



INSTITUTO POLITÉCNICO NACIONAL

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

**DISEÑO DE UN REACTOR QUÍMICO PARA LA HIDROGENACIÓN
SELECTIVA DE CITRAL SOBRE CATALIZADORES DE PLATINO
SOPORTADOS EN SÍLICE – CIRCONIA Y SÍLICE – TITANIA PARA LA
OBTENCIÓN DE CITRONELOL**

TESIS

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE
INGENIERO QUÍMICO INDUSTRIAL

PRESENTA:

LOPEZ LEDEZMA HECTOR URIEL

ASESOR:

DOCTOR ROMÁN RAMÍREZ LÓPEZ.



MEXICO D.F.

NOVIEMBRE 2013



CONTENIDO

ÍNDICE DE TABLAS

TABLA 1 CATALIZADORES COMERCIALES EN PROCESOS DE HIDROGENACION (pag.11)

TABLA 4.1 RESULTADO DEL COMPORTAMIENTO DE LA SUSTANCIA (pag.35)

TABLA 4.2 BALANCE DE MATERIA (pág. 35)

TABLA 4.3 DATOS TERMODINAMICOS DE LOS COMPONENTES (pag.36)

INDICE DE FIGURAS

FIGURA 1.1 ESTRUCTURA GERANIAL Y NERAL (CITRAL) (pag.13)

FIGURA 1,2 HIDROGENACION DE CITRAL ESTABLECIDA POR VANNICE Y SINGH²
(pag.20)

FIGURA 1.3 HIDROGENACION DE CITRAL PARA CATALIZADORES DE Pt
SOPORTADOS SiO₂-ZrO₂ y SiO₂-TiO₂ (pag.24)

FIGURA 1.4 HIDROGENACION DE CITRAL DE PLATINO SOPORTADO EN SiO₂-ZrO₂
(90-10) (pag.25)

FIGURA 1.5 HIDROGENACION DE CITRAL PARA EL CATALIZADOR DE
Pt/ SiO₂- ZrO₂ (90-10): CONDICIONES DE REACCION T=373 °K, P=2.026 MPa; 50
mg CATALIZADOR; 0.1M DE CITRAL EN N-HEXANO (pag.26)

FIGURA 3.1 DIAGRAMA DE FLUJO DEL PROCESO PARA LA OBTENCION DE
CITRONELOL (pag.30)

FIGURA 3.2 SELECCIÓN DE COMPONENTES (pag.30)

FIGURA 3.3 SE ESCRIBEN LOS DATOS QUE SE TENGAN DISPONIBLES (pag.31)

FIGURA 3.4 CALOR DE VAPORIZACION Y VOLUMEN LÍQUIDO MOLAR (pag.31)

FIGURA 3.5 DEFINIR ESTRUCTURAS UNIFAC PRESENTES EN LOS COMPUESTOS (pag.32)

FIGURA 3.6 PREPARACION DE MATERIAS PRIMAS (pag.32)

FIGURA 3.7 UNIDAD DE REACCION (pag.33)

FIGURA 3.8 SEPARACION (pag.33)

FIGURA 3.9 DIAGRAMA SIMULACION DEL PROCESO (pag.34)



OBJETIVOS.....	5
RESUMEN.....	5
INTRODUCCIÓN.....	6
CARACTERÍSTICAS DE LA MANUFACTURA DE QUÍMICOS FINOS.....	6
GENERALIDADES SOBRE CATALISIS.....	7
CAPITULO 1. GENERALIDADES	
1.1 HIDROGENACIÓN DE HIDROCARBUROS POR MEDIO DE CATALIZADORES.....	9
1.2 ESTUDIO DEL CITRAL Y SUS DERIVADOS.....	13
1.2.1 PROPIEDADES DEL CITRAL Y SU HIDROGENACION.....	13
1.2.2 PROCESOS PARA LA OBTENCION DEL CITRONELOL A PARTIR DE CITRAL.....	15
1.2.3 REACCIONES INVOLUCRADAS EN LA OBTENCION DE LOS ALCOHOLES INSATURADOS.....	21
CAPITULO 2. METODOLOGIA DE TRABAJO PARA EFECTUAR EL PROCESO DE REACCION.....	
2.1 SEGUIMIENTO DE LA REACCION EFECTUADA CON CATALIZADORES DE PLATINO SOPORTADOS EN OXIDOS METALICOS.....	24
2.2 OTRAS CONCLUSIONES DE HIDROGENACIONES CON CATALIZADORES METALICOS SOPORTADOS.....	28
CAPITULO 3. SIMULACION DEL PROCESO PARA LA OBTENCION DEL CITRONELOL.....	
3.1 SIMULACION DEL PROCESO PARA LA OBTENCION DEL CITRONELOL.....	30
CAPITULO 4. ANÁLISIS DE RESULTADOS.....	
4.1 ANÁLISIS DE RESULTADOS.....	35



CONCLUSIONES.....	37
BIBLIOGRAFIA.....	38
ANEXOS.....	40
I. HOJAS DE SEGURIDAD	
1.1 CITRAL	
1.2 CITRONELOL	
1.3 HEXANO	
1.4 HIDROGENO	
1.5 NITROGENO	
2. DISEÑO MECÁNICO DEL REACTOR	
2.1 DISEÑO PROPUESTO	



OBJETIVOS

- Diseñar un reactor químico para llevar a cabo a nivel industrial, a partir de estudios generados en laboratorio la obtención de citronelol con alta pureza.
- Dar a conocer el software de simulación PRO II
- Diseño y/o optimización de procesos con el software de simulación PROII

RESUMEN

En este trabajo, se muestra la hidrogenación selectiva de citral, a nivel experimental, sobre una serie de catalizadores de platino soportados en SiO_2 y óxidos mixtos de $\text{SiO}_2\text{-ZrO}_2$ y $\text{SiO}_2\text{-TiO}_2$, con el objetivo de incrementar la selectividad hacia el alcohol insaturado citronelol, que es el producto deseado. La carga metálica (1% en peso de Pt) se mantuvo constante. Los catalizadores de Pt soportados en óxidos mixtos de $\text{SiO}_2\text{-ZrO}_2$ y $\text{SiO}_2\text{-TiO}_2$ con alto porcentaje en peso de SiO_2 , favorecieron la producción de citronelal y citronelol.

Por otro lado se llevó a cabo una simulación en PRO II, con la finalidad de dar una idea mucho más amplia de cómo funciona este proceso llevado a nivel industrial, y es importante mencionar que este proceso aún se encuentra en etapa de investigación y muchos de los datos que se utilizan para hacer los cálculos termodinámicos (entalpía, viscosidad, etc.) aún no aparecen en bibliografía, por lo que al momento de simular utilizamos isómeros de las sustancias involucradas en la reacción.

Por otro lado, mediante los resultados obtenidos y en base a las diferentes investigaciones que se han realizado para la obtención del citronelol, la hidrogenación de citral es uno de los mejores procesos catalíticos que se pueden llevar a cabo para llegar a este producto.

Es importante mencionar que este proceso es de vital importancia en las industrias farmacéutica, alimenticia y de las fragancias, dado que el citronelol es una base en muchas aplicaciones de estas industrias.



INTRODUCCIÓN

Tradicionalmente, los químicos finos y sus especialidades se han producido primordialmente por síntesis orgánica no catalítica. Esta es una razón importante por la cual los productos deseados (de entre una variedad de 20 y 100) son producidos con desechos.

Por supuesto muchos otros factores, tales como la complejidad de las moléculas (y consecuentemente, el número de pasos sintéticos), además del corto tiempo de desarrollo para la síntesis técnica y también los altos requerimientos de pureza de muchos químicos finos son responsables de una situación ecológica desfavorable.

Sin embargo, la aplicación de los métodos catalíticos en los químicos finos se ha incrementado en los recientes años, en parte porque los costos de producción y desechos se minimizan en gran importancia incluso para valores de fármacos, saborizantes, aromáticos y especialidades agroquímicas.

Como químicos finos podemos entender a aquellos que se producen en baja cantidad y son de alto valor agregado. Entre los más importantes podemos encontrar a los aldehídos y alcoholes insaturados ya que estos se utilizan, como ya se ha mencionado, en la producción de fármacos, saborizantes, aromáticos y agroquímicos. Los aldehídos insaturados contienen enlaces C=C y C=O y después de una hidrogenación selectiva orientada hacia el enlace C=O, se obtienen alcoholes insaturados siendo por lo general de alto valor agregado.

En esta contribución daremos una caracterización de los problemas de la producción de químicos finos. Después describiremos las herramientas disponibles para resolver algunos de estos problemas con la ayuda de la catálisis.

Características de la manufactura de químicos finos

La manufactura de químicos finos y especialidades farmacéuticas, aromáticos, saborizantes y agroquímicos puede ser caracterizada por:

- ✓ Moléculas complejas (isómeros, estereoquímicos, varios grupos funcionales) con limitada estabilidad térmica.
- ✓ Producción vía síntesis multietapas (de 5 a 10 pasos para fármacos, aromáticos y saborizantes y de 3 a 7 para agroquímicos) de productos con tiempo de vida corta generalmente menos a 20 años. Usualmente



utilizando reacciones orgánicas clásicas, siendo la catálisis la excepción.

- ✓ Escala relativamente pequeña de producción (1 a 1000 toneladas por año para fármacos, aromáticos y saborizantes y de 500 a 10000 ton por año de agroquímicos).
- ✓ Altos requerimientos de pureza, usualmente mayor a 99% y menos a 10 ppm de residuos metálicos y mayor a 98% en fármacos.
- ✓ Alto valor agregado y por lo tanto, más tolerante a altos costos de proceso (especialmente para escalas de productos muy pequeña y efectiva).
- ✓ Tiempos cortos para el desarrollo del proceso de producción hasta obtener rentabilidad del producto. Por lo tanto, conviene utilizar la misma planta para la obtención de varios productos con diferente materia prima y a este tipo de plantas se les conoce como plantas multipropósitos.

Generalidades sobre catálisis

Las características básicas de la catálisis comprenden:

1. En una reacción catalítica, el catalizador no sufre ningún cambio al concluir la reacción, pero puede participar en las etapas intermedias para acelerar la velocidad de reacción.
2. Cuando la reacción puede seguir más de un mecanismo, el catalizador manifiesta a veces cierta selectividad favoreciendo una sobre los demás. Esta situación genera por lo común una distribución de productos diferente a los que se observa con otros mecanismos. La aplicación correcta de la selectividad de catalizadores permite acelerar la reacción deseada en tanto que se demoran las indeseables.
3. La velocidad de reacción es generalmente proporcional a la concentración del catalizador. En el caso de una reacción catalizada con un sólido, el área superficial del catalizador y la concentración de los llamados centros activos o sitios catalíticos (regiones de actividad química en la superficie) adquieren una importancia preponderante.
4. En una reacción reversible, el catalizador acelera la reacción inversa al igual que la directa. Por ende, la composición en el equilibrio del sistema reaccionante será la misma que la de un sistema no catalizado.
5. En una reacción auto catalítico, en donde uno de los productos de reacción actúa como catalizador, debe estar presente una cantidad pequeña del producto para iniciar la reacción. Una gráfica de conversión en



función del tiempo para este tipo de reacción genera una curva característica en forma de S.

- ✓ Catálisis homogénea. Se ha observado que las reacciones catalíticas homogéneas se desarrollan ya sea en la fase gaseosa o en la líquida. Se ha descubierto que gran número de la catálisis de este género obedecen a ecuaciones de velocidad que son de primer orden con respecto a la concentración del catalizador.
- ✓ Catálisis heterogénea. Las reacciones catalíticas de esta clasificación comprenden sistemas con dos o más fases, entre gaseosas, líquidas y sólidas. El catalizador está en fase distinta a la de los reactivos

¿Con qué puede contribuir la catálisis?

