



INSTITUTO POLITÉCNICO NACIONAL

**ESCUELA SUPERIOR DE INGENIERÍA QUÍMICA E
INDUSTRIAS EXTRACTIVAS**

*DISEÑO DEL SISTEMA DE REACCION PARA LA
OBTENCION DE FENOL A PARTIR DE LA OXIDACION
DEL CUMENO.*

TESIS QUE PARA OBTENER EL TITULO DE
INGENIERO QUIMICO INDUSTRIAL

P R E S E N T A

IRVING RODRIGO LOPEZ PEINADO

A S E S O R

Dr. ROMAN RAMIREZ LOPEZ

MÉXICO D.F.

NOVIEMBRE 2013





CONTENIDO

Índice de tablas

Tabla No.1 Identificación de los equipos, proceso Raschig – Hooker	13
Tabla No.2 Identificación de los equipos, proceso Clorobenceno	15
Tabla No.3 Ventajas del proceso de obtención de fenol, vía oxidación de cumeno	17
Tabla No.4 Identificación de los equipos, proceso Oxidación de Cumeno	18
Tabla No.5 Datos experimentales para la reacción de oxidación de cumeno	22
Tabla No.6 Datos experimentales para la reacción de oxidación de cumeno en Km ³ / l	22
Tabla No.7 Valores de la constante de velocidad de reacción 1er orden	23
Tabla No.8 Valores de la constante de velocidad de reacción 2do orden	24
Tabla No.9 Valores de la constante de velocidad de reacción 3er orden	24
Tabla No.10 Valores k de reacción experimentales de la patente US 4,358,618	27
Tabla No.11 temperatura y presión en las entradas y salidas del primer reactor	44
Tabla No.12 balance de masa en el primer reactor	44
Tabla No.13 temperatura y presión en las entradas y salidas del segundo reactor	45
Tabla No.14 balance de masa en el segundo reactor	45

Índice de figuras

Fig. 1.1 Estructura del fenol	7
Fig. 2.1 Producción de Fenol, vía proceso Raschig – Hooker	13
Fig. 3.1 Producción de Fenol, vía Clorobenceno	15
Fig. 4.1 Producción de Fenol, vía Oxidación de Cumeno	18
Fig. 1.2 Reacción de oxidación de cumeno en presencia de carbonato de sodio como catalizador.	21
Fig. 2.2 Reacción de conversión de hidroperóxido de cumeno en presencia de ácido sulfúrico como catalizador (reacción principal).	26



Fig. 3.2 Reacción de conversión de hidroperóxido de cumeno en presencia de ácido sulfúrico como catalizador (primera reacción secundaria)	26
Fig. 4.2 Reacción de conversión de hidroperóxido de cumeno en presencia de ácido sulfúrico como catalizador (segunda reacción secundaria)	27
Fig. 1.3 Ventana principal del software del simulador PRO II	30
Fig. 2.3 Ventana con la selección de los equipos a utilizar, simulador PRO II	30
Fig. 3.3 Ventana con la selección de las conexiones de entradas y salidas de los equipos a utilizar, simulador PRO II	31
Fig. 4.3 Ventana con la selección del sistema de unidades, simulador PRO II	31
Fig. 5.3 Ventana con la selección de los componentes, simulador PRO II	32
Fig. 6.3 Ventana con la lista de los componentes seleccionados, simulador PRO II	32
Fig. 7.3 Ventana con la selección del método termodinámico a utilizar, simulador PRO II	33
Fig. 8.3 Ventana con la selección de las reacciones, simulador PRO II	33
Fig. 9.3 Ventana con la indicación de las reacciones y productos a obtener, simulador PRO II	34
Fig. 10.3 Ventana con la selección del coeficiente estequiometrico para la obtención de fenol, simulador PRO II	34
Fig. 11.3 Ventana con la selección del coeficiente estequiometrico para la obtención de acetona, simulador PRO II	35
Fig. 12.3 Ventana con la selección del coeficiente estequiometrico para la obtención de alfa-metil-estireno, simulador PRO II	35
Fig. 13.3 Ventana con la selección del coeficiente estequiometrico para la obtención de hidroperóxido de cumeno, simulador PRO II	35
Fig. 14.3 Ventana con la selección de las condiciones de presión y temperatura para la corriente S1, simulador PRO II	36
Fig. 15.3 Ventana con la selección del componente de la corriente S1, simulador PRO II	36
Fig. 16.3 Ventana con la selección de las condiciones de presión y temperatura para la corriente S2, simulador PRO II	37
Fig. 17.3 Ventana con la selección del componente de la corriente S2, simulador PRO II	37



Fig. 18.3 Ventana descripción de la reacción en el primer, simulador PRO II	38
Fig. 19.3 Ventana con la selección de la reacción y el método de cálculo para el primer reactor, simulador PRO II	38
Fig. 20.3 Ventana con indicación del factor pre-exponencial para el primer reactor, simulador PRO II	39
Fig. 21.3 Ventana con la indicación del orden de reacción, simulador PRO II	39
Fig. 22.3 Ventana con la selección de las condiciones de presión y temperatura para la corriente S5, simulador PRO II	40
Fig. 23.3 Ventana con la selección del componente de la corriente S5, simulador PRO II	40
Fig. 24.3 Ventana descripción de la reacción en el segundo reactor, simulador PRO II	40
Fig. 25.3 Ventana con la selección de las reacciones y el método de cálculo para el segundo reactor, simulador PRO II	41
Fig. 26.3 Ventana con indicación del factor pre-exponencial para obtención de fenol en el segundo reactor, simulador PRO II	41
Fig. 27.3 Ventana con indicación del factor pre-exponencial para obtención de acetona en el segundo reactor, simulador PRO II	42
Fig. 28.3 Ventana con indicación del factor pre-exponencial para obtención de alfa-metil-estireno en el segundo reactor, simulador PRO II	42
Fig. 29.3 Ventana con indicación del volumen propuesto en el segundo reactor, simulador PRO II	43
Fig. 30.3 Ventana los equipos y especificaciones de operación, simulador PRO II	43
Fig. 31.3 Ventana con indicación de que el proceso es correcto, simulador PRO II	44

Índice general

Objetivo General	5
Resumen	5
Introduccion	6



Capitulo 1. Generalidades	7
1.1 Fenol	7
1.1.1 Historia del fenol	7
1.1.2 Fuentes y fabricacion de fenol	8
1.1.3 Principales aplicaciones del fenol	9
1.2 Metodos de obtencion de fenol	11
1.2.1 Produccion de fenol, via proceso Raschig-Hooker	11
1.2.2 Produccion de fenol, via clorobenceno	14
1.2.3 Produccion de fenol, via oxidacion de cumeno	16
1.3 Caracteristicas y propiedades de las materias primas	19
1.3.1 Cumeno	19
1.3.2 Carbonato de sodio (catalizador)	19
1.3.3 Hidroperoxido de cumeno	20
1.3.4 Acido Sulfurico	20
Capitulo 2. Diseño de reactores para la produccion de fenol.	21
2.1 Reactor Semi-Batch	21
2.1.1 Reaccion principal	
2.1.2 Cinetica de la reaccion	21
2.1.3 Diseño de un reactor semi-batch	25
2.2 Reactor CSTR	26
2.2.1 Reaccion principal	26
2.2.2 Cinetica de la reaccion	27
2.2.3 Diseño de un reactor CSTR	28
Capitulo 3. Simulacion de los reactores para la obtencion de fenol	29
Capitulo 4. Tablas de resultados	44
Capitulo 5. Analisis de resultados	46
Conclusiones	48
Bibliografia	49
Anexos	51



Objetivo general

Diseñar a partir del PRO II un sistema de reacción adecuado para la obtención de Fenol a partir de la oxidación del Cumeno.

Resumen

El presente trabajo describe la metodología a seguir para la correcta selección del proceso de producción de fenol.

Dicha metodología consistió en describir el compuesto a producir, sus generalidades, propiedades y usos ; posteriormente se realizó la investigación de las alternativas para la producción del Fenol, consecutivamente se procedió a la elección del método más viable, basándonos en las propiedades de la materia prima (Capítulo I), la facilidad para conseguirlos y las condiciones de operación (Capítulo II), además de los equipos necesarios (tanto reactores como procesos de separación), finalmente se realizó la simulación de dicho proceso con el fin comprobar su eficiencia y parte del diseño de los equipos necesarios (Capítulo III).

El método a elegir fue el proceso de oxidación del Cumeno para la producción de Fenol, ya que la reacción que se lleva a cabo es simple y el diseño del sistema de reacción no es tan complejo y los costos energéticos son bajos; por otro lado los subproductos que se obtienen por este método son bastante atractivos para su comercialización, los cuales pueden ser empleados para obtener otros compuestos en otros procesos.

Cabe destacar que el simulador empleado para la obtención de los resultados descritos en el presente trabajo fue el PRO II, el cual de una manera muy sencilla nos permite poder desarrollar dicho proceso de simulación y de esa manera evaluar las corrientes de entrada y salida de los equipos y de esta forma corroborar la decisión tomada.

Cabe mencionar que la producción de fenol es de vital importancia ya que él es utilizado en modo directo como componente de productos medicinales y de aseo, pero principalmente constituye la materia prima para la fabricación de otros reactivos y de productos finales siendo la producción de resinas fenólicas el mayor uso que se le da.



Introducción

Habitualmente la producción de muchos compuestos químicos se ha llevado a cabo por medio de síntesis orgánica y no por métodos catalíticos, esta es una de las razones por las cual los productos que se generan son producidos en gran medida con desecho.

En la actualidad es de vital importancia el poder desarrollar nuevas tecnologías que promuevan un mejor aprovechamiento de los recursos disponibles, tanto de las materias primas requeridas para realizar el proceso de transformación, como la energía necesaria para poder poner en marcha los equipos requeridos para llevar a cabo el proceso con un grado de conversión o eficiencia más alto, algunos factores tales como la complejidad de las moléculas (y consecuentemente, el número de pasos sintéticos), el corto tiempo para el desarrollo de la síntesis y los requerimientos de pureza de los productos generan una situación desfavorable para el medio ambiente.

En la búsqueda de favorecer la realización de la reacción y la preocupación por las cuestiones ambientales, ha hecho que en los últimos años surja todo un enfoque dentro de la química, que tiene como objetivo prevenir o minimizar la contaminación desde su origen. Esto supone un paso mucho más allá de lo que sería el mero hecho de un correcto tratamiento de residuos potencialmente contaminantes que puedan generarse, sino algo mucho más importante: evitar la formación de desechos contaminantes y propiciar la economía de tiempo y recursos.

La catálisis es el proceso a través del cual se incrementa la velocidad de una reacción química. El proceso de catálisis implica la presencia de una sustancia que, si bien es cierto, es parte del sistema de reacción, pero que aun sin esta la reacción se puede llevar a cabo. La catálisis juega un papel muy importante, permitiendo que muchas reacciones que a pesar de que la termodinámica indique que si se pueden llevar a cabo, si no fuese por esta no tendrían algún sentido práctico.

En una última instancia, si la reacción se puede llevar a cabo, importará el tiempo de reacción y cómo reducirlo, esto implicará el suministro de energía térmica o la disipación de ésta si la reacción es muy exotérmica.



La catálisis comprende características básicas, siendo estas las siguientes:

- En las reacciones de tipo catalíticas, la sustancia que se comporta como catalizador no sufre ningún cambio al finalizar la reacción, pero es de vital importancia para la aceleración de la velocidad de reacción.
- La velocidad de reacción es generalmente proporcional a la concentración del catalizador.
- Algunas reacciones químicas pueden seguir más de un mecanismo de reacción, el catalizador algunas veces manifiesta cierta selección favoreciendo una de las reacciones sobre las demás.

En este trabajo describiremos algunos puntos básicos para determinar la selección del sistema de reacción adecuado para la obtención de Fenol, siendo nuestro objetivo principal diseñar a partir del PRO II un sistema de reacción para la obtención de Fenol a partir de la oxidación del Cumeno.

1. GENERALIDADES

1.1 FENOL

1.1.1 HISTORIA DEL FENOL

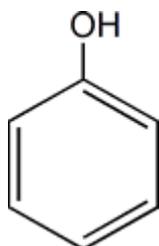


Fig. 1.1 Estructura del fenol

Fenol es el nombre específico del monohidroxibenceno, C_6H_5OH , y el nombre genérico de cualquier compuesto que contiene uno o varios hidroxilos (OH) unidos a un anillo aromático. Es un compuesto cristalino blanco, que se funde a $41^\circ C$ en un líquido incoloro, que hierve a $182^\circ C$. Tiene un olor característico, ataca la piel humana y es un veneno muy potente.

El fenol fue obtenido por Ruge en 1834 cuando separó del alquitrán de hulla, lo que él llamó ácido carbólico, nombre con el que se conoció por mucho tiempo. Antes de 1888, casi todo el fenol se obtenía del alquitrán de hulla, y su principal uso era como desinfectante.



En la última década del siglo XIX, el derivado trinitro del fenol (ácido pícrico) adquirió importancia como explosivo.

Después de la primera Guerra Mundial adquirió mucha importancia el uso del fenol en resinas fenólicas y la producción natural del fenol fue reemplazada por la síntesis.

En 1914 Meyers y Bergius, proponen hidrolizar el monoclorobenceno con hidróxido de sodio, proceso que se generalizó pocos años después. En 1930, se transforma el proceso de hidrólisis del monoclorobenceno, hidrolizando al monoclorobenceno con agua, en lo que se conoce proceso de Rashig–Hooker.

En 1950, B.P. Internacional. Ltd. y Hércules Chemical, Inc., desarrollan un nuevo proceso para la obtención del fenol, oxidando el cumeno hasta hidroperóxido de cumeno y catalizando la reacción de éste para obtener fenol y acetona. Este proceso surgió debido a la sobreproducción del cumeno que era subproducto en la reacción de obtención del hule sintético G R – S, además de la necesidad de la obtención de acetona que se usaba como aditivo en gasolinas de aviación. [1]

1.1.2 FUENTES Y FABRICACION DEL FENOL

El fenol se forma en la descomposición de muchos compuestos oxigenados. Se encuentra entre los productos de la descomposición natural de las proteínas y entre los productos de la descomposición térmica de la hulla, la madera y los esquistos bituminosos. Muchos aceites del cracking del petróleo contienen fenol, y en la producción de aceites por hidrogenación de la hulla se forma fenol en cantidad considerable.

La descomposición de las cadenas laterales de un fenol sustituido (por ejemplo Cresol, $\text{CH}_3\text{C}_6\text{H}_4\text{OH}$) bajo la influencia del hidrógeno da fenol. La acción de la mayoría de las sustancias oxidantes sobre el benceno puede dirigirse para formar fenol. Algunos hidroperóxidos se descomponen casi cuantitativamente con formación del fenol y un compuesto de carbonilo.

La hidrólisis de bencenos sustituidos negativamente, como bencenos halogenados, ácido bencenosulfónicos, etc., forma fenol. La descomposición de compuestos diazoicos es un método muy empleado en los laboratorios para



preparar fenoles sustituidos. Se han descrito otras muchas reacciones para la preparación del fenol.

La mayoría de las fuentes de fenol anteriormente enumeradas han sido sugeridas como métodos para la producción industrial de fenol, pero hoy casi todo el fenol producido se obtiene por descomposición térmica de sustancias orgánicas más complejas o por hidroxilación del benceno. [1]

En el grupo de los fenoles, los cresoles y el compuesto base mismo son los compuestos más importantes, además del timol, los naftoles, la fenolftaleína, el triclorofenol y el pentaclorofenol. Los compuestos naturales (pirocatequina, guayacol y sus derivados) no son tóxicos. El fenol se presenta en la Naturaleza en la madera y en las agujas de pino, en la orina de los herbívoros (fenolsulfato) y en el alquitrán de hulla. De los fenoles monohídricos se obtienen numerosas esencias (aromáticas) naturales, como por ejemplo: vainillina, timol, carvacrol, "zingiverón" (en jengibre), aldehído salicílico. Entre los fenoles multivalentes sintéticos, el hexaclorofeno es particularmente tóxico.

1.1.3 PRINCIPALES APLICACIONES DEL FENOL

El Fenol fue ampliamente utilizado durante el siglo XIX en el tratamiento de heridas, y como un antiséptico y anestésico local, actualmente se utiliza también como antiprurítico, agente cauterizante, anestésico tópico, y como repelente químico para la piel.

Los usos medicinales actuales del Fenol incluyen su incorporación en desinfectantes, antisépticos, lociones, pomadas, ungüentos, gotas para los oídos y la nariz, lociones para heridas, lavados bucales, gotas para el dolor de muelas, analgésicos tópicos, y lociones antisépticas.

Otra aplicación medicinal del Fenol es como agente neurológico, aplicado para aliviar espasmos y dolores crónicos

La producción de fenol tiene una gran importancia ya que tiene usos diversos a nivel industrial, otras aplicaciones del fenol son:



- Para la creación de resinas fenólicas
- Fabricación de alquil fenoles para aditivos de aceites lubricantes.
- Aditivos para la industria de la maderera y zapatera.
- Resinas para laminados decorativos e industriales
- Para la producción de caprolactama (nylon)
- Indispensable en la fabricación de baquelita
- Fabricación de colorantes
- Para la fabricación de Bisfenol A útil para la producción de resinas epoxicas y policarbonatos
- Utilizado en algunas preparaciones medicinales [1]



1.2 METODOS DE OBTENCION DEL FENOL

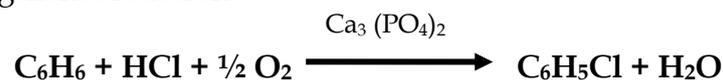
1.2.1 PRODUCCION DE FENOL, VIA PROCESO RASCHIG-HOOKER

El proceso Raschig-Hooker es un proceso químico para la producción de fenol, este proceso es llamado así por el químico alemán Friedrich Raschig. Este proceso para obtención de fenol se basa en dos etapas, en la primera de ellas se obtiene Clorobenceno a partir de Benceno, en la segunda se obtiene fenol a partir del cloro benceno. El proceso se lleva de la siguiente forma:

Etapa 1: Oxidación:

Benceno y aire que provienen de fuera de los límites de batería son alimentados a los sobrecalentadores (IC-100 e IC-200), que opera desde 250 a 500 °F.

El benceno y aire sobrecalentados y vapores de ácido clorhídrico alimentan al reactor (R-100) el cual está constituido por celdas con empaque de fosfato de tricalcico como catalizador y que opera a 410 °F, con un 10% de conversión a clorobenceno en base al benceno total usado. Dando como resultado la siguiente reacción:



Los productos del reactor (benceno, HCl, clorobenceno, agua, oxígeno y nitrógeno) pasan a la columna empacada (CD-100) recubierta con ladrillo, obteniendo por el destilado un azeótropo de benceno-agua, nitrógeno y oxígeno que no reaccionó, se recupera benceno lavándolo con aceite hidrocarbonado en la torre (TL-100); recirculando el benceno al tanque de balanceo (T-100) y descargando los otros gases a la atmósfera.

Por el fondo de la columna (CD-100) se tiene clorobenceno, benceno y ácido clorhídrico diluido, que entran a un decantador (DE-100) formando un líquido en dos fases: la fase inferior contiene solución de HCl, la cual es recirculada al vaporizador (VA-100); la fase superior contiene clorobenceno y benceno que alimentan al decantador (DE-200), obteniendo por la parte inferior benceno para recircular al sobrecalentador y por la parte superior clorobenceno para usarlo en la segunda etapa del proceso.



Etapa 2: Hidrólisis del clorobenceno.

Clorobenceno y vapor de agua alimentan al reactor (R-200) que opera a temperaturas de 850 a 930 ° F y 200 atmósferas, dando como resultado la siguiente reacción química:



El efluente (fenol, HCl, y clorobenceno) del reactor (R-200) se tratan con agua en la torre (TE-100), donde se obtiene como fondo solución de HCl y trazas de fenol que alimentan a la torre (TE-200) y en la parte superior se obtiene agua, clorobenceno y fenol que alimentan a la torre (TE-300).

En la torre (TE-200) tratada con benceno se obtiene como extracto fenol y polidifenilos y como refinado, solución de ácido clorhídrico que se recircula al vaporizador (VA-100)

De la torre (TE-300) tratada con agua se obtiene por la parte superior clorobenceno que se recircula al tanque de balanceo (T-200) y por la parte inferior se tiene fenol y agua que alimentan a la torre (TE-400), la cual usa benceno como agente másico de separación obteniendo agua en el fondo y fenol y polidifenilos en la parte superior.

El extracto fenol-polidifenilos provenientes de las torres (TE-200) y (TE-400) alimentan a la columna de destilación (CD-200), se obtiene como destilado fenol puro y en las colas polidifenilos.

La conversión del clorobenceno a fenol es del 10 al 15%.

La selectividad total en los dos pasos alcanza de 70 % a 85 %.

