



Universidad de Valladolid



ESCUELA DE INGENIERÍAS
INDUSTRIALES

UNIVERSIDAD DE VALLADOLID

ESCUELA DE INGENIERIAS INDUSTRIALES

Grado en Ingeniería Química

**DISEÑO DE UNA PLANTA DE
PRODUCCIÓN DE ÓXIDO NITROSO
MEDIANTE DESCOMPOSICIÓN
TÉRMICA DE NITRATO AMÓNICO**

Autor:

Barrena García, Alejandro

Tutor(es):

Vaquerizo Martín, Luis
Ingeniería Química y
TMA/Ingeniería Química

Valladolid, Septiembre 2024



Índice

1	RESUMEN	3
2	ABSTRACT	4
3	INTRODUCCIÓN	6
4	OBJETIVOS	10
5	DIAGRAMA DE BLOQUES, DIAGRAMAS DE FLUJO (PFDs) Y BALANCES DE MATERIA Y ENERGÍA.....	11
6	ANÁLISIS DEL REACTOR DE PRODUCCIÓN DE ÓXIDO NITROSO	12
6.1	CINÉTICA EN EL REACTOR.....	15
6.2	BALANCE DE MATERIA EN EL REACTOR.....	19
6.3	BALANCE DE ENERGÍA EN EL REACTOR.....	21
6.4	HAZOP REACTOR.....	21
7	DESCRIPCIÓN DETALLADA DE LAS ETAPAS DE SEPARACIÓN	24
8	ANÁLISIS DE LA INFLUENCIA DE LAS PRINCIPALES VARIABLES DEL PROCESO	29
9	ANÁLISIS ECONÓMICO	32
10	INDICADORES SOSTENIBILIDAD.....	40
10.1	Material Intensity	40
10.2	E-Factor.....	41
10.3	Water consumption	41
10.4	Energy Intensity	42
10.5	Greenhouse Gas Emissions	44
11	CONCLUSIÓN.....	48
12	BIBLIOGRAFÍA.....	50
13	ANEXOS.....	52



ÍNDICE DE ILUSTRACIONES

Ilustración 1: Gráfica variación T^a reactor en función de N_v	14
Ilustración 2: Gráfica relación G_a con Re	15
Ilustración 3: Gráfica variación volumen reactor con conversión	17
Ilustración 4: Gráfica variación volumen reactor con conversión	17
Ilustración 5: VAN vs TIC.....	37
Ilustración 6: VAN vs Coste materia prima.....	38
Ilustración 7: VAN vs Coste utilities	38
Ilustración 8: VAN vs Precio venta N_2O	39

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1: Propiedades físicas N_2O	52
Tabla 2: Propiedades físicas NH_4NO_3	52
Tabla 3: Propiedades y características del NH_4NO_3 sólido y líquido.....	53
Tabla 4: Restricciones composición NH_4NO_3 líquido	54



1 RESUMEN

Este Trabajo de Fin de Grado se centra en el diseño y análisis de una planta de producción de óxido nitroso (N_2O) con una capacidad de 300 kg/h, utilizando la descomposición térmica del nitrato de amonio (NH_4NO_3) para ello, siendo necesario un flujo de 593,5 kg/h de este. Se destaca el papel crucial del reactor, con una conversión óptima del 99%.

El proyecto incluye una simulación completa de la planta y un análisis económico, donde el VAN es de 113 millones de USD y la TIR es del 60%.

En términos de sostenibilidad, se consideran parámetros como el Material Intensity (3,6 kg de materia prima/kg de producto), el E-factor (2,6 kg de subproductos/kg de producto), el consumo de agua ($1,6 \cdot 10^{-3} m^3/kg$), la intensidad energética (38,5 MJ/kg) y las emisiones de gases de efecto invernadero (11 kg CO_2 equivalente/kg).

El trabajo combina aspectos técnicos, económicos y ambientales.



2 ABSTRACT

This Final Degree Project focuses on the design and analysis of a nitrous oxide (N_2O) production plant with a capacity of 300 kg/h, using the thermal decomposition of ammonium nitrate (NH_4NO_3) for this purpose, being necessary a flow of 593.5 kg/h of it. The crucial role of the reactor is highlighted, with an optimum conversion of 99%.

The project includes a complete simulation of the plant and an economic analysis, where the NPV is 113 million USD and the IRR is 60%.

In terms of sustainability, parameters such as Material Intensity (3.6 kg feedstock/kg product), E-factor (2.6 kg by-products/kg product), water consumption ($1.6 \cdot 10^{-3} m^3/kg$), energy intensity (38.5 MJ/kg) and greenhouse gas emissions (11 kg CO_2 equivalent/kg) are considered.

The work combines technical, economic and environmental aspects.



PALABRAS CLAVE

- Diseño de procesos
- Descomposición térmica
- Cinética de reacción
- Absorción en contracorriente
- Recuperación de N_2O



3 INTRODUCCIÓN

El óxido nitroso (N_2O) es un compuesto químico de gran relevancia tanto en la industria como en la medicina como se muestra en (De Salud, 2010). Su producción a escala industrial se realiza principalmente mediante la descomposición térmica del nitrato de amonio (NH_4NO_3), un proceso que ha sido utilizado desde finales del siglo XIX. Este proceso ha evolucionado significativamente, desde su descubrimiento hasta su implementación industrial, pasando por diversas etapas de optimización en términos de eficiencia, seguridad y costos, inicialmente, se utilizaban hornos básicos para la descomposición térmica de nitrato de amonio, sin un control preciso de las condiciones de operación (IPNI, 2019). Con el avance de la tecnología, se introdujeron reactores de acero inoxidable con sistemas de control automático de temperatura y presión, lo que permitió optimizar el proceso y reducir riesgos. En décadas recientes, se ha incorporado el uso de reactores catalíticos, que mejoran la conversión del nitrato y reducen el consumo de energía. Además, las plantas modernas ahora cuentan con sistemas avanzados de tratamiento de gases, como scrubbers y captadores de emisiones, para minimizar los subproductos nocivos, lo que refleja un enfoque cada vez más sostenible y eficiente en el uso de utilities como vapor y electricidad (Brit. J. Anaesth, 1967).

La historia del óxido nitroso se remonta a su descubrimiento en 1772 por el químico inglés Joseph Priestley, quien lo identificó como un gas incoloro y levemente dulce. Sin embargo, no fue hasta principios del siglo XIX cuando Humphry Davy exploró sus propiedades anestésicas, lo que llevó a su uso en medicina (Real academia europea de doctores, 2021). Paralelamente, la industria química comenzó a interesarse en su producción a gran escala, principalmente por su aplicación en la fabricación de ácidos y en la síntesis de otros productos químicos. La evolución de los métodos de producción ha permitido que el óxido nitroso sea más accesible, pero también ha aumentado la necesidad de control y seguridad en su manejo, debido a su naturaleza como gas de efecto invernadero.

El nitrato de amonio, la materia prima utilizada en la producción de óxido nitroso es un compuesto que se obtiene en grandes cantidades y es ampliamente utilizado como fertilizante. Sin embargo, su manejo y almacenamiento presentan riesgos considerables debido a su potencial explosivo, lo que ha resultado en varios accidentes industriales a lo largo de la historia. Entre los incidentes más notorios, se encuentra la explosión en Texas City, Estados Unidos, en 1947, donde la descomposición incontrolada de nitrato de amonio a bordo de un barco causó una de las mayores tragedias



industriales registradas, con cientos de muertos y una devastación considerable.

Otro accidente más reciente ocurrió en Beirut, Líbano, el 4 de agosto de 2020, cuando una gran cantidad de nitrato de amonio almacenado en el puerto explotó, causando una devastación masiva en la ciudad. Este evento, que dejó más de 200 muertos, miles de heridos y una destrucción significativa, subraya los peligros asociados con el manejo inadecuado de este compuesto químico.

(Yue et al., 2023)

La producción global de óxido nitroso es relativamente modesta comparada con otros gases industriales, pero su importancia es considerable. En la medicina, se utiliza como anestésico y analgésico, mientras que en la industria es un intermediario en la fabricación de ciertos productos químicos y un propulsor en la industria alimentaria (Kumar et al., 2024). Además, su impacto ambiental es significativo, ya que es un gas de efecto invernadero con un potencial de calentamiento global 298 veces mayor que el del dióxido de carbono (CO_2) en un horizonte de 100 años, lo que hace que su producción y manejo requieran especial cuidado para minimizar las emisiones (Rodríguez-Caballero et al., 2015).

A lo largo de este estudio, se han considerado aspectos clave como la historia del proceso, la importancia del óxido nitroso en diversas aplicaciones, los riesgos asociados tanto a la materia prima como al producto final, y los precedentes históricos de accidentes en plantas de este tipo. Esta visión integral permite no solo optimizar el proceso de producción, sino también asegurar que se lleve a cabo de manera segura y sostenible.

A lo largo de la historia se ha cambiado drásticamente los métodos de producción de este compuesto, así como el compromiso medioambiental en su producción y la optimización económica del mismo.

Durante el siglo XIX, la producción de óxido nitroso se realizaba en pequeñas cantidades, principalmente en laboratorios, a través de la descomposición térmica de nitrato de amonio (NH_4NO_3). El proceso consistía en calentar nitrato de amonio a temperaturas moderadas (alrededor de $170\text{ }^\circ\text{C}$), lo que provocaba su descomposición en óxido nitroso y agua. Este método, aunque efectivo, se realizaba a una escala muy limitada y era propenso a incidentes debido a la naturaleza explosiva del nitrato de amonio (Ministerio Trabajo y Economía Social, 2018).

Con el avance de la Revolución Industrial, el óxido nitroso comenzó a ser producido a mayor escala, a medida que su demanda aumentaba en la



medicina y en la industria química. A principios del siglo XX, el proceso de descomposición térmica del nitrato de amonio fue refinado y optimizado para permitir una producción más segura y eficiente. Se desarrollaron reactores más avanzados, con mejores controles de temperatura y presión, lo que permitió reducir el riesgo de explosiones y mejorar el rendimiento del proceso.

Durante la primera mitad del siglo XX, la producción industrial de N_2O comenzó a establecerse en fábricas dedicadas a la síntesis de productos químicos, donde se utilizaba tanto como intermediario en la fabricación de otros compuestos como en aplicaciones especializadas, como en la propulsión de cohetes y aerosoles (Werling & Hörger, 2021).

En la segunda mitad del siglo XX y principios del siglo XXI, la producción de óxido nitroso continuó evolucionando, impulsada por avances en la tecnología de procesos y una creciente conciencia ambiental. El aumento en la regulación de emisiones y la necesidad de reducir el impacto ambiental de las industrias químicas llevaron al desarrollo de tecnologías para capturar y reciclar el óxido nitroso emitido durante su producción (Clark & Brunick, 2015). Las plantas modernas incorporan sistemas de control que minimizan las emisiones de N_2O , dado su potente efecto como gas de efecto invernadero (Christensen & Rousk, 2024).

Además, se han investigado y desarrollado métodos alternativos de producción que buscan minimizar el uso de nitrato de amonio o que emplean catalizadores para mejorar la eficiencia del proceso.

Mirando hacia el futuro, la producción de óxido nitroso sigue siendo un campo activo de investigación como se puede ver en (Lu et al., 2024), con enfoques innovadores que buscan mejorar aún más la sostenibilidad del proceso. Esto incluye el desarrollo de métodos de producción más ecológicos, el uso de energías renovables en el proceso de producción, y la implementación de tecnologías de captura y almacenamiento de carbono.

Este Trabajo de Fin de Grado se enfoca en el estudio y simulación de una planta química dedicada a la producción de óxido nitroso a partir de la descomposición térmica de nitrato de amonio. Inicialmente, se ha realizado un análisis exhaustivo del reactor, que es el corazón del proceso, para entender y optimizar las condiciones de operación que maximicen la eficiencia del proceso mientras se minimizan los riesgos. Posteriormente, se ha llevado a cabo la simulación de toda la planta, integrando cada etapa del proceso desde el manejo de la materia prima hasta la obtención y purificación del producto final.

En el anexo 1 se muestran varias tablas con propiedades del nitrato de amonio, tanto sólido como líquido y la pureza mínima necesaria para utilizarlo en este



proceso, así como las cantidades máximas de contaminantes que puede tener, estos últimos datos han sido obtenidos de (Asia Industrial Gases Association, 2014).



4 OBJETIVOS

El principal objetivo de este Trabajo de Fin de Grado es diseñar y analizar una planta con una producción de 300 kg/h de óxido nitroso (N_2O) a partir de la descomposición térmica del nitrato de amonio (NH_4NO_3), garantizando su eficiencia, viabilidad económica y sostenibilidad ambiental. Para alcanzar este objetivo general, se establecen los siguientes objetivos específicos:

Estudio del Proceso de Producción: analizar el proceso químico de descomposición térmica del nitrato de amonio para optimizar la conversión a N_2O y minimizar la generación de subproductos no deseados.

Diseño del Reactor y Equipos Principales: diseñar el reactor y los equipos críticos necesarios para el proceso, como intercambiadores de calor, columnas de destilación y sistemas de absorción, asegurando que cumplan con los requisitos de operación y seguridad.

Simulación de la Planta: realizar una simulación completa del proceso de producción utilizando software especializado, con el fin de integrar todas las etapas del proceso, desde la entrada de materia prima hasta la obtención del N_2O puro.

Análisis Económico: evaluar la viabilidad financiera del proyecto mediante un análisis de los costos de inversión, operación y utilidades, así como los ingresos potenciales derivados de la venta del N_2O .

Evaluación de la Sostenibilidad: analizar los impactos ambientales asociados a la producción de N_2O , incluyendo el consumo de recursos, emisiones de gases de efecto invernadero, y generación de residuos, y proponer medidas para minimizar dichos impactos.

Propuesta de Mejora: identificar posibles mejoras en el diseño y operación de la planta para aumentar su eficiencia y reducir los riesgos asociados, tanto desde el punto de vista económico como ambiental.



5 DIAGRAMA DE BLOQUES, DIAGRAMAS DE FLUJO (PFDs) Y BALANCES DE MATERIA Y ENERGÍA

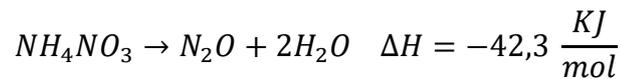
Tanto los PFDs como el diagrama de bloques del proceso y los balances de materia y energía se encuentran en el anexo 3.



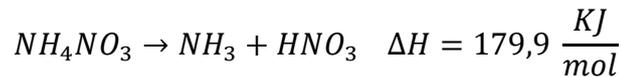
6 ANALISIS DEL REACTOR DE PRODUCCIÓN DE ÓXIDO NITROSO

En el reactor se producen varias reacciones. El nitrato de amonio funde a 169 °C y empieza a descomponerse a 190 °C a 1,2 barg, prácticamente la presión atmosférica.

A temperaturas superiores a 250 °C se producen dos reacciones predominantes, una de descomposición:



Y una de disociación:



La reacción de descomposición es exotérmica y la de disociación es endotérmica (Izato & Miyake, 2018).

La reacción de disociación empieza a ser apreciable a 210 °C y su importancia aumenta al hacerla la temperatura, el aumento de presión suprime la reacción de disociación.

Esta propiedad es de vital importancia en la seguridad del proceso ya que es la reacción de disociación la principal responsable de que el proceso se encuentre bajo control, ya que absorbe la energía liberada por la reacción de descomposición, al aumentar la presión en el reactor se suprime la reacción de disociación por lo que podría darse un runaway al no retirar la energía aportada por la de descomposición.

Si se dispone de una buena ventilación en el caso de que se produzca una pérdida de control en el reactor con un rápido aumento de temperatura la reacción de disociación controla el aumento de temperatura tanto como le es capaz absorbiendo para esta reacción el calor generado por la reacción exotérmica. Sin ventilación o siendo insuficiente la temperatura seguiría aumentando hasta consumir el nitrato de amonio o producirse una explosión debido a que la acumulación de gases produciría un aumento de presión y con este la inhibición de la reacción de disociación, como se ha comentado anteriormente.

Para diseñar el reactor necesario para este proceso se ha tomado el documento (Feick & Hainer, 1954) como base de estudio, aportando



expresiones matemáticas para el cálculo de las variables más importantes, como puede ser la constante de velocidad de reacción, la presión de disociación en función de la temperatura y el Nv.