La catálisis puede contribuir en dos niveles: para una producción limpia de químicos finos, proporcionando una mejora al proceso de producción y segundo, ayudando a eliminar o transformar subproductos indeseados e inclusive tóxicos.

Transformaciones posibles sólo mediante catálisis

- ✓ Nuevas selectividades.
- ✓ Catálisis enantioselectiva
- ✓ Nuevas quimioselectividades (hidrogenación de un $C=C-C=O$ para obtener $CH-CHC=O$).

Combinando varias transformaciones en un paso:

- ✓ Alquilación reductiva de aminas con compuesto carbonilo (aminas no aisladas).
- ✓ Hidrogenación-acilación de nitroarenos a acilanilinas.
- ✓ Alquilación directa de aminas con alcoholes vía una secuencia de deshidrogenación-condensación-hidrogenación.
- ✓ Reemplazando reactivos tóxicos o problemáticos.
- ✓ Alquilación de aminas o aromáticos con alcoholes en lugar de haluros de alquilo (reducción de la producción de la sal)
- ✓ Uso de hidrógeno en lugar de metales, hidruros de metal o sulfuros.
- ✓ Uso de agua oxigenada u oxígeno en lugar de óxidos metálicos o perácidos.
- ✓ Ácidos y bases sólidas para reemplazar los solubles.



Factores que implican la aplicación de catalizadores.

Un gran número de transformaciones catalíticas altamente selectivas se encuentran en la literatura, en principio puede ser aplicada a la síntesis de químicos finos, sin embargo algunos prerrequisitos se deben de satisfacer para obtener un proceso catalítico técnicamente viable.

Desempeño del catalizador

La selectividad de un catalizador es probablemente su propiedad más citada además de que la quimioselectividad y enantioselectividad juega un papel para la síntesis de químicos finos. Debido al alto costo de la materia prima y de los intermediarios, además de las etapas de separación, las selectividades mayores al 95% son usualmente requeridas para hacer atractivo un método catalítico. La productividad del catalizador dada como volumen (toneladas) o como relación sustrato/catalizador determina los costos del catalizador. Para catálisis enantioselectiva el volumen debe ser >1000 para productos de alto valor y 50000 para productos a gran escala o menos costosos.

CAPITULO 1. GENERALIDADES

1.1 HIDROGENACION DE HIDROCARBUROS POR MEDIO DE CATALIZADORES

El gran número de compuestos orgánicos que por diferentes razones se ha tratado de hidrogenar, compone una extensísima información cuyo tratamiento sistemático rebasa ampliamente los límites de esta breve panorámica.

Tanto los catalizadores utilizados, como las condiciones de operación de estos procesos, dependen básicamente de la estructura del compuesto a hidrogenar. La enorme variedad de los compuestos orgánicos susceptibles a hidrogenarse, no permite dar detalles concretos de procesos determinados. Por ello este resumen se limitara a intentar trazar a grandes rasgos, las características esenciales de estas reacciones, desde el punto de vista de los catalizadores generalmente utilizados.

Si bien muchos de los catalizadores usados en sistemas de hidrogenación pueden utilizarse en reacciones de des hidrogenación, es evidente que existen sensibles diferencias entre ambos procesos.

A temperaturas menores a 200^oC, la hidrogenación de olefinas a hidrocarburos aromáticos, esta favorecida termodinámicamente. Presiones de operación de hasta 200 atmosferas, permitan subir la temperatura de reacción



a valores aproximados a 500⁰C. Es decir, en estos sistemas el aumento de la temperatura suele estar asociado con el de la presión de trabajo, con el objeto de equilibrar favorablemente la reacción. Sin embargo, la mayoría de las reducciones no requieren presiones superiores a las 100 atmosferas, ni temperaturas por encima de 200⁰C. Cuando la reacción tiene lugar a temperaturas inferiores a 100⁰C, esta suele ser irreversible y fuertemente exotérmica.

En general, los catalizadores metálicos son mucho más activos en este tipo de reacciones que los óxidos metálicos semiconductores. Estos suelen emplearse en hidrogenaciones selectivas en ciertos compuestos y requieren mayores temperaturas y presiones de operación; sin embargo, la notable resistencia de estos óxidos metálicos de envenenamiento por elementos extraños, les confiere interesantes posibilidades industriales. En la tabla 1 se muestran los catalizadores de utilización más frecuentes en procesos comerciales de hidrogenación.

La gran importancia del eventual envenenamiento de los catalizadores de hidrogenación amerita algunas consideraciones. El proceso de envenenamiento se lleva a cabo mediante la adsorción, generalmente irreversible, de ciertos compuestos en los centros activos del catalizador, impidiendo así que estos sigan interviniendo en la transformación química.

En ciertos casos, relacionando la configuración electrónica de determinadas sustancias con su capacidad para adsorberse, es posible predecir qué tipo de compuestos pueden inhibir la actividad de un catalizador. Compuestos metálicos donde los orbitales *d* del metal contengan un electrón o un par de electrones disponibles para formar un enlace, o compuestos orgánicos capaces de donar electrones (como la piridina), competirán con los reactantes y productos de la hidrogenación, por centros de adsorción disponibles en la superficie del catalizador.

Aunque algunos metales como: mercurio, fierro, estaño, plomo, bismuto, zinc, etc., sus óxidos y sales pueden envenenar los catalizadores preparados con metales nobles, los venenos más importantes son sin duda los elementos de los grupos Vb (Nitrógeno, Fosforo, Arsénico, Antimonio) y VIb (Azufre, Selenio, Telurio) y sus compuestos. Es notable en este sentido la acción negativa del azufre, tanto en forma orgánica como inorgánica.



En la tabla 1 se presentan los catalizadores comerciales en procesos de hidrogenación.

Tabla 1 Catalizadores comerciales en procesos de hidrogenación.

Sistema	Fase activa	Soporte	Fase activa % en peso	Superficie m ² /g	Densidad relleno kg/l
Uso general	Ni	{ Al ₂ O ₃ Kieselguhr	14 - 65	50 - 170	0.2 - 1.6
Uso general (fase líquida, pequeña escala)	Ni Raney	—			
Uso general	Pt(*), Pd(*), Rh, Ru(*)	{ Al ₂ O ₃ carbón	Variable	Variable	Variable
Hidrogenación selectiva	Cr ₂ O ₃ +CuO	—	{ Cr ₂ O ₃ : 17 - 60 CuO: 37 - 82	10 - 40	0.9 - 1.7
Hidrogenación selectiva	Cr ₂ O ₃ +CuO+BaO	—	{ Cr ₂ O ₃ : 30 - 46 CuO: 37 - 46 BaO: 8 - 12	14 - 50	0.4 - 0.9
** Hidrogenación selectiva	CoO	{ Kieselguhr SiO ₂ Al ₂ O ₃	10 - 60	6 - 140	0.5 - 1.2

* También en forma de óxidos sin soportar.

Indudablemente la facilidad de envenenamiento de los catalizadores metálicos es un problema de difícil solución; sin embargo, este grave inconveniente se ha aprovechado con habilidad en ciertas ocasiones, para llevar a cabo hidrogenaciones selectivas o intermedias. Seguidamente se comentaran algunas características de las reacciones de reducción de olefinas, aceites y grasas, compuestos aromáticos, nitroderivados y grupos carbonilo, que son los procesos de mayor interés industrial entre las reacciones de hidrogenación catalítica.

En general un doble enlace se hidrogenara con preferencia a otras funciones, exceptuando el grupo NO₂ y el triple enlace. La reacción puede llevarse a cabo con facilidad, utilizando catalizadores de níquel y las condiciones de operación dependerán de la configuración de la olefina, siendo la velocidad del proceso inversamente proporcional al número de sustituyentes del doble enlace. Normalmente las temperaturas de reacción se encuentran entre 50 y 150°C y la presión de trabajo entre 1 y 10 atmósferas.

En la hidrogenación de olefinas pueden emplearse así mismo ciertos metales nobles, aunque su utilización esta en cierto modo restringida por su poder de isomerización. La actividad de estos metales sigue el orden paladio>rodio>platino>>rutenio y quizá su aplicación industrial más interesante sea la hidrogenación parcial de pequeñas cantidades de diolefinas y acetileno, contenidas en corrientes de olefinas, para lo cual se utiliza paladio soportado sobre CaCO₃ o alúmina.



La hidrogenación de aceites y grasas se lleva a cabo en fase líquida, donde el hidrógeno se disuelve con la ayuda de un agitador y la influencia del catalizador. El catalizador suele ser níquel soportado, puesto que los catalizadores de platino o paladio que también son activos no presentan ventajas adicionales y si el inconveniente de su precio. El níquel puede llevar pequeñas cantidades de cobre para facilitar la reducción previa del catalizador. Generalmente estas hidrogenaciones se realizan con una concentración de catalizador de 0.05 al 1.15% en peso de níquel, temperaturas entre 120 y 190°C y presiones que varían entre la atmósfera y las 15 atmósferas. La selección del catalizador ha de ser cuidadosa con respecto a la selectividad del mismo. Así mismo, es imprescindible que el catalizador pueda separarse del medio orgánico, mediante la filtración sencilla.

La hidrogenación de benceno a ciclohexano y la de naftaleno a tetralina o decalina, son los procesos más importantes de hidrogenación de hidrocarburos aromáticos. La hidrogenación catalítica de benceno en fase vapor se puede llevar a cabo en reactores de lecho fijo con temperaturas de 200 a 250°C, presiones de unas 10 atmósferas y catalizadores de níquel. Los rendimientos de ciclohexano se aproximan al 100% del teórico. Cuando la cantidad de azufre en la alimentación es pequeña puede utilizarse un catalizador en platino o rodio soportado. La reacción es altamente exotérmica (54 Kcal/mol de benceno hidrogenado a 250°C), por lo que conviene que el catalizador a emplear no sea extremadamente activo, sobre todo si la alimentación es muy rica en benceno. Según otro procedimiento, la hidrogenación de benceno se realiza en reactores con agitación mecánica y níquel raney como catalizador. Catalizadores de rutenio son especialmente útiles en las hidrogenaciones de hidrocarburos aromáticos, donde es necesario evitar los procesos secundarios de hidrogenolisis.

Los metales citados como catalizadores de hidrogenación, sirven perfectamente para la reducción de los grupos carbonilo; sin embargo, cuando la hidrogenación tiene que ser selectiva en estos grupos, dejando intacto el resto de la molécula, generalmente se utilizan cromitas de cobre como catalizadores. Estas cromitas suelen utilizarse para hidrogenar aldehídos, cetonas y ésteres a los alcoholes correspondientes; también son útiles en la saturación de dobles enlaces en moléculas que contengan anillos aromáticos que deban permanecer inalterados, y en la transformación de amidas a aminas. La utilización de las cromitas de cobre suele requerir condiciones de operación más energéticas, de forma que la temperatura puede llegar a 300°C y la presión a 300 atmósferas.

