores típicos máximos de ensuciamiento por el interior y el exterior de los tubos (h_{od} y h_{id} , en las mismas unidades que los coeficientes individuales), $6000 W/m^2 \text{ } ^\circ C$, y el valor de la conductividad térmica del acero, k_w , que vale $50.2 W/m^\circ C$. Con todo esto utilizamos la ecuación que permite obtener el coeficiente global:

$$\frac{1}{U} = \frac{1}{h_o} + \frac{d_o}{d_i \cdot h_i} + \frac{d_o \cdot \ln\left(\frac{d_o}{d_i}\right)}{2 \cdot k_w} + \frac{1}{h_{od}} + \frac{d_o}{d_i \cdot h_{id}} \quad (Ec. 13)$$

El valor del coeficiente obtenido es de $1244 W/m^2 \text{ } ^\circ C$, superior al que se estimó inicialmente, por lo que podríamos dar validez al diseño siempre que cumpliera las especificaciones referidas a la pérdida de carga. El valor típico que se toma como límite son 35 kPa , 0.35 bar . Para calcular la pérdida de carga se utilizaron métodos gráficos que permitiesen determinar el factor de fricción j_f en función del número de Reynolds.

Por el interior de los tubos se utilizó la siguiente correlación:

$$(-\Delta P) = N_p \cdot (8 \cdot j_f \cdot \frac{L}{d_i} \cdot \left(\frac{\mu}{\mu_s}\right)^{-0.25} \cdot \frac{\rho \cdot u_t^2}{2}) \quad (Ec. 14)$$

donde $(-\Delta P)$ es la caída de presión, en Pascales, N_p es el número de pasos por los tubos, L (m) es la longitud de los tubos, d_i es el diámetro interno de los tubos, μ es la viscosidad de la corriente y μ_s la del agua, ambas en kg/ms , ρ es la densidad de la corriente (kg/m^3) y u_t es la velocidad de la corriente en los tubos (m/s). El factor de fricción se obtiene mediante el siguiente gráfico del libro de Coulson & Richardson, Capítulo 1, figura 1.88:

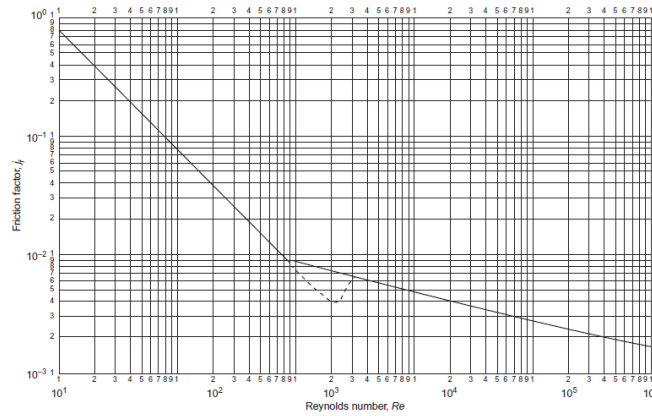


Ilustración 22. Factor de fricción por el lado de los tubos

Por el lado, de la carcasa, la correlación utilizada fue la siguiente:

$$(-\Delta P) = 8 \cdot j_f \cdot \frac{d_s}{d_e} \cdot \left(\frac{L}{l_b}\right) \cdot \frac{\rho \cdot u_c^2}{2} \tag{Ec. 15}$$

donde d_s (m) es el diámetro de la carcasa, l_b (m) es el espacio entre placas deflectoras, y u_c (m/s) es la velocidad del fluido a través de la carcasa. El factor de fricción j_f por el lado de la carcasa se calcula con la gráfica de correlación que se muestra en la ilustración 23. En el libro de Coulson, esta imagen se corresponde con la figura 1.92.

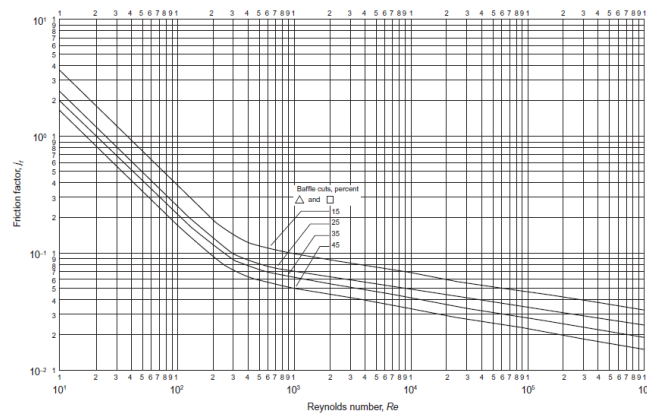


Ilustración 23. Factor de fricción por el lado de la carcasa

Finalizamos este apartado mostrando los valores de caída de presión calculados, junto al coeficiente global de transmisión de calor, a modo de resumen:

Tabla 13. Resumen diseño CL-102

$(-\Delta P)$ lado de la carcasa (kPa)	14.88
$(-\Delta P)$ lado de los tubos (kPa)	18.34
$(-\Delta P)$ valor típico (kPa)	35.00
Coef. transmisión de calor, U (W/m ² °C)	1244

3.3.2. Especificaciones de las torres de destilación. Columna T-102

Para completar las especificaciones de las columnas de destilación se utilizaron las herramientas disponibles de diseño en ASPEN Plus. El bloque Radfrac es un bloque que permite diseñar torres de forma rigurosa, pues realiza el cálculo de dos parámetros de operación (relación de reflujo, relación destilado/alimentación, cantidad de reflujo...) según dos requerimientos de balance de materia (purezas, cantidad, porcentaje de recuperación, etc.).

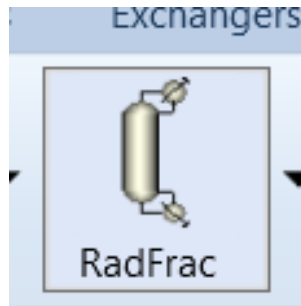


Ilustración 24. Bloque Radfrac en ASPEN Plus

Especificaciones de operación

Para explicar el procedimiento de cálculo se utilizará la columna T-102, pero al final del punto se resumirán las especificaciones de operación de las tres columnas.

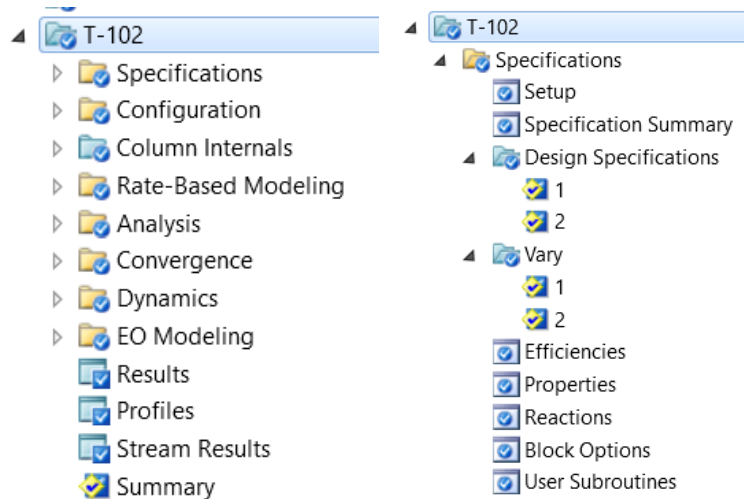


Ilustración 25. Opciones del bloque Radfrac

En la pestaña de especificaciones se llevó a cabo la configuración principal de las torres. Esta pestaña permite elegir el número de etapas de la torre, los tipos de condensador y ebullición, definir si hay equilibrio líquido-líquido (ELL) en las diferentes composiciones de la torre, y todo lo que se aprecia en la imagen inferior:

Ilustración 26. Configuración de la torre

En esta pestaña se eligieron el condensador total y el ebullidor kettle, el primero porque interesa que la corriente de destilado circule en estado líquido, y el segundo, porque es muy habitual el uso de este tipo de calderines. Cada etapa se calcula según el equilibrio líquido-vapor que marcan los parámetros binarios que reconoce el software, se pidió a ASPEN que comprobase la presencia de ELL en toda la torre, y se especificó que la convergencia de la torre, que en este caso es la T-102, fuese la adecuada para una destilación azeotrópica.

Más adelante se explicará por qué ese número de etapas es el elegido, igual que las especificaciones de operación que se indican en la imagen.

Dentro de la configuración de la torre también se especifica la etapa de entrada de la alimentación, y las etapas de salida de fondo y de destilado. Las segundas son las etapas última y primera, respectivamente, y la etapa de entrada de la alimentación, y la posición respecto a esa etapa, se situó, atendiendo al perfil de concentraciones de la torre a lo largo de las etapas, en la etapa cuya concentración fuese similar, en este caso, la etapa 10.

Name	Stage	Phase	Basis	Flow	Units	Flow Ratio	Feed Specs
A9	10	On-Stage					
AZ1	1	Liquid	Mole		kmol/hr		Feed basis
THF-1	20	Liquid	Mole		kmol/hr		Feed basis

Ilustración 27. Especificación de corrientes

9	0.812839	0.169678	9.705e-05	0.0173856
10	0.816187	0.166613	0.000107127	0.0170932
11	0.820637	0.160192	0.000109363	0.0190616

Ilustración 28. Composición del vapor en las etapas de la torre

- Mole Fractions	
METHANOL	0.0163217
PROPANOL	0.00011847
TH-FURAN	0.816
1,4-BDO	1.13709e-25
WATER	0.16756

Ilustración 29. Composición de la alimentación

Como parámetros de operación utilizados como variables manipuladas se eligieron las relaciones L/D, “Reflux ratio” y D/F “Distillate to feed ratio”, siendo L el reflujo, D, el destilado, y F, la alimentación. Se proporcionaron al programa unos valores estimados de ambas relaciones y se decretaron unos valores de cálculo máximos y mínimos, para que el valor de la variable manipulada se mantuviese en un intervalo conocido. Cada una de estas variables manipuladas controla una variable referida al balance de materia, como se ve en la figura siguiente:

ID	Active	Description	Type	Units	Target Value	Calculated Value	Error
1	<input checked="" type="checkbox"/>	Mass purity, 0.999, PRODUCT	Mass purity		0.999	0.999	0
2	<input checked="" type="checkbox"/>	Mole purity, 0.7016, PRODUCT	Mole purity		0.7016	0.7016	-2.36478e-14

New Edit Delete

Adjusted variables

ID	Active	Description	Type	Units	Lower Bound	Upper Bound	Calculated Value
1	<input checked="" type="checkbox"/>	Distillate to feed ratio, 0.5, 0.7	Distillate To Feed Ratio		0.5	0.7	0.613544
2	<input checked="" type="checkbox"/>	Reflux ratio, 1., 4., 0.01	Molar Reflux Ratio		1	4	1.08098

Ilustración 30. Resumen de especificaciones de operación

En este caso concreto, las variables controladas se refieren a pureza, en masa y moles, de las corrientes inferior y superior de T-102. Los valores corresponden a la pureza de THF comercial indicada en la enciclopedia Ullmann, ver tabla 14, y la composición del azeótropo a 5 bar:

Tabla 14. Comparación THF comercial y THF del estudio realizado

% w/w	Requerido	Obtenido
Pureza	> 99.9 %	99.9 %
Contenido de agua	< 0.03 %	0.022 %

El número de etapas se eligió basándose en criterios económicos, a mayor número de etapas, mayor tamaño de la torre y mayor coste de inversión inicial, pero, al haber más etapas de separación, conseguirla es más fácil, y el reflujo necesario es menor, por lo que se necesita menor energía en el ebullición para evaporarlo y que vuelva a ascender por los platos. El software de ASPEN

también tiene una opción de evaluación económica de las operaciones unitarias, en la que proporciona, en dólares estadounidenses, una tabla resumen de los costes de la operación y de los servicios generales (utilities). Por ejemplo, individualmente, para la columna T-102, los valores son los siguientes:

Tabla 15. Evaluación económica de la torre T-102¹⁰

Total Capital Cost [USD]	2 615 550
Total Operating Cost [USD/Year]	1 242 880
Total Raw Materials Cost [USD/Year]	0
Total Product Sales [USD/Year]	0
Total Utilities Cost [USD/Year]	279 141

Por eso, para encontrar el punto óptimo, económicamente hablando, se decidió realizar una evaluación del coste de cada unidad de destilación a los 10 años de funcionamiento, sumando el coste de instalación inicial (coste de inversión, coste de capital, CAPEX) y el coste de operación (OPEX) en los 10 años de funcionamiento, en función del número de etapas de cada torre. Los resultados fueron los siguientes:

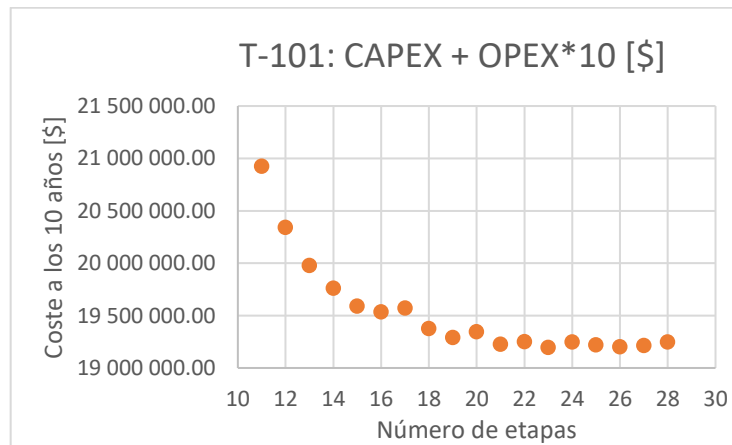


Ilustración 31. Selección del número de etapas, T-101

¹⁰ El valor de cero en materia prima y producto se debe a que el precio de las corrientes intermedias no está cuantificado, este apartado de la tabla tiene más sentido en el resumen global de los costes, como se verá en el apartado de evaluación económica.

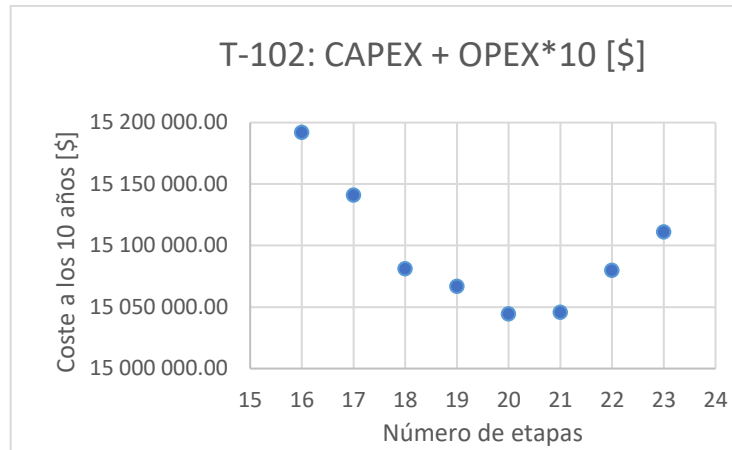


Ilustración 32. Selección del número de etapas, T-102

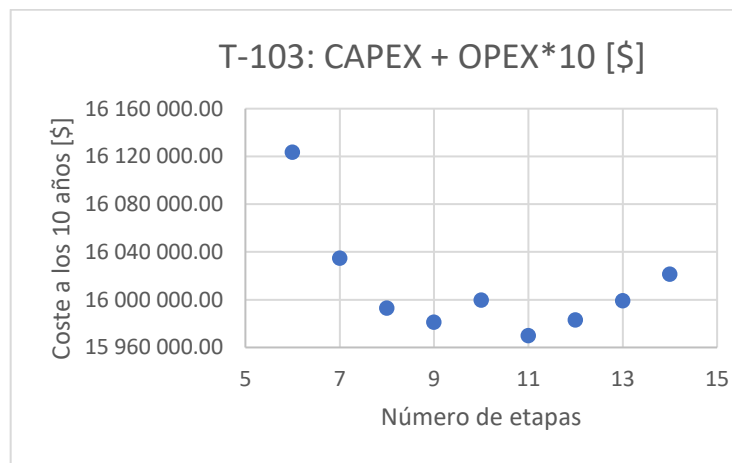


Ilustración 33. Selección del número de etapas, T-103

Como tabla resumen de las especificaciones de operación, se presenta la siguiente:

Tabla 16. Resumen especificaciones de las torres

	T-101	T-102	T-103
Relación D/F	0.716	0.613	0.976
Relación L/D	0.262	1.081	0.069
Etapa de alimentación	18-21 ¹¹	10	10
Número de etapas	23	20	11
Cost. instalación [\$]	2 794 130.00	2 615 550.00	2 568 510.00
Cost. operación [\$/año]	1 640 170.00	1 242 880.00	1 340 140.00
Cost. 10 años [\$]	19 195 830.00	15 044 350.00	15 969 910.00

¹¹ La corriente de azeótropo recirculada desde la T-102 se introduce en la etapa 18, y la mezcla que sale del reactor, en la etapa 21.

Diseño interno de la columna T-102

Además de las especificaciones de los parámetros de operación, hay una opción, en el desplegable, que permite realizar un diseño de la geometría interna de forma casi automática. Se utilizó esa opción para diseñar el cuerpo de la torre.

En primer lugar, se generaron los datos hidráulicos de la torre y, a continuación, se definieron las dos secciones de la torre, la sección de enriquecimiento, por encima de la alimentación, es decir, del plato 2 al plato 10, y la sección de agotamiento, del plato 11 al plato 19.

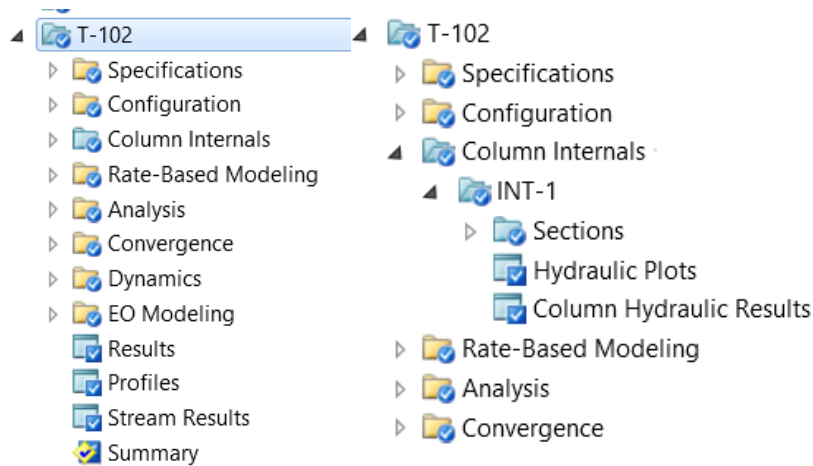


Ilustración 34. Diseño interno de columnas

Esta división en dos secciones se debe a que la alimentación aporta materia al líquido o al vapor que fluyen por la torre y cambian los flujos, lo que afecta a la velocidad por la torre. ASPEN Plus calcula el diámetro para que la velocidad del líquido sea un 80% de la velocidad de inundación en la etapa limitante de la sección.

Los platos elegidos son platos agujereados, de tipo SIEVE. Para esa configuración de los platos, las dimensiones que el programa calcula, para las dos secciones, son:

Tabla 17. Resumen geometría interna de la columna T-102

	Enriquecimiento	Agotamiento
Etapa crítica	9	19
Diámetro de la columna (m)	1.002	0.586
Espacio entre platos (m)	0.610	0.610
Número de agujeros por plato	498	156
Diámetro del agujero (mm)	12.7	12.7
Anchura del downcomer (mm)	156.8	111.4
Anchura de la presa (mm)	728.1	459.7
Altura de la presa (mm)	50.8	50.8
Distancia entre downcomer y plato (mm)	38.1	38.1

Para demostrar que en cada etapa el punto de operación es el adecuado, el programa emite un gráfico que denomina Hydraulic Plot, para cada etapa, que marca los límites de inundación y goteo, y las cargas máxima y mínima en la presa. Son cuatro líneas entre las que debe encontrarse el punto de operación en cada etapa, para el correcto funcionamiento. Por ejemplo, como puede apreciarse en la imagen inferior, para la etapa 15, el funcionamiento es adecuado:

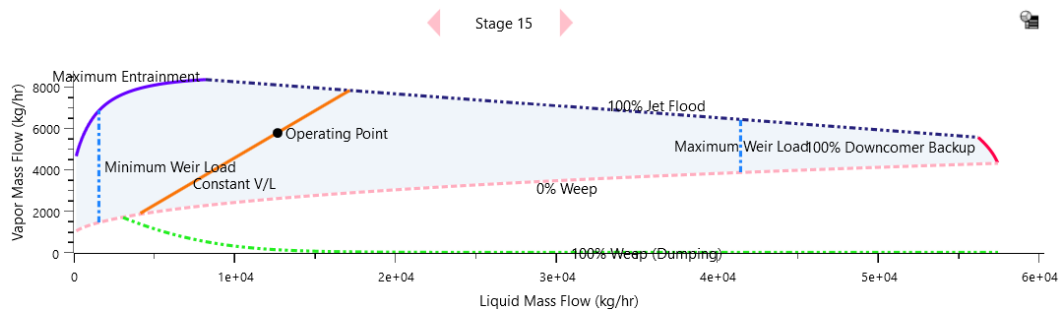


Ilustración 35. Hydraulic plot, etapa 15, T-102

Se indicó la manera de realizar el diseño de las torres, pero sólo se realizó el diseño para una de ellas, como ejemplo. En las otras dos, el procedimiento a seguir es el mismo.

3.3.3. Diseño del reactor catalítico en ASPEN

En el apartado 3.1 de análisis preliminar se explica que se decidió un reactor catalítico de flujo de pistón, multitubular horizontal, y de lecho fijo poroso, y se justificó esta elección. En este punto se explica el dimensionado del reactor de lecho, se especifican las dimensiones de los tubos y la cantidad de ellos, atendiendo a tres criterios principales: la transmisión de calor, la conversión del reactivo, y la pérdida de carga.

El procedimiento de cálculo que se siguió fue el siguiente: se utilizaron valores normalizados de los diámetros de tubo. Se fijó uno, se determinó un coeficiente de transmisión de calor estimado, y posteriormente, se realizó un análisis de sensibilidad que calculase la pérdida de carga en función del número de tubos, usando la ecuación de Ergun. Se estableció un máximo de caída de presión y se eligió el número de tubos inmediatamente superior al que excediese de ese máximo. Finalmente, con las herramientas de modelado de ASPEN, para ese número de tubos se calculó la longitud necesaria para alcanzar la conversión fijada que, como también se cita en el análisis preliminar, es del 98%. Con las dimensiones del reactor se evalúa el valor del coeficiente de transmisión y, con este coeficiente, se realiza una nueva iteración.

Especificaciones de diseño. Longitud del reactor.

Para calcular la longitud del reactor se utilizó una herramienta de modelado del programa, las ESPECIFICACIONES DE DISEÑO. Es una herramienta que permite al programa realizar un cálculo inverso, es decir, usar lo que en una simulación sería una variable de salida como entrada, para que el programa calculase la “entrada” teórica necesaria.

En este ejemplo, para que quede más claro, en una simulación sin especificaciones de diseño, se especificaría una longitud (entrada), y, como es un reactor tubular, la conversión (salida) dependería de ese valor de longitud. Utilizando las especificaciones de diseño de ASPEN, es posible fijar un valor de conversión y pedirle que calcule la longitud de los tubos.

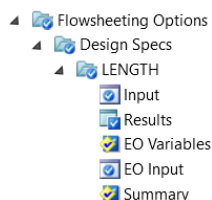


Ilustración 36. Especificaciones de diseño

Al realizar una especificación de diseño, hay una pestaña que pide el valor de una variable o expresión al que el programa debe llegar, habiendo definido previamente esa o esas variables. En la siguiente pestaña hay que definir la variable manipulada, y el intervalo de cálculo donde puede variar. En este caso,

se definieron las concentraciones de BDO a la entrada y a la salida, (C_{BDO} y $C_{BDO,0}$), y en la pestaña de ASPEN se especificó la expresión de la conversión, y que el cálculo debía llevar a un 98 %, con un error admisible de un 0.01 %. Se espera que el valor de la variable manipulada, en este caso, la longitud del reactor, se encuentre entre 1 y 5 metros.

$$X = \frac{C_{BDO,0} - C_{BDO}}{C_{BDO,0}} \quad (Ec. 16)$$

Design specification expressions	
Spec	(CBDO0-CBDO)/CBDO0
Target	0.98
Tolerance	0.0001

Manipulated variable	
Type	Block-Var
Block	B3
Variable	LENGTH
Sentence	PARAM
Units	meter

Manipulated variable limits	
Lower	1
Upper	5
Step size	0.01
Maximum step size	

Ilustración 37. Entradas especificación de diseño

La conversión es función de la longitud del reactor de forma indirecta. Realmente la conversión depende de la cinética de la reacción, y esta es función de la carga de catalizador. Cuanto más catalizador hay dentro del reactor, mayor es la transformación, es decir, mayor es la conversión¹², por eso, al cambiar la distribución de la sección para cada diámetro y número de tubos, se obtienen diferentes longitudes para cada una de las 5 pruebas.

Análisis de sensibilidad. Número de tubos.

Otra de las herramientas del software de ASPEN, cuyo nombre es ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD que permite manipular una variable del sistema y recoger la influencia, sobre una o más variables, que tiene esta variación del sistema, tabuladas, y permitiendo registrar esa información en gráficos y mapas de calor.

En este caso, la variable manipulada, como se explica anteriormente, es el número de tubos y, la variable cuyo efecto se quiere valorar, es la caída de presión en el lecho. Como es lógico, al aumentar el número de tubos, el flujo

¹² Recuérdese que la constante de velocidad tiene unidades de $L/(g_{cat}\cdot s)$

de reactivo influente se divide en más canalizaciones, por lo que la velocidad en cada una es menor y, por tanto, la pérdida de carga.

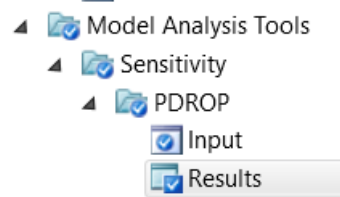


Ilustración 38. Análisis de sensibilidad I. Caída de presión en el reactor.

Se enseñan en el documento las capturas de pantalla del camino seguido para un diámetro fijado de 2.5 cm, aunque, realmente, el proceso a seguir es el mismo para las 5 pruebas de diámetros.

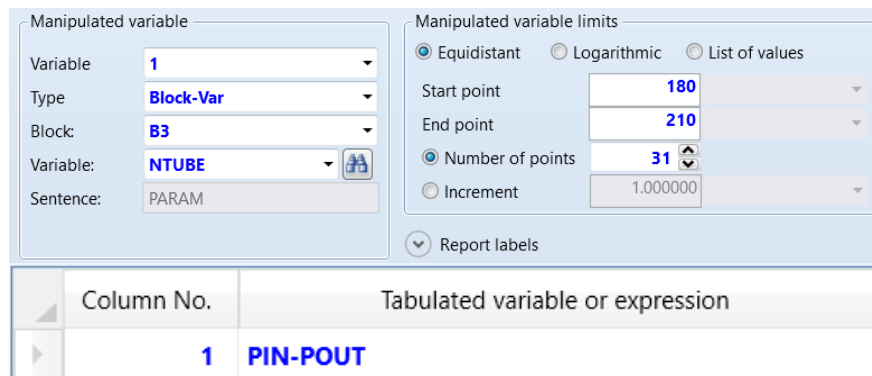


Ilustración 39. Entradas análisis de sensibilidad II. Caída de presión en el reactor

La caída de presión es calculada mediante la ecuación de Ergun. La ayuda del programa indica que esta elección en el reactor es la más adecuada para calcular la pérdida de carga en el reactor¹³, y hay que especificar este método de cálculo en la pestaña correspondiente, siendo el valor de la rugosidad el que viene por defecto:

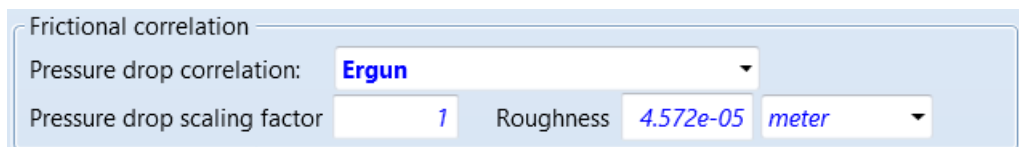


Ilustración 40. Especificación de la caída de presión.

Para que el programa calcule la caída de presión, en la pestaña referida al catalizador hay que especificar los parámetros de las zeolitas ZSM-5. Las zeolitas seleccionadas son esféricas, tienen una densidad de 1035 kg/m³ (Aghaziarati et al., 2007), y un diámetro de 3 mm (en internet existen diámetros

¹³ Cito textualmente: “The frictional correlations from the Pipeline model are available, as well as Ergun's Equation which is suitable for calculating the pressure drop across packed bed reactors.”

de entre 2 y 6 mm (*Adsorbent Molecular Sieve 5a Zeolite Zsm - 5*, n.d.), se eligió 3 mm de manera arbitraria). En hipotéticas revisiones futuras de este proyecto debería hacerse un estudio sobre la influencia del diámetro de partícula en la caída de presión.

Ilustración 41. Especificación del catalizador

Por cuestiones de seguridad se fijaron 150 milibares de pérdida de carga máxima asumible en el lecho fijo, pues, como se comenta en el apartado 3.1, en la parte que habla de la reacción, una disminución de la presión podría acarrear ebulliciones indeseadas que estropearan el proceso productivo.

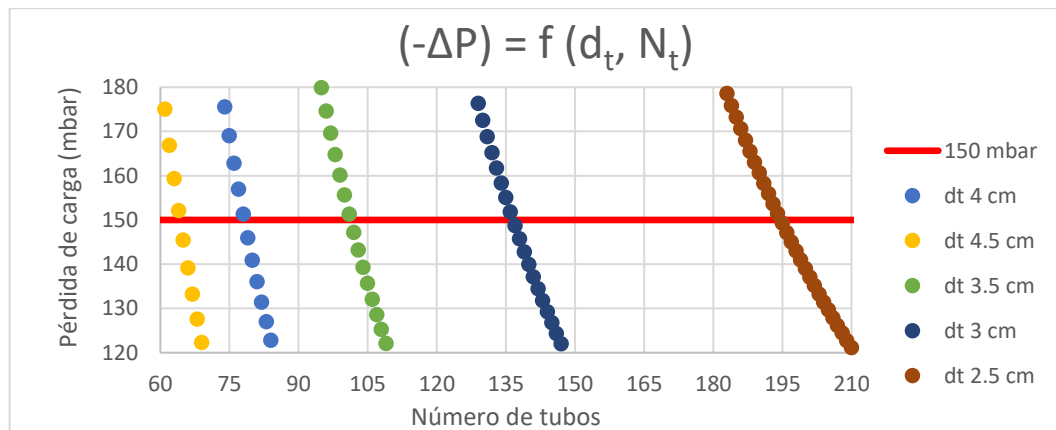


Ilustración 42. Pérdida de carga según diámetro y número de tubos

El análisis de sensibilidad llevó a los resultados anteriores. Para cada uno de los 5 diámetros, se eligió el número de tubos mínimo que respete la caída de presión. En el Anexo II. Cálculos justificativos, se incluyen los valores discretos, tabulados de la caída de presión según el diámetro del tubo y el número de tubos. En la ilustración 42 se aprecia claramente que cuanto menor es el diámetro, la pérdida de carga es mucho mayor, así que se necesita dividir el caudal entrante en más conductos para reducir su velocidad.

En la tabla siguiente se muestran los resultados (d_t es el diámetro de los tubos (m), N_t el número de tubos, y L la longitud (m)):

Tabla 18. Dimensionado del reactor

d_t (m)	N_t	L (m)
0.025	195	2.830
0.030	137	2.883
0.035	102	2.924
0.040	79	2.963
0.045	63	3.003

Transmisión de calor. Coeficiente global de transmisión.

De la misma manera que en el intercambiador de calor CL-102, en el reactor, debe calcularse la transmisión de calor. En el análisis preliminar se explica que se necesita calefactar el reactor, ya que la reacción es endotérmica, para mantener una temperatura elevada y mejorar el avance de la misma, reduciendo el volumen de reactor (si la cinética es más rápida la conversión de 98 % se alcanza antes). Se decidió que utilizar vapor a alta presión era la mejor opción para realizar este calentamiento.

Análogamente al CL-102, es necesario calcular los coeficientes individuales por el interior y el exterior de los tubos, para evaluar el coeficiente global de transmisión. En este caso, las correlaciones son diferentes, porque en el interior de los tubos hay un lecho poroso, y en el exterior se produce una condensación de vapor. Ambas correlaciones han sido obtenidas del libro de Coulson & Richardson citado en el apartado 3.3.1, en la parte de lechos porosos para el interior (Richardson et al., 2002), y del capítulo de transmisión de calor para el exterior (R. P. Chhabra et al., 2018).

Por el interior de los tubos, se tomaron los flujos y las propiedades físicas de la entrada y de la salida de reactivos y productos, para calcular un coeficiente promedio, y, utilizando el diámetro de las partículas de catalizador, d_p (m), se calculó el Reynolds de partícula (Re_p), que, junto con el número de Prandtl (Pr), permiten obtener el número de Nusselt (Nu), y el coeficiente individual por el interior:

$$S = \frac{\pi \cdot d_t^2}{4} \cdot N_t \rightarrow Re_p = \frac{Q/S \cdot d_p \cdot \rho}{\mu} \tag{Ec. 17 y 18}$$

$$Nu = \frac{d_p \cdot h_i}{k_l} = 2 + 1.3 \cdot Pr^{0.15} + 0.66 \cdot Pr^{0.31} \cdot Re_p^{0.5} \tag{Ec. 19}$$

En el exterior de los tubos, para calcular el coeficiente individual, se tomaron las propiedades físicas del vapor saturado, y se calcularon los parámetros M_H y N_r a partir del flujo de vapor condensante G_c (kg/s), y se utilizó la correlación que está a continuación:

$$G_c = \frac{q}{(-\Delta H_{vap})} \rightarrow M_H = \frac{G_c}{N_t \cdot L} ; N_r = \frac{2}{3} \cdot \frac{d_b}{P_t} \quad (Ec. 20, 21 y 22)$$

$$h_o = 0.95 \cdot k_l \cdot \left(\frac{\rho_l \cdot (\rho_l - \rho_v) \cdot g}{\mu \cdot M_H} \right)^{1/3} \cdot N_r^{-1/6} \quad (Ec. 23)$$

En este caso, el coeficiente individual es el mismo en la entrada que en la salida. Finalmente, se siguió la ecuación del coeficiente global de transmisión, U, teniendo en cuenta que el espesor de los tubos es de 3 mm. Es posible que el espesor de los tubos no sea suficiente para soportar la alta presión a la que se someten en este proyecto, debe revisarse en posteriores estudios.

Debería realizarse una consulta a la empresa suministradora del reactor tubular sobre si fuera necesario un mayor espesor, pero, en este caso, se supuso este valor inicial para los cálculos de la transmisión. La ecuación es la misma que para un intercambiador de carcasa y tubos, con la salvedad de que, en condensaciones, no es necesario considerar ensuciamiento en la carcasa.

$$\frac{1}{U} = \frac{1}{h_o} + \frac{d_o}{d_i \cdot h_i} + \frac{d_o \cdot \ln\left(\frac{d_o}{d_i}\right)}{2 \cdot k_w} + \frac{d_o}{d_i \cdot h_{id}} \quad (Ec. 13 modificada)$$

Se utilizó el promedio de los coeficientes entre la entrada y la salida, porque la diferencia entre ambos produjo resultados diferentes. Como resumen:

Tabla 19. Resumen parámetros del reactor

d _t (m)	N _t	L (m)	U promedio (W/m ² °C)	Pérdida de carga (mbar)
0.025	195	2.830	494	149.93
0.030	137	2.883	510	148.94
0.035	102	2.924	520	147.16
0.040	79	2.963	527	145.95
0.045	63	3.003	531	145.44

Como criterio principal de selección se utilizó la distribución de temperatura en el interior de los tubos. Cuánto más estrechos son los tubos, en su interior, la diferencia de temperaturas entre la pared del tubo y fluido situado en el eje del tubo es menor. En este caso, y bajo este criterio, la mejor opción sería elegir los tubos de 2.5 cm de diámetro. Sin embargo, el coeficiente global de transmisión de calor es muy bajo (todos lo son, pero este es notablemente menor), no llegando ni a los 500 W/m² °C. De este modo, se eligió la segunda opción, 137 tubos de 3 centímetros de diámetro y de unos 2.88 metros de largo.

El objetivo de la calefacción del reactor era evitar el descenso de la temperatura de reacción a pesar de que fuese endotérmica. Para ello, se utilizó vapor

saturado a 12 bar, con una temperatura de saturación de casi 188 °C según el NIST. Como cuestión destacable, es que la temperatura del producto a la salida del reactor es de 189.18 °C. Esto se debe al calor de mezcla de los fluidos de la mezcla de reacción, que es muy grande, como se explica en el apartado de introducción.

Por eso, además del calor aportado por el vapor, cuyo objetivo principal es mantener una temperatura elevada y constante en el reactor, hay un calor añadido que, en el perfil de calor solicitado por la reacción al fluido caloportador (DUTY, en la ilustración 43), se produjese un máximo que, en un principio, cuando no se había considerado la presencia del calor de mezcla, fue inesperado. El perfil de temperatura en el reactor, así como el perfil del DUTY acumulado, a lo largo de la longitud del reactor, son los siguientes:

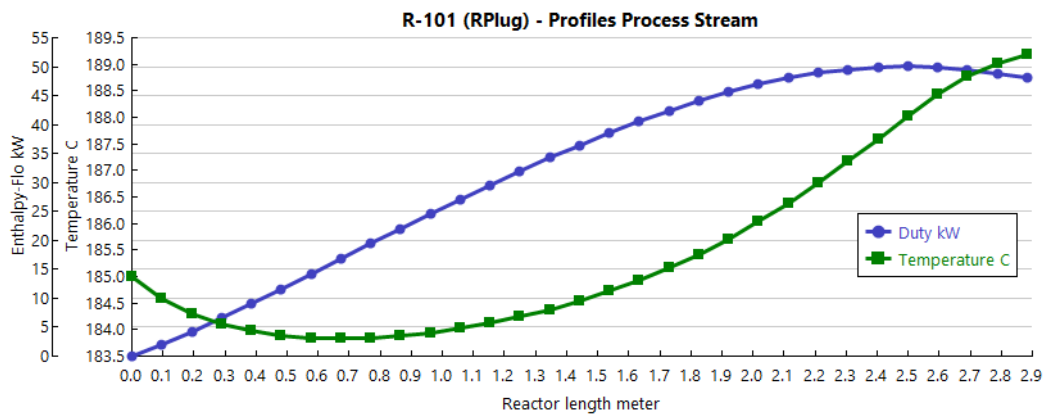


Ilustración 43. Perfiles de DUTY y temperatura en el reactor

Si no existiese calor de mezcla, la curva del DUTY, al ser acumulado, sería creciente hasta que, en el infinito, tendería hacia un valor asintótico horizontal, pues la velocidad de reacción tendería a 0. Sin embargo, debido a la presencia de este calor de mezcla, llega un punto en el que el fluido retira calor, pues el calor de mezcla hace que la temperatura de la corriente de proceso supere la temperatura del fluido calefactor y la transmisión de calor sea inversa.

Las conclusiones que se obtienen del perfil de temperaturas, respaldadas por el perfil de concentración mostrado en la imagen inferior, son que, en los primeros centímetros de reactor, la velocidad es más alta y, por tanto, la caída de temperatura es más fuerte, y conforme la velocidad se va reduciendo, aumenta la capacidad del vapor (y del calor de mezcla) de aumentar la temperatura de la reacción.

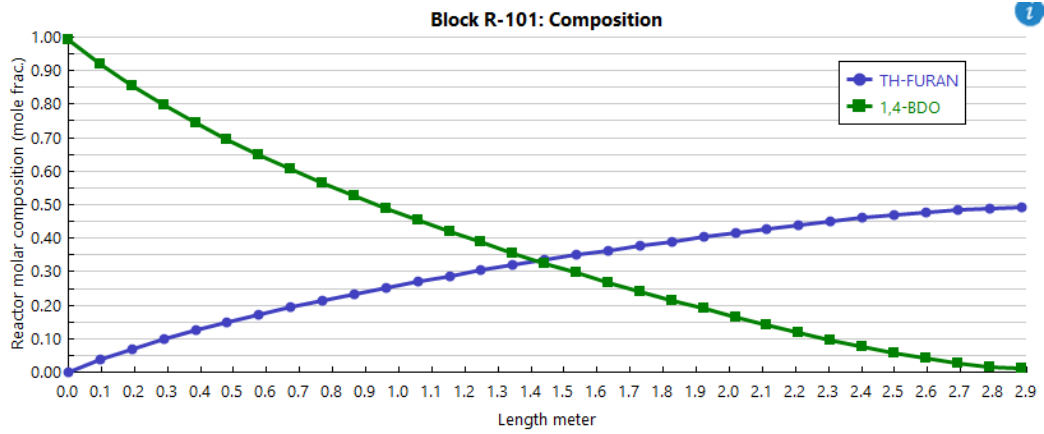


Ilustración 44. Perfiles de concentración de THF y BDO

3.4. BM en límites de batería

Tabla 20. Balance de materia en límites de batería

	A1	THF-3	WW-2
Desde	---	CL-101	CL-102
Hasta	V-101	---	---
Coste de la corriente (\$/hr)	-30933.75	43278.20	-18.97
Fase	Líquida	Líquida	Líquida
Temperatura (°C)	25.000	25.156	25.000
Presión (bar)	1.000	1.000	0.851
Fracción de vapor	0.000	0.000	0.000
Densidad (kg/m ³)	1081.486	879.270	993.089
Flujo de entalpía (kW)	-13359.310	-5731.760	-7566.561
Peso molecular (g/mol)	89.976	72.008	18.089
Flujo volumétrico (m ³ /h)	7.945	7.812	1.736
Flujos molares (kmol/h)	95.500	95.385	95.321
METANOL (kmol/h)	0.191	0.116	0.075
PROPANOL (kmol/h)	0.096	0.028	0.068
THF (kmol/h)	0.000	95.159	0.048
BDO (kmol/h)	95.214	0.000	0.008
AGUA (kmol/h)	0.000	0.083	95.123
Fracciones molares			
METANOL	0.002	0.001	0.001
PROPANOL	0.001	0.000	0.001
THF	0.000	0.998	0.000
BDO	0.997	0.000	0.000
AGUA	0.000	0.001	0.998
Flujos máscicos (t/año)			
METANOL (t/año)	53.648	32.573	20.994
PROPANOL (t/año)	50.309	14.493	35.818
THF (t/año)	0.000	60148.752	30.066
BDO (t/año)	75219.732	0.000	6.139
WATER (t/año)	0.000	13.143	15021.993
Fracciones máscicas			
METANOL	0.001	0.001	0.001
PROPANOL	0.001	0.000	0.002
THF	0.000	0.999	0.002
BDO	0.999	0.000	0.000
AGUA	0.000	0.000	0.994

La anterior tabla, tabla 20, resume la simulación. Muestra la composición, los flujos, la temperatura, y las demás variables que hay que tener en cuenta en el proceso, en este caso en la entrada y en las dos salidas del proceso (límites de batería). La tabla completa se encuentra en el Anexo IV. Tabla de corrientes.

Existe una discordancia entre algunos valores, como, por ejemplo, en las entradas y salidas de los flujos másicos hay una diferencia de 0.281 kg/h, lo que supone un error de un $3.8 \cdot 10^{-4}$ %, valor más que asumible, que se encuentra entre las tolerancias de ASPEN.

3.5. Aspectos económicos

3.5.1. Comparación flash / columna T-103

La zona de colas, aguas abajo de la torre T-101 no es una zona crítica para la realización del proceso, pues la salida de las colas no afecta a la pureza del producto en venta. Sin embargo, se conoce que un control y una optimización económica y técnica de los equipamientos colocados en ese emplazamiento puede desembocar en un ahorro económico muy importante. De manera introductoria, se comenta que la opción que se eligió fue la utilización de la columna frente al flash, pero de aquí en adelante se justifica la elección.

Las consecuencias de una buena separación son una reducción de los costes en la zona de tratamiento del agua residual generada en el proceso, cuyo impacto ambiental se valora en el 5.2.2 del documento. Cuanto mayor sea la carga orgánica, mayor será el coste de la instalación de depuración de aguas. Además, una buena separación implica la recirculación del reactivo no convertido hacia la zona de reacción, y supone un ahorro económico, en el caso final decidido, que no es despreciable (627.25 \$/hora¹⁴).

Sin embargo, al ser una reacción simple, se valoró que, aunque hubiese un mayor coste, la reacción podría recibir agua sin separar sin que afectase a su selectividad. Esto conllevaría un aumento del tamaño reactor de flujo de pistón, así que habría que realizar una pequeña evaluación económica.

Las opciones que se valoraron fueron las siguientes: colocar aguas abajo de T-101, un flash de separación líquido-vapor, mucho más barato, y una columna de destilación, equipo de separación más eficiente, pero de mayor coste:

Tabla 21. Costes de instalación

	Coste de instalación [\$]
Flash	130 200
Columna de destilación T-103	606 000

En primer lugar, se optó por la selección de un flash, y se utilizó la herramienta del software de los análisis de sensibilidad de ASPEN, como en el cálculo del reactor, para determinar el punto óptimo de funcionamiento (temperatura), del flash. Esta herramienta permite calcular variables y expresiones cambiando una única variable manipulada en un equipo o un proceso.

¹⁴ Este valor resultó de la multiplicación del flujo másico de BDO (174.38 kg/h) en la corriente R2, por el precio del BDO tomado como referencia (3.6 \$/kg, ver 4. Balance económico)

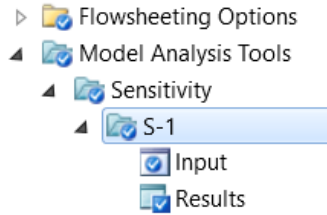


Ilustración 45. Análisis de sensibilidad II. Flash.

Se decidió que la variable manipulada, la temperatura de trabajo del flash, se variaría grado a grado desde 100 °C hasta 110 °C, que son los valores de la temperatura que ASPEN calculó también para la torre T-103, de destilado y de colas, y se recogerían los valores de recuperación y recirculación de BDO, el DUTY del flash, la pureza del agua separada, y el porcentaje de agua que retornase al reactor. Las entradas que se introdujeron en el programa son las siguientes:

Manipulated variable

Variable:

Type:

Block:

Variable:

Sentence:

Units:

Manipulated variable limits

Equidistant Logarithmic List of values

Start point: C

End point: C

Number of points:

Increment: C

Report labels

Column No.	Tabulated variable or expression
1	BDO/BDO0*100
2	DUTY
3	BDO0-BDO
4	PUREZA
5	AGUARET/AGUAIN*100
6	AGUARET
*	

Ilustración 46. Entradas análisis de sensibilidad II. Flash

En los resultados que se muestran en la tabla posterior, en la parte izquierda, se ven los extremos del intervalo, un extremo favorable por unas razones, y el otro, por otras. Las filas que se refieren a valores económicos abarcan solo a las consecuencias relativas al BDO, se observa que es suficiente con referirse a este compuesto para comprobar que la columna es la mejor opción:

Tabla 22. Comparativa Flash-T-103

	Flash (100 °C)	Flash (110 °C)	Columna T-103
Pureza agua (% masa)	97.03	96.34	99.38
Pérdidas BDO (kg/h)	1.86	55.35	0.70
Pérdidas BDO (\$/año)	58 698.20	1 745 397.78	22 084.81
DUTY (kW)	236.1	1206.8	1285.8
Cost 10 years (\$)	858 669.65	18 307 247.23	1 597 253.30
% agua recirculada (%)	81.72 %	0.29 %	0.4 %

Si atendemos únicamente a criterios económicos, es evidente que la opción más barata es el flash a 100 grados, porque, además de que las pérdidas son menores, el DUTY es menor, porque llega la corriente, prácticamente, a esa temperatura y no se necesita vapor para calentarla. Sin embargo, atendiendo a criterios técnicos, el flujo de agua separada sería pequeño, y no excesivamente puro. Estas conclusiones se refuerzan con los cálculos del Anexo II. Cálculos justificativos, el punto 2.4.

La opción de un flash a 110 grados se descarta por la gran cantidad de dinero que se perdería en forma de BDO hacia la planta de tratamiento de agua. La columna separa el agua más pura y con menos pérdidas que ambos flash, con un porcentaje de agua retornando al reactor bajo.

3.5.2. Integración energética

La solución que se obtuvo utilizando el software de ASPEN es una solución preliminar, que se definió usando los servicios generales que utiliza el programa de simulación por defecto, y sin haber tenido en cuenta en ningún momento aspectos importantes como el ahorro de energía. En el diagrama de flujo tampoco se han representado las posibilidades de integración energética, se presentó una solución simple, lineal, a partir de la que se puede obtener la producción deseada con un sistema de tuberías y cambiadores relativamente sencillo.

Sin embargo, como se ha mencionado, el ahorro de energía es un aspecto crucial en la elaboración de un proyecto económicamente viable, por tanto, se realizó una propuesta de red de intercambio de calor que consume la mínima energía de refrigeración y la mínima energía de calefacción, utilizando herramientas como la metodología Pinch y los diagramas de trama.

Estudio de la solución inicial simple

En primer lugar, utilizando el diagrama de flujo y los valores de los consumos de energía en los diferentes cambiadores del proceso productivo, que utilizan servicios generales directamente para satisfacer las necesidades energéticas de las corrientes de proceso, se elaboró una tabla resumen de las corrientes térmicas para conocer cuáles son las necesidades energéticas (DUTY) del proceso y para conocer las posibilidades de ahorro.

En el resumen de las corrientes, que se presenta en las tablas siguientes, se incluyen todos los intercambiadores de calor: los dos precalentadores (HT-101 y HT-102), los dos enfriadores, de producto y de agua de residuos (CL-101 y CL-102, respectivamente), y los ebulliciones y condensadores de cada una de las tres torres de destilación:

Tabla 23. Corrientes frías del proceso.

Corrientes frías	T1 [°C]	T2 [°C]	DUTY [kW]	Inercia térmica [kW/°C]
HT-101	29.52	185	1053.18	6.774
HT-102	63.24	120	2475.65	43.616
RB-101	98.87	98.87	1717.43	INF
RB-102	122.28	122.28	676.15	INF
RB-103	110.55	110.55	1150.13	INF

Tabla 24. Corrientes calientes del proceso.