Haciendo uso de la expresión facilitada en el documento citado se obtiene el siguiente valor para la velocidad de reacción en función de la temperatura a la que se dará la reacción, esta relación fue descubierta por Robertson.

$$k = 10^{13,8} \cdot e^{\frac{-40500}{R \cdot T}} = 0,000758 \text{ s}^{-1} \quad \text{siendo } T = 250 \text{ }^\circ\text{C}$$

La presión de disociación de esta reacción fue estudiada por Feick (Feick & Hainer, 1954), quien obtuvo la siguiente ecuación empírica para calcular este valor.

$$p = 10^{\frac{-4109}{T} + 8,502} = 44,427 \text{ mmHg} = 0,0592 \text{ bar} \quad \text{siendo } T = 250 \text{ }^\circ\text{C}$$

El termino Nv sirve para indicar la relación entre los moles reaccionados por descomposición y disociación, siendo las dos reacciones principales que se dan al descomponer térmicamente el nitrato de amonio. Es importante que este valor sea lo más pequeño posible, ya que los productos de la reacción de disociación son NH_3 y HNO_3 , compuestos que en las siguientes fases del proceso deberán ser separadas del N_2O , el producto deseado. Por otra parte, la reacción de descomposición solo genera H_2O a parte del N_2O , el agua es un compuesto fácil de recuperar y separar del resto en una corriente industrial.

$$Nv = \frac{\text{mol reacción disociación}}{\text{mol reacción descomposición}}$$

$$Nv = \frac{3}{2} \cdot \frac{Pd}{P - Pd} = 0,0768$$

Donde Pd es la presión de vapor de los productos de la reacción de disociación y P es la presión de operación en el reactor.

La presión de operación del reactor es de 1,216 bar y la temperatura 250 °C. Estas han sido escogidas con la premisa de que el valor de Nv sea lo mínimo posible, inhibiendo la producción de NH_3 y HNO_3 .

A continuación, se muestra gráficamente la variación del Nv en función de la temperatura y presión en el interior del reactor.

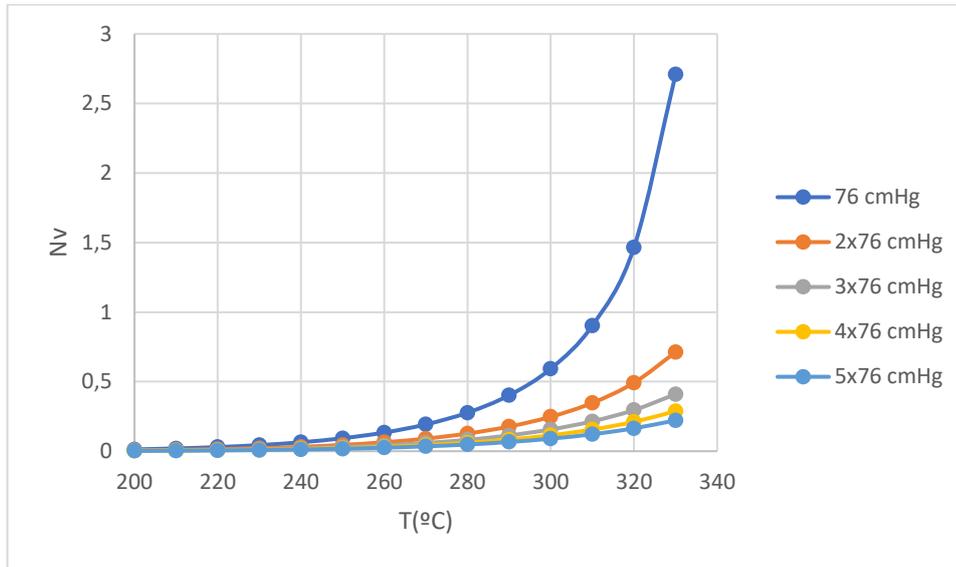


Ilustración 1: Gráfica variación T^a reactor en función de Nv

Como se puede comprobar un aumento de presión en el interior del reactor supone mayor moderación en el aumento del Nv , es decir, suprime la reacción de disociación provocando un runaway en el equipo. Los valores de presión y temperatura de operación en el reactor se han escogido teniendo en cuenta todos estos datos, escogiendo una zona estable donde un pequeño cambio no suponga una reacción exponencial en otra variable. Además, la presión no es muy alta ya que esto encarecería el reactor y por tanto el proceso.

Teniendo el valor de Nv se calcula el porcentaje de moles que interviene en cada una de las reacciones.

$$\%(dis) = \frac{Nv}{1 + Nv} = 0,0713$$

$$\%(des) = \frac{1}{1 + Nv} = 0,9287$$

6.1 CINÉTICA EN EL REACTOR

Dado que la reacción es prácticamente espontánea el tipo de reactor será uno tipo cesta, con una apertura en la parte superior, por donde saldrán los productos en forma de gas y una cavidad algo más grande en la parte inferior, donde irá llegando el nitrato de amonio y donde se producirá la reacción.

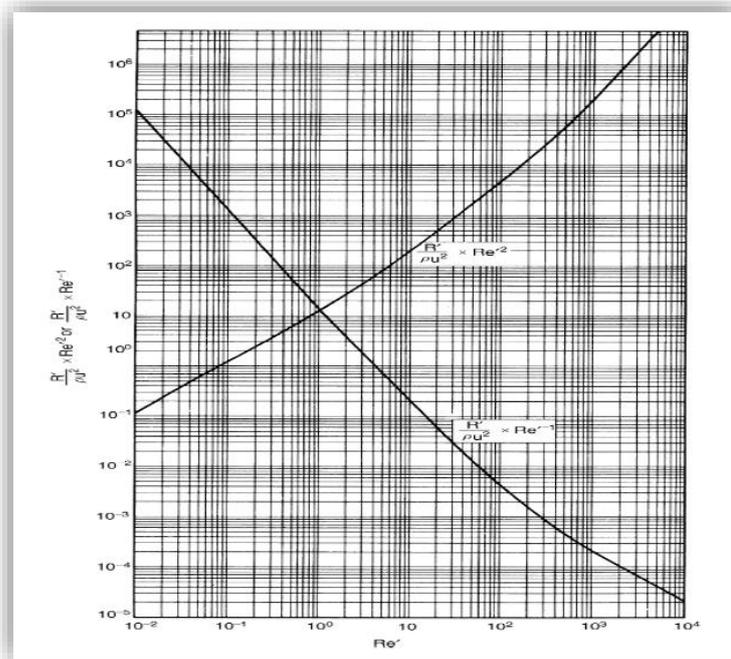


Ilustración 2: Gráfica relación Ga con Re

Se supone mezcla perfecta para los cálculos de la cinética ya que la reacción se da muy rápidamente y la subida de los gases en contracorriente con la llegada de la alimentación permite suponer que la mezcla y distribución equitativa de nitrato es prácticamente total, favorecido por estos movimientos.

El flujo volumétrico de materia prima se obtiene dividiendo el flujo masico del mismo entre la densidad del compuesto.

$$V_{flow} = \frac{\dot{m}_{feed}}{\rho_{NH_4NO_3}} = 0,45 \text{ m}^3/h$$

El flujo volumétrico de salida se calcula de la misma forma, pero con las propiedades de la corriente de salida.

$$V_{salida} = \frac{\dot{m}_{salida}}{\rho_{salida}} = 997,299 \text{ m}^3/h$$



Para calcular el volumen del reactor se parte de la expresión de la velocidad de reacción dentro del mismo (Babrauskas & Leggett, 2020).

$$-ra = k \cdot Fa = k \cdot Fa_0 \cdot (1 - Xa) \text{ mol/s}$$

Como se quiere calcular el volumen se calcula una nueva velocidad de reacción en función de este, al dividir el flujo entre el volumen se obtiene la concentración del compuesto llegando a la siguiente expresión.

$$-ra' = \frac{-ra}{V} = k \cdot Ca_0 \cdot (1 - Xa) \frac{\text{mol}}{\text{l} \cdot \text{s}}$$

Por último, para despejar el volumen del reactor se divide la expresión anterior entre $-ra$, la primera velocidad de reacción obtenida, como se puede comprobar al dividir ambas expresiones la unidad obtenida es de volumen.

En la expresión se agrupan algunos términos de la siguiente manera:

$$\frac{Fa_0 \cdot Xa}{Ca_0} = Vflow$$

Al dividir el flujo masico entre la concentración se obtiene el flujo volumétrico, como ahora todos los parámetros son conocidos se puede calcular el volumen del reactor.

$$V = \frac{Fa_0 \cdot Xa}{k \cdot Ca_0 \cdot (1 - Xa)} = \frac{Vflow}{k \cdot (1 - Xa)} = 16,503 \text{ m}^3$$

El motivo principal por el que se ha establecido una conversión del 99% es que el volumen del reactor depende de la conversión del nitrato, aumentando exponencialmente del 99% al 100%.

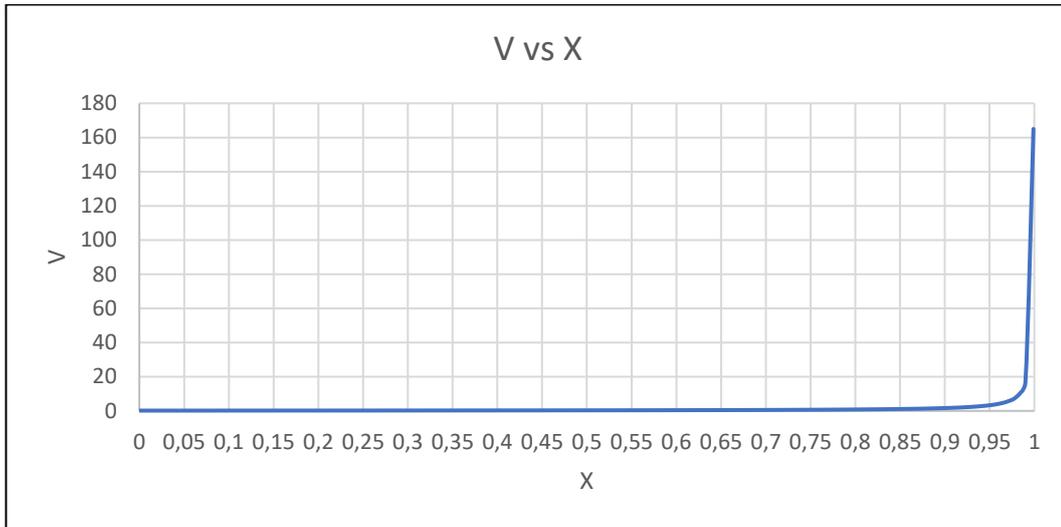


Ilustración 3: Gráfica variación volumen reactor con conversión

Como se trata de un cambio exponencial muy brusco a continuación se muestra la misma grafica solo hasta el 99% de conversión, que es el valor escogido en el proceso.

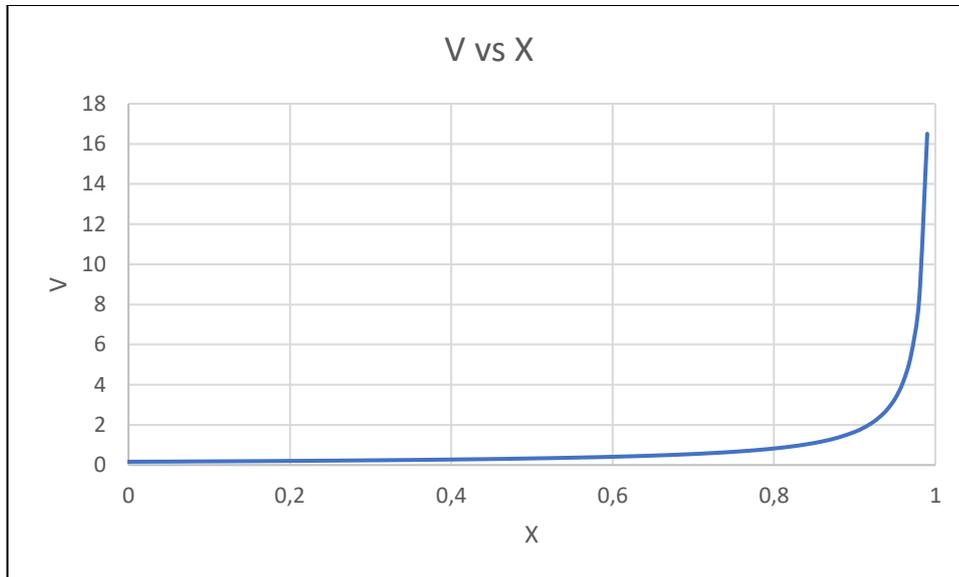


Ilustración 4: Gráfica variación volumen reactor con conversión

Por lo tanto, para aumentar ligeramente la conversión sería necesario ampliar drásticamente el volumen del reactor, lo que supone una gran inversión en equipo que no es rentable en relación al aumento de producto.



Para terminar esta sección se calculan los parámetros dimensionales de la salida del reactor, para ello se calculará la velocidad de caída límite, que al dividirla por el flujo volumétrico de salida nos aporta el valor del diámetro de salida necesario en este equipo.

$$Dp = 5 \cdot 10^{-2} mm$$

$$Ga = \frac{Dp^3 \cdot \rho \cdot (\rho_s - \rho) \cdot g}{\mu^2} = 5,4$$

$$\frac{2}{3} Ga = 3,6$$

Con este valor y haciendo uso de la siguiente grafica se obtiene el valor de Re_{∞} :

$$Re_{\infty} = 8$$

Y conociendo este valor y la fórmula de Re se calcula la velocidad de caída límite:

$$Re_{\infty} = \frac{Dp \cdot u_{\infty} \cdot \rho}{\mu}$$

$$u_{\infty} = \frac{Re_{\infty} \cdot \mu}{Dp \cdot \rho} = 1,79 \frac{m}{s} = 5,88 \frac{ft}{s}$$

Conociendo este valor y el flujo volumétrico de salida del reactor se calcula el diámetro de la sección de salida del reactor.

$$Area\ salida = \frac{Vsalida}{u_{\infty}} = 1,55 \cdot 10^{-1} m^2$$

$$Diametro\ salida = \sqrt{\frac{A\ salida \cdot 4}{\pi}} = 0,444 m = 17,47 inch$$



6.2 BALANCE DE MATERIA EN EL REACTOR

Tomando como base los datos de la empresa Linde (Linde, 2021b) se ha asignado una producción de N_2O de 300 kg/h y dividiendo este valor entre la masa molar del compuesto se obtiene la producción molar del mismo.

El 99% de la alimentación de NH_4NO_3 será por lo tanto la producción molar de N_2O ya que la relación molar de los compuestos en la reacción es 1:1 junto con los moles gastados en la otra reacción, calculado multiplicando los moles reaccionados en la primera reacción por el valor de N_v . Teniendo este valor se calcula el 100% de la alimentación molar mediante una regla de tres.

$$\dot{n} N_2O = \frac{300 \text{ g}}{80,043 \text{ g/mol}} = 6,816 \text{ kmol/h}$$

$$\dot{m} N_2O = 300 \text{ kg/h}$$

$$\begin{aligned} \dot{n} f NH_4NO_3 &= (\dot{n} N_2O + \dot{n} N_2O \cdot N_v) \cdot \frac{100}{99} = (6,81 + 6,81 \cdot 0,0768) \cdot \frac{100}{99} \\ &= 7,414 \text{ kmol/h} \end{aligned}$$

$$\dot{m} f NH_4NO_3 = \dot{n} f NH_4NO_3 \cdot M_m NH_4NO_3 = 593,470 \text{ kg/h}$$

Dado que la conversión de NH_4NO_3 es del 99% se tiene un flujo de salida del mismo:

$$\dot{n} s NH_4NO_3 = \dot{n} f NH_4NO_3 \cdot 0,01 = 0,074 \text{ kmol/h}$$

$$\dot{m} s NH_4NO_3 = \dot{n} s NH_4NO_3 \cdot M_m NH_4NO_3 = 5,934 \text{ kg/h}$$

Por los coeficientes estequiométricos la producción molar de agua será el doble que la de N_2O :

$$\dot{n} p H_2O = 2 \cdot \dot{n} N_2O = 13,633 \text{ kmol/h}$$

Además, como la alimentación de NH_4NO_3 es diluida al 85% en masa se tiene la siguiente cantidad de agua:

$$\dot{m} f H_2O = \frac{\dot{m} f NH_4NO_3 \cdot 0,15}{0,85} = 104,73 \text{ kg/h}$$

$$\dot{n} f H_2O = \dot{m} f H_2O \cdot M_m H_2O = 5,815 \text{ kmol/h}$$

Por lo tanto, el flujo masico y molar de agua a la salida del reactor serán las sumas de los flujos de alimentación y producido:



$$\dot{n}_s H_2O = 19,448 \text{ kmol/h}$$

$$\dot{m}_s H_2O = 350,265 \text{ kg/h}$$

La producción de HNO_3 se obtiene multiplicando la producción de por N_v .

$$\dot{n} HNO_3 = \dot{n} N_2O \cdot N_v = 0,524 \text{ kmol/h}$$

$$\dot{m} HNO_3 = \dot{n} HNO_3 \cdot M_m HNO_3 = 32,993 \text{ kg/h}$$

De la misma forma se calcula el flujo molar de NH_3 , obteniéndose el mismo flujo molar.