1.2 ESTUDIO DEL CITRAL Y SUS DERIVADOS

1.2.1. PROPIEDADES DEL CITRAL Y SU HIDROGENACION

El citral es un compuesto interesante para la hidrogenación, puesto que contiene un enlace doble aislado y conjugado así como un grupo carbonilo, y además existe como isómero cis y trans. En la hidrogenación de citral, el producto más importante es el citronelol, que se utiliza por ejemplo, en la industria de la perfumería. El producto primario de la hidrogenación es citronelal, que reacciona por hidrogenación sucesiva al citronelol y posteriormente a 3,7-dimetiloctanol. También existen otros productos formados en este sistema, los alcoholes no saturados (nerol y geraniol). Cuando el citral se hidrogena en etanol, puede ser formado el acetal citronelal. El citral es líquido a temperatura ambiente, muestra una coloración amarillo limón translúcido, aroma cítrico intenso agradable, consistencia aceitosa, inmiscible en agua, cuyas propiedades físicas y químicas son descritas a continuación:

Propiedades Físicas:

Citral: 3,7-Dimetil-2,6-octadienal $C_{10}H_{16}O$

Peso Molecular = 152.24 g/mol

Del aceite volátil conocido como te de limón *Cymbopogon citratus*, una planta de la familia de las gramíneas (graminae), el citral es el constituyente (75 a 85% en peso de del aceite obtenido como extracto) más importante del aceite, el citral obtenido de fuentes naturales es una mezcla de dos isómeros geométricos; geranial y neral.

En la fig. 1.1 se muestra la estructura de isómeros geométricos; geranial y neral (citral)

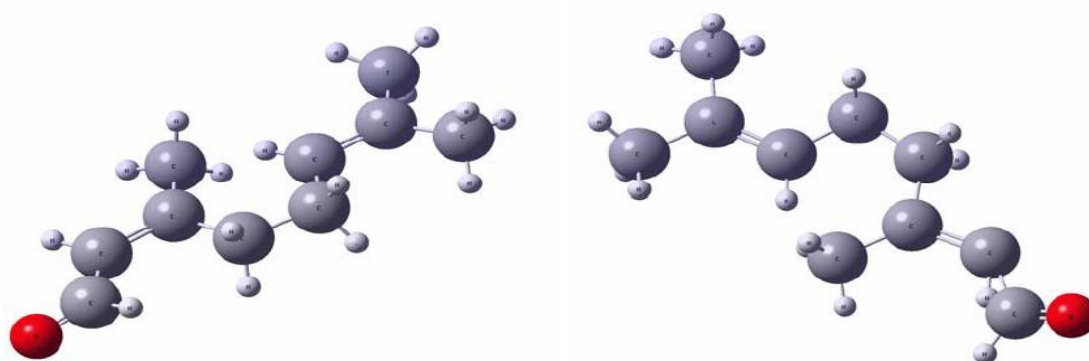


fig.1.1 geranial y neral (Citral)



GERANIAL: Físicamente es un líquido ligeramente aceitoso con olor fuerte a limón, sus propiedades físicas son las siguientes:

Punto de ebullición = 92-93 °C

Densidad = 0.8888 g/cm³

Índice de refracción a 20 grados centígrados incidido con luz de sodio:
 $n_D^{20} = 1.48982$

Solubilidad: Prácticamente insoluble en agua, es miscible en alcohol, éter, bencil, benzoato, dietilftalato, glicerol, propilengilcol, aceite mineral, y otros aceites esenciales.

NERAL: Al igual que el geranial es físicamente un líquido ligeramente aceitoso produce la sensación al olerlo a una esencia a limón no tan intenso pero más dulce que el geraniol, sus propiedades físicas son las siguientes:

Punto de ebullición = 91-92 °C

Densidad = 0.8869 g/cm³

Índice de refracción a 20 grados centígrados incidido con luz de sodio:
 $n_D^{20} = 1.48690$

Como se mencionó anteriormente, el citral puede obtenerse a partir de fuentes naturales, por ejemplo este compuesto se encuentra en las plantas del género *Cymbopogon* de las cuales se tiene cerca de 55 especies, la mayoría de las cuales son nativas a Asia del Sur, a Asia sur oriental y a Australia. La hierba de limón (*flexuosus* de *Cymbopogon* es nativa de la India, Sri Lanka, Birmania y Tailandia); para la hierba de limón se encuentra en el oeste de la India, y se asume generalmente un origen de Malesí. Ambas especies se cultivan hoy a través de Asia tropical. Aunque las dos especies se pueden utilizar indiscriminadamente, el citrato del *Cymbopogon* es más relevante para cocinar. En la India están los cultivos de la hierba que es usada con fines medicinales y para los perfumes, pero no utilizado como especia; en el resto de Asia tropical (Sri Lanka y aún más Asia Suroriental), es una hierba y una especia culinarias importantes.

El citral, el geraniol, nerol y citronelol son compuestos que están clasificados dentro de los terpenos en química orgánica, que son una clase de lípidos no saponificables. Los terpenos se diferencian de las grasas y ceras por que las subunidades moleculares de las grasas y ceras están unidas por enlaces de éster, mientras que las unidades de isopreno de los terpenos están ligadas por enlaces carbono-carbono, por esta razón las grasas se suelen



describir como lípidos saponificables y los terpenos como lípidos no saponificables. Otra característica distintiva es que los terpenos suelen tener múltiples sustituyentes de oxígeno a lo largo de la cadena, como alcoholes o grupos carbonilo, donde existen diferentes procesos para la producción de los alcoholes insaturados. En la siguiente sección se presentan los más importantes de éstos.

Los usos que en general se le dan al citral son: como saborizante para fortalecer el aceite de limón, en perfumería por su efecto cítrico, en aguas de colonia, en perfume para confitería, en síntesis de vitamina A, ionona y metil-ionona. No es estable en álcalis y ácidos fuertes, es probable que cause decoloración en jabones y cosméticos.

1.2.2. PROCESOS PARA LA OBTENCIÓN DE CITRONELOL A PARTIR DE CITRAL

Para la producción de alcoholes insaturados existen los siguientes procesos.

a) El proceso natural:

La producción de aceites esenciales es uno de los principales procesos donde se aplica la destilación por arrastre de vapor de agua. Esta técnica de destilación es usada para destilar compuestos de punto de ebullición altos que se descomponen en o cerca de sus puntos de ebullición.

Estos compuestos pueden destilarse con vapor de agua a una temperatura lo suficientemente baja para evitar su descomposición, este hecho constituye una ventaja sobre otros métodos de destilación. Dado que la corriente de vapor de agua es un proceso eficaz y barato (sólo se requiere agua y calor), se usa con frecuencia para aislar y purificar aceites naturales a partir de sus fuentes biológicas. Cuando se destilan con vapor pequeñas cantidades de material, resulta eficaz suspender la materia prima de los aceites en agua en matraz de destilación. Cuando se calienta esta mezcla, el vapor que se genera en el interior inicia el proceso de arrastre.

La consecuencia de esta técnica para la química práctica es que un componente de punto de ebullición elevado, con una presión de vapor relativamente pequeña, puede obtenerse por destilación con un líquido inmiscible. Así, como los aceites esenciales tienen un punto de ebullición alto pueden aislarse y purificarse combinándolos en un proceso de destilación con algún líquido inmiscible de punto de ebullición inferior. En el caso del citronelol, tiene un punto de ebullición cercano a 222 °C, pero ya que este va acompañado de otras sustancias minoritarias formando parte del aceite esencial, el punto de ebullición de esta mezcla, diferirá un poco de esta temperatura. El líquido inmiscible usado ha sido el agua debido a que tiene



varias características que favorecen su elección: se dispone de ella, es barata y de peso molecular bajo.

Debido a su bajo peso molecular pueden destilarse gran número de moles de agua sin que representen un gran volumen. Gracias a este procedimiento se comienza a destilar a una temperatura inferior al punto de ebullición del agua pues la temperatura de ebullición de una mezcla de dos líquidos inmiscibles es inferior a la temperatura de ebullición de cualquiera de ellos por separado. Como se puede observar esta temperatura es cercana a la temperatura del disolvente, ya que el vapor que se genera al comenzar el arrastre es más rico en el componente más volátil, es decir, el agua. Los aceites esenciales están constituidos químicamente por terpenoides, compuestos que son volátiles y por lo tanto arrastrables por vapor de agua. Las esencias hallan aplicación en numerosísimas industrias. Es el que consta de la extracción del Cymbopongo martin, con un rendimiento del 1% del extracto, del cual entre el 84% al 94% es citronelol. De este proceso se aprecia que se produce muy poco citronelol y muchos desechos.

b) El proceso sintético:

La producción de citronelol a partir de moléculas más pequeñas se basa en la hidroclicación para obtener cloruro de geranil y cloruro de neril. En primer lugar se necesita un calentamiento con acetato de sodio para obtener una mezcla de acetato de geranio y acetato de neril. Posteriormente con ayuda de bases nitrogenadas, disolventes y condiciones especiales la mezcla de acetatos son transformados vía síntesis a partir de etileno la forma deseada de la estructura de las moléculas. Es seguido por un proceso de reducción del grupo carbonilo enfocada a la síntesis de alcoholes. Finalmente se presenta la saponificación y recuperación de alcoholes vía destilación, con especial cuidado en remoción de cloruros ya que son cancerígenos.

En el proceso natural se produce muy poco citronelol y en el proceso sintético se utilizan reactivos que son cancerígenos. Por lo anterior, se tiene un tercer proceso de obtención de citronelol por hidrogenación selectiva de aldehídos empleando catalizadores metálicos soportados, para ser producido en gran escala y con un alto rendimiento.

c) Hidrogenación selectiva de aldehídos:

Una de las causas principales por las que se trabaja con el método de hidrogenación selectiva empleando catalizadores metálicos soportados, es por la reducción de desechos en comparación con los otros dos métodos ya mencionados, además otra de las causas es la producción de la alta pureza de los productos, y por lo tanto el alto valor agregado. A continuación se presenta un resumen de los trabajos más representativos al respecto:



Actualmente en las reacciones de química fina se han utilizado una gran variedad de catalizadores, con el propósito de obtener productos de mayor valor agregado. El primer paso para la obtención de un buen catalizador es la adecuada selección del soporte catalítico, de acuerdo con lo expuesto por [Dalmaschio, et al.¹¹]; las propiedades ácido-base de un catalizador cobran importancia ya que comúnmente son utilizados en la industria química. Las reacciones se llevan a cabo regularmente con catalizadores de características ácidas (que generalmente provienen de las características físico-químicas de los soportes catalíticos) en presencia de diferentes solventes, incluyendo agua, sin embargo el papel que juega la acidez en las reacciones catalíticas no ha sido establecido con claridad hasta el momento.

Para la obtención de los soportes catalíticos, de toda la gama de opciones disponibles en cuanto a materiales denominados "óxidos mixtos" con diferentes precursores, se ha elegido obtener óxidos mixtos de $\text{SiO}_2\text{-ZrO}_2$, $\text{SiO}_2\text{-TiO}_2$ los cuales serán obtenidos por el método de síntesis conocida como sol-gel, el cual ha sido empleado como un método de síntesis para la preparación del óxido puro, o bien mixtos con propiedades físico-químicas específicas que no pueden ser obtenidas por métodos tradicionales como precipitación o co-precipitación.

Otro aspecto a considerar para este tipo de reacciones es la propiedad de tener poros grandes (los llamados materiales mesoporosos o con macroporos) lo cual es importante ya que estos materiales brindan la oportunidad de que las moléculas de tamaño considerable (como en el caso de citral) entren en ellos. En los sólidos porosos tal interacción está determinada por la topología y dimensiones de sus poros, así como la naturaleza y distribución espacial de los átomos que forman sus paredes. En el caso de moléculas como citral o citronelal que son de una masa molecular ($152.24 \text{ g mol}^{-1}$ y $154.52 \text{ g mol}^{-1}$, respectivamente) y tamaño considerable es recomendable el emplear soportes catalíticos en el rango de los mesoporos, en algunas ocasiones es posible utilizar materiales como los MCM-41 tal como lo expone [Apesteguía, et al. ²⁴], en el caso de la síntesis de mentol a partir de citral.