Corrientes calientes	T1 [°C]	T2 [°C]	DUTY [kW]	Inercia térmica [kW/°C]
CL-101	122.28	25	-364.61	3.748
CL-102	110.55	25	-148.70	1.738
C-101	62.92	57.92	-2756.58	551.316
C-102	113.89	113.89	-2651.91	INF
C-103	97.97	97.97	-1153.53	INF

A partir de esta tabla de problema, se manejó una aplicación web de la escuela de ingenierías industriales¹⁵ para elaborar un gráfico que contuviese la serie de datos a la que se conoce como “Curvas compuestas” o “CC”, que no es más que una línea que integra todas las corrientes frías, con las coordenadas de la temperatura en el eje de ordenadas y los DUTY en el eje de abscisas. Esta representación es muy útil, porque nos proporciona el valor mínimo de calefacción y refrigeración necesario para llevar a cabo el proceso, para una diferencia mínima de temperaturas dada (se eligieron 10 grados, un valor adecuado para líquidos¹⁶). Estos valores, respectivamente, son el desfase entre los extremos, por la derecha y por la izquierda.

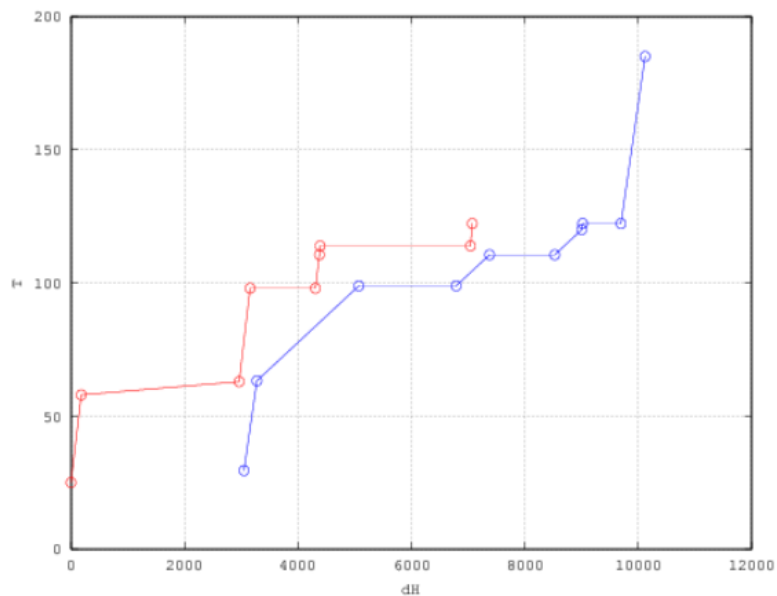


Ilustración 47. Curvas compuestas.

Sabidos estos valores numéricos, se elaboró una tabla para decidir, de un primer vistazo, si era necesaria una inversión en la mejora del sistema de

¹⁵ <http://hix.eii.uva.es/hix/fb.pl> (Mato, n.d.)

¹⁶ Para líquidos, la temperatura de Pinch suele variar entre 10 y 20 grados. Se elige por criterios económicos, pero como no se dispone de datos económicos se ha elegido arbitrariamente.

contacto entre corrientes, en función de si la capacidad de ahorro era elevada, o, por el contrario, era mínima:

Tabla 25. Posibilidades de ahorro de energía.

	Calefacción	Refrigeración
Total, utilizada [kW]	7072.54	7075.33
Mínima requerida [kW]	3046.90	3049.60
Exceso¹⁷ [kW]	4025.64	4025.73
Capacidad de ahorro	57%	57%

Los valores de refrigeración y calefacción totales se obtienen de la suma de los valores de las tablas 23 y 24, respectivamente.

La capacidad de ahorro de energía en los dos sistemas, tanto en refrigeración como en calefacción, es muy elevada, por lo que, basado en este primer estudio, se decidió realizar una propuesta de red de intercambio de calor de mínimo consumo y de un sistema de servicios generales que se adecuara a la situación del proceso actual.

Propuesta de servicios generales

Para elegir los servicios más adecuados para la planta de producción, se utiliza otra representación gráfica que calcula la aplicación web, que se denomina “Gran curva compuesta” o “GCC”, que se muestra en la ilustración 48. La línea de color rojo representa las corrientes de proceso, y el punto de entalpía 0 representa un Pinch (punto de mínima diferencia de temperaturas) entre las corrientes del proceso.

La línea de color azul representa los servicios generales (SG), también llamados Utilities, en inglés. Los SG se colocaron adecuadamente en el diagrama: la calefacción, completando el hueco entre el valor de DUTY del extremo superior y el eje de ordenadas, siempre por encima de la curva roja, y la refrigeración, del mismo modo, por debajo.

¹⁷ El exceso de refrigeración y el de calefacción deben tener el mismo valor, la diferencia de 9 centésimas de kilovatio se debe a que la aplicación web proporciona los valores de mínimos con una sola cifra decimal.

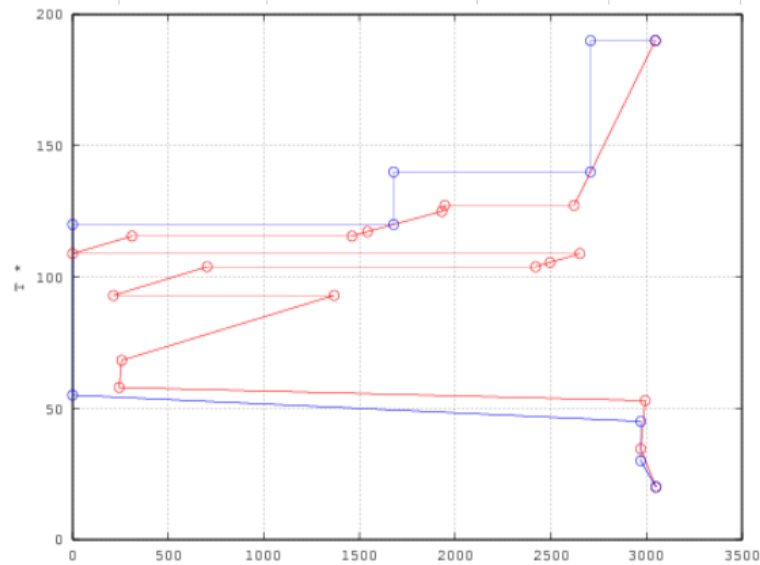


Ilustración 48. GCC.

El sistema de SG que se propuso y que se ve reflejado en la ilustración es el siguiente:

Tabla 26. Servicios generales

		TEMPERATURA [°C]	DUTY [kW]
CALEFACCIÓN	HPS	195	-339.5
	MPS	145	-1028.9
	LPS	125	-1678.5
REFRIGERACIÓN	CW	15-25	79.6
	AIRE	40-50	2970.0

La suma de los DUTY de los SG de refrigeración y de calefacción suman los valores mínimos. Se justificó la utilización de este sistema de servicios mediante criterios de consumo de energía, sin tener en cuenta costes de instalación.

El vapor saturado tiene un coste más elevado cuanto mayor es el nivel térmico. El vapor de alta presión (HPS) se justificó por la presencia de una corriente a 185 grados y la necesidad de calentarla de alguna manera, utilizando algo que estuviese, como mínimo, a 10 grados centígrados más. La instalación de sistemas de calefacción con vapor saturado a media (MPS) y baja presión (LPS) se propuso para minimizar el consumo de HPS, y el uso de vapor de dos niveles en vez de un nivel intermedio podría discutirse en el futuro. El ánimo de este estudio también es minimizar el uso de MPS, en favor del LPS.

Con respecto a la refrigeración, se ofreció la posibilidad de colocar una pequeña instalación de refrigeración por agua (CW o agua subenfriada “Chilled

water”, si fuese inviable obtener CW a 15 grados, depende de la localización y de la temperatura ambiente), o, si se pudiese, obtener el agua del río o del mar abarataría los costes enormemente para llegar a estas temperaturas. Por otro lado, el mayor aporte de refrigeración al proceso se debe al aire. Se planteó la posibilidad de instalar un sistema de aerorrefrigeración que proporcionase aproximadamente 3 MW.

Se repite que todos los criterios con los que se elige la propuesta se refieren a ahorro en el consumo en el proceso, y no a costes de instalación ni de funcionamiento del área de SG.

Propuesta de red de intercambio de calor

Se integraron los servicios generales en las “CC” y las “GCC” y los resultados fueron los siguientes:

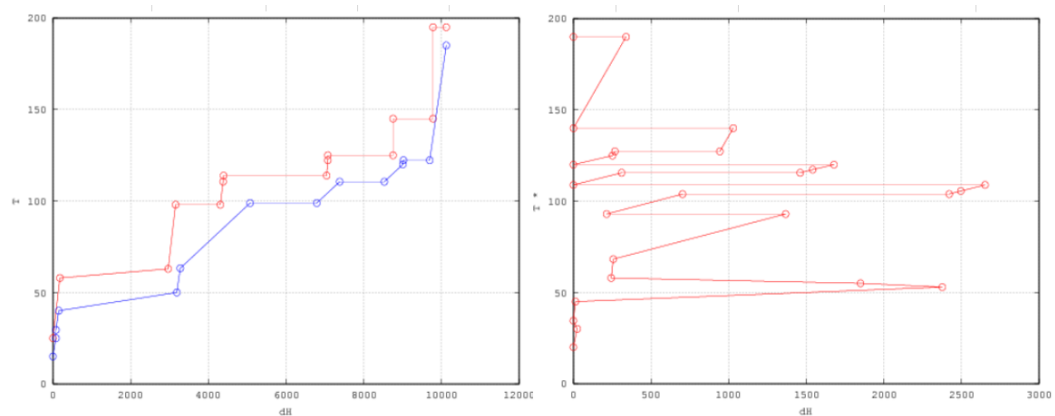


Ilustración 49. CC y GCC Combinadas

Gracias a estas curvas combinadas, se conoció la ubicación de los Pinch, o puntos de mínima diferencia de temperatura y, conocidos estos, se construyó el diagrama de trama en el que se muestra la propuesta de red de intercambio de calor de mínimo consumo. El diagrama se encuentra en el Anexo I. Diagramas de proceso.

Debe estudiarse en el futuro si la inversión (CAPEX) en intercambiadores de calor y sistemas de tuberías compensa el ahorro energético que podría producirse (OPEX). La red de mínimo intercambio tiene 19 cambiadores de calor, uno por encima del mínimo número con esos servicios, y 9 por encima de la solución inicial.

De primera mano, siendo un ahorro tan importante, de casi el 60% del gasto energético de la planta, en principio, la integración energética propuesta es una muy buena opción, pero debe realizarse un estudio de si la propuesta es la mejor posibilidad o hay posibilidades mejores. Para ello, si la planta llegase a construirse, se debería consultar con las empresas de servicios, que serían quienes proporcionarían los valores de los costes.

4. Balance económico

4.1. Potencial económico

El proceso que se estudió en este caso resultó interesante, además de por las aplicaciones, citadas en el apartado 2.2.4, del tetrahidrofurano, por el potencial económico de la reacción de deshidrociclación. La reacción es la siguiente:

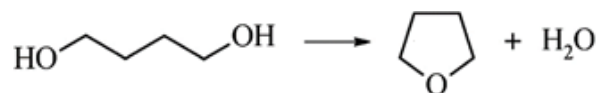


Ilustración 50. Reacción de deshidrociclación

Como se ve, la estequiometría es 1:1 (BDO:THF), es decir, por cada mol de 1,4-butanodiol que entra al reactor, se obtiene un mol de tetrahidrofurano. Al ser una reacción de descomposición, existe una pérdida de masa, en este caso en forma de agua (18 g/mol), y el peso del producto obtenido es menor que el peso del reactivo influente, lo que influye de manera directa en el análisis económico del proceso.

Los valores de mercado, obtenidos de la página web EChem (Chemicals Prices & Chemical Industry Market Analysis, Insights | Echemi, n.d.), se tomaron como los precios de venta de dos empresas localizadas en la República Popular de China. El precio del BDO se tomó como el valor de venta de la empresa Xinjiang Blue Ridge Tunhe, y el precio del THF, de la empresa Yingkou Kanghui Petrochemical, con fecha de 13 de agosto de 2021. Es posible que los precios hayan sufrido variaciones recientes, en el caso de que el proyecto fuese a llevarse a la realidad debería de realizarse un estudio económico con los valores más actualizados, pero estos valores nos aportan una primera idea del potencial del proyecto y de lo favorable que sería una inversión. En la tabla posterior se resume la viabilidad económica de la reacción química, sin tener en cuenta los costes de instalación ni de operación:

Tabla 27. Potencial económico de la reacción

	BDO (reactivo)	THF (producto)
Estequiometría	1	1
Peso molecular (kg/kmol)	90.12	72.10
Precio unitario (\$/kg)	3.6	6.3
Coste (\$)	324.43	454.23
Beneficio por kmol introducido (\$)		129.8

Como se puede apreciar, el beneficio es bastante notable, más de 100 \$ por kilomol introducido. Si se asocia este resultado obtenido con el balance de materia explicado en el apartado 3.6, más concretamente con el valor del flujo molar de entrada de reactivo, obtenemos un resultado de beneficio anual de:

$$95.5 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} \cdot \frac{24 \text{ h}}{\text{d}} \cdot \frac{365 \text{ d}}{\text{año}} \cdot 129.8 \frac{\$}{\text{año}} = 108.6 \frac{\text{mill.}\$}{\text{año}}$$

4.2. Análisis económico del proyecto

En la página anterior se cuantifica el beneficio obtenido puramente por la reacción, pero ese no es el beneficio neto total del proyecto, porque hay que tener en cuenta los costes de oportunidad perdidos en el proceso, por las pérdidas de reactivo y producto que se pierden en la corriente de agua que se marcha a la planta de tratamiento y se oxidan, perdiendo todo su valor. Para calcular el precio de la corriente se multiplicó el precio de reactivo y producto por su fracción másica en la corriente, resultando una pérdida de casi 19 \$ por hora (ver balance de materia).

Además de esto, la ejecución del proyecto tiene un coste añadido a mayores de la adquisición de los reactivos. Este coste incluye los servicios generales del proceso, tanto los energéticos de calefacción y refrigeración que se utilizan en el proceso, como la electricidad necesaria para que funcione todo el cableado que conecta la instrumentación, y que permite el control del proceso. En último lugar, a los gastos hay que añadirles el precio de adquisición e instalación de los equipos necesarios para ejecutar el proceso, columnas, bombas, etc.

ASPEN Plus es capaz de realizar un análisis económico resumido de los costes de ejecución del proceso. Requiere que se especifiquen el tipo de equipos que se utilizan, por ejemplo, para las bombas, el tipo de bomba, o los tipos de intercambiadores, y, como resumen principal, muestra la siguiente tabla:

Tabla 28. Análisis económico

Total Capital Cost [USD]	6 819 170
Total Operating Cost [USD/Year]	296 661 000
Total Raw Materials Cost [USD/Year]	271 114 000
Total Product Sales [USD/Year]	379 165 000
Total Utilities Cost [USD/Year]	2 333 940
Desired Rate of Return [Percent/Year]	20
P.O. Period [Year]	3.36784
Equipment Cost [USD]	808 100
Total Installed Cost [USD]	2 801 800

- Capital cost (CAPEX): es la inversión inicial que hay que realizar para construir la planta.
- Operating cost (OPEX): es el coste de funcionamiento anual de la planta de producción.
- Total Raw Materials Cost: es el precio de los reactivos.
- Product Sales: es el precio de los productos (incluye el coste de oportunidad de la corriente de agua residual, que tiene valor negativo).
- Utility Cost: es el precio de los servicios generales que intervienen en el proceso (excluyendo los eléctricos).

- Desired rate of return: es el porcentaje de la inversión deseado que se recupere cada año.
- PO Period: es el tiempo que tarda el proyecto en tener un flujo de caja positivo.
- Equipment cost: es el coste de los equipos del proyecto.
- Installed cost: incluye el equipment cost y los costes de obra civil, conducciones, costes de personal, etc.

Al igual que el potencial económico, en este tipo de análisis, el precio de venta de los productos supera a los costes de operación y, como se verá a continuación, la planta proporciona beneficios anuales bastante altos. El beneficio anual resulta de la diferencia entre los ingresos por la venta de THF y los costes de operación, que resulta de 82.5 millones al año.

Para que se vea de forma visual la evolución de la rentabilidad de proceso a lo largo del tiempo, se representa el valor actual neto (VAN), que es una actualización periódica de los flujos de caja que indica cuánto se va a ganar o perder con la inversión realizada.

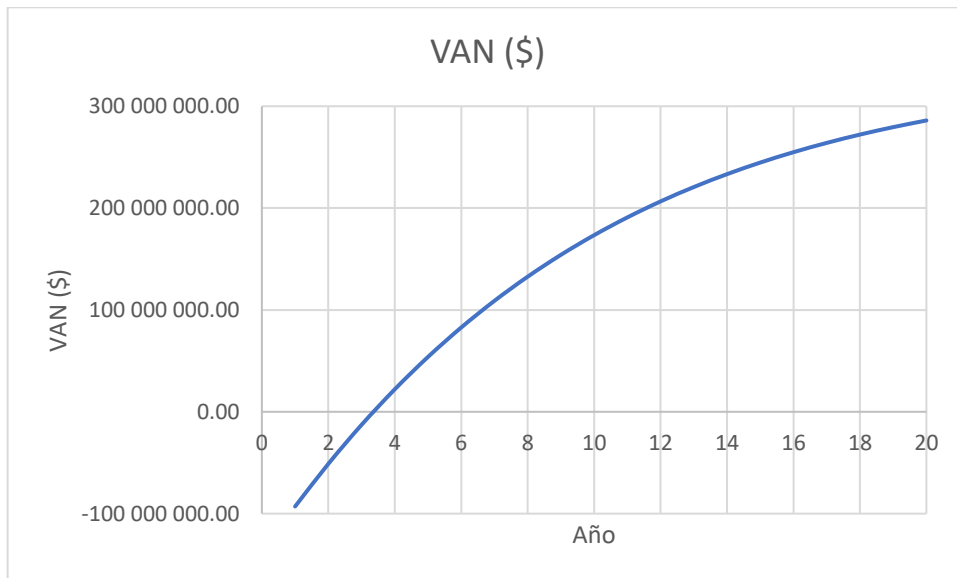


Ilustración 51. Valor actual neto

Que el VAN se vuelva positivo y vaya aumentando gradualmente con el paso del tiempo indica que la inversión es adecuada y que es una planta atractiva para el inversor. Además, ASPEN Plus proporciona un índice de rentabilidad mayor que uno, que refuerza la idea anterior.

5. Seguridad e impacto ambiental

5.1. Seguridad

En todos los proyectos es necesario realizar una evaluación de los peligros potenciales que puede acarrear su ejecución. Estos peligros pueden deberse a la naturaleza de los compuestos químicos que circulan por la planta, así como los peligros operacionales que puedan surgir durante la operación, como escapes y derrames, aumentos de presión...

5.1.1. Peligros referidos a la naturaleza de los compuestos

Para analizar los compuestos químicos y sus peligros potenciales, hay disponibles online varias herramientas. Por ejemplo, las ICSC, que son las fichas de seguridad química internacionales, que son redactadas por expertos de la Organización Mundial de la Salud, OMS, (*ICSC Database: International Chemical Safety Cards (ICSCs)*, n.d.), en las que se resumen los peligros en cuanto a incendios y explosiones, cómo afecta cada elemento al cuerpo, qué hacer en caso de escapes, etc.

Para completar la información de las ICSC, se adjuntan al documento del proyecto, como Anexo III. Fichas de seguridad, las fichas de seguridad redactadas y revisadas por la empresa ThermoFisher Scientific, de cada uno de los compuestos. Estas fichas, también contienen información sobre los peligros hacia el medio ambiente y la ecotoxicología, que se utilizan en la redacción del apartado 5.2 de impacto ambiental.

Peligro de incendio y explosiones

Salvo el BDO, los otros tres compuestos químicos MeOH, PrOH y THF, coinciden en ser altamente inflamables, y la mezcla de sus vapores con aire resulta explosiva, por eso, para prevenir estos peligros, es adecuado evitar cualquier tipo de fuente de ignición, y almacenarlos en sistemas a prueba de incendio y separados de sustancias oxidantes fuertes. Los equipos y el diseño, debido a estos peligros de inflamabilidad y explosividad, deben seguir las normativas ATEX, de trabajo en atmósferas explosivas, directivas 94/9/CE (ATEX-100) y 99/92/CE (ATEX-137) de la Comisión Europea (*Normativa ATEX*, n.d.). Además, se debe disponer de sistemas antiincendios adecuados, por ejemplo, extintores o bocas de incendio que utilicen agua pulverizada, CO₂ o espuma resistente al alcohol. La planta debe constar también de un plan de evacuación de emergencia por si un incendio se produjese de forma accidental.

Protección personal de los trabajadores

También el BDO es menos peligroso que los otros tres para los humanos, inhalarlo puede producir somnolencia. El contacto con los otros tres puede

producir enrojecimiento y dolor de ojos y piel, y su ingesta o inhalación puede producir vértigos, mareos, tos, náuseas, y otros muchos síntomas.

Por eso, para la seguridad de los operarios, es necesario que trabajen con guantes y traje de protección, y pantalla facial o protección ocular y respiratoria, como equipos de protección individuales (EPIs) principales. Además, debe trabajarse en ambientes bien ventilados y con sistemas de extracción para evitar inhalación en grandes cantidades, y con lavadores de ojos, boca y piel disponibles y cercanos a los puntos de trabajo con cada compuesto.

Los valores límite de exposición laboral se marcan en las propias fichas de seguridad, y los desarrolladores del proyecto deben comprometerse a que todas las medidas de seguridad pasiva se cumplan, así como de contratar o designar a un supervisor de la seguridad de la planta de producción.

5.1.2. Seguridad en el proceso

Como en todos los procesos químicos que se llevan a cabo en plantas de producción, en este diseño son susceptibles de ocurrir algunos fallos, para los que la planta de producción debe estar preparada y capacitada para que no tengan consecuencias, ni en el proceso, ni, sobre todo, en la salud de los trabajadores.

De esta forma, el sistema cuenta con sistemas de alarma colocados en cada equipo, que se encargan de enviar una señal de alerta al panel de control, en caso de que el valor de una variable sea anormalmente muy alto o anormalmente muy bajo, para que el operario de panel avise al personal y comiencen las acciones de seguridad activa.

Adicionalmente, por si no fuese posible controlar esos valores, y se disparasen o cayesen de forma brusca y muy pronunciada hacia valores muy altos, o muy bajos, la planta dispone de un sistema de control distribuido que, además de controlar la línea que sigue el fluido en cada zona de bombeo, como se explica en el apartado 3.2.2. P&ID, es capaz de realizar una parada de la planta gracias a los "Switches". La localización de los "Switches" y las alarmas en la planta se refleja en el P&ID.

Problemas de presión

El sistema es un sistema de conducciones y equipos en los que, salvo en las torres de destilación y, por consiguiente, en los condensadores, se trabaja en fase líquida, así que, salvo en esos puntos (3, uno en cada cabeza de las 3 torres de destilación), y en las zonas donde se utiliza vapor a alta presión como calefactor, no existe peligro de sobrepresión excesiva que pueda desembocar en explosiones.

En estos puntos, como medida de seguridad pasiva, se decidió proyectar la implantación de válvulas de seguridad, representadas en el P&ID como PSV. Estas válvulas se utilizan para aliviar sobrepresiones por efecto de la contrapresión. Si la presión interior es mayor que la contrapresión realizada por un resorte, tarada con un tornillo de ajuste, la presión interior vence la fuerza y el gas escapa del interior del equipo, hacia la atmósfera o hacia un quemador.

Problemas de temperatura

La temperatura, en varios puntos del sistema, por no decir en todos, es una variable crítica a la hora de velar por la seguridad de los trabajadores, pues una alta temperatura puede tener dos grandes problemas

- El primero, más visible, es el efecto del contacto de los trabajadores con los puntos de alta temperatura, pues puede provocar quemaduras muy graves en su piel si no están protegidos adecuadamente. Por esto, en las zonas en las que los equipos tienen una alta temperatura, pero no es necesario ni beneficioso que el calor se retenga en el fluido, debe colocarse un sistema de aislamiento de equipos y líneas (fibra de vidrio, cerámica o similar) que proteja a los operarios ante cualquier efecto dañino.
- El otro problema es que, un aumento de la temperatura puede desembocar en la evaporación de alguna corriente en algún punto de la planta que no esté preparado para el flujo de gases a través de él, y pueda provocar aumentos de presión que desemboquen en explosiones de líneas o equipos.

Además de que, cuando se diseñen y contraten las líneas de conducción y los equipos, se traten estos temas de seguridad y, los suministradores sean quienes informen acerca de la seguridad de los materiales que ofertan, en el P&ID se realiza un control exhaustivo de la temperatura a la salida de cada intercambiador de calor, de forma que, si, de repente, aumentase anormalmente (o disminuyese, pero eso no es peligroso para los trabajadores), hay un sistema de control que se encargaría de reducir el flujo de vapor o aumentar el flujo de refrigeración, y regular esa subida.

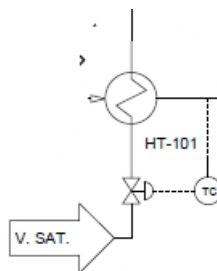


Ilustración 52. Control de la temperatura

Problemas de flujo y de nivel

El nivel en los depósitos debe ser regulado por seguridad para el proceso, no hay posibilidad de que afecte a los trabajadores. Sin embargo, un alto nivel puede provocar un rebose de los depósitos o de las torres e impedir el flujo de más líquido hacia su interior, impidiendo el flujo normal del fluido de proceso. Para evitar esto, existen en todos los equipos de líquido, sea cual sea su función, drenajes que permiten reducir el nivel y permitir una correcta operación.

El punto crítico en el que el flujo puede acarrear problemas es en las torres, en la entrada de la alimentación, del reflujo, o del vapor del calderín, pues un exceso de ellos puede producir inundaciones o goteos que fastidien el funcionamiento correcto de las columnas.

5.1.3. Análisis HAZOP

El Análisis de Riesgos HAZOP tiene como objetivo la identificación de peligros potenciales (HAZards) y problemas operativos (Operability Problems) en industrias, y es exigido por Real Decreto (RD 1254/1999 + 948/2005) sobre control de riesgos inherentes a los accidentes graves en los que intervengan sustancias peligrosas.

Es un método sistemático y cualitativo que se basa en la identificación de las posibles desviaciones en variables del proceso, y, tras esa identificación, la evaluación de sus causas, sus consecuencias, y las posibles acciones correctoras que se podrían llevar a cabo para mitigar esas consecuencias. Se realizó un análisis HAZOP, como ejemplo, para varias operaciones unitarias críticas, como el reactor, una operación de destilación, y un intercambiador de calor.

En el Anexo VI. HAZOP T-101 se muestra un ejemplo de análisis HAZOP en un punto crítico de funcionamiento del sistema, la columna de destilación primaria. Un fallo en ella puede arrastrarse hasta las otras dos operaciones de destilación, y un fallo en la línea de entrada desemboca en perturbaciones en su funcionamiento, así que se decidió enfocar un análisis en ella. De todos modos, en revisiones posteriores deberían realizarse evaluaciones HAZOP sobre todos los nodos del proceso.

5.2. Impacto ambiental

Se plantearon las principales consecuencias adversas en relación con el medio ambiente. En los tiempos recientes, la preocupación por el efecto de la actividad humana sobre los ecosistemas, y el planeta en general, ha ido en crescendo, y autoridades locales, nacionales e internacionales han comenzado a implantar algunas medidas restrictivas que regulen los procesos productivos, de forma que sean menos nocivos para la salud de aire, agua y suelo, principalmente.

Además de los efectos que pueda tener la obra de instalación y construcción de la planta, en el presente documento se recogieron los problemas que el proceso químico acarrea, bien por el consumo energético o bien por el vertido o la emisión de los compuestos que participan en él, de los cuales se recogen las fichas de seguridad en el Anexo III. Fichas de seguridad.

Se muestra una tabla resumen en la que se indica la biodegradabilidad y la toxicidad, con respecto al medio ambiente, de los compuestos orgánicos presentes, según el apartado 12.5 de las fichas de seguridad citadas anteriormente:

Tabla 29. Impacto ambiental de los componentes

	Biodegradabilidad	Bioacumulación	Toxicidad
MeOH	Fácilmente biodegradable	No persiste	No se considera tóxico
PrOH	Supuestamente biodegradable	Improbable	No se considera tóxico
BDO	Fácilmente biodegradable	Improbable	No se considera tóxico
THF	Biodegradable	No se acumula	No se considera tóxico

Afortunadamente, ninguno de los compuestos químicos tiene muchas consecuencias graves aparentes sobre el medio, sino que todos son biodegradables y no es un gran problema que pueda haber escapes, siempre que se controlen adecuadamente y no sean de gran cantidad, aunque, como se explicó en el apartado de seguridad, sean tóxicos para los vertebrados terrestres si, como se explica en las fichas de seguridad, en su apartado 2.1, son dañinos para la piel o si se produce inhalación o ingestión.

5.2.1. Efectos sobre la atmósfera

Se destacaron dos puntos principales perjudiciales para la atmósfera si la planta se encuentra en funcionamiento:

- En primer lugar, aunque no se refiera directamente al proceso diseñado, los requerimientos energéticos, ya sean de proceso o de instalación eléctrica, implican la producción de una cantidad de energía que siempre, en mayor o menor medida, acarrea una contaminación asociada.

En el caso de que la obtención del vapor a alta temperatura se obtenga en una caldera de gas, que es habitual, la quema del combustible produce emisiones, principalmente de CO₂, que deben ser controladas por los gestores de los servicios, sean de la propia empresa o subcontratados, utilizando, por ejemplo, dispositivos de captura de CO₂, con el objetivo de reducir la contribución de la planta al efecto invernadero y al calentamiento global.

- El otro problema es la emisión de compuestos orgánicos volátiles (COVs) en puntos en los que la corriente de proceso circula en estado gaseoso. Estos puntos, que son las zonas de las cabezas de las torres de destilación, cuentan con venteos que permiten evacuar el gas para realizar operaciones de limpieza y/o mantenimiento, además de contar con válvulas de seguridad que se abren si la presión es elevada.

El problema principal de los COVs para la atmósfera es que se mezclan con los óxidos de nitrógeno (NO_x), en presencia de luz solar, y se forma ozono troposférico, o a nivel de suelo, que es nocivo para la salud y causante del fenómeno denominado smog fotoquímico (Fernández, 2006).

Para evitar las emisiones de este tipo de compuestos directamente a la atmósfera, se decidió proponer un sistema de incineración de COVs, de forma que no se emitan a la atmósfera, sino que se produzca una combustión y se transformen en CO₂, y agua, principalmente, y sean emisiones menos problemáticas, aunque también perjudiciales.

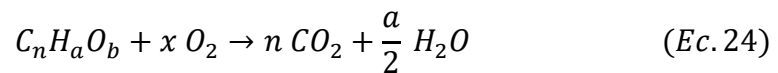
Otras opciones que deberían estudiarse son la condensación de los gases, para devolverlos de retorno al tanque de almacenamiento o al tanque V-101 para evitar pérdidas indeseadas, o la adsorción en carbón activo, aunque esta última tiene un coste mucho mayor, por el precio del carbón.

5.2.2. Efectos sobre el agua

Al igual que ocurre con los venteos, se implantó un gran número de drenajes para retirar fluido de las conducciones de la planta y realizar las operaciones de mantenimiento y limpieza. En las líneas en las que el fluido circulante no es agua pura, el drenaje del líquido, con alto contenido en materia orgánica, puede mezclarse con la línea de agua residual generada en el proceso.

La corriente de WW que se separa por las colas de la columna T-103 es agua que se origina en el proceso, y que puede ser empleada como agua caliente sanitaria (ACS) que se pueda utilizar en la planta, o en el propio proceso de producción, como servicio, para generar vapor en la caldera, si se realizara un tratamiento de desaireación, y se alimentara a la caldera como Boiler Feed Water, (BFW), o para introducirla en el sistema de refrigeración y generación de CW.

En cualquier caso, se cuantificó, en primer lugar, la carga orgánica que tiene la corriente, pues, aunque el agua sea el componente mayoritario, la corriente está compuesta también por un 0.615 % en masa de compuestos orgánicos. Para cuantificar la carga orgánica se utiliza el parámetro conocido como DQO (demanda química de oxígeno, en mg O₂/l) que es la cantidad de oxígeno necesario para oxidar toda la materia orgánica de cada componente. Para calcular la DQO de la corriente se utiliza la siguiente ecuación (Aguirre, 2013):



$$x = \frac{4 \cdot n + a - 2 \cdot b}{4} \tag{Ec. 25}$$

donde x es el número de moles de O₂ necesarios para oxidar 1 mol de compuesto orgánico. Conocidos los moles de oxígeno, y, del balance de materia, los moles por hora de compuesto orgánico, con el caudal, en litros por hora, que es de 1736.3 l/h, de corriente de agua residual, y los pesos moleculares, se obtuvieron los valores de DQO de cada compuesto en la corriente, y con todo, el total. Se indica en la siguiente tabla:

Tabla 30. DQO de la corriente WW-2

	MeOH	PrOH	BDO	THF
n	1	3	4	4
a	4	8	10	8
b	1	1	2	1
x (mol O₂/mol)	1.5	4.5	5.5	5.5
Flujo molar (mol/h)	74.74	67.99	47.56	7.77
DQO (mg O₂/l)	1033.15	2819.46	2410.77	393.84

Sumando todos estos valores, el valor de la DQO de la corriente WW-2 es de 6657.21 mg O₂/l, una carga orgánica bastante elevada. De acuerdo con estos valores, se ofreció la posibilidad de colocar un sistema de oxidación biológica, un sistema de digestión anaerobia, que cargas orgánicas así de grandes, es una buena opción.

Este tipo de tratamiento, además de, típicamente, retirar entre un 80 % y un 90 % de la DQO de la corriente, no requiere aireación, y es capaz de producir biometano, concretamente, 0.35 Nm³ por cada kilogramo de DQO eliminado. Tomando el valor medio de eliminación, 85 %, y, sabiendo que el valor energético del CH₄ es de 35.8 kJ/l, es posible conseguir un excedente de energía de 4 kW que, honestamente, no es demasiado alto.

Además, aunque el rendimiento sea de en torno a un 85 %, el valor de la DQO efluente sigue siendo muy elevado, así que es posible que sea interesante colocar seguidamente a este tratamiento otra oxidación biológica, en este caso aerobia, que consiguiese retirar aún más DQO. Los 4 kW obtenidos podrían utilizarse en el funcionamiento de la zona de tratamiento de aguas, aunque sería necesario, de todas maneras, un aporte externo de energía.

6. Conclusiones

Como conclusión y resumen del proyecto. El BDO es una materia prima ideal, pues partiendo de él se puede obtener THF con conversiones elevadas, en este caso, del 98 %.

Se ha decidido que la mejor ruta posible para la obtención de THF es una reacción a alta temperatura, pero en fase líquida (por tanto, a alta presión), en un lecho fijo, con una catálisis heterogénea sobre zeolitas ZSM-5. La reacción de deshidrociclación produce THF y agua, que forman un azeótropo, así que es necesario realizar una destilación azeotrópica (destilación en dos presiones) para romper el azeótropo y obtener THF puro (>99.9 %w/w). El agua formada se separa del reactivo (BDO) no consumido en otra columna de destilación, y se envía a una zona de tratamiento de agua capaz de reducir su carga orgánica.

El análisis económico garantiza que es un proceso muy rentable, con un beneficio anual mayor de los 80 millones de dólares, que devuelven de manera muy productiva un beneficio mucho mayor que la inversión inicial necesaria.

Este beneficio podría ser incluso mayor si se realizasen más revisiones y se atendieran a propuestas de optimización, como, por ejemplo, la integración energética del sistema que puede desembocar en un ahorro del 57 % de la calefacción y la refrigeración utilizadas, es decir, unos 4025 kW en cada caso.

7. Bibliografía

- Adsorbent Molecular Sieve 5a Zeolite Zsm - 5* . (n.d.). Retrieved 29 August 2021, from https://www.alibaba.com/product-detail/Zeolite-Zsm-5-Bead-Adsorbent-Molecular_60399946895.html?spm=a2700.galleryofferlist.normal_offer.d_title.2dc03e78DyqqGQ&s=p
- Aghaziarati, M., Kazemeini, M., Soltanieh, M., & Sahebdehfar, S. (2007). Evaluation of zeolites in production of tetrahydrofuran from 1,4-butanediol: Performance tests and kinetic investigations. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 46(3), 726–733. <https://doi.org/10.1021/ie061062m>
- Aguirre, M. (2013, November 5). *Cálculo teórico de la DQO*. <http://www.aguaydepuracion.com/calculo-teorico-de-la-dqo/>
- Chemicals Prices & Chemical Industry Market Analysis, Insights | Echemi*. (n.d.). Retrieved 29 August 2021, from <https://www.echemi.com/weekly-price.html>
- Cheng, Y., Zhongxian, Z., Jincheng, D., Weihua, L., Suxia, W., Zhengxue, W., Ligang, Z., Xinming, Z., & Zhongxian, Z. (2018). *Tetrahydrofuran fractional order reaction separator* (Patent No. CN208182895U). <https://worldwide.espacenet.com/patent/search?q=pn%3DCN208182895U>
- Chhabra, R. P., Shankar, V., & Coulson, J. M. (2018). *Coulson and Richardson's chemical engineering : volume 1B : heat and mass transfer : fundamentals and applications* (R. Chhabra & V. B. T.-C. and R. C. E. (Seventh E. Shankar (Eds.); Seventh, pp. 3–264). Butterworth-Heinemann. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/B978-0-08-102550-5.00001-8>
- Chu, P., & Lapierre, R. B. (1988). *Crystallization of ZSM-5 from reaction mixtures containing zeolite beta* (Patent No. US4650655A).
- Crespo Martínez, A. (2006). *Mecánica de fluidos* (Paraninfo (Ed.); 1st ed.).
- Ehtesham, A. (2017). *What is the difference between Class 150, 300 & 600 flange*. <https://www.trupply.com/blogs/news/109162438-what-is-the-difference-between-class-150-300-600-flange>
- Fengliang, J., Tao, L., Wenguang, Y., & Xingchen, Z. (2017). *Method for preparing anhydrous high-purity tetrahydrofuran from heteropolyacid imidazolium salt* (Patent No. CN107235936A). <https://worldwide.espacenet.com/patent/search?q=pn%3DCN107235936A>
- Fernández, A. (2006, November 13). *Efectos nocivos de los compuestos orgánicos volátiles | Consumer*. <https://www.consumer.es/medio-ambiente/efectos-nocivos-de-los-compuestos-organicos-volatiles.html>
- Ford, J. L., & Wilson, R. (1999). Thermal analysis and calorimetry of

- pharmaceuticals. In R. B. Kemp (Ed.), *Handbook of thermal analysis and calorimetry* (pp. 923–1016). Elsevier B.V.
- Gräffe, H., Körnig, W., Weitz, H.-M., Reiß, W., Steffan, G., Diehl, H., Bosche, H., Schneider, K., Kieczka, H., & Pinkos, R. (2019). Butanediols, Butenediol, and Butynediol. *Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry*, 1–12. https://doi.org/10.1002/14356007.a04_455.pub2
- Hunter, S. E., Ehrenberger, C. E., & Savage, P. E. (2006). Kinetics and mechanism of tetrahydrofuran synthesis via 1,4-butanediol dehydration in high-temperature water. *Journal of Organic Chemistry*, 71(16), 6229–6239. <https://doi.org/10.1021/jo061017o>
- ICSC database: *International Chemical Safety Cards (ICSCs)*. (n.d.). Retrieved 30 August 2021, from https://www.ilo.org/safework/info/publications/WCMS_113134/lang-en/index.htm
- Kanetaka, J., Asano, T., & Masamune, S. (1970). New Process for Production of Tetrahydrofuran. *Ind Eng Chem*, 62(4), 24–32. <https://doi.org/10.1021/ie50724a005>
- Kolmetz, K. (2020). *PLATE HEAT EXCHANGER SELECTION , SIZING AND TROUBLESHOOTING Kolmetz Handbook Of Process Equipment Design* (Issue April, pp. 1–97). KLM Technology Group.
- Li, K., & Chen, K. (2019). *Cyclodehydration of 1,4-butanediol over Zr-Al Catalysts: Effect of Reaction Medium*. 11.
- Limbeck, U., Altwicker, C., Kunz, U., & Hoffmann, U. (2001). Rate expression for THF synthesis on acidic ion exchange resin. *Chemical Engineering Science*, 56(6), 2171–2178. [https://doi.org/https://doi.org/10.1016/S0009-2509\(00\)00497-8](https://doi.org/https://doi.org/10.1016/S0009-2509(00)00497-8)
- Mato, F. A. (n.d.). *Integration Executables, IqTma, Universidad de Valladolid*. Retrieved 15 August 2021, from <http://hix.eii.uva.es/hix/fb.pl>
- Müller, H. (2011). Tetrahydrofuran. In *Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry*. https://doi.org/https://doi.org/10.1002/14356007.a26_221.pub2
- Normativa ATEX. (n.d.). Retrieved 1 September 2021, from <http://www.atmosferasexplosivas.com/index.php/normativa-atex>
- Pikra, G., Purwanto, Á., & Pramana, R. (2015). The Effect of Plate Spacing in Plate Heat Exchanger Design as a Condenser in Organic Rankine cycle for Low Temperature Heat Source. *Energy Procedia*, 68, 87–96. <https://doi.org/10.1016/j.egypro.2015.03.236>
- ResearchAndMarkets. (2019). *Global and China 1, 4-butanediol (BDO) Industry Report, 2019-2025 Featuring 13 Global and Chinese BDO Manufacturers*. <https://www.businesswire.com/news/home/20190610005589/en/Global-and-China-1-4-butanediol-BDO-Industry-Report-2019-2025-Featuring-13-Global-and-Chinese-BDO-Manufacturers---ResearchAndMarkets.com>

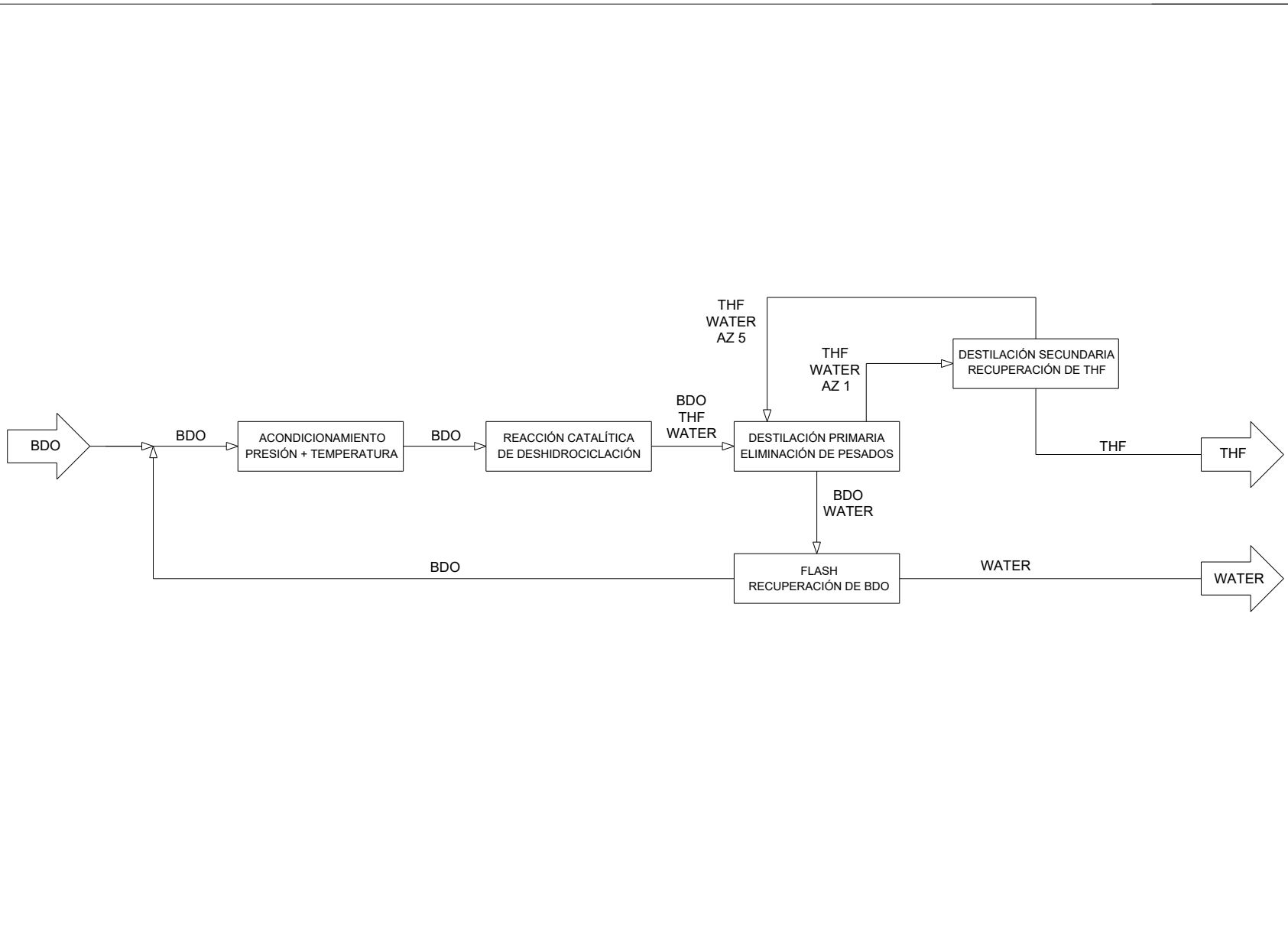
- Richardson, J. F., Harker, J. H., & Backhurst, J. R. (2002). Particle Technology and Separation Processes. In Butterworth-Heinemann (Ed.), *Coulson & Richardson Chemical Engineering* (Fifth, Vol. 2, pp. 191–236). Elsevier.
- Shinde, V. M., Patil, G. N., Katariya, A., & Mahajan, Y. S. (2015). Production of tetrahydrofuran by dehydration of 1,4-butanediol using Amberlyst-15: Batch kinetics and batch reactive distillation. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, 95, 241–248. <https://doi.org/10.1016/j.cep.2015.06.016>
- Soler & Palau. (2008). *Ventilación en ambientes explosivos*. https://web.archive.org/web/20081101180143/http://www.solerpalau.es/formacion_01_11.html
- Tavan, Y., & Hosseini, S. H. (2013). A novel integrated process to break the ethanol/water azeotrope using reactive distillation – Part I: Parametric study. *Separation and Purification Technology*, 118, 455–462. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.seppur.2013.07.036>
- Thoresen, P. P., Matsakas, L., Rova, U., & Christakopoulos, P. (2020). Recent advances in organosolv fractionation: Towards biomass fractionation technology of the future. *Bioresource Technology*, 306(January), 123189. <https://doi.org/10.1016/j.biortech.2020.123189>
- Vaidya, S. H., Bhandari, V. M., & Chaudhari, R. V. (2003). Reaction kinetics studies on catalytic dehydration of 1,4-butanediol using cation exchange resin. *Applied Catalysis A: General*, 242(2), 321–328. [https://doi.org/10.1016/S0926-860X\(02\)00528-8](https://doi.org/10.1016/S0926-860X(02)00528-8)
- Wu, H., Zhou, M., Qu, Y., Li, H., & Yin, H. (2009). Preparation and Characterization of Tungsten-substituted Molybdophosphoric Acids and Catalytic Cyclodehydration of 1,4-Butanediol to Tetrahydrofuran. *Chinese Journal of Chemical Engineering*, 17(2), 200–206. [https://doi.org/10.1016/S1004-9541\(08\)60194-9](https://doi.org/10.1016/S1004-9541(08)60194-9)

ANEXOS

Anexo

1. Diagramas de proceso

1.1. Diagrama de bloques



NOTAS GENERALES

EN ESTE DIAGRAMA SE MUESTRA UN RESUMEN MUY GENERAL DE LA SECUENCIA QUE SIGUEN LOS COMPONENTES Y Y DE LAS ETAPAS DEL PROCESO.