$$\dot{m} NH_3 = \dot{n} NH_3 \cdot M_m NH_3 = 8,917 \text{ kg/h}$$

Teniendo todos estos valores se puede calcular el flujo masico y molar de entrada y salida y comprobar que el balance de materia es correcto.

$$\begin{aligned} \dot{m} \text{ salida} &= \dot{m} N_2O + \dot{m}_s NH_4NO_3 + \dot{m}_s H_2O + \dot{m} NH_3 + \dot{m} HNO_3 \\ &= 698,15 \text{ kg/h} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \dot{n} \text{ salida} &= \dot{n} N_2O + \dot{n}_s NH_4NO_3 + \dot{n}_s H_2O + \dot{n} NH_3 + \dot{n} HNO_3 \\ &= 34,800 \text{ kmol/h} \end{aligned}$$

$$\dot{m} \text{ feed} = \dot{m}_f H_2O + \dot{m}_f NH_4NO_3 = 698,15 \text{ kg/h}$$

$$\dot{n} \text{ feed} = \dot{n}_f H_2O + \dot{n}_f NH_4NO_3 = 13,229 \text{ kmol/h}$$

Fracciones molares de la corriente de salida del reactor:

$$x(NH_4NO_3) = 0,002686$$

$$x(HNO_3) = 0,01916$$

$$x(NH_3) = 0,01916$$

$$x(N_2O) = 0,24944$$

$$x(H_2O) = 0,70955$$

Fracciones molares de la corriente de salida del reactor después del filtro:

$$x(NH_4NO_3) = 0,0000$$

$$x(HNO_3) = 0,01917$$

$$x(NH_3) = 0,01917$$

$$x(N_2O) = 0,24958$$

$$x(H_2O) = 0,71208$$



6.3 BALANCE DE ENERGÍA EN EL REACTOR

La reacción de disociación es endotérmica y la de descomposición exotérmica, realizando el balance de energía en el interior del reactor se comprueba que el valor total de calor es negativo, es decir, se libera calor en el proceso, por lo que se debe compensar refrigerando el equipo para que la temperatura en el interior se mantenga constante. De no ser así, el aumento de la temperatura provocaría un aumento del N_v , lo que supondría una regulación de la temperatura en el interior, ya que se desplazaría hacia la reacción endotérmica, pero la producción de NH_3 y HNO_3 aumentaría considerablemente, lo cual es contraproducente para el proceso.

$$Q_{disociacion} = \Delta H(dis) \cdot \dot{n}(AN) \cdot X \cdot \%(dis) = 26,153 \text{ kW}$$

$$Q_{descomposicion} = \Delta H(des) \cdot \dot{n}(AN) \cdot X \cdot \%(des) = -80,098 \text{ kW}$$

$$Q_{total} = Q_{disociacion} + Q_{descomposicion} = -53,945 \text{ kW}$$

En el anexo 2 se muestran los datos de las propiedades físicas de los compuestos necesarios para llevar a cabo estos cálculos, como las entalpías de reacción y las densidades de los compuestos, estos valores han sido obtenidos del NIST.

6.4 HAZOP REACTOR

El análisis HAZOP (Hazard and Operability Study) es una herramienta fundamental en la evaluación de riesgos y la identificación de problemas potenciales en procesos industriales complejos. En este apartado, se aplicará el estudio HAZOP al reactor de descomposición térmica del nitrato de amonio (NH_4NO_3) para la producción de óxido nitroso (N_2O).

Se evaluarán las variables críticas del proceso, como la temperatura, la presión y el nivel de material, con el objetivo de identificar desviaciones posibles y sus consecuencias. A través del uso de palabras guía como "más", "menos" y "sin", se explorarán diferentes escenarios de fallo, proponiendo medidas correctivas para garantizar la seguridad, la estabilidad del proceso y la eficiencia operativa del reactor.



Variable	Palabra Guía	Causa	Consecuencia	Acción Requerida
Temperatura	Más	Fallo en el sistema de refrigeración, reacción exotérmica no controlada	Aumento de temperatura, riesgo de runaway y sobrepresión, posible explosión	Mejorar la refrigeración, instalar sistema de monitoreo y control automático de temperatura
	Menos	Enfriamiento excesivo o entrada insuficiente de calor	Baja conversión de NH_4NO_3 , reducción de la producción de N_2O , aumento de subproductos (NH_3 y HNO_3)	Control preciso de la temperatura y ajustar el sistema de calentamiento de la alimentación

Variable	Palabra Guía	Causa	Consecuencia	Acción Requerida
Presión	Más	Acumulación de gases, fallo en el sistema de ventilación	Supresión de la reacción de disociación, riesgo de runaway y posible explosión	Mejorar el sistema de ventilación y monitoreo continuo de la presión, instalación PSV
	Menos	Fuga o fallo en el sistema de suministro	Reducción de la presión, aumento de la reacción de disociación, reducción de eficiencia	Reparación de fugas, ajuste del suministro y control preciso de la presión



Variable	Palabra Guía	Causa	Consecuencia	Acción Requerida
Nivel	Más	Exceso de alimentación de NH_4NO_3 o fallo en el control de entrada	Sobrecarga del reactor, riesgo de runaway, aumento de subproductos	Monitoreo continuo del nivel de alimentación, ajuste automático de entrada de materia prima
	Menos	Alimentación insuficiente de NH_4NO_3	Baja producción de N_2O , baja eficiencia	Ajuste en la alimentación de materia prima y control de nivel
	Sin	Fallo en los sensores de nivel	Imposibilidad de monitorear la cantidad de NH_4NO_3 , riesgo de descontrol en la reacción	Sistema de respaldo de sensores y alarmas de nivel



7 DESCRIPCIÓN DETALLADA DE LAS ETAPAS DE SEPARACIÓN

A la salida del reactor la composición molar de N_2O en la corriente es del 25%, valor que se queda muy lejos de la pureza necesaria para su comercialización, donde se alcanza una pureza superior al 98% (Linde, 2021a) por lo que es necesario aislar este componente de la corriente, es decir, eliminar de esta el resto de los componentes.

Las propiedades físicas del HNO_3 y el N_2O son similares por lo que es difícil separarlos mediante procesos físicos, por lo tanto, se decidió poner un absorbedor con agua en contracorriente para que de esta forma este componente fuese arrastrado por el agua y eliminarlo así de la corriente gaseosa.

Tras esta operación se obtiene una corriente de colas con un porcentaje superior al 97% de H_2O , una pequeña fracción de N_2O y trazas de NH_3 y HNO_3 . Una vez se obtiene esta corriente el objetivo principal es recuperar la máxima cantidad posible de N_2O para no desperdiciarlo en corrientes con mezcla de subproductos, para ello se dispone una primera columna de destilación que trabaja bajo unas condiciones no muy específicas ya que su finalidad es separar el agua del resto de compuestos, obteniéndose así una corriente de colas cuyo contenido en agua es superior al 99,5%, esta corriente podría ser recirculada a la torre para reutilizar este H_2O , sin embargo se opta por eliminar parte de esta corriente e introducir otra de agua pura para aumentar su composición en este compuesto, para ello se adecua la corriente mediante un intercambiador y una válvula a unas condiciones aptas para esta división y futura adición de H_2O . Tras este proceso, la corriente es recirculada al absorbedor con un 99,9% de agua prácticamente.

La corriente de cabezas que sale de esta primera columna es dividida en el condensador de la misma, recirculando al absorbedor una corriente con un contenido en N_2O del 79%, consiguiendo de esta manera devolver al proceso parte del N_2O que se quería recuperar.

La otra corriente que sale del condensador contiene los compuestos menos volátiles de la mezcla, es decir, en una gran proporción es agua, aunque aún contiene N_2O y los subproductos en proporciones similares.

Esta corriente es enviada a otra nueva columna de destilación con la misma finalidad que la primera, en este caso la corriente de colas generada que contiene principalmente agua y parte de HNO_3 sale del proceso para ser tratada en otra unidad. También se recircula al absorbedor la parte más volátil de la corriente que llega al condensador, esta contiene más de un 68% de N_2O por



lo que es conveniente que vuelva a pasar al proceso, volviendo recuperar parte del N_2O que salía en la corriente de colas del absorbedor.

Por último, el resto de la corriente que sale por cabezas de la segunda columna con un contenido en agua muy inferior a la de cabezas de la anterior torre y muy bajo porcentaje en N_2O , de hecho, hay mayor proporción de subproductos que de productos, se lleva a un flash donde se trata de recuperar el poco N_2O restante aun en esta corriente, para ello se adecua la corriente a las condiciones de presión necesaria a la temperatura de operación para que se produzca la separación de fases. La corriente de colas de este flash abandona el proceso y también debe ser tratada, en esta corriente sale 10 veces más cantidad de cada subproducto que de N_2O junto con el agua.

La corriente de cabezas se recircula al absorbedor habiendo conseguido en esta un 46% de N_2O aunque la fracción de NH_3 recirculada en este caso supera el 30%, lo que disminuye en parte la toxicidad de la corriente de colas del flash.

Por otro lado, es necesario tratar la corriente de cabezas del absorbedor, que tras estos procesos se convertirá en el producto final destinado a la venta. En esta parte del proceso la necesidad reside en aumentar la pureza de N_2O en la corriente, desperdiciando el mínimo N_2O posible.

En esta corriente la concentración de HNO_3 es muy baja resultado del buen funcionamiento del absorbedor, que cumple su función de separar de la corriente de alimentación este ácido. Por lo que para aumentar la pureza de la corriente se debe separar el N_2O del agua y del NH_3 , esta separación se va a llevar a cabo mediante el uso del flash, dado que el N_2O es mucho más volátil que el resto de los compuestos, siendo su punto de ebullición a la presión ambiental unos 55 °C más bajo que el del NH_3 , que es el siguiente compuesto más volátil.

Se adecuan las condiciones térmicas y de presión de la corriente haciendo uso de un compresor y un intercambiador de calor para que el N_2O pase a fase gaseosa y se pueda separar correctamente en el KO drum, la corriente de colas de este está formada principalmente por agua, con una pequeña cantidad de N_2O y trazas de los subproductos, esta corriente sale del proceso y es necesario tratarla debido a su toxicidad.

La corriente de cabezas apenas supera el 96% en composición de N_2O , esta pureza no es suficiente por lo que se repite este proceso dos veces más, pasando en cada una de las ocasiones por otro compresor, intercambiador de calor y KO drum, en este mismo sentido. En ambos casos las corrientes de colas del KO drum salen del proceso teniendo que ser tratadas.



La corriente de cabezas del último KO drum tiene un 98,15% molar y un 99,3% en masa de N_2O , valor aceptable para su comercialización y superando el 99% en composición del óxido nitroso vendido por la empresa Linde, de la que se han tomado algunas referencias a la hora de estudiar el proceso.

En el anexo 2.1 se muestran los valores de operación, así como el flujo en distintas unidades para cada corriente del proceso.

En el anexo 2.2 se muestra la composición molar de cada corriente del proceso.

El proceso comienza con un flujo de 593,47 kg/h de materia prima (NH_4NO_3) fundida que entra en el reactor, en este se producen las reacciones pertinentes, formándose H_2O , N_2O , NH_3 y HNO_3 , como la conversión no alcanza el 100% en esta corriente de salida se encuentran restos del NH_4NO_3 , esta corriente se encuentra a 250 °C y 1,216 barg, antes de continuar con el proceso esta corriente atraviesa un filtro de partículas selectivo para el NH_4NO_3 , eliminándolo de la corriente y evitando de esta manera que el compuesto genere interferencias o problemas a lo largo del resto del proceso.

Esta corriente (1) ya libre de NH_4NO_3 atraviesa el intercambiador de calor E-100 saliendo de él a 25 °C y 1,206 barg, el siguiente equipo por el que pasa la corriente (2) es el absorbedor A-100, donde agua a contracorriente absorbe parte de los compuestos de la corriente, tratando de eliminar el H_2O , NH_3 y HNO_3 de la misma, la corriente (3) que sale por la parte alta de este equipo, que sale como gas con una temperatura de 42,88 °C y 0,15 barg, donde más de un 91% de la composición de la misma es N_2O , esta pasa por el compresor K-100 saliendo del mismo a 137,91 °C y 2,128 barg hasta llegar al intercambiador de calor E-101, del cual sale a 40 °C y 2,128 barg. La corriente (5) llega a un nuevo equipo, un flash, el D-100 donde la parte líquida y gaseosa se separan, en estos equipos las propiedades de la corriente no varían ya que su única función es separar las corrientes en distintas fases. La corriente (6) que abandona el equipo por la parte baja del mismo se lleva a una unidad de tratamiento donde se separa el HNO_3 y NH_3 , los cuales tienen una regulación por su toxicidad.

La corriente (7) que sale por la parte alta del D-100 pasa por el compresor K-101, saliendo del mismo a 133,51 °C y 7,467 barg antes de pasar por el intercambiador E-102 que desciende la temperatura hasta los 40 °C manteniendo constante la presión, esta corriente (9) llega a otro flash, el D-101, cuya corriente (10) de colas sigue el mismo proceso que la del anterior flash, es decir se manda a una unidad de tratamiento y la corriente de cabezas atraviesa el compresor K-102, abandonando el mismo a 133,23 °C y 21,883



barg y nuevamente pasa por un intercambiador de calor que provoca un descenso de la temperatura hasta los 40 °C manteniendo constante la presión.

Esta corriente (13) llega al flash D-102, el último en esta parte del proceso, donde la corriente de colas se junta con la de los dos flashes anteriores y es enviada a la unidad de tratamiento. La corriente (15) que sale por la parte alta del equipo pasa por un último compresor, el K-103, del cual sale a 114,25 °C y 50 barg y tras pasar por el intercambiador E-104 se tiene la corriente final (17) de producto con las especificaciones necesarias para su venta o almacenamiento, 21,05 °C y 50 barg.

Las condiciones de la corriente antes de llegar a cada flash están impuestas por el compresor e intercambiador por el que pasa previamente teniendo en cuenta la volatilidad de cada especie en la corriente y queriendo obtener una corriente con la máxima composición de N₂O posible, es decir, es el que se pretenda que salga por cabezas en todo momento.

La corriente (18) que sale por la parte baja del absorbedor A-100 cuya composición es más del 99% H₂O sigue un proceso completamente distinto donde se pretende eliminar el máximo NH₃ y HNO₃ posible.

Esta corriente (18) pasa por la bomba P-100 para aumentar la presión hasta los 0,5 barg manteniendo la temperatura constante y llega a la primera torre de destilación, la C-100, la corriente (27) de salida de colas de esta, la cual se encuentra a 111,61 °C y 0,5 barg pasa por el intercambiador de calor E-107 disminuyendo la temperatura hasta 40 °C y después por la válvula V-101 para disminuir la presión hasta 0,15 barg, esta corriente (29) se divide en dos, separando un 5% de la corriente para enviarlo a una unidad de tratamiento como el resto de corrientes de salida de colas de los equipos, el otro 95% del flujo se une mediante la válvula a un flujo de agua pura (32) de 475,2 kg/h que entra en el proceso, esta corriente resultante con un alto flujo de agua es recirculada a la parte alta del absorbedor A-100 para continuar arrastrando compuestos en el equipo.

La corriente de cabezas de la columna de destilación C-100 que sale a 33,45 °C y 0,5 barg se divide en dos, un 7% de la corriente se recircula a la parte alta del absorbedor A-100 para reintroducir el N₂O de la corriente en la operación. El otro 97% de la corriente pasa por la bomba P-101 y sale de la misma con las siguientes propiedades, 33,5 °C y 5 barg y se dirige a la siguiente y última columna de destilación, la C-101, cuya corriente (22) de colas, a 158,91 °C y 5 barg, se une al resto con composiciones parecidas para ser enviada a la unidad de tratamiento.



En la corriente (23) de cabezas de la C-101, a 26,77 °C y 5 barg, se vuelve a realizar un bypass, recirculando al absorbedor A-100 un 21% en flujo masico para devolver al proceso el alto flujo de agua que la compone, el 79% restante pasa por la válvula V-100 disminuyendo la presión hasta 0,15 barg y la temperatura a 3,29 °C, propiedades que producen una separación de fases para dividir esta en dos corrientes distintas al pasar por el flash D-103, la corriente (25) de colas una vez más se envía a una unidad de tratamiento junto al resto de corrientes que se ha especificado. La corriente (26) de cabezas se recircula a la parte alta del absorbedor A-100 para reintroducir los compuestos en el proceso.



8 ANALISIS DE LA INFLUENCIA DE LAS PRINCIPALES VARIABLES DEL PROCESO

En este apartado se va a investigar qué consecuencias y riesgos tiene sobre la producción el desajuste en algunas de las variables de operación más importantes del proceso.