Debido al reducido volumen y tamaño de poro de los óxidos mixtos de $\text{SiO}_2\text{-ZrO}_2$ y $\text{SiO}_2\text{-TiO}_2$ se implementa una metodología post-síntesis la cual consiste en la utilización de una autoclave, con lo cual se obtienen materiales mesoporosos con características similares a los aerogeles (que utilizan condiciones supercríticas). En este trabajo se generan los sólidos porosos con ayuda de presión autogenerada, esta presión permite al gel mantener la tensión superficial dentro de sus poros, y por lo tanto, evitar el colapso del mismo, que pudiera repercutir en tener tamaños de poro pequeños.



Es importante mencionar que esto viene a sustituir los procedimientos tradicionales que involucraban la adición de tensoactivos, que si bien cumplen con la misma función en ocasiones su elevado costo económico dificulta llevar el proceso a una escala industrial.

La elección del metal o los metales a impregnar (en el caso de catalizadores bimetálicos), así como la carga metálica son aspectos del catalizador que requieren de una buena elección basada en las características del metal y de lo se conoce del mismo. Algunas reacciones se ven favorecidas por el uso de determinado metal, siempre considerando que sea factible su uso desde el punto de vista económico y de aplicabilidad. La carga metálica es la elección que depende en gran medida de los conocimientos que se tengan del soporte catalítico, considerando que hay factores como la dispersión del metal que están determinados directamente por la relación de interacción existente entre el metal y el soporte catalítico.

Aunque el efecto de la interacción metal-soporte no ha sido establecido, [Koningsberger, et al. ²⁵] ha propuesto una posible explicación, la cual correlaciona la estructura electrónica del metal (platino u otro) con las propiedades texturales del soporte, estableciendo que el incremento en las velocidades de reacción de hidrogenación e hidrogenolisis de hidrocarburos sobre catalizadores de platino se debe a la presencia de soportes oxidativos con una baja densidad electrónica sobre el soporte oxigenado. El origen de este efecto provocado por el soporte es atribuido a que el platino incrementa su energía en soportes con alta densidad electrónica y disminuye su energía en soportes con baja densidad electrónica, estos cambios en la estructura electrónica de las partículas soportadas de platino afectaran la quimisorción de adsorbatos e hidrógeno, sobre la superficie y por consecuencia tendrán influencia en el comportamiento catalítico.

El gran reto que se presenta en las reacciones de hidrogenación selectiva de aldehídos α , β insaturados es que la hidrogenación del enlace C=C es termodinámicamente favorecida sobre la hidrogenación de enlace C=O. Con lo cual la obtención de citronelal se dificulta, ya que, una vez hidrogenado el enlace C=C el siguiente paso es precisamente la hidrogenación no favorecida del enlace C=O. [Coloma, et al. ¹⁰] ha enfatizado la importancia de contar con superficies catalíticas que contengan oxígeno, en su estudio de la hidrogenación de crotonaldehído en fase gas sobre platino, encontró un incremento en la selectividad del enlace C=O. Esto fue atribuido a que se encontraban presentes una gran cantidad de grupos que contenían oxígeno sobre la superficie del soporte catalítico utilizado. Sin embargo, la presencia de grupos que contengan oxígeno sobre el soporte catalítico está aún en debate ya que el grupo de Bachiller, contradice la



influencia de estos grupos oxigenados en la hidrogenación de crotonaldehído con catalizadores de platino y rutenio soportados en grafito.

Otro parámetro importante es que algunos catalizadores son capaces de llevar a cabo la reacción en la interfase metal-soporte, tal como lo establecen [Burch y Flambard ¹⁹], para el catalizador de níquel soportado sobre titanía, el cual al presentar tamaños de partícula grandes no presentaba la interacción metal-soporte, pero aún tenía cincuenta veces mayor actividad específica en la hidrogenación de C=O que un catalizador de níquel soportado en sílice, por lo que propusieron la creación de nuevos sitios activos en la interfase metal-soporte, los cuales eran responsables de la alta actividad específica. En este trabajo se ha elegido el platino como metal para los catalizadores ya que presenta características hidrogenantes muy interesantes e importantes, si bien es cierto que hidrogena preferentemente al doble enlace C=C. También existe la posibilidad de modificar tal selectividad si se utiliza un soporte catalítico con características físico-químicas por determinar que ayuden a la hidrogenación selectiva del grupo carbonilo C=O. Las propiedades de catalizadores soportados difieren grandemente en relación a la reactividad y selectividad (Tsai y Muetterties²⁶). Dado que las características que presentan los catalizadores de platino soportados en óxidos puros de sílice, alúmina y titanía respectivamente no poseen los requerimientos que hasta ahora hemos analizado, se requiere la implementación de una técnica de síntesis de materiales que proporcione materiales catalíticos con alta pureza y que garantice seguir contando con aquellas propiedades de que si sean de interés de los óxidos puntos de partida.

En este trabajo se establece una metodología para la obtención de catalizadores de platino soportados en óxidos mixtos de SiO₂ modificados por ZrO₂ y TiO₂ con características específicas tanto desde el punto de vista textural como desde el punto de vista electrónico, que presenten alta actividad y sobre todo que sean selectivos hacia la molécula de citronelol.

El citral que es la molécula de partida se encuentra en la naturaleza, es muy interesante desde el punto de vista químico ya que posee un doble enlace C=C aislado y posee dos enlaces conjugados C=O y C=C, los cuales han sido motivo de estudio [Vannice y Singh ²⁷]. La molécula de citral está compuesta por dos isómeros (mezcla de E y Z) que por sí mismos proporcionan un agradable olor, sin embargo el principal interés a nivel industrial es la hidrogenación de los dobles enlaces que posee, obteniéndose productos de alto valor agregado como son: citronelal, citronelol y mentol. Los estudios de la literatura referentes a la hidrogenación selectiva de citral han intentado proporcionar un entendimiento de la reacción (Yilmazy, Aykac¹⁷), sin embargo, no proporcionaron una propuesta concreta del tipo de catalizador o de sus características, es por eso que en este trabajo se presenta la

metodología empleada para obtener y caracterizar materiales catalíticos de platino, soportados en óxidos mixtos que presenten alta selectividad hacia citronelal y su correspondiente alcohol insaturado "citronelol" en la reacción de hidrogenación de citral y la descripción de las características que deben de tener.

Uno de los trabajos más importantes relacionados con la hidrogenación selectiva de citral es el presentado por Vannice y Singh²⁷, en donde utilizaron catalizadores de platino soportado en una sílice comercial estableciendo las diferentes rutas de reacción para la molécula de citral, esto se representa en la fig. 1.2 :

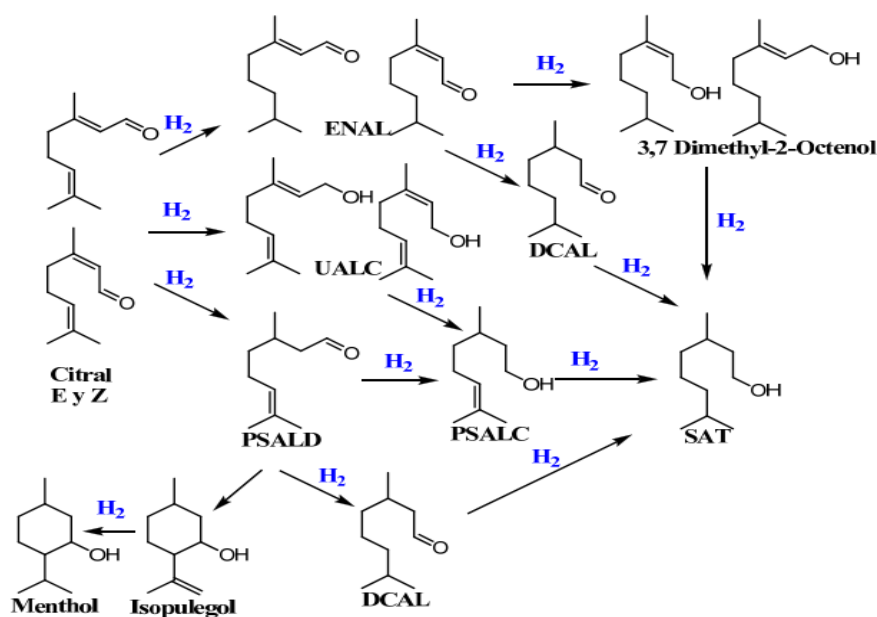


Fig. 1.2 Hidrogenación de citral, establecida por Vannice y Singh²⁷.

Dado que la molécula de citral posee 2 enlaces dobles conjugados (C=O y C=C) y un enlace doble aislado C=C, se tienen diferentes rutas de reacción dependiendo de cuál enlace sea el hidrogenado. Por ejemplo si la reacción de hidrogenación se presenta en el grupo funcional C=O (conjugado) entonces se obtendrán los dos isómeros de los alcoholes insaturados (Cis y trans) cuya nomenclatura empleada en el trabajo de [Vannice y Singh²⁷] fue (UALC). Mientras que si la reacción de hidrogenación se presenta con el grupo funcional C=C (conjugado) entonces se obtendrá el aldehído parcialmente insaturado cuya nomenclatura fue (PSALD).

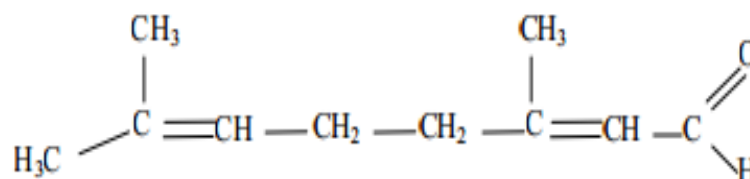
En esta investigación se consideró que es importante encontrar materiales que al ser impregnados con platino, presenten buena interacción metal soporte y que sean materiales con radios de poro en la región de mesoporos para que no existan limitaciones de transporte interno de los reactivos y de los productos. Por lo cual se investigó el comportamiento de



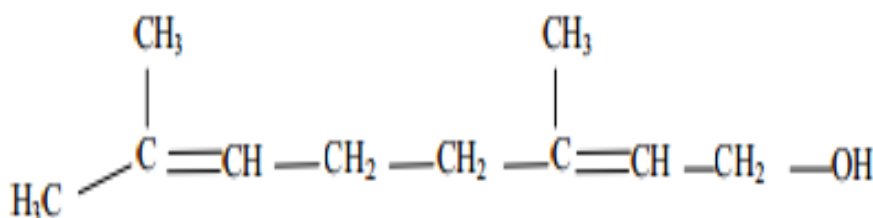
catalizadores de platino soportados en óxidos SiO_2 , ZrO_2 , TiO_2 y en óxidos mixtos $\text{SiO}_2\text{-ZrO}_2$ y $\text{SiO}_2\text{-TiO}_2$, en la hidrogenación selectiva de citral. Este estudio es interesante ya que el óxido de silicio por sí mismo es de gran interés como soporte catalítico, ya que desde el punto de vista estructural forma una red tridimensional que está compuesta por tetraedros bien definidos en el espacio y se puede aprovechar el incorporar nuevos átomos de un elemento diferente para generar materiales catalíticos con propiedades ácidas si se logra la incorporación o interacción de metales (Ti o Zr) en dicha red. En lo correspondiente a la reacción se buscó incrementar la selectividad hacia el alcohol insaturado "citronelol" el cual proporciona un olor agradable y características sensoriales tanto al olfato como al sentido del gusto.