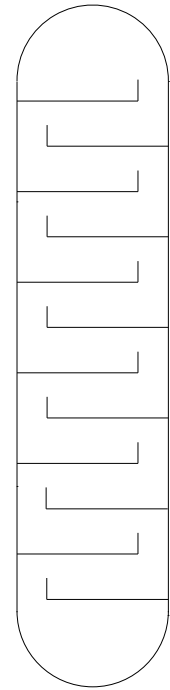
NOTAS

REV.	DESCRIPCIÓN	POR	FECHA	OK
0	FIRST DIAGRAM	JGL	13/A/2021	
LICENSED TO				
IQ UVa				
LICENSOR				
JAIME GÓMEZ				
DIAGRAM TITLE				
A4-BD-100-0				
DIAGRAM DESCRIPTION				
DIAGRAMA DE BLOQUES				
GROUP				
--				
PLANT TITLE		DWG FILENAME		
THF PLANT		DBLOQUES.dwg		
CLIENT PROJECT NUMBER		CLIENT DWG NUMBER		
1		1		
JOB NUMBER	UNIT	PAGE	REV.	
1	100	1	0	

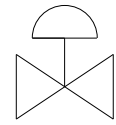
1.2. Diagrama de flujo

NOTAS GENERALES

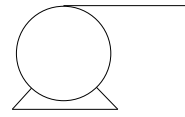
.-EN EQUIPOS DE AUMENTO DE PRESIÓN, COMO BOMBAS Y COMPRESORES (BOMBAS EN EL CASO DE ESTE PROYECTO), SE ADICIONA LA NOMENCLATURA A/B PARA INDICAR QUE HAY DOS EQUIPOS EN PARALELO, PARA OPERACIONES DE LIMPIEZA P MANTENIMIENTO



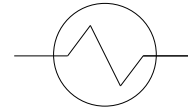
COLUMNA DE DESTILACIÓN



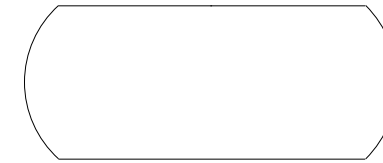
VÁLVULA DE CONTROL



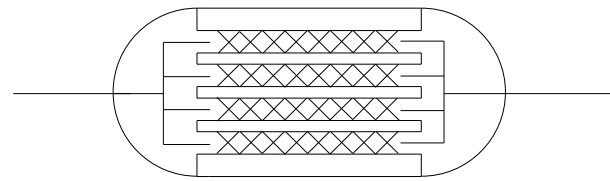
BOMBA CENTRÍFUGA



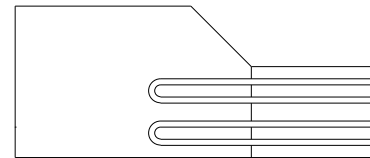
INTERCAMBIADOR DE CARCASA Y TUBOS



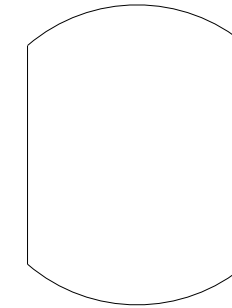
TANQUE HORIZONTAL



REACTOR CATALÍTICO MULTITUBULAR



EBULLIDOR TIPO KETTLE



TANQUE VERTICAL

EQUIPOS	
C	CONDENSADOR
CL	ENFRIADOR
HT	CALEFACTOR
P	BOMBA
R	REACTOR CATALÍTICO
RB	EBULLIDOR
T	COLUMNA
V	TANQUE

CONTROL + SERVICIOS	
FC	CONTROLADOR DE FLUJO
FT	MEDIDOR DE FLUJO
RC	CONTROL DE RATIO
LC	CONTROLADOR DE NIVEL
TC	"" DE TEMPERATURA
PC	CONTROL DE PRESIÓN
COND	RETORNO DE CONDENSADOS
CWR/CWS	RETORNO/SUMINISTRO DE AGUA DE REFRIGERACIÓN
V. SAT.	VAPOR SATURADO

NOTAS

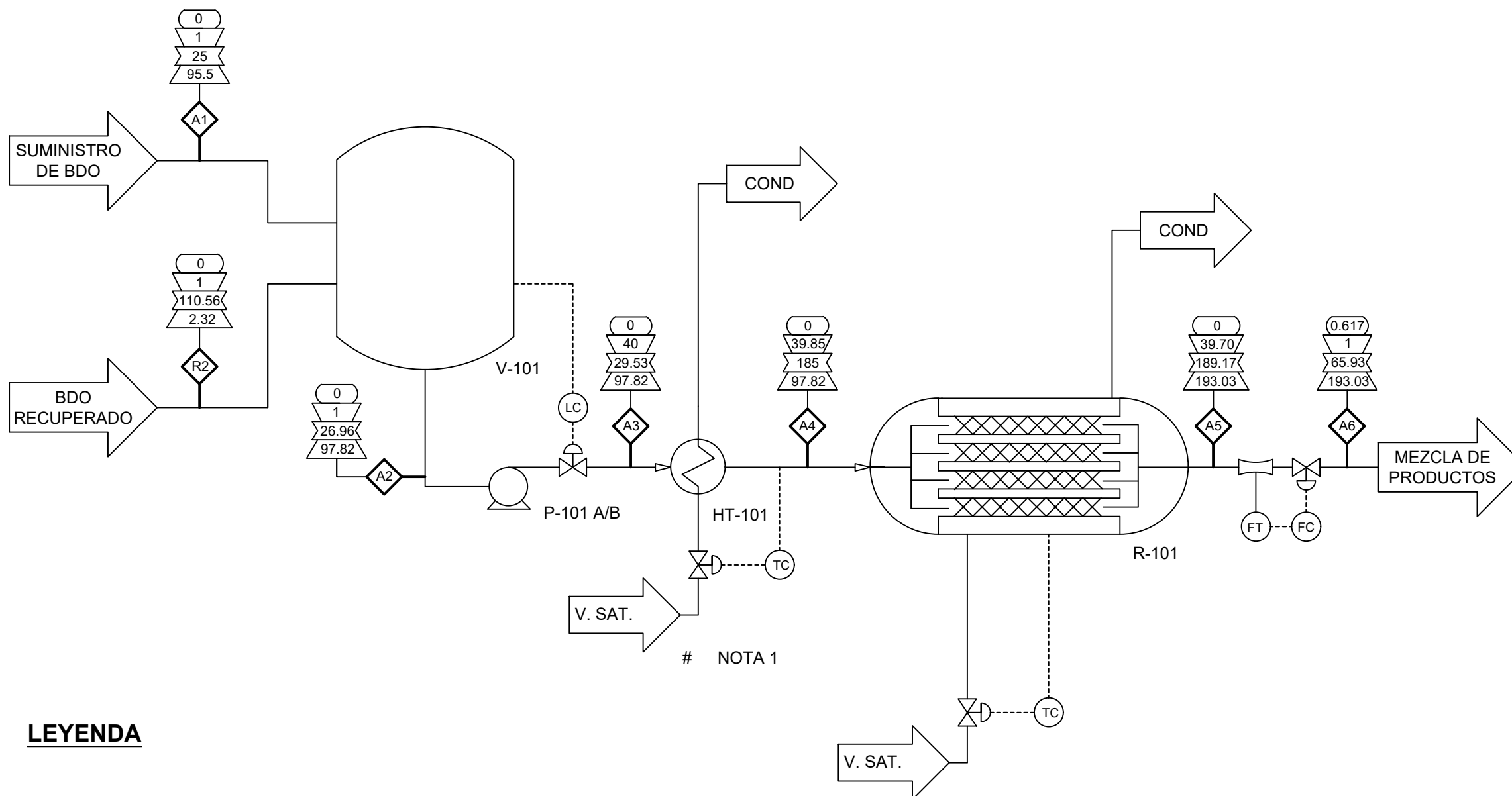
REV.	DESCRIPCIÓN	POR	FECHA	OK
0	FIRST DIAGRAM	JGL	13/A/2021	
LICENSED TO				
IQ UVa				
LICENSOR				
JAIME GÓMEZ				
DIAGRAM TITLE				
A3-PFD-100-0				
DIAGRAM DESCRIPTION				
NOMENCLATURA Y SIMBOLOGÍA				
GROUP				
--				
PLANT TITLE		DWG FILENAME		
THF PLANT		NAMING.dwg		
CLIENT PROJECT NUMBER		CLIENT DWG NUMBER		
1		2		
JOB NUMBER	UNIT	PAGE	REV.	
1	100	1	0	

V-101
TANQUE
PULMÓN
ALIMENTACIÓN

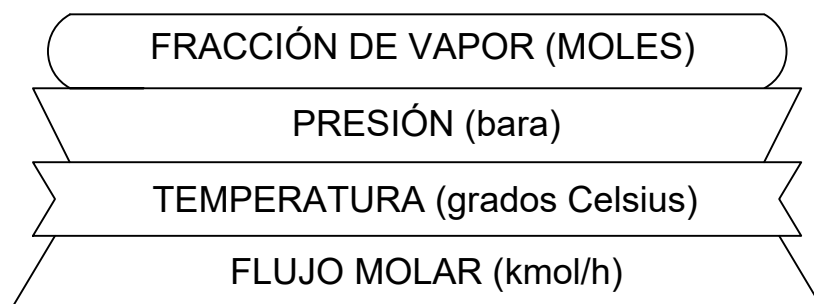
P-101 A/B
SISTEMA DE
BOMBEO
ALIMENTACIÓN

HT-101
SISTEMA DE
PRECALENTAMIENTO
ALIMENTACIÓN

R-101
REACTOR
PRODUCCIÓN
THF



LEYENDA



NOTAS GENERALES

-LA CORRIENTE DE BDO RECUPERADO PROVIENE DE LAS COLAS DE LA TORRE DE DESTILACIÓN T-103, MIENTRAS QUE LA CORRIENTE DE SUMINISTRO ES LA MATERIA PRIMA QUE ENTRA AL PROCESO PROVENIENTE DE UNA EMPRESA EXTERNA.

-LA REACCIÓN TIENE LUGAR EN EL INTERIOR DE LOS TUBOS CATALÍTICOS (ZONA MARCADA CON CRUCES) Y EL FLUIDO CALEFACTOR, EN ESTE CASO VAPOR SATURADO, FLUYE POR LA CARCASA DEL REACTOR.

NOTAS

-NOTA 1: EL VAPOR UTILIZADO INICIALMENTE EN LA SIMULACIÓN Y PARA EL QUE SE CALCULÓ EL BALANCE DE MATERIA Y ENERGÍA ERA VAPOR SATURADO A XXX PSIA, EN EL APARTADO DE INTEGRACIÓN ENERGÉTICA SE DISCUTIÓ LA POSIBILIDAD DE UTILIZAR VAPOR DE MENOR NIVEL TÉRMICO.

REV.	DESCRIPCIÓN	POR	FECHA	OK
0	FIRST DIAGRAM	JGL	13/A/2021	
LICENSED TO				
IQ UVa				
LICENSOR				
JAIME GÓMEZ				
DIAGRAM TITLE				
A3-PFD-101-0				
DIAGRAM DESCRIPTION				
SECCIÓN DE REACCIÓN				
GROUP				
--				
PLANT TITLE		DWG FILENAME		
THF PLANT		SEC-REAC.dwg		
CLIENT PROJECT NUMBER		CLIENT DWG NUMBER		
1		3		
JOB NUMBER	UNIT	PAGE	REV.	
1	100	2	0	

T-101
TORRE
DESTILACIÓN
PRIMARIA

RB-101
EBULLIDOR
DESTILACIÓN
PRIMARIA

C-101
CONDENSADOR
DESTILACIÓN
PRIMARIA

V-102
TANQUE
ACUMULACIÓN
DESTILADO
D. PRIMARIA

P-102 A/B
BOMBA
REFLUJO
D. PRIMARIA

V-103
TANQUE
HOMOGENEIZACIÓN
INTERMEDIO

HT-102
PRECALENTADOR
EBULLIDOR
D. SECUNDARIA

CL-101
ENFRIADOR
PRODUCTO

CL-102
ENFRIADOR
AGUA RESIDUAL

NOTAS GENERALES

PARA EVITAR REDUNDANCIAS, LA LISTA DE EQUIPOS ASOCIADOS A LAS TORRES SE RESUMIÓ. ESTAS SON LAS EQUIVALENCIAS:

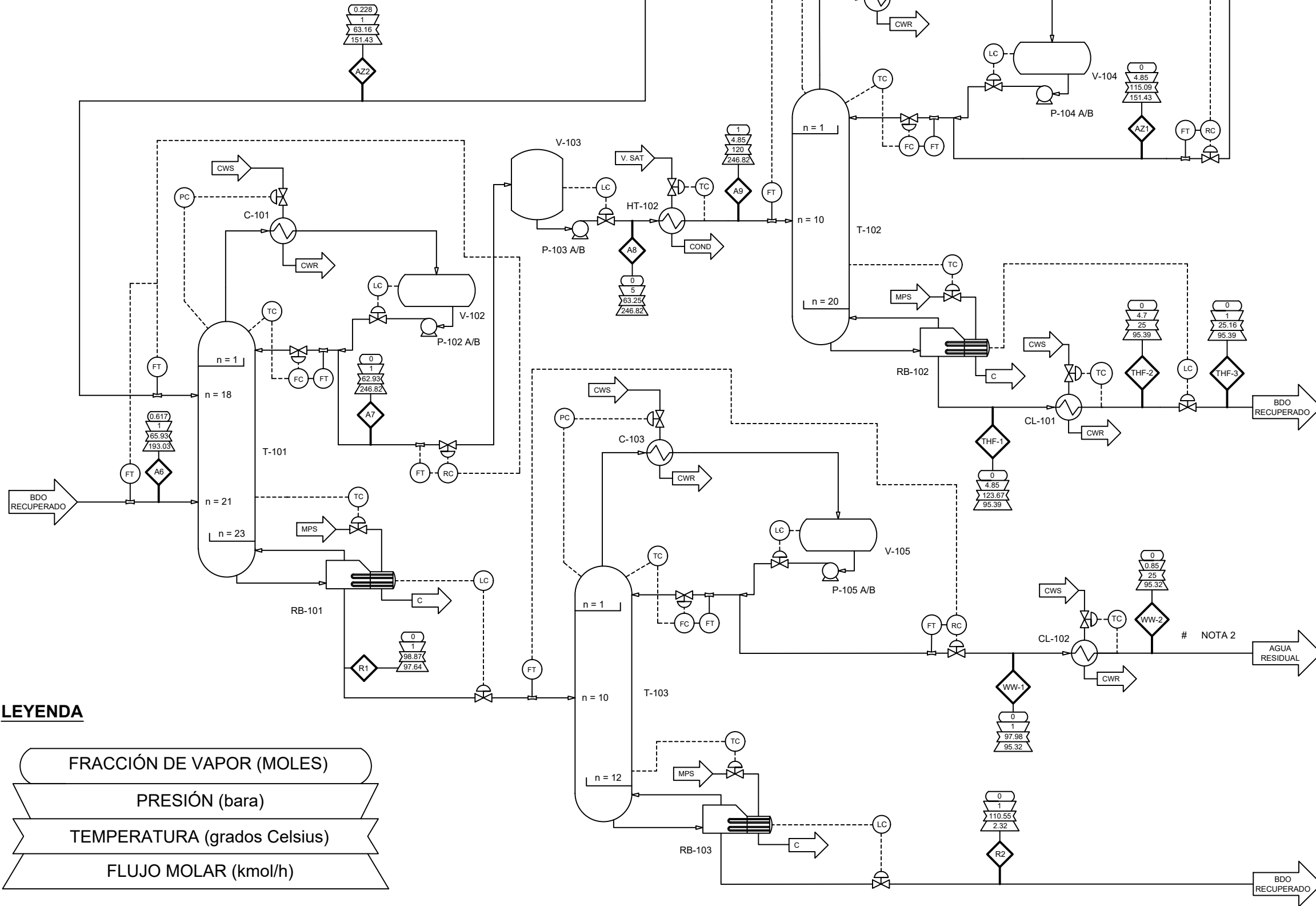
- COLUMNA: T-101 = T-102 = T-103
- COND.: C-101 = C-102 = C-103
- EBULL.: RB-101 = RB-102 = RB-103
- TQ. ACUM: V-102 = V-104 = V-105
- BOMBA: P-102 = P-104 = P-105

EL BDO RECUPERADO SE ENVÍA AL TANQUE DE MEZCLA V-101 SITUADO EN LA SECCIÓN DE REACCIÓN, Y EL AGUA RESIDUAL SE ENVÍA A LA ZONA DE TRATAMIENTO

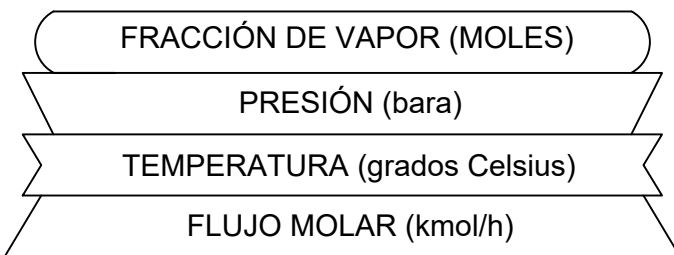
LAS ENTRADAS Y SALIDAS DE LAS COLUMNAS NO SE REPRESENTARON A ESCALA, SE INDICAN LAS ETAPAS DE ALIMENTACIÓN, ASÍ COMO EL NÚMERO DE ETAPAS.

NOTAS

NOTA 2: LA CORRIENTE DE AGUA RESIDUAL, POR CULPA DE LA PÉRDIDA DE CARGA, SALE DEL PROCESO A UNA PRESIÓN MENOR DE LA PRESIÓN AMBIENTE. NO OBSTANTE, SE CANALIZA HACIA UN SISTEMA DE BOMBEO PREVIO AL TRATAMIENTO DEL PROPIO RESIDUO



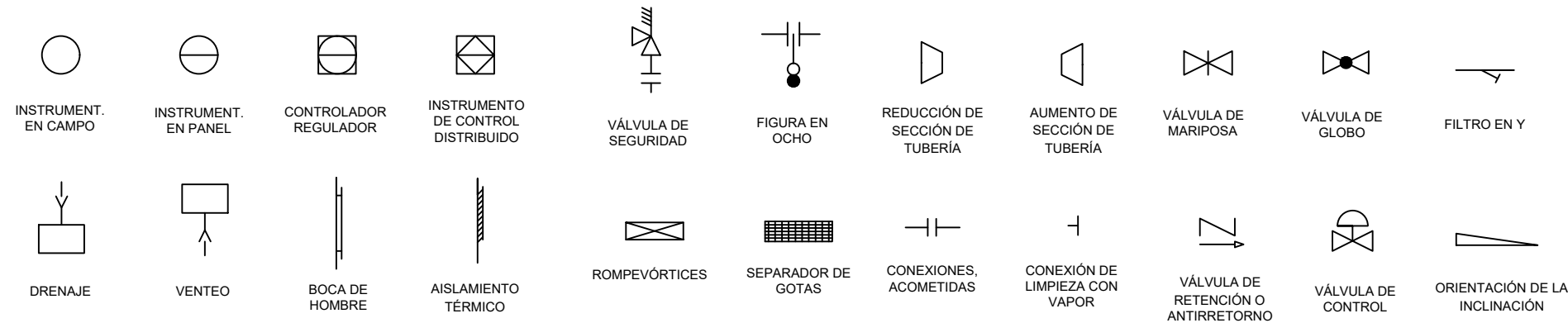
LEYENDA



REV.	DESCRIPCIÓN	POR	FECHA	OK
0	FIRST DIAGRAM	JGL	13/A/2021	
LICENSED TO				
IQ UVa				
LICENSOR				
JAIME GÓMEZ				
DIAGRAM TITLE				
A3-PFD-102-0				
DIAGRAM DESCRIPTION				
SECCIÓN DE SEPARACIÓN				
GROUP				
--				
PLANT TITLE		DWG FILENAME		
THF PLANT		SEC-SEP.dwg		
CLIENT PROJECT NUMBER		CLIENT DWG NUMBER		
1		4		
JOB NUMBER	UNIT	PAGE	REV.	
1	100	3	0	

1.3. P&ID

INSTRUMENTACIÓN, SIMBOLOGÍA



NOTAS GENERALES

-LA PARTE SUPERIOR DE ESTA HOJA DEL DIAGRAMA P&ID MUESTRA LA SIMBOLOGÍA DE TODOS LOS INSTRUMENTOS (VALVULERÍA, ESCAPES...)

-EN LA PARTE INFERIOR SE ENSEÑA LA NOMENCLATURA UTILIZADA EN LOS INSTRUMENTOS DE CONTROL Y EN LA DEFINICIÓN DE TUBERÍAS.

INSTRUMENTOS

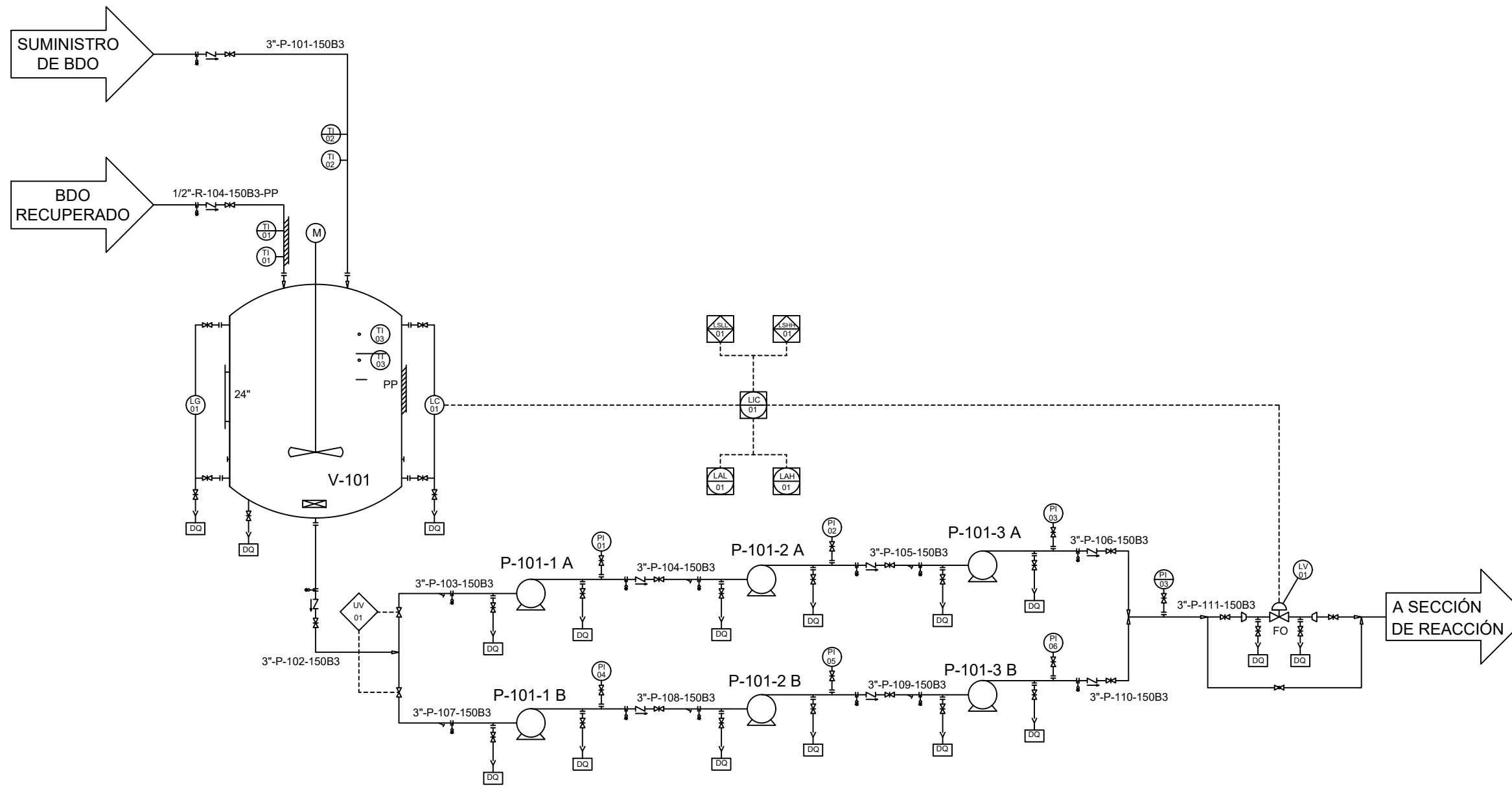
LETRA	VARIABLE	CONTROLADORES INDICADORES (IC)	VÁLVULAS	TRANSMISORES (T)	ALARMAS (A) (L-BAJO) (H-ALTO)	SWITCHES (S) (LL-MUY BAJO; HH-MUY ALTO)
F	FLUJO/CAUDAL	FIC	FV	FT	FAL	FSLL/FSHH
L	NIVEL	LIC	LV	LT	LAL/LAH	LSLL/LSHH
P	PRESSURE	PIC	PV	PT	PAL/PAH	PSLL/PSHH
T	TEMPERATURE	TIC	TV	TT	TAL/TAH	TSLL/TSHH
R	RATIO	RIC	RV		RAL/RAH	
OTROS	DQ	DRENAJE DE QUÍMICOS	D	DRENAJE DE AGUA	LG	MEDIDOR DE NIVEL DE CRISTAL
	AT	ATMÓSFERA	FL	LLAMA	PSV	VÁLVULA DE SEGURIDAD
	FE	ELEMENTO PRIMARIO (FLUJO)	UV	CONTROL DISTRIBUIDO		

CONDUCCIONES

FLUIDO	LETRA	FLUIDO	LETRA	TIPO DE AISLAMIENTO	LETRAS
COOLING WATER	CW	FLUIDO DE PROCESO	P	CONSERVACIÓN DE CALOR	HC
SUMINISTRO DE VAPOR	SS	AZEÓTROPO	AZ	PROTECCIÓN DE PERSONAL	PP
RECUPERACIÓN DE VAPOR	SR	CORRIENTE DE RECIRCULACIÓN	R	LÍNEA DE VAPOR	ST
AGUA RESIDUAL	WW				

NOTAS

REV.	DESCRIPCIÓN	POR	FECHA	OK
0	1st VERSION	JGL	24/A/2021	
LICENSED TO				
IQ UVa				
LICENSOR				
JAIME GÓMEZ				
DIAGRAM TITLE				
A3-PID-100-0				
DIAGRAM DESCRIPTION				
SIMBOLOGÍA Y NOMENCLATURA				
GROUP				
--				
PLANT TITLE		DWG FILENAME		
THF PLANT		P&ID.dwg		
CLIENT PROJECT NUMBER		CLIENT DWG NUMBER		
1		5		
JOB NUMBER	UNIT	PAGE	REV.	
1	100	1	0	

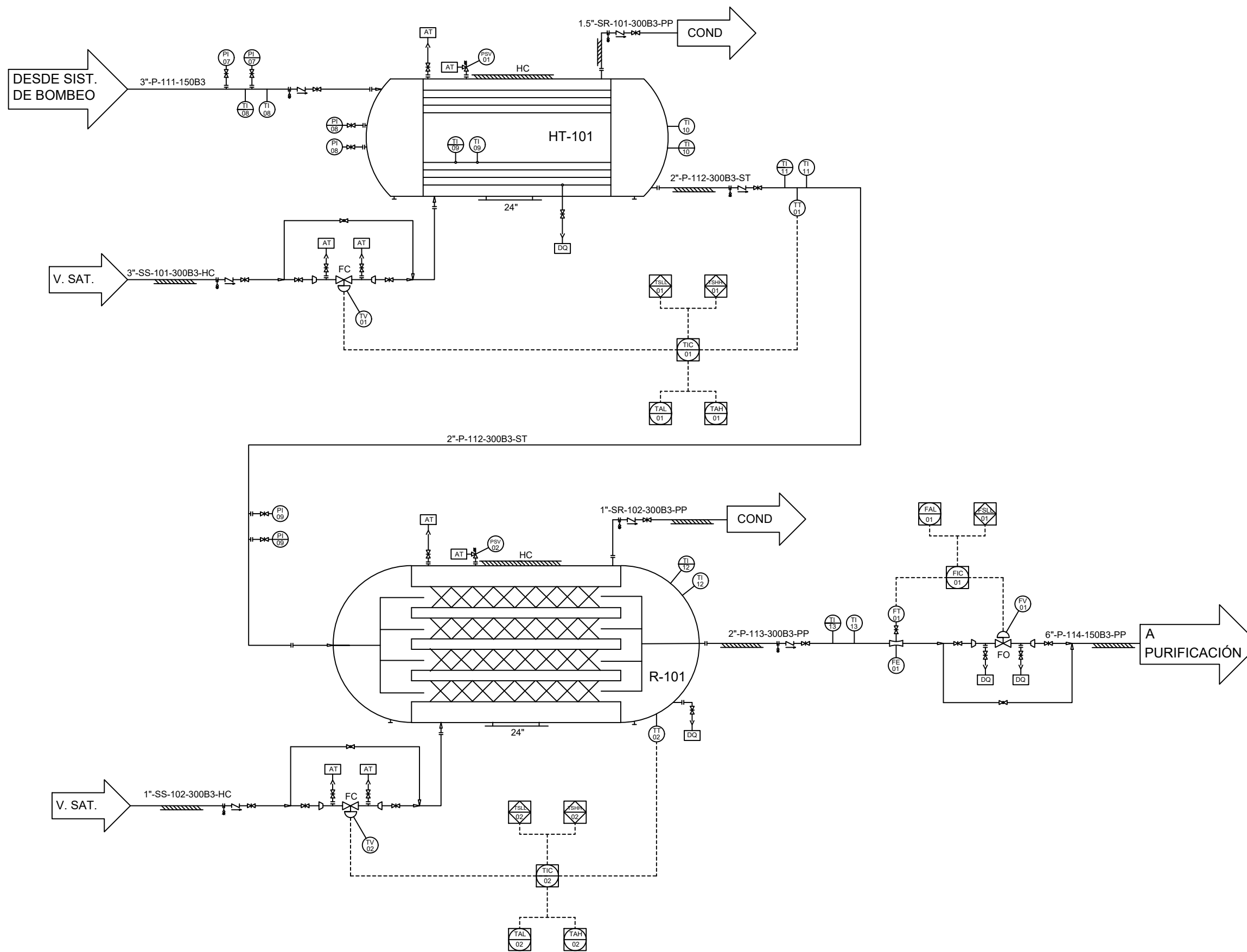


NOTAS GENERALES

EL SISTEMA DE BOMBEO SE DEFINIÓ COMO SE MUESTRA EN EL DIAGRAMA, CON TRES BOMBAS EN SERIE EN CADA UNA DE LAS LÍNEAS PARALELAS A/B, DEBIDO A QUE EL SALTO DE PRESIÓN ES MUY ELEVADO (APROX. 40 BAR, MÁS DE 400 M DE COLUMNA DE AGUA)

NOTAS

REV.	DESCRIPCIÓN	POR	FECHA	OK
0	1st VERSION	JGL	24/A/2021	
LICENSED TO				
IQ UVa				
LICENSOR				
JAIME GÓMEZ				
DIAGRAM TITLE				
A3-PID-101-0				
DIAGRAM DESCRIPTION				
PRESURIZACIÓN DE REACTIVOS				
GROUP				
--				
PLANT TITLE		DWG FILENAME		
THF PLANT		P&ID.dwg		
CLIENT PROJECT NUMBER		CLIENT DWG NUMBER		
1		5		
JOB NUMBER	UNIT	PAGE	REV.	
1	100	2	0	

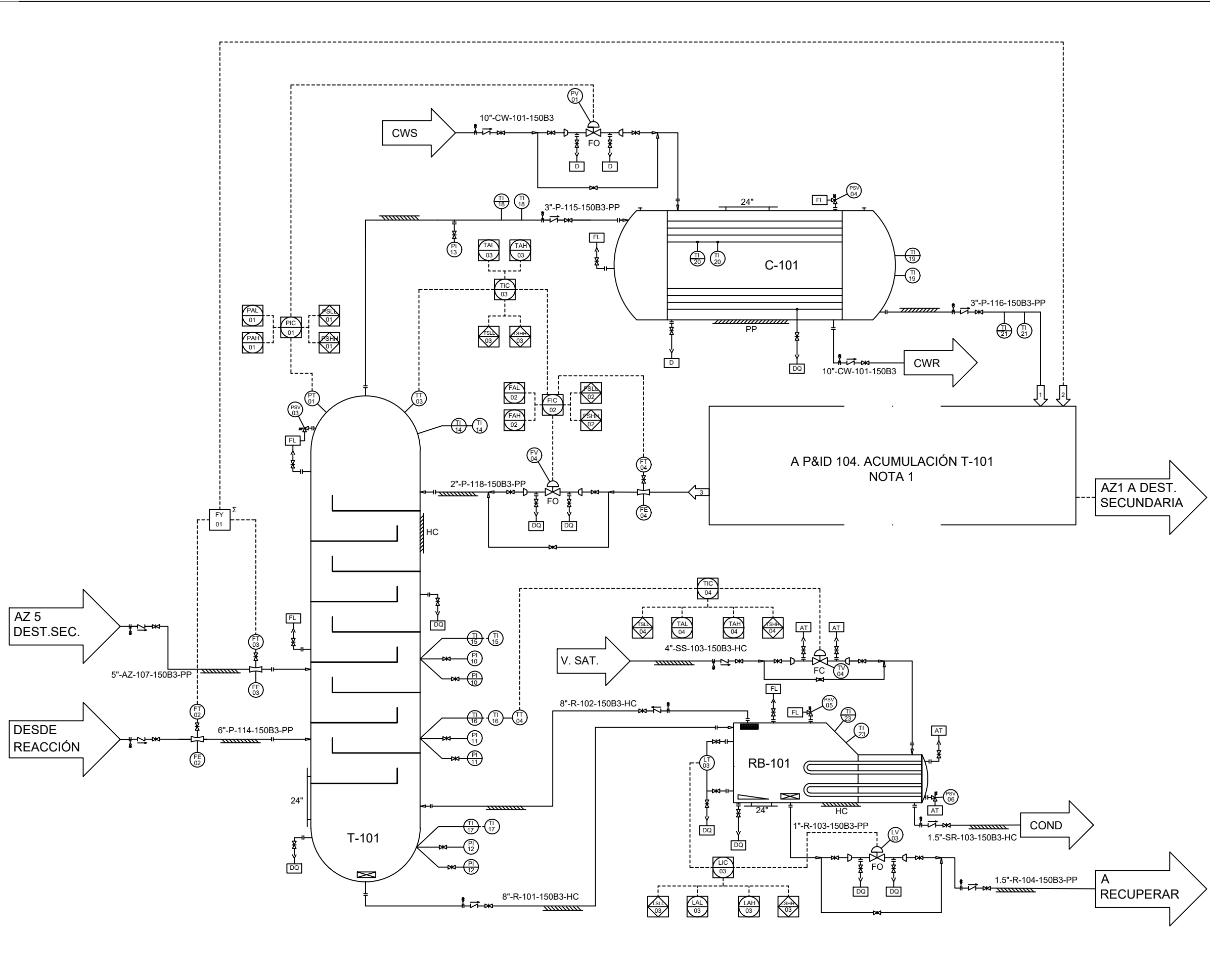


NOTAS GENERALES

EN ESTA SECCIÓN SE UTILIZAN VAPORES DE DIFERENTE TÍTULO A ALTA PRESIÓN (400 psi EN HT-101 Y 12 BAR EN EL REACTOR)

NOTAS

REV.	DESCRIPCIÓN	POR	FECHA	OK
0	1st VERSION	JGL	24/A/2021	
LICENSED TO				
IQ UVa				
LICENSOR				
JAIME GÓMEZ				
DIAGRAM TITLE				
A3-PID-102-0				
DIAGRAM DESCRIPTION				
SECCIÓN DE REACCIÓN				
GROUP				
--				
PLANT TITLE		DWG FILENAME		
THF PLANT		P&ID.dwg		
CLIENT PROJECT NUMBER		CLIENT DWG NUMBER		
1		5		
JOB NUMBER	UNIT	PAGE	REV.	
1	100	3	0	



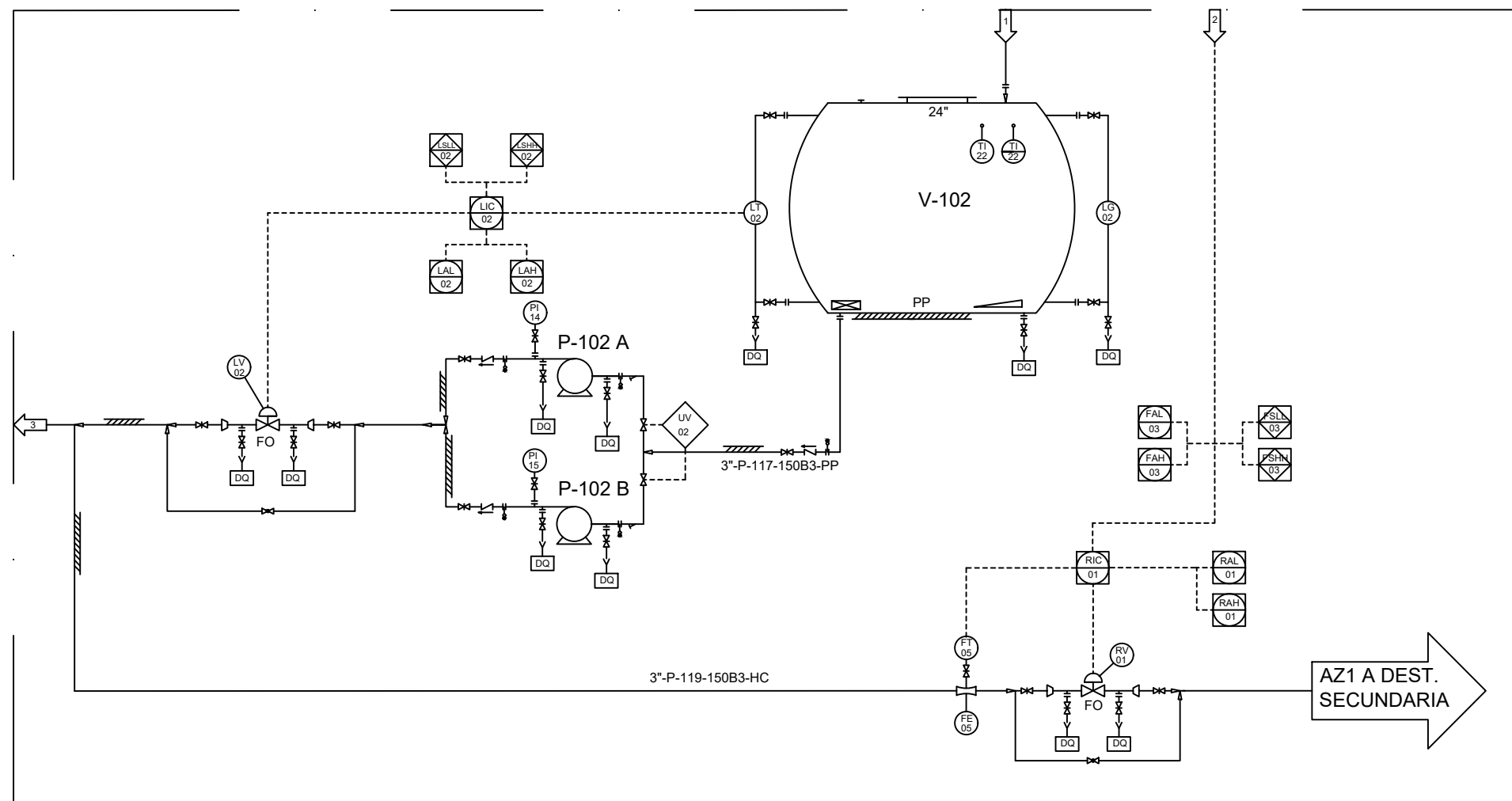
NOTAS GENERALES

EN ESTA TORRE SE SEPARA POR CABEZAS EL AZEÓTROPO, A BAJA PRESIÓN, POR CABEZAS, Y EN EL EBULLIDOR, SE RETIRA EL AGUA RESIDUAL Y EL REACTIVO NO CONSUMIDO.

NOTAS

-NOTA 1: EL TANQUE DE ACUMULACIÓN Y EL BOMBEO DEL REFLUJO SE DIBUJARON EN LA PÁGINA SIGUIENTE POR FALTA DE ESPACIO

REV.	DESCRIPCIÓN	POR	FECHA	OK
0	1st VERSION	JGL	24/A/2021	
LICENSED TO				
IQ UVa				
LICENSOR				
JAIME GÓMEZ				
DIAGRAM TITLE				
A3-PID-103-0				
DIAGRAM DESCRIPTION				
DESTILACIÓN PRIMARIA				
GROUP				
--				
PLANT TITLE		DWG FILENAME		
THF PLANT		P&ID.dwg		
CLIENT PROJECT NUMBER		CLIENT DWG NUMBER		
1		5		
JOB NUMBER		UNIT	PAGE	REV.
1		100	4	0



NOTAS GENERALES

TANQUE DE ACUMULACIÓN Y BOMBAS DE REFLUJO DE LA T-101.

LAS FLECHAS NUMERADAS INDICAN LA RELACIÓN DE LAS ENTRADAS Y SALIDAS CON EL DIAGRAMA ANTERIOR, LAS FLECHAS 1 Y 3 MARCAN LÍNEAS DE MATERIA, Y LA FLECHA 2, SEÑAL ELÉCTRICA.

EN DIAGRAMAS POSTERIORES SE SEGUIRÁ EL MISMO PROCEDIMIENTO.

NOTAS

-NOTA 1: EL TANQUE DE ACUMULACIÓN Y EL BOMBEO DEL REFLUJO SE DIBUJARON EN LA PÁGINA SIGUIENTE POR FALTA DE ESPACIO

REV.	DESCRIPCIÓN	POR	FECHA	OK
0	1st VERSION	JGL	24/A/2021	
LICENSED TO				
IQ UVa				
LICENSOR				
JAIME GÓMEZ				
DIAGRAM TITLE				
A3-PID-104-0				
DIAGRAM DESCRIPTION				
ACUMULACIÓN T-101				
GROUP				
--				
PLANT TITLE		DWG FILENAME		
THF PLANT		P&ID.dwg		
CLIENT PROJECT NUMBER		CLIENT DWG NUMBER		
1		5		
JOB NUMBER	UNIT	PAGE	REV.	
1	100	5	0	

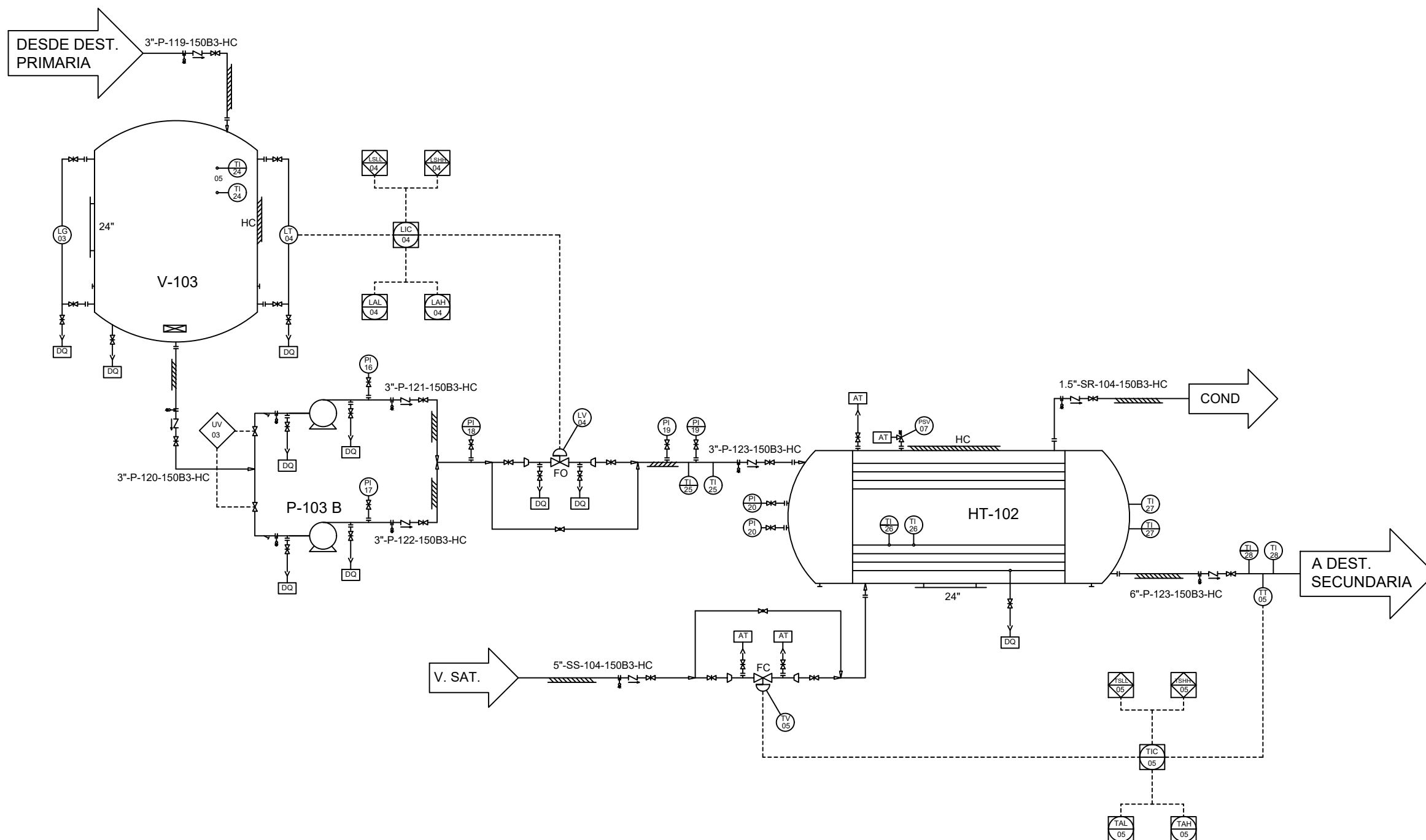
NOTAS GENERALES

PRESURIZACIÓN Y CALENTAMIENTO DE LA CORRIENTE PRINCIPAL DEL PROCESO PARA DESPLAZAR EL AZEÓTROPO.