- Reacción en el Reactor

Temperatura Elevada o Baja: Si la temperatura del reactor se eleva demasiado por encima de los 250 °C, podría acelerar la descomposición del NH_4NO_3 aumentando el riesgo de una reacción descontrolada, que podría generar un exceso de N_2O o productos no deseados, como óxidos de nitrógeno más peligrosos (NO_x). Por otro lado, si la temperatura es demasiado baja, la reacción podría ser incompleta, dejando un exceso de NH_4NO_3 sin reaccionar, lo que podría afectar las siguientes etapas y reducir la eficiencia general del proceso.

Presión Incorrecta: Una presión mayor a los 1,216 barg podría conducir a una sobrecarga en el sistema, afectando la seguridad estructural del reactor. Presiones más bajas podrían reducir la tasa de reacción, lo que implicaría una conversión incompleta del NH_4NO_3 .

Como ya se ha comentado en otros apartados un aumento de la presión inhibiría la reacción de disociación pudiendo provocar un runaway.

- Enfriamiento en el Intercambiador de Calor E-100

Enfriamiento Insuficiente: Si la temperatura no se reduce adecuadamente a 25 °C, el exceso de calor podría comprometer la eficiencia del absorbedor A-100, reduciendo la capacidad del agua de absorber los compuestos volátiles. Esto podría llevar a una menor eliminación de NH_3 , H_2O , y HNO_3 , afectando la pureza del N_2O en la corriente gaseosa.

Presión Baja: Si la presión cae significativamente por debajo de los 1,206 barg, podría ocasionar problemas en el flujo del proceso, ya que podría provocar flujos indeseados al darse tal diferencia de presión, afectando la capacidad del absorbedor.

- Absorción en el Absorbedor A-100

Fallo en la Absorción: Si la absorción no es efectiva, debido a un mal diseño o a variaciones en la presión (por ejemplo, más baja de 0,15 barg), se permitiría que NH_3 y HNO_3 pasen a la corriente de N_2O , contaminando el producto final y generando riesgos de toxicidad.



Temperatura Elevada en la Salida: Si la temperatura a la salida del absorbedor supera significativamente los 42,88 °C, la volatilidad de los compuestos residuales podría aumentar, lo que reduciría la eficiencia de la separación y afectaría la calidad del N₂O.

- Compresión y Enfriamiento Posterior

Descontrol en la Compresión (K-100, K-101, K-102, K-103): Una presión excesivamente alta en los compresores podría llevar a fallos mecánicos, aumento de temperatura no deseada (por encima de los 137,91 °C), y problemas de seguridad. Si la presión es demasiado baja, podría no alcanzarse la energía suficiente para realizar las separaciones de fases en los flashes.

Enfriamiento Insuficiente en Intercambiadores (E-101, E-102, E-103, E-104): Si los intercambiadores no bajan la temperatura a los 40 °C especificados, las fases podrían no separarse correctamente en los flashes, lo que afectaría la calidad del N₂O y dificultaría el control de las corrientes.

- Separación de Fases en los Flashes (D-100, D-101, D-102)

Mala Separación de Fases: Si los flashes no logran una buena separación, por ejemplo, debido a una incorrecta relación de temperatura-presión, las corrientes de cabezas podrían arrastrar líquidos no deseados o no separar correctamente el N₂O, afectando la pureza del producto final.

- Circuito de Agua en el Absorbedor

Descontrol en la Recirculación: Si no se recircula adecuadamente el agua al absorbedor, el proceso podría perder eficiencia, ya que el agua no sería capaz de absorber correctamente los compuestos, afectando todas las corrientes subsiguientes.

- Destilación en Columnas (C-100 y C-101)

Problemas en la Destilación: Si las condiciones de operación en las columnas C-100 y C-101 no se mantienen controladas (especialmente la temperatura y presión), podría haber una destilación ineficaz, resultando en una mezcla de compuestos indeseados en las corrientes de producto y recirculación.

- Pureza de la materia prima



Además de las reacciones principales se pueden producir algunas secundarias dando como productos nitrógeno y óxidos de nitrógeno, en función de la composición de la materia prima utilizada.

Compuestos clorados: la descomposición de nitrato de amonio en fase líquida es más rápida y puede tener lugar a temperaturas por debajo del punto de fusión cuando el nitrato de amonio contiene componentes clorados o el agua añadida contiene iones de cloro. La reacción en presencia de componentes clorados produce principalmente nitrógeno.

Las sustancias que contienen hierro expuestas a componentes clorados en presencia de una alta humedad y/o altas temperaturas pueden producir corrosión en los equipos.

Corrosión: las soluciones de nitrato de amonio son muy corrosivas para la mayoría de los metales, como cobre, zinc, aceros o latón, incluso el acero inoxidable tras estar expuesto a este tipo de soluciones por largos periodos de tiempo se descompone transfiriendo iones de hierro a la solución. La adición de fosfatos de amonio ($\text{NH}_4\text{H}_2\text{PO}_4$) o ácido fosfórico (H_3PO_4) en el nitrato de amonio limita esta reacción.



9 ANALISIS ECONOMICO

Este análisis no solo determina la viabilidad financiera del proyecto, sino que también guía decisiones clave durante su ciclo de vida, desde la fase de diseño hasta la operación y el mantenimiento. Un balance económico exhaustivo permite evaluar el costo total de inversión, los costos operativos, y los posibles ingresos derivados de la producción, ofreciendo una visión clara sobre la rentabilidad y sostenibilidad a largo plazo.

En este caso se ha partido de los datos económicos proporcionados por el software 'Aspen Hysys' que se muestran en la tabla a continuación:

Total Capital Cost	9,69	MM USD
Total Operating Cost	20,26	MM USD/Year

El primer valor indica el precio de la inversión inicial para la puesta en marcha de la planta, es decir, gastos en infraestructura, maquinaria, diseño, ingeniería, permisos, etc.

A la hora de llevar a cabo el análisis económico este valor se multiplica por el factor de Lang que tiene un valor de 5 por lo que este parámetro tendrá un valor de 48,48 MM USD.

El segundo corresponde al coste de operación de la planta, esto incluye salarios, mantenimiento, costos de los servicios auxiliares y de las materias primas.

El coste de la materia prima es de 14,6 MM USD.

El coste de los servicios auxiliares es de 2,06 MM USD.

El coste de los salarios es de 3,6 MM USD.

Se han supuesto 330 días de producción en la planta, lo que equivale a 7920 horas.

También es necesario conocer el coste de la materia prima que se va a utilizar a lo largo de un año. Para conocer este valor es necesario saber el precio por peso de la materia prima y el flujo masico de materia prima utilizada.

La siguiente tabla muestra estos datos descritos sobre la materia prima:



NITRATO	precio compra	3	USD/kg
	cantidad	593,47	kg/h
	horas producción	7920	h/año
	coste compra	14,1	MM USD/año

El dato más relevante es el del precio de venta del producto final, donde se ha encontrado un amplio rango de precios, que varían principalmente por el momento del año y la competencia de venta del producto.

Este precio oscila entre los 12 y los 20 USD/kg, por lo que se va a estudiar el balance económico de la planta en el caso del máximo, mínimo y valor medio. Para cada una de estas situaciones se va a calcular el beneficio neto anual, el ROI (retorno de inversión) y el PO (periodo de recuperación).

El beneficio neto anual es la cantidad de dinero que una empresa retiene después de haber pagado todos sus gastos, incluyendo costos operativos, impuestos, intereses y cualquier otro tipo de gasto. En esencia, es la ganancia que queda disponible para los accionistas o para reinvertir en el negocio al final del año fiscal.

$$\text{Beneficio neto} = \text{Ingresos totales} - \text{Costes totales}$$

El ROI es una métrica financiera que mide la rentabilidad de una inversión en relación con su costo.

Es una herramienta esencial para evaluar la eficiencia de una inversión y comparar su rentabilidad con otras alternativas.

$$ROI = \frac{\text{beneficio neto}}{\text{Coste inversión}} \cdot 100$$

El PO es una métrica que indica el tiempo que tomará recuperar la inversión inicial a través de los flujos de caja netos generados por el proyecto. En otras palabras, es el tiempo necesario para que los ingresos acumulados igualen el costo de la inversión, es una medida sencilla de riesgo que no considera el valor temporal del dinero.

$$PO = \frac{\text{Inversión inicial}}{\text{Beneficio neto}}$$



Precio de venta: 12 USD/kg.

N2O	precio venta N ₂ O	12	USD/kg
	producción	300,3	kg/h
	horas producción	7920	h/año
	beneficio venta	28,5	MM USD/año

Beneficio (MM USD)	9,78
ROI (%)	20
PO (años)	4,9

Precio de venta: 16 USD/kg.

N2O	precio venta N ₂ O	16	USD/kg
	producción	300,3	kg/h
	horas producción	7920	h/año
	beneficio venta	38	MM USD/año

Beneficio (MM USD)	19,3
ROI (%)	39,8
PO (años)	2,5

Precio de venta: 20 USD/kg.

N2O	precio venta N ₂ O	20	USD/kg
	producción	300,3	kg/h
	horas producción	7920	h/año
	beneficio venta	47,57	MM USD/año

Beneficio (MM USD)	28,8
ROI (%)	59,4
PO (años)	1,7

A la vista está que al aumentar el precio de venta del producto el ROI asciende y el PO disminuye ya que es inversamente proporcional al ROI.



Esto indica, como es obvio, que al aumentar el precio de venta del producto el tiempo que se tarda en recuperar la inversión disminuye.

Para este estudio se han elegido los valores obtenidos con el precio medio, ya que se supone que será el valor medio de venta del producto a lo largo del año.

Con el precio de venta mas alto el PO es demasiado pequeño, aunque esto es bueno para la planta ya que significa que se recuperaría la inversión más rápido el PO típico de estas plantas esta entre 3 y 5 años por lo que el valor de venta del óxido nitroso deberá estar entre los 16 y 20 USD/kg.

Suponiendo que se desea recuperar la inversión en 4 años se puede calcular el precio de venta del oxido. Para ello se puede interpolar entre los valores conocidos.

$$\text{Precio venta } N_2O (PO = 4) = 13,6 \frac{USD}{kg}$$

Los siguientes cálculos se realizan en base a la vida útil de la instalación, por lo que para este caso y teniendo en cuenta la de otros proyectos ya existentes se contarán como 25 años.

El VAN es una medida que calcula el valor presente de los flujos de caja futuros de un proyecto, descontados a una tasa de interés específica. El VAN ayuda a determinar si un proyecto es rentable o no, un VAN positivo indica que el proyecto generará más valor del que costará, mientras que un VAN negativo sugiere que el proyecto no es rentable.

Se calcula el VAN para cada uno de los precios de venta del N2O:

$$VAN = \sum_1^t \frac{Ct}{(1 + 0,1)^t} - Inversion\ Inicial$$

$$Ct = Ingresos - Costos\ operativos$$

12 USD/kg:

$$Ct = 28540512 - 20260000 = 8280512$$

$$VAN = \sum_1^{t=25} \frac{8280512}{(1 + 0,1)^t} - 48476900 = 26,69\ MM\ USD$$

16 USD/kg:

$$Ct = 38054016 - 20260000 = 17794016$$

$$VAN = \sum_1^{t=25} \frac{17794016}{(1 + 0,1)^t} - 48476900 = 113\ MM\ USD$$

20 USD/kg:

$$Ct = 47567520 - 20260000 = 27307520$$

$$VAN = \sum_1^{t=25} \frac{27307520}{(1 + 0,1)^t} - 48476900 = 199,4 \text{ MM USD}$$

Como se puede comprobar en todos los casos el VAN es positivo por lo que aunque se venda al precio mas bajo del mercado se estaría rentabilizando la planta.

El TIR es la tasa que hace que el VAN sea 0, se puede expresar de la siguiente forma:

$$0 = \sum_1^t \frac{Ct}{(1 + TIR)^t} - Inversion Inicial$$

De esta forma se obtiene la tasa óptima para el modelo, comprobando de esta forma la viabilidad económica del proyecto con la tasa supuesta inicialmente.

Estos cálculos han sido realizados con el comando 'solver' de Excel.

12 USD/kg:

$$0 = \sum_1^{t=25} \frac{8280512}{(1 + TIR)^t} - 48476900$$
$$TIR \approx 20 \%$$

16 USD/kg:

$$0 = \sum_1^{t=25} \frac{17794016}{(1 + TIR)^t} - 48476900$$
$$TIR \approx 60 \%$$

20 USD/kg:

$$0 = \sum_1^{t=25} \frac{27307520}{(1 + TIR)^t} - 48476900$$
$$TIR \approx 95 \%$$

El TIR para precios por encima de los 13,5 USD/kg pasa del 30 % que es un valor que ya esta considerado como alto, por lo que los precios superiores supondrían una altísima rentabilidad de la planta.

Se ha realizado un analisis de sensibilidad sobre el VAN teniendo en cuenta las siguientes variables: TIC (Total Investment Cost), coste de la materia prima,

coste de las utilities, precio de venta del N_2O . Para comprobar la influencia de cada una de ellas de ha variado su valor un 25% tanto positiva como negativamente.

De esta forma se obtienen graficas de como varia el valor del VAN al modificar el valor de estas variables y así se puede comprobar cuales tienen mayor o menor influencia sobre este.

A continuación, se muestran las gráficas obtenidas en cada caso:

TIC (Total Investment Cost)