Ventajas del proceso: el HCl adopta la función de catalizador

Desventajas: ser muy corrosivo en la oxiclорinacion y en la hidrolisis; exigir regeneración del catalizador, consumir mucha energía. [2]



Producción de Fenol

Proceso Rasching

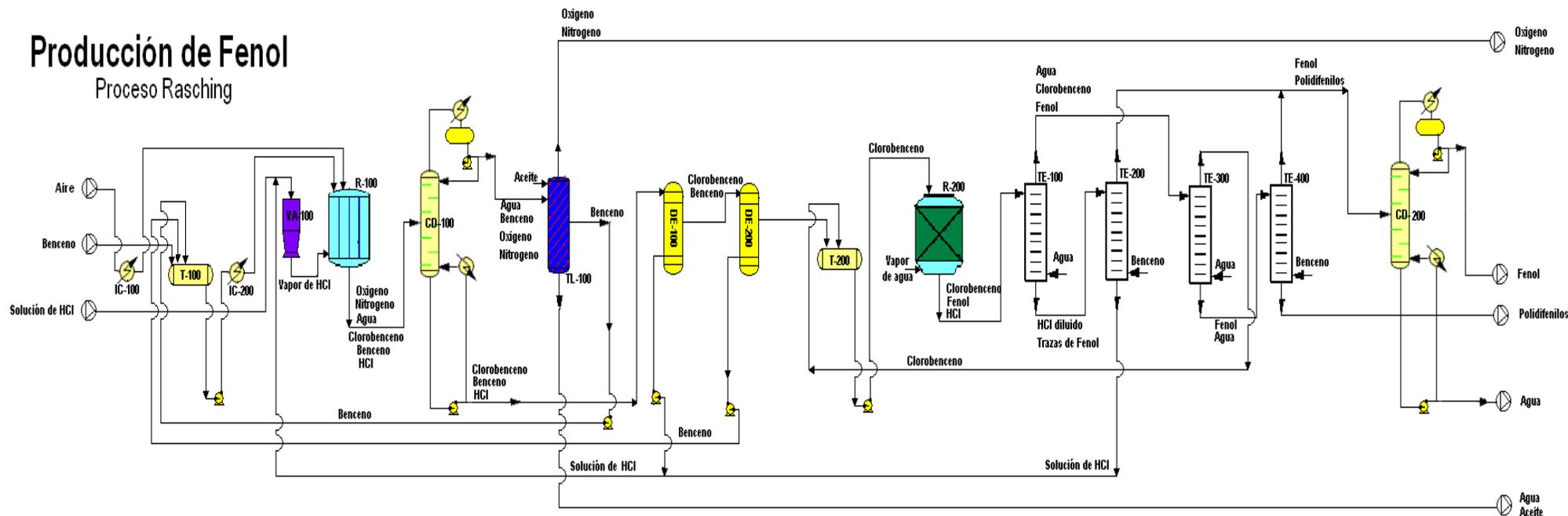


Fig. 2.1 Producción de Fenol, vía proceso Rasching - Hooker

Tabla No.1 Identificación de los equipos, proceso Rasching - Hooker

CLAVE	DESCRIPCION	CLAVE	DESCRIPCION
T - 100 y T - 200	TANQUES DE BALANCEO	IC - 100 y IC - 200	SOBRECALENTADORES
VA - 100	VAPORIZADOR	R - 100 y R - 200	REACTOR
CD - 100 y CD - 200	COLUMNA DE DESTILACION	TL - 100	TORRE DE LAVADO
DE - 100 y DE - 200	DECANTADOR	TE-100, TE-200, TE-300 y TE-400	TORRE DE EXTRACCION



1.2.2 PRODUCCION DE FENOL, VIA CLOROBENCENO

Es un proceso químico por medio del cual se hace reaccionar clorobenceno con hidróxido de sodio, en lo que se conoce como hidrolisis alcalina. El proceso se lleva de la siguiente forma:

El clorobenceno e hidróxido de sodio provenientes de recipientes fuera de límites de batería son alimentados a un reactor perfectamente mezclado (R-100) para obtener fenato de sodio, cloruro de sodio y agua de acuerdo a la siguiente reacción:



El efluente del reactor (R-100) se transfiere a la columna de destilación (CD-100) donde se obtiene por el domo cloruro de sodio y agua y por el fondo fenato de sodio y clorobenceno que alimentan al reactor tubular (R-200) junto con ácido clorhídrico proveniente de un tanque de almacenamiento fuera de los límites de batería para formar fenol como se indica en la siguiente reacción.



Fenol, fenato de sodio, clorobenceno, cloruro de sodio, agua y ácido clorhídrico provenientes del reactor (R-200) son transferidos al decantador (DE-100) para separar el clorobenceno y recircularlo al tanque de balanceo (T-100).

Posteriormente la mezcla libre de clorobenceno se lleva al separador (S-100) para separar fenato de sodio y recircularlo al tanque de balanceo (T-200).

La mezcla de Fenol, cloruro de sodio, agua y ácido clorhídrico pasa a un neutralizador (R-300), donde se agrega hidróxido de sodio para desacidular el fenol y obtener cloruro de sodio y agua.

Finalmente la corriente de fenol, cloruro de sodio y agua alimenta a la columna de destilación (CD-200), obteniendo por el domo Fenol y por el fondo cloruro de sodio y agua.



Producción de Fenol vía Clorobenceno

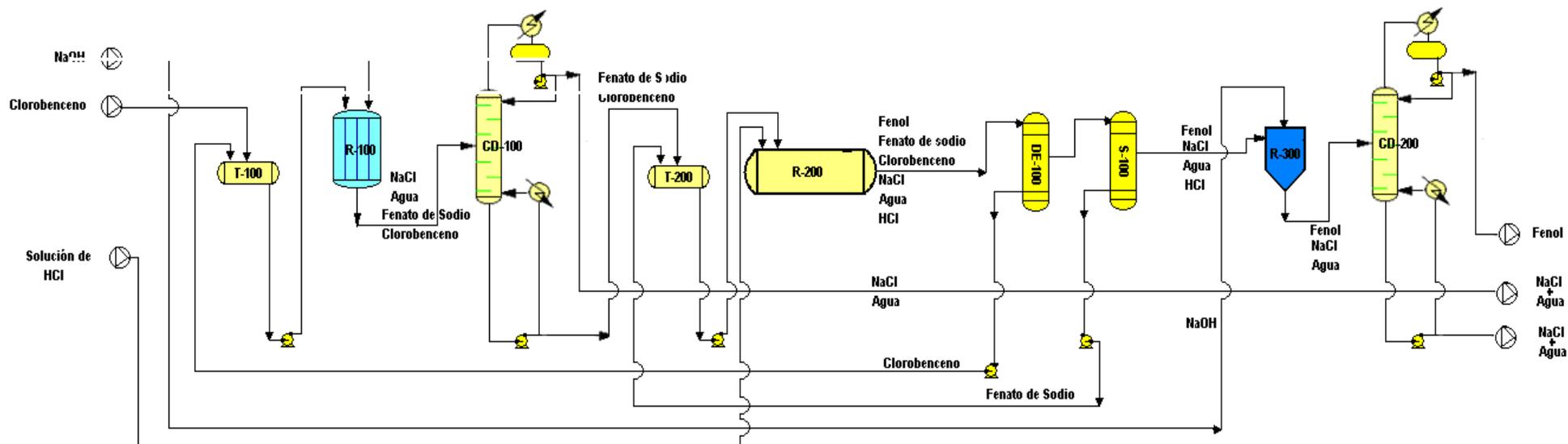


Fig. 3.1 Producción de Fenol, vía Clorobenceno

Tabla No.2 Identificación de los equipos, proceso Clorobenceno

CLAVE	DESCRIPCION	CLAVE	DESCRIPCION
<i>T - 100 y T - 200</i>	TANQUES DE BALANCEO	<i>R - 100</i>	REACTOR (CSTR)
<i>R - 200</i>	REACTOR TUBULAR (PFR)	<i>R - 300</i>	REACTOR NEUTRALIZADOR
<i>DE - 100</i>	DECANTADOR	<i>S - 100</i>	SEPARADOR
<i>CD - 100</i>	COLUMNA DE DESTILACION	<i>CD - 200</i>	COLUMNA DE DESTILACION

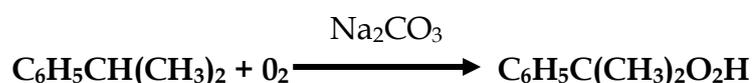


1.2.3 PRODUCCION DE FENOL, VIA OXIDACION DE CUMENO

La producción de Fenol, vía cumeno, es un proceso moderno que produce fenol de alta calidad, apropiado para la obtención de policarbonatos y/o resinas, además de obtenerse como subproducto acetona de buena calidad. El proceso de oxidación mejorado, se combina con avanzadas tecnologías que minimizan la producción de otros productos pesados y maximiza la conversión en la oxidación, obteniendo a su vez material reciclable y siendo este un proceso limpio y seguro.

El fenol es obtenido vía cumeno, mediante una oxidación en fase líquida del cumeno hacia hidroperóxido de cumeno, seguida por una descomposición catalítica del hidroperóxido de cumeno hacia fenol y acetona. Estos últimos, el cumeno sin reaccionar y coproductos son destilados mediante una serie de torres de destilación, para recuperar fenol de gran pureza y recircular el cumeno que no reacciona.[3] El proceso se lleva de la siguiente forma:

Cumeno y aire provenientes de recipientes fuera de los límites de batería alimentan al Reactor oxidador (R-100), dando la siguiente reacción:



La reacción anterior se lleva a cabo a una temperatura entre 185 y 260° F a la presión de una atmósfera, usando carbonato de sodio como catalizador con un pH de 8.5 a 10.5. Cabe mencionar que esta reacción es muy exotérmica.

La solución obtenida (de hidroperóxido de cumeno) se transfiere a un reactor convertidor (R-200), donde se agrega ácido sulfúrico diluido al 10% a una temperatura de 180° F; efectuándose la siguiente reacción:



Los productos (fenol, acetona, alfa-metilestireno, acetofenona, metanol y cumeno) provenientes del reactor convertidor (R-200) pasan al separador (S-100), para extraer el cumeno que no reacciona y recircularlo al tanque de balanceo (T-100).

El efluente libre de cumeno alimenta a la torre de lavado (TL-100), donde es tratado con agua para eliminar impurezas junto con metanol y desecharlas fuera de los límites de batería.



La corriente libre de impurezas y de metanol se transfiere a un sistema de purificación que consiste en tres columnas de destilación; de la primer columna (CD-100) se obtiene en el destilado acetona que es enfriada y enviada a un tanque de almacenamiento fuera de los límites de batería; los fondos (acetofenona, alfa metil estireno y fenol) alimentan la segunda columna (CD-200) para destilar alfa metil estireno que es enfriado y enviado a un tanque de almacenamiento fuera de los límites de batería. La acetofenona y el fenol provenientes de los fondos de la columna (CD-200) entran a la tercer columna (CD-300), obteniendo por el domo fenol y por el fondo acetofenona. Tanto el Fenol como la Acetofenona son enfriados y enviados a tanques de almacenamiento fuera de los límites de batería.

Las ventajas del proceso se observan en la tabla No. 3

Tabla No.3 Ventajas del proceso de obtención de fenol, vía oxidación de cumeno. [3]

<i>Características del proceso</i>	<i>Beneficios obtenidos</i>
Tecnología avanzada	Mejora la obtención de fenol y acetona. Reduce la formación de compuestos pesados.
Optima red de intercambio de calor	Reducción del consumo de energía.
Tratamiento de agua integrado	Bajo impacto ambiental, reduciendo costos de tratamiento.
Sistema de control avanzado	Eleva la eficiencia de los equipos y aumenta la calidad de los productos.



Producción de Fenol vía oxidación de Cumeno

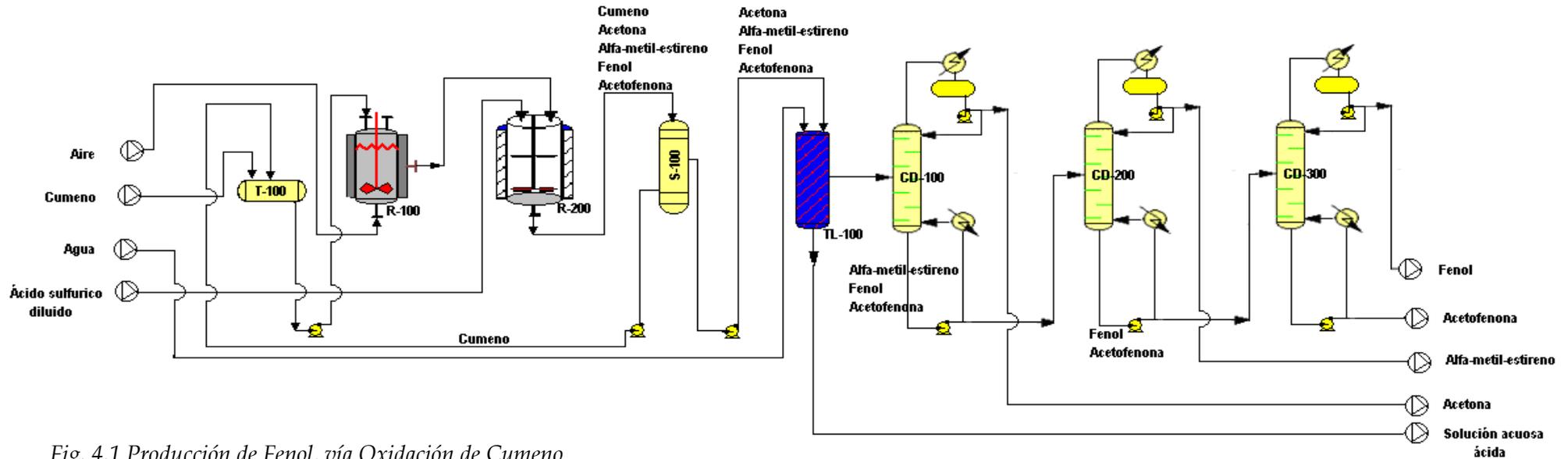


Fig. 4.1 Producción de Fenol, vía Oxidación de Cumeno

Tabla No.4 Identificación de los equipos, proceso Oxidación de Cumeno

CLAVE	DESCRIPCION	CLAVE	DESCRIPCION
T - 100	TANQUE DE BALANCEO	R - 100	REACTOR OXIDADRO
R - 200	REACTOR CONVERTIDOR	S - 100	TANQUE DE SEPARACION
TL - 100	TORRE DE LAVADO	CD - 100	COLUMNA DE DESTILACION
CD - 200	COLUMNA DE DESTILACION	CD - 300	COLUMNA DE DESTILACION



1.3 CARACTERÍSTICAS Y PROPIEDADES DE LAS MATERIAS PRIMAS

1.3.1 CUMENO

Cumeno es el nombre utilizado comúnmente para el isopropilbenceno, un compuesto químico clasificado entre los hidrocarburos aromáticos. Se encuentra en el petróleo y en algunos de sus productos derivados, como algunos combustibles. Se utiliza en la síntesis de algunos detergentes y, principalmente, en la fabricación de fenol y acetona mediante la obtención previa de hidroperóxido de cumeno.

El cumeno es un líquido, aromático penetrante, incoloro e inflamable. Su temperatura de inflamación es de 44 °C en copa cerrada y 25 °C en copa abierta; su temperatura de auto ignición es de 424 °C; y cuando su concentración en presencia de oxígeno está entre 0.88 % y 6.5 %.

Tiene una presión de vapor de 8 mmHg (a 20 °C), una densidad relativa de 0.86 g/cm³ (a 15 °C), densidad relativa de los vapores de cumeno es de 4,2 (aire=1), es soluble en alcohol, éter, benceno y acetona. Es insoluble en agua.

1.3.2 CARBONATO DE SODIO (CATALIZADOR)

El carbonato de sodio es una sal de sodio de ácido carbónico. Por lo general, se presenta en forma de un polvo cristalino blanco. Se puede extraer de las cenizas de muchas plantas, por lo que también se conoce como ceniza sódica, y se puede producir sintéticamente en un proceso que implica la salmuera de la sal del agua de mar y de la piedra caliza. El carbonato de sodio tiene muchos usos que van desde doméstico a industrial o científico.

El uso primario del carbonato de sodio se encuentra en la producción de vidrio. Se combina con arena y carbonato de calcio, se calienta a una temperatura muy alta y después se enfría rápidamente para fabricar vidrio.

El carbonato de sodio también se usa para regular el pH. Esto tiene muchas aplicaciones. Una de ellas es en las piscinas para ajustar los niveles de pH y hacerlo más alcalino.

Tiene una densidad relativa de 2.5 g/cm³, su temperatura de ebullición es de 1600 °C.



1.3.3 HIDROPEROXIDO DE CUMENO

El hidroperóxido de cumeno es un líquido incoloro a amarillo pálido con olor fuerte. Se emplea en la fabricación de acetona y fenol, como agente de curado y como catalizar de polimerización. [5]

Puede estallar por calentamiento intenso alrededor de los 150°C. En combustión, formación de gases tóxicos. Durante un calentamiento intenso se producen humos tóxicos. La sustancia es un oxidante fuerte y reacciona violentamente con materiales combustibles y reductores originando riesgo de incendio y explosión. El contacto con aleaciones de cobre o plomo y ácidos minerales puede conducir a una descomposición violenta.

Tiene un punto de fusión de -10 °C, una densidad relativa de 1.05 (agua=), su punto de inflamación es de 79 °C, su temperatura de auto ignición es de 221 °C. Su solubilidad en agua es modera en la relación 1.5g/100 ml.

1.3.4 ACIDO SULFURICO (CATALIZADOR)

El ácido sulfúrico es un líquido aceitoso, sin color y sin olor. Es muy corrosivo. En su forma comercial esta usualmente impuro.

Puede formar soluciones con agua en cualquier proporción. Las soluciones acuosas de ácido sulfúrico se nombran de acuerdo al porcentaje en peso de ácido sulfúrico en la solución.

Por sus características de oxidante fuerte, reacciona violentamente con materiales reductores. Cuando entra en contacto con combustibles finamente particulados provoca su ignición. Es corrosivo para muchos metales comunes generando humos de dióxido de azufre e hidrogeno gaseoso, el cual es altamente explosivo. [6]

Tiene un punto de ebullición de 290 °C a una atm de presión y al 100%. Tiene una gravedad especifica de 1.841 (agua=1) al 100%, su densidad de vapor es de 3.4 (aire=1) es libremente soluble en agua.

2. DISEÑO DE LOS REACTORES PARA LA PRODUCCIÓN DE FENOL.

2.1 REACTOR SEMI-BATCH

2.1.1 REACCIÓN PRINCIPAL

En el primer reactor (reactor semi-batch) se efectúa la reacción de oxidación del cumeno, esto se logra mezclando una corriente de cumeno con oxígeno en presencia de carbonato de sodio como catalizador, obteniéndose como producto hidróperóxido de cumeno como se muestra en la siguiente figura.

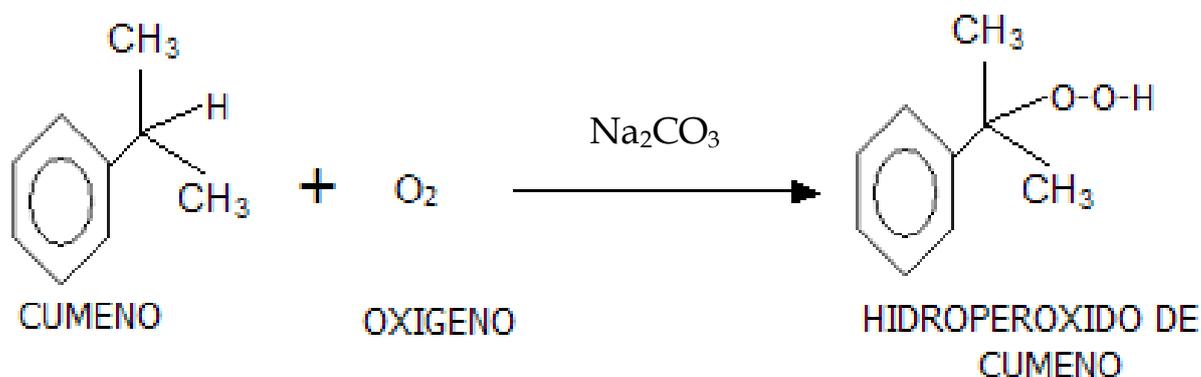


Fig. 1.2 Reacción de oxidación de cumeno en presencia de carbonato de sodio como catalizador.

2.1.2 CINÉTICA DE LA REACCIÓN

Síntesis del reactor No. 1 (reactor oxidador)

En la tabla siguiente se presentan los datos experimentales obtenidos de la patente no. **US 6,225,513** .United States Patent (Zakoshansky et al) siendo el nombre de la patente: PROCESS FOR THE PRODUCTION OF PHENOL AND ACETONE FROM CUMENE [7]



Tabla No.5 Datos experimentales para la reacción de oxidación de cumeno

Tiempo hr	Cumeno ton	Cumeno ton	HPC ton
1	53.7157895	18.9	44.1
1	52.3042947	17.1679	44.5061
1	46.6341474	11.7522	44.1838
1	52.0200842	17.1679	44.1461
1	48.4287158	12.1989	45.8911
1	52.6341474	17.7522	44.1838
1	52.0200842	17.1679	44.1461

Para poder calcular el orden de la reacción es necesario convertir los valores experimentales de la tabla anterior para tenerlos en las siguientes unidades Kmol y Kg, utilizando la densidad para sacar el volumen y después pasando a kmol /L obtenemos la siguiente tabla.

Tabla No.6 Datos experimentales para la reacción de oxidación de cumeno en Kmol / l

Tiempo hr	C ^o _{cumeno} Kmol/L	C _{cumeno} Kmol/L
1	0.00718333	0.00252747
1	0.00718333	0.00235779
1	0.00718333	0.00181026
1	0.00718333	0.00237068
1	0.00718333	0.00180944
1	0.00718333	0.00242276
1	0.00718333	0.00237068

Los datos experimentales que se presentan en las tablas anteriores están referidos a una temperatura de 50 °C y con ellos podemos probar si la reacción es de 1er, 2do ó 3er orden.