1.2.3. REACCIONES INVOLUCRADAS EN LA OBTENCIÓN DE LOS ALCOHOLES INSATURADOS.

Los alcoholes insaturados se obtienen hidrogenando un aldehído, como por ejemplo, el proceso de producción de citronelol a partir de citral (3,7 dimetil 2,6 octadienol, $\text{C}_{10}\text{H}_{16}\text{O}$),



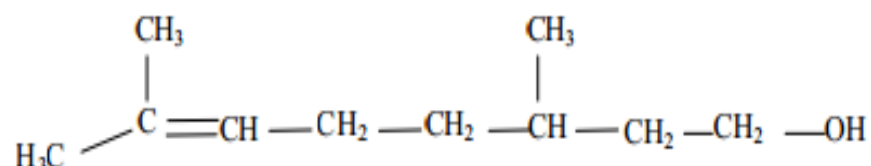
por hidrogenación selectiva de los aldehídos (geranial y neral) existe la formación de alcoholes insaturados isoméricos como es el caso de geraniol y nerol (3,7 dimetil 2,6 octadieno-1 ol, $\text{C}_{10}\text{H}_{18}\text{O}$) que ambos tienen la siguiente fórmula desarrollada:



Es difícil que esta reacción se dé con una alta conversión y selectividad debido a la existencia de enlaces carbono-carbono $\text{C}=\text{C}$ dentro de la estructura molecular de la molécula que nos interesa hidrogenar.



La hidrogenación de los alcoholes isoméricos diolefinicos geraniol y nerol puede proseguir con otra hidrogenación parcial o total de los dobles enlaces olefínicos para dar, primero:



Citronelol (3,7 dimetil 6 octeno-1 ol, C₁₀H₂₀O), en el caso de la hidrogenación del enlace alfa.

CAPITULO 2. METODOLOGÍA DE TRABAJO PARA EFECTUAR EL PROCESO DE REACCION

La síntesis de los óxidos mixtos de SiO₂-ZrO₂ y SiO₂-TiO₂ se realiza utilizando el método sol-gel a una temperatura de 353 K. La obtención de los materiales mesoporosos se logra con un procedimiento postsíntesis, utilizando una autoclave y una temperatura de 423 K, la cual representa una temperatura relativamente baja y fácil de manipular si se compara con las condiciones supercríticas utilizadas en la obtención de aerogeles, sólo se debe tener siempre la precaución que el gel se encuentre perfectamente hidratado para evitar que se presente la carbonización del mismo. El gel posteriormente es secado por medio de vacío hasta observar que la fase líquida había sido removida totalmente de la red polimérica del gel. Finalmente se obtienen los soportes mixtos SiO₂-ZrO₂ y SiO₂-TiO₂ con diferentes contenidos en peso de ZrO₂ y TiO₂, por ejemplo; el óxido mixto SiO₂-TiO₂ (90-10) contiene 90% en peso de SiO₂ y 10% en peso de TiO₂. Otra serie de soportes fueron obtenidos por mezclado mecánico, para fines comparativos, en donde se pusieron en contacto óxidos puros de SiO₂, ZrO₂ y TiO₂ para lograr los mismos porcentajes en peso que aquellos obtenidos por el método sol-gel.

Preparación de los catalizadores: El componente metálico se deposita por impregnación del soporte (SiO₂, SiO₂-ZrO₂, SiO₂-TiO₂) a partir de una solución acuosa de ácido hexacloroplatínico (H₂PtCl₆*6H₂O) como precursor del Platino, en cantidad adecuada para generar una concentración de 1% en peso de metal. La cantidad de solución añadida a cada soporte se determina tomando como base las propiedades estructurales del mismo (diámetro y volumen de poro; determinados en el análisis textural por fisiorción de Nitrógeno). La solución se adiciona gota a gota para que este en contacto directo, los sólidos deben permanecer 48 horas a temperatura ambiente



(periodo de añejamiento), posteriormente son calcinados en atmósfera estática de aire, con el fin de eliminar desechos orgánicos y el agua que se encontraba ocluida en su interior. La temperatura de reducción para los sólidos es de 773 K. La reducción se lleva a cabo en un micro-reactor tubular de vidrio con una cama fija en su interior, en donde se deposita la cantidad del catalizador a reducir.

Adsorción de hidrógeno. La capacidad de adsorción de hidrógeno de la monocapa se evalúa a partir de la extrapolación a presión cero de la parte lineal de la isoterma de quimisorción de hidrógeno, asumiendo un coeficiente estequiométrico de 1, entre átomos de hidrógeno y átomos de Platino. El valor de dispersión permite conocer el número de sitios activos del catalizador y, por tanto, se calculan los valores de actividad catalítica en TOF (Turnover Frequency) o moléculas transformadas por sitio activo por segundo. El análisis del área superficial, diámetro y volumen de poro se lleva a cabo a 77 K.

El área superficial se determinó a partir de isotermas de adsorción, utilizando la ecuación de BET y del método BJH. Se considera como área de la molécula de nitrógeno el valor de 0.16 nm^2

Evaluación catalítica. La hidrogenación de citral se realiza en un reactor a 373 K y 2.026 MPa de H_2 , con 50 mg de catalizador en una solución de 0.1M de citral en n-hexano, durante un tiempo de reacción de 6 horas. Para eliminar la posible limitación de transferencia de masa interfacial, se empleó una agitación de 1000 rpm, estas precauciones tomadas antes de realizar las reacciones catalíticas nos sirvieron para incrementar la tasa de velocidad de transferencia de masa de la fase gas a la fase líquida, así como para incrementar la tasa de velocidad de transferencia de los reactantes desde el seno del fluido hasta la superficie catalítica. Finalmente con esta velocidad de agitación también se favoreció el contacto entre las especies involucradas en la reacción catalítica. Para asegurar que no existió limitación de la difusión interna de los catalizadores se utilizó el criterio de [Weisz²⁸].

2.1 SEGUIMIENTO DE LA REACCION EFECTUADA CON CATALIZADORES DE PLATINO SOPORTADOS EN OXIDOS METALICOS

Cuando la hidrogenación de citral se realiza sin catalizador no se obtiene conversión alguna, al igual que aquellas reacciones en donde solo se utilizaron los soportes catalíticos, por lo tanto para llevar a cabo la hidrogenación es necesario que se encuentre presente el metal (en este caso platino) soportado en algún óxido. En la figura 1.3, se presentan las rutas de hidrogenación, que en general son favorecidas con los catalizadores de platino soportados en los óxidos mixtos de $\text{SiO}_2\text{-ZrO}_2$, $\text{SiO}_2\text{-TiO}_2$, en donde se tienen reacciones en paralelo como reacciones consecutivas y en donde se asigna la nomenclatura (K_1 , K_2 , K_3 , etc.) para las constantes involucradas en la reacción de hidrogenación.

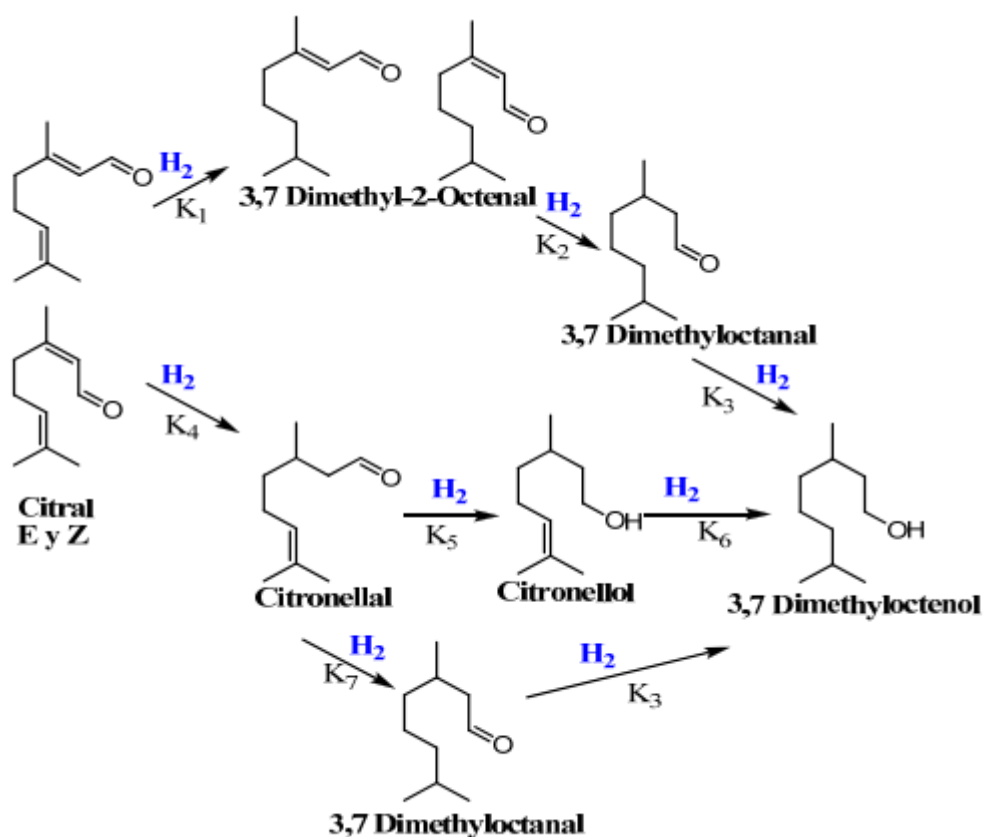


fig.1.3 Hidrogenación de citral para catalizadores de Pt soportado en $\text{SiO}_2\text{-ZrO}_2$ y $\text{SiO}_2\text{-TiO}_2$.

De la hidrogenación de citral se obtiene productos conocidos como 3,7 Dimetil-2-Octenal y Citronelal (k_1 y k_4 respectivamente). En el caso del primero es un compuesto intermediario que rara vez se utiliza en aplicaciones de perfumería o de los alimentos, por lo que esta ruta de hidrogenación no es de interés, en el segundo caso, la ruta involucra la formación de la molécula de

citronelal que es de un gran interés ya que junto con el citronelol son moléculas utilizadas ampliamente en las industrias de perfumería, alimentos o bien utilizadas en la industria agrícola como aditamentos para los repelentes de algunas plagas o bien como insecticidas (en el caso de la citronelal). La hidrogenación del doble enlace carbono-carbono $C=C$ es termodinámicamente favorecida, cuando se compara con la hidrogenación del carbonilo $C=O$. Por esta razón se observa que las moléculas del 3,7 dimetil-octanal y del 3,7-dimetil-octanol aparecen por ambas rutas de hidrogenación, inclusive en el caso del alcohol es el producto final de las rutas de hidrogenación. La molécula de mayor interés en las rutas reaccionales presentadas en el esquema anterior es el citronelol, que fue parcialmente hidrogenada, su aparición dependerá fuertemente de la obtención primeramente de citronelal y posteriormente de la adecuada hidrogenación de tal molécula.