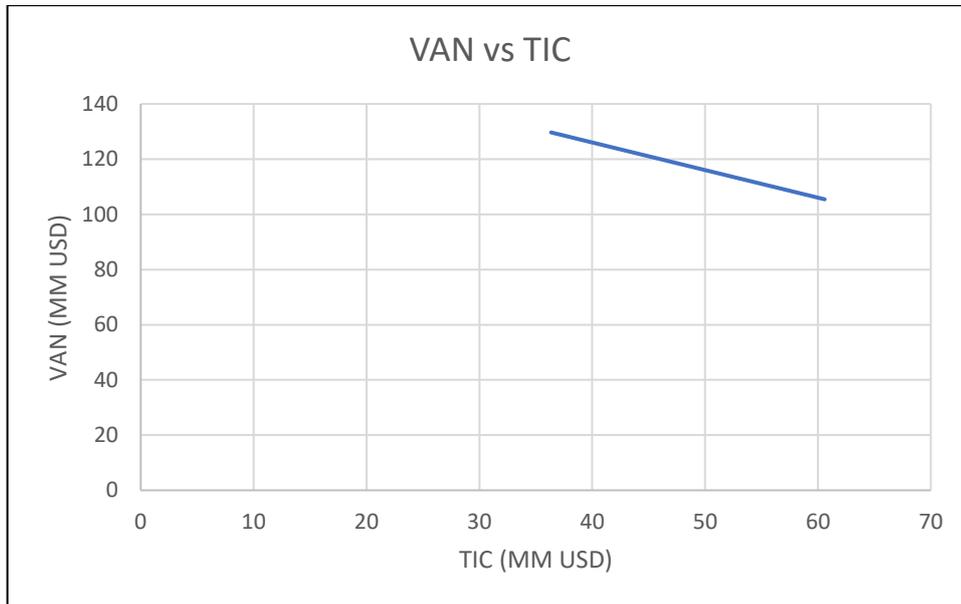


Ilustración 5: VAN vs TIC

Pendiente: -1

Coste de la materia prima

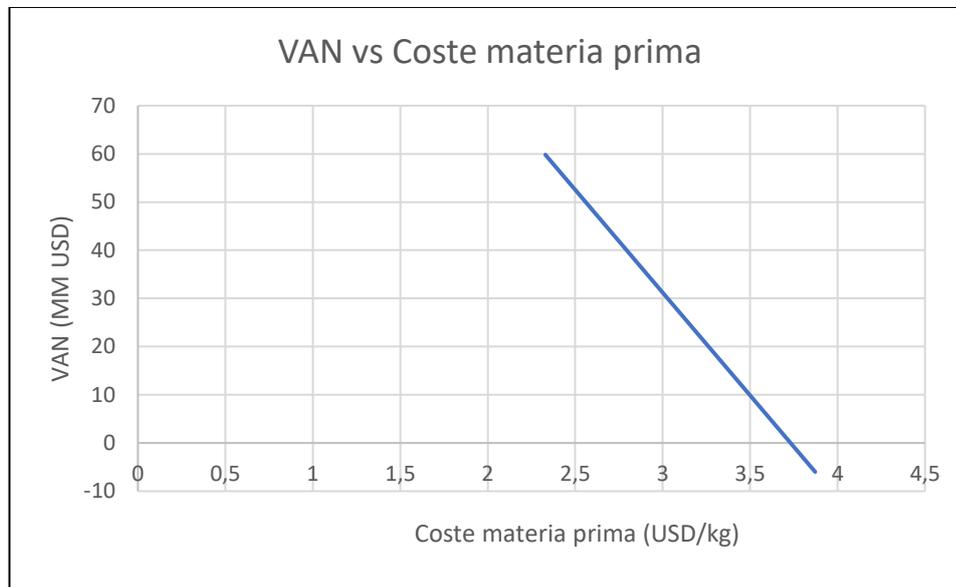


Ilustración 6: VAN vs Coste materia prima

Pendiente: -42,7

Coste de las utilities

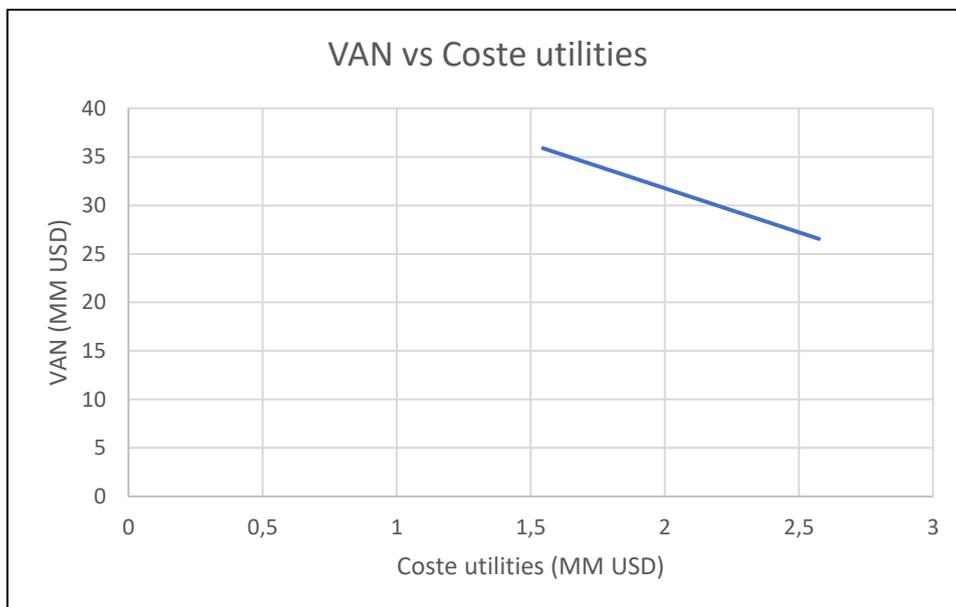


Ilustración 7: VAN vs Coste utilities

Pendiente: -9

Precio de venta del N_2O

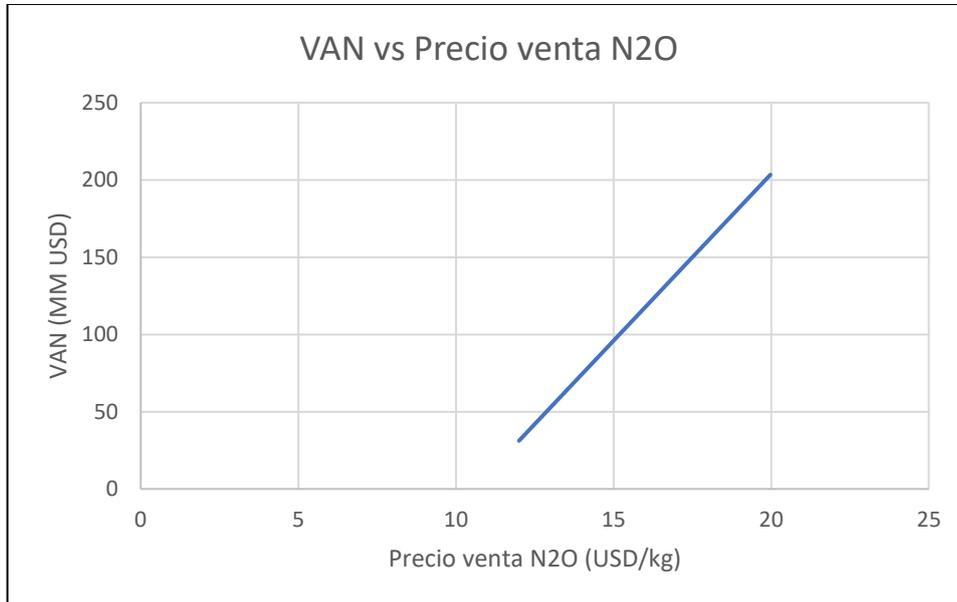


Ilustración 8: VAN vs Precio venta N_2O

Pendiente: 21,6

Como se puede comprobar y era de esperar la única variable que provoca un aumento del VAN al aumentar su valor es el precio del N_2O , que como es lógico aumenta el valor de este al vender el producto a mayor precio. Además, el efecto de esta es muy notable ya que el valor de la pendiente es muy alto.

Por otro lado, las otras tres variables consideradas para el estudio tienen pendiente negativa, es decir, disminuyen el VAN al aumentar su valor, es lógico ya que estas variables hacen referencia a costos asociados a la producción del N_2O , al aumentar estos sin variar el precio de venta del mismo el beneficio se minimiza.

Dentro de estas la más influyente es el precio de la materia prima, que tiene una pendiente con un valor negativo muy alto, sobre todo en comparación con las otras dos.

Se puede concluir que dentro de lo que era lógico esperar la diferencia de la influencia del coste de la materia prima respecto del TIC y el precio de las utilities es reseñable, sobre todo respecto del TIC, el cual tiene una influencia prácticamente despreciable sobre el VAN. Esto se debe a que al tratarse de una inversión inicial solo afecta al primer año, al contrario que el resto de las variables que afectan durante todo el ciclo de vida de la planta.



10 INDICADORES SOSTENIBILIDAD

En la actualidad, la sostenibilidad se ha convertido en un pilar fundamental en la operación de plantas químicas y otros procesos industriales. Este concepto no solo se refiere a la viabilidad económica y eficiencia operativa, sino también a la minimización de los impactos ambientales y al uso responsable de los recursos naturales. En este contexto, los indicadores de sostenibilidad juegan un papel crucial. Estos indicadores proporcionan métricas cuantificables que permiten evaluar y comparar el desempeño ambiental de un proceso, facilitando la identificación de áreas de mejora y la toma de decisiones informadas para optimizar la sostenibilidad. Incorporar estos indicadores en la simulación y el diseño de plantas químicas es esencial para asegurar que los procesos industriales no solo sean económicamente viables, sino también respetuosos con el medio ambiente y socialmente responsables.

10.1 Material Intensity

Este indicador mide la cantidad de materias primas necesarias para producir una unidad de producto útil. Se desea que el valor de este indicador sea bajo, ya que indica un uso más eficiente de los recursos naturales, reduciendo así la presión sobre las reservas de materias primas y minimizando el impacto ambiental asociado a su extracción y procesamiento.

$$MI = \frac{\text{kg materia prima}}{\text{kg producto}}$$

$$\text{kg materia prima} = \text{kg } H_2O + \text{kg } NH_4NO_3$$

$$\text{kg materia prima} = 475,198 + 593,47$$

$$\text{kg materia prima} = 1068,668 \text{ kg}$$

$$MI = \frac{1068,668 \text{ kg}}{300,29 \text{ kg}}$$

$$MI = 3,559$$



10.2 E-Factor

Se refiere a la cantidad de residuos generados por cada kilogramo de producto útil. Este indicador es crucial porque una menor generación de residuos no solo reduce el impacto ambiental del proceso, sino que también puede significar una reducción de costos asociados al tratamiento y disposición de estos residuos. Es una métrica directa de la eficiencia y sostenibilidad del proceso.

$$EF = \frac{kg \text{ subproducto}}{kg \text{ producto}}$$

$$kg \text{ subproducto} = kg_{'6'} + kg_{'10'} + kg_{'14'} + kg_{'22'} + kg_{'25'}$$

$$kg \text{ subproducto} = 7,694 + 2,501 + 1,432 + 682,379 + 80,879$$

$$kg \text{ subproducto} = 774,885 \text{ kg}$$

$$EF = \frac{774,885 \text{ kg}}{300,29 \text{ kg}}$$

$$EF = 2,581$$

10.3 Water consumption

Este indicador cuantifica la cantidad de agua dulce consumida en el proceso por cada kilogramo de producto útil. En un contexto donde el acceso al agua es cada vez más limitado, minimizar el consumo de agua es esencial para la sostenibilidad. Un bajo consumo de agua reduce la presión sobre los recursos y disminuye los costos operativos relacionados con el abastecimiento y tratamiento del agua.

$$WC = \frac{m^3 \text{ agua}}{kg \text{ producto}}$$

$$WC = \frac{0,476 \text{ m}^3}{300,29 \text{ kg}}$$

$$WC = 1,586 \cdot 10^{-3} \frac{m^3}{kg}$$

Este valor es muy bajo en comparación con otros proyectos semejantes, que suelen tener un valor entre 1 y 3 m³/kg, esto se debe seguramente al gran número de recirculaciones que hay en el proyecto hacia el absorbedor donde



gran parte de estas corrientes es agua, reutilizándola en vez de deshacerse de ella de primeras.

Aunque difiere de otros proyectos semejantes esta variación es positiva ya que indica una menor necesidad de agua, lo que ayuda a la sostenibilidad de la planta y muestra un gran compromiso con el medio ambiente.

10.4 Energy Intensity

La intensidad energética mide la cantidad de energía consumida, tanto térmica como eléctrica, por unidad de producto útil. Este indicador es fundamental porque la energía es uno de los principales factores que contribuyen a las emisiones de gases de efecto invernadero y al impacto ambiental general de un proceso. Reducir la intensidad energética es clave para mejorar la sostenibilidad y reducir la huella de carbono de la planta.

$$EI = \frac{MJ}{kg \text{ producto}}$$

En el cálculo de este parámetro se tiene en cuenta la energía utilizada en los distintos equipos que constituyen el proceso, para ello se han dividido en aquellos que se utilizan para enfriar la corriente y los que se utilizan para calentar, la de los compresores y la de las bombas, estos datos se obtienen directamente de Aspen.

Enfriamiento:

$$E100 = 2,69 \cdot 10^5 \frac{kcal}{h}$$

$$E101 = 1,12 \cdot 10^4 \frac{kcal}{h}$$

$$E102 = 7616 \frac{kcal}{h}$$

$$E103 = 6813 \frac{kcal}{h}$$

$$E104 = 2,45 \cdot 10^4 \frac{kcal}{h}$$

$$E107 = 1,42 \cdot 10^5 \frac{kcal}{h}$$



$$E106 = 1,11 \cdot 10^6 \frac{kcal}{h}$$

$$E109 = 1,39 \cdot 10^6 \frac{kcal}{h}$$

Calentamiento, compresores y bombas:

$$E105 = 1,26 \cdot 10^6 \frac{kcal}{h}$$

$$E108 = 1,48 \cdot 10^6 \frac{kcal}{h}$$

$$K100 = 6916 \frac{kcal}{h}$$

$$K101 = 6477 \frac{kcal}{h}$$

$$K102 = 6365 \frac{kcal}{h}$$

$$K103 = 4991 \frac{kcal}{h}$$

$$P100 = 31,59 \frac{kcal}{h}$$

$$P101 = 114,2 \frac{kcal}{h}$$

Para realizar el cálculo es necesario calcular la suma total de estas energías y convertirlo a MJ, obteniendo los siguientes valores:

$$2761894,79 \frac{kcal}{h}$$

$$11563,5 MJ$$

$$EI = \frac{11563,5 MJ}{300,29 kg}$$

$$EI = 38,508 \frac{MJ}{kg}$$



10.5 Greenhouse Gas Emissions

Las emisiones de gases de efecto invernadero, expresadas en equivalentes de CO₂ por kilogramo de producto útil, son un indicador crucial del impacto climático de un proceso. Este indicador tiene en cuenta las emisiones provenientes de la producción de materias primas, el consumo de energía y la generación de servicios auxiliares. Reducir las emisiones de gases de efecto invernadero es fundamental para mitigar el cambio climático y cumplir con las normativas ambientales vigentes.

$$GHG = \frac{kg\ CO_2\ eq}{kg\ producto}$$

Los valores de CO₂ equivalente se han obtenido del documento (UNITED NATIONS ECONOMIC COMMISSION FOR EUROPE, 2022) . En este se aportan datos acerca de los g de CO₂ equivalente por cada kW/h generado con distintos medios de obtención de energía.

A partir de estos valores y la energía consumida en la planta se calculan los kg de CO₂ que se generan en la planta a la hora. Con estos valores se calcula el GHG.

Como la generación de CO₂ equivalente es muy dispar entre las distintas formas de producir energía se va a realizar el estudio sobre la diferencia entre la que más genera, la que menos y una neutra, para comprobar el impacto de esta variación y poder decidir cuál sería más conveniente seleccionar.

Además, se ha de tener en cuenta el CO₂ equivalente generado para producir la materia prima necesaria en este proceso.

En este caso se ha obtenido el valor de emisión de CO₂ en la producción del nitrato de amonio, al multiplicar este valor por el flujo masico de nitrato necesario en la planta se obtiene la emisión total de CO₂ por hora debido a la materia prima.

$$\frac{kg\ CO_2}{kg\ nitrato} = 3,6$$

$$\frac{kg\ nitrato}{h} = 593,47$$

$$Generación\ CO_2(materia\ prima) = 3,6 \cdot 593,47 = 2136,49 \frac{kg\ CO_2}{h}$$



Para cada una de las fuentes de energía se ha escogido el valor medio de emisión de CO₂ entre el máximo y mínimo que pueden generar.

Además, se ha calculado la emisión de CO₂ en kg/h de cada una multiplicando el valor de emisión de cada fuente por los kw/h consumidos en la planta.

En la siguiente tabla se muestran los valores descritos para cada fuente de energía:

Fuente energía	g CO ₂ /kw/h	kg CO ₂ /h
Carbón	923	2964,75
Gas natural	458	1471,13
Nuclear	5,75	18,47
Hidráulica	76,5	245,72
Fotovoltaica	74,5	239,30
Viento	11,9	38,22

Como se puede comprobar existe una amplia diferencia de unos a otros, por lo que, como ya se ha comentado antes, se realizaran los cálculos con el carbón, como fuente con las máximas emisiones, la nuclear, como aquella con menos emisiones, y el gas natural que se encuentra aproximadamente en un valor medio entre estas otras dos y además es la más ampliamente utilizada hoy en día.

Para obtener la emisión de CO₂ equivalente total se debe sumar la emisión debida a los servicios auxiliares y la de la materia prima.

Carbón:

$$\text{Generación total } CO_2 = 2136,49 + 2964,75 = 5101,24 \frac{kg \text{ } CO_2}{h}$$

Gas natural:

$$\text{Generación total } CO_2 = 2136,49 + 1471,13 = 3607,62 \frac{kg \text{ } CO_2}{h}$$

Nuclear:

$$\text{Generación total } CO_2 = 2136,49 + 18,47 = 2154,96 \frac{kg \text{ } CO_2}{h}$$

Como se puede ver las emisiones haciendo uso de carbón se duplica respecto a la que hace uso de la energía nuclear, en el punto medio se encuentran las



emisiones haciendo uso del gas natural. A su vez esta opción es la más lógica ya que es la fuente de energía más utilizada a día de hoy, por lo que en esta planta el valor que se va a tener en cuenta es la de la producción a partir de gas natural.

Otra opción sería utilizar tanto el gas natural como la energía nuclear, aunque para hacer uso de esta hay que llevar a cabo previamente un estudio para comprobar la viabilidad del transporte de esta energía, ya que al ser escasas las centrales nucleares el precio y pérdidas en el transporte pueden suponer una pérdida demasiado grande como para tener en cuenta esta fuente de energía. En cualquier caso, si las condiciones lo permitiesen estaría bien utilizar un abastecimiento compartido, es decir, usar gas natural y energía nuclear, como la cantidad de esta última es menor y de más difícil acceso se incluiría un 20% de energía nuclear y un 80% de gas natural.

Usando este método las emisiones totales serían de 3317 kgCO₂/h.

Como la producción de óxido nitroso es de 300 kg/h el valor final de este parámetro es el siguiente.

$$GHG = 11,06 \frac{kg CO_2 eq}{kg producto}$$

Cabe destacar que en este estudio no se está teniendo en cuenta las emisiones generadas por el tratamiento de las corrientes con subproductos que abandonan el proceso ya que según la técnica utilizada y distancia a la planta de esta podrían variar considerablemente, sin embargo, no cabe duda de que este tratamiento aumentara notablemente las emisiones de CO₂ del proceso total.

Los valores obtenidos se encuentran dentro de los rangos lógicos para una planta de este tipo, también se ha querido comparar estos valores con los de otros procesos de producción de compuestos, en la mayoría de los casos comparados los de este proyecto son mayores, lo cual es normal ya que la planta requiere de un gran número de equipos y utilities y el producto de la misma es muy contaminante, uno de los casos con los que se ha comparado es (Vaquerizo & Kiss, 2024)

También se tienen en cuenta el compromiso con los objetivos de desarrollo sostenible, que son una serie de 17 metas globales establecidas por la Asamblea General de las Naciones Unidas en 2015 como parte de la Agenda 2030 para el Desarrollo Sostenible. Estos objetivos abordan los desafíos más apremiantes que enfrenta el mundo, desde la erradicación de la pobreza hasta



la lucha contra el cambio climático, y están diseñados para ser una hoja de ruta hacia un futuro más justo, equitativo y sostenible.