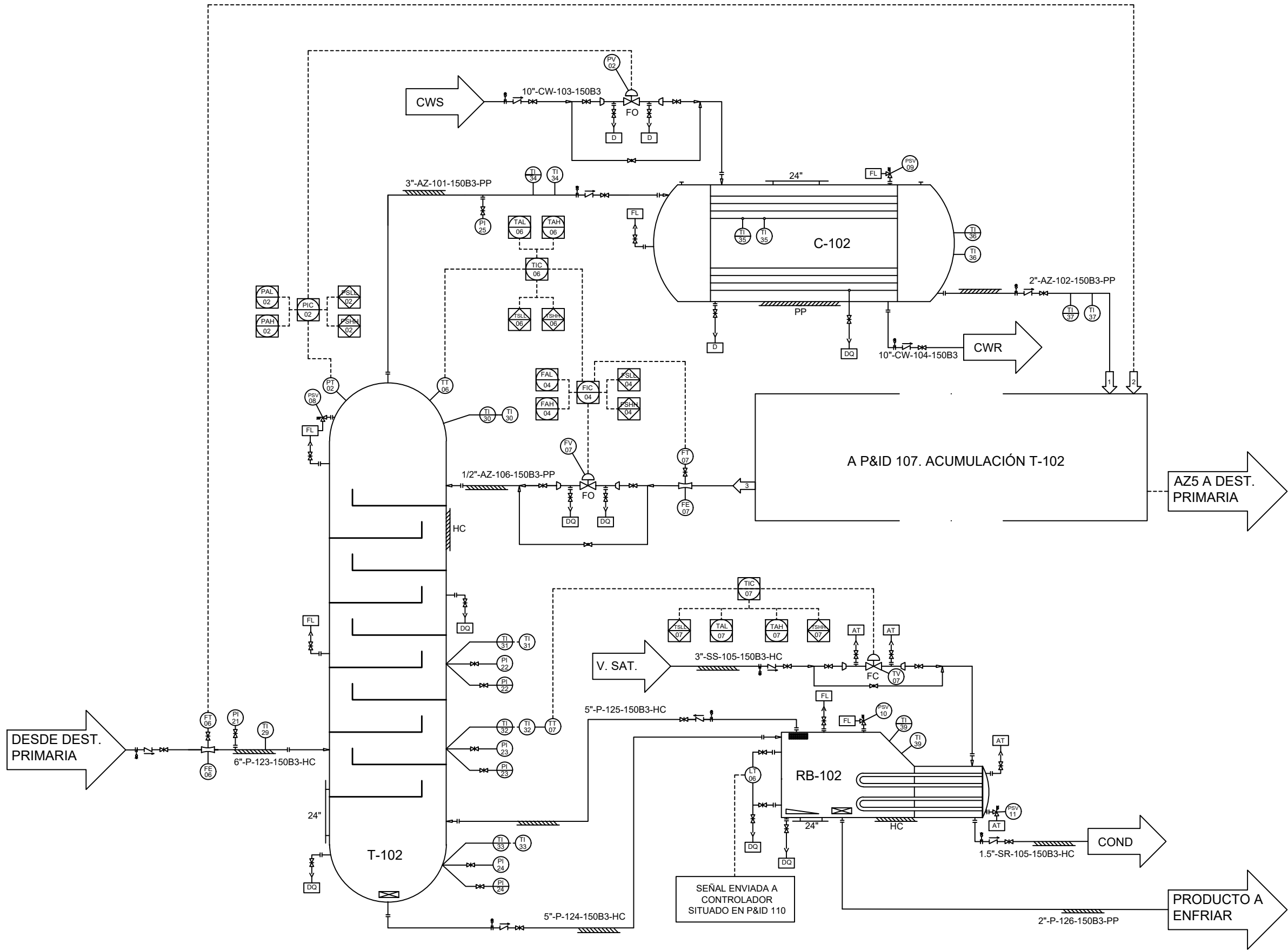
V-103 ES UN TANQUE DE HOMOGENEIZACIÓN QUE SE COLOCA PARA MINIMIZAR LAS PERTURBACIONES QUE PUEDAN PRODUCIRSE EN EL PROCESO Y EVITAR DESCONTROLES

HT-102 SE REGULA CON VAPOR A MEDIA PRESIÓN (100 psi)

NOTAS



REV.	DESCRIPCIÓN	POR	FECHA	OK
0	1st VERSION	JGL	24/A/2021	
LICENSED TO				
IQ UVa				
LICENSOR				
JAIME GÓMEZ				
DIAGRAM TITLE				
A3-PID-105-0				
DIAGRAM DESCRIPTION				
RECALENTAMIENTO INTERMEDIO				
GROUP				
--				
PLANT TITLE		DWG FILENAME		
THF PLANT		P&ID.dwg		
CLIENT PROJECT NUMBER		CLIENT DWG NUMBER		
1		5		
JOB NUMBER	UNIT	PAGE	REV.	
1	100	6	0	



NOTAS GENERALES

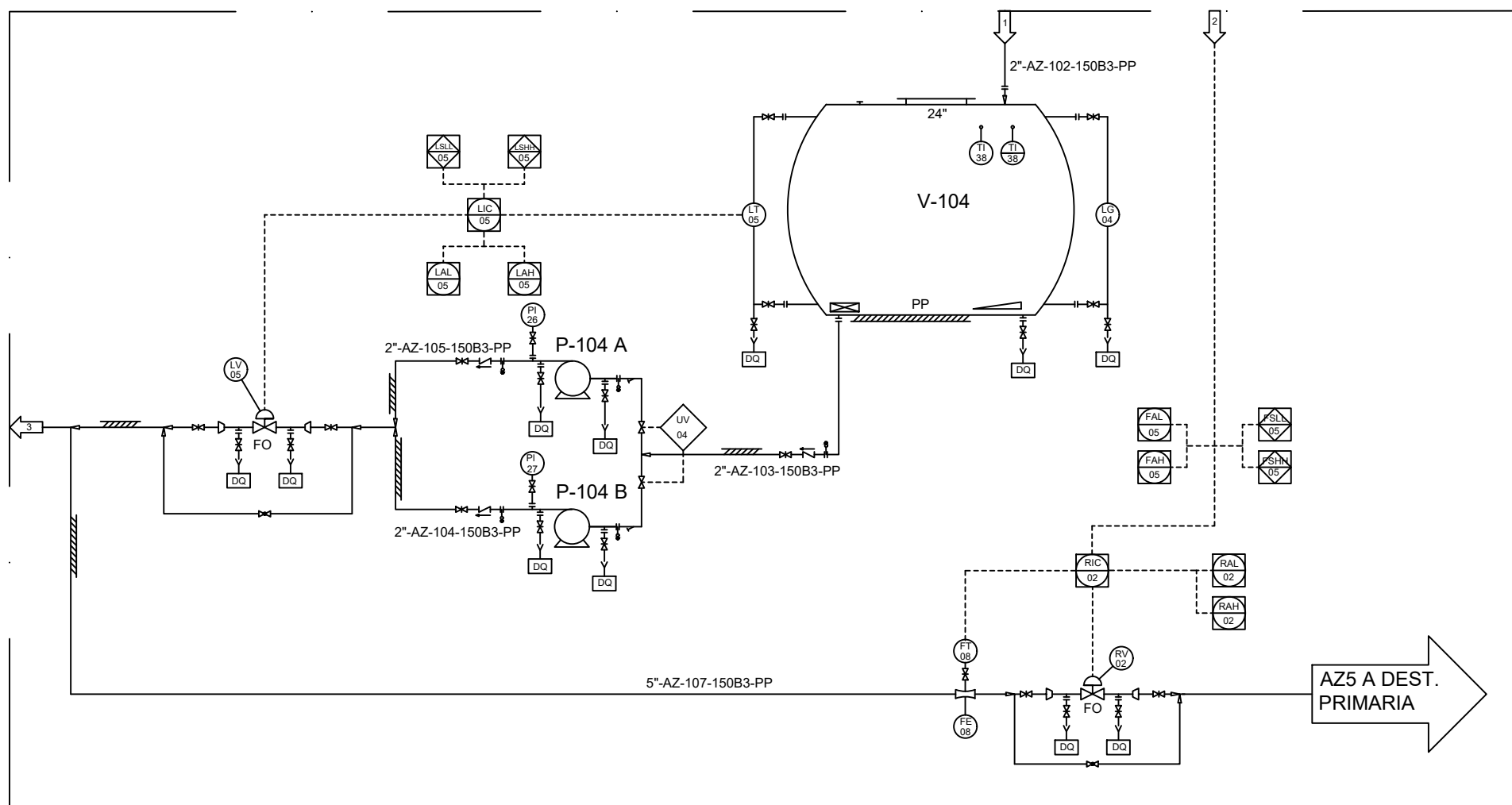
LA DESTILACIÓN SECUNDARIA SEPARA EL AZEÓTRPO DEL PRODUCTO (THF). UTILIZA COOLING WATER EN EL CONDENSADOR Y VAPOR DE MEDIA PRESIÓN EN EL EBULLIDOR, QUE SE REGULAN CONTROLANDO LA TEMPERATURA A LA SALIDA DE AMBOS

NOTAS

REV.	DESCRIPCIÓN	POR	FECHA	OK
0	1st VERSION	JGL	24/A/2021	
LICENSED TO				
IQ UVa				
LICENSOR				
JAIME GÓMEZ				
DIAGRAM TITLE				
A3-PID-106-0				
DIAGRAM DESCRIPTION				
DEST. SECUNDARIA				
GROUP				
--				
PLANT TITLE		DWG FILENAME		
THF PLANT		P&ID.dwg		
CLIENT PROJECT NUMBER		CLIENT DWG NUMBER		
1		5		
JOB NUMBER	UNIT	PAGE	REV.	
1	100	7	0	

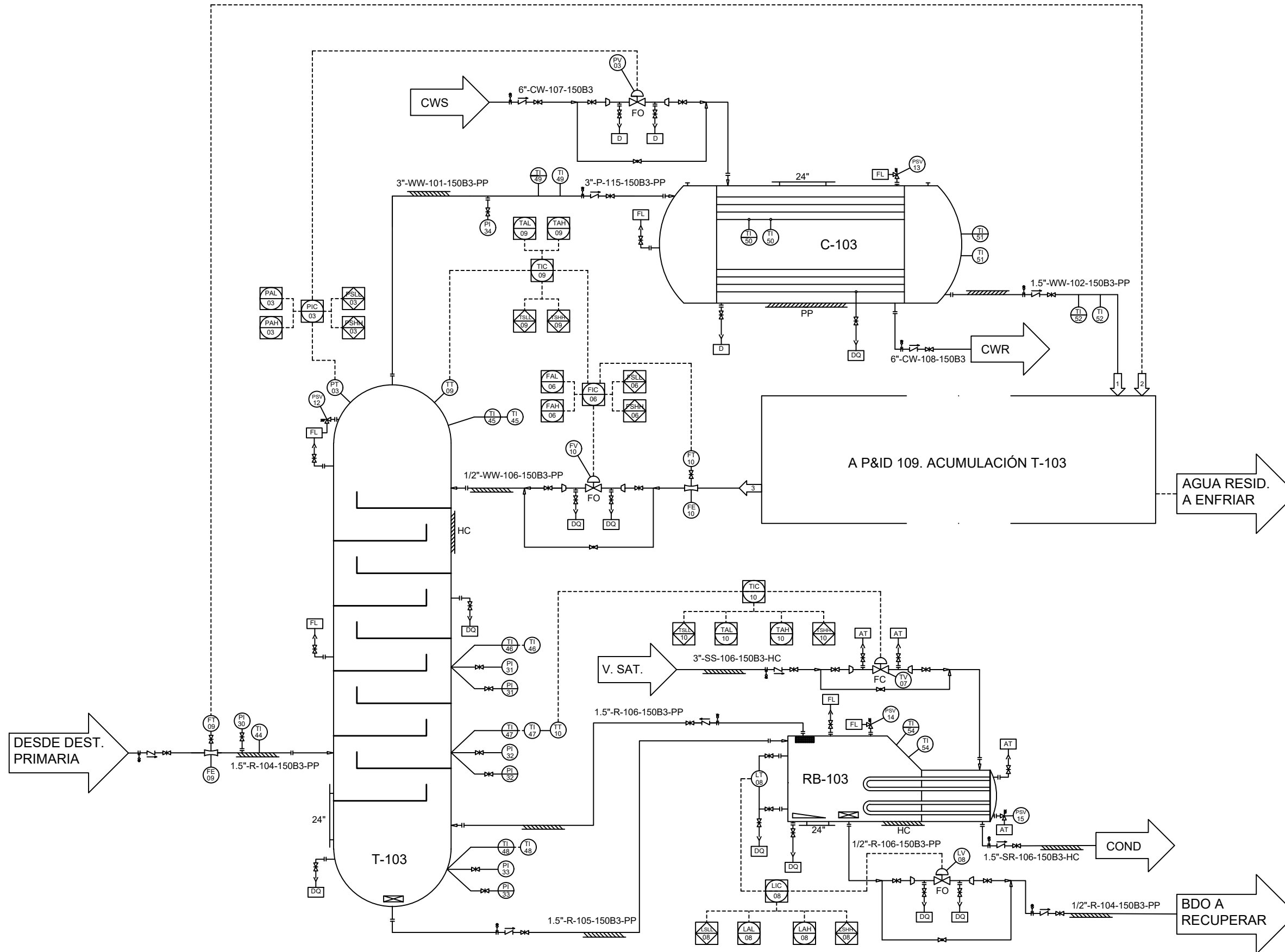
NOTAS GENERALES

EL FORMATO DE ESTE DIAGRAMA ES EL MISMO QUE EL DEL P&ID 104, Y EL P&ID 109.



NOTAS

REV.	DESCRIPCIÓN	POR	FECHA	OK
0	1st VERSION	JGL	24/A/2021	
LICENSED TO				
IQ UVa				
LICENSOR				
JAIME GÓMEZ				
DIAGRAM TITLE				
A3-PID-107-0				
DIAGRAM DESCRIPTION				
ACUMULACIÓN T-102				
GROUP				
--				
PLANT TITLE		DWG FILENAME		
THF PLANT		P&ID.dwg		
CLIENT PROJECT NUMBER		CLIENT DWG NUMBER		
1		5		
JOB NUMBER	UNIT	PAGE	REV.	
1	100	8	0	



NOTAS GENERALES

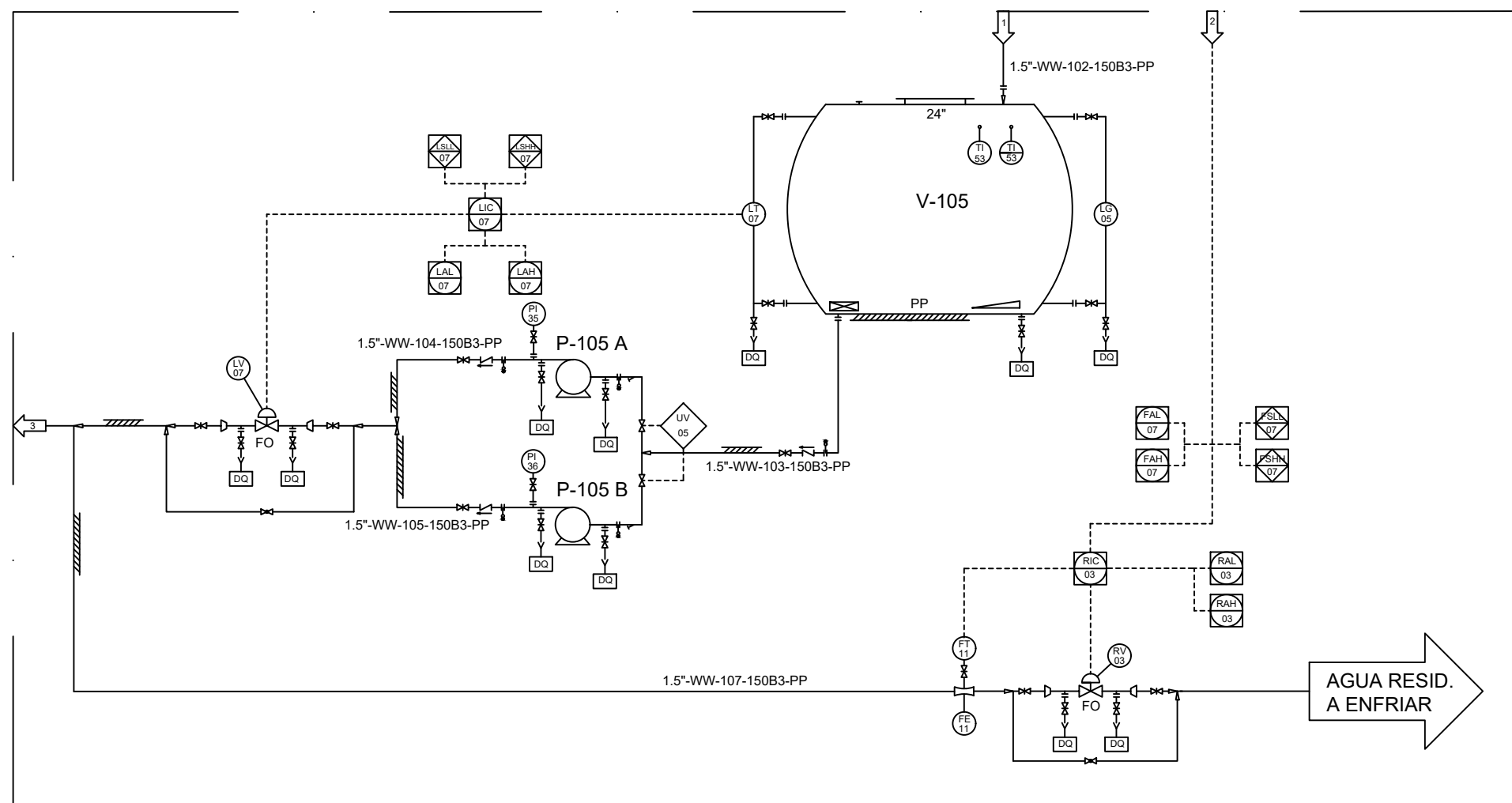
LA DESTILACIÓN TERNARIA SEPARA EL AGUA GENERADA EN EL PROCESO DEL REACTIVO QUE NO SE HA CONSUMIDO. IGUAL QUE EN LA DESTILACIÓN SECUNDARIA (PID 106), UTILIZA VAPOR DE MEDIA PRESIÓN EN EL EBULLIDOR Y COOLING WATER EN EL CONDENSADOR, EN EL EBULLIDOR SE CONTROLA TEMPERATURA DEL PLATO SENSIBLE, Y EN EL CONDENSADOR, LA PRESIÓN DE LA TORRE.

NOTAS

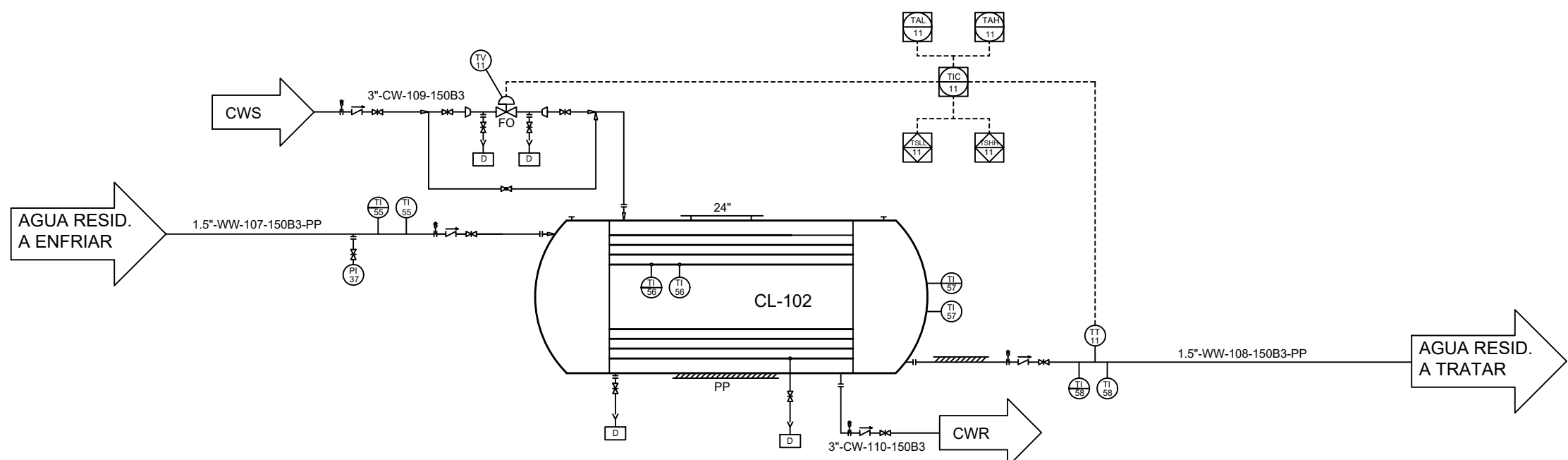
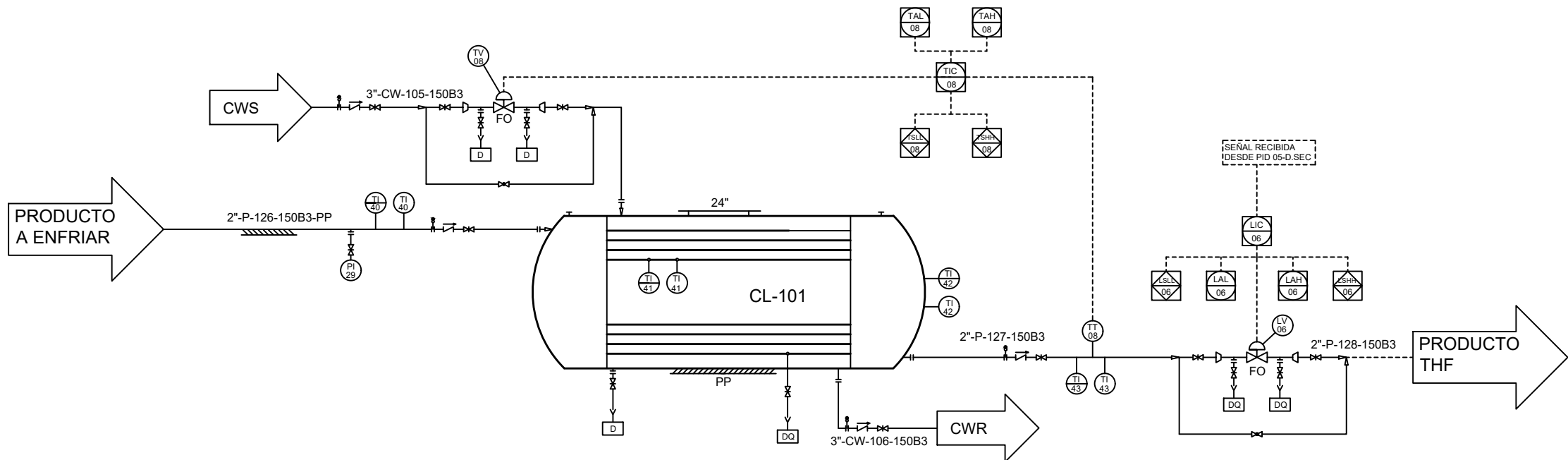
REV.	DESCRIPCIÓN	POR	FECHA	OK
0	1st VERSION	JGL	24/A/2021	
LICENSED TO				
IQ UVa				
LICENSOR				
JAIME GÓMEZ				
DIAGRAM TITLE				
A3-PID-108-0				
DIAGRAM DESCRIPTION				
DEST. TERNARIA				
GROUP				
--				
PLANT TITLE		DWG FILENAME		
THF PLANT		P&ID.dwg		
CLIENT PROJECT NUMBER		CLIENT DWG NUMBER		
1		5		
JOB NUMBER	UNIT	PAGE	REV.	
1	100	9	0	

NOTAS GENERALES

NOTAS



REV.	DESCRIPCIÓN	POR	FECHA	OK
0	1st VERSION	JGL	24/A/2021	
LICENSED TO				
IQ UVa				
LICENSOR				
JAIME GÓMEZ				
DIAGRAM TITLE				
A3-PID-109-0				
DIAGRAM DESCRIPTION				
ACUMULACIÓN T-103				
GROUP				
--				
PLANT TITLE		DWG FILENAME		
THF PLANT		P&ID.dwg		
CLIENT PROJECT NUMBER		CLIENT DWG NUMBER		
1		5		
JOB NUMBER	UNIT	PAGE	REV.	
1	100	10	0	



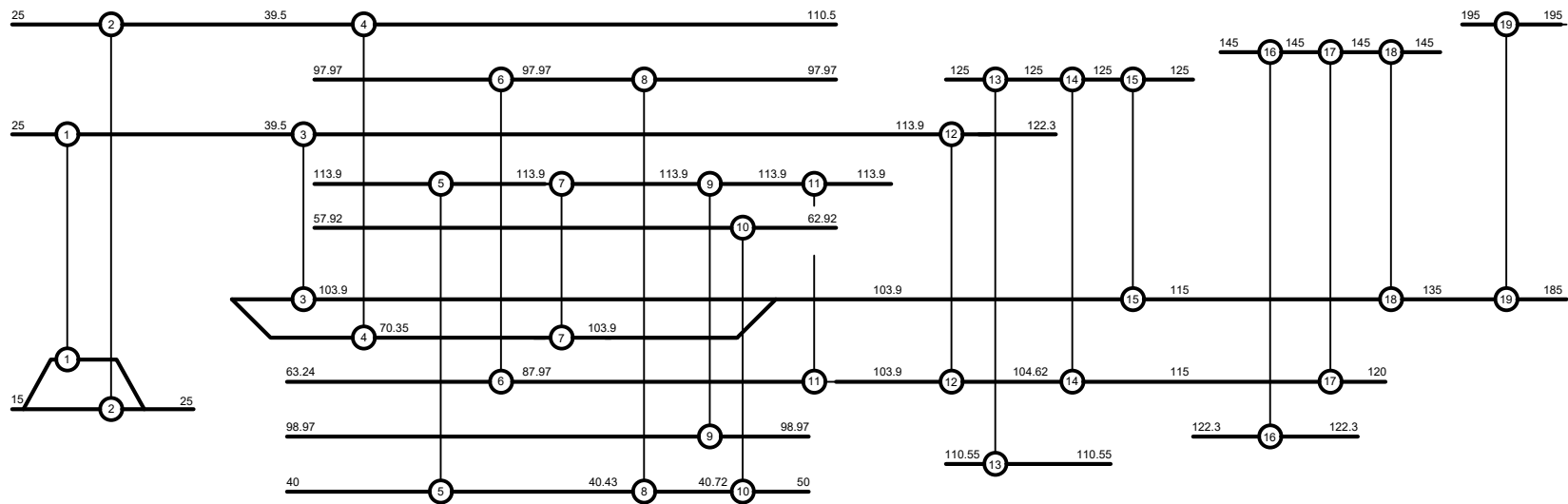
NOTAS GENERALES

LA ZONA DE ENFRIAMIENTO CONSTA DE DOS INTERCAMBIADORES DE CALOR DE CARCASA Y TUBOS, EN LOS QUE SE UTILIZA AGUA DE REFRIGERACIÓN PARA CONTROLAR LA TEMPERATURA DE SALIDA DE THF Y DE AGUA RESIDUAL.

NOTAS

REV.	DESCRIPCIÓN	POR	FECHA	OK
0	1st VERSION	JGL	24/A/2021	
LICENSED TO		IQ UVa		
LICENSOR		JAIME GÓMEZ		
DIAGRAM TITLE		A3-PID-110-0		
DIAGRAM DESCRIPTION		ZONA DE ENFRIAMIENTO		
GROUP		--		
PLANT TITLE	THF PLANT	DWG FILENAME	P&ID.dwg	
CLIENT PROJECT NUMBER	1	CLIENT DWG NUMBER	5	
JOB NUMBER	1	UNIT	PAGE	REV.
		100	11	0

1.4. Integración energética



NOTAS GENERALES

EN ESTE DIAGRAMA SE MUESTRA LA COMBINACIÓN DE DISTINTOS INTERCAMBIADORES DE CALOR QUE PERMITE UN AHORRO DEL 57 % DE LA ENERGÍA EN EL PROCESO, AUNQUE AUMENTE EL COSTE DE EQUIPOS.

NOTAS

REV.	DESCRIPCIÓN	POR	FECHA	OK
0	FIRST DIAGRAM	JGL	17/A/2021	
LICENSADO TO				
IQ UVa				
LICENSOR				
JAIME GÓMEZ				
DIAGRAM TITLE				
A4-HI-100-0				
DIAGRAM DESCRIPTION				
INTEGRACIÓN ENERGÉTICA				
GROUP				

PLANT TITLE		DWG FILENAME		
THF PLANT		HEAT INT.dwg		
CLIENT PROJECT NUMBER		CLIENT DWG NUMBER		
1		6		
JOB NUMBER	UNIT	PAGE	REV.	
1	100	1	0	

Anexo

2. Cálculos justificativos

2.1. Intercambiador de calor CL-102

El intercambiador de calor CL-102 se diseñó siguiendo la siguiente secuencia de cálculo:

En primer lugar, se determinaron los flujos de fluido de proceso y de fluido de servicio. El caudal, Q , de fluido de proceso se obtuvo de la simulación, al igual que el calor retirado en el intercambiador, y utilizando la ecuación del balance de energía, y, con la densidad, ρ , del fluido de servicio, se puede obtener el flujo volumétrico y, por tanto, la velocidad.

Una vez obtenida la velocidad, gracias a la herramienta web del NIST (“National Institute of Standards and Technology”, de los Estados Unidos), en la que se encuentran registradas muchas propiedades de muchos fluidos, se anotaron los valores de conductividad térmica, k_L , viscosidad dinámica, μ , y calor específico, c_p , de las dos corrientes, a la temperatura de entrada, salida y a la temperatura promedio, en unidades del sistema internacional, salvo la capacidad calorífica, que se expresó en KJ/kg.

Se estimó un valor del coeficiente global inicial de $1200 \text{ W/m}^2 \text{ }^\circ\text{C}$, y, como se indica en la memoria, se calculó el área a partir de la ecuación del calor transferido y se continuó con el diseño mecánico.

Se fijó una longitud de 4.878 m y un diámetro externo de 16 mm, y, con la superficie calculada de transmisión de calor, se determinó el número de tubos. Las combinaciones de longitud, número de tubos, y número de pasos se fueron comprobando, atendiendo a valores de velocidad y caída de presión:

$$q = U \cdot A \cdot F \cdot \Delta T_{lm} \rightarrow A = \pi \cdot L \cdot d_o \cdot N_t \quad (\text{Ec. II. 1 y II. 2})$$

Se seleccionó un cambiador de cabezal flotante, con los tubos distribuidos al tresbolillo. De esta forma, el paso de tubo, P_t (m):

$$P_t = 1.25 \cdot d_o \quad (\text{Ec. II. 3})$$

y el diámetro de la bancada, para 4 pasos por los tubos, se calculó con la siguiente ecuación, siendo las constantes las de la tabla inferior:

$$d_b = d_o \cdot \left(\frac{N_t}{k_1} \right)^{\frac{1}{n_1}} \quad (\text{Ec. II. 4})$$

Tabla 31. Constantes empíricas diámetro de bancada

Triangular pitch, $p_t = 1.25d_o$					
No. passes	1	2	4	6	8
K_1	0.319	0.249	0.175	0.0743	0.0365
n_1	2.142	2.207	2.285	2.499	2.675

Para obtener el diámetro de la carcasa, d_s , se utiliza la siguiente correlación gráfica, como el diámetro de la bancada (bundle diameter) es menor de 20 centímetros, la holgura entre d_b y d_s debe ser de 50 mm.

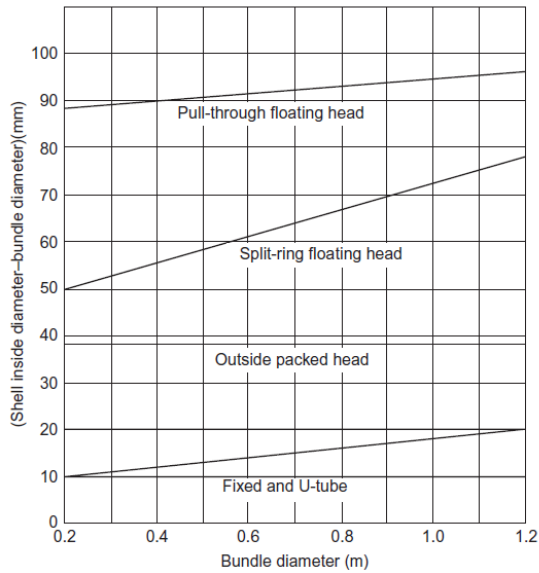


Ilustración 53. Holgura entre carcasa y bancada de tubos (Chhabra et al., 2018)

Las pacas deflectoras de la carcasa se diseñaron con un 25 % de corte de placa, y una separación de $0.4 \cdot d_s$ valores óptimos según el libro de Coulson. Los soportes se encuentran separados 1 metro de distancia, y se colocan 4 varillas de sujeción, de 16 mm de diámetro.

El resumen de los valores calculados del diseño mecánico es el siguiente:

Tabla 32. Resumen de especificaciones del intercambiador CL-102. Todas las dimensiones en metros.

Longitud	4.878	Diámetro de la bancada de tubos	0.141
Diámetro exterior	0.0160	Diámetro de la carcasa	0.191
Espesor de los tubos	0.0016	Espacio entre placas deflectoras	0.076
Diámetro interior	0.0144	Corte de placas deflectoras	25%
Número de tubos	17	Número de pasos por los tubos	4

Seguidamente se procedió a calcular el coeficiente de transmisión por el interior de los tubos, (con las medidas del intercambiador que se citan en la memoria). Con los valores de las propiedades físicas, velocidad y diámetro, se pueden calcularon, todo en unidades del sistema internacional, cuantificaron los valores del número de Reynolds, Re , número de Prandtl, Pr , y número de Nusselt, Nu , y, con este, el coeficiente, h_i :

$$Q = \frac{q \cdot \rho}{c_p \cdot \Delta T} \quad (Ec. II.5)$$

$$u_t = \frac{4 \cdot Q \cdot N_p}{N_t \cdot \pi \cdot d_i^2} \quad (Ec. II. 6)$$

$$Re = \frac{\rho \cdot u_t \cdot d_i}{\mu}; \quad Pr = \frac{\mu \cdot c_p}{k_l} \quad (Ec. II. 7 y II. 8)$$

$$Nu = \frac{h_i \cdot d_i}{k_l} = 0.023 \cdot Re^{0.8} \cdot Pr^{0.33} \quad (Ec. II. 9)$$

Tabla 33. Coeficiente individual por los tubos

	Entrada	Salida	Promedio
u_t (m/s)	0.753	0.700	0.725
μ (kg/ms)	2.86E-04	9.13E-04	0.001
k_L (W/mK)	0.627	0.579	0.603
cp_L (kJ/kg)	4.432	4.103	4.268
ρ (kg/m ³)	919.380	993.081	956.231
Pr	2.023	6.468	4.245
Re	34847	10918	16652
Nu	124.87	72.41	88.33
hi (W/m ² °C)	5432	2911	3697

Para calcular el coeficiente de transmisión por la carcasa se definió un área transversal, A_s , que atravesará el fluido a través de la carcasa, y que se depende del diámetro de los tubos, d_o , de la carcasa, d_s , y del espacio entre placas, l_b , las tres en metros. Definido esa área, se calcularon la densidad de flujo másico a través de esa área, $G's$, (kg/m²s), y el diámetro hidráulico equivalente, d_e (m). Se consiguió así el número Re, necesario para obtener el factor j_h a partir de la correlación gráfica de la ilustración 17, y así poder usar la correlación del método de Kern, que proporciona el número Nu y el coeficiente por el exterior, h_o :

$$A_s = \frac{d_s \cdot l_b \cdot (P_t - d_o)}{P_t} \quad (Ec. II. 10)$$

$$G's = \frac{\dot{m}}{A_s}; \quad d_e = \frac{1.10}{d_o} \cdot (P_t^2 - 0.917 \cdot d_o^2); \quad Re = \frac{G's \cdot d_e}{\mu}$$

(Ec. II. 11, II. 12 y II. 13)

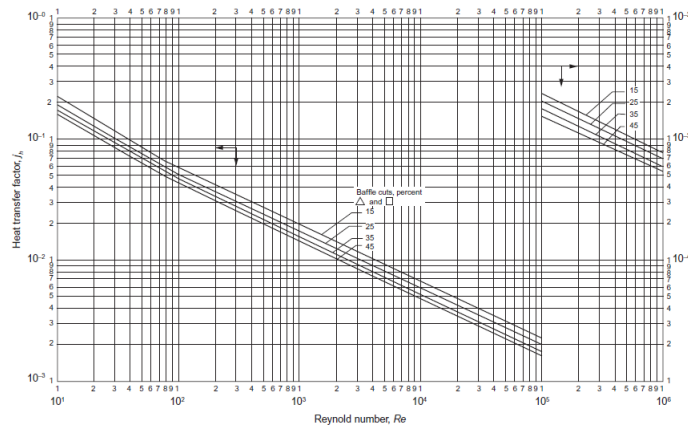


Ilustración 54. Correlación gráfica para obtener el factor j_h . (Chhabra et al., 2018)

$$Nu = \frac{h_o \cdot d_e}{k_l} = j_h \cdot Re \cdot Pr^{0.33} \quad (Ec. II. 14)$$

Tabla 34. Coeficiente individual por la carcasa

	Entrada	Salida	Promedio
Flujo (kg/s)	3.550	3.550	3.550
u_t (m/s)	0.315	0.316	0.315
μ (kg/ms)	1.14E-03	8.90E-04	1.01E-03
k_L (W/mK)	0.589	0.607	0.598
cp_L (kJ/kg)	4.189	4.181	4.185
ρ (kg/m ³)	999.100	997.050	998.075
Pr	8.084	6.129	7.107
A_s (m ²)	2.27E-03	2.27E-03	2.27E-03
G's (kg/m ² s)	1562.088	1562.088	1562.088
d_e (m)	0.011	0.011	0.011
Re	15601	19938	17505
j_h	4.20E-03	4.50E-03	4.20E-03
Nu	131.51	164.20	141.35
h_o (W/m ² °C)	6822	8776	7444

Con los coeficientes individuales, y estimados los coeficientes de ensuciamiento h_{id} y h_{od} como 6000 W/m²°C, y conocida la k_w del acero de los tubos, 50.2 W/m°C, a partir de la ecuación del coeficiente global, U, se obtienen un valor promedio, que es el que se tomará, superior al valor de la iteración inicial, por lo que el diseño es válido según los requisitos de transmisión de calor.

Tabla 35. Coeficientes globales

U entrada (W/m² °C)	1389
U salida (W/m² °C)	1157
U promedio (W/m² °C)	1245
U inicial (W/m² °C)	1200

Se cuantificó también la pérdida de carga en el intercambiador, con el objetivo de, además de definirla en concreto para este intercambiador, usar el valor como estimación en el resto de los cambiadores de calor del proceso, tanto en los tubos como en la carcasa. Por el lado de los tubos j_f se obtiene con la correlación gráfica de la ilustración 17, figura 1.88 del capítulo 1 del volumen 1B del libro Coulson and Richardson, y luego se utiliza la ecuación de correlación.

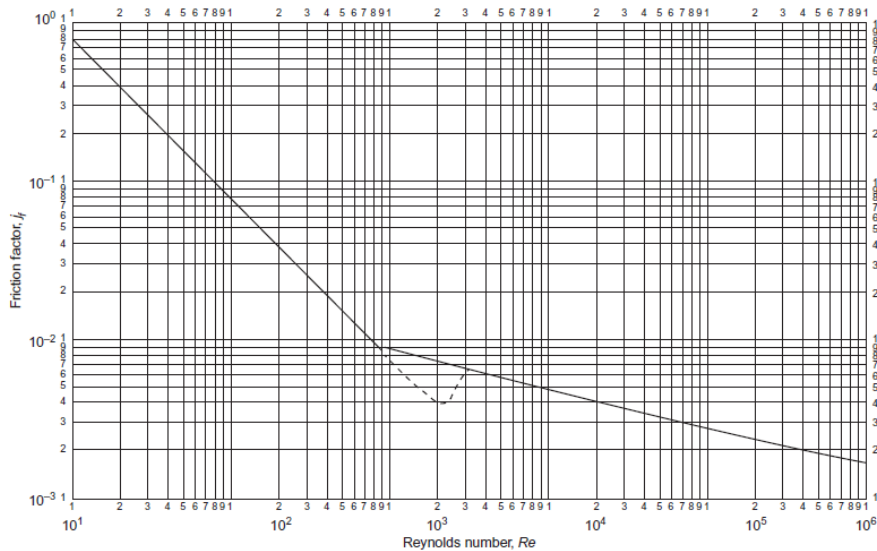


Ilustración 55. Factor de fricción por el lado de los tubos

$$(-\Delta P) = N_p \cdot (8 \cdot j_f \cdot \frac{L}{d_i} \cdot \left(\frac{\mu}{\mu_s}\right)^{-0.25} \cdot \frac{\rho \cdot u_t^2}{2}) \quad (Ec. II. 15)$$

Los resultados fueron los siguientes:

Tabla 36. Cálculo de la caída de presión en los tubos

	Entrada	Salida	Promedio
u (m/s)	0.753	0.697	0.725
Re	15601	19938	17505
j_f	3.20E-03	4.70E-03	4.00E-03
(-ΔP) (Pa)	14957	14978	14887

La velocidad del líquido en los tubos, típicamente es de alrededor de 1 m/s, aunque en este caso es un poco inferior. Para aumentar podría aumentarse el número de pasos, pero eso hace que aumente la pérdida de carga considerablemente, por encima del valor máximo típico establecido de 35 kPa. Una solución podría ser aumentar el número de pasos y aumentar el diámetro de los tubos, reduciendo también el número de tubos, para que no pierda velocidad.

Por el lado de la carcasa el procedimiento fue similar, se obtuvo el factor de fricción j_f de la correlación gráfica de la figura 1.92, y se usó la otra ecuación de correlación:

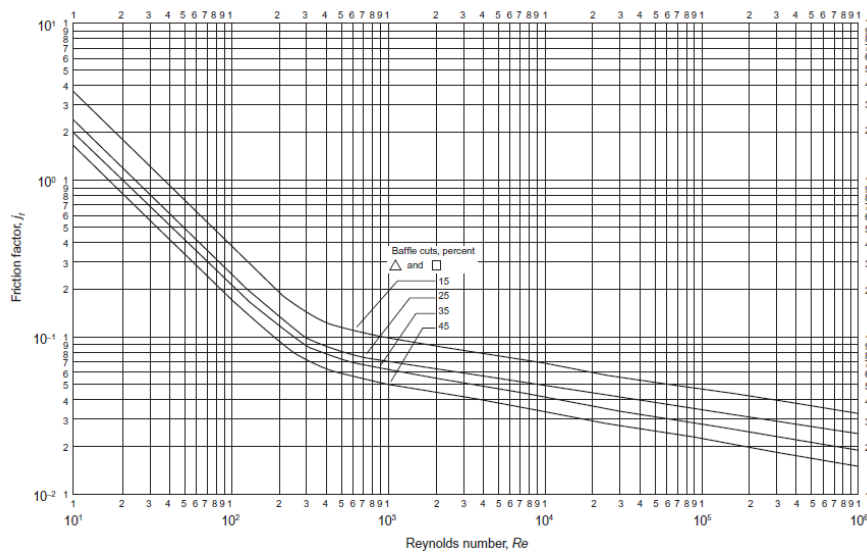


Ilustración 56. Factor de fricción por el lado de la carcasa

$$u_c = \frac{4 \cdot Q}{\pi \cdot (d_s^2 - d_b^2)} \tag{Ec. II. 16}$$

$$(-\Delta P) = 8 \cdot j_f \cdot \frac{d_s}{d_e} \cdot \left(\frac{L}{l_b}\right) \cdot \frac{\rho \cdot u_c^2}{2} \tag{Ec. II. 17}$$

Los resultados obtenidos son:

Tabla 37. Caída de presión en la carcasa

	Entrada	Salida	Promedio
u (m/s)	0.315	0.316	0.315
Re	15601	19938	17505
jf	4.20E-03	4.50E-03	4.20E-03
(-ΔP) (Pa)	14.95	14.98	14.96

En ambos casos, el valor de la depresión producida obtenido fue de unos 15 kPa, por debajo del valor típico de 35 kPa, así que se acepta el diseño del cambiador.

Como se comenta en el documento principal, se valoró la posibilidad de utilizar un intercambiador de placas, en lugar de uno de carcasa y tubos, porque son más compactos, más económicos, y más versátiles. Para ello, se realizó una revisión bibliográfica de los tamaños típicos de las placas, separación entre ellas, espesor... La conclusión a la que se llegó es que la pérdida de carga es el principal impedimento para colocar un equipo de estas características.

Cómo el área de transmisión viene impuesto, se decidió utilizar una distancia entre placas, d , de 4 mm, no muy pequeña en comparación con valores comerciales, y minimizar el área de las placas, para maximizar el número de canales entre placas. Utilizando el mínimo, según Kolmetz, 2020, de 0.5 m x 0.15 m, (altura, h x anchura, w) el cambiador de calor constaría de 55 canales.

Con estos valores, para el lado del fluido de proceso, cuyo flujo es menor y, por tanto, acarreará menor pérdida de presión, siguiendo el procedimiento indicado por Pikra et al., 2015, se calculan los valores del coeficiente individual de transmisión de calor y de la caída de presión:

$$u_{ch} = \frac{\dot{m}}{\rho \cdot A_{ch} \cdot N_{ch}} = \frac{\dot{m}}{\rho \cdot w \cdot d \cdot N_{ch}} \quad (Ec. II. 18)$$

donde u_{ch} es la velocidad por cada canal (m/s), A_{ch} es el área transversal de cada canal (anchura x separación, m^2), y N_{ch} es el número de canales, 55.

Se calculó el diámetro equivalente, y, con él, el número Re , para poder utilizar la correlación que proporciona el Nu :

$$d_e = 2 \cdot d \quad (Ec. II. 19)$$

$$Re = \frac{\rho \cdot u_t \cdot d_e}{\mu}; \quad Pr = \frac{\mu \cdot c_p}{k_l} \quad (Ec. II. 20)$$

$$Nu = \frac{h_p \cdot d_e}{k_l} = 0.26 \cdot Re^{0.65} \cdot Pr^{0.4} \quad (Ec. II. 21)$$

De esta correlación final, se obtiene h_p , el coeficiente de transmisión de calor individual ($W/m^2\text{°C}$) en un cambiador de placas que, como se comprobará en la tabla siguiente, es más pequeño que los coeficientes individuales de un cambiador de carcasa y tubos.

Para la pérdida de carga, se calculó el factor de fricción con una correlación, a partir del número Re , y, conocido j_f , se calcula la caída de presión en el interior de los canales, no la caída de presión total, que sería incluso superior.

Los resultados se muestran en la tabla de la página siguiente. Se concluyó que la depresión producida era muy elevada y se rechazó la opción, sin ni siquiera molestarse en calcular los canales por los que fluye la refrigeración, pues el flujo mayor conllevaría una mayor caída de presión. Debería realizarse un estudio acerca de las posibilidades de utilización de varios cambiadores de placas en paralelo, y comprobar si su funcionamiento fuera más eficaz, pero se realizará ese estudio en versiones posteriores de este proyecto.

Tabla 38. Intercambiador de placas

	Entrada	Salida	Promedio
Flujo (kg/s)	0.479	0.479	0.479
Flujo (l/s)	0.521	0.482	0.502
u (m/s)	0.016	0.015	0.015
μ (kg/ms)	0.000	0.001	0.001
k_L (W/mK)	0.627	0.579	0.603
cp_L (kJ/kg)	4.432	4.103	4.268
ρ (kg/m³)	919.38	993.08	956.23
pr	2.023	6.468	4.245
Re	406	127	194
Nu	17.1	12.8	14.2
h(W/m² °C)	1339	927	1072
jf	0.099	0.140	0.124
-dP (kPa)	567	744	682

2.2. Reactor catalítico

Para el dimensionado del reactor catalítico, como se explica en la memoria, se utilizaron conjuntamente la herramienta de las especificaciones de diseño, y el análisis de sensibilidad. El procedimiento de cálculo fue el siguiente. Se estimaba un diámetro de tubos y, mediante un análisis de sensibilidad, que contenía anidada una especificación de diseño, se determinaban el número de tubos y la longitud correspondiente.

Para cada diámetro, en cada iteración inicial, se estimó un valor del coeficiente de transmisión de calor (como finalmente no hubo mucha diferencia entre los U calculados, se usó como iteración inicial el valor obtenido para el diámetro anterior). Fijados en el programa el diámetro de los tubos, d_t (m), y el coeficiente, U ($W/m^2 \text{ } ^\circ C$).

Se pidió en la especificación de diseño que se calculase la longitud del reactor necesaria para obtener una conversión, como lazo interno de cálculo, y en el análisis de sensibilidad, que se variase el número de tubos entre 120 mbar y 180 mbar. Para cada número de tubos se consiguió una longitud y una caída de presión (calculada a partir de la ecuación de Ergun) determinadas, que se tabularon (las tablas se adjuntan a continuación) y que son las representadas en el gráfico posterior, que, en la memoria, se adjunta como ilustración 38.

Como es de esperar, cuanto menor es la sección del tubo, mayor es la pérdida de carga y se necesita un mayor número de tubos para dividir el flujo y reducir la velocidad de la mezcla. Eso es algo que se aprecia de forma clara en el gráfico.

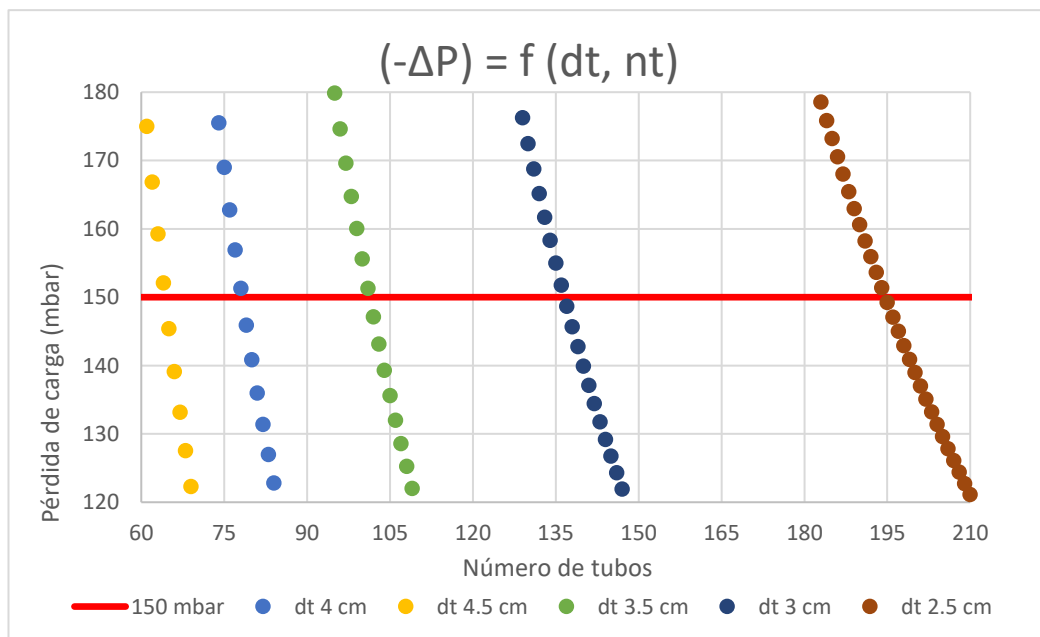


Ilustración 57. Pérdida de carga según el número de tubos y su diámetro

Tabla 39. L y $-\Delta P$ para 4.5 cm de diámetro

Número de tubos	$-\Delta P$ (mbar)	Longitud (m)
58	183.692	3.262
59	175.015	3.207
60	166.865	3.153
61	159.298	3.102
62	152.124	3.051
63	145.437	3.003
64	139.133	2.957
65	133.181	2.911
66	127.561	2.866
67	122.320	2.824
68	117.311	2.782

Tabla 40. L y $-\Delta P$ para 4 cm de diámetro

Número de tubos	$-\Delta P$ (mbar)	Longitud (m)
73	182.445	3.206
74	175.537	3.163
75	169.031	3.121
76	162.793	3.079
77	156.919	3.040
78	151.306	3.001
79	145.954	2.963
80	140.874	2.926
81	136.017	2.889
82	131.428	2.854
83	127.019	2.820
84	122.825	2.787
85	118.788	2.753

Tabla 41. L y $-\Delta P$ para 3.5 cm de diámetro

Número de tubos	$-\Delta P$ (mbar)	Longitud (m)
94	185.357	3.172
95	179.882	3.139
96	174.626	3.106
97	169.629	3.075
98	164.747	3.043
99	160.089	3.012
100	155.633	2.983
101	151.300	2.953
102	147.156	2.924
103	143.170	2.895
104	139.316	2.867
105	135.640	2.841
106	132.041	2.813
107	128.602	2.787
108	125.284	2.761
109	122.044	2.735
110	118.985	2.711

Tabla 42. L y $-\Delta P$ para 3 cm de diámetro

Número de tubos	$-\Delta P$ (mbar)	Longitud (m)
128	180.183	3.085
129	176.309	3.062
130	172.489	3.038
131	168.796	3.015
132	165.202	2.992
133	161.718	2.970
134	158.329	2.947
135	155.042	2.926
136	151.810	2.903
137	148.694	2.884
138	145.718	2.862
139	142.782	2.841
140	139.924	2.821
141	137.145	2.801
142	134.443	2.781
143	131.785	2.761
144	129.218	2.742
145	126.760	2.724
146	124.334	2.705
147	121.970	2.687
148	119.667	2.669

Tabla 43. L y $-\Delta P$ para 3 cm de diámetro

Número de tubos	$-\Delta P$ (mbar)	Longitud (m)
182	181.416	3.033
183	178.586	3.016
184	175.847	2.999
185	173.222	2.984
186	170.593	2.968
187	168.019	2.952
188	165.473	2.936
189	163.004	2.920
190	160.636	2.906
191	158.264	2.890
192	155.941	2.875
193	153.642	2.860
194	151.412	2.845
195	149.270	2.831
196	147.126	2.817
197	145.024	2.802
198	142.943	2.788
199	140.923	2.773
200	138.980	2.760
201	137.036	2.746
202	135.129	2.733
203	133.241	2.719
204	131.406	2.706
205	129.640	2.693
206	127.873	2.680
207	126.138	2.667
208	124.421	2.654
209	122.751	2.641
210	121.141	2.629

Conocidas las dimensiones de los tubos, se pueden realizar los cálculos referidos a la transmisión de calor. Por el exterior de la carcasa, el fluido calefactor es vapor de agua saturado a 12 bar. Las propiedades físicas del agua en estas condiciones son las siguientes:

Tabla 44. Propiedades físicas del vapor

T. saturación (°C)	187.96	k_L (W/m °C)	0.66976
ρ líquido (kg/m ³)	878.35	μ_L (kg/m·s)	1.43E-04
ρ vapor (kg/m ³)	6.13	$-\Delta H_{VAP}$ (kJ/kg)	1985.37

Guardadas las propiedades físicas del vapor, se utilizaron las dimensiones del reactor para calcular los parámetros de diseño presentes en la ecuación del coeficiente obtenido por condensación:

$$P_t = 1.25 \cdot d_o; d_b = d_o \cdot \left(\frac{N_t}{k_1}\right)^{\frac{1}{n_1}} \rightarrow N_r = \frac{2}{3} \cdot \frac{d_b}{P_t} \quad (\text{Ec. II. 22, II. 23 y II. 24})$$

con las constantes extraídas de la Tabla 15 del anexo,

Tabla 45. Constantes empíricas de carcasa

Square pitch, $p_t = 1.25d_o$	
No. passes	1
K_1	0.215
n_1	2.207

El otro parámetro de diseño, M_H (kg/m·s), se obtiene a partir de la cantidad de vapor condensada, G_c (kg/s), que, a su vez, se obtiene del DUTY, q (64.65 kW):

$$G_c = \frac{q}{(-\Delta H_{vap})} \rightarrow M_H = \frac{G_c}{N_t \cdot L} \quad (\text{Ec. II. 25 y II. 26})$$

Calculados estos parámetros, se obtiene el coeficiente por el exterior de los tubos, h_o , usando la siguiente ecuación:

$$h_o = 0.95 \cdot k_l \cdot \left(\frac{\rho_l \cdot (\rho_l - \rho_v) \cdot g}{\mu \cdot M_H}\right)^{1/3} \cdot N_r^{-1/6} \quad (\text{Ec. II. 27})$$

Los resultados fueron los siguientes:

Tabla 46. Resultados coeficiente por el exterior

N_r (adim.)	M_H (kg/m·s)	h_o (W/m ² °C)
6.995	0.162	3154

Por el interior de los tubos se utilizó una correlación cuya forma se explica en la memoria, para los cálculos, se tomaron las propiedades físicas a la entrada y la salida del reactor tubular, y se calcularon los coeficientes a la entrada y a la salida. Como existe diferencia, se optó, para aumentar la rigurosidad, utilizar el promedio de ambos. Si se fuese aún más riguroso, se podría haber dividido el reactor en varias zonas, pero se comprobó que el efecto de esa precisión añadida apenas variaba la solución de la longitud en milímetros, por lo que se decidió obviar eso, y trabajar de manera simplificada.