➤ **Si la reacción fuese de 1er orden:**

La ecuación es:

$$t = \frac{1}{K} \ln \left(\frac{C_A^0}{C_A} \right)$$

Despejando K tenemos:

$$K = \frac{1}{t} \ln \left(\frac{C_A^0}{C_A} \right)$$



Con los datos de la tabla No. 6 obtendremos los valores de la constante de velocidad de reacción, sustituyéndolos en las formula anterior, teniendo como resultado la tabla siguiente.

Tabla No.7 Valores de la constante de velocidad de reacción 1er orden

Tiempo hr	C ^o _{cumeno} Kmol/L	C _{cumeno} Kmol/L	K hr ⁻¹
1	0.00718333	0.00252747	1.04454507
1	0.00718333	0.00235779	1.11403712
1	0.00718333	0.00181026	1.37829259
1	0.00718333	0.00237068	1.10858852
1	0.00718333	0.00180944	1.37874716
1	0.00718333	0.00242276	1.08685565
1	0.00718333	0.00237068	1.10858852

De la tabla No. 7 podemos observar que los valores de la constante de velocidad de reacción son muy parecidos.

➤ **Si la reacción fuese de 2do orden:**

La ecuación es:

$$t * K = \left(\frac{1}{C_A} - \frac{1}{C_A^0} \right)$$

Despejando K tenemos:

$$K = \frac{1}{t} \left(\frac{1}{C_A} - \frac{1}{C_A^0} \right)$$

Con los datos de la tabla No. 6 obtendremos los valores de la constante de velocidad de reacción, sustituyéndolos en las formula anterior para reacciones de segundo orden con los que obtendremos los resultados siguientes mostrados en la tabla No. 8



Tabla No.8 Valores de la constante de velocidad de reacción 2do orden

tiempo hr	C ^o _{cumeno} Kmol/L	C _{cumeno} Kmol/L	K hr ⁻¹ Kmol ⁻¹ L
1	0.00718333	0.00252747	256.441567957
1	0.00718333	0.00235779	284.914139619
1	0.00718333	0.00181026	413.195448523
1	0.00718333	0.00237068	282.609532155
1	0.00718333	0.00180944	413.446609563
1	0.00718333	0.00242276	273.541056890
1	0.00718333	0.00237068	282.609532155

De la tabla No. 8 podemos observar que los valores de la constante de velocidad de reacción presentan una mayor variación que los obtenidos en la tabla No. 7

➤ Si la reacción fuese de 3er orden:

La ecuación es:

$$2t * K = \left(\frac{1}{C_A^2} - \frac{1}{C_{A^0}^2} \right)$$

Despejando K tenemos:

$$K = \frac{1}{2t} \left(\frac{1}{C_A^2} - \frac{1}{C_{A^0}^2} \right)$$

Con los datos de la tabla No. 6 obtendremos los valores de la constante de velocidad de reacción, sustituyéndolos en las formula anterior, para reacciones de tercer orden con los que obtendremos los resultados siguientes mostrados en la tabla No. 9

Tabla No.9 Valores de la constante de velocidad de reacción 3er orden

Tiempo hr	C ^o _{cumeno} Kmol/L	C _{cumeno} Kmol/L	K Khr ⁻¹ Kmol ⁻² L ²
1	0.00718333	0.00252747	68580.6611
1	0.00718333	0.00235779	80251.2548
1	0.00718333	0.00181026	142886.647
1	0.00718333	0.00237068	79276.4681
1	0.00718333	0.00180944	143025.422
1	0.00718333	0.00242276	75492.3164
1	0.00718333	0.00237068	79276.4681



De la tabla No. 9 podemos observar que los valores de la constante de velocidad de reacción presentan una mayor variación que los obtenidos en las tablas No. 7 y No. 8

Por lo anterior se concluye que la reacción es de **1er. Orden** y por lo tanto el valor de la K cinética es el promedio de las K obtenidas con la ecuación de orden 1.

$$K = 1.17423637 \text{ hr}^{-1} \text{ Con una temperatura de } 50 \text{ }^{\circ}\text{C}$$

2.1.3 DISEÑO DE UN REACTOR SEMI-BATCH

El reactor semi-batch probablemente es el tipo más frecuente de reactor en la industria química, particularmente en la rama química fina, en los laboratorios de la química orgánicos y en los procesos biotecnológicos.

De acuerdo a los datos de operación y a las características de los componentes que intervienen en la reacción se concluye que el reactor a diseñar será tipo semi-batch, (por lotes) donde cada lote involucrara una sola carga de cumeno y catalizador, la entrada y salida del aire será continua.

El reactor semi-batch es similar al reactor batch, pero tiene el rasgo de adición continua o retiro de uno o varios componentes / corrientes. Además de mejores producciones y selectividad, la adición gradual o el retiro ayudan en el control de la temperatura en particular cuando la reacción neta es sumamente exotérmica. El uso de un reactor semi-batch permite el funcionamiento de operación más estable y seguro que en el batch.

Ventajas para usar un Reactor sem-ibatch.

1. Control de concentración de reactantes para mejorar la selectividad de una reacción.
2. Adición de reactantes en pequeños incrementos para controlar la distribución de composición del producto (por ejemplo polimerización).
3. Control de calor en la Ejecución de reacciones (reacciones exotérmicas).
4. Evitar la toxicidad de sustratos para producir organismos o enzimas aisladas.
5. Retiro de producto para aumentar conversión y selectividad

6. Evitar la acumulación de reactantes propensos a la descomposición termal.
7. Simular la producción continua sobre todo para la pequeña escala.

2.2 REACTOR CSTR

2.2.1 REACCION PRINCIPAL

En el segundo reactor (reactor CSTR) se efectúa la reacción de conversión del Hidroperóxido de cumeno, esto se logra mezclando la corriente proveniente del primer reactor y adicionándole ácido sulfúrico diluido al 10% como catalizador, en el reactor CSTR, obteniéndose como producto fenol (producto principal) y acetona, además de obtenerse subproductos tales como; alfa-metil-estireno, acetofenona y metanol, en las reacciones secundarias, como se muestra en las siguientes figuras.

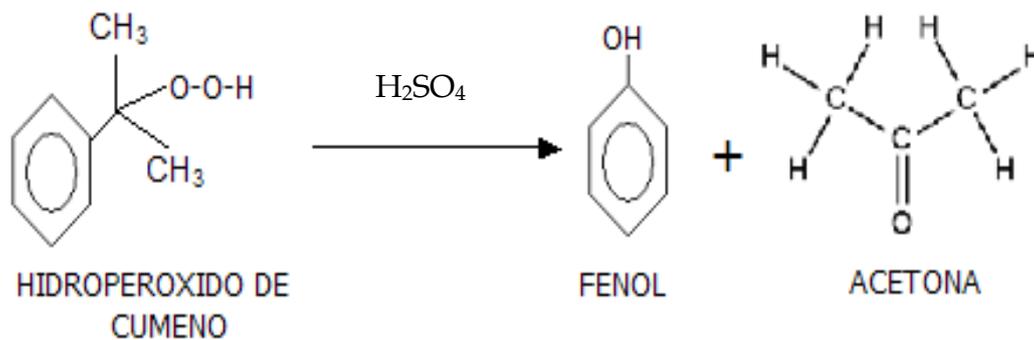


Fig. 2.2 Reacción de conversión de hidroperóxido de cumeno en presencia de ácido sulfúrico como catalizador (reacción principal).

Reacciones secundarias

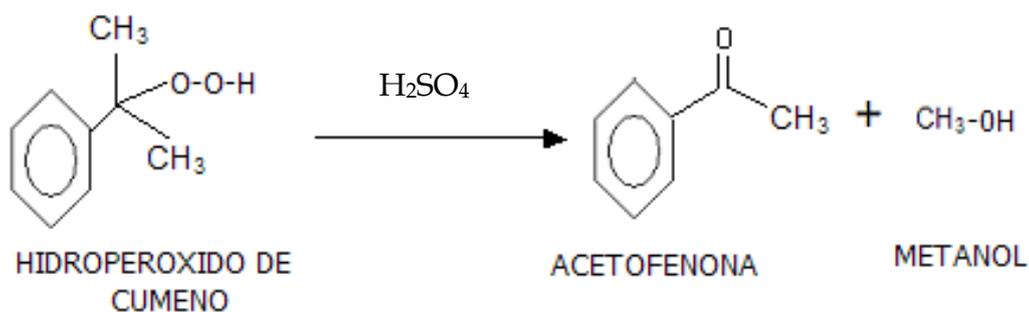


Fig. 3.2 Reacción de conversión de hidroperóxido de cumeno en presencia de ácido sulfúrico como catalizador (primera reacción secundaria)

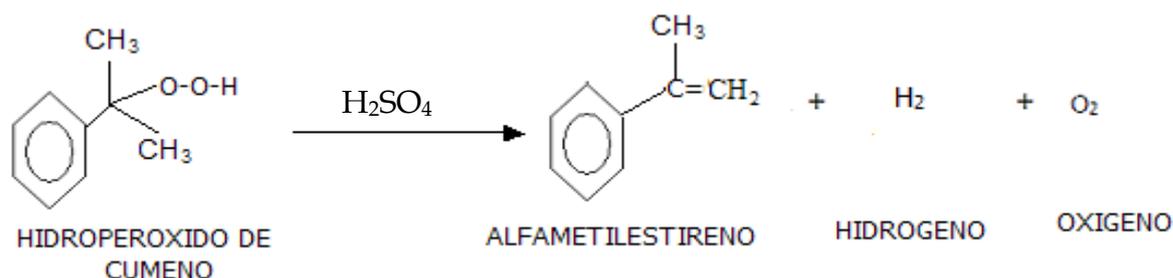


Fig. 4.2 Reacción de conversión de hidroperóxido de cumeno en presencia de ácido sulfúrico como catalizador (segunda reacción secundaria)

2.2.2 CINÉTICA DE LA REACCIÓN

Síntesis del reactor No. 2 (reactor convertidor)

En la tabla siguiente se presentan los datos experimentales obtenidos de la patente no. **US 4, 358,618**. [8]

Tabla No.10 Valores de la constante de velocidad de reacción experimentales de la patente US 4,358,618

Temperatura °C	Constante de velocidad de reacción min ⁻¹
50	4.8026
75	5.2173

Utilizando los datos de la tabla anterior y manejando la ecuación de Arrhenius podremos conocer el valor de la energía de activación, con el fin de conocer posteriormente la constante de velocidad de reacción a cualquier temperatura.

$$K = K_0 e^{\frac{-E_a}{RT}}$$

Despejando K_0 sustituyendo el primer valor de K a 50°C se tiene la siguiente ecuación:

$$K_0 = \frac{4.8026 \text{ min}^{-1}}{e^{\frac{-E_a}{(8.314 * 323.15^\circ K)}}}$$



Sustituyendo K_0 en la ecuación de Arrhenius e igualando con la K a $75\text{ }^\circ\text{C}$, tendremos lo siguiente:

$$5.2173 \text{ min}^{-1} = \frac{4.8026 \text{ min}^{-1}}{e^{\frac{-Ea}{(8.314 * 323.15^\circ K)}}} * e^{\frac{-Ea}{(8.314 * 348.15^\circ K)}}$$

De la ecuación anterior se obtiene la energía de activación y se sustituye en la ecuación de K_0 , para obtener los resultados siguientes:

$$Ea = 3098.77021 \text{ J / gmol}$$

$$K_0 = 15.21900246 \text{ min}^{-1}$$

Con los valores obtenidos de Ea y K_0 se puede calcular la K cinética a cualquier temperatura, tomando en cuenta que las condiciones de operación del reactor son las siguientes: $T = 70\text{ }^\circ\text{C} = 343.15\text{ }^\circ\text{C}$ y una presión de 1 atm. Con estos datos es posible calcular la constante de velocidad de reacción que en nuestro caso será la siguiente:

$$K = 15.21900246 \text{ min}^{-1} * e^{\left(\frac{-3098.7721 \text{ J / gmol}}{(8.314 * 343.15^\circ K)}\right)}$$

$$K = 5.136546404 \text{ min}^{-1}$$

$$K = 308.1927842 \text{ hr}^{-1}$$

2.2.3 DISEÑO DE UN REACTOR CSTR

Este tipo de reactor consiste en un tanque con buena agitación en el que hay un flujo continuo de material reaccionante y desde el cual sale continuamente el material que ha reaccionado (parcialmente). La agitación del contenido es esencial a causa de la forma de estos recipientes (por ejemplo, cilindros cuyo diámetro es igual a su altura); si no fuera así, se crearía una corriente directa de fluido entre la entrada y la salida del recipiente y gran parte del volumen de este sería un espacio muerto (sin circulación).

Ventajas en la elaboración de un reactor CSTR

1. Una de las grandes ventajas de los reactores CSTR, además de su sencillez de construcción, es la facilidad con que se realiza el control de la temperatura. Los reactivos que entran al primer recipiente de inmediato entran a un gran volumen de fluido que ha reaccionado parcialmente y, debido a la agitación, no tienden a producirse zonas calientes. Asimismo los tanques del reactor CSTR ofrecen la oportunidad de proporcionar un área muy grande de superficie de



enfriamiento. Además de la superficie externa de los recipientes mismos, puede lograrse una gran cantidad de superficie interna si se instalan serpentines sumergidos.

2. Otra ventaja es que la construcción es abierta. Esto facilita la limpieza de las superficies internas lo cual es importante en el caso de reacciones en que hay una tendencia a que se deposite material sólido, por ejemplo, en los procesos de polimerización y en las reacciones en que se forma como producto algún material alquitranado. [9]

Influencia del catalizador

La función del ácido sulfúrico es la de donar iones H^+ para la formación del Fenol y debido a la migración de dichos iones es como se forman los productos, la influencia en el diseño del reactor será de acuerdo a él volumen que este ocupara en el reactor.

Tipo de reactor

De acuerdo a los datos de operación y a las características de los componentes que intervienen en la reacción se concluye que el reactor a diseñar será tipo CSTR, (perfectamente mezclado) donde la entrada y salida de reactivos y productos será de manera continua.

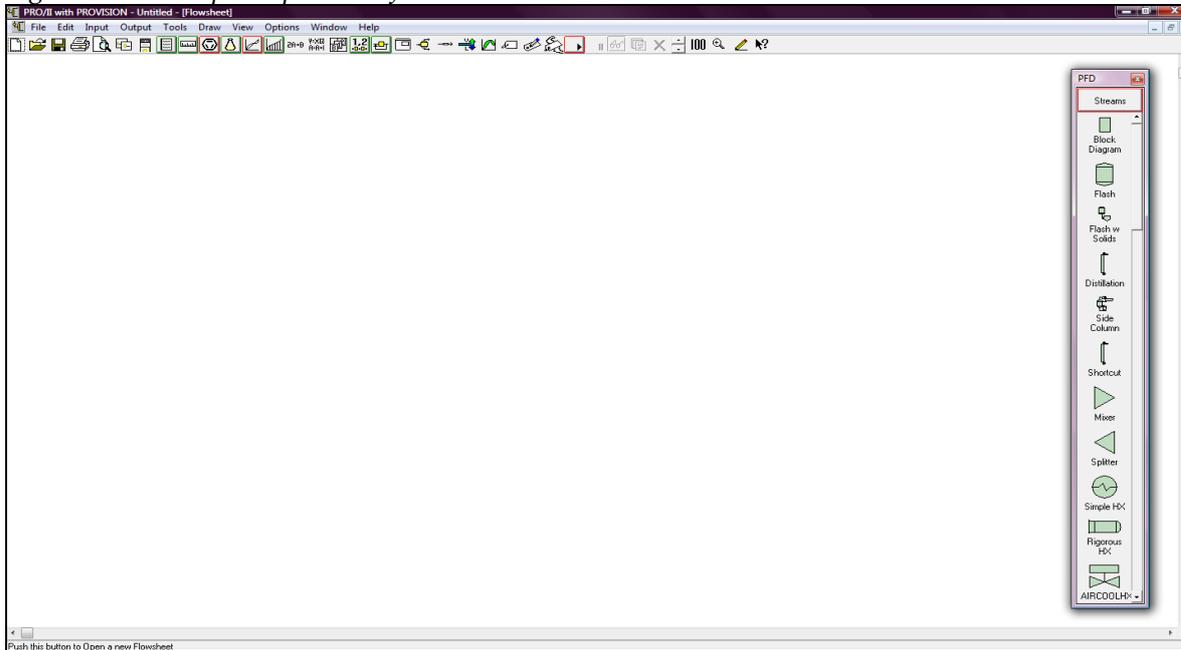
3. SIMULACION DE LOS REACTORES PARA LA OBTENCION DE FENOL.

A continuación se muestran los pasos para la simulación de los reactores utilizando el simulador PRO II:

En la figura 1.3 observamos la apertura del software del simulador PRO II, en la cual encontramos la paleta de los equipos y los iconos básicos con los que cuenta el simulador, esto con el fin de ir ubicando cuales son los dispositivos que seleccionaremos para nuestro proceso (reactores).

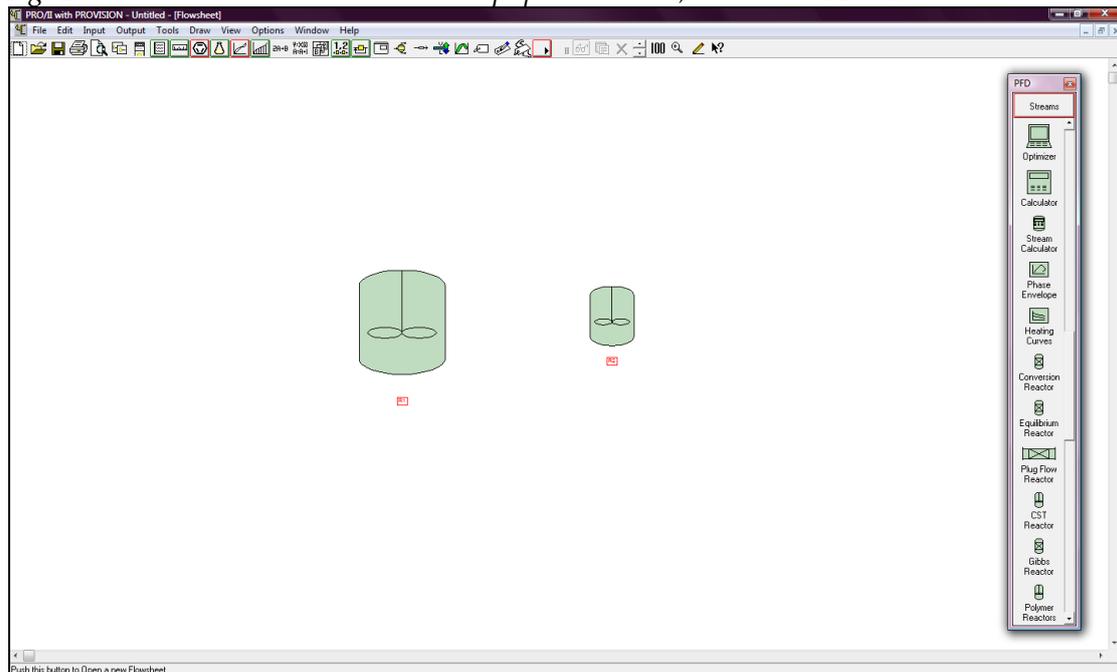


Fig. 1.3 Ventana principal del software del simulador PRO II



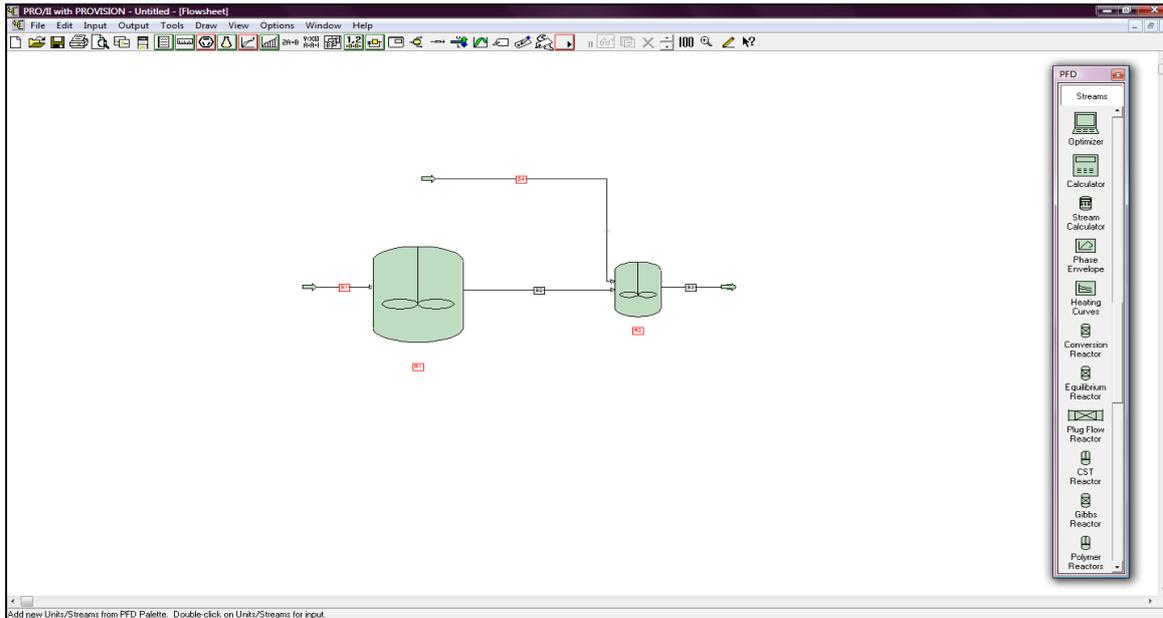
En la figura 2.3 podemos observar, que en base a los determinado en el capitulo No. 2, se anexaron los equipos en la pantalla para ir construyendo nuestros diagrama, aquí es importante aclarar que el PRO II cuenta con una gama diversa de tipos de reactores por ello debemos de seleccionar de forma precisa con los equipos que vamos a trabajar.