El desarrollo y diseño de una planta de producción de óxido nitroso mediante la descomposición térmica del nitrato de amonio puede contribuir directamente a varios de estos objetivos, principalmente a través de un enfoque en la sostenibilidad ambiental, la eficiencia en el uso de recursos y la reducción de las emisiones de gases de efecto invernadero.

Este proyecto tiene en cuenta los siguientes:

- Energía asequible y no contaminante: este proyecto está comprometido con la eficiencia energética en el diseño de la planta. La reducción en el consumo de energía mediante procesos optimizados contribuye a la disminución del uso de fuentes energéticas contaminantes.
- Industria, innovación e infraestructura: el desarrollo de una infraestructura industrial sostenible y eficiente es un elemento clave en este proyecto. El diseño optimizado del reactor y los equipos asociados ayuda a mejorar la eficiencia de la producción, promoviendo una innovación industrial más limpia y segura.
- Producción y consumo responsables: el proyecto trata de minimizar el uso de recursos y reducir los residuos generados durante la producción de óxido nitroso. Al adoptar prácticas responsables en el uso de materias primas y la gestión de subproductos, se contribuye a un modelo de producción más sostenible.
- Acción por el clima: dado que el óxido nitroso es un gas de efecto invernadero con un impacto considerable, se ha puesto un especial énfasis en la reducción de las emisiones durante su producción. El proyecto incluye medidas para minimizar las emisiones de gases contaminantes, contribuyendo a la mitigación del cambio climático.
- Agua limpia y saneamiento: el consumo responsable de agua es otro aspecto crítico en este proyecto. Se ha optimizado el uso del agua en los procesos industriales, incluyendo la posibilidad de reciclar una parte importante del agua utilizada, lo que reduce la demanda de este recurso tan valioso.



11 CONCLUSIÓN

A lo largo de este trabajo de fin de grado, se ha llevado a cabo un análisis exhaustivo y detallado del diseño y operación de una planta de producción de óxido nitroso (N_2O) a partir de la descomposición térmica del nitrato de amonio (NH_4NO_3). Este proyecto ha incluido un estudio profundo de la ingeniería básica, abarcando desde los fundamentos del proceso hasta la simulación y optimización de cada una de las etapas involucradas en la producción industrial de N_2O .

Uno de los aspectos más destacados del trabajo ha sido el diseño del reactor, con un volumen de $16,5 m^3$, que es el corazón del proceso. La selección de las condiciones óptimas de temperatura ($250\text{ }^\circ C$) y presión ($1,2\text{ bar}$) dentro del reactor ha sido crucial para maximizar la conversión del nitrato de amonio en óxido nitroso, aunque la conversión escogida ha sido del 99 % que es la óptima teniendo en cuenta todos los parámetros de diseño del reactor y minimizando simultáneamente la formación de subproductos no deseados como el amoníaco (NH_3) y el ácido nítrico (HNO_3). La reacción de descomposición, que es exotérmica, y la reacción de disociación, que es endotérmica, han sido objeto de un control cuidadoso para asegurar la estabilidad del proceso. Este equilibrio ha sido fundamental para evitar riesgos operativos, como el sobrecalentamiento del reactor que podría conducir a incidentes peligrosos.

La ingeniería básica también ha abarcado el diseño y la selección de equipos críticos como los intercambiadores de calor, columnas de destilación y sistemas de absorción, que son esenciales para la purificación del N_2O y la separación de los subproductos. Estos equipos han sido diseñados teniendo en cuenta las condiciones específicas del proceso, como el manejo de altas presiones y temperaturas, así como la necesidad de maximizar la recuperación de N_2O para su comercialización. Por ejemplo, la elección de un absorbedor en contracorriente de agua ha demostrado ser una solución efectiva para la eliminación de impurezas, permitiendo obtener una corriente de producto de alta pureza.

Desde el punto de vista económico, el análisis realizado ha confirmado la viabilidad financiera de la planta bajo diferentes escenarios de precios de mercado del N_2O . Con los cálculos realizados se ha obtenido un PO de 2,2 años, el cual es un valor muy positivo ya que este suele ser un poco mayor en proyectos de este tipo, así como el VAN de 113 MM USD y el TIR que es del 60%, valor muy alto también con el que se entiende que la recuperación de la inversión sea tan rápida.



Se ha demostrado que la inversión inicial, aunque considerable, puede ser recuperada en un periodo razonable, especialmente si el precio de venta del producto se mantiene en el rango superior del mercado. Además, el análisis ha subrayado la importancia de los costos operativos y de los servicios auxiliares, que deben ser gestionados eficientemente para asegurar la rentabilidad a largo plazo.

La sostenibilidad ha sido un eje central en el diseño de la planta, reflejándose en la implementación de indicadores de sostenibilidad que evalúan el impacto ambiental del proceso. En el proyecto se tiene un material intensity de 3,6 kg de materia prima por cada kg de producto, el E-factor con un valor de 2,6 kg de subproductos por cada kg de producto, el wáter consumption con un valor de $1,6 \cdot 10^{-3}$ m³ de agua por cada kg de producto, energy intensity con 38,5 MJ por cada kg de producto y el greenhouse gas emissions con un valor de 11 kg de CO₂ equivalente por cada kg de producto.

Estos indicadores no solo permiten evaluar la eficiencia del proceso en términos de recursos, sino también medir su impacto ambiental, lo que es crucial en un contexto donde las normativas ambientales son cada vez más estrictas.

En particular, las emisiones de N₂O, un gas de efecto invernadero con un potencial de calentamiento global significativamente mayor que el CO₂, han sido minimizadas mediante el diseño de un proceso que incluye tecnologías de captura y reciclaje. La planta ha sido diseñada no solo para cumplir con las regulaciones actuales, sino también para ser adaptable a futuras normativas más restrictivas, asegurando así su operación sostenible en el tiempo.

En conclusión, este trabajo ha proporcionado un marco completo para el diseño y operación de una planta de producción de óxido nitroso, abordando tanto los aspectos técnicos como económicos y ambientales. La integración de la ingeniería básica con un enfoque en la sostenibilidad asegura que el proceso no solo sea eficiente y rentable, sino también responsable desde el punto de vista ambiental.

Este trabajo, por lo tanto, sienta las bases para futuras investigaciones y desarrollos en la producción de N₂O, con el potencial de mejorar aún más la eficiencia y sostenibilidad del proceso.



12 BIBLIOGRAFÍA

- Asia Industrial Gases Association. (2014). *SAFE PRACTICES FOR THE PRODUCTION OF NITROUS OXIDE FROM AMMONIUM NITRATE AIGA 080/16 SAFE PRACTICES FOR THE PRODUCTION OF NITROUS OXIDE FROM AMMONIUM NITRATE Disclaimer*.
- Babrauskas, V., & Leggett, D. (2020). Thermal decomposition of ammonium nitrate. *Fire and Materials*, 44(2), 250–268. <https://doi.org/10.1002/fam.2797>
- Brit. J. Anaesth. (1967). Appendix I current methods of commercial production of nitrous oxide. *British Journal of Anaesthesia*, 39(5), 440–442. <https://doi.org/10.1093/bja/39.5.440>
- Christensen, S., & Rousk, K. (2024). Global N₂O emissions from our planet: Which fluxes are affected by man, and can we reduce these? *IScience*, 27(2), 109042. <https://doi.org/10.1016/J.ISCI.2024.109042>
- Clark, M. S., & Brunick, A. L. (2015). Manufacturing and Distribution of N₂O and O₂ Gases. *Handbook of Nitrous Oxide and Oxygen Sedation*, 44–54. <https://doi.org/10.1016/B978-1-4557-4547-0.00006-2>
- De Salud, C. (2010). 2010 INFORME_3. www.juntadeandalucia.es/salud/orgdep/AETSA
- Feick, G., & Hainer, R. M. (1954). On the Thermal Decomposition of Ammonium Nitrate. Steady-state Reaction Temperatures and Reaction Rate. *Journal of the American Chemical Society*, 76(22), 5860–5863. <https://doi.org/10.1021/ja01651a096>
- IPNI (International Plant Nutrition Institute). (2019). NSS-ES-22. Fuentes de nutrientes ESPECIFICOS
- Izato, Y. ichiro, & Miyake, A. (2018). Kinetic analysis of the thermal decomposition of liquid ammonium nitrate based on thermal analysis and detailed reaction simulations. *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*, 134(1), 813–823. <https://doi.org/10.1007/s10973-018-7322-8>
- Kumar, S., Gahlot, P., & Kumar, S. (2024). Energy, exergy and economical analysis of N₂O based cascade refrigeration system for ultralow temperature cooling applications using different eco-friendly refrigerants in high temperature cycle. *Results in Engineering*, 22, 102259. <https://doi.org/10.1016/J.RINENG.2024.102259>
- Linde. (2021a). *Linde-SOCSIL_N2O_2.5-5.0_Grade-1*. Linde Gas Hungary Co. C Ltd., N₂O Plant Engineering Department - SOCSI



- Linde. (2021b). *N2O-production-unit*. Linde Gas Hungary Co. Cltd., N2O Plant Engineering Department - SOCSI
- Lu, M., Long, W., Wei, F., Dong, D., Cong, L., Dong, P., Tian, H., Chen, X., Chen, S., Wang, Y., & Wang, P. (2024). Assessment of carbon-free fuel ammonia combustion with low methanol blends in reducing GHG emissions including N2O. *Journal of Cleaner Production*, 463, 142755. <https://doi.org/10.1016/J.JCLEPRO.2024.142755>
- Ministerio Trabajo y Economía Social. (2018). *ICSC 0067 - ÓXIDO NITROSO*. https://chemicalsafety.ilo.org/dyn/icsc/showcard.display?p_lang=es&p_card_id=0067&p_version=2
- Real academia europea de doctores. (2021). *Cómo el “gas de la risa” se convirtió en la anestesia que revolucionó la cirugía - Real Academia Europea de Doctores*. <https://raed.academy/como-el-gas-de-la-risa-se-convirtio-en-la-anestesia-que-revoluciono-la-cirurgia/>
- Rodriguez-Caballero, A., Aymerich, I., Marques, R., Poch, M., & Pijuan, M. (2015). Minimizing N2O emissions and carbon footprint on a full-scale activated sludge sequencing batch reactor. *Water Research*, 71, 1–10. <https://doi.org/10.1016/J.WATRES.2014.12.032>
- UNITED NATIONS ECONOMIC COMMISSION FOR EUROPE. (2022). *Carbon Neutrality in the UNECE Region: Integrated Life-cycle Assessment of Electricity Sources UNITED NATIONS ECONOMIC COMMISSION FOR EUROPE*.
- Vaquerizo, L., & Kiss, A. A. (2024). Thermally self-sufficient process for single-step coproduction of methanol and dimethyl ether by CO2 hydrogenation. *Journal of Cleaner Production*, 441, 140949. <https://doi.org/10.1016/J.JCLEPRO.2024.140949>
- Werling, L., & Hörger, T. (2021). Experimental analysis of the heat fluxes during combustion of a N2O/C2H4 premixed green propellant in a research rocket combustor. *Acta Astronautica*, 189, 437–451. <https://doi.org/10.1016/J.ACTAASTRO.2021.07.011>
- Yue, Y., Gai, W., & Boustras, G. (2023). Exploration of the causes of ammonium nitrate explosions: Statistics and analysis of accidents over the past 100 years. *Safety Science*, 158, 105954. <https://doi.org/10.1016/J.SSCI.2022.105954>

13 ANEXOS

Anexo 1

Anexo 1.1

Propiedad	Valor	Unidad
Masa molar	44,013	g/mol
Densidad (gas, 0 °C y 1 atm)	1,977	kg/m ³
Punto de fusión	-90,86	°C
Punto de ebullición	-88,48	°C
Solubilidad en agua	1,5	g/L
Entalpía de formación	82,05	kJ/mol
Calor específico (gas, 25 °C)	0,880	kJ/kg·K
Presión crítica	7,245	MPa
Temperatura crítica	36,4	°C

Tabla 1: Propiedades físicas N₂O

Anexo 1.2

Propiedad	Valor	Unidad
Masa molar	80,04	g/mol
Densidad	1,725	g/cm ³
Punto de fusión	169,6	°C
Punto de ebullición	210	°C
Solubilidad en agua	1180	g/L
Temperatura descomposición	210	°C
Entalpía de formación	-365,6	kJ/mol
Calor específico	1,59	kJ/kg·K

Tabla 2: Propiedades físicas NH₄NO₃



Anexo 1.3

	Solid ammonium nitrate (SAN)	Liquid ammonium nitrate (LAN)
Identification		
Chemical formula	NH ₄ NO ₃	80 – 93 % NH ₄ NO ₃ in water
CAS No.	6484-52-2	6484-52-2
EC No.	229-347-8	229-347-8
UN-No:	UN 1942	UN 2426
Name according to [8]	ammonium nitrate	ammonium nitrate, liquid
Transport Class according to [8]	5.1	5.1
Classification according to [8]	O2 (oxidizing substance solid)	O1 (oxidizing substance liquid)
Properties	Contact with combustible material can cause fire. Explosive when mixed with combustible material. Decomposes when heated to about 170 °C (338 °F). Fire can cause generation of toxic nitric gases.	LAN has in principle the same properties as solid ammonium nitrate, but due to its water content it is slightly less sensitive.
Safety precautions	Keep away from sources of ignition – no smoking. Avoid contamination by combustible liquids, powdery substances, oxidizing substances, alkalis and acids. Avoid contact with skin and eyes. Clean ammonium nitrate from equipment during maintenance prior to welding or brazing	
Health hazards	The substance can be absorbed into the body by inhalation of its aerosol. Short term exposure: Irritating to the eyes, the skin and the blood respiratory tract.	

Tabla 3: Propiedades y características del NH₄NO₃ sólido y líquido



Anexo 1.4

Table 2 Typical specification for technical grade liquid ammonium nitrate

NH ₄ NO ₃ concentration range	min. 82.0%0 – max. 93,0%
NH ₃ (free ammonia)	max. 500 mg/kg (<u>500</u> ppm)
Volatile organic matter (for example, oil)	max. <u>20</u> mg/kg (as carbon) (<20ppm)
Chloride (Cl)	< 5 mg/kg (<5ppm)
Iron (Fe)	< <u>4</u> mg/kg (<4 ppm)
Phosphate (PO ₄)	< 10 mg/kg (<10 ppm)
Calcium (Ca)	< 10 mg/kg (< 10ppm)
Sulphate (SO ₄)	< 50 mg/kg (< 50 ppm)
Acidity of 10 % <u>test</u> solution	5 < pH < 6.5
Urea	< 5ppm
Foreign matter	None visible
Extractable organic matter	< 100 ppm
No anti-caking agent or additive	

Tabla 4: Restricciones composición NH₄NO₃ líquido



Anexo 2

$$Mm \text{ NH}_4\text{NO}_3 = 80,043 \text{ g/mol}$$

$$Mm \text{ HNO}_3 = 63,01 \text{ g/mol}$$

$$Mm \text{ NH}_3 = 17,03 \text{ g/mol}$$

$$Mm \text{ N}_2\text{O} = 44,01 \text{ g/mol}$$

$$Mm \text{ H}_2\text{O} = 18,01 \text{ g/mol}$$

$$\rho \text{ NH}_4\text{NO}_3 = 1720 \text{ kg/m}^3$$

$$\rho \text{ salida} = 0,7 \text{ kg/m}^3$$

$$\mu \text{ salida} = 1,6 \cdot 10^{-5} \text{ Pa} \cdot \text{s}$$

$$\Delta H(\text{dis}) = 179,9 \text{ KJ/mol}$$

$$\Delta H(\text{des}) = -42,3 \text{ KJ/}$$

Anexo 3

	<i>Unit</i>	9.	10.	11.	12.	13.	14.	15.	16.	17.S
Vapour Fraction		0,98	0,00	1,00	1,00	0,99	0,00	1,00	1,00	0,00
Temperature	C	40	40	40	133	40	40	40	114	21
Pressure	<i>bar_g</i>	7,47	7,47	7,47	21,88	21,88	21,88	21,88	50,00	50,00
Molar Flow	<i>kgmole/h</i>	7,08	0,12	6,96	6,96	6,96	0,06	6,90	6,90	6,90
Mass Flow	<i>kg/h</i>	304,22	2,50	301,72	301,72	301,72	1,43	300,29	300,29	300,29
Liquid Flow	<i>m3/h</i>	0,37	0,00	0,37	0,37	0,37	0,00	0,37	0,37	0,37
Heat Flow	<i>kcal/h</i>	122064,44	-6979,58	129044,03	135409,15	128596,28	-2348,08	130944,36	135934,88	111464,77