Para el catalizador de platino soportado en SiO_2 comercial se estableció que no fue adecuado para la obtención de citronelol, ya que los resultados de hidrogenación mostraron que favoreció la aparición de 3,7 dimetil-octanal y 3,7 dimetil-octanol, no obteniéndose citronelal y citronelol. El catalizador de platino soportado en SiO_2 sintetizado por el método sol-gel, proporcionó principalmente citronelal, con la formación de citronelol, hasta una composición máxima de 40% después de 7 horas de reacción tal y como se muestra en la fig. 1.4 :

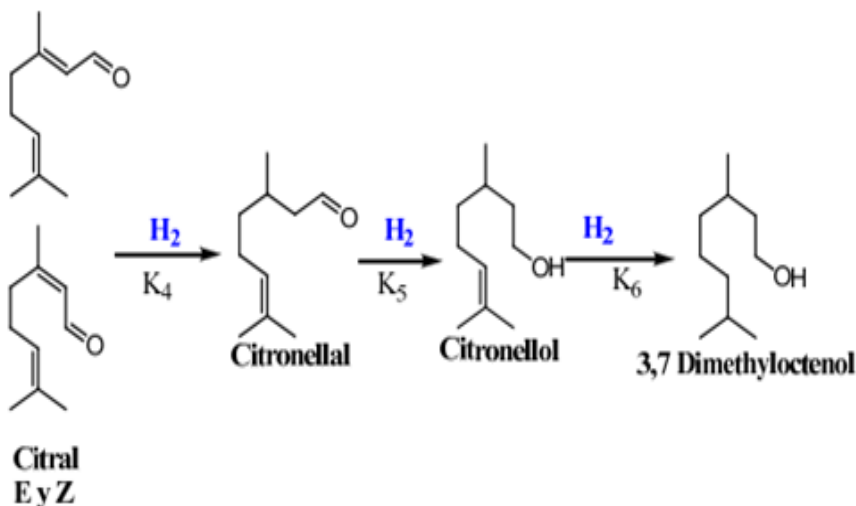


fig.1.4 Hidrogenación de citral de platino soportado en SiO_2-ZrO_2 (90-10).

Los catalizadores de platino soportado en $\text{SiO}_2\text{-TiO}_2$ fueron adecuados para la obtención de citronelal y citronelol obteniéndose hasta 40% de composición y conversiones totales de la molécula de citral a 10 horas de reacción. El mejor catalizador en la obtención de citronelol fue el de platino soportado en sílice-circonia (90-10), con este catalizador se logró una conversión de la molécula de citral del 100%, produciendo principalmente citronelal y citronelol a tiempos cortos (una hora de reacción). La aparición de 3,7-dimetil-octanol es consecuencia de la hidrogenación de citronelol conforme avanza el tiempo de reacción (Mostrada en la fig. 1.5). Con este catalizador se consume el citral en media hora y también se consume por completo el citronelal dando como resultado la obtención del máximo en concentración de citronelol, que posteriormente también es hidrogenado hasta el 3,7 dimetil-octanol tal y como se muestran en la figura 1.4.

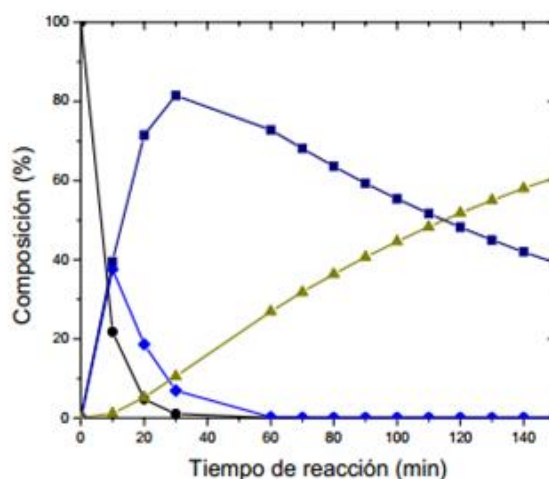


fig. 1.5

Hidrogenación de citral para el catalizador de $\text{Pt/SiO}_2\text{-ZrO}_2$ (90-10): (●) citral; (◆) citronelal; (■) citronelol; (▲) 3,7-dimetil-octanol. Condiciones de reacción: $T=373\text{K}$, $P=2.026\text{ MPa}$; 50 mg catalizador; 0.1M de citral en n-Hexano.

La producción inicial de citronelol y citronelal son muy importantes, donde citronelal en esta reacción sólo actúa como un intermediario. La obtención de citronelol en esta reacción es muy interesante ya que como se ha observado proviene de la hidrogenación directa de citronelal, a diferencia de lo que sucede en la naturaleza en donde el citronelol es obtenido del aceite de geraniol conocido como rodol, inclusive industrialmente se ha producido citronelol sintético vía la hidrogenación de geraniol/nerol es por eso que se le conocen al citronelol como el análogo deshidrogenado de geraniol/nerol.



En particular el catalizador de 1% de platino, soportado en un óxido mixto de $\text{SiO}_2\text{-ZrO}_2$ (90-10) incrementa la selectividad del alcohol insaturado (citronelol) en lugar de la obtención del aldehído parcialmente saturado (citronelal) o del 3,7 dimetil-octanol, estableciendo que es un catalizador adecuado para la inhibición de la hidrogenación del doble enlace $\text{C}=\text{C}$ y favoreciendo la hidrogenación del enlace $\text{C}=\text{O}$. La selectividad está asociada directamente con el incremento en la interacción del grupo carbonilo con la superficie del metal, la presencia de sitios ácidos Lewis podrían ser los responsables de la activación del grupo carbonilo. Los efectos electrónicos en la superficie catalítica también juegan un papel importante ya que tal incremento en la selectividad puede deberse al enriquecimiento del metal con electrones que provienen directamente del soporte utilizado.

En relación con los resultados de dispersión para este catalizador se puede establecer que la reacción de hidrogenación de citral y la de citronelal hacia la formación del alcohol insaturado citronelol ocurre preferentemente sobre partículas individuales muy pequeñas ($\Phi_p \leq 2$ nm) que en aquellas partículas de mayor tamaño. Así como en las regiones de la interface entre el platino y el óxido mixto de $\text{SiO}_2\text{-ZrO}_2$ lo cual puede ser atribuido a los efectos electrónicos presentes en este catalizador. [Delbecq y Suatet¹²], han reportado que cuando se incrementa el tamaño de la partícula del metal la selectividad hacia al alcohol insaturado también se incrementa, este incremento en selectividad es debido a la baja probabilidad de la activación del doble enlace $\text{C}=\text{C}$ en comparación con la probabilidad de la activación del grupo $\text{C}=\text{O}$.

La explicación para este cambio en selectividad está relacionada con el modo de adsorción de la molécula, el cual depende fuertemente de la estructura de la superficie del metal. [Delbecq y Suatet¹²], propusieron un cambio en la actividad cuando un aldehído α , β insaturado es adsorbido en el plano del platino. Esto se debe a que la adsorción de la molécula se realizó a través del doble enlace $\text{C}=\text{C}$, con lo cual este es el enlace que resultó hidrogenado, en cambio cuando la molécula fue adsorbida en el plano mediante el enlace $\text{C}=\text{O}$ se tuvo como consecuencia la obtención del alcohol insaturado. Las diferencias del tamaño de partícula y por lo tanto la actividad y selectividad pueden ser atribuidas a la influencia que tienen los soportes de SiO_2 , $\text{SiO}_2\text{-ZrO}_2$ y $\text{SiO}_2\text{-TiO}_2$ en el catalizador y que tal efecto puede ser uno de los más importantes.

Las partículas de tamaño grande (mayores a 2-3 nm) favorecen la selectividad hacia el grupo $\text{C}=\text{C}$. Mientras, en partículas más pequeñas se favorece la hidrogenación de $\text{C}=\text{O}$. En aquellos catalizadores donde el tamaño de partícula es menor a 2 nm (como es el caso del catalizador de platino al 1% soportado en el óxido mixto de $\text{SiO}_2\text{-ZrO}_2$, con un porcentaje en



peso de 90% de sílice y 10% de circonia) es posible que se genere la interacción metal-soporte, y por lo tanto grandes diferencias en la densidad electrónica pueden presentarse en el soporte oxigenado, sobre todo para aquellas reacciones que toman lugar predominantemente sobre el metal, sin embargo es muy común que la reacción no ocurra exclusivamente sobre el metal, con lo cual se tendría un catalizador bifuncional en donde sitios del soporte como sitios del metal toman parte en el proceso catalítico o bien que la reacción ocurra en la interface metal-soporte. Para evidenciar estos efectos se realizó a manera de comparación la hidrogenación de citral con un catalizador de platino soportado en un sólido de $\text{SiO}_2\text{-ZrO}_2$ con una composición de 90% en peso de sílice y 10% en peso de circonia, solo que obtenido de manera mecánica, es decir; este sólido no es un óxido mixto sino es la combinación mecánica de dos óxidos puros ajustada a la composición deseada, obteniendo una baja actividad catalítica (alrededor del 50% de conversión) y resultados en selectividad como los ya presentados para el caso del catalizador de platino soportado en la sílice pura. En general, para los catalizadores de platino soportados en óxidos obtenidos de manera mecánica se obtuvieron actividades y selectividades muy por debajo de las obtenidas para los óxidos mixtos sinterizados por el método sol-gel. Por lo que se puede concluir que es necesario obtener materiales en donde exista la real incorporación de la circonia en la red tridimensional de sílice.

2.2 OTRAS CONCLUSIONES DE HIDROGENACIONES CON CATALIZADORES METALICOS SOPORTADOS

Similarmente un catalizador a base de platino soportado en carbón activado, sílicas, o aluminatos dará una selectividad de geraniol y nerol de aproximadamente 95% con un 92-98% de conversión.

La reacción toma lugar en un reactor continuo a aproximadamente 2 a 8 mega pascales preferentemente. El catalizador es preparado de preferencia impregnando el soporte con una solución acuosa u orgánica de al menos un elemento del grupo VIII (grupo 8: Fe, Co, Ni, Ru, Rh, Pd, Os, Ir, Pt).

El soporte impregnado es filtrado, posiblemente enjuagado con agua destilada, es entonces secado y calcinado en aire usualmente a temperaturas de 110 grados centígrados a cerca de 500 grados centígrados, es entonces reducido en hidrogeno a una temperatura cercana a 200 grados. El producto obtenido es entonces impregnado con una solución acuosa u orgánica de germanio y/o estaño y/o plomo.

El soporte puede ser de varios tipos, pero es preferible que sea a base de sílica, el área superficial específica debe ser determinada por el método de BET y debe estar comprendida entre 50 a 500 m^2/g .



Es necesario tomar en cuenta en la influencia de los factores que tienen un rol en la quimioselectividad o regioselectividad (esto es su influencia sobre la estructura molecular, los efectos estéricos y electrónicos producidos por los sustituyentes) tanto como la estructura del catalizador, esto es la naturaleza de los átomos metálicos, geometría de los arreglos, estructura local y textura del soporte, efectos electrónicos y geométricos de un segundo metal o de un ligante superficial.

La vida útil del catalizador es otro factor que juega un papel clave en determinar la economía del proceso. La vida útil es el período durante el cual el catalizador produce el producto deseado, resistencia al envenenamiento y sinterizado tanto como el proceso de desactivación son atributos que deben tomarse en cuenta al preferir un soporte comercial porque un cambio inaceptable en las propiedades mecánicas mediante el aumento en la temperatura.