Fig. 2.3 Ventana con la selección de los equipos a utilizar, simulador PRO II



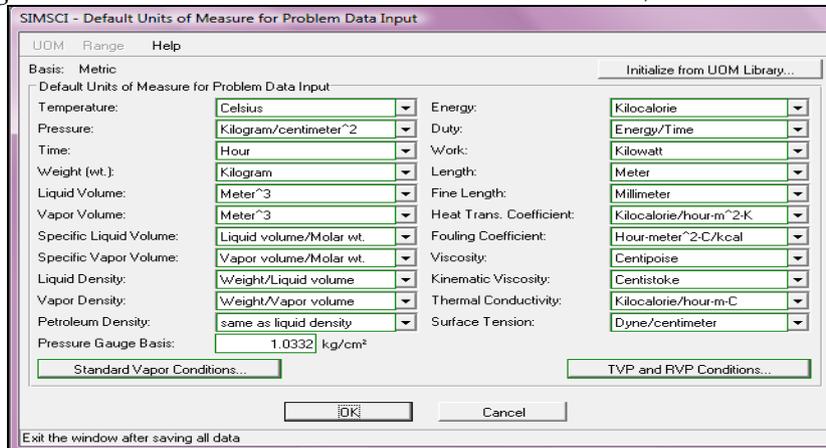
En la figura 3.3 podemos observar la facilidad con la que el simulador PRO II nos permite paso a paso ir generando la conexión de nuestros equipos ya seleccionados, definiendo sus entradas y salidas de los flujos respectivos, ubicar direcciones de flujo y especificaciones de las corrientes.

Fig. 3.3 Ventana con la selección de las conexiones de entradas y salidas de los equipos a utilizar, simulador PRO II



Para la figura 4.3 tenemos una ventana que nos muestra la selección del sistema de unidades a utilizar, se debe entender que la homogeneidad al sistema de unidades nos lleva a un correcto desempeño del simulador, esto se puede traducir en que si desde un principio establecemos el criterio de igualdad de las unidades los resultados se podrán interpretar de manera clara.

Fig. 4.3 Ventana con la selección del sistema de unidades, simulador PRO II



En las siguientes figuras (fig. 5.3 y fig. 6.3) vemos la ventana que nos permite hacer la selección de todos los componentes (sustancias) que intervienen en el proceso. El PRO II cuenta con una base de datos de una gran variedad de compuestos que son comúnmente utilizados en un gran número de procesos. Todos ellos están considerados con sus propiedades fisicoquímicas. Para esta parte podemos aclarar que si tuviéramos alguna sustancia o compuesto que no estuviera indicado en la base de datos del simulador será necesario anexarla.

Fig. 5.3 Ventana con la selección de los componentes, simulador PRO II

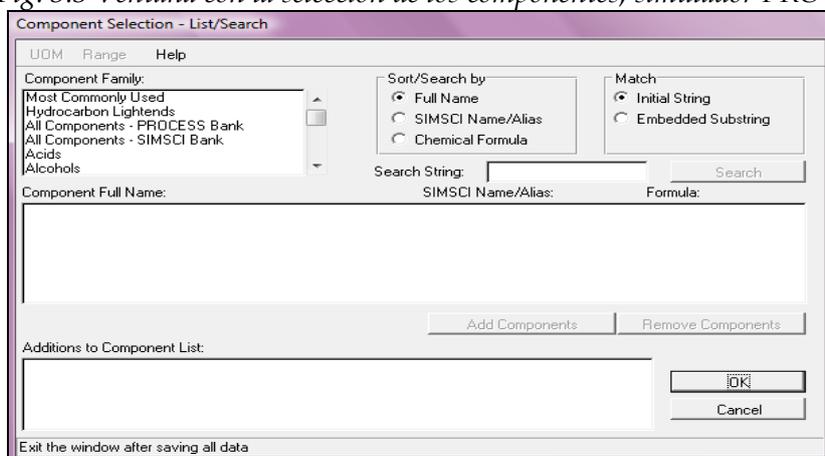
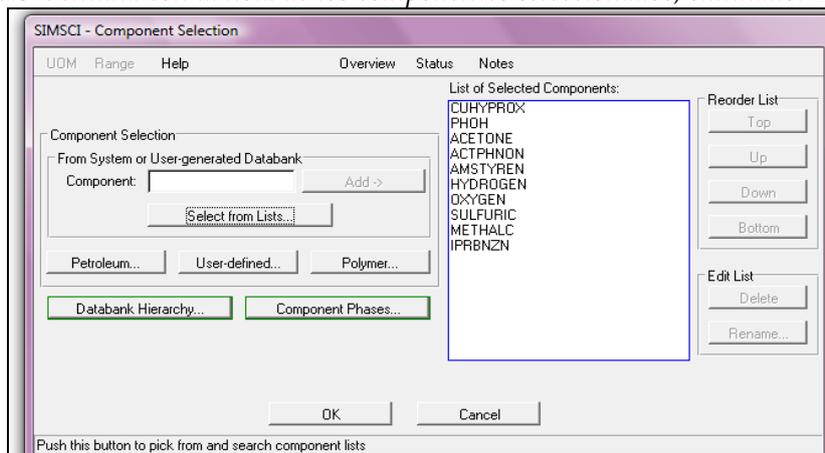


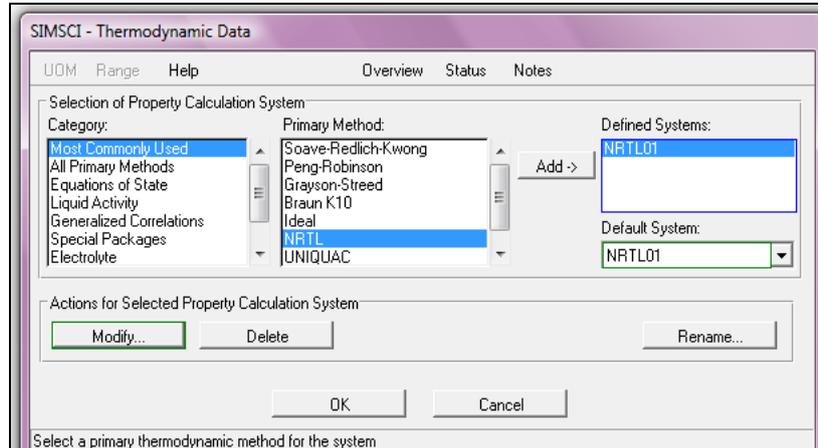
Fig. 6.3 Ventana con la lista de los componentes seleccionados, simulador PRO II



Una vez seleccionados los componentes a utilizar en el proceso procedemos a seleccionar el metodo termodinamico mas adecuado. En la figura 7.3 podemos observar la ventana que nos muestra los metodos termodinamicos, con los que el simulador PRO II cuenta, por ellos y dependiendo de las

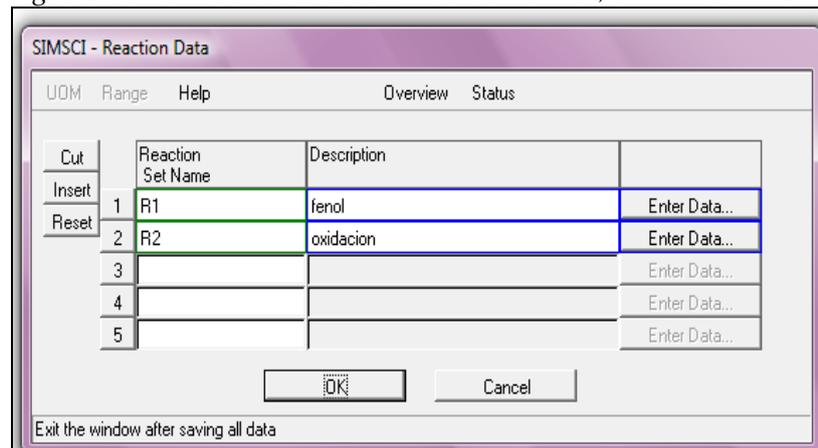
características de nuestro proceso seleccionaremos el que mas se adapta a nuestro proceso.

Fig. 7.3 Ventana con la selección del método termodinámico a utilizar, simulador PRO II



A continuación indicaremos las reacciones que se llevan a cabo en nuestro proceso, esto lo podemos observar en la figura 8.3. cabe mencionar que en la selección de las reacciones que se llevan a cabo se coloca como R1 (reacción principal) a la obtención de Fenol mientras que para la R2 (reacción de oxidación, etapa 1) a la reacción de oxidación de cumeno.

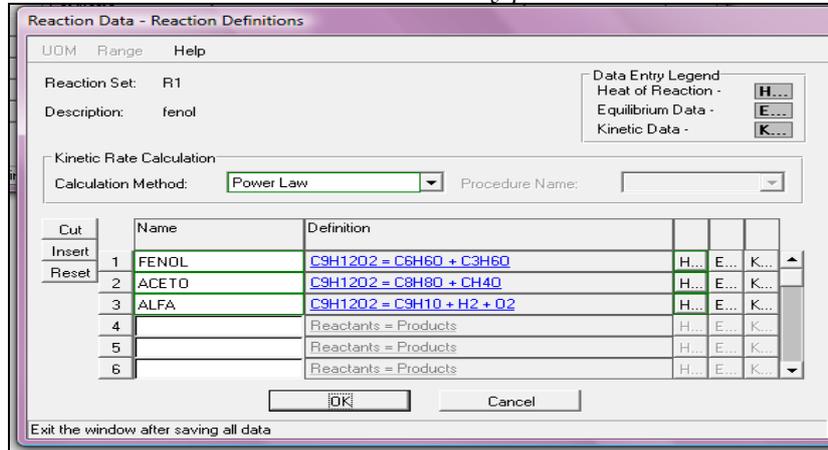
Fig. 8.3 Ventana con la selección de las reacciones, simulador PRO II



Seleccionados los compuestos a utilizar y teniendo indicadas las reacciones procedemos a definir de manera clara como intervienen cada uno de los compuestos seleccionados en cada una de las reacciones. Para ello observaremos la figura 9.3 se muestra la ventana en la que podemos apreciar el nombre del producto o subproducto a obtener y en seguida se muestra la

reacción con la cual se obtiene dicho producto o subproducto. Estos datos el simulador los almacena para continuar indicándole los siguientes.

Fig. 9.3 Ventana con la indicación de las reacciones y productos a obtener, simulador PRO II



En las figuras que a continuación se presentan (fig. 10.3, 11.3, 12.3, 13.3) se describen los coeficientes estequiométricos de cada uno de los compuestos según la reacción a efectuar (producto a obtener), esto es fundamental ya que las reacciones deben estar balanceadas de lo contrario los cálculos serán erróneos en los balances. Cabe mencionar que la figura 13.3 habla de la primera etapa de reacción que es la de la oxidación de cumeno.

Fig. 10.3 Ventana con la selección del coeficiente estequiométrico para la obtención de fenol, simulador PRO II

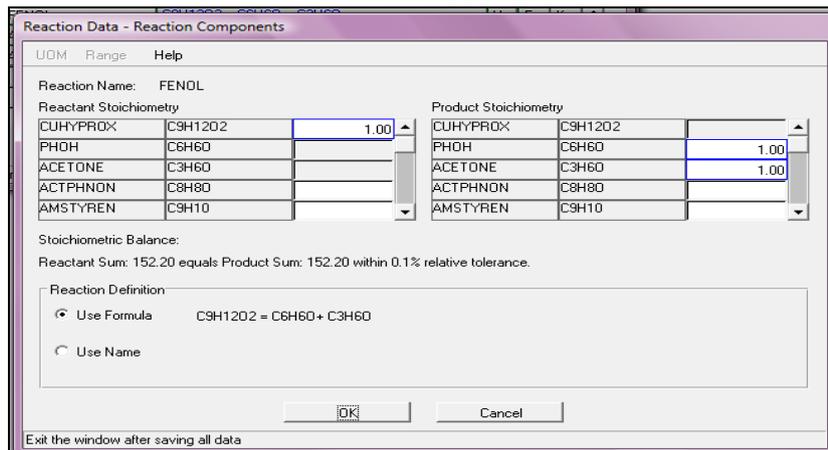
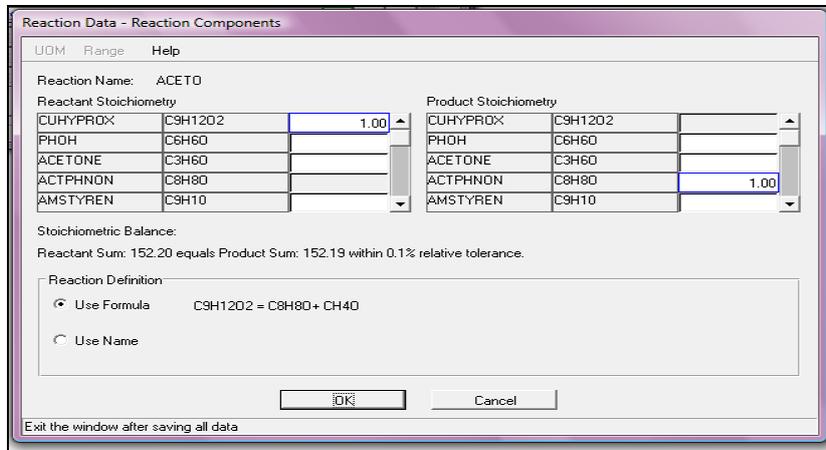


Fig. 11.3 Ventana con la selección del coeficiente estequiometrico para la obtención de acetona, simulador PRO II



Reaction Data - Reaction Components

UOM Range Help

Reaction Name: ACETO

Reactant Stoichiometry			Product Stoichiometry		
CUHYPROX	C9H12O2	1.00	CUHYPROX	C9H12O2	
PHOH	C6H6O		PHOH	C6H6O	
ACETONE	C3H6O		ACETONE	C3H6O	
ACTPHNON	C8H8O		ACTPHNON	C8H8O	1.00
AMSTYREN	C9H10		AMSTYREN	C9H10	

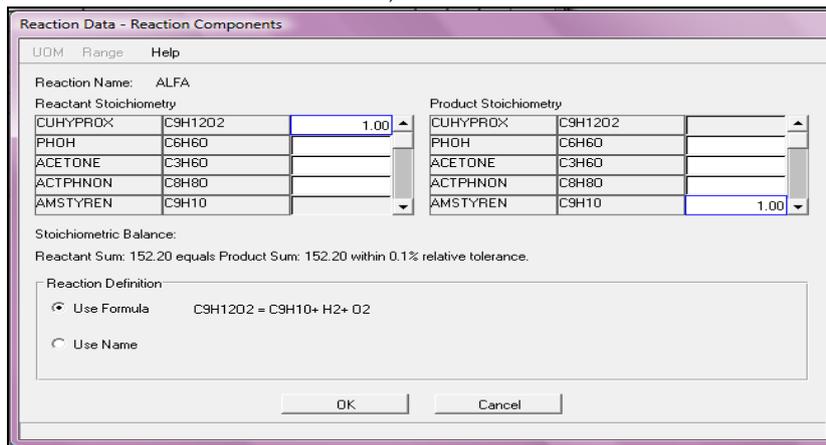
Stoichiometric Balance:
 Reactant Sum: 152.20 equals Product Sum: 152.19 within 0.1% relative tolerance.

Reaction Definition:
 Use Formula $C_9H_{12}O_2 = C_8H_8O + CH_4O$
 Use Name

OK Cancel

Exit the window after saving all data

Fig. 12.3 Ventana con la selección del coeficiente estequiometrico para la obtención de alfa-metil-estireno, simulador PRO II



Reaction Data - Reaction Components

UOM Range Help

Reaction Name: ALFA

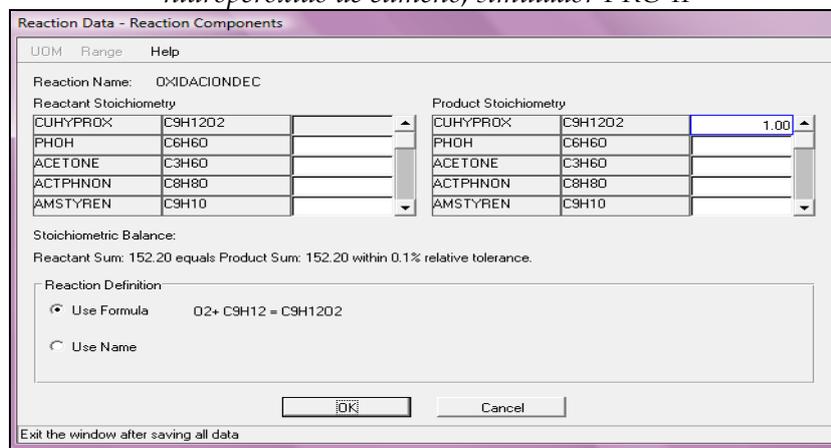
Reactant Stoichiometry			Product Stoichiometry		
CUHYPROX	C9H12O2	1.00	CUHYPROX	C9H12O2	
PHOH	C6H6O		PHOH	C6H6O	
ACETONE	C3H6O		ACETONE	C3H6O	
ACTPHNON	C8H8O		ACTPHNON	C8H8O	
AMSTYREN	C9H10		AMSTYREN	C9H10	1.00

Stoichiometric Balance:
 Reactant Sum: 152.20 equals Product Sum: 152.20 within 0.1% relative tolerance.

Reaction Definition:
 Use Formula $C_9H_{12}O_2 = C_9H_{10} + H_2 + O_2$
 Use Name

OK Cancel

Fig. 13.3 Ventana con la selección del coeficiente estequiometrico para la obtención de hidroperóxido de cumeno, simulador PRO II



Reaction Data - Reaction Components

UOM Range Help

Reaction Name: OXIDACIONDEC

Reactant Stoichiometry			Product Stoichiometry		
CUHYPROX	C9H12O2		CUHYPROX	C9H12O2	1.00
PHOH	C6H6O		PHOH	C6H6O	
ACETONE	C3H6O		ACETONE	C3H6O	
ACTPHNON	C8H8O		ACTPHNON	C8H8O	
AMSTYREN	C9H10		AMSTYREN	C9H10	

Stoichiometric Balance:
 Reactant Sum: 152.20 equals Product Sum: 152.20 within 0.1% relative tolerance.

Reaction Definition:
 Use Formula $O_2 + C_9H_{12} = C_9H_{12}O_2$
 Use Name

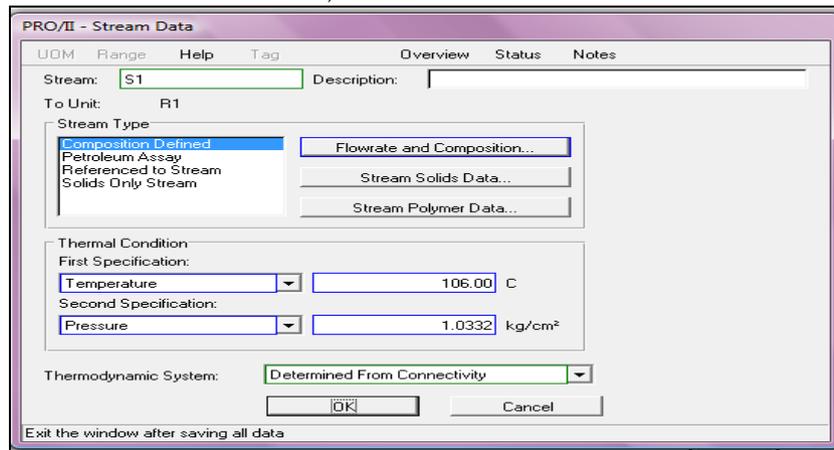
OK Cancel

Exit the window after saving all data

Posteriormente se procede a proporcionar la informacion de los datos de las corrientes de entrada a los reactores, por ello es importante conocer los

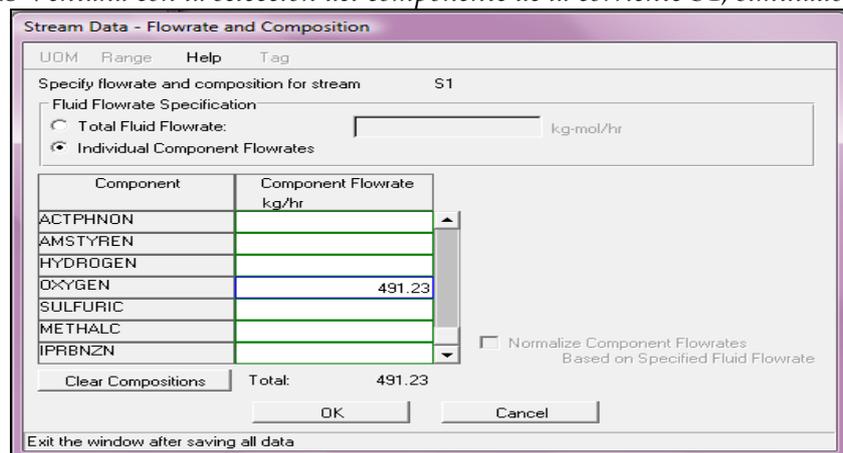
detalles a partir de la bibliografía o bien de procesos ya existentes. En la figura 14.3 seleccionares las condiciones de presión y temperatura a la entrada del primer reactor y para la corriente S1.

Fig. 14.3 Ventana con la selección de las condiciones de presión y temperatura para la corriente S1, simulador PRO II



Después de haber seleccionado las condiciones de presión y temperatura es necesario indicar que componente es el que va por esa corriente y en qué cantidades se alimentara a nuestro reactor, por ello en la figura 15.3 podemos observar que se hace la indicación del contenido de la corriente S1.