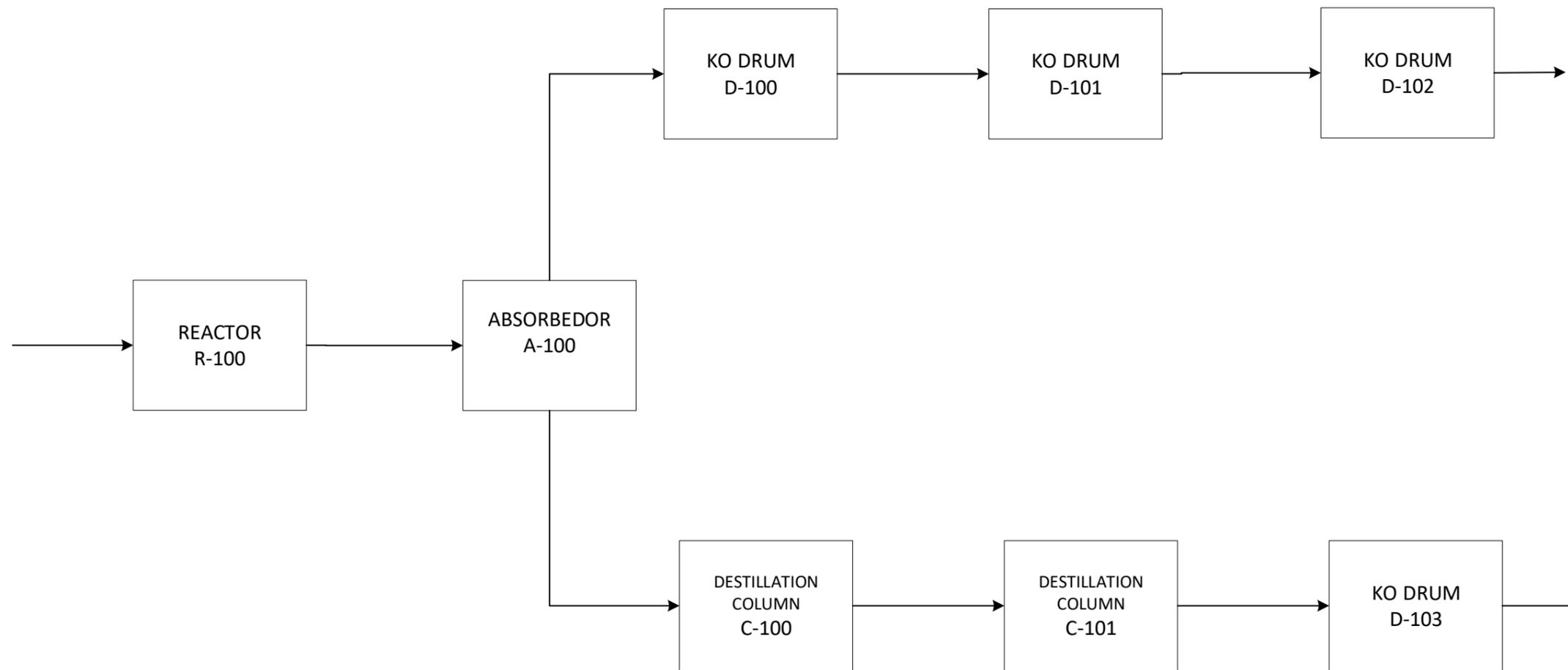
	<i>Unit</i>	18.	19.	20.	21.	22.	23.	24.	25.	26.
Vapour Fraction		0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,12	0,00	1,00
Temperature	C	39	39	33	34	159	27	3	3	3
Pressure	<i>bar_g</i>	0,15	0,50	0,50	5,00	5,00	5,00	0,15	0,15	0,15
Molar Flow	<i>kgmole/h</i>	152,83	152,83	42,18	42,18	37,74	3,73	3,73	3,28	0,45
Mass Flow	<i>kg/h</i>	2834,04	2834,04	801,59	801,59	682,38	94,27	94,27	80,88	13,39
Liquid Flow	<i>m3/h</i>	2,86	2,86	0,81	0,81	0,68	0,09	0,09	0,08	0,02
Heat Flow	<i>kcal/h</i>	-10124740,80	-10124709,21	-2743879,20	-2743764,98	-2476475,35	-186309,91	-186309,91	-187539,19	1229,27

	<i>Unit</i>	27.	28.	29.	30.	31.	32.	33.	R-C100	R-C101
Vapour Fraction		0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	1,00	1,00
Temperature	<i>C</i>	112	40	40	40	40	40	40	33	27
Pressure	<i>bar_g</i>	0,50	0,50	0,15	0,15	0,15	0,15	0,15	0,50	5,00
Molar Flow	<i>kgmole/h</i>	109,10	109,10	109,10	5,45	103,64	26,38	130,07	1,56	0,70
Mass Flow	<i>kg/h</i>	1972,44	1972,44	1972,44	98,62	1873,82	475,20	2350,00	60,00	24,94
Liquid Flow	<i>m3/h</i>	1,97	1,97	1,97	0,10	1,87	0,48	2,35	0,08	0,03
Heat Flow	<i>kcal/h</i>	-7253478,21	-7395131,32	-7395131,32	-369756,57	-7025374,75	-1788949,84	-8817997,50	18224,33	6825,80

	1.	2.	3.	4.	5.	6.	7.	8.	9.	10.	11.	12.
H2O	0,712	0,712	0,073	0,073	0,073	0,956	0,022	0,022	0,022	0,882	0,008	0,008
N2O	0,250	0,250	0,912	0,912	0,912	0,039	0,961	0,961	0,961	0,106	0,976	0,976
NH3	0,019	0,019	0,015	0,015	0,015	0,003	0,016	0,016	0,016	0,009	0,016	0,016
HNO3	0,019	0,019	0,000	0,000	0,000	0,002	0,000	0,000	0,000	0,003	0,000	0,000

	13.	14.	15.	16.	17.S	18.	19.	20.	21.	22.	23.	24.
H2O	0,008	0,684	0,002	0,002	0,002	0,975	0,975	0,949	0,949	0,999	0,631	0,631
N2O	0,976	0,288	0,982	0,982	0,982	0,013	0,013	0,018	0,018	0,000	0,070	0,070
NH3	0,016	0,024	0,016	0,016	0,016	0,007	0,007	0,021	0,021	0,000	0,175	0,175
HNO3	0,000	0,004	0,000	0,000	0,000	0,004	0,004	0,012	0,012	0,001	0,124	0,124

	25.	26.	27.	28.	29.	30.	31.	32.	33.	R-C100	R-C101
H2O	0,717	0,005	0,999	0,999	0,999	0,999	0,999	1,000	0,999	0,032	0,004
N2O	0,016	0,464	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,791	0,686
NH3	0,126	0,528	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,176	0,308
HNO3	0,141	0,003	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	0,000	0,001	0,001	0,002



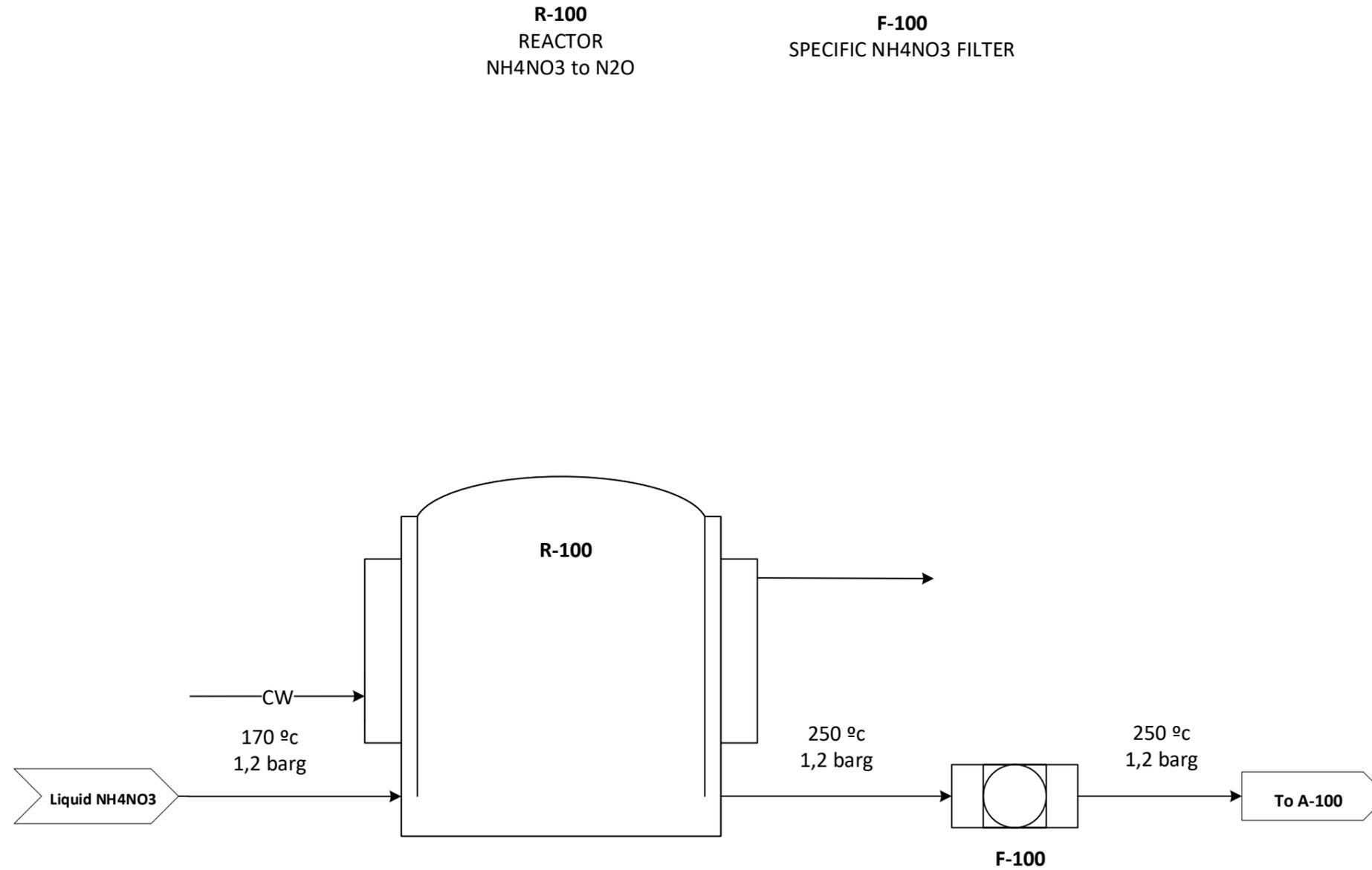
GENERAL NOTES

TÍTULO

ALEJANDRO BARRENA GARCIA

**DISEÑO DE UNA PLANTA DE
PRODUCCIÓN DE ÓXIDO NITROSO
MEDIANTE DESCOMPOSICIÓN
TÉRMICA DE NITRATO AMÓNICO**

Nº PLANO:
A3-BD-100



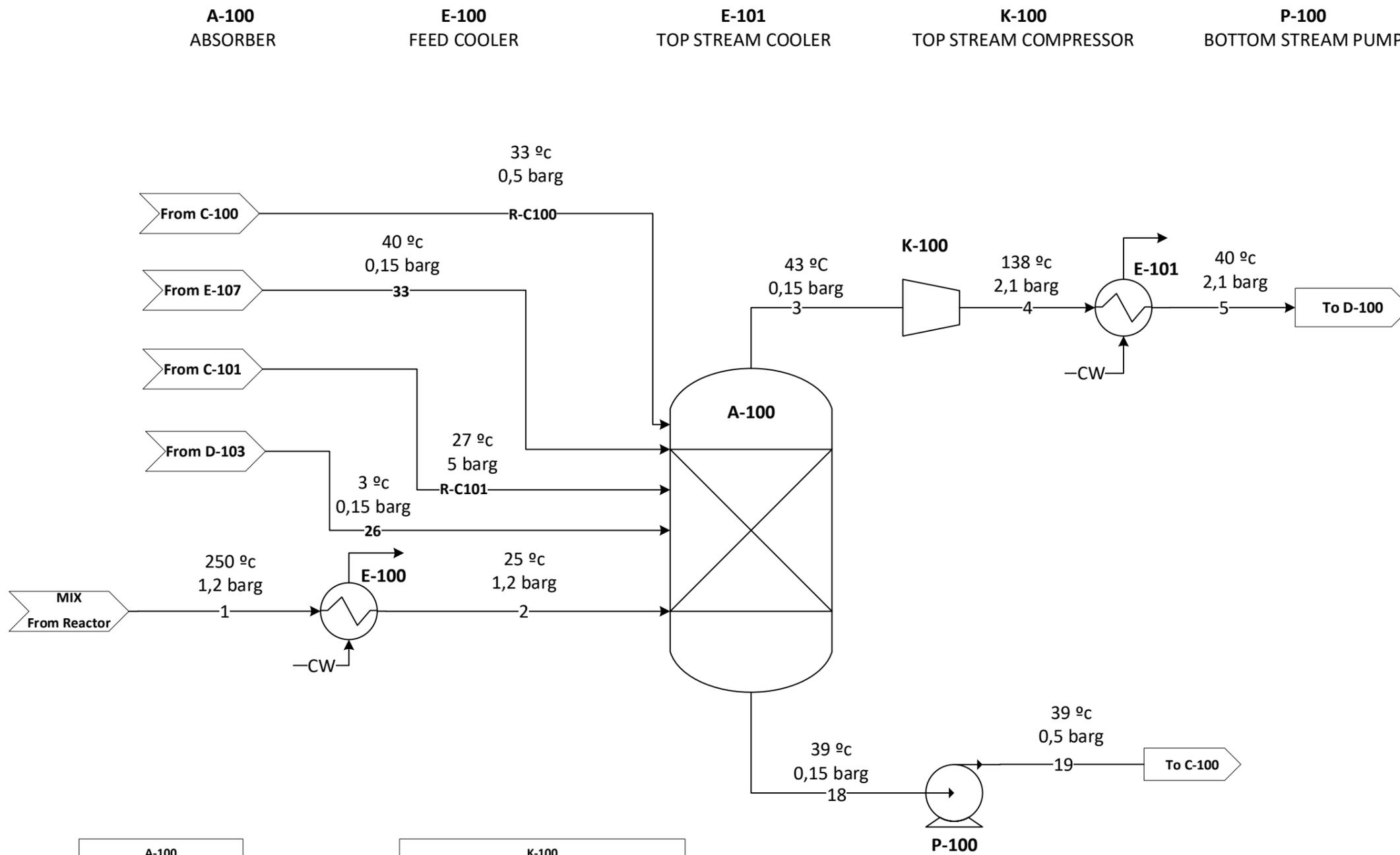
R-100
Temperatura: 250 °C
Presion: 1,2 bar