Las propiedades, así como el flujo volumétrico de influente y efluente, que es diferente, porque la reacción produce dos moles a partir de uno solo, y

compuestos con diferente densidad, y el número de Prandtl, se recogen en la siguiente tabla:

$$Pr = \frac{\mu \cdot c_p}{k_l} \quad (Ec. II. 28)$$

Tabla 47. Propiedades físicas de reactivos y productos

	Influyente	Efluyente
Flujo (m3/s)	2.62E-03	3.43E-03
μ_L (kg/m·s)	8.72E-04	1.49E-04
k_L (W/m °C)	0.197	0.089
c_p (kJ/kg °C)	3.138	3.087
ρ (kg/m ³)	930.920	709.914
Pr	13.909	5.161

No se recoge el número de Reynolds de partícula porque varía en cada una de las posibilidades:

$$S = \frac{\pi \cdot d_t^2}{4} \cdot N_t \rightarrow Re_p = \frac{Q/S \cdot d_p \cdot \rho}{\mu} \quad (Ec. II. 29 \text{ y } II. 30)$$

Tras esto, se utilizaron la correlación empírica de transmisión de calor en lechos porosos, y la ecuación del coeficiente global, para calcular los coeficientes a la entrada, la salida, y el promedio de ambos, usando los valores de ensuciamiento, h_{id} , y conductividad del acero, k_w , de 5000 W/m²°C y 50.2 W/m °C, sin despreciar su contribución a la resistencia, pues afecta notoriamente, sobre todo el ensuciamiento, al valor de los coeficientes:

$$Nu = \frac{d_p \cdot h_i}{k_l} = 2 + 1.3 \cdot Pr^{0.15} + 0.66 \cdot Pr^{0.31} \cdot Re_p^{0.5} \quad (Ec. II. 31)$$

$$\frac{1}{U} = \frac{1}{h_o} + \frac{d_o}{d_i \cdot h_i} + \frac{d_o \cdot \ln\left(\frac{d_o}{d_i}\right)}{2 \cdot k_w} + \frac{d_o}{d_i \cdot h_{id}} \quad (Ec. II. 32)$$

Tabla 48. Coeficientes de transmisión de calor según diámetro y número de tubos

d_t	U entrada (W/m ² °C)	U salida (W/m ² °C)	U promedio (W/m ² °C)	U despreciando (W/m ² °C)
2.5 cm	556	431	493	586
3 cm	572	448	510	605
3.5 cm	582	458	520	617
4 cm	588	465	527	625
4.5 cm	592	470	531	629

La tabla resumen que se encuentra en la memoria se compuso de la integración de los valores que se encuentran en tono azulado en las tablas 9 a 13, y la tabla 18 del Anexo II. Cálculos justificativos.

2.3. Selección del número de etapas en columnas

Se expresa en el documento de memoria, en el apartado 3.3.2. que el criterio de selección del número de etapas de las columnas de destilación que se han diseñado en el proceso es puramente económico, y se utilizaron las estimaciones económicas que ASPEN proporciona en la tabla resumen económico, que es la siguiente:

Tabla 49. Evaluación económica de ASPEN

Total Capital Cost [USD]	2 615 550
Total Operating Cost [USD/Year]	1 242 880
Total Raw Materials Cost [USD/Year]	0
Total Product Sales [USD/Year]	0
Total Utilities Cost [USD/Year]	279 141

Para completar los gráficos presentes en las ilustraciones 29, 30 y 31 de la memoria, lo que se hizo fue ir variando el número de etapas de las columnas, y extraer los datos de Capital Cost, CAPEX (primera fila), y Operating Cost, OPEX (segunda fila) en cada caso. Lastimosamente, ASPEN Plus no da la opción de tabular valores económicos, así que tuvo que hacerse paso a paso, cambiando el número de etapas y la etapa de alimentación en cada una de las columnas. Como se explica en la memoria, se eligió, para cada torre, el número de platos que minimizara la suma del CAPEX y el OPEX multiplicado por 10, que es el número de años mínimo que se espera que la planta esté en funcionamiento.

Los resultados fueron los siguientes:

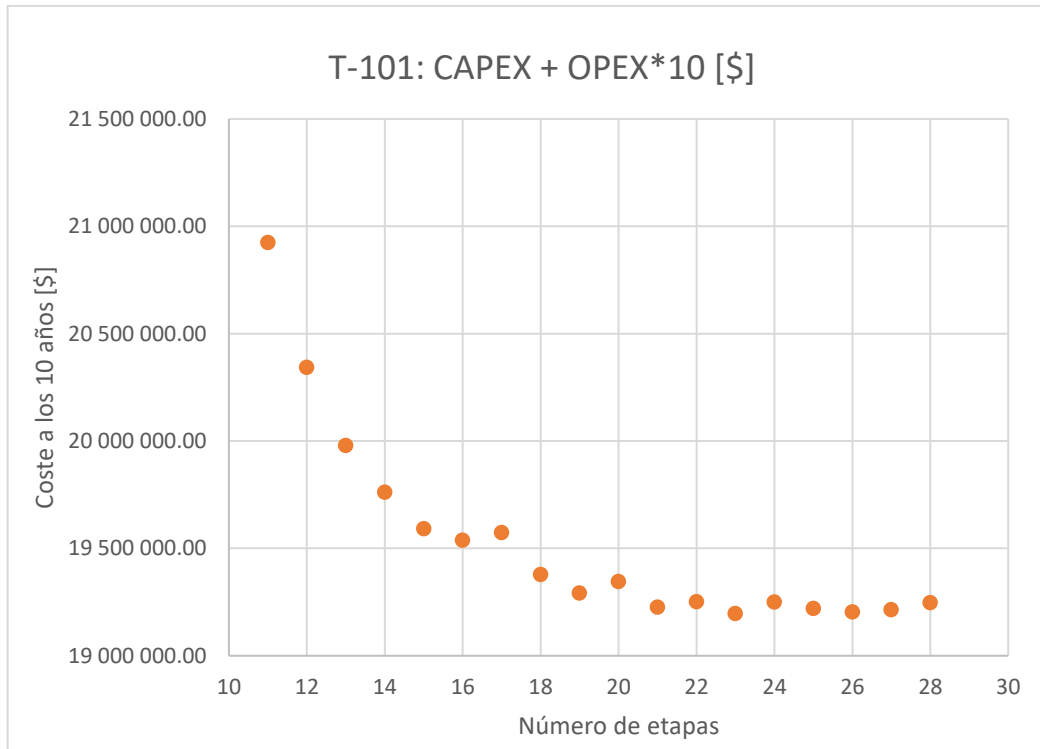


Ilustración 58. Selección del número de etapas, T-101

Tabla 50. Selección del número de etapas, T-101

Nº etapas	CAPEX [\$]	OPEX [\$/año]	Coste 10 años [\$]
9	2 728 990.00	2 041 440.00	23 143 390.00
10	2 741 520.00	1 937 610.00	22 117 620.00
11	2 703 360.00	1 822 180.00	20 925 160.00
12	2 709 970.00	1 763 350.00	20 343 470.00
13	2 714 010.00	1 726 560.00	19 979 610.00
14	2 730 090.00	1 703 120.00	19 761 290.00
15	2 732 720.00	1 685 840.00	19 591 120.00
16	2 744 620.00	1 679 260.00	19 537 220.00
17	2 763 390.00	1 681 090.00	19 574 290.00
18	2 769 120.00	1 660 890.00	19 378 020.00
19	2 765 610.00	1 652 650.00	19 292 110.00
20	2 789 530.00	1 655 580.00	19 345 330.00
21	2 789 320.00	1 643 760.00	19 226 920.00
22	2 796 180.00	1 645 500.00	19 251 180.00
23	2 794 130.00	1 640 170.00	19 195 830.00
24	2 816 640.00	1 643 350.00	19 250 140.00
25	2 826 810.00	1 639 430.00	19 221 110.00
26	2 831 620.00	1 637 290.00	19 204 520.00
27	2 846 230.00	1 636 800.00	19 214 230.00
28	2 853 000.00	1 639 450.00	19 247 500.00

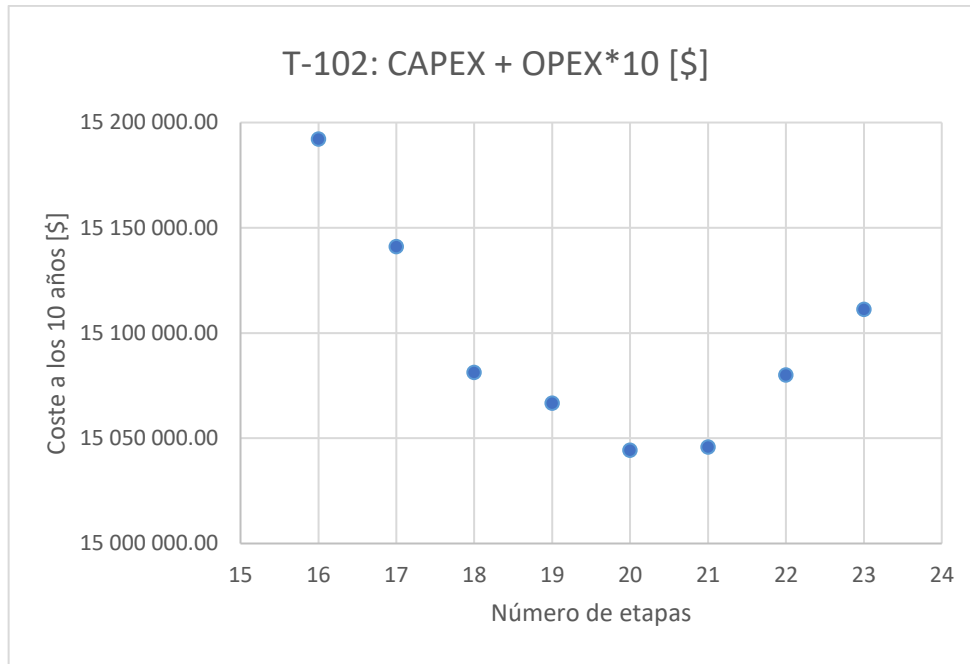


Ilustración 59. Selección del número de etapas, T-102

Tabla 51. Selección del número de etapas, T-103

Nº etapas	CAPEX [\$]	OPEX [\$/año]	Coste 10 años [\$]
16	2 579 290.00	1 261 280.00	15 192 090.00
17	2 596 700.00	1 254 430.00	15 141 000.00
18	2 595 830.00	1 248 540.00	15 081 230.00
19	2 608 500.00	1 245 820.00	15 066 700.00
20	2 615 550.00	1 242 880.00	15 044 350.00
21	2 625 560.00	1 242 020.00	15 045 760.00
22	2 657 250.00	1 242 270.00	15 079 950.00
23	2 678 630.00	1 243 250.00	15 111 130.00

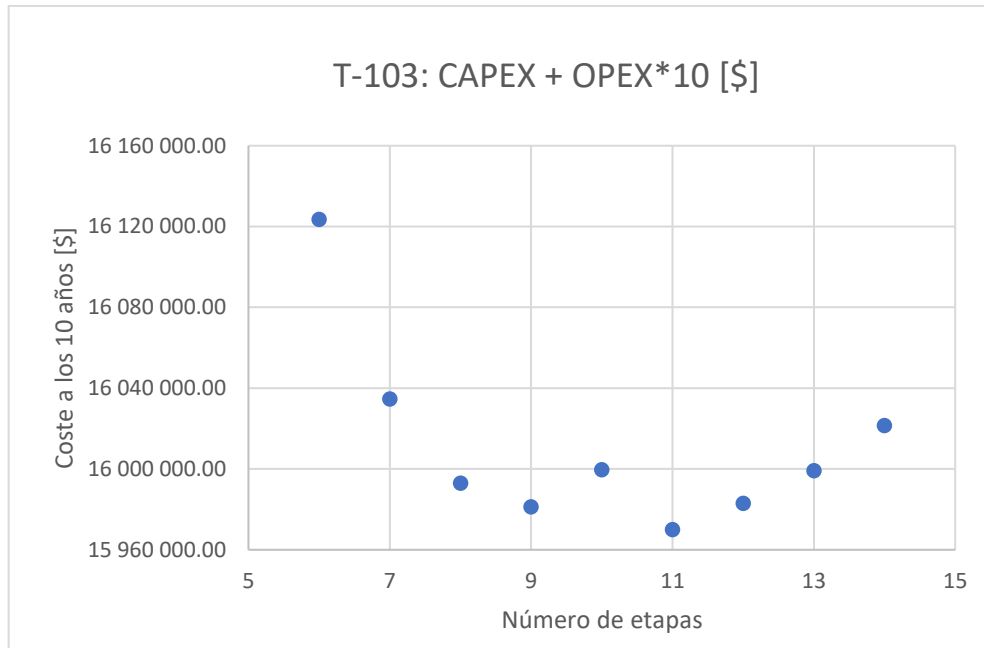


Ilustración 60. Selección del número de etapas, T-103

Tabla 52. Selección del número de etapas, T-103

Nº etapas	CAPEX [\$]	OPEX [\$/año]	Coste 10 años [\$]
6	2 536 900.00	1 358 660.00	16 123 500.00
7	2 549 750.00	1 348 490.00	16 034 650.00
8	2 555 060.00	1 343 780.00	15 992 860.00
9	2 563 210.00	1 341 790.00	15 981 110.00
10	2 577 870.00	1 342 170.00	15 999 570.00
11	2 568 510.00	1 340 140.00	15 969 910.00
12	2 578 670.00	1 340 430.00	15 982 970.00
13	2 593 050.00	1 340 600.00	15 999 050.00
14	2 605 040.00	1 341 640.00	16 021 440.00

De la misma manera que en el apartado anterior, los valores sombreados en azul son los que finalmente se eligieron para el diseño, y que se recogen en la tabla 16 de la memoria.

2.4. Elección del equipo de separación de colas

Por el fondo de la destilación primaria se separa una corriente que contiene una gran parte del agua que se forma en el reactor (ver en el Anexo IV. Balance de materia, que del agua que entraba a la torre, casi 3/4 se separan por las colas), y 1,4-butanodiol que no se ha convertido en el lecho catalítico.

En la memoria se cuenta que se barajó la posibilidad de utilizar un flash binario para separar agua y BDO, que son los componentes mayoritarios de la corriente R1, porque su coste de instalación es menos de un cuarto del coste de instalación de la columna ($606\ 000\ \$ / 130\ 200\ \$ \approx 4.65$), y se previó, erróneamente, que podría ser más barato.

Además del coste de instalación y de los aspectos económicos, se valoraron las consecuencias técnicas del empleo de un flash, realizando un estudio de los más críticos para 10 temperaturas diferentes, que se encontraban en el intervalo definido por la temperatura de las cabezas y las colas de la torre que luego decidió instalarse de forma definitiva.

En cuanto a aspectos técnicos, se valoraron: el porcentaje de recirculación de agua de vuelta al reactor (llega a T-103 un flujo de más de 1700 kg/h, de los cuales deben recircularse los menos posibles, pues esto reduciría la velocidad de reacción y el volumen del reactor debería ser notablemente mayor), la pureza del agua separada (cuanto más puro se consiga sacar el agua, menor coste de tratamiento de agua posterior va a asociarse a la planta), y las pérdidas de BDO en la corriente de agua (el BDO es un reactivo caro, con un precio de 3.6 \$/kg, y es necesario recircular la mayor cantidad posible para minimizar las pérdidas económicas. Se resumen los aspectos previos en la tabla 23.

Por otro lado, se realizó también una valoración económica, teniendo en cuenta los costes de instalación y operación y, adicionalmente, el dinero que supone que las pérdidas de BDO se produzcan, en términos de coste de oportunidad, pues todo el que pierdes en el agua es reactivo que no recirculas y que tienes que suministrar en la alimentación fresca. Igual que en el punto anterior, se realizó esta evaluación de CAPEX y OPEX a los 10 años de funcionamiento, considerando como OPEX el DUTY del flash y, en el caso de la columna, el calor aportado por el vapor en el Reboiler.

La conclusión que se obtiene de estos análisis es que, de los cuatros aspectos técnicos valorados, la columna T-103 mejora un hipotético flash y, de las 10 opciones de temperatura valoradas, el coste de las opciones que mejoran el cuarto aspecto supera en más de 10 veces al coste de la torre en vista de 10 años, por tanto, se sentenció que la instalación de una columna de destilación es infinitamente más rentable.

Tabla 53. Valoración técnica T-103 y Flash

Temp. (°C)	Pureza (%w/w)	BDO recuperado (%)	Pérdidas BDO (kg/h)	Agua recirculada (%)
100	0.970	98.935	1.861	81.722
101	0.981	90.330	16.900	21.912
102	0.977	84.086	27.813	5.233
103	0.976	81.453	32.414	1.561
104	0.974	79.626	35.608	0.985
105	0.972	77.873	38.671	0.720
106	0.971	76.104	41.762	0.565
107	0.969	74.282	44.947	0.463
108	0.967	72.388	48.258	0.389
109	0.965	70.408	51.718	0.334
110	0.963	68.332	55.346	0.289
T-103	0.994	99.600	0.700	0.400

Tabla 54. Valoración económica T-103 y Flash

Temp. (°C)	Pérdidas BDO (kg/h)	Pérdidas BDO (\$/año)	Duty (kW)	Coste a los 10 años (\$)
100	1.861	58 698.196	236.13	858 669.650
101	16.900	532 953.045	935.03	6 019 983.580
102	27.813	877 126.429	1 134.07	9 580 982.816
103	32.414	1 022 216.551	1 178.63	11 058 580.611
104	35.608	1 122 927.187	1 187.20	12 070 820.912
105	38.671	1 219 514.301	1 192.14	13 039 650.950
106	41.762	1 317 021.866	1 195.80	14 016 923.771
107	44.947	1 417 437.848	1 198.88	15 022 928.580
108	48.258	1 521 851.308	1 201.65	16 068 724.053
109	51.718	1 630 985.354	1 204.25	17 161 622.758
110	55.346	1 745 397.782	1 206.76	18 307 247.230
T-103	0.700	22 084.805	1 285.76	1 597 253.304

Anexo

3. Fichas de seguridad

SECCIÓN 1: IDENTIFICACIÓN DE LA SUSTANCIA O LA MEZCLA Y DE LA SOCIEDAD O LA EMPRESA**1.1 Identificador del producto**

Nombre del producto	1,4-Butanediol
Cat No. :	107630000; 107630010; 107630020; 107630025
Sinónimos	1,4-Butylene glycol
Nº. CAS	110-63-4
Fórmula molecular	C4 H10 O2
Número de registro REACH	01-2119471849-20

1.2. Usos pertinentes identificados de la sustancia o de la mezcla y usos desaconsejados

Uso recomendado	Productos químicos de laboratorio.
Sector de uso	SU3 - Usos industriales: Usos de sustancias como tales o en preparados en emplazamientos industriales
Categoría del producto	PC21 - Productos químicos de laboratorio
Categorías de procesos	PROC15 - Uso como reactivo de laboratorio
Categoría de emisión al medio ambiente	ERC6a: Uso industrial que da lugar a la fabricación de otra sustancia (uso de sustancias intermedias)
Usos desaconsejados	No hay información disponible

1.3. Datos del proveedor de la ficha de datos de seguridad

Empresa	Entidad de la UE / nombre de la empresa Acros Organics BVBA Janssen Pharmaceuticalaan 3a 2440 Geel, Belgium
	Nombre de la entidad / negocio del Reino Unido Fisher Scientific UK Bishop Meadow Road, Loughborough, Leicestershire LE11 5RG, United Kingdom
Dirección de correo electrónico	begel.sdsdesk@thermofisher.com

1.4. Teléfono de emergencia

Para obtener información en EE.UU., llame al: 800-ACROS-01
Para obtener información en Europa, llame al: +32 14 57 52 11

Número de emergencia, Europa: +32 14 57 52 99
Número de emergencia, EE.UU.: 201-796-7100

Número de teléfono de CHEMTREC, EE.UU.: 800-424-9300
Número de teléfono de CHEMTREC, Europa: 703-527-3887

SECCIÓN 2: IDENTIFICACIÓN DE LOS PELIGROS**2.1. Clasificación de la sustancia o de la mezcla**

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

1,4-Butanediol

Fecha de revisión 10-dic-2020

CLP clasificación - Reglamento (CE) n° 1272/2008

Peligros físicos

A la vista de los datos disponibles, no se cumplen los criterios de clasificación

Peligros para la salud

Toxicidad aguda oral

Categoría 4 (H302)

Toxicidad específica del órgano blanco - (única exposición)

Categoría 3 (H336)

Peligros para el medio ambiente

A la vista de los datos disponibles, no se cumplen los criterios de clasificación

Texto completo de las Indicaciones de peligro: ver la sección 16

2.2. Elementos de la etiqueta



Palabras de advertencia

Atención

Indicaciones de peligro

H302 - Nocivo en caso de ingestión

H336 - Puede provocar somnolencia o vértigo

Consejos de prudencia

P304 + P340 - EN CASO DE INHALACIÓN: Transportar a la víctima al exterior y mantenerla en reposo en una posición confortable para respirar

2.3. Otros peligros

Sustancia no considerada ser persistente, bioacumulable ni tóxica (PBT) / muy persistente ni bioacumulable (vPvB)

Tóxico para los vertebrados terrestres

SECCIÓN 3: COMPOSICIÓN/INFORMACIÓN SOBRE LOS COMPONENTES

3.1. Sustancias

Componente	Nº. CAS	Nº. CE.	Porcentaje en peso	CLP clasificación - Reglamento (CE) n° 1272/2008
Butano-1,4-diol	110-63-4	EEC No. 203-786-5	99	Acute Tox. 4 (H302) STOT SE 3 (H336)

ACR10763

Página 2 / 11

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

1,4-Butanediol

Fecha de revisión 10-dic-2020

Número de registro REACH

01-2119471849-20

Texto completo de las Indicaciones de peligro: ver la sección 16

SECCIÓN 4: PRIMEROS AUXILIOS

4.1. Descripción de los primeros auxilios

Contacto con los ojos	Enjuagar inmediatamente con abundante agua, también bajo los párpados, durante al menos 15 minutos. Consultar a un médico.
Contacto con la piel	Lavar inmediatamente con jabón y abundante agua y quitarse la ropa y el calzado contaminados. Consultar a un médico.
Ingestión	Limpiar la boca con agua. Consultar a un médico.
Inhalación	Alejarse de la fuente de exposición, tumbarse en el suelo. Transportar a la víctima al exterior. Si la respiración es difícil, proporcionar oxígeno. Si no respira, realizar técnicas de respiración artificial. Consultar a un médico.
Equipo de protección para el personal de primeros auxilios	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

No hay información disponible.

4.3. Indicación de toda atención médica y de los tratamientos especiales que deban dispensarse inmediatamente

Notas para el médico Tratar los síntomas.

SECCIÓN 5: MEDIDAS DE LUCHA CONTRA INCENDIOS

5.1. Medios de extinción

Medios de extinción apropiados

Dióxido de carbono (CO₂), Producto químico seco. Puede utilizarse niebla de agua para enfriar los contenedores cerrados.

Medios de extinción que no deben utilizarse por razones de seguridad

No hay información disponible.

5.2. Peligros específicos derivados de la sustancia o de la mezcla

Su descomposición térmica puede dar lugar a la liberación de vapores y gases irritantes.

Productos de combustión peligrosos

Monóxido de carbono (CO), Dióxido de carbono (CO₂).

5.3. Recomendaciones 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

ACR10763

Página 3 / 11

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

1,4-Butanediol

Fecha de revisión 10-dic-2020

6.1. Precauciones personales, equipo de protección y procedimientos de emergencia

Asegurar una ventilación adecuada.

6.2. Precauciones relativas al medio ambiente

Para obtener más información ecológica, ver el apartado 12.

6.3. Métodos y material de contención y de limpieza

Limpiar con material absorbente inerte (p. ej. arena, gel de sílice, aglomerante ácido, aglomerante universal, serrín). Prevenir la penetración del producto en desagües. Mantener en contenedores cerrados aptos para su eliminación. Procurar una ventilación adecuada. No arrojar a las aguas superficiales ni al sistema de alcantarillado.

6.4. Referencia a otras secciones

Consultar las medidas de protección en las listas de las secciones 8 y 13.

SECCIÓN 7: MANIPULACIÓN Y ALMACENAMIENTO

7.1. Precauciones para una manipulación segura

Evítase el contacto con los ojos y la piel. No respirar la niebla/los vapores/el aerosol. Mantener alejado de fuentes de calor, chispas, llama abierta o superficies calientes. - No fumar.

Medidas higiénicas

Manipular respetando las buenas prácticas de higiene industrial y seguridad. Manténgase lejos de alimentos, bebidas y piensos. No comer, beber ni fumar durante su utilización. Retirar y lavar la ropa y los guantes contaminados, por dentro y por fuera, antes de volver a usarlos. Lavar las manos antes de los descansos y después de la jornada de trabajo.

7.2. Condiciones de almacenamiento seguro, incluidas posibles incompatibilidades

Mantener en un lugar seco. Mantener el recipiente herméticamente cerrado. Proteger de la luz del sol directa. Almacenar a temperatura ambiente.

7.3. Usos específicos finales

Uso en laboratorios

SECCIÓN 8: CONTROLES DE EXPOSICIÓN/PROTECCIÓN INDIVIDUAL

8.1 Parámetros de control

Límites de exposición

Lista fuente (s)

Componente	Italia	Alemania	Portugal	Países Bajos	Finlandia
Butano-1,4-diol		TWA: 50 ppm (8 Stunden). AGW - exposure factor 4 TWA: 200 mg/m ³ (8 Stunden). AGW - exposure factor 4			

Componente	Austria	Dinamarca	Suiza	Polonia	Noruega
Butano-1,4-diol	MAK-KZW: 200 ppm 15				

ACR10763

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

1,4-Butanediol

Fecha de revisión 10-dic-2020

	Minuten MAK-KZW: 800 mg/m ³ 15 Minuten MAK-TMW: 50 ppm 8 Stunden MAK-TMW: 200 mg/m ³ 8 Stunden				
--	--	--	--	--	--

Componente	Rusia	República Eslovaca	Eslovenia	Suecia	Turquía
Butano-1,4-diol	MAC: 5 mg/m ³		TWA: 50 ppm 8 urah TWA: 200 mg/m ³ 8 urah STEL: 200 ppm 15 minutah STEL: 800 mg/m ³ 15 minutah		

Valores límite biológicos

Este producto, tal como se suministra, no contiene ningún material peligroso con límites biológicos establecidos por los organismos reguladores regionales específicos

Métodos de seguimiento

EN 14042:2003 Título de identificación: Atmósferas en los lugares de trabajo. Directrices para la aplicación y uso de procedimientos para evaluar la exposición a agentes químicos y biológicos.

Nivel sin efecto derivado (DNEL) No hay información disponible

<u>Ruta de exposición</u>	Efecto agudo (local)	Efecto agudo (sistémica)	Los efectos crónicos (local)	Los efectos crónicos (sistémica)
Oral Cutánea Inhalación				

Concentración prevista sin efecto (PNEC) No hay información disponible.

8.2 Controles de la exposición

Medidas técnicas

Asegurar una ventilación adecuada, especialmente en áreas confinadas.

Siempre que sea posible, deberán adoptarse medidas técnicas de control tales como el aislamiento o confinamiento del proceso, la introducción de cambios en el proceso o los equipos para reducir al mínimo la liberación o el contacto, y el uso de sistemas de ventilación adecuadamente diseñados, dirigidas a controlar los materiales peligrosos en su fuente

Equipos de protección personal

Protección de los ojos Antiparras (Norma de la UE - EN 166)

Protección de las manos Guantes protectores

Material de los guantes	Tiempo de penetración	Espesor de los guantes	Norma de la UE	Guante de los comentarios
Goma de nitrilo Neopreno Caucho natural PVC	Consulte las recomendaciones del fabricante	-	EN 374	(requisito mínimo)

Protección de la piel y el cuerpo Utilizar guantes y ropas de protección adecuados para evitar la exposición de la piel

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

1,4-Butanediol

Fecha de revisión 10-dic-2020

Inspeccione los guantes antes de su uso

Por favor, observe las instrucciones en cuanto a la permeabilidad y el tiempo de adelanto que son provistos por el proveedor de los guantes. (Consulte al fabricante / proveedor para obtener información).

Asegurarse de que los guantes son adecuados para la tarea

química compatibilidad, destreza, condiciones de funcionamiento

También tener en cuenta las condiciones locales específicas bajo las cuales el producto es utilizado, tal como el

Quítese los guantes con cuidado para evitar contaminación de la piel.

Protección respiratoria

Cuando los trabajadores se enfrentan a concentraciones superiores al límite de exposición, deben utilizar respiradores certificados apropiados.

Para proteger a quien lo lleva, el equipo de protección respiratoria debe ajustarse correctamente y estar sometido a un uso y un mantenimiento adecuados

A gran escala / uso de emergencia

Utilice un NIOSH / MSHA o la norma europea EN 136 respirador aprobado si los límites de exposición son excedidos o irritación u otros síntomas son experimentados

Tipo de filtro recomendado: Gases y vapores orgánicos de filtro Tipo A Marrón conforme a la EN14387

Pequeña escala / uso en laboratorio

Utilice un NIOSH / MSHA o la norma europea EN 149:2001 respirador aprobado si los límites de exposición son excedidos o irritación u otros síntomas son experimentados

Recomendado media máscara: - Válvula de filtrado: EN405; o; Media máscara: EN140; con filtro, ES141

Al EPR se utiliza una prueba de ajuste de la máscara debe llevarse a cabo

Controles de exposición medioambiental

No hay información disponible.

SECCIÓN 9: PROPIEDADES FÍSICAS Y QUÍMICAS

9.1. Información sobre propiedades físicas y químicas básicas

Estado físico	Líquido viscoso	Líquido
Aspecto	Incoloro	
Olor	Inodoro	
Umbral olfativo	No hay datos disponibles	
Punto/intervalo de fusión	20 °C / 68 °F	
Punto de reblandecimiento	No hay datos disponibles	
Punto /intervalo de ebullición	229.2 °C / 444.6 °F	@ 1013 hPa
Inflamabilidad (líquido)	No hay datos disponibles	
Inflamabilidad (sólido, gas)	No es aplicable	Líquido
Límites de explosión	Inferior 2.4 Vol% Superior 15.3 Vol%	
Punto de Inflamación	135 °C / 275 °F	Método - No hay información disponible
Temperatura de autoignición	420 °C / 788 °F	
Temperatura de descomposición	> 150°C	
pH	7-8	500 g/l aq. sol
Viscosidad	70 cP at 24 °C	
Solubilidad en el agua	Miscible	
Solubilidad en otros disolventes	No hay información disponible	
Coeficiente de reparto (n-octanol/agua)		
Componente	log Pow	
Butano-1,4-diol	-0.88	
Presión de vapor	<0.1 hPa @ 20 °C	
Densidad / Densidad relativa	1.010	
Densidad aparente	No es aplicable	Líquido
Densidad de vapor	3.1	(Aire = 1.0)
Características de las partículas	No es aplicable (Líquido)	

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

1,4-Butanediol

Fecha de revisión 10-dic-2020

9.2. Otros datos

Fórmula molecular C4 H10 O2
Peso molecular 90.12

SECCIÓN 10: ESTABILIDAD Y REACTIVIDAD

10.1. Reactividad

Ninguno conocido, en base a la información facilitada

10.2. Estabilidad química

Estable en condiciones normales, Higroscópico.

10.3. Posibilidad de reacciones peligrosas

Polimerización peligrosa No se produce ninguna polimerización peligrosa.
Reacciones peligrosas No hay información disponible.

10.4. Condiciones que deben evitarse

Mantener alejado de llamas desnudas, superficies calientes y fuentes de ignición. Productos incompatibles. Exposición al aire húmedo o al agua.

10.5. Materiales incompatibles

Ácidos. Peróxidos. Anhídridos de ácidos. Cloruros de ácidos. Agente reductor.

10.6. Productos de descomposición peligrosos

Monóxido de carbono (CO). Dióxido de carbono (CO2).

SECCIÓN 11: INFORMACIÓN TOXICOLÓGICA

11.1. Información sobre las clases de peligro definidas en el Reglamento (CE) n.o 1272/2008

Información del producto

(a) toxicidad aguda;

Oral Categoría 4
Cutánea A la vista de los datos disponibles, no se cumplen los criterios de clasificación
Inhalación A la vista de los datos disponibles, no se cumplen los criterios de clasificación

Componente	DL50 Oral	DL50 cutánea	LC50 Inhalación
Butano-1,4-diol	LD50 = 1525 mg/kg (Rat)	LD50 > 5000 mg/kg (Rat)	LC50 > 15 mg/L (Rat) 4 h LC50 > 5.1 mg/L (Rat) 4 h

(b) corrosión o irritación cutáneas; A la vista de los datos disponibles, no se cumplen los criterios de clasificación

(c) lesiones o irritación ocular graves; A la vista de los datos disponibles, no se cumplen los criterios de clasificación

(d) sensibilización respiratoria o cutánea;

Respiratorio A la vista de los datos disponibles, no se cumplen los criterios de clasificación
Piel A la vista de los datos disponibles, no se cumplen los criterios de clasificación

(e) mutagenicidad en células A la vista de los datos disponibles, no se cumplen los criterios de clasificación

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

1,4-Butanediol

Fecha de revisión 10-dic-2020

germinales;

No mutagénico en la prueba de AMES

(f) carcinogenicidad;

A la vista de los datos disponibles, no se cumplen los criterios de clasificación

Este producto no contiene componentes químicos reconocidos como carcinógenos

(g) toxicidad para la reproducción;

A la vista de los datos disponibles, no se cumplen los criterios de clasificación

(h) toxicidad específica en determinados órganos (STOT) – exposición única;

Categoría 3

Resultados / Órganos diana

Sistema nervioso central (SNC).

(i) toxicidad específica en determinados órganos (STOT) – exposición repetida;

A la vista de los datos disponibles, no se cumplen los criterios de clasificación

Órganos diana

Ninguno conocido.

(j) peligro de aspiración;

A la vista de los datos disponibles, no se cumplen los criterios de clasificación

Otros efectos adversos

No se han estudiado completamente las propiedades toxicológicas. Consulte la información completa en la entrada concreta de RTECS.

Síntomas / efectos, agudos y retardados

No hay información disponible.

11.2. Información sobre otros peligros

Propiedades de alteración endocrina

Evaluar las propiedades de alteración endocrina en la salud humana. Este producto no contiene ningún alterador del sistema endocrino conocido o sospechoso de serlo.

SECCIÓN 12: INFORMACIÓN ECOLÓGICA

12.1. Toxicidad

Efectos de ecotoxicidad

Componente	Peces de agua dulce	pulga de agua	Algas de agua dulce
Butano-1,4-diol	LC50: > 30000 mg/L, 96h static (Pimephales promelas)	EC50: = 813 mg/L, 48h (Daphnia magna)	EC50: > 500 mg/L, 72h (Desmodesmus subspicatus)

12.2. Persistencia y degradabilidad

Persistencia

Fácilmente biodegradable

Miscible con agua, La persistencia es improbable, en base a la información facilitada.

12.3. Potencial de bioacumulación

La bioacumulación es improbable

Componente	log Pow	Factor de bioconcentración (FBC)
Butano-1,4-diol	-0.88	No hay datos disponibles

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

1,4-Butanediol

Fecha de revisión 10-dic-2020

12.4. Movilidad en el suelo	El producto es soluble en agua y puede propagarse en sistemas acuosos . Probablemente será móvil en el medio ambiente debido a su solubilidad en agua. Altamente móvil en suelos
12.5. Resultados de la valoración PBT y mPmB	Sustancia no considerada ser persistente, bioacumulable ni tóxica (PBT) / muy persistente ni bioacumulable (vPvB).
12.6. Propiedades de alteración endocrina Información del alterador del sistema endocrino	Este producto no contiene ningún alterador del sistema endocrino conocido o sospechoso de serlo
12.7. Otros efectos adversos Contaminantes Orgánicos Persistentes Potencial de reducción de ozono	Este producto no contiene ningún conocido o sospechado sustancia Este producto no contiene ningún conocido o sospechado sustancia

SECCIÓN 13: CONSIDERACIONES RELATIVAS A LA ELIMINACIÓN

13.1. Métodos para el tratamiento de residuos

Restos de residuos/productos sin usar	Los desechos están clasificados como peligrosos. Dispóngase de acuerdo a las Directivas Europeas sobre desechos y desechos peligrosos. Eliminar de conformidad con las normativas locales.
Embalaje contaminado	Deshágase de este recipiente en un punto de recogida de residuos especiales o peligrosos.
Catálogo de Desechos Europeos	Según el Catálogo Europeo de Residuos, los códigos de residuos no son específicos del producto sino específicos de la aplicación.
Otra información	El usuario debe asignar códigos de residuos basándose en la aplicación para la que se utilizó el producto. No tirar los residuos por el desagüe.

SECCIÓN 14: INFORMACIÓN RELATIVA AL TRANSPORTE

IMDG/IMO No regulado

14.1. Número ONU
14.2. Designación oficial de transporte de las Naciones Unidas
14.3. Clase(s) de peligro para el transporte
14.4. Grupo de embalaje

ADR No regulado

14.1. Número ONU
14.2. Designación oficial de transporte de las Naciones Unidas
14.3. Clase(s) de peligro para el transporte
14.4. Grupo de embalaje

IATA No regulado

14.1. Número ONU
14.2. Designación oficial de transporte de las Naciones Unidas

ACR10763

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

1,4-Butanediol

Fecha de revisión 10-dic-2020

14.3. Clase(s) de peligro para el transporte

14.4. Grupo de embalaje

14.5. Peligros para el medio ambiente No hay peligros identificados

14.6. Precauciones particulares para los usuarios No se requieren precauciones especiales

14.7. Transporte marítimo a granel con arreglo a los instrumentos de la OMI No aplicable, productos envasados

SECCIÓN 15: INFORMACIÓN REGLAMENTARIA

15.1. Reglamentación y legislación en materia de seguridad, salud y medio ambiente específicas para la sustancia o la mezcla

Inventarios internacionales

X = enumeran, Europa (EINECS/ELINCS/NLP), U.S.A. (TSCA), Canadá (DSL/NDSL), Filipinas (PICCS), China (IECSC), Japan (ENCS), Australia (AICS), Korea (ECL).

Componente	EINECS	ELINCS	NLP	TSCA	DSL	NDSL	PICCS	ENCS	IECSC	AICS	KECL
Butano-1,4-diol	203-786-5	-		X	X	-	X	X	X	X	KE-0378 8

Reglamento (CE) n.º 649/2012 del Parlamento Europeo y del Consejo, de 4 de julio de 2012, relativo a la exportación e importación de productos químicos peligrosos

No es aplicable

Reglamentos nacionales

Clasificación WGK Ver la tabla de valores

Componente	Alemania Clasificación de las Aguas (VwVwS)	Alemania - TA-Luft Class
Butano-1,4-diol	WGK1	

15.2. Evaluación de la seguridad química

Un Seguridad Química Evaluación / Informe (CSA / CSR) no se ha llevado a cabo

SECCIÓN 16: OTRA INFORMACIÓN

Texto completo de las indicaciones H mencionadas en las secciones 2 y 3

H302 - Nocivo en caso de ingestión

H336 - Puede provocar somnolencia o vértigo

Leyenda

CAS - Chemical Abstracts Service

EINECS/ELINCS : Inventario europeo de sustancias químicas

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

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

1,4-Butanediol

Fecha de revisión 10-dic-2020

comercializadas existentes/Lista europea de sustancias químicas notificadas

PICCS - Inventario de productos químicos y sustancias químicas de Filipinas

IECS - Inventario chino de sustancias químicas existentes

KECL - Sustancias químicas existentes y evaluadas de Corea

WEL - Límites de exposición profesionales

ACGIH - American Conference of Governmental Industrial Hygienists (Conferencia Americana de Higienistas Industriales Gubernamentales)

DNEL - Nivel obtenido sin efecto

RPE - Equipos de protección respiratoria

LC50 - Concentración letal 50%

NOEC - Concentración sin efecto observado

PBT - Persistentes, bioacumulativas, tóxicas

ENCS - Inventario japonés de sustancias químicas existentes y nuevas

AICS - Inventario australiano de sustancias químicas (Australian Inventory of Chemical Substances)

NZIoC - Inventario de productos químicos de Nueva Zelanda

TWA - Tiempo Promedio Ponderado

IARC - Agencia Internacional para la Investigación del Cáncer

Concentración prevista sin efecto (PNEC)

LD50 - Dosis Letal 50%

EC50 - Concentración efectiva 50%

POW - Coeficiente de reparto octanol: agua

vPvB - Muy persistente y muy bioacumulable

ADR - Acuerdo europeo sobre el transporte internacional de mercancías peligrosas por carretera

IMO/IMDG - International Maritime Organization/International Maritime Dangerous Goods Code

OECD - Organización para la Cooperación y el Desarrollo

BCF - Factor de bioconcentración (FBC)

Bibliografía fundamental y fuentes de datos

<https://echa.europa.eu/information-on-chemicals>

Los proveedores de datos de seguridad, ChemADVISOR - LOLI, Merck Index, RTECS

ICAO/IATA - International Civil Aviation Organization/International Air Transport Association

MARPOL - Convenio Internacional para Prevenir la Contaminación por los Buques

ATE - Estimación de la toxicidad aguda

COV (compuesto orgánico volátil)

Consejo de formación

Formación de concienciación sobre peligros químicos, cubriendo etiquetado, fichas de datos de seguridad, equipos de protección personal e higiene.

Uso de equipos de protección personal, cubriendo su correcta selección, compatibilidad, umbrales de penetración, cuidados, mantenimiento, ajuste y estándares EN.

Primeros auxilios pertinentes a la exposición a productos químicos, incluido el uso de estaciones de lavado de ojos y duchas de seguridad.

Fecha de revisión

10-dic-2020

Resumen de la revisión

Actualización del CLP formato.

**La hoja técnica de seguridad cumple con los requisitos del Reglamento (CE) No. 1907/2006
REGLAMENTO (UE) 2020/878 DE LA COMISIÓN por el que se modifica el anexo II del
Reglamento (CE) n.o 1907/2006**

Descargo de responsabilidad

La información facilitada en esta Ficha de Datos de Seguridad es correcta, a nuestro leal saber y entender, en la fecha de su publicación. Dicha información está concebida únicamente como guía para la seguridad en la manipulación, el uso, el procesamiento, el almacenamiento, el transporte, la eliminación y la liberación, no debiendo tomarse como garantía o especificación de calidades. La información se refiere únicamente al material específico mencionado y puede no ser válida para tal material usado en combinación con cualesquiera otros materiales o en cualquier proceso salvo que se especifique expresamente en el texto

Fin de la ficha de datos de seguridad

Fecha de preparación 11-jun-2009

Fecha de revisión 24-dic-2020

Número de Revisión 9

SECCIÓN 1: IDENTIFICACIÓN DE LA SUSTANCIA O LA MEZCLA Y DE LA SOCIEDAD O LA EMPRESA**1.1 Identificador del producto**

Nombre del producto	Tetrahydrofuran
Cat No. :	BP1140-1
Sinónimos	THF
Nº. CAS	109-99-9
Nº. CE.	203-726-8
Fórmula molecular	C4 H8 O
Número de registro REACH	-

1.2. Usos pertinentes identificados de la sustancia o de la mezcla y usos desaconsejados

Uso recomendado	Productos químicos de laboratorio.
Sector de uso	SU3 - Usos industriales: Usos de sustancias como tales o en preparados en emplazamientos industriales
Categoría del producto	PC21 - Productos químicos de laboratorio
Categorías de procesos	PROC15 - Uso como reactivo de laboratorio
Categoría de emisión al medio ambiente	ERC6a: Uso industrial que da lugar a la fabricación de otra sustancia (uso de sustancias intermedias)
Usos desaconsejados	No hay información disponible

1.3. Datos del proveedor de la ficha de datos de seguridad

Empresa	Entidad de la UE / nombre de la empresa Acros Organics BVBA Janssen Pharmaceuticalaan 3a 2440 Geel, Belgium
	Nombre de la entidad / negocio del Reino Unido Fisher Scientific UK Bishop Meadow Road, Loughborough, Leicestershire LE11 5RG, United Kingdom
Dirección de correo electrónico	begel.sdsdesk@thermofisher.com

1.4. Teléfono de emergencia

Para obtener información en EE.UU., llame al: 800-ACROS-01
Para obtener información en Europa, llame al: +32 14 57 52 11

Número de emergencia, Europa: +32 14 57 52 99
Número de emergencia, EE.UU.: 201-796-7100

Número de teléfono de CHEMTREC, EE.UU.: 800-424-9300
Número de teléfono de CHEMTREC, Europa: 703-527-3887

SECCIÓN 2: IDENTIFICACIÓN DE LOS PELIGROS

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

Tetrahydrofuran

Fecha de revisión 24-dic-2020

2.1. Clasificación de la sustancia o de la mezcla

CLP clasificación - Reglamento (CE) n ° 1272/2008

Peligros físicos

Líquidos inflamables

Categoría 2 (H225)

Peligros para la salud

Toxicidad aguda oral

Categoría 4 (H302)

Lesiones o irritación ocular graves

Categoría 2 (H319)

Carcinogenicidad

Categoría 2 (H351)

Toxicidad específica del órgano blanco - (única exposición)

Categoría 3 (H335) (H336)

Peligros para el medio ambiente

A la vista de los datos disponibles, no se cumplen los criterios de clasificación

Texto completo de las Indicaciones de peligro: ver la sección 16

2.2. Elementos de la etiqueta



Palabras de advertencia

Peligro

Indicaciones de peligro

H225 - Líquido y vapores muy inflamables

H302 - Nocivo en caso de ingestión

H319 - Provoca irritación ocular grave

H335 - Puede irritar las vías respiratorias

H336 - Puede provocar somnolencia o vértigo

H351 - Se sospecha que provoca cáncer

EUH019 - Puede formar peróxidos explosivos

Consejos de prudencia

P210 - Mantener alejado del calor, superficies calientes, chispas llamas al descubierto y otras fuentes de ignición. No fumar

P280 - Llevar guantes/prendas/gafas/máscara de protección

P301 + P330 + P331 - EN CASO DE INGESTIÓN: Enjuagarse la boca. NO provocar el vómito

P303 + P361 + P353 - EN CASO DE CONTACTO CON LA PIEL (o el pelo): Quitar inmediatamente toda la ropa contaminada.

Enjuagar la piel con agua o ducharse

P304 + P340 - EN CASO DE INHALACIÓN: Transportar a la víctima al exterior y mantenerla en reposo en una posición confortable para respirar

P312 - Llamar a un CENTRO DE INFORMACION TOXICOLOGICA o a un médico en caso de malestar

2.3. Otros peligros

ACRBP1140

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

Tetrahydrofuran

Fecha de revisión 24-dic-2020

Sustancia no considerada ser persistente, bioacumulable ni tóxica (PBT) / muy persistente ni bioacumulable (vPvB)

Tóxico para los vertebrados terrestres

SECCIÓN 3: COMPOSICIÓN/INFORMACIÓN SOBRE LOS COMPONENTES

3.1. Sustancias

Componente	Nº. CAS	Nº. CE.	Porcentaje en peso	CLP clasificación - Reglamento (CE) n° 1272/2008
Tetrahidrofurano	109-99-9	EEC No. 203-726-8	>95	Flam. Liq. 2 (H225) Acute Tox. 4 (H302) Eye Irrit. 2 (H319) STOT SE 3 (H335) STOT SE 3 (H336) Carc. 2 (H351) (EUH019)

Componente	Specific concentration limits (SCL's)	Factor-M	Component notes
Tetrahidrofurano	STOT SE 3 :: C>=25% Eye Irrit. 2 :: C>=25% Acute Tox. 4 :: C>82.5%	-	-

Número de registro REACH	
	-

Texto completo de las Indicaciones de peligro: 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.
Contacto con los ojos	Enjuagar inmediatamente con abundante agua, también bajo los párpados, durante al menos 15 minutos. Consultar a un médico.
Contacto con la piel	Lavar inmediatamente con abundante agua durante al menos 15 minutos. Si persiste la irritación cutánea, llamar a un médico.
Ingestión	Limpia la boca con agua y beber a continuación abundante agua.
Inhalación	Transportar a la víctima al exterior. Si no respira, realizar técnicas de respiración artificial. Consultar a un médico si se producen síntomas.
Equipo de protección para el personal de primeros auxilios	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

Dificultades respiratorias. Pueden ser síntomas de sobreexposición cefalea, mareos, cansancio, náuseas y vómitos: Causa depresión del sistema nervioso central

4.3. Indicación de toda atención médica y de los tratamientos especiales que deban dispensarse inmediatamente

Notas para el médico	Tratar los síntomas. Los síntomas pueden ser retardados.
-----------------------------	--

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

Tetrahydrofuran

Fecha de revisión 24-dic-2020

SECCIÓN 5: MEDIDAS DE LUCHA CONTRA INCENDIOS

5.1. Medios de extinción

Medios de extinción apropiados

Agua pulverizada, dióxido de carbono (CO₂), productos químicos secos, espuma resistente al alcohol. Puede utilizarse niebla de agua para enfriar los contenedores cerrados.

Medios de extinción que no deben utilizarse por razones de seguridad

No utilizar una corriente sólida de agua, ya que puede esparcir y extender el fuego.

5.2. Peligros específicos derivados de la sustancia o de la mezcla

Inflamable. Los contenedores pueden explotar si se calientan. Los vapores pueden formar mezclas explosivas con el aire. Los vapores se pueden desplazar hasta una fuente de ignición y producir el retroceso de la llama. Puede formar peróxidos explosivos.

Productos de combustión peligrosos

Monóxido de carbono (CO), Dióxido de carbono (CO₂), Peróxidos.