Fig. 15.3 Ventana con la selección del componente de la corriente S1, simulador PRO II



Lo anterior es necesario hacerlo para la otra corriente S2, por lo que se muestran las figuras siguientes para tal efecto.

Fig. 16.3 Ventana con la selección de las condiciones de presión y temperatura para la corriente S2, simulador PRO II

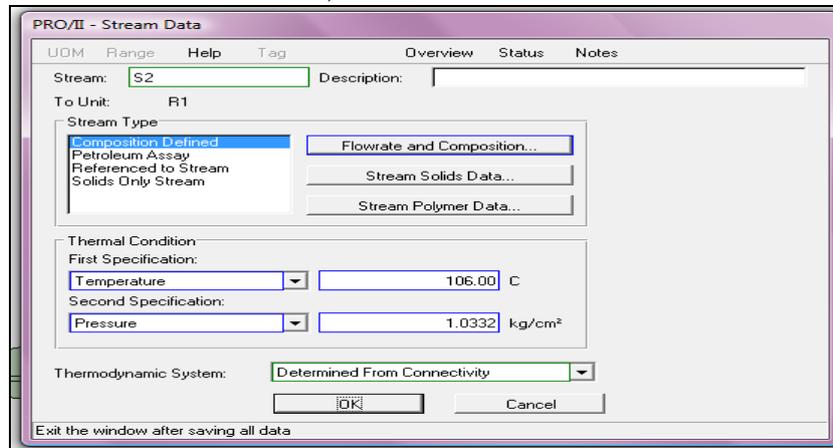
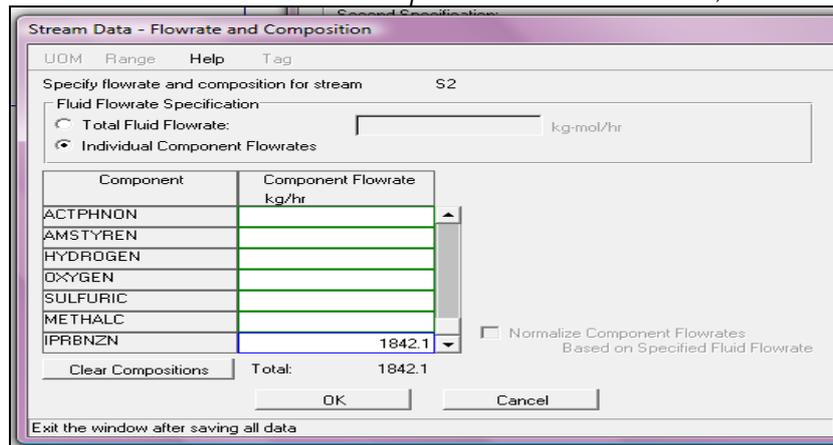
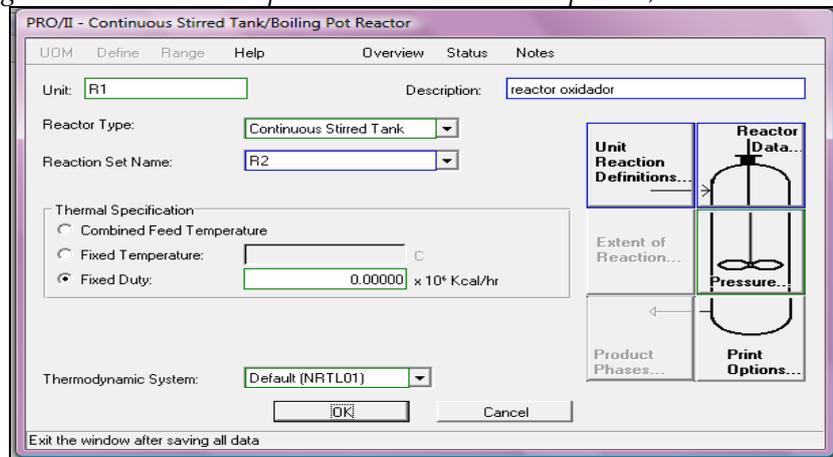


Fig. 17.3 Ventana con la selección del componente de la corriente S2, simulador PRO II



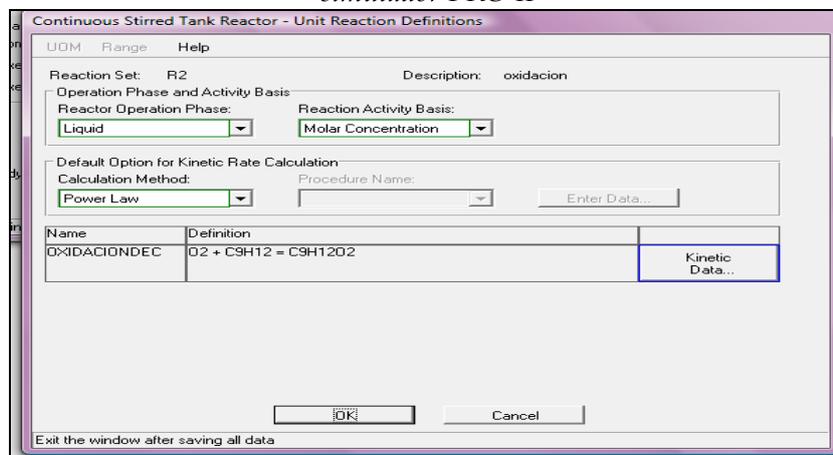
Posteriormente se procede a la complementación de los datos necesarios para los equipos, esto es características generales de nuestros dispositivos de reacción (reactores). En esta parte es donde se debe tener un manejo adecuado para que las especificaciones de los equipos estén completas y el PRO II arroje datos coherentes y sobretodo tengamos la facilidad de manipular la información, con el fin de mejorar el proceso. En la figura 17.3 podemos observar la ventana que nos muestra el equipo de reacción, aquí es donde indicaremos que reacción es la que se llevara a cabo en este reactor.

Fig. 18.3 Ventana descripción de la reacción en el primer, simulador PRO II



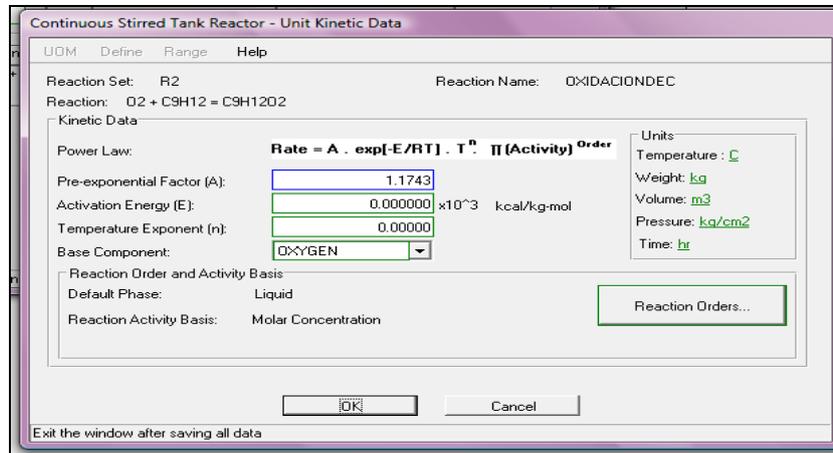
Posteriormente le indicaremos la reacción que se llevara a cabo, la fase en que se realizara la reacción y el metodo de calculo que utilizaremos. Esto lo podremos observar en la figura 19.3

Fig. 19.3 Ventana con la selección de la reacción y el método de cálculo para el primer reactor, simulador PRO II



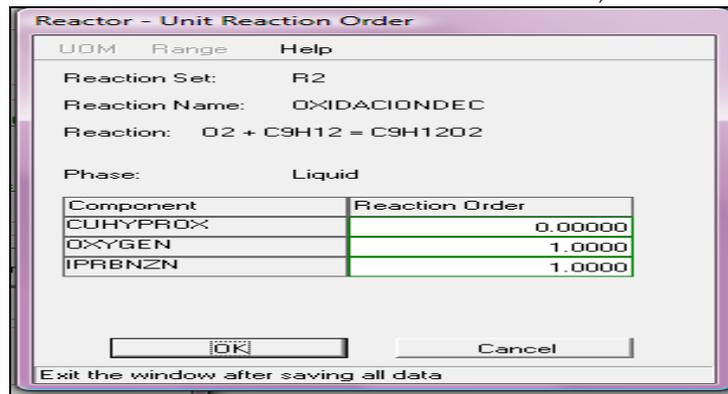
A continuación se muestra la figura 20.3 en la cual es fácil observar la ventana con los datos que le hemos indicado al simulador para la reacción de oxidación. Y en ella podemos indicarle el factor pre-exponencial para nuestra reacción y la energía de activación.

Fig. 20.3 Ventana con indicación del factor pre-exponencial para el primer reactor, simulador PRO II



En seguida indicaremos el orden de la reacción que se lleva a cabo en nuestro reactor.

Fig. 21.3 Ventana con la indicación del orden de reacción, simulador PRO II



Posteriormente haremos los mismos pasos para indicar los datos de las corrientes posteriores de entrada, así como los datos generales para nuestro segundo reactor, esto podemos apreciarlo en las siguientes figuras (fig. 22.3, 23.3, 24.3, 25.3, 26.3, 27.3 y 28.3)

Fig. 22.3 Ventana con la selección de las condiciones de presión y temperatura para la corriente S5, simulador PRO II

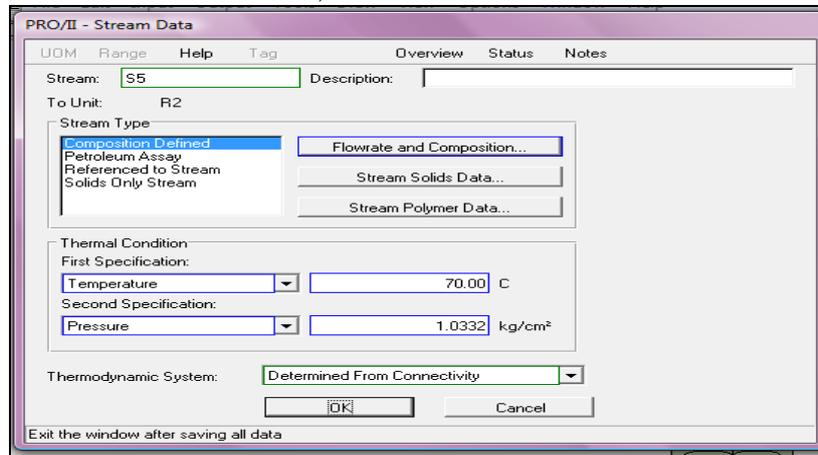


Fig. 23.3 Ventana con la selección del componente de la corriente S5, simulador PRO II

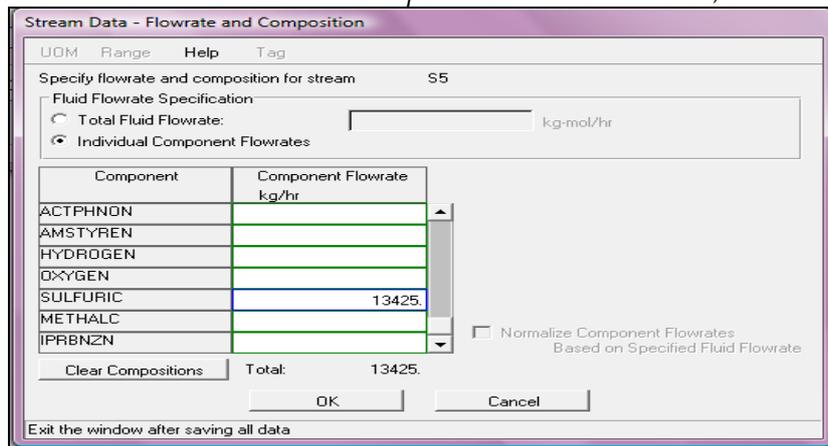


Fig. 24.3 Ventana descripción de la reacción en el segundo reactor, simulador PRO II

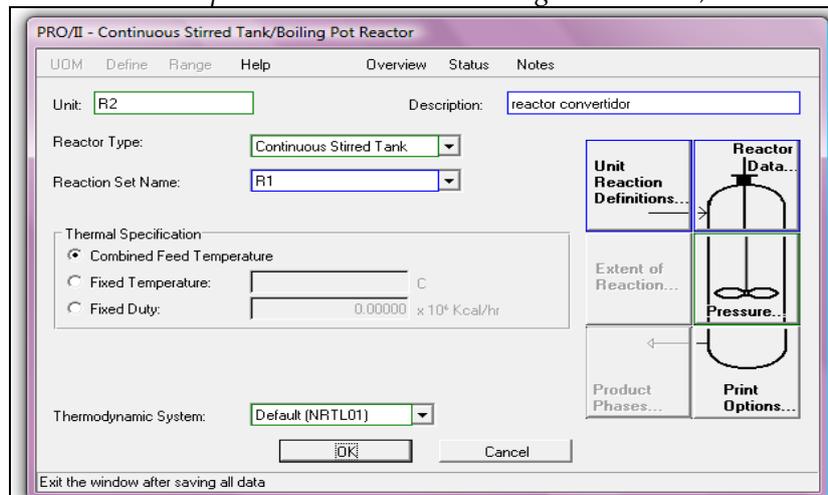
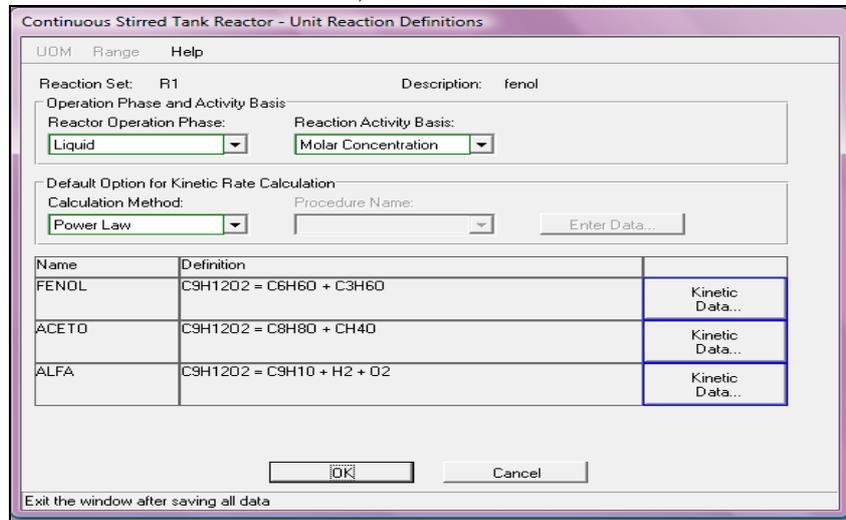


Fig. 25.3 Ventana con la selección de las reacciones y el método de cálculo para el segundo reactor, simulador PRO II



Continuous Stirred Tank Reactor - Unit Reaction Definitions

UOM Range Help

Reaction Set: R1 Description: fenol

Operation Phase and Activity Basis

Reactor Operation Phase: Liquid Reaction Activity Basis: Molar Concentration

Default Option for Kinetic Rate Calculation

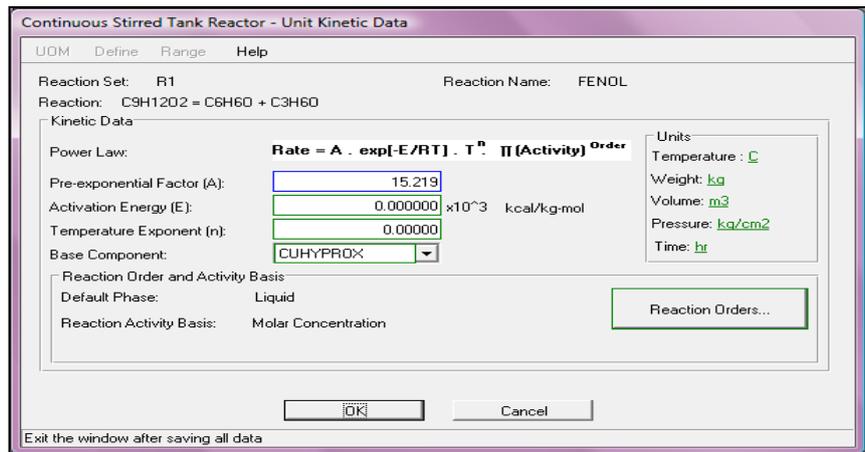
Calculation Method: Power Law Procedure Name: Enter Data...

Name	Definition	
FENOL	C9H12O2 = C6H6O + C3H6O	Kinetic Data...
ACETO	C9H12O2 = C8H8O + CH4O	Kinetic Data...
ALFA	C9H12O2 = C9H10 + H2 + O2	Kinetic Data...

OK Cancel

Exit the window after saving all data

Fig. 26.3 Ventana con indicación del factor pre-exponencial para obtención de fenol en el segundo reactor, simulador PRO II



Continuous Stirred Tank Reactor - Unit Kinetic Data

UOM Define Range Help

Reaction Set: R1 Reaction Name: FENOL

Reaction: C9H12O2 = C6H6O + C3H6O

Kinetic Data

Power Law: Rate = A . exp[-E/RT] . Tⁿ . II (Activity)^{Order}

Pre-exponential Factor (A): 15.219

Activation Energy (E): 0.000000 x10⁻³ kcal/kg-mol

Temperature Exponent (n): 0.000000

Base Component: CUHYPROX

Units: Temperature: C, Weight: kg, Volume: m3, Pressure: kg/cm2, Time: hr

Reaction Order and Activity Basis

Default Phase: Liquid

Reaction Activity Basis: Molar Concentration

Reaction Orders...

OK Cancel

Exit the window after saving all data

En el caso del segundo reactor, tenemos que la reacción que se lleva a cabo en este, además de producir fenol genera subproductos es por ello que debemos indicar para cada una de las reacciones el factor pre-exponencial, por ello se muestran por separado las ventanas en donde se indica cada uno de los productos y su factor pre-exponencial.

Fig. 27.3 Ventana con indicación del factor pre-exponencial para obtención de acetona en el segundo reactor, simulador PRO II

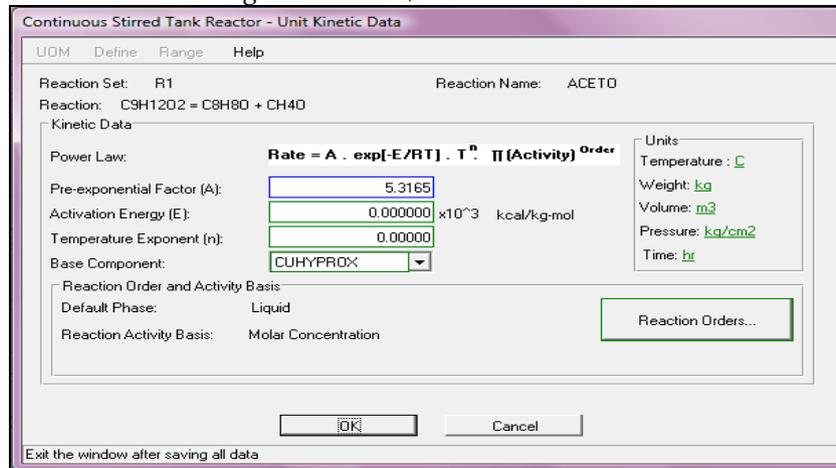
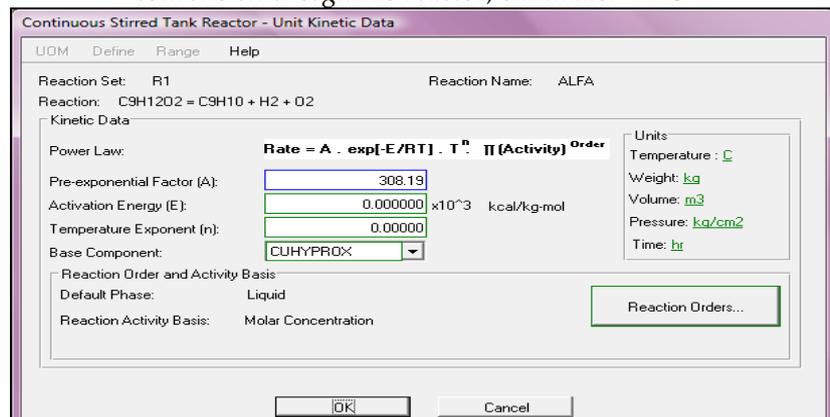
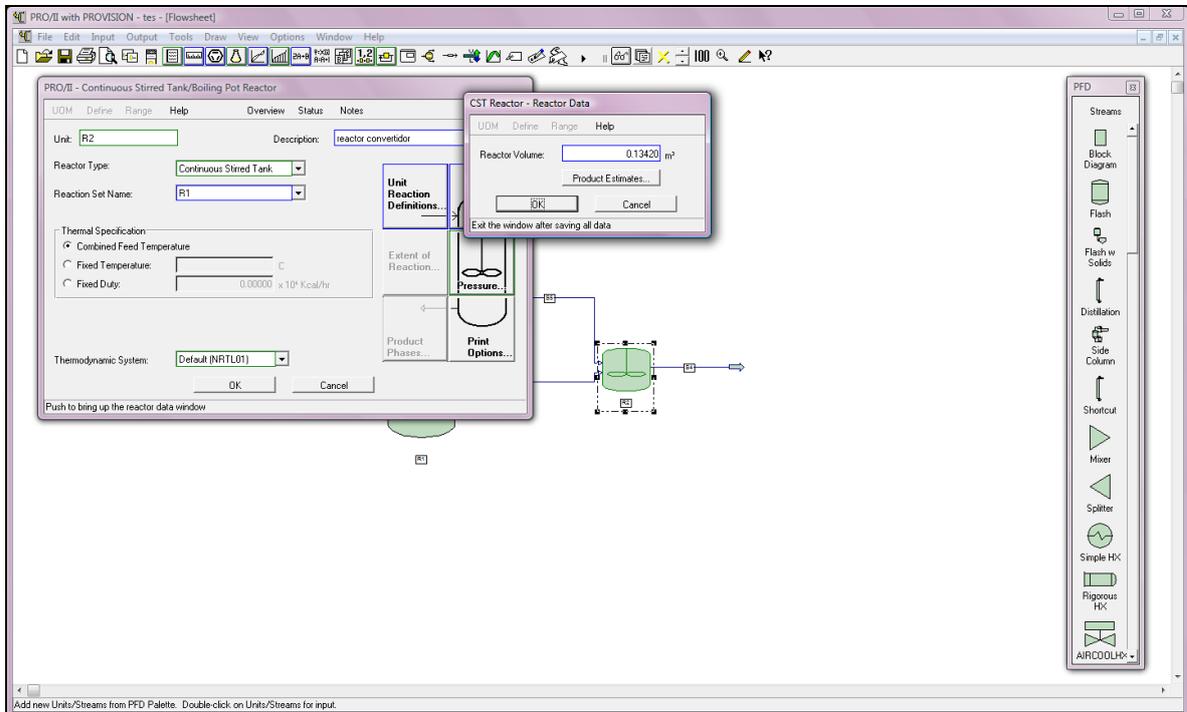