TÍTULO

ALEJANDRO BARRENA GARCIA

**DISEÑO DE UNA PLANTA DE
PRODUCCIÓN DE ÓXIDO NITROSO
MEDIANTE DESCOMPOSICIÓN
TÉRMICA DE NITRATO AMÓNICO**

Nº PLANO:
A3-PFD-100-1



A-100
Nº Etapas: 20

K-100
ΔP: 2 bar
Potencia: 8 KW

E-100
Duty: 312,9 KW

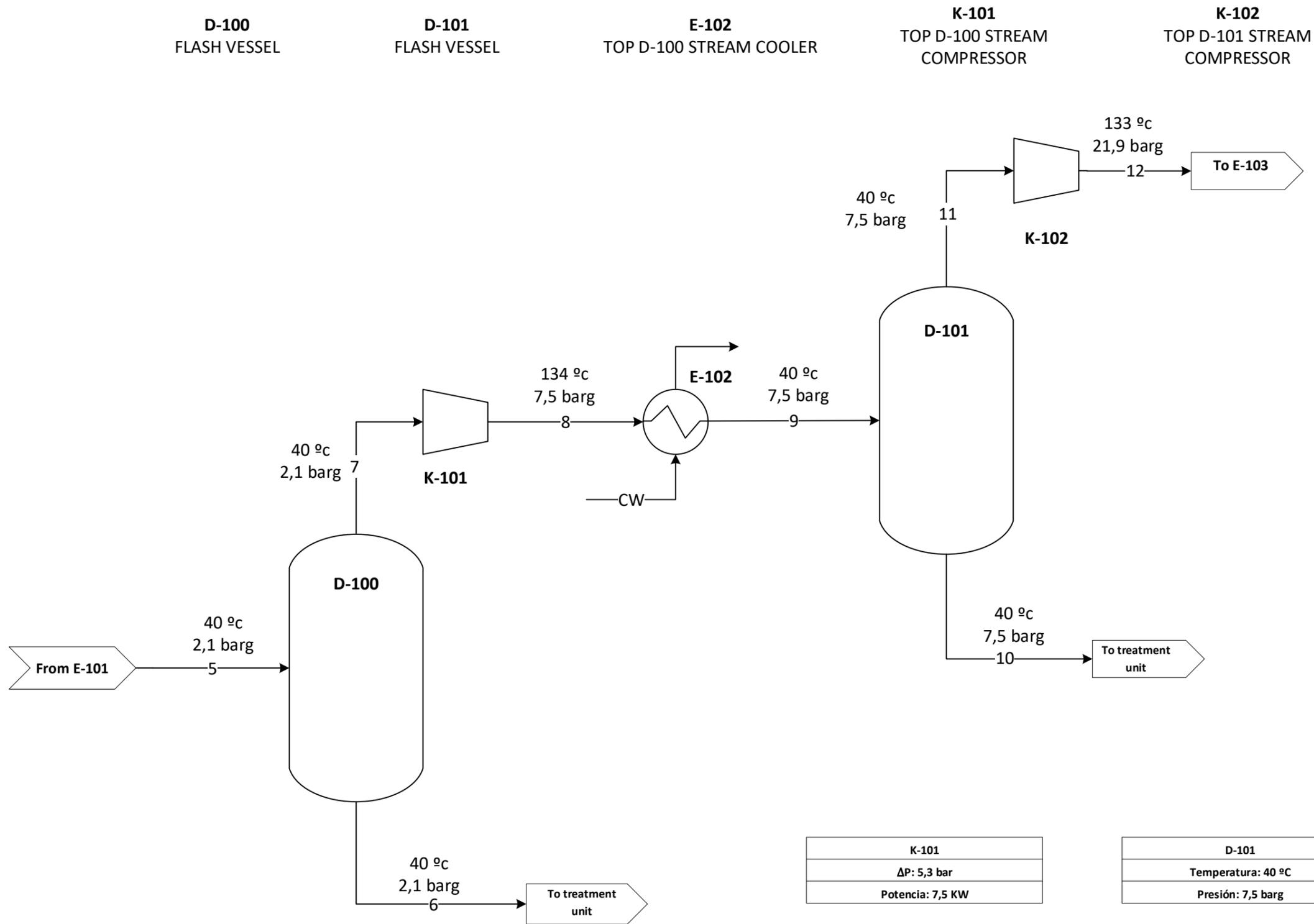
P-100
ΔP: 0,35 bar
Potencia: 4,5 KW

E-101
Duty: 13 KW

ALEJANDRO BARRENA GARCÍA

DISEÑO DE UNA PLANTA DE PRODUCCIÓN DE ÓXIDO NITROSO MEDIANTE DESCOMPOSICIÓN TÉRMICA DE NITRATO AMÓNICO

Nº PLANO:
A3-PFD-100-2



E-102
Duty: 8,9 KW

K-101
ΔP : 5,3 bar
Potencia: 7,5 KW

D-101
Temperatura: 40 °C
Presión: 7,5 barg

K-102
ΔP : 14,4 bar
Potencia: 7,4 KW

D-100
Temperatura: 40 °C
Presión: 2,1 barg

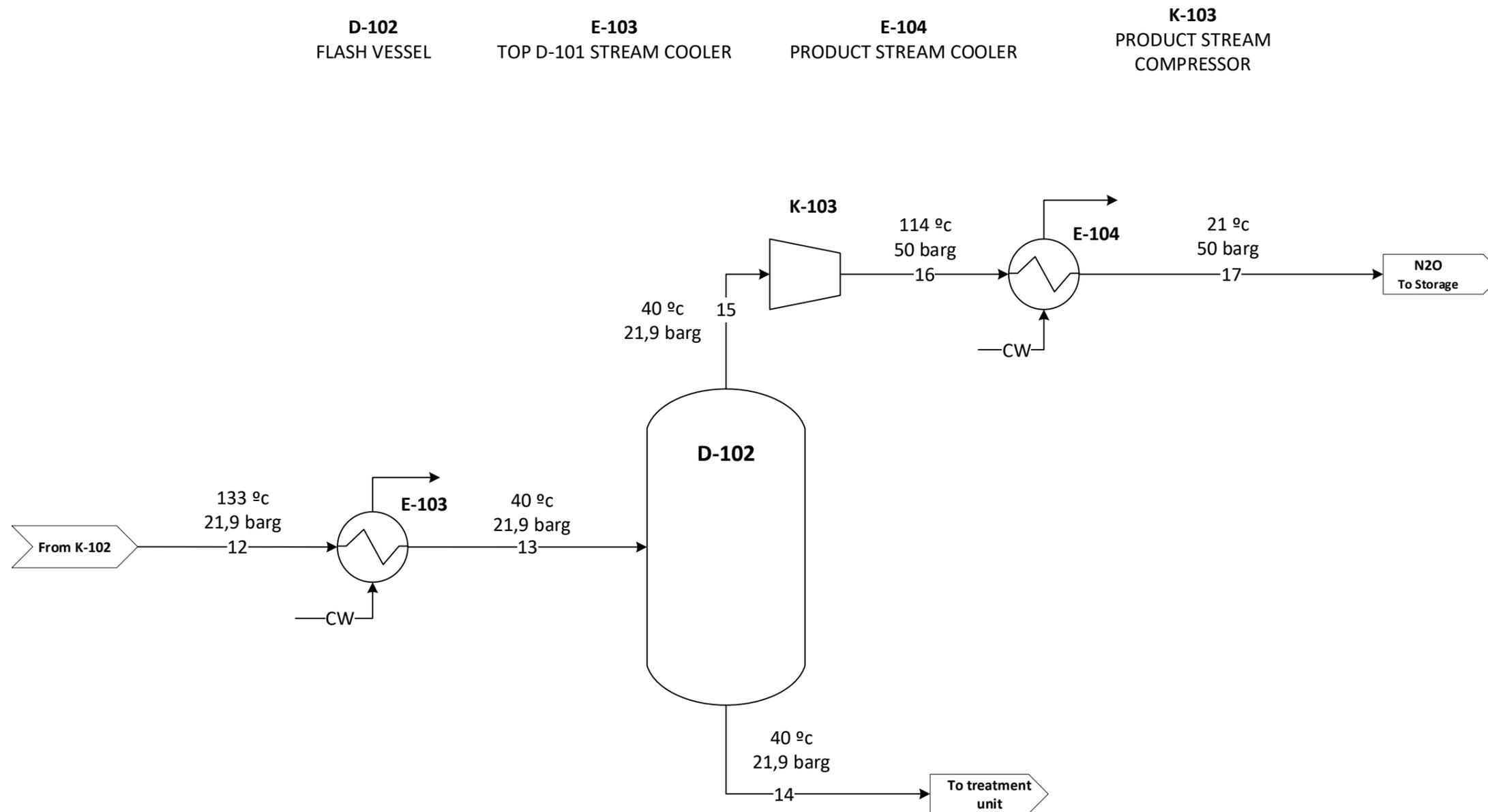
GENERAL NOTES

TÍTULO

ALEJANDRO BARRENA GARCIA

DISEÑO DE UNA PLANTA DE PRODUCCIÓN DE ÓXIDO NITROSO MEDIANTE DESCOMPOSICIÓN TÉRMICA DE NITRATO AMÓNICO

Nº PLANO:
A3-PFD-100-3



E-104
Duty: 28,5 KW

K-103
ΔP : 28,1 bar
Potencia: 5,8 KW

E-103
Duty: 7,9 KW

D-102
Temperatura: 40 °C
Presión: 21,9 barg

TÍTULO

ALEJANDRO BARRENA GARCIA

DISEÑO DE UNA PLANTA DE PRODUCCIÓN DE ÓXIDO NITROSO MEDIANTE DESCOMPOSICIÓN TÉRMICA DE NITRATO AMÓNICO

Nº PLANO:
A3-PFD-100-4

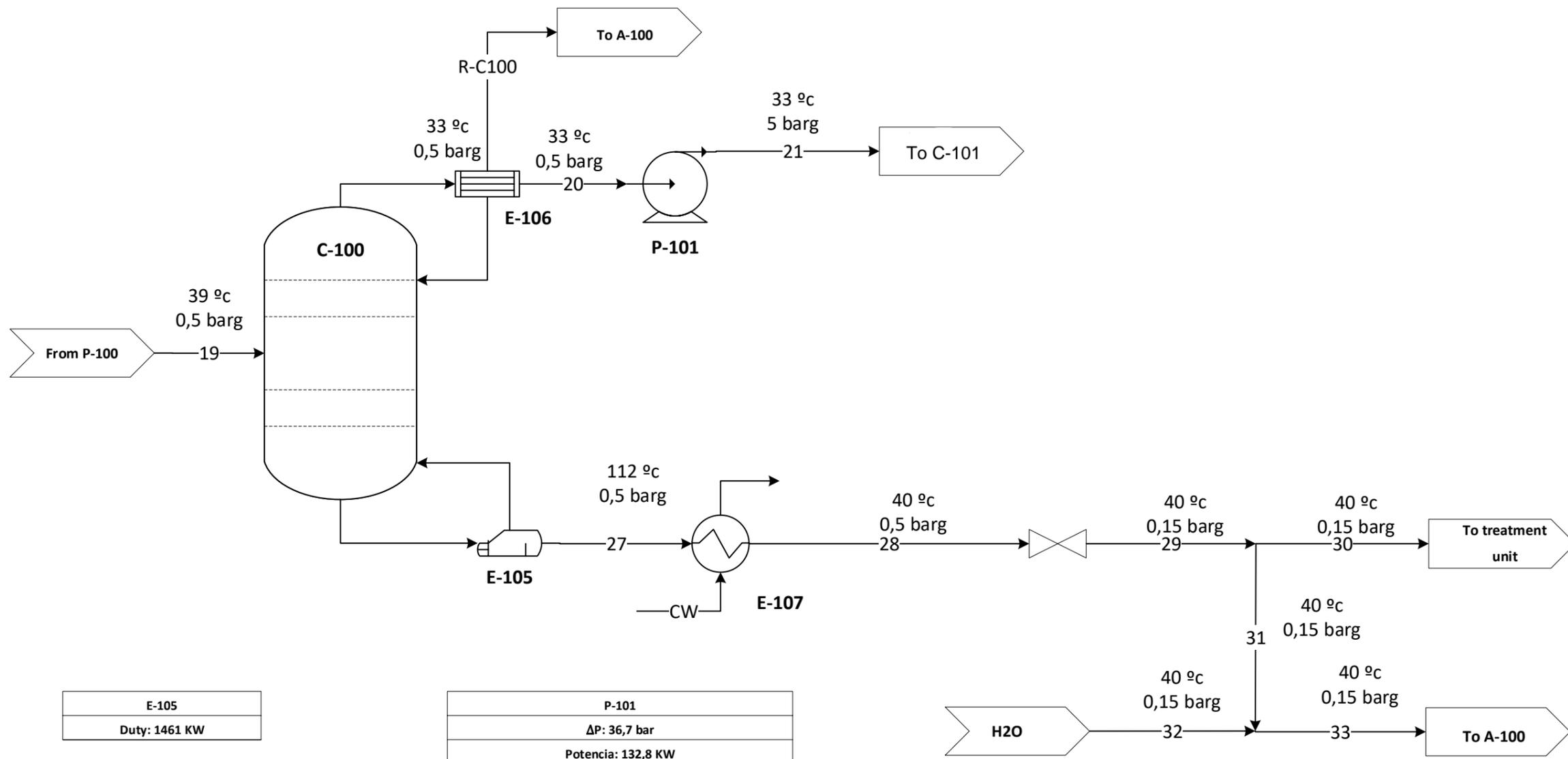
C-100
DISTILLATION COLUMN

E-105
MIX RECOVERY COLUMN
REBOILER

E-106
WATER RECOVERY COLUMN
CONDENSER

E-107
BOTTOM C-100 STREAM
COOLER

P-101
TOP C-100 STREAM PUMP



E-105
Duty: 1461 KW

P-101
ΔP : 36,7 bar
Potencia: 132,8 KW

E-106
Duty: 1291 KW

C-100
Nº stages: 25
Condenser reflux: 61,1 kmol/h
Outlet flowrate: 109,1 kmol/h

E-107
Duty: 165,2 KW

TÍTULO

ALEJANDRO BARRENA GARCIA

DISEÑO DE UNA PLANTA DE PRODUCCIÓN DE ÓXIDO NITROSO MEDIANTE DESCOMPOSICIÓN TÉRMICA DE NITRATO AMÓNICO

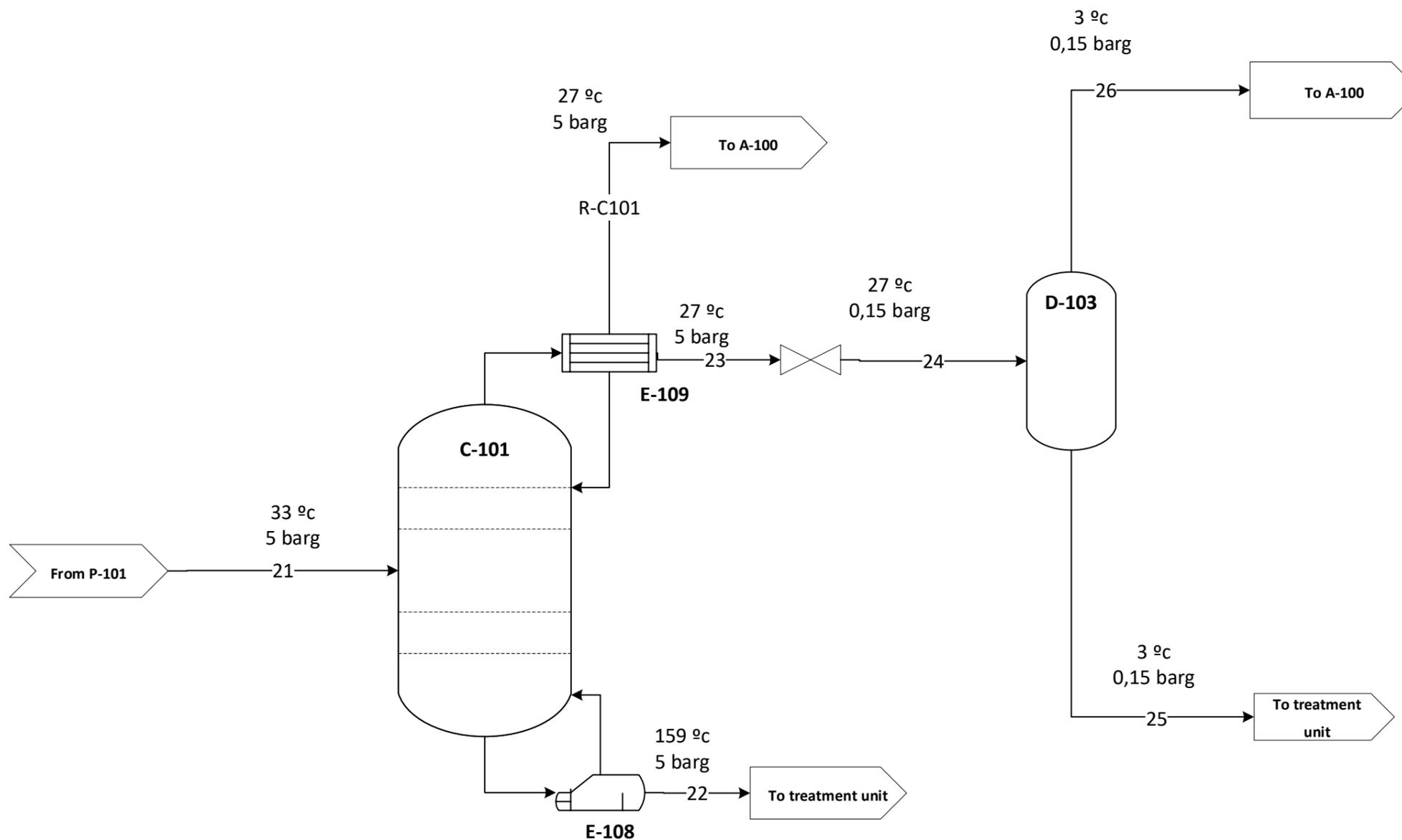
Nº PLANO:
A3-PFD-100-5

C-101
DISTILLATION COLUMN

E-108
MIX RECOVERY COLUMN
REBOILER

E-109
WATER RECOVERY COLUMN
CONDENSER

D-103
FLASH VESSEL



D-103
Temperatura: 3°C
Presion: 0,15 barg

E-108
Duty: 1720 KW

C-101
Nº stages: 20
Condenser reflux: 134,3 kmol/h
Outlet flowrate: 37,3 kmol/h

E-109
Duty: 1618 KW

TÍTULO

ALEJANDRO BARRENA GARCIA

**DISEÑO DE UNA PLANTA DE
PRODUCCIÓN DE ÓXIDO NITROSO
MEDIANTE DESCOMPOSICIÓN
TÉRMICA DE NITRATO AMÓNICO**

Nº PLANO:
A3-PFD-100-6