5.3. Recomendaciones 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

Utilizar el equipo de protección individual obligatorio. Asegurar una ventilación adecuada. Retirar todas las fuentes de ignición. Evítese la acumulación de cargas electroestáticas.

6.2. Precauciones relativas al medio ambiente

No debe liberarse en el medio ambiente.

6.3. Métodos y material de contención y de limpieza

Absorber con material absorbente inerte. Mantener en contenedores cerrados aptos para su eliminación. Retirar todas las fuentes de ignición. Utilizar herramientas que no hagan chispas y un equipamiento a prueba de explosiones.

6.4. Referencia a otras secciones

Consultar las medidas de protección en las listas de las secciones 8 y 13.

SECCIÓN 7: MANIPULACIÓN Y ALMACENAMIENTO

7.1. Precauciones para una manipulación segura

Llevar equipo de protección individual/máscara de protección. Evitar el contacto con los ojos, la piel o la ropa. Asegurar una ventilación adecuada. Evitar la inhalación y la ingestión. Si se sospecha que hay formación de peróxido, no abrir ni mover el recipiente. Mantener alejado de llamas desnudas, superficies calientes y fuentes de ignición. Utilizar únicamente herramientas que no produzcan chispas. Deben conectarse a tierra, todas las partes metálicas de las instalaciones que se usen para evitar la inflamación de vapores por la descarga de la electricidad estática. Evítese la acumulación de cargas electroestáticas.

Medidas higiénicas

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

Tetrahydrofuran

Fecha de revisión 24-dic-2020

Manipular respetando las buenas prácticas de higiene industrial y seguridad. Manténgase lejos de alimentos, bebidas y piensos. No comer, beber ni fumar durante su utilización. Retirar y lavar la ropa y los guantes contaminados, por dentro y por fuera, antes de volver a usarlos. Lavar las manos antes de los descansos y después de la jornada de trabajo.

7.2. Condiciones de almacenamiento seguro, incluidas posibles incompatibilidades

Vida media de 6 meses. Puede formar peróxidos explosivos durante el almacenamiento prolongado. Los contenedores se deben marcar con la fecha de apertura y deben ensayarse periódicamente para detectar la presencia de peróxidos. Si se forman cristales en un líquido peroxidable, es posible que se haya producido peroxidación y el producto debe considerarse extremadamente peligroso. En ese caso, el contenedor debe ser abierto únicamente por profesionales de manera remota. Mantener los contenedores perfectamente cerrados en un lugar fresco, seco y bien ventilado. Mantener alejado del calor, chispas y llamas. Área de productos inflamables. Guarde bajo una atmósfera inerte.

7.3. Usos específicos finales

Uso en laboratorios

SECCIÓN 8: CONTROLES DE EXPOSICIÓN/PROTECCIÓN INDIVIDUAL

8.1 Parámetros de control

Límites de exposición

Lista fuente (s) **EU** - Directiva (UE) 2019/1831 de la Comisión de 24 de octubre de 2019 por la que se establece una quinta lista de valores límite de exposición profesional indicativos de conformidad con la Directiva 98/24/CE del Consejo y por la que se modifica la Directiva 2000/39/CE de la Comisión **ES** Ministerio de Trabajo y Asuntos Sociales de España. INSTITUTO NACIONAL DE SEGURIDAD E HIGIENE EN EL TRABAJO (INSST). Límites de Exposición Profesional Para Agentes Químicos en España. Publicado inicialmente en 1999. Modificado anualmente. Última edición febrero 2019.

Componente	Unión Europea	Reino Unido	Francia	Bélgica	España
Tetrahydrofuran	TWA: 50 ppm (8h) TWA: 150 mg/m ³ (8h) STEL: 100 ppm (15min) STEL: 300 mg/m ³ (15min) Skin	STEL: 100 ppm 15 min STEL: 300 mg/m ³ 15 min TWA: 50 ppm 8 hr TWA: 150 mg/m ³ 8 hr Skin	TWA / VME: 50 ppm (8 heures). restrictive limit TWA / VME: 150 mg/m ³ (8 heures). restrictive limit STEL / VLCT: 100 ppm. restrictive limit STEL / VLCT: 300 mg/m ³ . restrictive limit Peau	TWA: 50 ppm 8 uren TWA: 150 mg/m ³ 8 uren STEL: 100 ppm 15 minuten STEL: 300 mg/m ³ 15 minuten Huid	STEL / VLA-EC: 100 ppm (15 minutos). STEL / VLA-EC: 300 mg/m ³ (15 minutos). TWA / VLA-ED: 50 ppm (8 horas) TWA / VLA-ED: 150 mg/m ³ (8 horas) Piel

Componente	Italia	Alemania	Portugal	Países Bajos	Finlandia
Tetrahydrofuran	TWA: 50 ppm 8 ore. Media Ponderata nel Tempo TWA: 150 mg/m ³ 8 ore. Media Ponderata nel Tempo STEL: 100 ppm 15 minuti. Breve termine STEL: 300 mg/m ³ 15 minuti. Breve termine Pelle	TWA: 50 ppm (8 Stunden). AGW - exposure factor 2 TWA: 150 mg/m ³ (8 Stunden). AGW - exposure factor 2 TWA: 50 ppm (8 Stunden). MAK TWA: 150 mg/m ³ (8 Stunden). MAK Höhepunkt: 100 ppm Höhepunkt: 300 mg/m ³ Haut	STEL: 100 ppm 15 minutos STEL: 300 mg/m ³ 15 minutos TWA: 50 ppm 8 horas TWA: 150 mg/m ³ 8 horas Pele	huid STEL: 600 mg/m ³ 15 minuten TWA: 300 mg/m ³ 8 uren	TWA: 50 ppm 8 tunteina TWA: 150 mg/m ³ 8 tunteina STEL: 100 ppm 15 minuutteina STEL: 300 mg/m ³ 15 minuutteina Iho

Componente	Austria	Dinamarca	Suiza	Polonia	Noruega
Tetrahydrofuran	Haut MAK-KZW: 100 ppm 15 Minuten MAK-KZW: 300 mg/m ³ 15 Minuten MAK-TMW: 50 ppm 8	TWA: 50 ppm 8 timer TWA: 150 mg/m ³ 8 timer Hud	Haut/Peau STEL: 100 ppm 15 Minuten STEL: 300 mg/m ³ 15 Minuten TWA: 50 ppm 8	STEL: 300 mg/m ³ 15 minutach TWA: 150 mg/m ³ 8 godzinach	TWA: 50 ppm 8 timer TWA: 150 mg/m ³ 8 timer STEL: 75 ppm 15 minutter. value calculated STEL: 187.5 mg/m ³ 15

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

Tetrahydrofuran

Fecha de revisión 24-dic-2020

	Stunden MAK-TMW: 150 mg/m ³ 8 Stunden		Stunden TWA: 150 mg/m ³ 8 Stunden		minutter. value calculated Hud
--	--	--	--	--	--------------------------------------

Componente	Bulgaria	Croacia	Irlanda	Chipre	República Checa
Tetrahydrofurano	TWA: 50.0 ppm TWA: 150.0 mg/m ³ STEL : 100 ppm STEL : 300.0 mg/m ³ Skin notation	kože TWA-GVI: 50 ppm 8 satima. TWA-GVI: 150 mg/m ³ 8 satima. STEL-KGVI: 100 ppm 15 minutama. STEL-KGVI: 300 mg/m ³ 15 minutama.	TWA: 50 ppm 8 hr. TWA: 150 mg/m ³ 8 hr. STEL: 100 ppm 15 min STEL: 300 mg/m ³ 15 min Skin	Skin-potential for cutaneous absorption STEL: 100 ppm STEL: 300 mg/m ³ TWA: 50 ppm TWA: 150 mg/m ³	TWA: 150 mg/m ³ 8 hodinách. Potential for cutaneous absorption Ceiling: 300 mg/m ³

Componente	Estonia	Gibraltar	Grecia	Hungría	Islandia
Tetrahydrofurano	Nahk TWA: 50 ppm 8 tundides. TWA: 150 mg/m ³ 8 tundides. STEL: 100 ppm 15 minutites. STEL: 300 mg/m ³ 15 minutites.	Skin notation TWA: 50 ppm 8 hr TWA: 150 mg/m ³ 8 hr STEL: 100 ppm 15 min STEL: 300 mg/m ³ 15 min	STEL: 250 ppm STEL: 735 mg/m ³ TWA: 200 ppm TWA: 590 mg/m ³	STEL: 300 mg/m ³ 15 percekben. CK TWA: 150 mg/m ³ 8 órában. AK lehetséges borön keresztüli felszívódás	STEL: 100 ppm STEL: 300 mg/m ³ TWA: 50 ppm 8 klukkustundum. TWA: 150 mg/m ³ 8 klukkustundum. Skin notation

Componente	Letonia	Lituania	Luxemburgo	Malta	Rumanía
Tetrahydrofurano	skin - potential for cutaneous exposure STEL: 100 ppm STEL: 300 mg/m ³ TWA: 50 ppm TWA: 150 mg/m ³	TWA: 50 ppm IPRD TWA: 150 mg/m ³ IPRD Oda STEL: 100 ppm STEL: 300 mg/m ³	Possibility of significant uptake through the skin TWA: 50 ppm 8 Stunden TWA: 150 mg/m ³ 8 Stunden STEL: 100 ppm 15 Minuten STEL: 300 mg/m ³ 15 Minuten	possibility of significant uptake through the skin TWA: 50 ppm TWA: 150 mg/m ³ STEL: 100 ppm 15 minuti STEL: 300 mg/m ³ 15 minuti	Skin notation TWA: 50 ppm 8 ore TWA: 150 mg/m ³ 8 ore STEL: 100 ppm 15 minute STEL: 300 mg/m ³ 15 minute

Componente	Rusia	República Eslovaca	Eslovenia	Suecia	Turquía
Tetrahydrofurano	MAC: 100 mg/m ³	Ceiling: 300 mg/m ³ Potential for cutaneous absorption TWA: 50 ppm TWA: 150 mg/m ³	TWA: 50 ppm 8 urah TWA: 150 mg/m ³ 8 urah Koža STEL: 100 ppm 15 minutah STEL: 300 mg/m ³ 15 minutah	Binding STEL: 100 ppm 15 minuter Binding STEL: 300 mg/m ³ 15 minuter TLV: 50 ppm 8 timmar. NGV TLV: 150 mg/m ³ 8 timmar. NGV	Deri TWA: 50 ppm 8 saat TWA: 150 mg/m ³ 8 saat STEL: 100 ppm 15 dakika STEL: 300 mg/m ³ 15 dakika

Valores límite biológicos

Lista fuente (s) **ES** Ministerio de Trabajo y Asuntos Sociales de España

INSTITUTO NACIONAL DE SEGURIDAD E HIGIENE EN EL TRABAJO

Limites de Exposición Profesional Para Agentes Químicos en España

Establecidos bajo Ley 31/1995, Prevención de Riesgos Laborales y Real Decreto 39/1997, Reglamento de los Servicios de Prevención. La Implementación de esta legislación en el Instituto Nacional de Seguridad e Higiene en el Trabajo (INSHT) es bajo Real Decreto 374/2001 de Mayo 1, 2001. Publicado inicialmente en 1995. actualizada en 2011

Componente	Unión Europea	Reino Unido	Francia	España	Alemania
Tetrahydrofurano				Tetrahydrofuran: 2 mg/L urine end of shift	Tetrahydrofuran: 2 mg/L urine (end of shift)

Componente	Gibraltar	Letonia	República Eslovaca	Luxemburgo	Turquía
Tetrahydrofurano			Tetrahydrofuran: 2 mg/L urine end of exposure or work shift		

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

Tetrahydrofuran

Fecha de revisión 24-dic-2020

Métodos de seguimiento

EN 14042:2003 Título de identificación: Atmósferas en los lugares de trabajo. Directrices para la aplicación y uso de procedimientos para evaluar la exposición a agentes químicos y biológicos.

Nivel sin efecto derivado (DNEL) Ver la tabla de valores

<u>Ruta de exposición</u>	Efecto agudo (local)	Efecto agudo (sistémica)	Los efectos crónicos (local)	Los efectos crónicos (sistémica)
Oral				
Cutánea				25 mg/kg bw/day
Inhalación	150 mg/m ³	300 mg/m ³	150 mg/m ³	300 mg/m ³

Concentración prevista sin efecto (PNEC) Ver valores por debajo de.

Agua dulce	4.32 mg/l
Sedimentos de agua dulce	23.3 mg/kg
Agua marina	0.432 mg/l
Sedimentos de agua marina	2.3 mg/kg
El agua intermitente	21.6 mg/l
Microorganismos de tratamiento de aguas residuales	4.6 mg/l
Del suelo (agricultura)	2.1 mg/kg

8.2 Controles de la exposición

Medidas técnicas

Utilizar un material eléctrico/de ventilación/iluminación/ antideflagrante. Asegurarse de que haya estaciones de lavado de ojos y duchas de seguridad cerca de la ubicación de la estación de trabajo. Asegurar una ventilación adecuada, especialmente en áreas confinadas.

Siempre que sea posible, deberán adoptarse medidas técnicas de control tales como el aislamiento o confinamiento del proceso, la introducción de cambios en el proceso o los equipos para reducir al mínimo la liberación o el contacto, y el uso de sistemas de ventilación adecuadamente diseñados, dirigidas a controlar los materiales peligrosos en su fuente

Equipos de protección personal

Protección de los ojos Antiparras (Norma de la UE - EN 166)

Protección de las manos Guantes protectores

Material de los guantes	Tiempo de penetración	Espesor de los guantes	Norma de la UE	Guante de los comentarios
Goma de butilo	< 25 minutos	0.6 mm	Nivel 1 EN 374	Tasa de permeación 106 µg/cm ² /min Según las pruebas realizadas de acuerdo con EN374-3 Determinación de la resistencia a la permeación por productos químicos
Guantes de neopreno	< 15 minutos	0.45 mm		

Protección de la piel y el cuerpo Ropa de manga larga

Inspeccione los guantes antes de su uso

Por favor, observe las instrucciones en cuanto a la permeabilidad y el tiempo de adelanto que son provistos por el proveedor de los guantes. (Consulte al fabricante / proveedor para obtener información).

Asegurarse de que los guantes son adecuados para la tarea química compatibilidad, destreza, condiciones de funcionamiento

También tener en cuenta las condiciones locales específicas bajo las cuales el producto es utilizado, tal como el
Quítese los guantes con cuidado para evitar contaminación de la piel.

Protección respiratoria

Cuando los trabajadores se enfrentan a concentraciones superiores al límite de exposición, deben utilizar respiradores certificados apropiados.

Para proteger a quien lo lleva, el equipo de protección respiratoria debe ajustarse correctamente y estar sometido a un uso y un mantenimiento adecuados

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

Tetrahydrofuran

Fecha de revisión 24-dic-2020

A gran escala / uso de emergencia Utilice un NIOSH / MSHA o la norma europea EN 136 respirador aprobado si los límites de exposición son excedidos o irritación u otros síntomas son experimentados
Tipo de filtro recomendado: Gases y vapores orgánicos de filtro Tipo A Marrón conforme a la EN14387

Pequeña escala / uso en laboratorio Utilice un NIOSH / MSHA o la norma europea EN 149:2001 respirador aprobado si los límites de exposición son excedidos o irritación u otros síntomas son experimentados
Recomendado media máscara: - Válvula de filtrado: EN405; o; Media máscara: EN140; con filtro, ES141
Al EPR se utiliza una prueba de ajuste de la máscara debe llevarse a cabo

Controles de exposición medioambiental No hay información disponible.

SECCIÓN 9: PROPIEDADES FÍSICAS Y QUÍMICAS

9.1. Información sobre propiedades físicas y químicas básicas

Estado físico	Líquido	
Aspecto	Incoloro	
Olor	Destilados de petróleo	
Umbral olfativo	No hay datos disponibles	
Punto/intervalo de fusión	-108.4 °C / -163.1 °F	
Punto de reblandecimiento	No hay datos disponibles	
Punto /intervalo de ebullición	66 °C / 150.8 °F	
Inflamabilidad (líquido)	Fácilmente inflamable	En base a datos de ensayos
Inflamabilidad (sólido, gas)	No es aplicable	Líquido
Límites de explosión	Inferior 1.5 vol% Superior 12 vol%	
Punto de Inflamación	-21 °C / -5.8 °F	Método - No hay información disponible
Temperatura de autoignición	215 °C / 419 °F	
Temperatura de descomposición	No hay datos disponibles	
pH	7-8	20% aq. solution
Viscosidad	0.456 mPas @ 20°C dinámica	
Solubilidad en el agua	Miscible	
Solubilidad en otros disolventes	No hay información disponible	
Coeficiente de reparto (n-octanol/agua)		
Componente	log Pow	
Tetrahidrofurano	0.45	
Presión de vapor	170 mbar @ 20 °C	
Densidad / Densidad relativa	0.880	
Densidad aparente	No es aplicable	Líquido
Densidad de vapor	2.5	(Aire = 1.0)
Características de las partículas	No es aplicable (Líquido)	

9.2. Otros datos

Fórmula molecular	C4 H8 O
Peso molecular	72.11
Propiedades explosivas	.?1 ETANOL. ?2 Los vapores pueden formar mezclas explosivas con el aire
Índice de Evaporación	> 1 - (Butil acetato = 1,0)

SECCIÓN 10: ESTABILIDAD Y REACTIVIDAD

10.1. Reactividad

ACRBP1140

Página 8 / 14

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

Tetrahydrofuran

Fecha de revisión 24-dic-2020

Sí. Puede formar peróxidos explosivos

10.2. Estabilidad química

Puede formar peróxidos explosivos, Verifique el nivel de peróxido periódicamente y si > 100 ppm 'NO USE', Higroscópico.

10.3. Posibilidad de reacciones peligrosas

Polimerización peligrosa
Reacciones peligrosas

Puede producirse una polimerización peligrosa.
Ninguno durante un proceso normal.

10.4. Condiciones que deben evitarse

Productos incompatibles. Exceso de calor. Mantener alejado de llamas desnudas, superficies calientes y fuentes de ignición. Exposición al aire húmedo o al agua.

10.5. Materiales incompatibles

Agentes oxidantes fuertes. Ácidos.

10.6. Productos de descomposición peligrosos

Monóxido de carbono (CO). Dióxido de carbono (CO₂). Peróxidos.

SECCIÓN 11: INFORMACIÓN TOXICOLÓGICA

11.1. Información sobre las clases de peligro definidas en el Reglamento (CE) n.o 1272/2008

Información del producto

(a) toxicidad aguda;

Oral

Categoría 4

Cutánea

A la vista de los datos disponibles, no se cumplen los criterios de clasificación

Inhalación

A la vista de los datos disponibles, no se cumplen los criterios de clasificación

Componente	DL50 Oral	DL50 cutánea	LC50 Inhalación
Tetrahydrofurano	1650 mg/kg (Rat)	> 2000 mg/kg (Rabbit)	180 mg/L (Rat) 1 h 53.9 mg/L (Rat) 4 h

(b) corrosión o irritación cutáneas; A la vista de los datos disponibles, no se cumplen los criterios de clasificación

(c) lesiones o irritación ocular graves;

Categoría 2

(d) sensibilización respiratoria o cutánea;

Respiratorio

A la vista de los datos disponibles, no se cumplen los criterios de clasificación

Piel

A la vista de los datos disponibles, no se cumplen los criterios de clasificación

Component	Métodos de seguimiento	Especies de prueba	Estudiar resultado
Tetrahydrofurano 109-99-9 (>95)	Local ensayo de ganglio linfático OECD TG 429	ratón	no sensibilizante

(e) mutagenicidad en células germinales;

A la vista de los datos disponibles, no se cumplen los criterios de clasificación

Component	Métodos de seguimiento	Especies de prueba	Estudiar resultado
Tetrahydrofurano 109-99-9 (>95)	OECD TG 476 Gene mutación celular ----- OECD TG 473	in vivo mamífero	negativo

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

Tetrahydrofuran

Fecha de revisión 24-dic-2020

	Ensayo de aberración cromosómica	in vitro mamífero	negativo
--	----------------------------------	-------------------	----------

(f) **carcinogenicidad;** Categoría 2
Posibles efectos cancerígenos

Componente	UE	UK	Alemania	IARC
Tetrahydrofurano				Group 2B

(g) **toxicidad para la reproducción;** A la vista de los datos disponibles, no se cumplen los criterios de clasificación

Component	Métodos de seguimiento	Especies de prueba / duración	Estudiar resultado
Tetrahydrofurano 109-99-9 (>95)	OECD TG 416	Rata 2 Generación	NOAEL = 3,000 ppm

(h) **toxicidad específica en determinados órganos (STOT) – exposición única;** Categoría 3

Resultados / Órganos diana Aparato respiratorio, Sistema nervioso central (SNC).

(i) **toxicidad específica en determinados órganos (STOT) – exposición repetida;** A la vista de los datos disponibles, no se cumplen los criterios de clasificación

Métodos de seguimiento Ensayo OCDE n.º 407
Especies de prueba / duración Rata / 28 días
Estudiar resultado NOAEL = 1,000 mg/l
Ruta de exposición Oral
Órganos diana Ninguno conocido.

(j) **peligro de aspiración;** A la vista de los datos disponibles, no se cumplen los criterios de clasificación

Síntomas / efectos, agudos y retardados Pueden ser síntomas de sobreexposición cefalea, mareos, cansancio, náuseas y vómitos. Causa depresión del sistema nervioso central.

11.2. Información sobre otros peligros

Propiedades de alteración endocrina Evaluar las propiedades de alteración endocrina en la salud humana. Este producto no contiene ningún alterador del sistema endocrino conocido o sospechoso de serlo.

SECCIÓN 12: INFORMACIÓN ECOLÓGICA

12.1. Toxicidad

Efectos de ecotoxicidad No tirar los residuos por el desagüe.

Componente	Peces de agua dulce	pulga de agua	Algas de agua dulce
Tetrahydrofurano	2160 mg/l LC50 = 96 h Pimephales promelas Leuciscus idus: LC50: 2820 mg/L/48h	EC50 48 h 3485 mg/l EC50: >10000 mg/L/24h	

12.2. Persistencia y degradabilidad Product is biodegradable
Persistencia La persistencia es improbable, en base a la información facilitada.
La degradación en la planta de No contiene sustancias nocivas para el entorno o no degradables en las estaciones de

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

Tetrahydrofuran

Fecha de revisión 24-dic-2020

tratamiento de aguas residuales tratamiento de aguas residuales.

12.3. Potencial de bioacumulación EL MATERIAL NO SE BIOACUMULA

Componente	log Pow	Factor de bioconcentración (FBC)
Tetrahydrofurano	0.45	No hay datos disponibles

12.4. Movilidad en el suelo

El producto contiene compuestos orgánicos volátiles (COV) que se evaporan fácilmente a partir de todas las superficies. Probablemente será móvil en el medio ambiente debido a su volatilidad. Se disipa rápidamente en el aire.

12.5. Resultados de la valoración PBT y mPmB

Sustancia no considerada ser persistente, bioacumulable ni tóxica (PBT) / muy persistente ni bioacumulable (vPvB).

12.6. Propiedades de alteración endocrina

Información del alterador del sistema endocrino

Componente	UE - Lista de potenciales alteradores del sistema endocrino	UE - Alteradores del sistema endocrino - Sustancias evaluadas	Japón: Información sobre disruptores endocrinos
Tetrahydrofurano	Group III Chemical		

12.7. Otros efectos adversos

Contaminantes Orgánicos Persistentes

Este producto no contiene ningún conocido o sospechado sustancia

Potencial de reducción de ozono

Este producto no contiene ningún conocido o sospechado sustancia

SECCIÓN 13: CONSIDERACIONES RELATIVAS A LA ELIMINACIÓN

13.1. Métodos para el tratamiento de residuos

Restos de residuos/productos sin usar

Los desechos están clasificados como peligrosos. Dispóngase de acuerdo a las Directivas Europeas sobre desechos y desechos peligrosos. Eliminar de conformidad con las normativas locales.

Embalaje contaminado

Deshágase de este recipiente en un punto de recogida de residuos especiales o peligrosos. Los recipientes vacíos siguen conteniendo residuos del producto (líquido y/o vapor), y pueden ser peligrosos. Mantener el producto y el recipiente vacío alejado de fuentes de calor e ignición.

Catálogo de Desechos Europeos

Según el Catálogo Europeo de Residuos, los códigos de residuos no son específicos del producto sino específicos de la aplicación.

Otra información

No verter en la red de alcantarillado. El usuario debe asignar códigos de residuos basándose en la aplicación para la que se utilizó el producto. Puede desecharse en vertederos o incinerarse, cuando eso sea conforme con las normativas locales.

SECCIÓN 14: INFORMACIÓN RELATIVA AL TRANSPORTE

IMDG/IMO

14.1. Número ONU

UN2056

14.2. Designación oficial de transporte de las Naciones Unidas

Tetrahydrofurano

14.3. Clase(s) de peligro para el transporte

3

14.4. Grupo de embalaje

II

ACRBP1140

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

Tetrahydrofuran

Fecha de revisión 24-dic-2020

ADR

14.1. Número ONU	UN2056
14.2. Designación oficial de transporte de las Naciones Unidas	Tetrahydrofurano
14.3. Clase(s) de peligro para el transporte	3
14.4. Grupo de embalaje	II

IATA

14.1. Número ONU	UN2056
14.2. Designación oficial de transporte de las Naciones Unidas	Tetrahydrofurano
14.3. Clase(s) de peligro para el transporte	3
14.4. Grupo de embalaje	II
14.5. Peligros para el medio ambiente	No hay peligros identificados

14.6. Precauciones particulares para los usuarios No se requieren precauciones especiales

14.7. Transporte marítimo a granel con arreglo a los instrumentos de la OMI No aplicable, productos envasados

SECCIÓN 15: INFORMACIÓN REGLAMENTARIA

15.1. Reglamentación y legislación en materia de seguridad, salud y medio ambiente específicas para la sustancia o la mezcla

Inventarios internacionales

X = enumeran, Europa (EINECS/ELINCS/NLP), U.S.A. (TSCA), Canadá (DSL/NDSL), Filipinas (PICCS), China (IECSC), Japan (ENCS), Australia (AICS), Korea (ECL).

Componente	EINECS	ELINCS	NLP	TSCA	DSL	NDSL	PICCS	ENCS	IECSC	AICS	KECL
Tetrahydrofurano	203-726-8	-		X	X	-	X	X	X	X	KE-3345 4

Reglamento (CE) n.o 649/2012 del Parlamento Europeo y del Consejo, de 4 de julio de 2012, relativo a la exportación e importación de productos químicos peligrosos
No es aplicable

Reglamentos nacionales

Clasificación WGK Ver la tabla de valores

Componente	Alemania Clasificación de las Aguas (VwVwS)	Alemania - TA-Luft Class
Tetrahydrofurano	WGK1	

Componente	Francia - INRS (cuadros de enfermedades profesionales)
Tetrahydrofurano	Tableaux des maladies professionnelles (TMP) - RG 84

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

Tetrahydrofuran

Fecha de revisión 24-dic-2020

15.2. Evaluación de la seguridad química

Un informe sobre la seguridad química Evaluación / (CSA / CSR) ha sido llevado a cabo por el fabricante / importador

SECCIÓN 16: OTRA INFORMACIÓN

Texto completo de las indicaciones H mencionadas en las secciones 2 y 3

H225 - Líquido y vapores muy inflamables
H302 - Nocivo en caso de ingestión
H319 - Provoca irritación ocular grave
H335 - Puede irritar las vías respiratorias
H336 - Puede provocar somnolencia o vértigo
H351 - Se sospecha que provoca cáncer
EUH019 - Puede formar peróxidos explosivos

Leyenda

CAS - Chemical Abstracts Service

EINECS/ELINCS : Inventario europeo de sustancias químicas comercializadas existentes/Lista europea de sustancias químicas notificadas

PICCS - Inventario de productos químicos y sustancias químicas de Filipinas

IECSC - Inventario chino de sustancias químicas existentes

KECL - Sustancias químicas existentes y evaluadas de Corea

WEL - Límites de exposición profesionales

ACGIH - American Conference of Governmental Industrial Hygienists (Conferencia Americana de Higienistas Industriales Gubernamentales)

DNEL - Nivel obtenido sin efecto

RPE - Equipos de protección respiratoria

LC50 - Concentración letal 50%

NOEC - Concentración sin efecto observado

PBT - Persistentes, bioacumulativas, tóxicas

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

ENCS - Inventario japonés de sustancias químicas existentes y nuevas

AICS - Inventario australiano de sustancias químicas (Australian Inventory of Chemical Substances)

NZIoC - Inventario de productos químicos de Nueva Zelanda

TWA - Tiempo Promedio Ponderado

IARC - Agencia Internacional para la Investigación del Cáncer

Concentración prevista sin efecto (PNEC)

LD50 - Dosis Letal 50%

EC50 - Concentración efectiva 50%

POW - Coeficiente de reparto octanol: agua

vPvB - Muy persistente y muy bioacumulable

ADR - Acuerdo europeo sobre el transporte internacional de mercancías peligrosas por carretera

IMO/IMDG - International Maritime Organization/International Maritime Dangerous Goods Code

OECD - Organización para la Cooperación y el Desarrollo

BCF - Factor de bioconcentración (FBC)

Bibliografía fundamental y fuentes de datos

<https://echa.europa.eu/information-on-chemicals>

Los proveedores de datos de seguridad, ChemADVISOR - LOLI, Merck Index, RTECS

ICAO/IATA - International Civil Aviation Organization/International Air Transport Association

MARPOL - Convenio Internacional para Prevenir la Contaminación por los Buques

ATE - Estimación de la toxicidad aguda

COV (compuesto orgánico volátil)

Consejo de formación

Formación de concienciación sobre peligros químicos, cubriendo etiquetado, fichas de datos de seguridad, equipos de protección personal e higiene.

Uso de equipos de protección personal, cubriendo su correcta selección, compatibilidad, umbrales de penetración, cuidados, mantenimiento, ajuste y estándares EN.

Primeros auxilios pertinentes a la exposición a productos químicos, incluido el uso de estaciones de lavado de ojos y duchas de seguridad.

Prevención y lucha contra incendios, identificando peligros y riesgos, electricidad estática y atmósferas explosivas que presentan los vapores y polvos.

Formación en respuesta a incidentes químicos.

Fecha de preparación 11-jun-2009

Fecha de revisión 24-dic-2020

Resumen de la revisión Actualización del CLP formato.

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

Tetrahydrofuran

Fecha de revisión 24-dic-2020

**La hoja técnica de seguridad cumple con los requisitos del Reglamento (CE) No. 1907/2006
REGLAMENTO (UE) 2020/878 DE LA COMISIÓN por el que se modifica el anexo II del
Reglamento (CE) n.o 1907/2006**

Descargo de responsabilidad

La información facilitada en esta Ficha de Datos de Seguridad es correcta, a nuestro leal saber y entender, en la fecha de su publicación. Dicha información está concebida únicamente como guía para la seguridad en la manipulación, el uso, el procesamiento, el almacenamiento, el transporte, la eliminación y la liberación, no debiendo tomarse como garantía o especificación de calidades. La información se refiere únicamente al material específico mencionado y puede no ser válida para tal material usado en combinación con cualesquiera otros materiales o en cualquier proceso salvo que se especifique expresamente en el texto

Fin de la ficha de datos de seguridad

SECCIÓN 1: IDENTIFICACIÓN DE LA SUSTANCIA O LA MEZCLA Y DE LA SOCIEDAD O LA EMPRESA

1.1 Identificador del producto

Nombre del producto	Metanol
Cat No. :	M/4062/15, M/4062/17, M/4062/21RSS, M/4062/24RSS, M/4062/25RSS, M/4062/34RSS, M/4062/27RSS
Sinónimos	Methyl alcohol
Nº. CAS	67-56-1
Nº. CE.	200-659-6
Fórmula molecular	C H4 O
Número de registro REACH	01-2119433307-44

1.2. Usos pertinentes identificados de la sustancia o de la mezcla y usos desaconsejados

Uso recomendado	Productos químicos de laboratorio.
Sector de uso	SU3 - Usos industriales: Usos de sustancias como tales o en preparados en emplazamientos industriales
Categoría del producto	PC21 - Productos químicos de laboratorio
Categorías de procesos	Consulte la SECCIÓN 16 para obtener una lista completa de los usos para los que se proporciona un escenario de exposición como anexo.
Categoría de emisión al medio ambiente	ERC1: Fabricación de sustancias ERC2: Formulación de preparados (mezclas) ERC4: Uso industrial de aditivos en procesos y productos, que no forman parte de artículos ERC8a: Amplio uso dispersivo interior de aditivos del procesado en sistemas abiertos
Usos desaconsejados	SU21 - Usos por los consumidores: Domicilios particulares (= público general = consumidores); PC13 - Combustibles. Restricción del Anexo XVII de REACH: consulte la SECCIÓN 15

1.3. Datos del proveedor de la ficha de datos de seguridad

Empresa	Entidad de la UE / nombre de la empresa Acros Organics BVBA Janssen Pharmaceuticalaan 3a 2440 Geel, Belgium
	Nombre de la entidad / negocio del Reino Unido Fisher Scientific UK Bishop Meadow Road, Loughborough, Leicestershire LE11 5RG, United Kingdom
Dirección de correo electrónico	begel.sdsdesk@thermofisher.com

1.4. Teléfono de emergencia

Tel: +44 (0)1509 231166
Chemtrec US: (800) 424-9300
Chemtrec EU: 001 (202) 483-7616

SECCIÓN 2: IDENTIFICACIÓN DE LOS PELIGROS

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

Metanol

Fecha de revisión 01-ene-2021

2.1. Clasificación de la sustancia o de la mezcla

CLP clasificación - Reglamento (CE) n ° 1272/2008

Peligros físicos

Líquidos inflamables

Categoría 2 (H225)

Peligros para la salud

Toxicidad aguda oral

Categoría 3 (H301)

Toxicidad aguda cutánea

Categoría 3 (H311)

Toxicidad aguda por inhalación - Vapores

Categoría 3 (H331)

Toxicidad específica del órgano blanco - (única exposición)

Categoría 1 (H370)

Peligros para el medio ambiente

A la vista de los datos disponibles, no se cumplen los criterios de clasificación

Texto completo de las Indicaciones de peligro: ver la sección 16

2.2. Elementos de la etiqueta



Palabras de advertencia

Peligro

Indicaciones de peligro

H225 - Líquido y vapores muy inflamables

H301 + H311 + H331 - Tóxico en caso de ingestión, contacto con la piel o inhalación

H370 - Provoca daños en los órganos: el nervio óptico, Sistema nervioso central (SNC)

Consejos de prudencia

P280 - Llevar guantes/prendas/gafas/máscara de protección

P301 + P310 - EN CASO DE INGESTIÓN: Llamar inmediatamente a un CENTRO DE TOXICOLOGÍA o a un médico

P302 + P350 - EN CASO DE CONTACTO CON LA PIEL: Lavar suavemente con agua y jabón abundantes

P304 + P340 - EN CASO DE INHALACIÓN: Transportar a la víctima al exterior y mantenerla en reposo en una posición confortable para respirar

P240 - Toma de tierra y enlace equipotencial del recipiente y del equipo receptor

P210 - Mantener alejado del calor, superficies calientes, chispas llamas al descubierto y otras fuentes de ignición. No fumar

2.3. Otros peligros

Sustancia no considerada ser persistente, bioacumulable ni tóxica (PBT). Sustancia no considerada ser muy persistente ni bioacumulable (vPvB).

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

Metanol

Fecha de revisión 01-ene-2021

Tóxico para los vertebrados terrestres

SECCIÓN 3: COMPOSICIÓN/INFORMACIÓN SOBRE LOS COMPONENTES

3.1. Sustancias

Componente	Nº. CAS	Nº. CE.	Porcentaje en peso	CLP clasificación - Reglamento (CE) n° 1272/2008
Alcohol metílico	67-56-1	200-659-6	>95	Flam. Liq. 2 (H225) Acute Tox. 3 (H301) Acute Tox. 3 (H311) Acute Tox. 3 (H331) STOT SE 1 (H370)

Componente	Specific concentration limits (SCL's)	Factor-M	Component notes
Alcohol metílico	STOT SE 1 :: C>=10% STOT SE 2 :: 3%<=C<10%	-	-

Número de registro REACH	01-2119433307-44
---------------------------------	------------------

Texto completo de las Indicaciones de peligro: ver la sección 16

SECCIÓN 4: PRIMEROS AUXILIOS

4.1. Descripción de los primeros auxilios

Consejo general	Se necesita atención médica inmediata. Mostrar esta ficha de datos de seguridad al médico de servicio.
Contacto con los ojos	Enjuagar inmediatamente con abundante agua, también bajo los párpados, durante al menos 15 minutos. Se necesita atención médica inmediata.
Contacto con la piel	Lavar inmediatamente con abundante agua durante al menos 15 minutos. Se necesita atención médica inmediata.
Ingestión	NO provocar el vómito. Llamar inmediatamente a un médico o a un centro de información toxicológica.
Inhalación	Transportar a la víctima al exterior. Si la respiración es difícil, proporcionar oxígeno. No utilizar el método boca a boca si la víctima ha ingerido o inhalado la sustancia; administrar la respiración artificial con ayuda de una mascarilla de bolsillo dotada de una válvula unidireccional u otro dispositivo médico para reanimación respiratoria apropiado. Se necesita atención médica inmediata.
Equipo de protección para el personal de primeros auxilios	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. Utilizar el equipo de protección individual obligatorio. Evitar el contacto con la piel, los ojos o la ropa. Retirar todas las fuentes de ignición. No practicar respiración artificial boca a boca o boca a nariz. Usar instrumentos/aparatos adecuados. Evítese el contacto con la piel.

4.2. Principales síntomas y efectos, agudos y retardados

Dificultades respiratorias. Puede provocar ceguera: La inhalación de grandes concentraciones de vapor puede provocar síntomas como cefalea, mareos, cansancio, náuseas y vómitos

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

Metanol

Fecha de revisión 01-ene-2021

4.3. Indicación de toda atención médica y de los tratamientos especiales que deban dispensarse inmediatamente

Notas para el médico Tratar los síntomas. Los síntomas pueden ser retardados.

SECCIÓN 5: MEDIDAS DE LUCHA CONTRA INCENDIOS

5.1. Medios de extinción

Medios de extinción apropiados

Agua pulverizada, dióxido de carbono (CO₂), productos químicos secos, espuma resistente al alcohol. Puede utilizarse niebla de agua para enfriar los contenedores cerrados.

Medios de extinción que no deben utilizarse por razones de seguridad

No utilizar una corriente sólida de agua, ya que puede esparcir y extender el fuego.

5.2. Peligros específicos derivados de la sustancia o de la mezcla

Inflamable. Riesgo de ignición. Los vapores pueden formar mezclas explosivas con el aire. Los vapores se pueden desplazar hasta una fuente de ignición y producir el retroceso de la llama. Los contenedores pueden explotar si se calientan. Los vapores pueden formar mezclas explosivas con el aire.

Productos de combustión peligrosos

Monóxido de carbono (CO), Formaldehído.

5.3. Recomendaciones 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. Su descomposición térmica puede dar lugar a la liberación de vapores y gases irritantes.

SECCIÓN 6: MEDIDAS EN CASO DE VERTIDO ACCIDENTAL

6.1. Precauciones personales, equipo de protección y procedimientos de emergencia

Evacuar al personal a zonas seguras. Mantener alejadas a las personas y en dirección contraria al viento en una fuga o vertido. Utilizar el equipo de protección individual obligatorio. Asegurar una ventilación adecuada. Retirar todas las fuentes de ignición. Evítese la acumulación de cargas electroestáticas.

6.2. Precauciones relativas al medio ambiente

No debe liberarse en el medio ambiente. Para obtener más información ecológica, ver el apartado 12.

6.3. Métodos y material de contención y de limpieza

Absorber con material absorbente inerte. Mantener en contenedores cerrados aptos para su eliminación. Retirar todas las fuentes de ignición. Utilizar herramientas que no hagan chispas y un equipamiento a prueba de explosiones.

6.4. Referencia a otras secciones

Consultar las medidas de protección en las listas de las secciones 8 y 13.

SECCIÓN 7: MANIPULACIÓN Y ALMACENAMIENTO

7.1. Precauciones para una manipulación segura

Llevar equipo de protección individual/máscara de protección. No respirar la niebla/los vapores/el aerosol. Evitar el contacto con los ojos, la piel o la ropa. Usar sólo bajo un protector contra humos químicos. No ingerir. En caso de ingestión, buscar

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

Metanol

Fecha de revisión 01-ene-2021

inmediatamente asistencia médica. Mantener alejado de llamas desnudas, superficies calientes y fuentes de ignición. Utilizar únicamente herramientas que no produzcan chispas. Deben conectarse a tierra, todas las partes metálicas de las instalaciones que se usen para evitar la inflamación de vapores por la descarga de la electricidad estática. Evítese la acumulación de cargas electroestáticas.

Medidas higiénicas

No comer, ni beber, ni fumar durante su utilización. Limpieza regular del equipo, del área de trabajo y de la indumentaria.

7.2. Condiciones de almacenamiento seguro, incluidas posibles incompatibilidades

Mantener el contenedor perfectamente cerrado y en un lugar seco y bien ventilado. Mantener alejado de llamas desnudas, superficies calientes y fuentes de ignición. Área de productos inflamables.

7.3. Usos específicos finales

Uso en laboratorios

SECCIÓN 8: CONTROLES DE EXPOSICIÓN/PROTECCIÓN INDIVIDUAL

8.1 Parámetros de control

Límites de exposición

Lista fuente (s) **EU** - Directiva (UE) 2019/1831 de la Comisión de 24 de octubre de 2019 por la que se establece una quinta lista de valores límite de exposición profesional indicativos de conformidad con la Directiva 98/24/CE del Consejo y por la que se modifica la Directiva 2000/39/CE de la Comisión **ES** Ministerio de Trabajo y Asuntos Sociales de España. INSTITUTO NACIONAL DE SEGURIDAD E HIGIENE EN EL TRABAJO (INSST). Límites de Exposición Profesional Para Agentes Químicos en España. Publicado inicialmente en 1999. Modificado anualmente. Última edición febrero 2019.

Componente	Unión Europea	Reino Unido	Francia	Bélgica	España
Alcohol metílico	TWA: 200 ppm 8 hr TWA: 260 mg/m ³ 8 hr Skin	WEL - TWA: 200 ppm TWA; 266 mg/m ³ TWA WEL - STEL: 250 ppm STEL; 333 mg/m ³ STEL	TWA / VME: 200 ppm (8 heures). restrictive limit TWA / VME: 260 mg/m ³ (8 heures). restrictive limit STEL / VLCT: 1000 ppm. STEL / VLCT: 1300 mg/m ³ . Peau	TWA: 200 ppm 8 uren TWA: 266 mg/m ³ 8 uren STEL: 250 ppm 15 minuten STEL: 333 mg/m ³ 15 minuten Huid	TWA / VLA-ED: 200 ppm (8 horas) TWA / VLA-ED: 266 mg/m ³ (8 horas) Piel

Componente	Italia	Alemania	Portugal	Países Bajos	Finlandia
Alcohol metílico	TWA: 200 ppm 8 ore. Media Ponderata nel Tempo TWA: 260 mg/m ³ 8 ore. Media Ponderata nel Tempo Pelle	100 ppm TWA MAK; 130 mg/m ³ TWA MAKSkin absorber	STEL: 250 ppm 15 minutos TWA: 200 ppm 8 horas TWA: 260 mg/m ³ 8 horas Pele	huid TWA: 133 mg/m ³ 8 uren	TWA: 200 ppm 8 tunteina TWA: 270 mg/m ³ 8 tunteina STEL: 250 ppm 15 minuutteina STEL: 330 mg/m ³ 15 minuutteina Iho

Componente	Austria	Dinamarca	Suiza	Polonia	Noruega
Alcohol metílico	Haut MAK-KZW: 800 ppm 15 Minuten MAK-KZW: 1040 mg/m ³ 15 Minuten MAK-TMW: 200 ppm 8 Stunden MAK-TMW: 260 mg/m ³ 8 Stunden	TWA: 200 ppm 8 timer TWA: 260 mg/m ³ 8 timer Hud	Haut/Peau STEL: 800 ppm 15 Minuten STEL: 1040 mg/m ³ 15 Minuten TWA: 200 ppm 8 Stunden TWA: 260 mg/m ³ 8 Stunden	STEL: 300 mg/m ³ 15 minutach TWA: 100 mg/m ³ 8 godzinach	TWA: 100 ppm 8 timer TWA: 130 mg/m ³ 8 timer STEL: 125 ppm 15 minutter. value calculated STEL: 162.5 mg/m ³ 15 minutter. value calculated Hud

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

Metanol

Fecha de revisión 01-ene-2021

Componente	Bulgaria	Croacia	Irlanda	Chipre	República Checa
Alcohol metílico	TWA: 200 ppm TWA: 260.0 mg/m ³ Skin notation	kože TWA-GVI: 200 ppm 8 satima. TWA-GVI: 260 mg/m ³ 8 satima.	TWA: 200 ppm 8 hr. TWA: 260 mg/m ³ 8 hr. STEL: 600 ppm 15 min STEL: 780 mg/m ³ 15 min Skin	Skin-potential for cutaneous absorption TWA: 200 ppm TWA: 260 mg/m ³	TWA: 250 mg/m ³ 8 hodinách. Potential for cutaneous absorption Ceiling: 1000 mg/m ³

Componente	Estonia	Gibraltar	Grecia	Hungría	Islandia
Alcohol metílico	Nahk TWA: 200 ppm 8 tundides. TWA: 250 mg/m ³ 8 tundides. STEL: 250 ppm 15 minutites. STEL: 350 mg/m ³ 15 minutites.	Skin notation TWA: 200 ppm 8 hr TWA: 260 mg/m ³ 8 hr	skin - potential for cutaneous absorption STEL: 250 ppm STEL: 325 mg/m ³ TWA: 200 ppm TWA: 260 mg/m ³	TWA: 260 mg/m ³ 8 órában. AK lehetséges borön keresztüli felszívódás	TWA: 200 ppm 8 klukkustundum. TWA: 260 mg/m ³ 8 klukkustundum. Skin notation Ceiling: 400 ppm Ceiling: 520 mg/m ³

Componente	Letonia	Lituania	Luxemburgo	Malta	Rumanía
Alcohol metílico	skin - potential for cutaneous exposure TWA: 200 ppm TWA: 260 mg/m ³	TWA: 200 ppm IPRD TWA: 260 mg/m ³ IPRD Oda	Possibility of significant uptake through the skin TWA: 200 ppm 8 Stunden TWA: 260 mg/m ³ 8 Stunden	possibility of significant uptake through the skin TWA: 200 ppm TWA: 260 mg/m ³	Skin notation TWA: 200 ppm 8 ore TWA: 260 mg/m ³ 8 ore

Componente	Rusia	República Eslovaca	Eslovenia	Suecia	Turquía
Alcohol metílico	TWA: 5 mg/m ³ 1269 Skin notation STEL: 15 mg/m ³ 1269	Potential for cutaneous absorption TWA: 200 ppm TWA: 260 mg/m ³	TWA: 200 ppm 8 urah TWA: 260 mg/m ³ 8 urah Koža STEL: 800 ppm 15 minutah STEL: 1040 mg/m ³ 15 minutah	Indicative STEL: 250 ppm 15 minuter Indicative STEL: 350 mg/m ³ 15 minuter TLV: 200 ppm 8 timmar. NGV TLV: 250 mg/m ³ 8 timmar. NGV Hud	Deri TWA: 200 ppm 8 saat TWA: 260 mg/m ³ 8 saat

Valores límite biológicos

Lista fuente (s) **ES** Ministerio de Trabajo y Asuntos Sociales de España

INSTITUTO NACIONAL DE SEGURIDAD E HIGIENE EN EL TRABAJO

Límites de Exposición Profesional Para Agentes Químicos en España

Establecidos bajo Ley 31/1995, Prevención de Riesgos Laborales y Real Decreto 39/1997, Reglamento de los Servicios de Prevención. La Implementación de esta legislación en el Instituto Nacional de Seguridad e Higiene en el Trabajo (INSHT) es bajo Real Decreto 374/2001 de Mayo 1, 2001. Publicado inicialmente en 1995. actualizada en 2011

Componente	Unión Europea	Reino Unido	Francia	España	Alemania
Alcohol metílico			Methanol: 15 mg/L urine end of shift	Methanol: 15 mg/L urine end of shift	Methanol: 15 mg/L urine (end of shift) Methanol: 15 mg/L urine (for long-term exposures: at the end of the shift after several shifts)

Componente	Italia	Finlandia	Dinamarca	Bulgaria	Rumanía
Alcohol metílico					Methanol: 6 mg/L urine end of shift

Componente	Gibraltar	Letonia	República Eslovaca	Luxemburgo	Turquía
Alcohol metílico			Methanol: 30 mg/L urine end of exposure or work shift Methanol: 30 mg/L urine after all work shifts for long-term exposure		

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

Metanol

Fecha de revisión 01-ene-2021

Métodos de seguimiento

EN 14042:2003 Título de identificación: Atmósferas en los lugares de trabajo. Directrices para la aplicación y uso de procedimientos para evaluar la exposición a agentes químicos y biológicos.

Nivel sin efecto derivado (DNEL) Ver la tabla de valores

<u>Ruta de exposición</u>	Efecto agudo (local)	Efecto agudo (sistémica)	Los efectos crónicos (local)	Los efectos crónicos (sistémica)
Oral				
Cutánea		20 mg/kg bw/day		20 mg/kg bw/day
Inhalación	130 mg/m ³	130 mg/m ³	130 mg/m ³	130 mg/m ³

Concentración prevista sin efecto (PNEC) Ver valores por debajo de.