Un soporte ideal es aquel que es:

- 1.- Barato
- 2.- Disponible en grandes cantidades y a una composición uniforme
- 3.- Porosidad suficiente para permitir dispersión del catalizador al interior de la superficie.
- 4.- Libre de compuestos que puedan envenenar el catalizador.
- 5.- Estable ante las condiciones de regeneración.
- 6.- Resistente para resistir cualquier choque térmico o mecánico que esta expuesto a sufrir.
- 7.- Resistente al agotamiento.
- 8.- Inerte al ataque de componentes de los flujos de alimentación y a los productos y a los componentes presentes en los flujos de regeneración a los cuales será expuesto.
- 9.- No catalítico con respecto a reacciones colaterales

CAPITULO 3. SIMULACIÓN DEL PROCESO PARA LA OBTENCIÓN DE CITRONELOL

Dividiremos el proceso en 3 secciones para hacer más clara y precisa la explicación. A continuación en la fig. 3.1 se detalla la información correspondiente a la simulación del proceso. Cabe mencionar que la simulación se llevó a cabo en PRO II SIMSCI.

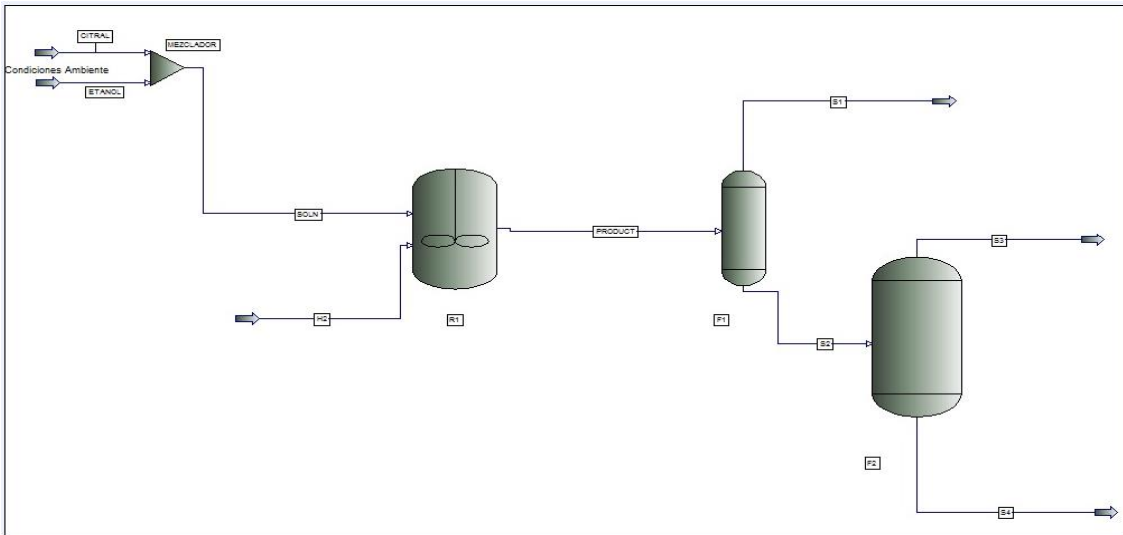


Figura 3.1 Diagrama de flujo de proceso para la obtención de Citronelol

1.- Para la simulación se utilizó un modelo de solución UNIFAC, debido a que la reacción se efectuará en Fase Líquida y es justamente ese método por el que se introdujeron los compuestos químicos al banco de datos de PRO II.

2.- Como se menciona anteriormente, PRO II no cuenta con los datos de los compuestos a utilizar, es por eso que fue necesario introducir dicha información de forma manual, como se muestra a continuación.

Únicamente introducimos los componentes que se utilizarán en la primera reacción de acuerdo con la figura 3.2.

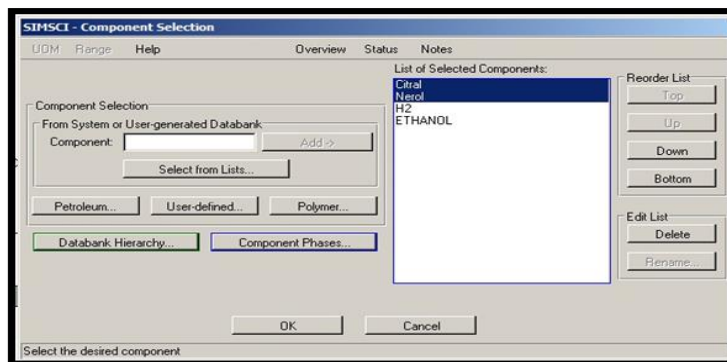


Figura 3.2. Selección de Componentes.

En este caso uno de esos datos es el Peso Molecular y el punto de ebullición según figura 3.3.

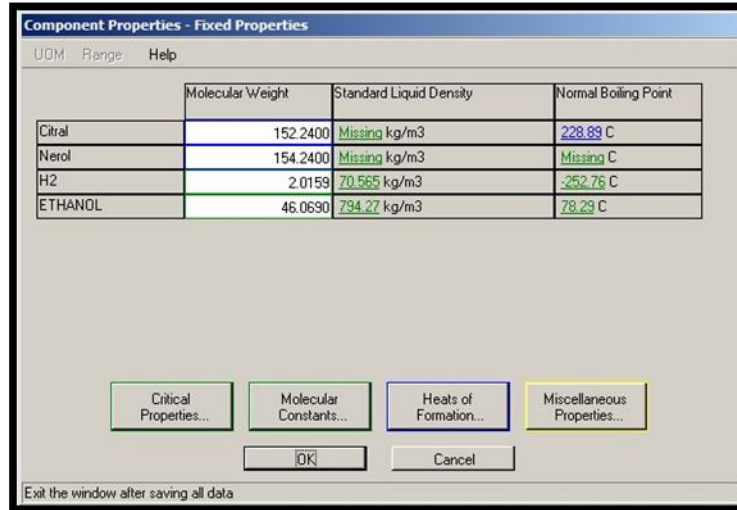


Figura 3.3. Se escriben los datos que se tengan disponibles.

Datos de calor de vaporización y volumen líquido molar figura 3.4.

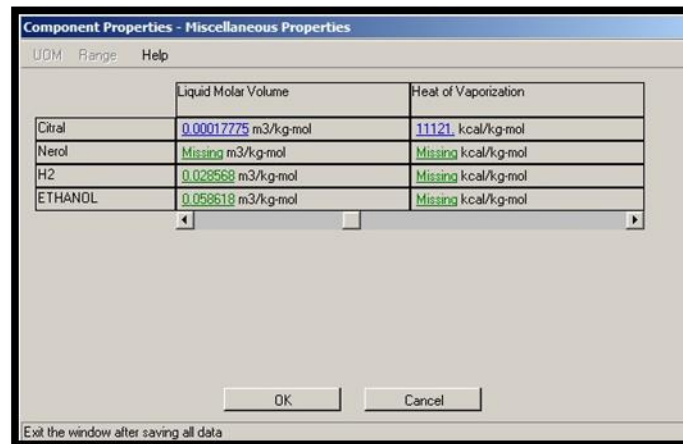


Figura 3.4. Calor de Vaporización y Volumen Líquido Molar

Dichas estructuras representan los grupos funcionales existentes en cada molécula. Fig. 3.5

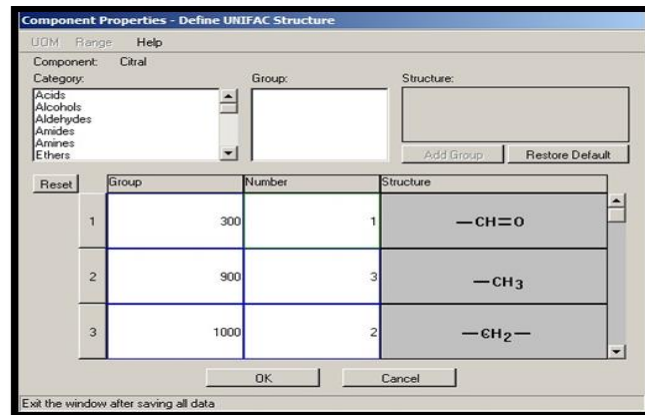


Figura 5. Se deben definir las estructuras UNIFAC presentes en los compuestos.

Nota: Los compuestos utilizados en este proceso se encuentran actualmente en proceso de investigación; tomando en cuenta lo anterior, las propiedades son altamente difíciles de hallar en literatura.

Respecto al proceso de producción, a continuación se detallarán las 3 secciones:

La primer parte del proceso se denomina “**Preparación de Materias primas**”, en donde se prepara y se acondiciona la solución alcohólica de Citral/Etanol.

Se bombean a razón de 1 kmol/hr de Citral por cada 10 Kmol/hr de Etanol.

Los dos componentes provienen de silos ubicados fuera de los límites de batería a condiciones ambiente. Se envían al mezclador mediante bombas centrífugas.

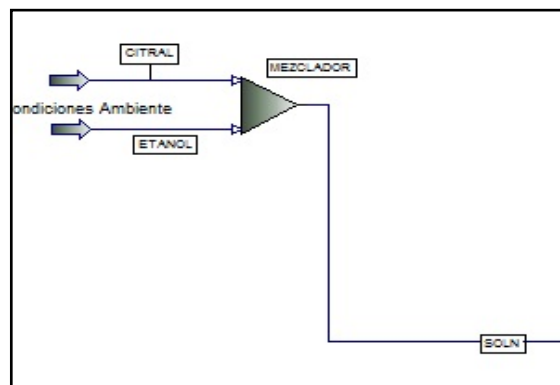


Fig. 3.6. Preparación de Materias Primas

La segunda parte se denomina “**Unidad de reacción**”, en donde se llevan a cabo las reacciones de hidrogenación catalítica.

Se cuenta con un reactor tipo CSTR de 1 m^3 de capacidad, al cual se alimentan por separado las corrientes de solución alcohólica e hidrógeno (proveniente de fuera de los límites de batería). Es importante mencionar que el reactor cuenta con una cama de catalizador de Platino.

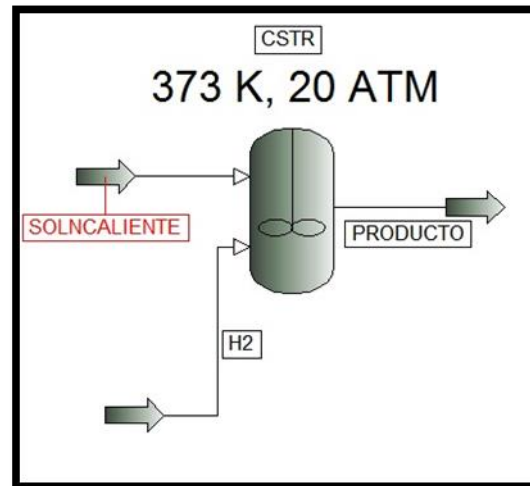


Fig 3.7. Unidad de Reacción

Tal como lo muestra la Figura 3.7, el Reactor CSRT trabaja isotérmicamente a 373 Kelvin y a una presión constante de 20 atm. A la salida del reactor el producto se bombea dos separadores flash en serie.

La tercera parte del proceso se denomina “Separación” en donde la mezcla de citrales proveniente del reactor se separa para obtener solamente en forma líquida al citronelol con impurezas generadas por el arrastre de otros compuestos intermedios de todo el mecanismo de reacción, como se muestra en la figura 3.8.

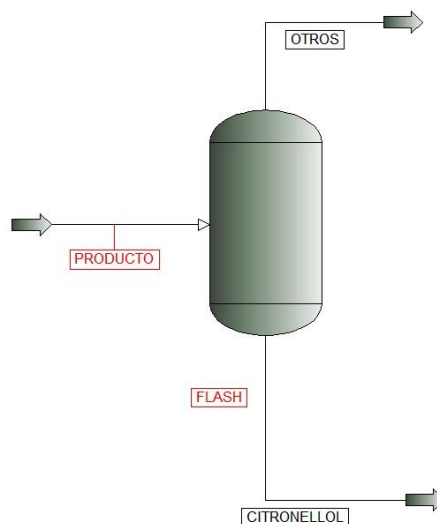


Fig. 3.8 separacion



Las condiciones de operación de éste equipo no quedaron definidas ya que no se contaban con datos necesarios para llevar a cabo de reacción y por consecuencia no teníamos condiciones a la salida del reactor.