Fig. 28.3 Ventana con indicación del factor pre-exponencial para obtención de alfa-metil-estireno en el segundo reactor, simulador PRO II



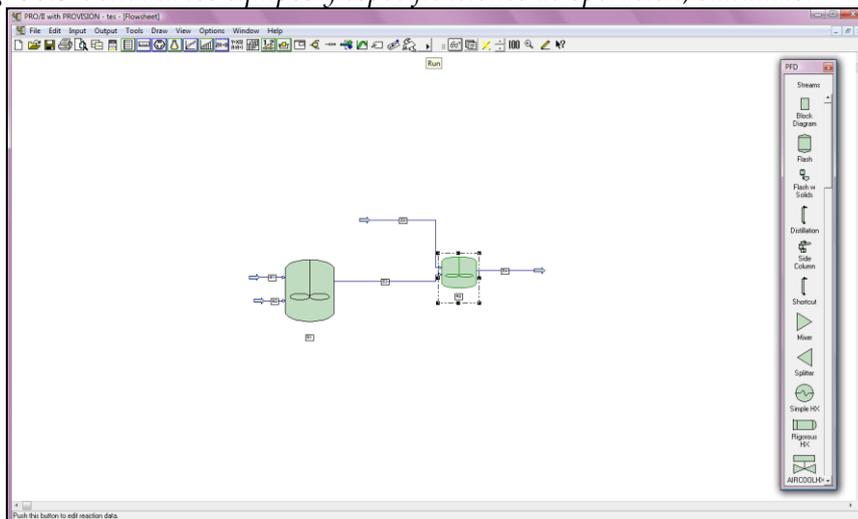
Ya que tenemos listo nuestras corrientes de entrada a los reactores, proponemos en base a los datos de bibliografía un volumen para nuestro reactor en nuestro caso dicho volumen sera de 0.1342 m³ obtenidos de la patente no. US 4,358,618. [8]

Fig. 29.3 Ventana con indicación del volumen propuesto en el segundo reactor, simulador PRO II



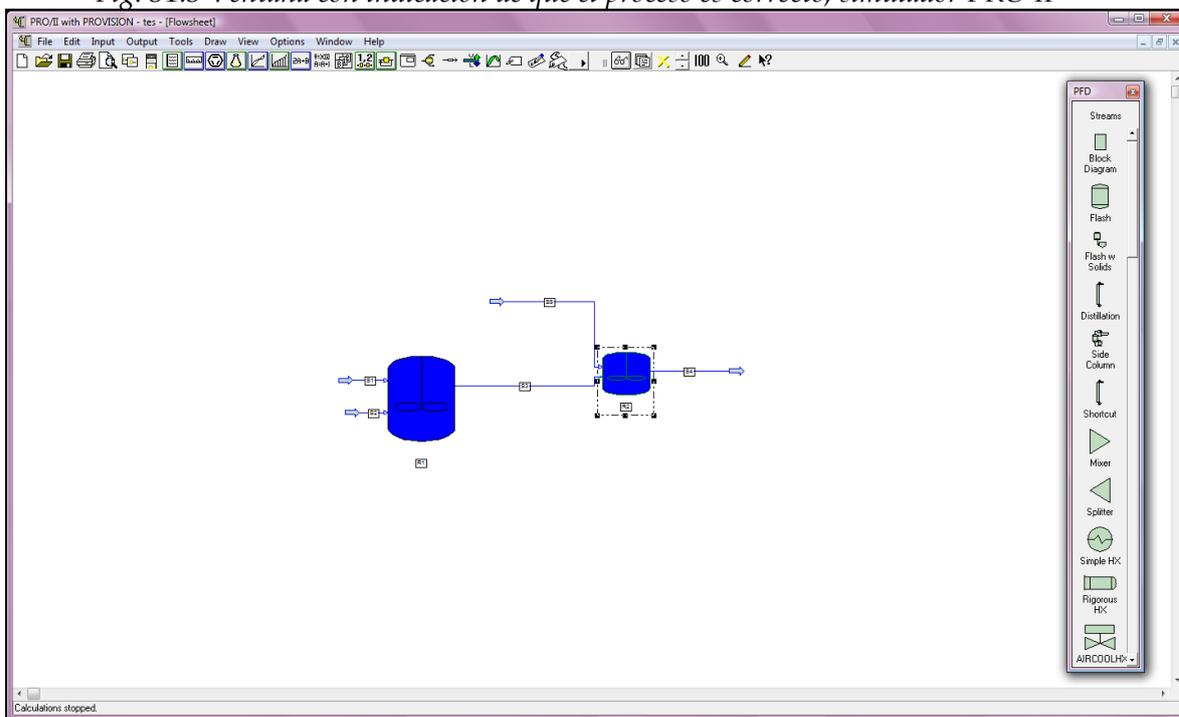
En la figura 30.3 observamos la ventana con los equipos anexados al diagrama, las corrientes de entrada y salida. En esta figura se muestra que una vez que tenemos las especificaciones de operación listas es posible proceder a correr el programa.

Fig. 30.3 Ventana los equipos y especificaciones de operación, simulador PRO II



El programa nos indica que una vez corrido, si las figuras del diagrama se tornan de color azul el proceso es correcto y en este momento se empiezan a generar los resultados los cuales tendremos que analizar.

Fig. 31.3 Ventana con indicación de que el proceso es correcto, simulador PRO II



4. TABLAS DE RESULTADOS

Datos en el Reactor 1: Oxidador (Semi-batch)

Tabla No.11 temperatura y presión en las entradas y salidas del primer reactor

	ENTRADA	SALIDA
ALIMENTACION	S1, S2	S3
TEMPERATURA (°C)	86.13	212.86
PENSION (Kg/cm2)	1.0332	1.0332

Tabla No.12 balance de masa en el primer reactor

COMPONENTE	ALIMENTACIÓN (KG/HR)	PRODUCTO (KG/HR)
HIDROPERÓXIDO DE CUMENO	0	1745.7037
OXIGENO	491.23	124.1958
CUMENO	1842.1	463.4305
TOTAL	2333.33	2333.33



Datos en el Reactor 2: Convertidor (CSTR)

Tabla No.13 temperatura y presión en las entradas y salidas del segundo reactor

	ENTRADA	SALIDA
ALIMENTACIÓN MEZCLA DEL PRODUCTO	S3,S5	S4
TEMPERATURA (°C)	123.43	123.43
PRESIÓN (Kg/cm ²)	1.0332	1.0332

Tabla No.14 balance de masa en el segundo reactor

COMPONENTE	ALIMENTACIÓN (KG/HR)	PRODUCTO (KG/HR)
HIDROPEROXIDO DE CUMENO	1745.7037	361.3414
FENOL	0	423.6161
ACETONA	0	24.4579
ACETOFENONA	0	17.6744
ALFA-METIL-ESTIRENO	0	1007.8154
HIDROGENO	0	17.1920
OXIGENO	124.1945	13.0876
ACIDO SULFURICO	13424.9972	13424.9972
METANOL	0	4.7134
CUMENO	463.4277	463.4277
TOTAL	15758.3231	15758.3231



5. ANALISIS DE RESULTADOS

En este trabajo se realizó la simulación del proceso de obtención de fenol, mediante la oxidación de cumeno en el primer reactor SEMI-BATCH, posteriormente el producto de hidroperóxido de cumeno se alimentó a un segundo reactor CSTR, donde se llevó a cabo la reacción de conversión, en presencia de un catalizador (ácido sulfúrico diluido al 10%), cabe mencionar que en el primer reactor la presión de operación fue constante, no así la temperatura. Y para el segundo reactor ambas variables (temperatura y presión) fueron constantes. Lo que conduce a establecer que el segundo reactor trabaja de forma isotérmica; con lo que respecta al volumen que nos arrojó el simulador PRO II para el primer reactor es de 5.35 m^3 esto es 5350 litros para el primer reactor, siendo el volumen del segundo reactor el que se propuso en la simulación siendo este de 0.1342 m^3 . Recordemos que el segundo reactor es de tipo CSTR y en él se hace la reacción de conversión del HPC por lo que hablar de 134.2 litros es aceptable.

Podemos observar que en el primer reactor la temperatura de entrada con respecto a la temperatura de salida aumenta de forma trascendente, esto es casi 3 veces la inicial, lo que corrobora lo mencionado anteriormente que la primera reacción es altamente exotérmica. En lo que respecta a la presión permanece constante esto debido a que por ser un reactor semi-batch nos encontramos extrayendo el componente que nos interesa para la reacción de obtención de fenol, por lo cual no registra un cambio en esta condición de operación.

De lo anterior se extrae que la forma de operar del primer reactor es adiabática por ello es que ocurre el cambio de temperatura, el valor de la ΔH que nos arrojó el simulador es de $-0.2265 \text{ M}^{\circ}\text{Kcal / hr}$, recordamos también que el signo negativo de esta ΔH indica que la reacción es exotérmica, esto es que genera energía cuando se lleva a cabo.

Con los datos de las tablas de resultados podemos calcular la conversión del cumeno en el primer reactor y haciendo el cálculo obtenemos que la conversión de cumeno que se oxida a HPC es de 74.82 %, lo cual nos lleva a decir que esta conversión es buena, esto debido a que en la realidad obtener conversiones de aproximadamente 75 % nos sugiere que el proceso es rentable, desde luego debes tomar en cuenta que no todo el HPC que se forma es convertido al producto de interés, en nuestro caso Fenol.

En la tabla No.12 podemos el balance de masa del primer reactor (reactor oxidador), en el cual podemos ver que se cumple el principio de conservación de la masa, en donde la masa total de los reactivos es igual a la masa total de los



productos, mismo caso nos muestra la tabla No. 14 pero para el balance de masa en el reactor dos, cumpliendo de igual forma el principio de conservación de la masa. Esto nos da la seguridad de la veracidad de los resultados arrojados por el simulador PRO II.

Podemos observar que en el segundo reactor la temperatura y presión en la entrada y en la salida se mantienen constantes, es decir, el proceso se lleva a cabo de forma isotérmica e isobárica. Recordemos que en el segundo reactor se realizó la reacción del HPC en presencia de ácido sulfúrico al 10% (como catalizador), como resultado de esta reacción se obtuvieron una mezcla de compuestos como lo es el Fenol (producto principal), Acetona, Acetofenona, Alfa-metil-estireno y Metanol. De lo anterior podemos extraer que en relación a la valor de la ΔH que nos arrojó el simulador que es de $0.4015 \text{ M}^*\text{Kcal} / \text{hr}$, la reacción es endotérmica, por tal motivo a este reactor se le necesita suministrar energía para que se lleve a cabo dicho proceso, este calor a suministrar se puede obtener por medio de un sistema de intercambio térmico (una chaqueta o un serpentín).

El simulador PRO II arroja los datos necesarios para calcular la conversión del HPC la cual fue de 85.66%, pero solo una parte de esta conversión se transforma en nuestro producto principal (fenol), por su puesto hay otros productos que dependiendo de su utilidad pueden o no comercializarse.



Conclusiones

El PRO II es un paquete adecuado para la simulación de procesos como el de este trabajo, que fue la obtención de fenol a partir de la oxidación de cumeno, en dos etapas de reacción.

Este simulador nos permite seleccionar, de las rutas ya existentes en el mercado o bien alguna ruta experimental, la más adecuada para obtener un producto específico, este paquete nos permite manipular las condiciones de operación y obtener resultados, lo cual tendría complicaciones y costos si se llevara a cabo de forma experimental (en la planta).

Ahora que ya se ha realizado la simulación y el diseño de los reactores, se puede concluir de forma breve que la opción de oxidación de cumeno para la obtención de fenol es posible llevarla a cabo a nivel industrial ya que es un proceso, que además de producir Fenol, genera subproductos muy atractivos para su comercialización. Además de tener conversiones aceptables el proceso no requiere de un sistema muy complejo para la separación de los productos en la reacción y es posible obtener el producto principal y los subproductos con altas purezas.

El obtener Fenol por medio de la oxidación de cumeno contribuye a obtener un producto de alta pureza, además de evitar generar productos de desecho y por el contrario obtener productos muy atractivos.

Este trabajo nos permite conocer más a fondo el simulador PRO II y observar que el trabajar con el software de este programa, directamente para el diseño de proyectos o bien para la optimización de proyectos existentes, es muy sencillo.

Podemos concluir que los objetivos planteados al inicio de este proyecto se han cubierto ampliamente ya que se logró llevar a cabo la simulación del diseño del sistema de reacción a través del PRO II



Bibliografía

CASTELLAN, GILBERT *"Fisicoquímica"*, Segunda edición. Addison Wesley Iberoamericana

FOGLER, SCOTT H., *"Elementos de ingeniería de las reacciones químicas"*, Cuarta Edición, 2008.

JIMENEZ G. ARTURO., *"Diseño de procesos en ingeniería química"*. Ed. Reverte

LEVENSPIEL, O., *"Ingeniería de las reacciones químicas"*, 3era edición. Reverte, 1999

MC CABE., SMITH. *"Operaciones básicas de Ingeniería Química"* Ed. Reverte

PERRY, H. JOHN., *"Manual del ingeniero químico"* 6ta edición, Tomo I y II

RAMIREZ L. ROMAN. *"Cinética química y catálisis"*. Ed. IPN, 2007

RAMIREZ L. ROMAN. *"Diseño de reactores ideales para reacciones homogéneas"* Ed. IPN, 2008

SMITH, J. M., VAN HESS H.C., *"Introducción a la termodinámica en ingeniería"* Mc Graw Hill, 1980

Chemical Engineer's Handbook 7th Edition – Robert H. Perry.

Bibliografía en la red

[1]----www.quiminet.com/articulos/todo-sobre-el-fenol-22466.htm

[2]----<http://books.google.com.mx/books?id=UxA3kcGM-i0C&pg=PA332&lpg=PA332&dq=descripcion+del+proceso+de+raschig+hooker&source=bl&ots=5WH-P39kDH&sig=r8XpOTAsZzAoERBJT0vQwUNO33s&hl=es&sa=X&ei=r2aCUpOeMIbN8AHOMYHoAg&ved=0CCsQ6AEwAA#v=onepage&q=descripcion%20del%20proceso%20de%20raschig%20hooker&f=false>



- [3]---<http://www.sc.ehu.es/iawfemaf/archivos/materia/00171211.htm>
- [4]---<http://bibing.us.es/proyectos/abreproy/4382/fichero/INTRODUCCION%252Fintroduccion.pdf>
- [5]---<http://nj.gov/health/eoh/rtkweb/documents/fs/0543sp.pdf>
- [6]---<http://www.minambiente.gov.co/documentos/Guia4.pdf>
- [7]---<http://www.kpatents.com>
- [8]---<http://www.freepatentsonline.com/4358618.html>
- [9]---<http://galeon.com/jackzavaleta/balw7.pdf>
- [10]---<http://www.insht.es/portal/site/Insht/menuitem.a82abc15915c8090128caz10060961ca?vgnextoid=4458908b51593110VgnVCM100000dc0ca8c0RCRD>



Anexos

Fichas Internacionales de Seguridad Química

FENOL

ICSC: 0070



FENOL

Hidróxidobenceno
 C_6H_5O/C_6H_5OH

Masa molecular: 94.1

Nº CAS 108-95-2
Nº RTECS SJ3325000
Nº ICSC 0070
Nº NU 1671 (fenol, sólido)
Nº CE 604-001-00-2



TIPOS DE PELIGRO/ EXPOSICION	PELIGROS/ SINTOMAS AGUDOS	PREVENCION	PRIMEROS AUXILIOS/ LUCHA CONTRA INCENDIOS
INCENDIO	Combustible.	Evitar las llamas. NO poner en contacto con oxidantes fuertes.	Espuma resistente al alcohol, polvo, agua pulverizada, espuma, dióxido de carbono. Los bomberos deberían emplear indumentaria de protección completa, incluyendo equipo autónomo de respiración.
EXPLOSION	Por encima de 79°C: se pueden formar mezclas explosivas vapor/aire.	Por encima de 79°C: sistema cerrado, ventilación.	En caso de incendio: mantener fríos los bidones y demás instalaciones rociando con agua. Los bomberos deberían emplear indumentaria de protección completa, incluyendo equipo autónomo de respiración.
EXPOSICION		¡EVITAR LA FORMACION DE NIEBLA DEL PRODUCTO! ¡HIGIENE ESTRICTA!	¡CONSULTAR AL MEDICO EN TODOS LOS CASOS!
• INHALACION	Sensación de quemazón, tos, vértigo, dolor de cabeza, náuseas, jadeo, vómitos, pérdida del conocimiento (Síntomas no inmediatos: véanse Notas).	Evitar la inhalación de polvo fino y niebla. Ventilación, extracción localizada o protección respiratoria.	Aire limpio, reposo, posición de semiincorporado, respiración artificial si estuviera indicada y proporcionar asistencia médica.
• PIEL	¡PUEDA ABSORBERSE! Quemaduras cutáneas graves, shock, colapso, efecto anestésico local, convulsiones, shock, colapso, coma, muerte (para mayor información, véase Inhalación).	Guantes protectores y traje de protección.	Quitar las ropas contaminadas, aclarar la piel con agua abundante o ducharse y proporcionar asistencia médica. Utilizar guantes protectores cuando se presten primeros auxilios.
• OJOS	Pérdida de visión, quemaduras profundas graves.	Pantalla facial o protección ocular combinada con la protección respiratoria.	Enjuagar con agua abundante durante varios minutos (quitar las lentes de contacto, si puede hacerse con facilidad) y proporcionar asistencia médica.
• INGESTION	Corrosivo. Dolor abdominal, convulsiones, diarrea, dolor de garganta, coloración oscura de la orina.	No comer, ni beber, ni fumar durante el trabajo. Lavarse las manos antes de comer.	Enjuagar la boca, NO provocar el vómito, dar a beber agua abundante, reposo y proporcionar asistencia médica. Dar a beber gran cantidad de aceite vegetal. NO agua.



DERRAMAS Y FUGAS	ALMACENAMIENTO	ENVASADO Y ETIQUETADO
NO verterlo al alcantarillado, barrer la sustancia derramada e introducirla en un recipiente precintable, recoger cuidadosamente el residuo y trasladarlo a continuación a un lugar seguro. (Protección personal adicional: traje de protección completa incluyendo equipo autónomo de respiración).	Medidas para contener el efluente de extinción de incendios. Separado de oxidantes fuertes y alimentos y piensos. Mantener en lugar fresco, seco, bien cerrado y bien ventilado.	No transportar con alimentos y piensos. símbolo T R: 24/25-34 S: (1/2-)28-45 Clasificación de Peligros NU: 6.1 Grupo de Envasado NU: II CE:



VEASE AL DORSO INFORMACION IMPORTANTE

ICSC: 0070

Preparada en el Contexto de Cooperación entre el IPCS y la Comisión de las Comunidades Europeas © CCE, IPCS, 1994

Fichas Internacionales de Seguridad Química

FENOL

ICSC: 0070

D A T O S F I S I C O S	ESTADO FISICO; ASPECTO Cristales de incoloros a amarillos o ligeramente rosados, de olor característico.	VIAS DE EXPOSICION La sustancia se puede absorber rapidamente por inhalación del vapor, a través de la piel y por ingestión. El vapor puede ser absorbido!
	PELIGROS FISICOS El vapor es más denso que el aire y puede extenderse a ras del suelo; posible ignición en punto distante.	RIESGO DE INHALACION Por evaporación de esta sustancia a 20°C, se puede alcanzar bastante lentamente una concentración nociva en el aire.
P R O P I E D A D E S F I S I C A S	PELIGROS QUIMICOS Puede explotar por calentamiento intenso por encima de 78°C. La disolución en agua es un ácido débil. Reacciona con oxidantes, originando peligro de incendio y explosión.	EFFECTOS DE EXPOSICION DE CORTA DURACION El vapor de la sustancia es corrosiva para los ojos, la piel y el tracto respiratorio. La inhalación del vapor de la sustancia puede originar edema pulmonar (véanse Notas). La sustancia puede causar efectos en el sistema nervioso central, el corazón y el riñón, dando lugar a convulsiones, alteraciones cardíacas, fallo respiratorio, colapso y coma. La exposición puede causar la muerte. Los efectos pueden aparecer de forma no inmediata. Se recomienda vigilancia médica.
	LIMITES DE EXPOSICION TLV (como TWA): 5 ppm; 19 mg/m ³ (piel) (ACGIH 1993-1994). MAK: 5 ppm; 19 mg/m ³ ; (piel) (1993).	EFFECTOS DE EXPOSICION PROLONGADA O REPETIDA El contacto prolongado o repetido con la piel puede producir dermatitis. La sustancia puede afectar al hígado y al riñón.
D A T O S A M B I E N T A L E S	Punto de ebullición: 182°C Punto de fusión: 43°C Densidad relativa (agua = 1): 1.06 Solubilidad en agua, g/100 ml: 7 Solubilidad en agua: Moderada Presión de vapor, Pa a 20°C: 47	Densidad relativa de vapor (aire = 1): 3.2 Densidad relativa de la mezcla vapor/aire a 20°C (aire = 1): 1.001 Punto de inflamación: 79°C c.c. Temperatura de autoignición: 715°C Límites de explosividad, % en volumen en el aire: 1.36-10 Coeficiente de reparto octanol/agua como log Pow: 1.46
	La sustancia es tóxica para los organismos acuáticos.	
NOTAS		



Otros números NU: 2312 (fundido); 2821 (solución). El consumo de bebidas alcohólicas aumenta el efecto nocivo. Está indicado examen médico periódico dependiendo del grado de exposición. Los síntomas del edema pulmonar no se ponen de manifiesto, a menudo, hasta pasadas algunas horas y se ven agravados por el esfuerzo físico. Reposo y vigilancia médica son, por ello, imprescindibles. Debe considerarse la inmediata administración de un aerosol adecuado por un médico o persona por él autorizada. NO utilizar cerca de llamas, de superficies calientes o de operaciones de soldadura. Para eliminar o neutralizar la sustancia, utilizar polietilenglicol 300 o aceite vegetal.