Agua dulce	154 mg/l
Sedimentos de agua dulce	570.4 mg/kg
Agua marina	15.4 mg/l
Microorganismos de tratamiento de aguas residuales	100 mg/l
Del suelo (agricultura)	23.5 mg.kg

8.2 Controles de la exposición

Medidas técnicas

Usar sólo bajo un protector contra humos químicos. Utilizar un material eléctrico/de ventilación/iluminación/ antideflagrante. Asegurarse de que haya estaciones de lavado de ojos y duchas de seguridad cerca de la ubicación de la estación de trabajo. Siempre que sea posible, deberán adoptarse medidas técnicas de control tales como el aislamiento o confinamiento del proceso, la introducción de cambios en el proceso o los equipos para reducir al mínimo la liberación o el contacto, y el uso de sistemas de ventilación adecuadamente diseñados, dirigidas a controlar los materiales peligrosos en su fuente

Equipos de protección personal

Protección de los ojos Gafas de seguridad bien ajustadas (Norma de la UE - EN 166)

Protección de las manos Guantes protectores

Material de los guantes	Tiempo de penetración	Espesor de los guantes	Norma de la UE	Guante de los comentarios
Goma de butilo	> 480 minutos	0.35 mm	Nivel 6	Según las pruebas realizadas de acuerdo con EN374-3 Determinación de la resistencia a la permeación por productos químicos
Vitón (R)	> 480 minutos	0.70 mm	EN 374	
Guantes de neopreno	< 60 minutos	0.45 mm		
Goma de nitrilo	< 30 minutos	0.38 mm		

Protección de la piel y el cuerpo Ropa de manga larga

Inspeccione los guantes antes de su uso

Por favor, observe las instrucciones en cuanto a la permeabilidad y el tiempo de adelanto que son provistos por el proveedor de los guantes. (Consulte al fabricante / proveedor para obtener información).

Asegurarse de que los guantes son adecuados para la tarea química compatibilidad, destreza, condiciones de funcionamiento

También tener en cuenta las condiciones locales específicas bajo las cuales el producto es utilizado, tal como el

Quítese los guantes con cuidado para evitar contaminación de la piel.

Protección respiratoria

Cuando los trabajadores se enfrentan a concentraciones superiores al límite de exposición, deben utilizar respiradores certificados apropiados.

Para proteger a quien lo lleva, el equipo de protección respiratoria debe ajustarse correctamente y estar sometido a un uso y un mantenimiento adecuados

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

Metanol

Fecha de revisión 01-ene-2021

A gran escala / uso de emergencia Utilice un NIOSH / MSHA o la norma europea EN 136 respirador aprobado si los límites de exposición son excedidos o irritación u otros síntomas son experimentados
Tipo de filtro recomendado: bajo punto de ebullición disolvente orgánico Tipo AX Marrón conforme a EN371

Pequeña escala / uso en laboratorio Utilice un NIOSH / MSHA o la norma europea EN 149:2001 respirador aprobado si los límites de exposición son excedidos o irritación u otros síntomas son experimentados
Recomendado media máscara: - Válvula de filtrado: EN405; o; Media máscara: EN140; con filtro, ES141
Al EPR se utiliza una prueba de ajuste de la máscara debe llevarse a cabo

Controles de exposición medioambiental No hay información disponible.

SECCIÓN 9: PROPIEDADES FÍSICAS Y QUÍMICAS

9.1. Información sobre propiedades físicas y químicas básicas

Estado físico	Líquido	
Aspecto	Incoloro	
Olor	parecido al alcohol	
Umbral olfativo	No hay datos disponibles	
Punto/intervalo de fusión	-98 °C / -144.4 °F	
Punto de reblandecimiento	No hay datos disponibles	
Punto /intervalo de ebullición	64.7 °C / 148.5 °F	@ 760 mmHg
Inflamabilidad (líquido)	Fácilmente inflamable	En base a datos de ensayos
Inflamabilidad (sólido, gas)	No es aplicable	Líquido
Límites de explosión	Inferior 6 vol% Superior 31 vol%	
Punto de Inflamación	9.7 °C / 49.5 °F	Método - No hay información disponible
Temperatura de autoignición	455 °C / 851 °F	
Temperatura de descomposición	No hay datos disponibles	
pH	No es aplicable	
Viscosidad	0.55 cP at 20 °C	
Solubilidad en el agua	Miscible	
Solubilidad en otros disolventes	No hay información disponible	
Coefficiente de reparto (n-octanol/agua)		
Componente	log Pow	
Alcohol metílico	-0.74	
Presión de vapor	128 hPa @ 20 °C	
Densidad / Densidad relativa	0.791	
Densidad aparente	No es aplicable	Líquido
Densidad de vapor	1.11	(Aire = 1.0)
Características de las partículas	No es aplicable (Líquido)	

9.2. Otros datos

Fórmula molecular	C H4 O
Peso molecular	32.04
Contenido (%) COV (compuestos orgánicos volátiles)	100
Propiedades explosivas	.?1 ETANOL.?2 Los vapores pueden formar mezclas explosivas con el aire
Índice de Evaporación	5.2 (éter = 1)
Tensión superficial	0.02255 N/m @ 20°C

SECCIÓN 10: ESTABILIDAD Y REACTIVIDAD

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

Metanol

Fecha de revisión 01-ene-2021

10.1. Reactividad

Ninguno conocido, en base a la información facilitada

10.2. Estabilidad química

Estable en condiciones normales.

10.3. Posibilidad de reacciones peligrosas

Polimerización peligrosa Reacciones peligrosas

No se produce ninguna polimerización peligrosa.
Ninguno durante un proceso normal.

10.4. Condiciones que deben evitarse

Productos incompatibles. Calor, llamas y chispas. Mantener alejado de llamas desnudas, superficies calientes y fuentes de ignición.

10.5. Materiales incompatibles

Agentes oxidantes fuertes. Ácidos fuertes. Anhídridos de ácidos. Cloruros de ácidos. Bases fuertes. Metales. Peróxidos.

10.6. Productos de descomposición peligrosos

Monóxido de carbono (CO). Formaldehído.

SECCIÓN 11: INFORMACIÓN TOXICOLÓGICA

11.1. Información sobre las clases de peligro definidas en el Reglamento (CE) n.o 1272/2008

Información del producto

(a) toxicidad aguda;

Oral	Categoría 3
Cutánea	Categoría 3
Inhalación	Categoría 3

Componente	DL50 Oral	DL50 cutánea	LC50 Inhalación
Alcohol metílico	LD50 > 1187 – 2769 mg/kg (Rat)	LD50 = 17100 mg/kg (Rabbit)	LC50 = 128.2 mg/L (Rat) 4 h

(b) corrosión o irritación cutáneas; A la vista de los datos disponibles, no se cumplen los criterios de clasificación

(c) lesiones o irritación ocular graves; A la vista de los datos disponibles, no se cumplen los criterios de clasificación

(d) sensibilización respiratoria o cutánea;

Respiratorio	A la vista de los datos disponibles, no se cumplen los criterios de clasificación
Piel	A la vista de los datos disponibles, no se cumplen los criterios de clasificación

Component	Métodos de seguimiento	Especies de prueba	Estudiar resultado
Alcohol metílico 67-56-1 (>95)	OECD TG 406 Guinea Pig Maximisation Test (GPMT)	conejiillo de Indias	no sensibilizante

(e) mutagenicidad en células germinales; A la vista de los datos disponibles, no se cumplen los criterios de clasificación

(f) carcinogenicidad; A la vista de los datos disponibles, no se cumplen los criterios de clasificación

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

Metanol

Fecha de revisión 01-ene-2021

Este producto no contiene componentes químicos reconocidos como carcinógenos

(g) toxicidad para la reproducción; A la vista de los datos disponibles, no se cumplen los criterios de clasificación

Component	Métodos de seguimiento	Especies de prueba / duración	Estudiar resultado
Alcohol metílico 67-56-1 (>95)	OECD TG 416	Rata / Inhalación 2 Generación	NOAEC = 1.3 mg/l (air)

Efectos sobre el desarrollo Component substance is listed on California Proposition 65 as a developmental hazard.

(h) toxicidad específica en determinados órganos (STOT) – exposición única;

Categoría 1

Resultados / Órganos diana

el nervio óptico, Sistema nervioso central (SNC).

(i) toxicidad específica en determinados órganos (STOT) – exposición repetida;

A la vista de los datos disponibles, no se cumplen los criterios de clasificación

Órganos diana

Ninguno conocido.

(j) peligro de aspiración;

A la vista de los datos disponibles, no se cumplen los criterios de clasificación

Síntomas / efectos, agudos y retardados

Puede provocar ceguera. La inhalación de grandes concentraciones de vapor puede provocar síntomas como cefalea, mareos, cansancio, náuseas y vómitos.

11.2. Información sobre otros peligros

Propiedades de alteración endocrina

Evaluar las propiedades de alteración endocrina en la salud humana. Este producto no contiene ningún alterador del sistema endocrino conocido o sospechoso de serlo.

SECCIÓN 12: INFORMACIÓN ECOLÓGICA

12.1. Toxicidad

Efectos de ecotoxicidad

Componente	Peces de agua dulce	pulga de agua	Algas de agua dulce
Alcohol metílico	Pimephales promelas: LC50 > 10000 mg/L 96h	EC50 > 10000 mg/L 24h	

Componente	Microtox	Factor-M
Alcohol metílico	EC50 = 39000 mg/L 25 min EC50 = 40000 mg/L 15 min EC50 = 43000 mg/L 5 min	

12.2. Persistencia y degradabilidad Fácilmente biodegradable

Persistencia La persistencia es improbable, en base a la información facilitada.

Component	Degradabilidad
Alcohol metílico 67-56-1 (>95)	DT50 ~ 17.2d >94% after 20d

12.3. Potencial de bioacumulación La bioacumulación es improbable

Componente	log Pow	Factor de bioconcentración (FBC)
Alcohol metílico	-0.74	<10

FSUM4062

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

Metanol

Fecha de revisión 01-ene-2021

12.4. Movilidad en el suelo

Tensión superficial

El producto contiene compuestos orgánicos volátiles (COV) que se evaporan fácilmente a partir de todas las superficies. Probablemente será móvil en el medio ambiente debido a su volatilidad. Se disipa rápidamente en el aire.
0.02255 N/m @ 20°C

12.5. Resultados de la valoración PBT y mPmB

Sustancia no considerada ser persistente, bioacumulable ni tóxica (PBT). Sustancia no considerada ser muy persistente ni bioacumulable (vPvB).

12.6. Propiedades de alteración endocrina

Información del alterador del sistema endocrino

Este producto no contiene ningún alterador del sistema endocrino conocido o sospechoso de serlo.

12.7. Otros efectos adversos

Contaminantes Orgánicos Persistentes

Este producto no contiene ningún conocido o sospechado sustancia

Potencial de reducción de ozono

Este producto no contiene ningún conocido o sospechado sustancia

SECCIÓN 13: CONSIDERACIONES RELATIVAS A LA ELIMINACIÓN

13.1. Métodos para el tratamiento de residuos

Restos de residuos/productos sin usar

Los desechos están clasificados como peligrosos. Dispóngase de acuerdo a las Directivas Europeas sobre desechos y desechos peligrosos. Eliminar de conformidad con las normativas locales.

Embalaje contaminado

Deshágase de este recipiente en un punto de recogida de residuos especiales o peligrosos. Los recipientes vacíos siguen conteniendo residuos del producto (líquido y/o vapor), y pueden ser peligrosos. Mantener el producto y el recipiente vacío alejado de fuentes de calor e ignición.

Catálogo de Desechos Europeos

Según el Catálogo Europeo de Residuos, los códigos de residuos no son específicos del producto sino específicos de la aplicación.

Otra información

El usuario debe asignar códigos de residuos basándose en la aplicación para la que se utilizó el producto. No verter en la red de alcantarillado. Puede desecharse en vertederos o incinerarse, cuando eso sea conforme con las normativas locales.

SECCIÓN 14: INFORMACIÓN RELATIVA AL TRANSPORTE

IMDG/IMO

14.1. Número ONU

UN1230

14.2. Designación oficial de transporte de las Naciones Unidas

Metanol

14.3. Clase(s) de peligro para el transporte

3

Clase de peligro subsidiario

6.1

14.4. Grupo de embalaje

II

ADR

14.1. Número ONU

UN1230

14.2. Designación oficial de transporte de las Naciones Unidas

Metanol

14.3. Clase(s) de peligro para el transporte

3

FSUM4062

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

Metanol

Fecha de revisión 01-ene-2021

Clase de peligro subsidiario 6.1
14.4. Grupo de embalaje II

IATA

14.1. Número ONU UN1230

14.2. Designación oficial de Metanol

transporte de las Naciones Unidas

14.3. Clase(s) de peligro para el 3
transporte

Clase de peligro subsidiario 6.1

14.4. Grupo de embalaje II

14.5. Peligros para el medio No hay peligros identificados
ambiente

14.6. Precauciones particulares para No se requieren precauciones especiales
los usuarios

14.7. Transporte marítimo a granel No aplicable, productos envasados
con arreglo a los instrumentos de la
OMI

SECCIÓN 15: INFORMACIÓN REGLAMENTARIA

15.1. Reglamentación y legislación en materia de seguridad, salud y medio ambiente específicas para la sustancia o la mezcla

Inventarios internacionales

X = enumeran, Europa (EINECS/ELINCS/NLP), U.S.A. (TSCA), Canadá (DSL/NDSL), Filipinas (PICCS), China (IECSC), Japan (ENCS), Australia (AICS), Korea (ECL).

Componente	EINECS	ELINCS	NLP	TSCA	DSL	NDSL	PICCS	ENCS	IECSC	AICS	KECL
Alcohol metílico	200-659-6	-		X	X	-	X	X	X	X	KE-2319 3

Componente	REACH (1907/2006) - Anexo XIV - sustancias sujetas a autorización	REACH (1907/2006) - Anexo XVII - Restricciones a la utilización de determinadas sustancias peligrosas	REACH Regulation (EC 1907/2006) article 59 - Candidate List of Substances of Very High Concern (SVHC)
Alcohol metílico		Use restricted. See item 69. (see http://eur-lex.europa.eu/LexUriServ/LexUriServ.do?uri=CELEX:32006R1907:EN:NOT for restriction details)	

Componente	Directiva Seveso III (2012/18/EU) - cantidades umbral para la notificación de accidentes graves	Directiva Seveso III (2012/18/CE) - Cantidades que califican para los requisitos de informe de seguridad
Alcohol metílico	500 tonne	5000 tonne

Reglamento (CE) n.o 649/2012 del Parlamento Europeo y del Consejo, de 4 de julio de 2012, relativo a la exportación e importación de productos químicos peligrosos

No es aplicable

Reglamentos nacionales

Clasificación WGK Ver la tabla de valores

Componente	Alemania Clasificación de las Aguas (VwVwS)	Alemania - TA-Luft Class
Alcohol metílico	WGK 2	

FSUM4062

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

Metanol

Fecha de revisión 01-ene-2021

Componente	Francia - INRS (cuadros de enfermedades profesionales)
Alcohol metílico	Tableaux des maladies professionnelles (TMP) - RG 84

15.2. Evaluación de la seguridad química

Un informe sobre la seguridad química Evaluación / (CSA / CSR) ha sido llevado a cabo por el fabricante / importador

SECCIÓN 16: OTRA INFORMACIÓN

Texto completo de las indicaciones H mencionadas en las secciones 2 y 3

H225 - Líquido y vapores muy inflamables

H301 - Tóxico en caso de ingestión

H311 - Tóxico en contacto con la piel

H331 - Tóxico en caso de inhalación

H370 - Provoca daños en los órganos

Leyenda

CAS - Chemical Abstracts Service

EINECS/ELINCS : Inventario europeo de sustancias químicas comercializadas existentes/Lista europea de sustancias químicas notificadas

PICCS - Inventario de productos químicos y sustancias químicas de Filipinas

IECSC - Inventario chino de sustancias químicas existentes

KECL - Sustancias químicas existentes y evaluadas de Corea

WEL - Límites de exposición profesionales

ACGIH - American Conference of Governmental Industrial Hygienists (Conferencia Americana de Higienistas Industriales Gubernamentales)

DNEL - Nivel obtenido sin efecto

RPE - Equipos de protección respiratoria

LC50 - Concentración letal 50%

NOEC - Concentración sin efecto observado

PBT - Persistentes, bioacumulativas, tóxicas

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

ENCS - Inventario japonés de sustancias químicas existentes y nuevas

AICS - Inventario australiano de sustancias químicas (Australian Inventory of Chemical Substances)

NZIoC - Inventario de productos químicos de Nueva Zelanda

TWA - Tiempo Promedio Ponderado

IARC - Agencia Internacional para la Investigación del Cáncer

Concentración prevista sin efecto (PNEC)

LD50 - Dosis Letal 50%

EC50 - Concentración efectiva 50%

POW - Coeficiente de reparto octanol: agua

vPvB - Muy persistente y muy bioacumulable

ADR - Acuerdo europeo sobre el transporte internacional de mercancías peligrosas por carretera

IMO/IMDG - International Maritime Organization/International Maritime Dangerous Goods Code

OECD - Organización para la Cooperación y el Desarrollo

BCF - Factor de bioconcentración (FBC)

Bibliografía fundamental y fuentes de datos

<https://echa.europa.eu/information-on-chemicals>

Los proveedores de datos de seguridad, ChemADVISOR - LOLI, Merck Index, RTECS

ICAO/IATA - International Civil Aviation Organization/International Air Transport Association

MARPOL - Convenio Internacional para Prevenir la Contaminación por los Buques

ATE - Estimación de la toxicidad aguda

COV (compuesto orgánico volátil)

Consejo de formación

Formación de concienciación sobre peligros químicos, cubriendo etiquetado, fichas de datos de seguridad, equipos de protección personal e higiene.

Uso de equipos de protección personal, cubriendo su correcta selección, compatibilidad, umbrales de penetración, cuidados, mantenimiento, ajuste y estándares EN.

Primeros auxilios pertinentes a la exposición a productos químicos, incluido el uso de estaciones de lavado de ojos y duchas de seguridad.

Formación en respuesta a incidentes químicos.

Prevención y lucha contra incendios, identificando peligros y riesgos, electricidad estática y atmósferas explosivas que presentan los vapores y polvos.

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

Metanol

Fecha de revisión 01-ene-2021

Fecha de preparación 27-abr-2009
Fecha de revisión 01-ene-2021
Resumen de la revisión Actualización del CLP formato.

**La hoja técnica de seguridad cumple con los requisitos del Reglamento (CE) No. 1907/2006
REGLAMENTO (UE) 2020/878 DE LA COMISIÓN por el que se modifica el anexo II del
Reglamento (CE) n.o 1907/2006**

Descargo de responsabilidad

La información facilitada en esta Ficha de Datos de Seguridad es correcta, a nuestro leal saber y entender, en la fecha de su publicación. Dicha información está concebida únicamente como guía para la seguridad en la manipulación, el uso, el procesamiento, el almacenamiento, el transporte, la eliminación y la liberación, no debiendo tomarse como garantía o especificación de calidades. La información se refiere únicamente al material específico mencionado y puede no ser válida para tal material usado en combinación con cualesquiera otros materiales o en cualquier proceso salvo que se especifique expresamente en el texto

Fin de la ficha de datos de seguridad

Fecha de preparación 26-ago-2010

Fecha de revisión 18-dic-2020

Número de Revisión 7

SECCIÓN 1: IDENTIFICACIÓN DE LA SUSTANCIA O LA MEZCLA Y DE LA SOCIEDAD O LA EMPRESA**1.1 Identificador del producto**

Nombre del producto	1-Propanol
Cat No. :	232070000; 232070010; 232070025; 232070100
Sinónimos	Propyl alcohol
Nº. CAS	71-23-8
Nº. CE.	200-746-9
Fórmula molecular	C3 H8 O
Número de registro REACH	01-2119486761-29

1.2. Usos pertinentes identificados de la sustancia o de la mezcla y usos desaconsejados

Uso recomendado	Productos químicos de laboratorio.
Sector de uso	SU3 - Usos industriales: Usos de sustancias como tales o en preparados en emplazamientos industriales
Categoría del producto	PC21 - Productos químicos de laboratorio
Categorías de procesos	PROC15 - Uso como reactivo de laboratorio
Categoría de emisión al medio ambiente	ERC6a: Uso industrial que da lugar a la fabricación de otra sustancia (uso de sustancias intermedias)
Usos desaconsejados	No hay información disponible

1.3. Datos del proveedor de la ficha de datos de seguridad

Empresa	Entidad de la UE / nombre de la empresa Acros Organics BVBA Janssen Pharmaceuticalaan 3a 2440 Geel, Belgium
	Nombre de la entidad / negocio del Reino Unido Fisher Scientific UK Bishop Meadow Road, Loughborough, Leicestershire LE11 5RG, United Kingdom

Dirección de correo electrónico begel.sdsdesk@thermofisher.com

1.4. Teléfono de emergencia

Para obtener información en EE.UU., llame al: 800-ACROS-01
Para obtener información en Europa, llame al: +32 14 57 52 11

Número de emergencia, Europa: +32 14 57 52 99
Número de emergencia, EE.UU.: 201-796-7100

Número de teléfono de CHEMTREC, EE.UU.: 800-424-9300
Número de teléfono de CHEMTREC, Europa: 703-527-3887

SECCIÓN 2: IDENTIFICACIÓN DE LOS PELIGROS

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

1-Propanol

Fecha de revisión 18-dic-2020

2.1. Clasificación de la sustancia o de la mezcla

CLP clasificación - Reglamento (CE) n ° 1272/2008

Peligros físicos

Líquidos inflamables

Categoría 2 (H225)

Peligros para la salud

Lesiones o irritación ocular graves
Toxicidad específica del órgano blanco - (única exposición)

Categoría 1 (H318)
Categoría 3 (H336)

Peligros para el medio ambiente

A la vista de los datos disponibles, no se cumplen los criterios de clasificación

Texto completo de las Indicaciones de peligro: ver la sección 16

2.2. Elementos de la etiqueta



Palabras de advertencia

Peligro

Indicaciones de peligro

H225 - Líquido y vapores muy inflamables
H336 - Puede provocar somnolencia o vértigo
H318 - Provoca lesiones oculares graves

Consejos de prudencia

P280 - Llevar gafas/ máscara de protección
P305 + P351 + P338 - EN CASO DE CONTACTO CON LOS OJOS: Enjuagar con agua cuidadosamente durante varios minutos. Quitar las lentes de contacto cuando estén presentes y pueda hacerse con facilidad. Proseguir con el lavado
P310 - Llamar inmediatamente a un CENTRO DE INFORMACION TOXICOLOGICA o a un médico
P240 - Toma de tierra y enlace equipotencial del recipiente y del equipo receptor
P210 - Mantener alejado del calor, superficies calientes, chispas llamas al descubierto y otras fuentes de ignición. No fumar
P261 - Evitar respirar el polvo/ el humo/ el gas/ la niebla/ los vapores/ el aerosol
P301 + P312 - EN CASO DE INGESTIÓN: Llamar a un CENTRO DE INFORMACIÓN TOXICOLÓGICA o a un médico si se encuentra mal
P304 + P340 - EN CASO DE INHALACIÓN: Transportar a la víctima al exterior y mantenerla en reposo en una posición confortable para respirar

2.3. Otros peligros

Sustancia no considerada ser persistente, bioacumulable ni tóxica (PBT) / muy persistente ni bioacumulable (vPvB)

Tóxico para los vertebrados terrestres

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

1-Propanol

Fecha de revisión 18-dic-2020

SECCIÓN 3: COMPOSICIÓN/INFORMACIÓN SOBRE LOS COMPONENTES

3.1. Sustancias

Componente	Nº. CAS	Nº. CE.	Porcentaje en peso	CLP clasificación - Reglamento (CE) n° 1272/2008
Alcohol n-propílico	71-23-8	EEC No. 200-746-9	>95	Flam. Liq. 2 (H225) Eye Dam. 1 (H318) STOT SE 3 (H336)

Número de registro REACH	01-2119486761-29
--------------------------	------------------

Texto completo de las Indicaciones de peligro: ver la sección 16

SECCIÓN 4: PRIMEROS AUXILIOS

4.1. Descripción de los primeros auxilios

Contacto con los ojos	Enjuagar inmediatamente con abundante agua, también bajo los párpados, durante al menos 15 minutos. Se necesita atención médica inmediata.
Contacto con la piel	Lavar inmediatamente con abundante agua durante al menos 15 minutos. Consultar a un médico si se producen síntomas.
Ingestión	NO provocar el vómito. Consultar a un médico.
Inhalación	Transportar a la víctima al exterior. Consultar a un médico si se producen síntomas. Si no respira, realizar técnicas de respiración artificial.
Equipo de protección para el personal de primeros auxilios	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

Dificultades respiratorias. Provoca quemaduras en los ojos. Provoca lesiones oculares graves. La inhalación de grandes concentraciones de vapor puede provocar síntomas como cefalea, mareos, cansancio, náuseas y vómitos

4.3. Indicación de toda atención médica y de los tratamientos especiales que deban dispensarse inmediatamente

Notas para el médico Tratar los síntomas. Los síntomas pueden ser retardados.

SECCIÓN 5: MEDIDAS DE LUCHA CONTRA INCENDIOS

5.1. Medios de extinción

Medios de extinción apropiados

No usar un chorro compacto de agua ya que puede dispersar y extender el fuego. Puede utilizarse niebla de agua para enfriar los contenedores cerrados.

Medios de extinción que no deben utilizarse por razones de seguridad

No utilizar una corriente sólida de agua, ya que puede esparcir y extender el fuego.

5.2. Peligros específicos derivados de la sustancia o de la mezcla

ACR23207

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

1-Propanol

Fecha de revisión 18-dic-2020

Inflamable. Los vapores pueden formar mezclas explosivas con el aire. Los vapores se pueden desplazar hasta una fuente de ignición y producir el retroceso de la llama. Los contenedores pueden explotar si se calientan. Su descomposición térmica puede dar lugar a la liberación de vapores y gases irritantes. Mantener el producto y el recipiente vacío alejado de fuentes de calor e ignición.

Productos de combustión peligrosos

Monóxido de carbono (CO), Dióxido de carbono (CO₂).

5.3. Recomendaciones 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

Utilizar el equipo de protección individual obligatorio. Retirar todas las fuentes de ignición. Evítense la acumulación de cargas electroestáticas. Evitar el contacto con la piel, los ojos o la ropa.

6.2. Precauciones relativas al medio ambiente

Evitar su liberación al medio ambiente. Para obtener más información ecológica, ver el apartado 12.

6.3. Métodos y material de contención y de limpieza

Retirar todas las fuentes de ignición. Absorber con material absorbente inerte. Mantener en contenedores cerrados aptos para su eliminación. Evítense la acumulación de cargas electroestáticas. Utilizar herramientas que no hagan chispas y un equipamiento a prueba de explosiones.

6.4. Referencia a otras secciones

Consultar las medidas de protección en las listas de las secciones 8 y 13.

SECCIÓN 7: MANIPULACIÓN Y ALMACENAMIENTO

7.1. Precauciones para una manipulación segura

Llevar equipo de protección individual/máscara de protección. Evitar el contacto con los ojos, la piel o la ropa. Evitar la inhalación y la ingestión. Mantener alejado de llamas desnudas, superficies calientes y fuentes de ignición. Utilizar únicamente herramientas que no produzcan chispas. Utilizar herramientas que no hagan chispas y un equipamiento a prueba de explosiones. Evítense la acumulación de cargas electroestáticas. Deben conectarse a tierra, todas las partes metálicas de las instalaciones que se usen para evitar la inflamación de vapores por la descarga de la electricidad estática.

Medidas higiénicas

Manipular respetando las buenas prácticas de higiene industrial y seguridad. Manténgase lejos de alimentos, bebidas y piensos. No comer, beber ni fumar durante su utilización. Retirar y lavar la ropa y los guantes contaminados, por dentro y por fuera, antes de volver a usarlos. Lavar las manos antes de los descansos y después de la jornada de trabajo.

7.2. Condiciones de almacenamiento seguro, incluidas posibles incompatibilidades

Mantener los contenedores perfectamente cerrados en un lugar fresco, seco y bien ventilado. Mantener alejado del calor, chispas y llamas. Área de productos inflamables.

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

1-Propanol

Fecha de revisión 18-dic-2020

7.3. Usos específicos finales

Uso en laboratorios

SECCIÓN 8: CONTROLES DE EXPOSICIÓN/PROTECCIÓN INDIVIDUAL

8.1 Parámetros de control

Límites de exposición

Lista fuente (s) **ES** Ministerio de Trabajo y Asuntos Sociales de España. INSTITUTO NACIONAL DE SEGURIDAD E HIGIENE EN EL TRABAJO (INSST). Límites de Exposición Profesional Para Agentes Químicos en España. Publicado inicialmente en 1999. Modificado anualmente. Última edición febrero 2019.

Componente	Unión Europea	Reino Unido	Francia	Bélgica	España
Alcohol n-propílico		STEL: 250 ppm 15 min STEL: 625 mg/m ³ 15 min TWA: 200 ppm 8 hr TWA: 500 mg/m ³ 8 hr Skin	TWA / VME: 200 ppm (8 heures). TWA / VME: 500 mg/m ³ (8 heures).	TWA: 100 ppm 8 uren TWA: 250 mg/m ³ 8 uren	STEL / VLA-EC: 400 ppm (15 minutos). STEL / VLA-EC: 1000 mg/m ³ (15 minutos). TWA / VLA-ED: 200 ppm (8 horas) TWA / VLA-ED: 500 mg/m ³ (8 horas) Piel

Componente	Italia	Alemania	Portugal	Países Bajos	Finlandia
Alcohol n-propílico			STEL: 400 ppm 15 minutos TWA: 200 ppm 8 horas		TWA: 200 ppm 8 tunteina TWA: 500 mg/m ³ 8 tunteina STEL: 250 ppm 15 minuutteina STEL: 620 mg/m ³ 15 minuutteina

Componente	Austria	Dinamarca	Suiza	Polonia	Noruega
Alcohol n-propílico	MAK-TMW: 200 ppm 8 Stunden MAK-TMW: 500 mg/m ³ 8 Stunden	TWA: 200 ppm 8 timer TWA: 500 mg/m ³ 8 timer Hud	Haut/Peau TWA: 200 ppm 8 Stunden TWA: 500 mg/m ³ 8 Stunden	STEL: 600 mg/m ³ 15 minutach TWA: 200 mg/m ³ 8 godzinach	TWA: 100 ppm 8 timer TWA: 245 mg/m ³ 8 timer STEL: 125 ppm 15 minutter. value calculated STEL: 306.25 mg/m ³ 15 minutter. value calculated Hud

Componente	Bulgaria	Croacia	Irlanda	Chipre	República Checa
Alcohol n-propílico	TWA: 300.0 mg/m ³ STEL : 500.0 mg/m ³	TWA-GVI: 200 ppm 8 satima. TWA-GVI: 500 mg/m ³ 8 satima. STEL-KGVI: 250 ppm 15 minutama. STEL-KGVI: 625 mg/m ³ 15 minutama.	TWA: 100 ppm 8 hr. STEL: 300 ppm 15 min Skin		TWA: 500 mg/m ³ 8 hodinách. Potential for cutaneous absorption Ceiling: 1000 mg/m ³

Componente	Estonia	Gibraltar	Grecia	Hungría	Islandia
Alcohol n-propílico			STEL: 250 ppm STEL: 625 mg/m ³ TWA: 200 ppm TWA: 500 mg/m ³		TWA: 200 ppm 8 klukkustundum. TWA: 500 mg/m ³ 8 klukkustundum. Skin notation Ceiling: 400 ppm Ceiling: 1000 mg/m ³

Componente	Letonia	Lituania	Luxemburgo	Malta	Rumanía
Alcohol n-propílico	TWA: 10 mg/m ³				TWA: 81 ppm 8 ore

ACR23207

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

1-Propanol

Fecha de revisión 18-dic-2020

					TWA: 200 mg/m ³ 8 ore STEL: 203 ppm 15 minute STEL: 500 mg/m ³ 15 minute
--	--	--	--	--	--

Componente	Rusia	República Eslovaca	Eslovenia	Suecia	Turquía
Alcohol n-propílico	TWA: 10 mg/m ³ 1794 STEL: 30 mg/m ³ 1794			Indicative STEL: 250 ppm 15 minuter Indicative STEL: 600 mg/m ³ 15 minuter TLV: 150 ppm 8 timmar. NGV TLV: 350 mg/m ³ 8 timmar. NGV	

Valores límite biológicos

Este producto, tal como se suministra, no contiene ningún material peligroso con límites biológicos establecidos por los organismos reguladores regionales específicos

Métodos de seguimiento

EN 14042:2003 Título de identificación: Atmósferas en los lugares de trabajo. Directrices para la aplicación y uso de procedimientos para evaluar la exposición a agentes químicos y biológicos.

Nivel sin efecto derivado (DNEL) Ver la tabla de valores

Ruta de exposición	Efecto agudo (local)	Efecto agudo (sistémica)	Los efectos crónicos (local)	Los efectos crónicos (sistémica)
Oral				
Cutánea			136 mg/kg	
Inhalación	1723 mg/m ³		268 mg/m ³	

Concentración prevista sin efecto (PNEC) Ver valores por debajo de.

Agua dulce	10 mg/l
Sedimentos de agua dulce	22.8 mg/kg
Agua marina	1 mg/l
Sedimentos de agua marina	2.28 mg/kg
Del suelo (agricultura)	2.2 mg/kg

8.2 Controles de la exposición

Medidas técnicas

Asegurar una ventilación adecuada, especialmente en áreas confinadas. Utilizar un material eléctrico/de ventilación/iluminación/antideflagrante. Asegurarse de que haya estaciones de lavado de ojos y duchas de seguridad cerca de la ubicación de la estación de trabajo.

Siempre que sea posible, deberán adoptarse medidas técnicas de control tales como el aislamiento o confinamiento del proceso, la introducción de cambios en el proceso o los equipos para reducir al mínimo la liberación o el contacto, y el uso de sistemas de ventilación adecuadamente diseñados, dirigidas a controlar los materiales peligrosos en su fuente

Equipos de protección personal

Protección de los ojos	Antiparras (Norma de la UE - EN 166)
Protección de las manos	Guantes protectores

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

1-Propanol

Fecha de revisión 18-dic-2020

Material de los guantes	Tiempo de penetración	Espesor de los guantes	Norma de la UE	Guante de los comentarios
Goma de butilo	> 480 minutos	0.38 mm - 0.56 mm	Nivel 6	Según las pruebas realizadas de acuerdo con EN374-3 Determinación de la resistencia a la permeación por productos químicos
Guantes de neopreno	> 480 minutos	0.45mm	EN 374	
Goma de nitrilo				
Vitón (R)				
Vitón (R)	> 480 minutos	0.7 mm		

Protección de la piel y el cuerpo Utilizar guantes y ropas de protección adecuados para evitar la exposición de la piel

Inspeccione los guantes antes de su uso

Por favor, observe las instrucciones en cuanto a la permeabilidad y el tiempo de adelanto que son provistos por el proveedor de los guantes. (Consulte al fabricante / proveedor para obtener información).

Asegurarse de que los guantes son adecuados para la tarea química compatibilidad, destreza, condiciones de funcionamiento

También tener en cuenta las condiciones locales específicas bajo las cuales el producto es utilizado, tal como el

Quítese los guantes con cuidado para evitar contaminación de la piel.

Protección respiratoria

Cuando los trabajadores se enfrentan a concentraciones superiores al límite de exposición, deben utilizar respiradores certificados apropiados.

Para proteger a quien lo lleva, el equipo de protección respiratoria debe ajustarse correctamente y estar sometido a un uso y un mantenimiento adecuados

A gran escala / uso de emergencia

Utilice un NIOSH / MSHA o la norma europea EN 136 respirador aprobado si los límites de exposición son excedidos o irritación u otros síntomas son experimentados

Tipo de filtro recomendado: Gases y vapores orgánicos de filtro Tipo A Marrón conforme a la EN14387

Pequeña escala / uso en laboratorio

Utilice un NIOSH / MSHA o la norma europea EN 149:2001 respirador aprobado si los límites de exposición son excedidos o irritación u otros síntomas son experimentados

Recomendado media máscara: - Válvula de filtrado: EN405; o; Media máscara: EN140; con filtro, ES141

Al EPR se utiliza una prueba de ajuste de la máscara debe llevarse a cabo

Controles de exposición medioambiental

No hay información disponible.

SECCIÓN 9: PROPIEDADES FÍSICAS Y QUÍMICAS

9.1. Información sobre propiedades físicas y químicas básicas

Estado físico	Líquido	
Aspecto	Incoloro	
Olor	parecido al alcohol	
Umbral olfativo	No hay datos disponibles	
Punto/intervalo de fusión	-127 °C / -196.6 °F	1,013 hPa
Punto de reblandecimiento	No hay datos disponibles	
Punto /intervalo de ebullición	97 °C / 206.6 °F	@ 760 mmHg
Inflamabilidad (líquido)	Fácilmente inflamable	En base a datos de ensayos
Inflamabilidad (sólido, gas)	No es aplicable	Líquido
Limites de explosión	Inferior 2 vol%	
	Superior 12 vol%	
Punto de Inflamación	15 °C / 59 °F	Método - CC (copa cerrada)
Temperatura de autoignición	405 °C / 761 °F	
Temperatura de descomposición	No hay datos disponibles	
pH	7	20% aq. solution
Viscosidad	2.2 mPa.s at 20 °C	
Solubilidad en el agua	Soluble	
Solubilidad en otros disolventes	No hay información disponible	
Coefficiente de reparto (n-octanol/agua)		

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

1-Propanol

Fecha de revisión 18-dic-2020

Componente	log Pow	
Alcohol n-propílico	0.34	
Presión de vapor	25 mbar @ 20 °C	
Densidad / Densidad relativa	0.800	
Densidad aparente	No es aplicable	Líquido
Densidad de vapor	2.07	(Aire = 1.0)
Características de las partículas	No es aplicable (Líquido)	

9.2. Otros datos

Fórmula molecular	C3 H8 O
Peso molecular	60.1
Propiedades explosivas	No es explosivo .?1 ETANOL.?2 Los vapores pueden formar mezclas explosivas con el aire

SECCIÓN 10: ESTABILIDAD Y REACTIVIDAD

10.1. Reactividad

Ninguno conocido, en base a la información facilitada

10.2. Estabilidad química

Estable en condiciones normales.

10.3. Posibilidad de reacciones peligrosas

Polimerización peligrosa	No se produce ninguna polimerización peligrosa.
Reacciones peligrosas	Ninguno durante un proceso normal.

10.4. Condiciones que deben evitarse

Productos incompatibles. Exceso de calor. Mantener alejado de llamas desnudas, superficies calientes y fuentes de ignición.

10.5. Materiales incompatibles

Agentes oxidantes fuertes. Ácidos fuertes.

10.6. Productos de descomposición peligrosos

Monóxido de carbono (CO). Dióxido de carbono (CO2).

SECCIÓN 11: INFORMACIÓN TOXICOLÓGICA

11.1. Información sobre las clases de peligro definidas en el Reglamento (CE) n.o 1272/2008

Información del producto

(a) toxicidad aguda;

Oral

A la vista de los datos disponibles, no se cumplen los criterios de clasificación

Cutánea

A la vista de los datos disponibles, no se cumplen los criterios de clasificación

Inhalación

A la vista de los datos disponibles, no se cumplen los criterios de clasificación

Componente	DL50 Oral	DL50 cutánea	LC50 Inhalación
Alcohol n-propílico	LD50 = 1870 mg/kg (Rat)	LD50 = 4049 mg/kg (Rabbit)	LC50 > 13548 ppm (Rat) 4 h

(b) corrosión o irritación cutáneas; A la vista de los datos disponibles, no se cumplen los criterios de clasificación

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

1-Propanol

Fecha de revisión 18-dic-2020

- (c) lesiones o irritación ocular graves;** Categoría 1
- (d) sensibilización respiratoria o cutánea;**
Respiratorio A la vista de los datos disponibles, no se cumplen los criterios de clasificación
Piel A la vista de los datos disponibles, no se cumplen los criterios de clasificación
- (e) mutagenicidad en células germinales;** A la vista de los datos disponibles, no se cumplen los criterios de clasificación
- (f) carcinogenicidad;** A la vista de los datos disponibles, no se cumplen los criterios de clasificación
 Este producto no contiene componentes químicos reconocidos como carcinógenos
- (g) toxicidad para la reproducción;** A la vista de los datos disponibles, no se cumplen los criterios de clasificación
- (h) toxicidad específica en determinados órganos (STOT) – exposición única;** Categoría 3
Resultados / Órganos diana Sistema nervioso central (SNC).
- (i) toxicidad específica en determinados órganos (STOT) – exposición repetida;** A la vista de los datos disponibles, no se cumplen los criterios de clasificación
Órganos diana Ninguno conocido.
- (j) peligro de aspiración;** A la vista de los datos disponibles, no se cumplen los criterios de clasificación
- Síntomas / efectos, agudos y retardados** La inhalación de grandes concentraciones de vapor puede provocar síntomas como cefalea, mareos, cansancio, náuseas y vómitos.

11.2. Información sobre otros peligros

Propiedades de alteración endocrina Evaluar las propiedades de alteración endocrina en la salud humana. Este producto no contiene ningún alterador del sistema endocrino conocido o sospechoso de serlo.

SECCIÓN 12: INFORMACIÓN ECOLÓGICA

12.1. Toxicidad

Efectos de ecotoxicidad No tirar los residuos por el desagüe. .

Componente	Peces de agua dulce	pulga de agua	Algas de agua dulce
Alcohol n-propílico	Pimephales promelas: LC50=4480 mg/L 96h	EC50: 3339 - 3977 mg/L, 48h Static (Daphnia magna) EC50: = 3642 mg/L, 48h (Daphnia magna)	

Componente	Microtox	Factor-M
Alcohol n-propílico	EC50 = 17700 mg/L 5 min EC50 = 45000 mg/L 5 h EC50 = 8686 mg/L 15 min	

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

1-Propanol

Fecha de revisión 18-dic-2020

	EC50 = 980 mg/L 12 h	
--	----------------------	--

12.2. Persistencia y degradabilidad Supuestamente biodegradable
Persistencia La persistencia es improbable.

12.3. Potencial de bioacumulación La bioacumulación es improbable

Componente	log Pow	Factor de bioconcentración (FBC)
Alcohol n-propílico	0.34	No hay datos disponibles

12.4. Movilidad en el suelo El producto es soluble en agua y puede propagarse en sistemas acuosos. Probablemente será móvil en el medio ambiente debido a su solubilidad en agua. Altamente móvil en suelos

12.5. Resultados de la valoración PBT y mPmB Sustancia no considerada ser persistente, bioacumulable ni tóxica (PBT) / muy persistente ni bioacumulable (vPvB).

12.6. Propiedades de alteración endocrina

Información del alterador del sistema endocrino Este producto no contiene ningún alterador del sistema endocrino conocido o sospechoso de serlo

12.7. Otros efectos adversos

Contaminantes Orgánicos Persistentes Este producto no contiene ningún conocido o sospechado sustancia

Potencial de reducción de ozono Este producto no contiene ningún conocido o sospechado sustancia

SECCIÓN 13: CONSIDERACIONES RELATIVAS A LA ELIMINACIÓN

13.1. Métodos para el tratamiento de residuos

Restos de residuos/productos sin usar Los desechos están clasificados como peligrosos. Dispóngase de acuerdo a las Directivas Europeas sobre desechos y desechos peligrosos. Eliminar de conformidad con las normativas locales.

Embalaje contaminado Deshágase de este recipiente en un punto de recogida de residuos especiales o peligrosos. Los recipientes vacíos siguen conteniendo residuos del producto (líquido y/o vapor), y pueden ser peligrosos. Mantener el producto y el recipiente vacío alejado de fuentes de calor e ignición.

Catálogo de Desechos Europeos Según el Catálogo Europeo de Residuos, los códigos de residuos no son específicos del producto sino específicos de la aplicación.

Otra información El usuario debe asignar códigos de residuos basándose en la aplicación para la que se utilizó el producto. No verter en la red de alcantarillado. Puede desecharse en vertederos o incinerarse, cuando eso sea conforme con las normativas locales. No tirar los residuos por el desagüe.

SECCIÓN 14: INFORMACIÓN RELATIVA AL TRANSPORTE

IMDG/IMO

14.1. Número ONU UN1274
14.2. Designación oficial de transporte de las Naciones Unidas n-PROPANOL
14.3. Clase(s) de peligro para el transporte 3
14.4. Grupo de embalaje II

ACR23207

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

1-Propanol

Fecha de revisión 18-dic-2020

ADR

14.1. Número ONU	UN1274
14.2. Designación oficial de transporte de las Naciones Unidas	n-PROPANOL
14.3. Clase(s) de peligro para el transporte	3
14.4. Grupo de embalaje	II

IATA

14.1. Número ONU	UN1274
14.2. Designación oficial de transporte de las Naciones Unidas	n-PROPANOL
14.3. Clase(s) de peligro para el transporte	3
14.4. Grupo de embalaje	II
14.5. Peligros para el medio ambiente	No hay peligros identificados
14.6. Precauciones particulares para los usuarios	No se requieren precauciones especiales
14.7. Transporte marítimo a granel con arreglo a los instrumentos de la OMI	No aplicable, productos envasados

SECCIÓN 15: INFORMACIÓN REGLAMENTARIA

15.1. Reglamentación y legislación en materia de seguridad, salud y medio ambiente específicas para la sustancia o la mezcla

Inventarios internacionales

X = enumeran, Europa (EINECS/ELINCS/NLP), U.S.A. (TSCA), Canadá (DSL/NDSL), Filipinas (PICCS), China (IECSC), Japan (ENCS), Australia (AICS), Korea (ECL).

Componente	EINECS	ELINCS	NLP	TSCA	DSL	NDSL	PICCS	ENCS	IECSC	AICS	KECL
Alcohol n-propílico	200-746-9	-		X	X	-	X	X	X	X	KE-2936 2

Reglamento (CE) n.o 649/2012 del Parlamento Europeo y del Consejo, de 4 de julio de 2012, relativo a la exportación e importación de productos químicos peligrosos

No es aplicable

Reglamentos nacionales

Clasificación WGK Ver la tabla de valores

Componente	Alemania Clasificación de las Aguas (VwVwS)	Alemania - TA-Luft Class
Alcohol n-propílico	WGK1	

Componente	Francia - INRS (cuadros de enfermedades profesionales)
Alcohol n-propílico	Tableaux des maladies professionnelles (TMP) - RG 84

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

1-Propanol

Fecha de revisión 18-dic-2020

15.2. Evaluación de la seguridad química

Un informe sobre la seguridad química Evaluación / (CSA / CSR) ha sido llevado a cabo por el fabricante / importador

SECCIÓN 16: OTRA INFORMACIÓN

Texto completo de las indicaciones H mencionadas en las secciones 2 y 3

H225 - Líquido y vapores muy inflamables

H318 - Provoca lesiones oculares graves

H336 - Puede provocar somnolencia o vértigo

Leyenda

CAS - Chemical Abstracts Service

EINECS/ELINCS : Inventario europeo de sustancias químicas comercializadas existentes/Lista europea de sustancias químicas notificadas

PICCS - Inventario de productos químicos y sustancias químicas de Filipinas

IECS - Inventario chino de sustancias químicas existentes

KECL - Sustancias químicas existentes y evaluadas de Corea

WEL - Límites de exposición profesionales

ACGIH - American Conference of Governmental Industrial Hygienists (Conferencia Americana de Higienistas Industriales Gubernamentales)

DNEL - Nivel obtenido sin efecto

RPE - Equipos de protección respiratoria

LC50 - Concentración letal 50%

NOEC - Concentración sin efecto observado

PBT - Persistentes, bioacumulativas, tóxicas

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

ENCS - Inventario japonés de sustancias químicas existentes y nuevas

AICS - Inventario australiano de sustancias químicas (Australian Inventory of Chemical Substances)

NZIoC - Inventario de productos químicos de Nueva Zelanda

TWA - Tiempo Promedio Ponderado

IARC - Agencia Internacional para la Investigación del Cáncer

Concentración prevista sin efecto (PNEC)

LD50 - Dosis Letal 50%

EC50 - Concentración efectiva 50%

POW - Coeficiente de reparto octanol: agua

vPvB - Muy persistente y muy bioacumulable

ADR - Acuerdo europeo sobre el transporte internacional de mercancías peligrosas por carretera

IMO/IMDG - International Maritime Organization/International Maritime Dangerous Goods Code

OECD - Organización para la Cooperación y el Desarrollo

BCF - Factor de bioconcentración (FBC)

Bibliografía fundamental y fuentes de datos

<https://echa.europa.eu/information-on-chemicals>

Los proveedores de datos de seguridad, ChemADVISOR - LOLI, Merck Index, RTECS

ICAO/IATA - International Civil Aviation Organization/International Air Transport Association

MARPOL - Convenio Internacional para Prevenir la Contaminación por los Buques

ATE - Estimación de la toxicidad aguda

COV (compuesto orgánico volátil)

Consejo de formación

Formación de concienciación sobre peligros químicos, cubriendo etiquetado, fichas de datos de seguridad, equipos de protección personal e higiene.

Uso de equipos de protección personal, cubriendo su correcta selección, compatibilidad, umbrales de penetración, cuidados, mantenimiento, ajuste y estándares EN.

Primeros auxilios pertinentes a la exposición a productos químicos, incluido el uso de estaciones de lavado de ojos y duchas de seguridad.

Prevención y lucha contra incendios, identificando peligros y riesgos, electricidad estática y atmósferas explosivas que presentan los vapores y polvos.

Formación en respuesta a incidentes químicos.

Fecha de preparación 26-ago-2010

Fecha de revisión 18-dic-2020

Resumen de la revisión Actualización del CLP formato.