Ficha de emergencia de transporte (Transport Emergency Card): TEC (R)-8A
Código NFPA: H3; F2; R0;

INFORMACION ADICIONAL

FISQ: 3-118 FENOL

ICSC: 0070

FENOL

© CCE, IPCS, 1994

**NOTA LEGAL
IMPORTANTE:**

Ni la CCE ni la IPCS ni sus representantes son responsables del posible uso de esta información. Esta ficha contiene la opinión colectiva del Comité Internacional de Expertos del IPCS y es independiente de requisitos legales. La versión española incluye el etiquetado asignado por la clasificación europea, actualizado a la vigésima adaptación de la Directiva 67/548/CEE traspuesta a la legislación española por el Real Decreto 363/95 (BOE 5.6.95).

© INSHT



Fichas Internacionales de Seguridad Química

ACETONA			ICSC: 0087 Abril 2009	
CAS: RTECS: NU: CE Índice Anexo I: CE / EINECS:	67-64-1 AL3150000 1090 606-001-00-8 200-662-2	2-Propanona Dimetil cetona Metil cetona C ₃ H ₆ O / CH ₃ -CO-CH ₃ Masa molecular: 58.1	  	
TIPO DE PELIGRO / EXPOSICIÓN	PELIGROS AGUDOS / SÍNTOMAS	PREVENCIÓN	PRIMEROS AUXILIOS / LUCHA CONTRA INCENDIOS	
INCENDIO	Altamente inflamable.	Evitar las llamas. NO producir chispas y NO fumar.	Polvo, espuma resistente al alcohol, agua en grandes cantidades o dióxido de carbono.	
EXPLOSIÓN	Las mezclas vapor/aire son explosivas. El calentamiento intenso puede producir aumento de la presión con riesgo de estallido.	Sistema cerrado, ventilación, equipo eléctrico y de alumbrado a prueba de explosión. NO utilizar aire comprimido para llenar, vaciar o manipular. Utilícense herramientas manuales no generadoras de chispas.	En caso de incendio: mantener fríos los bidones y demás instalaciones rociando con agua.	
EXPOSICIÓN				
Inhalación	Dolor de garganta. Tos. Confusión mental. Dolor de cabeza. Vértigo. Somnolencia. Pérdida del conocimiento.	Ventilación, extracción localizada o protección respiratoria.	Aire limpio y reposo. Proporcionar asistencia médica.	
Piel	Piel seca.	Guantes de protección.	Quitar las ropas contaminadas. Aclarar y lavar la piel con agua y jabón.	
Ojos	Enrojecimiento. Dolor. Visión borrosa.	Gafas de protección de seguridad.	Enjuagar con agua abundante durante varios minutos (quitar las lentes de contacto si puede hacerse con facilidad). Proporcionar asistencia médica.	
Ingestión	Náuseas. Vómitos. (Ver Inhalación).	No comer, ni beber, ni fumar durante el trabajo. Lavarse las manos antes de comer.	Enjuagar la boca. Proporcionar asistencia médica.	
DERRAMES Y FUGAS		ENVASADO Y ETIQUETADO		
Eliminar toda fuente de ignición. Ventilar. Protección personal: filtro para gases y vapores orgánicos de bajo punto de ebullición adaptado a la concentración de la sustancia en el aire. NO verterlo en el alcantarillado. Recoger el líquido procedente de la fuga en recipientes precintables. Absorber el líquido residual en arena o absorbente inerte y trasladarlo a un lugar seguro. Eliminarlo a continuación con agua abundante.		Clasificación UE Símbolo: F, Xi R: 11-36-66-67 S: (2-)9-16-26-46 Clasificación NU Clasificación de Peligros NU: 3 Grupo de Envasado NU: II Clasificación GHS Peligro Líquido y vapores muy inflamables. Provoca irritación ocular.		
DERRAMES Y FUGAS		ENVASADO Y ETIQUETADO		
Eliminar toda fuente de ignición. Ventilar. Protección personal: filtro para gases y vapores orgánicos de bajo punto de ebullición adaptado a la concentración de la sustancia en el aire. NO verterlo en el alcantarillado. Recoger el líquido procedente de la fuga en recipientes precintables. Absorber el líquido residual en arena o absorbente inerte y trasladarlo a un lugar seguro. Eliminarlo a continuación con agua abundante.		Clasificación UE Símbolo: F, Xi R: 11-36-66-67 S: (2-)9-16-26-46 Clasificación NU Clasificación de Peligros NU: 3 Grupo de Envasado NU: II Clasificación GHS Peligro Líquido y vapores muy inflamables. Provoca irritación ocular.		
RESPUESTA DE EMERGENCIA		ALMACENAMIENTO		
Código NFPA: H1; F3; R0		A prueba de incendio. Separado de: Ver Peligros Químicos. Almacenar en un área sin acceso a desagües o alcantarillas.		
Preparada en el Contexto de Cooperación entre el IPCS y la Comisión Europea © CE, IPCS, 2009       				

VÉASE INFORMACIÓN IMPORTANTE AL DORSO



Fichas Internacionales de Seguridad Química

ACETONA		ICSC: 0087
DATOS IMPORTANTES		
ESTADO FÍSICO; ASPECTO Líquido incoloro de olor característico. PELIGROS FÍSICOS El vapor es más denso que el aire y puede extenderse a ras del suelo. Posible ignición en punto distante. PELIGROS QUÍMICOS La sustancia puede formar peróxidos explosivos en contacto con oxidantes fuertes tales como ácido acético, ácido nítrico y peróxido de hidrógeno. Reacciona con cloroformo y bromoformo en medio básico, originando peligro de incendio y explosión. Ataca a los plásticos. LÍMITES DE EXPOSICIÓN TLV: 500 ppm como TWA, 750 ppm como STEL. A4 (no clasificable como cancerígeno humano). BEI establecido (ACGIH 2009). LEP UE: 500 ppm, 1210 mg/m ³ como TWA (EU 2000).	VÍAS DE EXPOSICIÓN La sustancia se puede absorber por inhalación. RIESGO DE INHALACIÓN Por evaporación de esta sustancia a 20°C se puede alcanzar bastante rápidamente una concentración nociva en el aire, sin embargo, más rápidamente por pulverización o cuando se dispersa. EFFECTOS DE EXPOSICIÓN DE CORTA DURACIÓN La sustancia irrita los ojos y el tracto respiratorio. La exposición a altas concentraciones puede producir disminución del estado de alerta. EFFECTOS DE EXPOSICIÓN PROLONGADA O REPETIDA El líquido desengrasa la piel. El contacto repetido puede producir piel seca y agrietada.	
PROPIEDADES FÍSICAS		
Punto de ebullición: 56°C Punto de fusión: -95°C Densidad relativa (agua = 1): 0.8 Solubilidad en agua: miscible. Presión de vapor, kPa a 20°C: 24 Densidad relativa de vapor (aire = 1): 2.0	Densidad relativa de la mezcla vapor/aire a 20°C (aire = 1): 1.2 Punto de inflamación: -18°C c.c. Temperatura de autoignición: 465°C Límites de explosividad, % en volumen en el aire: 2.2-13 Coeficiente de reparto octanol/agua como log Pow: -0.24 Viscosidad, mm ² /s a 40 °C: 0.34	
DATOS AMBIENTALES		
NOTAS		
El consumo de bebidas alcohólicas aumenta el efecto nocivo.		
INFORMACIÓN ADICIONAL		
Límites de Exposición Profesional (INSHT 2011): VLA-ED: 500 ppm; 1210 mg/m ³ VLB: 50 mg/l en orina. Nota I.		
NOTA LEGAL	Esta ficha contiene la opinión colectiva del Comité Internacional de Expertos del IPCS y es independiente de requisitos legales. Su posible uso no es responsabilidad de la CE, el IPCS, sus representantes o el INSHT, autor de la versión española.	
© IPCS, CE 2009		



Fichas Internacionales de Seguridad Química

CUMENO

ICSC: 0170

 <p style="text-align: center;"> CUMENO Isopropilbenceno Cumene 2-Fenilpropano Cumol $C_9H_{12}/C_6H_5CH(CH_3)_2$ Masa molecular: 120.2 </p>					
<p>Nº CAS 98-82-8 Nº RTECS GR8575000 Nº ICSC 0170 Nº NU 1918 Nº CE 601-024-00-X</p>					
TIPOS DE PELIGRO/ EXPOSICION	PELIGROS/ SINTOMAS AGUDOS	PREVENCION	PRIMEROS AUXILIOS/ LUCHA CONTRA INCENDIOS		
INCENDIO	Inflamable.	Evitar las llamas, NO producir chispas y NO fumar.	Polvo, AFFF, espuma, dióxido de carbono.		
EXPLOSION	Por encima de 31°C: pueden formarse mezclas explosivas vapor/aire.	Por encima de 31°C: sistema cerrado, ventilación y equipo eléctrico a prueba de explosión. Evitar la generación de cargas electrostáticas (por ejemplo, mediante conexión a tierra).	En caso de incendio: mantener fríos los bidones y demás instalaciones rociando con agua.		
EXPOSICION		¡EVITAR LA FORMACION DE NIEBLA DEL PRODUCTO!			
• INHALACION	Ataxia, tos, vértigo, somnolencia, dolor de cabeza y garganta, pérdida del conocimiento.	Ventilación, extracción localizada o protección respiratoria.	Aire limpio, reposo, posición de semiincorporado y proporcionar asistencia médica.		
• PIEL	Piel seca.	Guantes protectores y traje de protección.	Quitar las ropas contaminadas, aclarar y lavar la piel con agua y jabón.		
• OJOS	Enrojecimiento, dolor.	Gafas de protección de seguridad.	Enjuagar con agua abundante durante varios minutos (quitar las lentes de contacto si puede hacerse con facilidad) y proporcionar asistencia médica.		
• INGESTION	(Para mayor información, véase Inhalación).	No comer, ni beber, ni fumar durante el trabajo.	Enjuagar la boca, NO provocar el vómito y proporcionar asistencia médica.		
DERRAMAS Y FUGAS	ALMACENAMIENTO	ENVASADO Y ETIQUETADO			
Recoger, en la medida de lo posible, el líquido que se derrama y el ya derramado en recipientes precintables, absorber el líquido residual en arena o absorbente inerte y trasladarlo a un lugar seguro. NO permitir que este producto químico se incorpore al ambiente. (Protección personal adicional: respirador de filtro mixto contra vapores orgánicos y polvo nocivo A/P2).	A prueba de incendio. Separado de oxidantes fuertes, ácidos. Mantener en lugar fresco y oscuro. Almacenar solamente si está estabilizado.	símbolo Xi símbolo N R: 10-37-51/53-65 S: (2-)24-37-61-62 Clasificación de Peligros NU: 3 Grupo de Envasado NU: III IMO: contaminante marino. CE:			
VEASE AL DORSO INFORMACION IMPORTANTE					
ICSC: 0170	Preparada en el Contexto de Cooperación entre el IPCS y la Comisión de las Comunidades Europeas © CCE, IPCS, 1994				



Fichas Internacionales de Seguridad Química

CUMENO

ICSC: 0170

D A T O S I M P O R T A N T E S	<p>ESTADO FÍSICO; ASPECTO Líquido incoloro, de olor característico.</p> <p>PELIGROS FÍSICOS Como resultado del flujo, agitación, etc., se pueden generar cargas electrostáticas.</p> <p>PELIGROS QUÍMICOS La sustancia puede formar peróxidos explosivos. Reacciona violentamente con ácidos y oxidantes fuertes, originando peligro de incendio y explosión.</p> <p>LÍMITES DE EXPOSICIÓN TLV (como TWA): 50 ppm; 246 mg/m³ (piel) (ACGIH 1995-1996). MAK: 50 ppm; 245 mg/m³ (piel) (1996).</p>	<p>VIAS DE EXPOSICIÓN La sustancia se puede absorber por inhalación y a través de la piel.</p> <p>RIESGO DE INHALACIÓN Por evaporación de esta sustancia a 20°C se puede alcanzar bastante lentamente una concentración nociva en el aire.</p> <p>EFFECTOS DE EXPOSICIÓN DE CORTA DURACIÓN La sustancia irrita los ojos y el tracto respiratorio. La ingestión del líquido puede dar lugar a la aspiración del mismo por los pulmones y la consiguiente neumonitis química. La sustancia puede causar efectos en sistema nervioso central. La exposición por encima del LEL puede producir pérdida del conocimiento.</p> <p>EFFECTOS DE EXPOSICIÓN PROLONGADA O REPETIDA El contacto prolongado o repetido con la piel puede producir dermatitis.</p>
	PROPIEDADES FÍSICAS	<p>Punto de ebullición: 152°C Punto de fusión: -96°C Densidad relativa (agua = 1): 0.90 Solubilidad en agua: Ninguna Presión de vapor, Pa a 20°C: 427 Densidad relativa de vapor (aire = 1): 4.2</p>
DATOS AMBIENTALES	<p>Esta sustancia puede ser peligrosa para el ambiente; debería prestarse atención especial a los organismos acuáticos y a las aves.</p>	
NOTAS		
<p>La adición de estabilizadores o inhibidores podría influir sobre las propiedades toxicológicas de esta sustancia; consultar a un experto. Antes de la destilación comprobar si existen peróxidos; en caso positivo eliminarlos.</p> <p style="text-align: right;">Ficha de emergencia de transporte (Transport Emergency Card): TEC (R)-594 Código NFPA: H 2; F 3; R 0;</p>		
INFORMACIÓN ADICIONAL		
<p>FISQ: 4-076 CUMENO</p>		
<p>ICSC: 0170</p>		<p>CUMENO</p>
<p>© CCE, IPCS, 1994</p>		
NOTA LEGAL IMPORTANTE:	<p>Ni la CCE ni la IPCS ni sus representantes son responsables del posible uso de esta información. Esta ficha contiene la opinión colectiva del Comité Internacional de Expertos del IPCS y es independiente de requisitos legales. La versión española incluye el etiquetado asignado por la clasificación europea, actualizado a la vigésima adaptación de la Directiva 67/548/CEE traspuesta a la legislación española por el Real Decreto 363/95 (BOE 5.6.95).</p>	

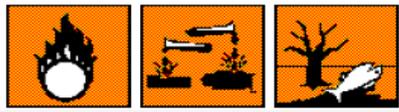




Fichas Internacionales de Seguridad Química

HIDROPEROXIDO DE CUMENO

ICSC: 0761

			
<p>HIDROPEROXIDO DE CUMENO Hidroperóxido de alfa-alfa-dimetilbencilo $C_9H_{12}O_2/C_6H_5C(CH_3)_2OOH$ Masa molecular: 152.2</p>			
<p>Nº CAS 80-15-9 Nº RTECS MX2450000 Nº ICSC 0761 Nº NU 3109 Nº CE 617-002-00-8</p> 			
TIPOS DE PELIGRO/ EXPOSICION	PELIGROS/ SINTOMAS AGUDOS	PREVENCION	PRIMEROS AUXILIOS/ LUCHA CONTRA INCENDIOS
INCENDIO	Combustible. Muchas reacciones pueden producir incendio o explosión.	Evitar llama abierta. NO poner en contacto con sustancias inflamables.	Polvos, pulverización con agua, espuma, dióxido de carbono.
EXPLOSION	Por encima de 79°C: pueden formarse mezclas explosivas vapor/aire. Riesgo de incendio y explosión en contacto con materiales orgánicos, combustibles y reductores.	Por encima de 79°C: sistema cerrado, ventilación.	En caso de incendio: mantener fríos los bidones y demás instalaciones por pulverización con agua. Combatir el incendio desde un lugar protegido.
EXPOSICION		¡EVITAR LA PRODUCCION DE NIEBLAS!	
• INHALACION	Sensación de quemazón, tos, dificultad respiratoria.	Ventilación, extracción localizada o protección respiratoria.	Aire limpio, reposo, posición de semiincorporado. Respiración artificial si estuviera indicada, someter a atención médica.
• PIEL	Enrojecimiento, quemaduras cutáneas, dolor.	Guantes protectores, traje de protección.	Aclarar con agua abundante, después quitar la ropa contaminada y aclarar de nuevo y solicitar atención médica.
• OJOS	Enrojecimiento, dolor, quemaduras profundas graves.	Pantalla facial.	Enjuagar con agua abundante durante varios minutos (quitar las lentes de contacto si puede hacerse con facilidad), después consultar a un médico.
• INGESTION	Dolor abdominal, sensación de quemazón.	No comer, beber ni fumar durante el trabajo.	Dar de beber abundante agua, NO provocar el vómito y someter a atención médica.
DERRAMAS Y FUGAS		ALMACENAMIENTO	ENVASADO Y ETIQUETADO
Consultar a un experto, recoger en la manera de lo posible el líquido que se derrama y el ya derramado en recipientes herméticos; recoger los derrames y vertidos del líquido en recipientes tapados siempre que sea posible; absorber el líquido residual en arena o absorbente inerte y trasladar a lugar seguro. NO absorber en serrín u otros absorbentes combustibles (protección personal adicional: traje de protección completa incluyendo equipo autónomo de respiración).		Separado de sustancias combustibles, reductoras y aceites minerales. Mantener en lugar frío y seco.	Material especial. símbolo O símbolo C símbolo N R: 7-21/22-23-34-48/20/22-51/53 S: (1/2-3)/7-14-36/37/39-45-50-61 Clasificación de Peligros NU: 5.2 Grupo de Envasado NU: II CE: 
VEASE AL DORSO INFORMACION IMPORTANTE			
ICSC: 0761		Preparada en el Contexto de Cooperación entre el IPCS y la Comisión de las Comunidades Europeas © CCE, IPCS, 1994	



Fichas Internacionales de Seguridad Química

HIDROPEROXIDO DE CUMENO

ICSC: 0761

D A T O S I M P O R T A N T E S	<p>ESTADO FISICO; ASPECTO LIQUIDO INCOLORO Líquido, de incoloro a amarillo pálido. con olor característico.</p> <p>PELIGROS FISICOS</p> <p>PELIGROS QUIMICOS Puede estallar por calentamiento intenso alrededor de los 150°C. En combustión, formación de gases tóxicos. (COx). Durante un calentamiento intenso se producen humos tóxicos. La sustancia es un oxidante fuerte y reacciona violentamente con materiales combustibles y reductores originando riesgo de incendio y explosión. El contacto con aleaciones de cobre o plomo y ácidos minerales puede conducir a una descomposición violenta.</p> <p>LIMITES DE EXPOSICION TLV no establecido.</p>	<p>VIAS DE EXPOSICION La sustancia se puede absorber por inhalación del aerosol y por ingestión.</p> <p>RIESGO DE INHALACION La evaporación a 20°C es despreciable; sin embargo se puede alcanzar rápidamente una concentración nociva de partículas en el aire rociando.</p> <p>EFFECTOS DE EXPOSICION DE CORTA DURACION Corrosivo. El vapor es corrosivo por ingestión también. La inhalación del aerosol de esta sustancia puede originar edema pulmonar (véanse Notas).</p> <p>EFFECTOS DE EXPOSICION PROLONGADA O REPETIDA</p>
	<p>PROPIEDADES FISICAS</p> <p>Punto de fusión: -10°C Densidad relativa (agua = 1): 1.05 Solubilidad en agua: Moderada (1.5 g/100 ml) Presión de vapor, Pa a 20°C: 32 Densidad relativa de vapor (aire = 1): 5.4</p>	<p>Densidad relativa de la mezcla vapor/aire a 20°C (aire = 1): 1.0 Punto de inflamación: 79°C Temperatura de autoignición: 221°C Límites de explosividad, % en volumen en el aire: 0.9-6.5 Coeficiente de reparto octanol/agua como log Pow: -0.16</p>
DATOS AMBIENTALES		
NOTAS		
<p>El producto técnico puede contener una cierta cantidad de cumeno (10-20%), el cual cambia las propiedades físicas. Los síntomas del edema pulmonar no se ponen de manifiesto a menudo hasta pasadas algunas horas y se agravan por el esfuerzo físico. Reposo y vigilancia médica son por ello imprescindibles. Debe considerarse la inmediata administración de un spray adecuado por un médico o persona por él autorizada. Enjuagar la ropa contaminada con agua abundante (peligro de incendio). Tarjeta de emergencia de transporte (Transport Emergency Card): TEC (R)-649</p> <p style="text-align: right;">Código NFPA: H 1; F 2; R 4; OX</p>		
INFORMACION ADICIONAL		
FISQ: 1-124 HIDROPEROXIDO DE CUMENO		
ICSC: 0761	HIDROPEROXIDO DE CUMENO	
© CCE, IPCS, 1994		
NOTA LEGAL IMPORTANTE:	<p>Ni la CCE ni la IPCS ni sus representantes son responsables del posible uso de esta información. Esta ficha contiene la opinión colectiva del Comité Internacional de Expertos del IPCS y es independiente de requisitos legales. La versión española incluye el etiquetado asignado por la clasificación europea, actualizado a la vigésima adaptación de la Directiva 67/548/CEE traspuesta a la legislación española por el Real Decreto 363/95 (BOE 5.6.95).</p>	