La hoja técnica de seguridad cumple con los requisitos del Reglamento (CE) No. 1907/2006

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

1-Propanol

Fecha de revisión 18-dic-2020

REGLAMENTO (UE) 2020/878 DE LA COMISIÓN por el que se modifica el anexo II del Reglamento (CE) n.o 1907/2006

Descargo de responsabilidad

La información facilitada en esta Ficha de Datos de Seguridad es correcta, a nuestro leal saber y entender, en la fecha de su publicación. Dicha información está concebida únicamente como guía para la seguridad en la manipulación, el uso, el procesamiento, el almacenamiento, el transporte, la eliminación y la liberación, no debiendo tomarse como garantía o especificación de calidades. La información se refiere únicamente al material específico mencionado y puede no ser válida para tal material usado en combinación con cualesquiera otros materiales o en cualquier proceso salvo que se especifique expresamente en el texto

Fin de la ficha de datos de seguridad

Anexo

4. Tabla de corrientes

	A1	A2	A3
Desde	---	V-101	P-101AB
Hasta	V-101	P-101AB	HT-101
Coste de la corriente (\$/hr)	-30933.75		
Fase	Líquida	Líquida	Líquida
Temperatura (°C)	25.000	26.957	29.526
Presión (bar)	1.000	1.000	40.000
Fracción de vapor	0.000	0.000	0.000
Densidad (kg/m ³)	1081.486	1079.878	1077.652
Flujo de entalpía (kW)	-13359.310	-13649.271	-13626.670
Peso molecular (g/mol)	89.976	89.698	89.698
Flujo volumétrico (m ³ /h)	7.945	8.125	8.142
Flujos molares (kmol/h)	95.500	97.819	97.819
METANOL (kmol/h)	0.191	0.191	0.191
PROPANOL (kmol/h)	0.096	0.096	0.096
THF (kmol/h)	0.000	0.000	0.000
BDO (kmol/h)	95.214	97.151	97.151
AGUA (kmol/h)	0.000	0.382	0.382
Fracciones molares			
METANOL	0.002	0.002	0.002
PROPANOL	0.001	0.001	0.001
THF	0.000	0.000	0.000
BDO	0.997	0.993	0.993
AGUA	0.000	0.004	0.004
Flujos másicos (t/año)	75323.690	76914.397	76914.397
METANOL (t/año)	53.648	53.674	53.674
PROPANOL (t/año)	50.309	50.355	50.355
THF (t/año)	0.000	0.002	0.002
BDO (t/año)	75219.732	76750.036	76750.036
WATER (t/año)	0.000	60.329	60.329
Fracciones másicas			
METANOL	0.001	0.001	0.001
PROPANOL	0.001	0.001	0.001
THF	0.000	0.000	0.000
BDO	0.999	0.998	0.998
AGUA	0.000	0.001	0.001

	A4	A5	A6
Desde	HT-101	R-101	B4
Hasta	R-101	B4	T-101
Coste de la corriente (\$/hr)			
Fase	Líquida	Líquida	Mezcla
Temperatura (°C)	185.000	189.176	65.929
Presión (bar)	39.850	39.701	1.000
Fracción de vapor	0.000	0.000	0.617
Densidad (kg/m3)	930.920	709.713	3.436
Flujo de entalpía (kW)	-12573.453	-12525.329	-12525.329
Peso molecular (g/mol)	89.698	45.456	45.456
Flujo volumétrico (m3/h)	9.425	12.363	2553.274
Flujos molares (kmol/h)	97.819	193.025	193.025
METANOL (kmol/h)	0.191	0.191	0.191
PROPANOL (kmol/h)	0.096	0.096	0.096
THF (kmol/h)	0.000	95.206	95.206
BDO (kmol/h)	97.151	1.945	1.945
AGUA (kmol/h)	0.382	95.588	95.588
Fracciones molares			
METANOL	0.002	0.001	0.001
PROPANOL	0.001	0.000	0.000
THF	0.000	0.493	0.493
BDO	0.993	0.010	0.010
AGUA	0.004	0.495	0.495
Flujos máscicos (t/año)	76914.389	76914.389	76914.389
METANOL (t/año)	53.674	53.674	53.674
PROPANOL (t/año)	50.355	50.355	50.355
THF (t/año)	0.002	60178.509	60178.509
BDO (t/año)	76750.029	1536.450	1536.450
WATER (t/año)	60.329	15095.400	15095.400
Fracciones máscicas			
METANOL	0.001	0.001	0.001
PROPANOL	0.001	0.001	0.001
THF	0.000	0.782	0.782
BDO	0.998	0.020	0.020
AGUA	0.001	0.196	0.196

	A7	A8	A9
Desde	T-101	P-103	HT-102
Hasta	P-103	HT-102	T-102
Coste de la corriente (\$/hr)			
Fase	Líquida	Líquida	Vapor
Temperatura (°C)	62.925	63.247	120.000
Presión (bar)	1.000	5.000	4.850
Fracción de vapor	0.000	0.000	1.000
Densidad (kg/m ³)	856.409	856.021	9.963
Flujo de entalpía (kW)	-15309.221	-15305.261	-12830.883
Peso molecular (g/mol)	62.389	62.389	62.389
Flujo volumétrico (m ³ /h)	17.981	17.989	1545.557
Flujos molares (kmol/h)	246.819	246.819	246.819
METANOL (kmol/h)	4.040	4.040	4.040
PROPANOL (kmol/h)	0.029	0.029	0.029
THF (kmol/h)	201.404	201.404	201.404
BDO (kmol/h)	0.000	0.000	0.000
AGUA (kmol/h)	41.345	41.345	41.345
Fracciones molares			
METANOL	0.016	0.016	0.016
PROPANOL	0.000	0.000	0.000
THF	0.816	0.816	0.816
BDO	0.000	0.000	0.000
AGUA	0.168	0.168	0.168
Flujos máxicos (t/año)	134985.092	134985.092	134985.111
METANOL (t/año)	1134.882	1134.882	1134.895
PROPANOL (t/año)	15.359	15.359	15.359
THF (t/año)	127305.548	127305.548	127305.560
BDO (t/año)	0.000	0.000	0.000
WATER (t/año)	6529.303	6529.303	6529.297
Fracciones máxicas			
METANOL	0.008	0.008	0.008
PROPANOL	0.000	0.000	0.000
THF	0.943	0.943	0.943
BDO	0.000	0.000	0.000
AGUA	0.048	0.048	0.048

	AZ1	AZ2	R1
Desde	T-102	B12	T-101
Hasta	B12	T-101	T-103
Coste de la corriente (\$/hr)			
Fase	Líquida	Mezcla	Líquida
Temperatura (°C)	115.087	63.163	98.870
Presión (bar)	4.850	1.000	1.000
Fracción de vapor	0.000	0.228	0.000
Densidad (kg/m ³)	800.021	9.674	923.317
Flujo de entalpía (kW)	-9431.381	-9431.381	-7704.409
Peso molecular (g/mol)	56.330	56.330	19.518
Flujo volumétrico (m ³ /h)	10.663	881.792	2.064
Flujos molares (kmol/h)	151.434	151.434	97.640
METANOL (kmol/h)	3.924	3.924	0.075
PROPANOL (kmol/h)	0.002	0.002	0.068
THF (kmol/h)	106.246	106.246	0.048
BDO (kmol/h)	0.000	0.000	1.945
AGUA (kmol/h)	41.262	41.262	95.505
Fracciones molares			
METANOL	0.026	0.026	0.001
PROPANOL	0.000	0.000	0.001
THF	0.702	0.702	0.000
BDO	0.000	0.000	0.020
AGUA	0.272	0.272	0.978
Flujos máxicos (t/año)	74776.451	74776.451	16705.748
METANOL (t/año)	1102.258	1102.258	21.050
PROPANOL (t/año)	0.917	0.917	35.914
THF (t/año)	67157.109	67157.109	30.070
BDO (t/año)	0.000	0.000	1536.450
WATER (t/año)	6516.167	6516.167	15082.264
Fracciones máxicas			
METANOL	0.015	0.015	0.001
PROPANOL	0.000	0.000	0.002
THF	0.898	0.898	0.002
BDO	0.000	0.000	0.092
AGUA	0.087	0.087	0.903

	R2	WW-1	WW-2
Desde	T-103	T-103	CL-102
Hasta	V-101	CL-102	
Coste de la corriente (\$/hr)			-18.97
Fase	Líquida	Líquida	Líquida
Temperatura (°C)	110.555	97.977	25.000
Presión (bar)	1.000	1.000	0.851
Fracción de vapor	0.000	0.000	0.000
Densidad (kg/m ³)	1005.377	919.384	993.088
Flujo de entalpía (kW)	-289.961	-7417.852	-7566.548
Peso molecular (g/mol)	78.242	18.089	18.089
Flujo volumétrico (m ³ /h)	0.180	1.875	1.736
Flujos molares (kmol/h)	2.319	95.321	95.321
METANOL (kmol/h)	0.000	0.075	0.075
PROPANOL (kmol/h)	0.000	0.068	0.068
THF (kmol/h)	0.000	0.048	0.048
BDO (kmol/h)	1.937	0.008	0.008
AGUA (kmol/h)	0.382	95.123	95.123
Fracciones molares			
METANOL	0.000	0.001	0.001
PROPANOL	0.000	0.001	0.001
THF	0.000	0.000	0.000
BDO	0.835	0.000	0.000
AGUA	0.165	0.998	0.998
Flujos máxicos (t/año)	1590.707	15115.041	15115.041
METANOL (t/año)	0.026	21.024	21.024
PROPANOL (t/año)	0.046	35.868	35.868
THF (t/año)	0.002	30.069	30.069
BDO (t/año)	1530.305	6.146	6.146
WATER (t/año)	60.329	15021.935	15021.935
Fracciones máxicas			
METANOL	0.000	0.001	0.001
PROPANOL	0.000	0.002	0.002
THF	0.000	0.002	0.002
BDO	0.962	0.000	0.000
AGUA	0.038	0.994	0.994

	THF-1	THF-2	THF-3
Desde	T-102	CL-101	B17
Hasta	CL-101	B17	
Coste de la corriente (\$/hr)			43277.98
Fase	Líquida	Líquida	Líquida
Temperatura (°C)	123.668	25.000	25.156
Presión (bar)	4.850	4.700	1.000
Fracción de vapor	0.000	0.000	0.000
Densidad (kg/m ³)	760.660	879.439	879.270
Flujo de entalpía (kW)	-5361.306	-5731.731	-5731.731
Peso molecular (g/mol)	72.008	72.008	72.008
Flujo volumétrico (m ³ /h)	9.030	7.810	7.812
Flujos molares (kmol/h)	95.385	95.385	95.385
METANOL (kmol/h)	0.116	0.116	0.116
PROPANOL (kmol/h)	0.027	0.027	0.027
THF (kmol/h)	95.158	95.158	95.158
BDO (kmol/h)	0.000	0.000	0.000
AGUA (kmol/h)	0.083	0.083	0.083
Fracciones molares			
METANOL	0.001	0.001	0.001
PROPANOL	0.000	0.000	0.000
THF	0.998	0.998	0.998
BDO	0.000	0.000	0.000
AGUA	0.001	0.001	0.001
Flujos máxicos (t/año)	60208.660	60208.660	60208.660
METANOL (t/año)	32.638	32.638	32.638
PROPANOL (t/año)	14.442	14.442	14.442
THF (t/año)	60148.451	60148.451	60148.451
BDO (t/año)	0.000	0.000	0.000
WATER (t/año)	13.129	13.129	13.129
Fracciones máxicas			
METANOL	0.001	0.001	0.001
PROPANOL	0.000	0.000	0.000
THF	0.999	0.999	0.999
BDO	0.000	0.000	0.000
AGUA	0.000	0.000	0.000

Anexo

5. Hojas de especificaciones



Universidad de Valladolid

EQUIPMENT LIST

REV.	0				JOB NO.	1
DATE	03-sep				UNIT	100
BY	JGL				CLIENT	UVa
APPR'V					LOCATION	VALLADOLID

REV.	ITEM NO.	QUANTITY	DESCRIPTION	ORIGIN (1)	DRIVER (1)	REMARKS
1	V-101	1	TANQUE DE HOMOGENEIZACIÓN PRIMARIO			
2	P-101	6	PRESURIZACIÓN DE REACTIVOS			DOS LÍNEAS PARALELAS DE 3 BOMBAS
3	HT-101	1	PRECALENTADOR INICIAL			CALENTAMIENTO CON VAPOR A 185 ° C
4	R-101	1	REACTOR CATALÍTICO MULTITUBULAR			
5	T-101	1	COLUMNA DE DESTILACIÓN PRIMARIA			23 ETAPAS
6	C-101	1	CONDENSADOR (DEST. PRIMARIA)			
7	V-102	1	ACUMULADOR (DEST. PRIMARIA)			
8	P-102	2	BOMBA DE REFLUJO (DEST. PRIMARIA)			
9	RB-101	1	EBULLIDOR KETTLE (DEST. PRIMARIA)			
10	V-103	1	HOMOGENEIZACIÓN INTERMEDIA			
11	P-103	2	BOMBEO INTERMEDIO A 5 BAR			
12	HT-102	1	RECALENTAMIENTO INTERMEDIO			
13	T-102	1	COLUMNA DE DESTILACIÓN SECUNDARIA			20 ETAPAS
14	C-102	1	CONDENSADOR (DEST. SECUNDARIA)			
15	V-104	1	ACUMULADOR (DEST. SECUNDARIA)			
16	P-104	2	BOMBA DE REFLUJO (DEST. SECUNDARIA)			
17	RB-102	1	EBULLIDOR KETTLE (DEST. SECUNDARIA)			
18	CL-101	1	ENFRIADOR DE PRODUCTO			
19	T-103	1	COLUMNA DE DESTILACIÓN TERNARIA			11 ETAPAS
20	C-103	1	CONDENSADOR TERNARIO			
21	V-105	1	TANQUE DE ACUM. (DEST. TERNARIA)			
22	P-105	2	BOMBA DE REFLUJO (DEST. TERNARIA)			
23	RB-103	1	EBULLODOR KETTLE (DEST. TERNARIA)			
24	CL-102	1	ENFRIADOR DE AGUA DE SALIDA			
25						
26						
27						
28						
29						
30						
31						
32						
33						
34						
35						
36						
37						
38						
39						
40						
41						


LEGEND:

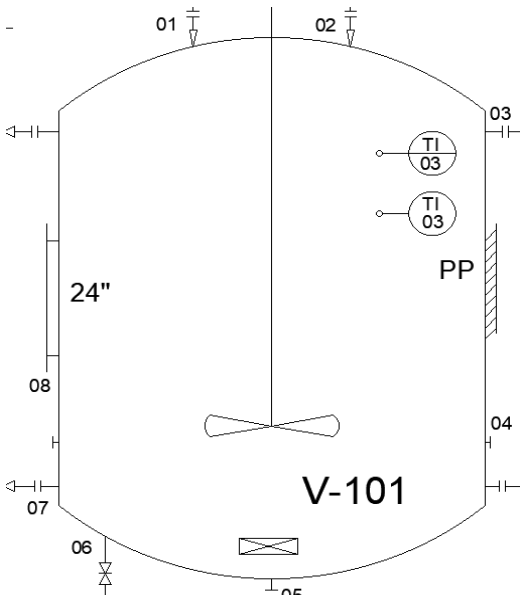
1.- DRIVER: M - ELECTRIC MOTOR

T - TURBINE

ORIGIN: E - SPAIN


O - OTHERS


 Universidad de Valladolid					<h1 style="margin: 0;">VESSEL</h1> <h2 style="margin: 0;">PROCESS DATA SHEET</h2>				
REV.	0				JOB N°	1			
DATE	28-ago				UNIT	100			
BY	JGL				CLIENT	Uva			
APPR'V					LOCATION	VALLADOLID			
REV.									
1	Item Number:	V-101			Quantity:	1			
2	Service:	TANQUE DE HOMOGENEIZACIÓN							
3	Fluid:	1,4 - BUTANODIOL							
4	Volume	3.76	m ³						
5	Diameter (ID)	1.1	mm	Height (TL-TL)	4.2	mm			
6	Horizontal or Vertical	VERTICAL							
7	Demister	NO	bar		Thickness	mm			
8									
9		PRESSURE bar g			TEMPERATURE °C				
10		Operating	Design	Operating	Design				
11	Shell	1	1.034	110.5	138.3				
12	Jacket	--	--	--	--				
13	Coil	--	--	--	--				
14									
15		MATERIAL			CORR. ALLOW.				
16	Shell	SS-304			3	mm			
17	Heads	SS-304			3	mm			
18	Jacket	--				mm			
19	Coil	--				mm			
20	Demister	--							
21									
22	Internal liner				Thickness:	mm			
23	Heads type	SEMIELÍPTICOS							
24	Code	ASME SECCIÓN 8							
25	Liquid height	3660	mm						
26	Specific Gravity	1.015	@	25	°C				
27	Steam Out conditions	(1)	bar g	@	°C				
28	Stress Relieve for Process Reasons	(1)							
29	Minimum Elevation (BTL to Grade)	(1)	mm						
30	Insulation: Type	PROTECCIÓN DE PERSONAL							
31	Thickness	(1)	mm						
32	Radiograph								
33									
34	NOZZLES								
35	Mark N°	Quantity	Size	Service					
36	1	1	1/2"	FLUIDO RECIRCULADO (IN)					
37	2	1	3"	MATERIA PRIMA (IN)					
38	3	2	1/2"	TRANSMISOR DE NIVEL					
39	4	2	3"	STEAM OUT					
40	5	1	3"	SALIDA DE MEZCLA					
41	6	1	1"	DRENAJE					
42	7	2	2"	CRISTAL DE NIVEL					
43	8	1	24"	BOCA DE HOMBRE					
44									
45									
46									
47									
48									
49									
50									
51									
52									
53									
54									
55									
56									




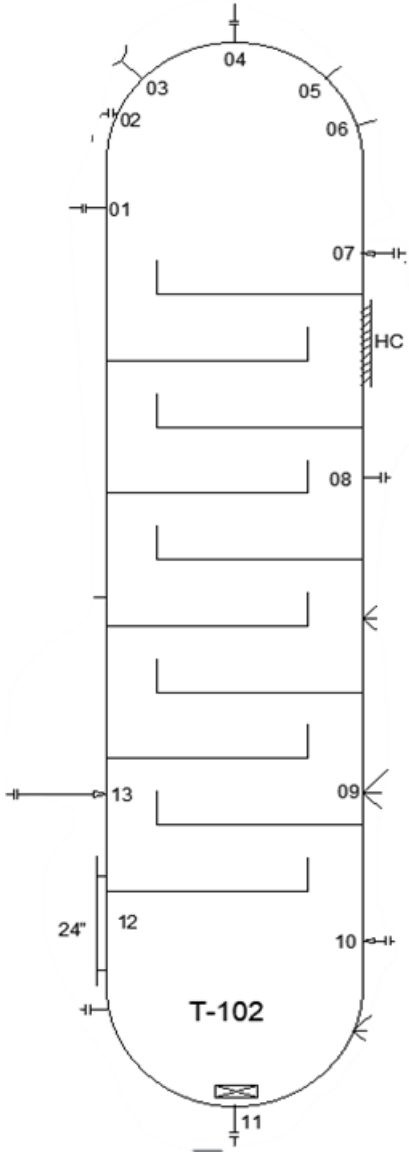
NOTES

(1) Este proyecto ocupa un diseño preliminar, las características mecánicas de los equipos deben definirse en estudios más avanzados.

				<h2 style="text-align: center;">REBOLIER PROCESS DATA SHEET</h2>			
Universidad de Valladolid							
REV.	0			JOB N°	1		
DATE	03-sep			UNIT	100		
BY	JGL			CLIENT	UVa		
APPR'V				LOCATION	VALLADOLID		
REV.							
1	ITEM NUMBER	RB-101		QUANTITY	1		
2	SERVICE	EBULLIDOR PARCIAL / CALDERÍN COLUMNA T-101					
3	OPERATING CASE	NORMAL					
4	TEMA Type	BKU KETTLE	Units	SHELL SIDE		TUBE SIDE	
5	FLUID CIRCULATED			FLUIDO DE PROCESO		VAPOR MPS	
6	FLOW TOTAL.	Normal (Máx.)	kg/h	4687.34		2970	
7		Gas		2780.95		---	
8		Liquid		1906.05		---	
9		Steam		---		0.825	
10		Incondensables		---		---	
11		Vaporized or condensate		---		---	
12		Steam or condensate		---		0.825	
13	LIQUID DENSITY (Inlet/Outlet)		kg/m ³	923.32	923.32	---	---
14	VISCOSITY-LIQUID (Inlet/Outlet)		cP	0.3	0.3	---	0.16
15	MOLECULAR WEIGHT-GAS (Inlet/Outlet)			---	19.52	18	---
16	SPECIFIC HEAT (Inlet/Outlet)		kcal/kg °C	1.024	1.024	0.605	1.04
17	ENTHALPY (Inlet/Outlet)				-14552.1	2758.8	693.9
18	THERMAL CONDUCTIVITY		kcal/m h °C	0.406		0.585	
19	SURFACE TENSION		dyna/cm	57.96		45.65	
20	TEMPERATURE INLET		°C	98.87		164.34	
21	OUTLET		°C	98.87		164.34	
22	OPERATING PRESSURE (Normal, Inlet)		barg	1		6.89	
23	ALLOWABLE PRESSURE DROP		bar	(1)		(1)	
24	FOULING FACTOR		h m ² °C/kcal	NO SE CONSIDERA		NO SE CONSIDERA	
25	DUTY		kW	1706.7			
26	SURFACE OVERDESIGN		%	15			
27	DESIGN CONDITIONS						
28	PRESSURE		barg	4.73		7.605	
29	TEMPERATURE		°C	126.65		192.11	
30	MATERIALS (2)						
31	Shell and cover	SA-455 II	Tubes	SA-106 B			
32	Floating head and cover	SA-455 II	Channel and cover	SA-455 II			
33	Fixed tubesheet	SA-455 II	Floating tubesheet	SA-455 II			
34	Wear plate		Baffles	SA-455 II			
35	Joint type	BUTT	Gaskets	SA-234-WPB			
36	CORROSION ALLOWANCE	Shell side	3 mm	Tube side	3 mm		
37	NOZZLES	Shell side	Inlet	8	inch	Outlet	1 inch
38		Tube side	Inlet	4	inch	Outlet	1 1/2 inch
39	CODE REQUIREMENTS	ASME					
40	NOTES						
41	(1)	NO SE HA REALIZADO EVALUACIÓN ACERCA DE ESTE ASPECTO (PRÓXIMAS REVISIONES)					
41	(2)	DEBEN REVISARSE LOS CATÁLOGOS DE EBULLIDORES, Y DEFINIR EXACTAMENTE LOS MÁS ADECUADOS					
42		EN REVISIONES POSTERIORES					
43							
44							

				<h2 style="text-align: center;">PUMP PROCESS DATA SHEET</h2>			
Universidad de Valladolid							
REV.	0			JOB N°	1		
DATE	03-sep			UNIT	100		
BY	JGL			CLIENT	UVa		
APPR'V				LOCATION	VALLADOLID		
REV.							
1	ITEM NUMBER	P - 103 A/B					
2	SERVICE	AUMENTO DE LA CARGA DE 1 A 5 BAR PARA DESPLAZAR EL AZEÓTROPO					
3	TYPE	BOMBA CENTRÍFUGA					
4	NO. OF PUMPS	2					
5	IN OPERATION	1					
6	SPARE	1					
7	DRIVER	MOTOR		SÍ			
8		TURBINE		NO			
9		OTHERS		NO			
10	LIQUID PUMPED	DESTILADO T-101					
11	OPERATING CASE	ENTRADA		SALIDA			
12	PUMPING TEMPERATURE (T)	°C	62.93	63.25			
13	VISCOSITY (@ T)	cP	0.341	0.34			
14	VAPOR PRESSURE (@ T)	bar a	1	1.01			
15	DENSITY (@ T)	kg/m ³	856.4	856			
16							
17	NORMAL CAPACITY	m ³ /h	18	18			
18	DESIGN CAPACITY	m ³ /h	21.6	21.6			
19	DISCHARGE PRESSURE Normal/Design	bar g	4	4			
20	SUCTION PRESSURE Normal/Design	bar g	0	0			
21	DIFFERENTIAL PRESSURE Normal/Design	Bar	4	4			
22	DIFFERENTIAL HEAD Normal/Design	m	47.63	47.63			
23	NPSH MINIMUM AVAILABLE Normal/Design	m	(1)	(1)			
24	MAXIMUM SUCTION PRESSURE	bar g	(1)				
25	SHUT-OFF PRESSURE	bar g	(1)				
26	DUTY (Continuous/Intermitent)	kW	3.96				
27	MINIMUM CIRCULATION FLOW		(1)				
28	CORROSION OR EROSION DUE TO						
29	SOLIDS IN SUSPENSION		NO				
30	LOCATION (Indoors/Outdoors)		INTERIOR				
31	HIDRAULIC POWER @ Design flow		--				
32	CONSTRUCTION MATERIALS (2)	CASE		AISI 304			
33		IMPELLER		AISI 304			
34		SHAFT		AISI 304			
35	NOTES						
36	(1)	NO SE PUEDEN DEFINIR ESTOS VALORES EN LA PRIMERA REVISIÓN					
37		PORQUE NO SE HA DEFINIDO LA PÉRDIDA DE CARGA EN LAS TUBERÍAS					
38		EN PRÓXIMAS REVISIONES SE ESPECIFICARÁN ESTOS VALORES					
39		Y SE SELECCIONARÁ ESPECÍFICAMENTE LA BOMBA					
40	(2)	LOS MATERIALES DE LAS BOMBAS SE SELECCIONARON DE LA SERIE					
41		DE BOMBAS VS DEL CATÁLOGO DE BOMBAS DE HIDRÁULICA ALSINA					
42							
43							
44							

				<h2 style="margin: 0;">COLUMNA DE DESTILACIÓN</h2> <h3 style="margin: 0;">PROCESS DATA SHEET</h3>			
Universidad de Valladolid				JOB N° 1			
REV.	0			DATE		03-sep	
BY	JGL			CLIENT		UVa	
APPR'V				LOCATION		VALLADOLID	
REV.							
1	Item Number: T-102		Quantity: 1				
2	Service: DESTILACIÓN SECUNDARIA						
3	Fluid: FLUIDO DE PROCESO AZEÓTROPO A 5 BAR						
4	Volume	8.65	m ³				
5	Diameter (ID)	(1)	m	Height (TL-TL)	10.97	m	
6	Horizontal or Vertical Vertical						
7	Demister	No	bar	Thickness	mm		
8							
9			PRESSURE	bar g	TEMPERATURE °C		
10			Operating	Design	Operating	Design	
11	Shell	4	5.8	123.66	150		
12	Jacket	---	---	---	---		
13	Coil	---	---	---	---		
14							
15	(2)	MATERIAL		CORR. ALLOW.			
16	Shell	SS-304		mm			
17	Heads	---		mm			
18	Jacket	---		mm			
19	Coil	---		mm			
20	Demister	---		---			
21							
22	Internal liner			Thickness:	mm		
23	Heads type	SEMIESFÉRICAS					
24	Code	ASME SECCIÓN 8					
25	Liquid height	(2)	mm				
26	Specific Gravity	(2)	@	°C			
27	Steam Out conditions	bar g	@	°C			
28	Stress Relieve for Process Reasons	Yes					
29	Minimum Elevation (BTL to Grade)	mm					
30	Insulation: Type	HC					
31	Thickness	20 mm					
32	Radiograph						
33							
34	NOZZLES (2)						
35	Mark N°	Quantity	Size	Service			
36	1	2	1 1/2"	VENTEO A QUEMADOR			
37	2	1	3"	VÁLVULA DE SEGURIDAD			
38	3	2	1/2"	TRANSMISOR DE PRESIÓN			
39	4	1	3"	SALIDA DE DESTILADO			
40	5	2	--	TRANSM. TEMPERATURA			
41	6	8	--	INDICADORES DE TEMP.			
42	7	1	1/2"	ENTRADA DE REFLUJO			
43	8	2	1"	DRENAJE			
44	9	6	1/2"	INDICADORES DE PRESIÓN			
45	10	1	5"	RETORNO DE VAPOR			
46	11	1	5"	SALIDA DE COLAS			
47	12	1	24"	BOCA DE HOMBRE			
48	13	1	6"	ALIMENTACIÓN			
49							
50							
51							
52							
53							
54							
55							
56							




NOTES			
(1)	LA TORRE SE DIVIDE EN DOS SECCIONES		
	CON DIFERENTE DIÁMETRO:	D SUP:	1.002 m
		D INF:	0.586 m
(2)	ES NECESARIO REVISAR ESTA HOJA		
	PARA COMPLETAR CIERTOS DATOS		
	PORQUE ES UNA PLANTILLA DE		
	LA HOJA DE ESPECIFICACIONES DE UN DEPÓSITO		



Universidad de Valladolid

TOWER INTERNAL SPECIFICATIONS TRAY TYPE COLUMNS

REV.					
57					
58	Nº of trays	18	Type	TAMIZ	
59	Tray Spacing	610 mm	Manway	Yes	(Removable from TOP)
60	Valve: Number/Tray		Size	mm	Spacing mm
61	Riser:	Yes	Diameter	mm	
62	Type of flow	Cross			
63	Inlet Weirs	Yes	Height above Tray floor	mm	
64	Outlet weirs:		Length	mm	
65					
66					
67					
68	Downcomers	Yes	Type	Segmental(Straight)	
69	Downcomers:	Fixed	Clearance Above Tray Floor	mm	
70	Seal Pan Distance Below Bottom Tray		Seal	mm	
71					
72	Hydraulic Gradient Provision:	None required, all valves same height above tray			
73					
74					
75					
76					
77					
78	MATERIALS OF CONSTRUCTION				
79					
80	Valve and Riser:	Gaskets:			
81	Bolts,Nuts and Washers:				
82	Trays:	Gaskets		Bolting	
83	Tray Supports,Downcomers and Seal Pan:				
84					
85	NOTES				
86	GENERAL:	EL DIMENSIONADO QUE SE LLEVÓ A CABO DURANTE LA PRIMERA REVISIÓN			
87		FUE MÍNIMO, ES NECESARIO CONSULTAR CON FABRICANTES EL DISEÑO			
88		INTERNO DE LAS COLUMNAS			
89					
90					
91					
92					
93					
94					
95					
96					
97					
98					
99					
100					
101					
102					
103					
104					
105					
106					
107					
108					
109					
110					

				<h2 style="text-align: center;">HEAT EXCHANGER PROCESS DATA SHEET</h2>			
Universidad de Valladolid							
REV.	0			JOB N°	1		
DATE	03-sep			UNIT	100		
BY	JGL			CLIENT	UVa		
APPR'V				LOCATION	VALLADOLID		
REV.							
1	ITEM NUMBER	CL-102		QUANTITY	1		
2	SERVICE	ENFRIAMIENTO DEL AGUA RESIDUAL					
3	OPERATING CASE	NORMAL					
4	TEMA Type	BEM	Units	SHELL SIDE	TUBE SIDE		
5	FLUID CIRCULATED			COOLING WATER	AGUA RESIDUAL		
6	FLOW TOTAL.	Normal (Máx.)	kg/h	12780	1724.4		
7		Gas		---	---		
8		Liquid		12780	1724.4		
9		Steam		---	---		
10		Incondensables		---	---		
11		Vaporized or condensate		---	---		
12		Steam or condensate		---	---		
13	LIQUID DENSITY (Inlet/Outlet)		kg/m ³	999.1	997.05	919.4	993.1
14	VISCOSITY-LIQUID (Inlet/Outlet)		cP	1.14	0.89	0.286	0.913
15	MOLECULAR WEIGHT-GAS (Inlet/Outlet)			--	--	---	---
16	SPECIFIC HEAT (Inlet/Outlet)		kJ/kg °C	4.189	4.181	4.43	4.103
17	ENTHALPY (Inlet/Outlet)		kJ/kg	63.1	104.9	-3699.05	-3773.2
18	THERMAL CONDUCTIVITY		W/mK	0.589		0.603	
19	SURFACE TENSION		dyna/cm	--		---	
20	TEMPERATURE INLET		°C	15		97.98	
21	OUTLET		°C	25		25	
22	OPERATING PRESSURE (Normal, Inlet)		barg	0		0	
23	ALLOWABLE PRESSURE DROP		bar	0.35		0.35	
24	FOULING FACTOR		m °C/W	0.000167		0.000167	
25	DUTY		kW	148.7			
26	SURFACE OVERDESIGN		%	15			
27	DESIGN CONDITIONS						
28	PRESSURE		barg	2.43		4.16	
29	TEMPERATURE		°C	50		123	
30	MATERIALS (1)						
31	Shell and cover	SA-455 II	Tubes	SA-106 B			
32	Floating head and cover	SA-455 II	Channel and cover	SA-455 II			
33	Fixed tubesheet	SA-455 II	Floating tubesheet	SA-455 II			
34	Wear plate	---	Baffles	SA-455 II			
35	Joint type	A TOPE	Gaskets	SA-234-WPB			
36	CORROSION ALLOWANCE	Shell side	3 mm	Tube side	3 mm		
37	NOZZLES	Shell side	Inlet	3	inch	Outlet	3 inch
38		Tube side	Inlet	2	inch	Outlet	2 inch
39	CODE REQUIREMENTS	TEMA					
40	NOTES						
41	(1)	LOS MATERIALES Y EL DISEÑO MECÁNICO DEBEN REVISARSE MÁS EXHAUSTIVAMENTE Y USANDO					
41		CATÁLOGOS DE FABRICANTES (CL-102)					
42							
43							
44							

Anexo

6. HAZOP T-101

HAZOP STUDY

CLIENT: UVa PLANT: THF PLANT SYSTEM: DEST. PRIMARIA OPER. TYPE: NORMAL	NODE N°: 1 DRAWING: P&ID 103 EQUIPMENT/LINE: T-101 / ALIMENTACIÓN DESIGN INTENTION: COLUMNA DE DESTILACIÓN PRIMARIA	REV: 0 DATE: 3-SEP-2021 BY: JGL
---	--	---------------------------------------

PALABRA GUÍA	DESVIACIÓN	POSIBLES CAUSAS	CONSECUENCIAS	SALVAGUARDIAS
MÁS	FLUJO	<ul style="list-style-type: none"> - FALLO EN LA VÁLVULA FV 01. - MAYOR ENTRADA DE MATERIA PRIMA EN EL PROCESO. 	<ul style="list-style-type: none"> - AUMENTO DEL FLUJO DE LÍQUIDO EN LA SECCIÓN INFERIOR (GOTEO EN LA TORRE). - AUMENTO DEL NIVEL DE LA TORRE POSIBLE REBOSE. 	<ul style="list-style-type: none"> - INSTALACIÓN DE DRENAJES DE EMERGENCIA - MANTENIMIENTO PERIÓDICO DE FV 01.
MENOS	FLUJO	<ul style="list-style-type: none"> - CIERRE POR FALLO DE LA VÁLVULA FV 01. - FALLO EN LA ENTRADA DE VAPOR AL REACTOR Y MENOR REACCIÓN PRODUCIDA. - ATRANQUE DE TUBERÍAS 	<ul style="list-style-type: none"> - DISMINUCIÓN DEL FLUJO DE LÍQUIDO EN LA PARTE INFERIOR DE LA TORRE (PLATOS SECOS, INUNDACIÓN...). - MAYOR NECESIDAD DE REFLUJO EN LA TORRE. 	<ul style="list-style-type: none"> - ALARMAS DE FLUJO BAJO INSTALADAS PREVIAMENTE A LA TORRE. - MANTENIMIENTO PERIÓDICO DE FV 01.
NO	FLUJO	<ul style="list-style-type: none"> - FALLO DE LA VÁLVULA FV 01. - ATRANQUE DE LA TUBERÍA. 	<ul style="list-style-type: none"> - SECADO DE LA TORRE 	<ul style="list-style-type: none"> - ALARMAS DE FLUJO BAJO INSTALADAS PREVIAMENTE A LA TORRE. - MANTENIMIENTO PERIÓDICO DE FV 01.
MENOS	PRESIÓN	<ul style="list-style-type: none"> - CAÍDA DE PRESIÓN ELEVADA EN TUBERÍA Y VÁLVULA. 	<ul style="list-style-type: none"> - FLUJO DE ALIMENTACIÓN EN SENTIDO OPUESTO. 	<ul style="list-style-type: none"> - INSTALACIÓN DE VÁLVULAS ANTIRRETORNO EN LAS LÍNEAS

HAZOP STUDY

CLIENT: UVa PLANT: THF PLANT SYSTEM: DEST. PRIMARIA OPER. TYPE: NORMAL	NODE N°: 1 DRAWING: P&ID 103 EQUIPMENT/LINE: T-101 / RETORNO DE AZEÓTROPO DESIGN INTENTION: COLUMNA DE DESTILACIÓN PRIMARIA	REV: 0 DATE: 3-SEP-2021 BY: JGL
---	--	---------------------------------------

PALABRA GUÍA	DESVIACIÓN	POSIBLES CAUSAS	CONSECUENCIAS	SALVAGUARDIAS
MÁS	FLUJO	<ul style="list-style-type: none"> - FALLO EN LA VÁLVULA FV RV 02. - MAYOR ENTRADA DE MATERIA PRIMA EN EL PROCESO. 	<ul style="list-style-type: none"> - AUMENTO DEL FLUJO DE LÍQUIDO EN LA SECCIÓN INFERIOR (GOTEO EN LA TORRE). - AUMENTO DEL NIVEL DE LA TORRE POSIBLE REBOSE. - AUMENTO DEL FLUJO DE VAPOR (INUNDACIÓN EN LA PARTE SUPERIOR) 	<ul style="list-style-type: none"> - INSTALACIÓN DE DRENAJES Y VENTEOS DE EMERGENCIA. - ALARMAS DE RATIO ALTO EN LA VÁLVULA RV 02. - MANTENIMIENTO PERIÓDICO DE RV 02.
MENOS	FLUJO	<ul style="list-style-type: none"> - CIERRE POR FALLO DE LA VÁLVULA RV 02. - FALLOS DE OPERACIÓN EN LA COLUMNA T-102. - ATRANQUE DE TUBERÍAS 	<ul style="list-style-type: none"> - DISMINUCIÓN DEL FLUJO DE LÍQUIDO EN LA PARTE INFERIOR DE LA TORRE (PLATOS SECOS, INUNDACIÓN...). - DISMINUCIÓN DEL FLUJO DE VAPOR ENTRANTE (GOTEOS). - MAYOR NECESIDAD DE REFLUJO EN LA TORRE. - MAYOR NECESIDAD DE VAPOR DESDE EL EBULLIDOR. 	<ul style="list-style-type: none"> - ALARMAS DE RATIO BAJO EN LA VÁLVULA RV 02. - MANTENIMIENTO PERIÓDICO DE RV 02.
NO	FLUJO	<ul style="list-style-type: none"> - FALLO DE LA VÁLVULA RV 02. - ATRANQUE DE LA TUBERÍA. 	<ul style="list-style-type: none"> - PROBLEMAS OPERACIONALES QUE SE PODRÍAN RESOLVER. 	<ul style="list-style-type: none"> - CONTROL DE RATIO DE ENTRADA/DESTILADO QUE REGULAN EL REFLUJO EN T-101. - MANTENIMIENTO PERIÓDICO DE RV 02. BYPASS.

PALABRA GUÍA	DESVIACIÓN	POSIBLES CAUSAS	CONSECUENCIAS	SALVAGUARDIAS
MENOS	PRESIÓN	<ul style="list-style-type: none"> - CAÍDA DE PRESIÓN ELEVADA EN TUBERÍA Y VÁLVULA. 	<ul style="list-style-type: none"> - FLUJO DE ALIMENTACIÓN EN SENTIDO OPUESTO. - AUMENTO DE PRESIÓN EN LAS 	<ul style="list-style-type: none"> - INSTALACIÓN DE VÁVULAS - INSTALACIÓN DE VENTOSILAS SEGURIDAD EN LAS LÍNEAS.
MÁS	PRESIÓN	<ul style="list-style-type: none"> - MENOR CIERRE DE VÁLVULA EN RV 02. 	<ul style="list-style-type: none"> - AUMENTO DE LA PRESIÓN EN LAS CABEZAS DE LA TORRE, PELIGRO DE EXPLOSIÓN. 	<ul style="list-style-type: none"> - INSTALACIÓN DE CONTROL DE PRESIÓN EN LAS CABEZAS. - INSTALACIÓN DE PSV 03 EN LAS CABEZAS DE LA TORRE.
DIFERENTE	TEMPERATURA	<ul style="list-style-type: none"> - FALLOS EN LA OPERACIÓN NORMAL DE T-102 O EN EL CONDENSADOR C-102. 	<ul style="list-style-type: none"> - CAMBIO EN LA TEMPERATURA DE LOS PLATOS, LO QUE AFECTA AL EQUILIBRIO EN CADA UNO. 	<ul style="list-style-type: none"> - CONTROL DE LA TEMPERATURA EN CABEZAS DE LA TORRE Y EN EL PLATO SENSIBLE.

HAZOP STUDY

CLIENT: UVa PLANT: THF PLANT SYSTEM: DEST. PRIMARIA OPER. TYPE: NORMAL	NODE N°: 1 DRAWING: P&ID 103 EQUIPMENT/LINE: T-101 / SALIDA DE DESTILADO (CABEZAS) DESIGN INTENTION: COLUMNA DE DESTILACIÓN PRIMARIA	REV: 0 DATE: 3-SEP-2021 BY: JGL
---	---	---------------------------------------

PALABRA GUÍA	DESVIACIÓN	POSIBLES CAUSAS	CONSECUENCIAS	SALVAGUARDIAS
NO	FLUJO	<ul style="list-style-type: none"> - MAL FUNCIONAMIENTO DE LA COLUMNA (INUNDACIÓN). - NO HAY ENTRADAS A LA COLUMNA (CIERRE DE VÁLVULAS). - ATRANQUE DE TUBERÍAS. 	<ul style="list-style-type: none"> - NO HAY SALIDA DE PRODUCTO POR LA CABEZA. - PARADA DEL PROCESO QUE CONTINÚA POR ESA LÍNEA. - AUMENTO DE LA PRESIÓN EN CABEZAS. 	<ul style="list-style-type: none"> - ALARMAS DE FLUJO BAJO EN LAS VÁLVULAS RV 02 Y FV 01. - TANQUES PULMÓN (V-102 DE ACUMULACIÓN EN LAS CABEZAS Y TANQUE PULMÓN V-103) PARA EVITAR PARADAS. - PRESENCIA DE VENTEOS Y PSV.
DIFERENTE	FLUJO	<ul style="list-style-type: none"> - CAMBIOS ANORMALES EN EL FUNCIONAMIENTO DE LA TORRE, O EN LAS ENTRADAS. 	<ul style="list-style-type: none"> - PERTURBACIONES EN LA LÍNEA DE CABEZAS, DESTILADO. 	<ul style="list-style-type: none"> - INSTALACIÓN DE V-102 PARA REDUCIR LAS PERTURBACIONES. - CONTROL DEL NIVEL EN EL TANQUE PARA REGULAR LA LÍNEA. - ALARMAS Y DRENAJES EN V-102.
MÁS	PRESIÓN (TEMPERATURA)	<ul style="list-style-type: none"> - FALLO EN EL CONTROL DE LA TORRE. - CAMBIOS EN ENTRADAS DE LA TORRE. - FALLO EN EL CONTROL DE TEMPERATURA CON EL EBULLIDOR. 	<ul style="list-style-type: none"> - PELIGRO DE AUMENTO DE LA CARGA EN LAS CABEZAS DE LA TORRE. PELIGRO DE EXPLOSIÓN. - PUEDE AFECTAR A LOS MATERIALES DE LOS QUE ESTÁ FABRICADA LA LÍNEA Y LOS EQUIPOS QUE HAY EN ELLA. - MÁS REFRIGERACIÓN NECESARIA. 	<ul style="list-style-type: none"> - CONTROL DE LA PRESIÓN EN LAS CABEZAS DE LA TORRE CON EL REFRIGERANTE PV 01. - PSV 01. - CONTROL DE LA TEMPERATURA EN LAS CABEZAS CON EL REFLUJO.

PALABRA GUÍA	DESVIACIÓN	POSIBLES CAUSAS	CONSECUENCIAS	SALVAGUARDIAS
MENOS	PRESIÓN	- CAÍDA DE PRESIÓN ELEVADA EN TUBERÍA.	- FLUJO DE ALIMENTACIÓN EN SENTIDO OPUESTO.	- INSTALACIÓN DE VÁVULAS ANTIRRETORNO EN LAS LÍNEAS

HAZOP STUDY

CLIENT: UVa PLANT: THF PLANT SYSTEM: DEST. PRIMARIA OPER. TYPE: NORMAL	NODE N°: 1 DRAWING: P&ID 103 EQUIPMENT/LINE: T-101 / REFLUJO DESIGN INTENTION: COLUMNA DE DESTILACIÓN PRIMARIA	REV: 0 DATE: 3-SEP-2021 BY: JGL
---	---	---------------------------------------

PALABRA GUÍA	DESVIACIÓN	POSIBLES CAUSAS	CONSECUENCIAS	SALVAGUARDIAS
NO	FLUJO	<ul style="list-style-type: none"> - ATRANQUE DE LA TUBERÍA. - FALLO DE LA VÁLVULA FV 04. 	<ul style="list-style-type: none"> - PÉRDIDA DE CONTROL SOBRE LA CABEZA DE LA TORRE. - NO HAY RETORNO DE LÍQUIDO, LA TORRE DEJA DE FUNCIONAR. 	<ul style="list-style-type: none"> - COLOCACIÓN DE UN BYPASS QUE CONSTA DE UNA VÁLVULA DE GLOBO. - SE PUEDE CONTROLAR LA TORRE, AUNQUE MENOS EFICAZMENTE, CON EL EBULLIDOR.
MÁS	FLUJO	<ul style="list-style-type: none"> - DESCONTROL DE LA BOMBA P-102. - AUMENTO DE LA SALIDA POR DESTILADO. - TAPONAMIENTO DE LA LÍNEA DE DESTILADO. 	<ul style="list-style-type: none"> - DEMASIADO LÍQUIDO FLUYENDO POR LA TORRE Y PUEDE PRODUCIRSE GOTEÓ EN LA TORRE. - PUEDE PRODUCIRSE REBOSE EN EL FONDO DE LA TORRE. 	<ul style="list-style-type: none"> - INSTALACIÓN DE DRENAJES PARA RETIRAR FLUIDO SI FUESE NECESARIO.
DIFERENTE	TEMPERATURA	<ul style="list-style-type: none"> - FALLO EN LA OPERACIÓN DEL CONDENSADOR C-101 	<ul style="list-style-type: none"> - DESCONTROL DE LA TEMPERATURA EN LAS CABEZAS DE LA TORRE. 	<ul style="list-style-type: none"> - DEBERÍA HABER ALARMAS INSTALADAS Y CONTROLAR EL REFLUJO SEGÚN LA TEMPERATURA.

HAZOP STUDY

CLIENT: UVa PLANT: THF PLANT SYSTEM: DEST. PRIMARIA OPER. TYPE: NORMAL	NODE N°: 1 DRAWING: P&ID 103 EQUIPMENT/LINE: T-101 / SALIDA DE COLAS DESIGN INTENTION: COLUMNA DE DESTILACIÓN PRIMARIA	REV: 0 DATE: 3-SEP-2021 BY: JGL
---	---	---------------------------------------

PALABRA GUÍA	DESVIACIÓN	POSIBLES CAUSAS	CONSECUENCIAS	SALVAGUARDIAS
DIFERENTE	FLUJO	<ul style="list-style-type: none"> - VARIACIÓN EN LA OPERACIÓN DE LA TORRE (CAMBIO EN ENTRADAS). - FUGAS EN LA TORRE O EN LA TUBERÍA. 	<ul style="list-style-type: none"> - VARIACIÓN DEL NIVEL EN EL EBULLIDOR. 	<ul style="list-style-type: none"> - ALARMAS Y SWITCHES DE NIVEL ALTO Y BAJO INSTALADOS EN EL EBULLIDOR. - DRENAJE INSTALADO PARA DISMINUIR EL NIVEL.
NO	FLUJO	<ul style="list-style-type: none"> - TAPONAMIENTO DE LA LÍNEA. 	<ul style="list-style-type: none"> - DESCARGA DEL EBULLIDOR. - NO CONDENSACIÓN DEL VAPOR. 	<ul style="list-style-type: none"> - ALARMAS DE NIVEL BAJO EN EL EBULLIDOR.
MENOS	PRESIÓN	<ul style="list-style-type: none"> - POSIBLE CAÍDA DE PRESIÓN ELEVADA EN TUBERÍA. 	<ul style="list-style-type: none"> - FLUJO DE ALIMENTACIÓN EN SENTIDO OPUESTO. 	<ul style="list-style-type: none"> - INSTALACIÓN DE VÁVULAS ANTIRRETORNO EN LAS LÍNEAS
MENOS	TEMPERATURA	<ul style="list-style-type: none"> - POR PERTURBACIONES EN LAS ENTRADAS O EL REFLUJO. 	<ul style="list-style-type: none"> - MÁS NECESIDAD DE VAPOR EN EL EBULLIDOR. 	<ul style="list-style-type: none"> - EL FLUJO DE VAPOR SE REGULA CON LA TEMPERATURA DE PLATO SENSIBLE DE LA TORRE.

MÁS	PRESIÓN	- AUMENTO DEL NIVEL EN EL FONDO DE LA TORRE.	- PUEDE AUMENTAR LA PRESIÓN DEL GAS EN EL EBULLIDOR.	- PSV 05.
-----	---------	--	--	-----------

HAZOP STUDY

CLIENT: UVa PLANT: THF PLANT SYSTEM: DEST. PRIMARIA OPER. TYPE: NORMAL	NODE N°: 1 DRAWING: P&ID 103 EQUIPMENT/LINE: T-101 / RETORNO DE GAS DESDE RB-101 DESIGN INTENTION: COLUMNA DE DESTILACIÓN PRIMARIA	REV: 0 DATE: 3-SEP-2021 BY: JGL
---	---	---------------------------------------

PALABRA GUÍA	DESVIACIÓN	POSIBLES CAUSAS	CONSECUENCIAS	SALVAGUARDIAS
MÁS	FLUJO	- FALLO EN TV 04 Y AUMENTO DEL FLUJO DE VAPOR.	- AUMENTO DEL FLUJO DE GAS HACIA ARRIBA Y POSIBLE INUNDACIÓN DE T-101. - AUMENTO DE LA TEMPERATURA DE OPERACIÓN.	- INSTALACIÓN DE VENTEOS EN EL EBULLIDOR. - CONTROL DE LA TEMPERATURA EN EL PLATO SENSIBLE.
MENOS	FLUJO	- TAPONAMIENTO DE LA TUBERÍA. - FALLO EN TV 04 Y REDUCCIÓN DEL FLUJO DE GAS	- DISMINUCIÓN DEL FLUJO DE GAS Y POSIBLE GOTEÓ.	- CONTROL DE LA TEMPERATURA EN EL PLATO SENSIBLE.
MÁS	PRESIÓN	- AUMENTO DE LA PRESIÓN DE ENTRADA DE LÍQUIDO.	- AUMENTO DE LA PRESIÓN DE OPERACIÓN DE LA TORRE Y PELIGRO DE EXPLOSIÓN.	- PSV 05. - VENTEOS DE EMERGENCIA.
MÁS	TEMPERATURA	- AUMENTO DEL FLUJO DE MPS DE ENTRADA AL RB-101.	- PROBLEMAS EN MATERIALES. - CAMBIOS EN LA OPERACIÓN DE LA COLUMNA.	- CONTROL DE LA TEMPERATURA EN CABEZAS (FV 04). - CONTROL DE LA TEMPERATURA EN EL PLATO SENSIBLE (TV 04)