© INSHT



Fichas Internacionales de Seguridad Química

ACETOFENONA

ICSC: 1156

 <p style="text-align: center;"> ACETOFENONA Fenilmetilcetona Acetilbenceno $C_8H_8O/C_6H_5COCH_3$ Masa molecular: 120.1 </p> <p> Nº CAS 98-86-2 Nº RTECS AM5250000 Nº ICSC 1156 Nº CE 606-042-00-1 </p>				 <p style="text-align: right;"> INSTITUTO NACIONAL DE SEGURIDAD E HIGIENE EN EL TRABAJO </p>			
TIPOS DE PELIGRO/ EXPOSICION	PELIGROS/ SINTOMAS AGUDOS	PREVENCION	PRIMEROS AUXILIOS/ LUCHA CONTRA INCENDIOS				
INCENDIO	Combustible.	Evitar las llamas.	Espuma resistente al alcohol, polvo, dióxido de carbono.				
EXPLOSION	Por encima de 82°C: pueden formarse mezclas explosivas vapor/ aire.	Por encima de 82°C: sistema cerrado, ventilación.					
EXPOSICION		¡EVITAR LA FORMACION DE NIEBLA DEL PRODUCTO!					
• INHALACION	Vértigo, somnolencia, dolor de cabeza.	Ventilación, extracción localizada o protección respiratoria.	Aire limpio, reposo y proporcionar asistencia médica.				
• PIEL	Piel seca.	Guantes protectores.	Quitar las ropas contaminadas. Aclarar la piel con agua abundante o ducharse.				
• OJOS	Enrojecimiento, dolor.	Gafas de protección de seguridad.	Enjuagar con agua abundante durante varios minutos (quitar las lentes de contacto si puede hacerse con facilidad) y proporcionar asistencia médica.				
• INGESTION	Náuseas (para mayor información, véase Inhalación).	No comer, ni beber, ni fumar durante el trabajo.	Enjuagar la boca y proporcionar asistencia médica.				
DERRAMAS Y FUGAS		ALMACENAMIENTO	ENVASADO Y ETIQUETADO				
Recoger, en la medida de lo posible, el líquido que se derrama y el ya derramado en recipientes precintables. Absorber el líquido residual en arena o absorbente inerte y trasladarlo a un lugar seguro. (Protección personal adicional: respirador de filtro mixto contra vapores orgánicos y polvo nocivo A/P2).		Separado de oxidantes fuertes. Ventilación a ras del suelo.	símbolo Xn R: 22-36 S: (2-)26 CE:				
							
VEASE AL DORSO INFORMACION IMPORTANTE							
ICSC: 1156		Preparada en el Contexto de Cooperación entre el IPCS y la Comisión de las Comunidades Europeas © CCE, IPCS, 1994					



Fichas Internacionales de Seguridad Química

ACETOFENONA

ICSC: 1156

D A T O S I M P O R T A N T E S	<p>ESTADO FÍSICO; ASPECTO Líquido incoloro o cristales blancos, de olor característico.</p> <p>PELIGROS FÍSICOS</p> <p>PELIGROS QUÍMICOS</p> <p>LIMITES DE EXPOSICION TLV (como TWA): 10 ppm; 49 mg/m³ (ACGIH 1997-1998).</p>	<p>VIAS DE EXPOSICION La sustancia se puede absorber por inhalación, a través de la piel y por ingestión.</p> <p>RIESGO DE INHALACION Por evaporación de esta sustancia a 20°C se puede alcanzar bastante lentamente una concentración nociva en el aire sin embargo, por pulverización o dispersión mucho más rápidamente.</p> <p>EFFECTOS DE EXPOSICION DE CORTA DURACION La sustancia irrita los ojos. La sustancia puede causar efectos en el sistema nervioso central. La exposición a altas concentraciones puede producir pérdida del conocimiento.</p> <p>EFFECTOS DE EXPOSICION PROLONGADA O REPETIDA El líquido desengrasa la piel.</p>
	<p>PROPIEDADES FÍSICAS</p> <p>Punto de ebullición: 202°C Punto de fusión: 20°C Densidad relativa (agua = 1): 1.03 Solubilidad en agua: Escasa Presión de vapor, kPa a 15°C: 0.133</p>	<p>Densidad relativa de vapor (aire = 1): 4.1 Densidad relativa de la mezcla vapor/aire a 20°C (aire = 1): 1 Punto de inflamación: 82°C (o.c.). Temperatura de autoignición: 571°C Coeficiente de reparto octanol/agua como log Pow: 1.58</p>
DATOS AMBIENTALES		
NOTAS		
El consumo de bebidas alcohólicas aumenta el efecto nocivo. Nombre comercial: Hipnona.		
Código NFPA: H 1; F 2; R 0;		
INFORMACION ADICIONAL		
FISQ: 5-002 ACETOFENONA		
ICSC: 1156		ACETOFENONA
© CCE, IPCS, 1994		
NOTA LEGAL IMPORTANTE:	Ni la CCE ni la IPCS ni sus representantes son responsables del posible uso de esta información. Esta ficha contiene la opinión colectiva del Comité Internacional de Expertos del IPCS y es independiente de requisitos legales. La versión española incluye el etiquetado asignado por la clasificación europea, actualizado a la vigésima adaptación de la Directiva 67/548/CEE traspuesta a la legislación española por el Real Decreto 363/95 (BOE 5.6.95).	

© INSHT



Fichas Internacionales de Seguridad Química

ÁCIDO SULFÚRICO			ICSC: 0362 Febrero 2000
CAS:	7664-93-9	Ácido sulfúrico 100%	
RTECS:	WS5600000	Aceite de vitriolo	
NU:	1830	H ₂ SO ₄	
CE Índice Anexo I: CE / EINECS:	016-020-00-8 231-639-5	Masa molecular: 98.1	
TIPO DE PELIGRO / EXPOSICIÓN	PELIGROS AGUDOS / SÍNTOMAS	PREVENCIÓN	PRIMEROS AUXILIOS / LUCHA CONTRA INCENDIOS
INCENDIO	No combustible. Muchas reacciones pueden producir incendio o explosión. En caso de incendio se desprenden humos (o gases) tóxicos e irritantes.	NO poner en contacto con sustancias inflamables. NO poner en contacto con combustibles.	NO utilizar agua. En caso de incendio en el entorno: polvo, espuma, dióxido de carbono.
EXPLOSIÓN	Riesgo de incendio y explosión en contacto con bases, sustancias combustibles, oxidantes, agentes reductores o agua.		En caso de incendio: mantener fríos los bidones y demás instalaciones rociando con agua pero NO en contacto directo con agua.
EXPOSICIÓN		¡EVITAR LA FORMACIÓN DE NIEBLAS DEL PRODUCTO! ¡EVITAR TODO CONTACTO!	¡CONSULTAR AL MÉDICO EN TODOS LOS CASOS!
Inhalación	Corrosivo. Sensación de quemazón. Dolor de garganta. Tos. Dificultad respiratoria. Jadeo. Síntomas no inmediatos (ver Notas).	Ventilación, extracción localizada o protección respiratoria.	Aire limpio, reposo. Posición de semiincorporado. Respiración artificial si estuviera indicada. Proporcionar asistencia médica.
Piel	Corrosivo. Enrojecimiento. Dolor. Ampollas. Quemaduras cutáneas graves.	Guantes de protección. Traje de protección.	Quitar las ropas contaminadas. Aclarar la piel con agua abundante o ducharse. Proporcionar asistencia médica.
Ojos	Corrosivo. Enrojecimiento. Dolor. Quemaduras profundas graves.	Pantalla facial o protección ocular combinada con protección respiratoria.	Enjuagar con agua abundante durante varios minutos (quitar las lentes de contacto si puede hacerse con facilidad), después proporcionar asistencia médica.
Ingestión	Corrosivo. Dolor abdominal. Sensación de quemazón. Shock o colapso.	No comer, ni beber, ni fumar durante el trabajo.	Enjuagar la boca. NO provocar el vómito. Proporcionar asistencia médica.
DERRAMES Y FUGAS		ENVASADO Y ETIQUETADO	
Consultar a un experto. ¡Evacuar la zona de peligro! NO absorber en serrín u otros absorbentes combustibles. Protección personal adicional: traje de protección completo incluyendo equipo autónomo de respiración. NO permitir que este producto químico se incorpore al ambiente.		Envase irrompible: colocar el envase frágil dentro de un recipiente irrompible cerrado. No transportar con alimentos y piensos. Clasificación UE Símbolo: C R: 35 S: (1/2-)26-30-45 Nota: B Clasificación NU Clasificación de Peligros NU: 8 Grupo de Envasado NU: II	
RESPUESTA DE EMERGENCIA		ALMACENAMIENTO	
Ficha de Emergencia de Transporte (Transport Emergency Card): TEC (R)-80S1830 o 80GC1-II+III Código NFPA: H3; F0; R2; W		Separado de sustancias combustibles y reductoras, oxidantes fuertes, bases fuertes, alimentos y piensos, materiales incompatibles. Ver Peligros Químicos. Puede ser almacenado en contenedores de acero inoxidable. Almacenar en un área con suelo de hormigón resistente a la corrosión.	
Preparada en el Contexto de Cooperación entre el IPCS y la Comisión Europea © CE, IPCS, 2005			
 IPCS International Programme on Chemical Safety	 WHO	 ILO	 UNEP
	 MINISTERIO DE TRABAJO E INMIGRACIÓN	 INSTITUTO NACIONAL DE SEGURIDAD E HIGIENE EN EL TRABAJO	

VÉASE INFORMACIÓN IMPORTANTE AL DORSO



Fichas Internacionales de Seguridad Química

ÁCIDO SULFÚRICO		ICSC: 0362
DATOS IMPORTANTES		
ESTADO FÍSICO; ASPECTO Líquido higroscópico incoloro, aceitoso e inodoro.	VÍAS DE EXPOSICIÓN La sustancia se puede absorber por inhalación del aerosol y por ingestión.	
PELIGROS QUÍMICOS La sustancia es un oxidante fuerte y reacciona violentamente con materiales combustibles y reductores. La sustancia es un ácido fuerte, reacciona violentamente con bases y es corrosiva para la mayoría de metales más comunes, originando hidrógeno (gas inflamable y explosivo- ver ICSC 0001). Reacciona violentamente con agua y compuestos orgánicos con desprendimiento de calor (véanse Notas). Al calentar se forman humos (o gases) irritantes o tóxicos (óxido de azufre).	RIESGO DE INHALACIÓN La evaporación a 20°C es despreciable; sin embargo, se puede alcanzar rápidamente una concentración nociva de partículas en el aire por pulverización.	
LÍMITES DE EXPOSICIÓN TLV: 0.2 mg/m ³ , Fracción torácica, A2 (sospechoso de ser cancerígeno humano); (ácido sulfúrico contenido en las nieblas de ácidos inorgánicos fuertes) (ACGIH 2005). MAK: (Fracción inhalable) 0.1 mg/m ³ ; Categoría de limitación de pico: I(1); Cancerígeno: categoría 4; Riesgo para el embarazo: grupo C (DFG 2004).	EFFECTOS DE EXPOSICIÓN DE CORTA DURACIÓN Corrosivo. La sustancia es muy corrosiva para los ojos, la piel y el tracto respiratorio. Corrosivo por ingestión. La inhalación del aerosol de esta sustancia puede originar edema pulmonar (ver Notas).	
PROPIEDADES FÍSICAS		
Punto de ebullición (se descompone): 340°C Punto de fusión: 10°C Densidad relativa (agua = 1): 1.8 Solubilidad en agua: miscible Presión de vapor, kPa a 146°C: 0.13 Densidad relativa de vapor (aire = 1): 3.4	EFFECTOS DE EXPOSICIÓN PROLONGADA O REPETIDA Los pulmones pueden resultar afectados por la exposición prolongada o repetida al aerosol de esta sustancia. Si las exposiciones al aerosol de esta sustancia son repetidas o prolongadas existe el riesgo de presentar erosiones dentales. Las nieblas de ácidos inorgánicos fuertes que contengan esta sustancia son carcinógenas para los seres humanos.	
DATOS AMBIENTALES		
La sustancia es nociva para los organismos acuáticos.		
NOTAS		
Los síntomas del edema pulmonar no se ponen de manifiesto, a menudo, hasta pasadas algunas horas y se agravan por el esfuerzo físico. Reposo y vigilancia médica son, por ello, imprescindibles. NO verter NUNCA agua sobre esta sustancia; cuando se deba disolver o diluir, añadirla al agua siempre lentamente. Otros números NU: UN1831 Ácido sulfúrico fumante, clase de peligro 8, riesgo subsidiario 6.1, grupo de envasado I; UN1832 Ácido sulfúrico agotado, clase de peligro 8, grupo de envasado II. Esta ficha ha sido parcialmente actualizada en octubre de 2005, ver Límites de exposición, Respuesta de Emergencia, y en enero de 2008: ver Lucha contra incendios.		
INFORMACIÓN ADICIONAL		
Límites de exposición profesional (INSHT 2012): VLA-ED (niebla). Fracción torácica: 0,05 mg/m ³ Notas: al seleccionar un método adecuado de control de la exposición, deben tomarse en consideración posibles limitaciones e interferencias que pueden surgir en presencia de otros compuestos de azufre. Agente químico que tiene un valor límite indicativo por la UE. Esta sustancia tiene prohibida total o parcialmente su comercialización y uso como fitosanitario y/o biocida. Véase UNE EN 481: "Atmósferas en los puestos de trabajo; Definición de las fracciones por el tamaño de las partículas para la medición de aerosoles".		
NOTA LEGAL	Esta ficha contiene la opinión colectiva del Comité Internacional de Expertos del IPCS y es independiente de requisitos legales. Su posible uso no es responsabilidad de la CE, el IPCS, sus representantes o el INSHT, autor de la versión española.	
© IPCS, CE 2005		



Fichas Internacionales de Seguridad Química

METANOL		ICSC: 0057 Abril 2000	
Alcohol metílico		Carbinol	
CAS:	67-56-1	CH ₂ O / CH ₃ OH	 
RTECS:	PC1400000	Masa molecular: 32.0	
NU:	1230		
CE Índice Anexo I:	603-001-00-X		
CE / EINECS:	200-659-6		
TIPO DE PELIGRO / EXPOSICIÓN	PELIGROS AGUDOS / SÍNTOMAS	PREVENCIÓN	PRIMEROS AUXILIOS / LUCHA CONTRA INCENDIOS
INCENDIO	Altamente inflamable. Ver Notas.	Evitar las llamas, NO producir chispas y NO fumar. NO poner en contacto con oxidantes.	Polvo, espuma resistente al alcohol, agua en grandes cantidades, dióxido de carbono.
EXPLOSIÓN	Las mezclas vapor/aire son explosivas.	Sistema cerrado, ventilación, equipo eléctrico y de alumbrado a prueba de explosión. NO utilizar aire comprimido para llenar, vaciar o manipular. Utilícense herramientas manuales no generadoras de chispas.	En caso de incendio: mantener fríos los bidones y demás instalaciones rociando con agua.
EXPOSICIÓN		¡EVITAR LA EXPOSICIÓN DE ADOLESCENTES Y NIÑOS!	
Inhalación	Tos. Vértigo. Dolor de cabeza. Náuseas. Debilidad. Alteraciones de la vista.	Ventilación. Extracción localizada o protección respiratoria.	Aire limpio, reposo. Proporcionar asistencia médica.
Piel	¡PUEDE ABSORBERSE! Piel seca. Enrojecimiento.	Guantes de protección. Traje de protección.	Quitar las ropas contaminadas. Aclarar con agua abundante o ducharse. Proporcionar asistencia médica.
Ojos	Enrojecimiento. Dolor.	Gafas ajustadas de seguridad, o protección ocular combinada con la protección respiratoria.	Enjuagar con agua abundante durante varios minutos (quitar las lentes de contacto si puede hacerse con facilidad), después proporcionar asistencia médica.
Ingestión	Dolor abdominal. Jadeo. Vómitos. Convulsiones. Pérdida del conocimiento (para mayor información, véase Inhalación).	No comer, ni beber, ni fumar durante el trabajo. Lavarse las manos antes de comer.	Provocar el vómito (¡ÚNICAMENTE EN PERSONAS CONSCIENTES!). Proporcionar asistencia médica.
DERRAMES Y FUGAS		ENVASADO Y ETIQUETADO	
Evacuar la zona de peligro. Ventilar. Recoger el líquido procedente de la fuga en recipientes precintables. Eliminar el residuo con agua abundante. Eliminar vapor con agua pulverizada. Traje de protección química, incluyendo equipo autónomo de respiración.		No transportar con alimentos y piensos. Clasificación UE Símbolo: F, T R: 11-23/24/25-39/23/24/25; S: (1/2)-7-16-36/37-45 Clasificación NU Clasificación de Peligros NU: 3 Riesgos Subsidiarios de las NU: 6.1; Grupo de Envasado NU: II	
RESPUESTA DE EMERGENCIA		ALMACENAMIENTO	
Ficha de emergencia de transporte (Transport Emergency Card): TEC (R)-30S1230. Código NFPA: H 1; F 3; R 0;		A prueba de incendio. Separado de oxidantes fuertes, alimentos y piensos. Mantener en lugar fresco.	
IPCS International Programme on Chemical Safety	  		 
Preparada en el Contexto de Cooperación entre el IPCS y la Comisión Europea © IPCS, CE 2000			

VÉASE INFORMACIÓN IMPORTANTE AL DORSO



Fichas Internacionales de Seguridad Química

METANOL

ICSC: 0057

DATOS IMPORTANTES

ESTADO FÍSICO; ASPECTO:

Líquido incoloro, de olor característico.

PELIGROS FÍSICOS:

El vapor se mezcla bien con el aire, formándose fácilmente mezclas explosivas.

PELIGROS QUÍMICOS:

Reacciona violentamente con oxidantes, originando peligro de incendio y explosión.

LÍMITES DE EXPOSICIÓN:

TLV: 200 ppm como TWA, 250 ppm como STEL; (piel); BEI establecido (ACGIH 2004).
MAK: Riesgo para el embarazo: grupo (DFG 2004).
LEP UE: 200 ppm; 260 mg/m³ como TWA (piel) como TWA (UE 2006).

VÍAS DE EXPOSICIÓN:

La sustancia se puede absorber por inhalación, a través de la piel y por ingestión.

RIESGO DE INHALACIÓN:

Por evaporación de esta sustancia a 20 °C se puede alcanzar bastante rápidamente una concentración nociva en el aire.

EFFECTOS DE EXPOSICIÓN DE CORTA DURACIÓN:

La sustancia irrita los ojos la piel y el tracto respiratorio. La sustancia puede afectar al sistema nervioso central, dando lugar a pérdida del conocimiento. La exposición puede producir ceguera y muerte. Los efectos pueden aparecer de forma no inmediata.

EFFECTOS DE EXPOSICIÓN PROLONGADA O REPETIDA:

El contacto prolongado o repetido con la piel puede producir dermatitis. La sustancia puede afectar sistema nervioso central, dando lugar a dolores de cabeza persistentes y alteraciones de la visión.

PROPIEDADES FÍSICAS

Punto de ebullición: 65 °C
Punto de fusión: -98 °C
Densidad relativa (agua = 1): 0.79
Solubilidad en agua: miscible
Presión de vapor, kPa a 20 °C: 12.3
Densidad relativa de vapor (aire = 1): 1.1

Densidad relativa de la mezcla vapor/aire a 20 °C (aire = 1): 1.01
Punto de inflamación: 12 °C c.c.
Temperatura de autoignición: 464 °C
Límites de explosividad, % en volumen en el aire: 5.5-44
Coeficiente de reparto octanol/agua como log Pow: -0.82/-0.66

DATOS AMBIENTALES

NOTAS

Arde con llama azulada. Está indicado examen médico periódico dependiendo del grado de exposición. Esta ficha ha sido parcialmente actualizada en octubre de 2006: ver Límites de exposición.

INFORMACIÓN ADICIONAL

Límites de exposición profesional (INSHT 2011):

VLA-ED: 200 ppm; 266 mg/m³

Notas: vía dérmica.

VLB: 15 mg/L en orina. Notas F, I.

Nota legal

Esta ficha contiene la opinión colectiva del Comité Internacional de Expertos del IPCS y es independiente de requisitos legales. Su posible uso no es responsabilidad de la CE, el IPCS, sus representantes o el INSHT, autor de la versión española.

© IPCS, CE 2000

[10]