A continuación se presenta en la figura 3.9 lo obtenido en la corrida en PROII para la Hidrogenación Selectiva de Citral sobre catalizadores de Platino soportados en Sílice - Circonia y Sílice-Titania para la obtención de Citronelol, donde se observa la viabilidad del proceso simulado lo que nos indica que las condiciones de operación planteadas, pueden ser llevadas a cabo en la realidad de forma satisfactoria, de acuerdo a este modelo de proceso.

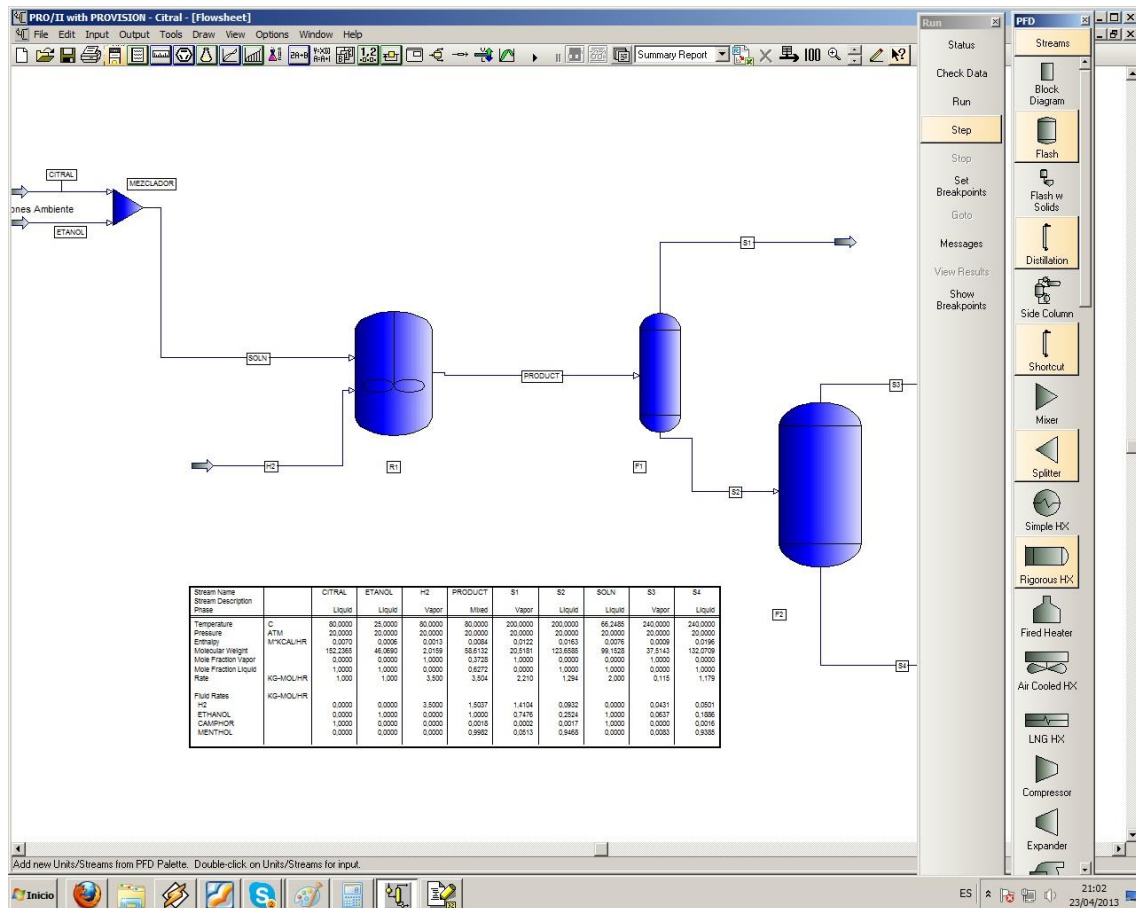


Fig. 3.9 diagrama de simulación del proceso



CAPITULO 4.- ANÁLISIS DE RESULTADOS

Después de realizar la simulación del proceso de reacción para la obtención de citronelol a partir de la hidrogenación de citral, se obtienen datos muy interesantes del comportamiento de estas sustancias. Del reporte que arroja el PRO II se puede hacer el siguiente análisis de resultados para la simulación del proceso, en base a la información de la tabla 4.1.

Tabla 4.1 resultados del comportamiento de la sustancia.

UNIT 3, 'R1'	
CONDICIONES DE OPERACIÓN	
TIPO DE REACTOR	ISOTERMICO
CALOR, M*KCAL/HR	-0.0636
CALOR TOTAL DE LA REACCION A 25.00 C, M*KCAL/HR	-0.0134
VOLUMEN, m ³	1
TIEMPO ESPACIAL, HR A LAS CONDICIONES DE SALIDA	1.2323
VELOCIDAD ESPACIAL, /HR A LAS CONDICIONES DE SALIDA	0.8115

Inicialmente al analizar el valor del calor que se requiere retirar para mantener el proceso como isotérmico, es decir, -13400 KCAL/HR indica que nuestra reacción es EXOTERMICA, lo cual también debe ser considerado al efectuar la selección de los materiales para la construcción del reactor.

Tabla 4.2 balance de materia.

DATOS DE REACCION				
COMPONENTE	ALIMENTACION	CAMBIO	PRODUCTO	FRACCION CONVERTIDA
1 H2	1.0000	-0.7992	0.2008	0.7992
2 ETANOL	10.0000	0.0000	10.0000	
3 CITRAL	1.0000	-0.3996	0.6004	0.3996
4 MENTOL	0.0000	0.3996	0.3996	
TOTAL	12.0000	-0.7992	11.2008	
		KG-MOL/HR / M ³		FRACCION CONVERTIDA
COMPONENTE BASE	REACCION	CONVERTIDO		
3 CITRAL	1	-0.3996		0.3996
	REACCION			-E/RT
	1			0.0000

En lo que se refiere a la conversión obtenida del reactivo limitante, que es el citral, se tiene un valor de 39.96% de acuerdo a la selectividad orientada de la reacción, y considerando que se tomó la constante cinética (0.00245 mol/seg-L) que se obtuvo de la bibliografía [William Smith & Javad Hashemi ²³] y también tomando en cuenta que este resultado es en base a moléculas isoméricas del reactivo principal (citral) y el producto deseado (citronelol), es decir el alcanfor (reactivo) y el mentol (producto), que a pesar de no ser las sustancias reales, nos dan una idea clara del comportamiento ideal de nuestro proceso ya que la estructura molecular es muy similar, además aprovecha las bondades del simulador para poder tener un marco de referencia del



comportamiento del reactor, y en caso de ser necesario, poder tener un diagnóstico claro de las posibles desviaciones que pudiera presentar el reactor real.

Tabla 4.3 datos termodinámicos de los componentes.

DATOS TERMODINAMICOS DE LOS COMPONENTES				
COMPONENTE	COMP. TYPE KG/M3	FASE	PESO MOLECULAR	DENSIDAD
1 H2	LIBRARY	VAP/LIQ	2.016	70.565
2 ETHANOL	LIBRARY	VAP/LIQ	46.069	794.266
3 CITRAL	LIBRARY	VAP/LIQ	152.236	991.07
4 MENTHOL	LIBRARY	VAP/LIQ	156.268	899.509
COMPONENTE	NBP °C	TEMPERATURA °C	PRESION CRITICA atm	VOLUMEN m3/Kg.mol
1 H2	-252.76	-239.96	12.958	0.0641
2 ETHANOL	78.29	240.77	60.676	0.167
3 CITRAL	207.42	435.85	29.509	0.505
4 MENTHOL	216.4	384.85	26.746	0.533
COMPONENTE	FACTOR	H FORMACION Kcal/Kg.mol	G FORMACION Kcal/Kg.mol	
1 H2	-0.21599	0	0	
2 ETHANOL	0.64525	-56116.84	-40090.28	
3 CITRAL	0.31896	-63891.28	-5971.15	
4 MENTHOL	0.77961	-97329.7	-23287.48	

Al emplear los datos termodinámicos de los componentes que se emplean en la reacción, arrojados por el simulador, con la energía de Gibbs de formación de los reactivos y productos, se puede aplicar la siguiente ecuación:

$$\Delta G_{reaccion} = \sum_{productos} \Delta G - \sum_{reactivos} \Delta G$$

Con la cual se obtiene el siguiente resultado de la energía de Gibbs de la reacción que es de -17316.33 Kcal/Kg.mol, lo cual indica que la reacción es espontánea. De acuerdo a la literatura, cualquier energía de Gibbs de una reacción dada, al tener un valor negativo indica que la reacción es espontánea, y en caso de ser positiva, indica una reacción no espontánea.

Con la información de la tabla anterior de las entalpías de formación de productos y reactivos, también se puede aplicar la siguiente ecuación:

$$\Delta H_{reaccion} = \sum_{productos} \Delta H_f - \sum_{reactivos} \Delta H_f$$

con la cual se obtiene el valor de el ΔH de reacción para la obtención del citronelol que es de -33438.42 Kcal/Kg.mol, lo cual confirma algo que habíamos declarado en función del calor de reacción y esto es que nuestra reacción es una reacción exotérmica. De acuerdo a la bibliografía, cuando se obtiene una ΔH de reacción negativa indica que la reacción es exotérmica y cuando el valor de la ΔH de reacción es positivo indica que la reacción es endotérmica.



CONCLUSIONES

Ahora que ya se ha desarrollado la simulación y el diseño del reactor se puede concluir que este proceso puede ser llevado a cabo a nivel industrial, a partir de los estudios generados en laboratorio, debido a que la simulación arroja valores aceptables de conversión de citral a citronelol, en condiciones de temperatura y presión que industrialmente pueden ser controlables. Además de no tener que realizar un proceso muy complejo para la separación de los productos de la reacción y poder obtener el citronelol con una alta pureza.

El llevar a cabo la reacción de forma catalítica, en platino soportado por sílice/circonia y sílice/titania, y utilizar el etanol como solvente, contribuye a obtener una mayor conversión de citral orientado a la obtención de citronelol, en comparación con las conversiones de la hidrogenación de citral en otros medios disolventes como ciclohexano, n-hexano o acetato de etilo (estudio efectuado por Vannice, 2006) y utilizando otro tipo de catalizadores, como alúminas, o incluso llevar a cabo la reacción sin ayuda de catalizadores, lo cual reporta velocidades de reacción, y por consecuencia, concentraciones de salida menores a la obtenida en el presente estudio.

Los principales objetivos para la realización de este proyecto es dar a conocer las bondades de los software de simulación, en este caso del PRO II, directamente para el diseño y/o optimización de procesos, así como para desarrollar y emplear los conocimientos adquiridos en el desarrollo de la investigación, por lo que se puede concluir que este objetivo se ha cubierto ampliamente, ya que a partir de un estudio de laboratorio se pudo simular un proceso industrial y determinar su viabilidad, además de poder interpretar y correlacionar los resultados de dicha simulación para la optimización de dicho proceso. Además de esto, se adquirieron otros conocimientos teóricos del comportamiento de un proceso químico, que tiene como eje central un reactor químico, con los cuales se pueden interpretar los resultados para comprender la cinética de la reacción, el transporte de los fluidos, y poder corroborar los balances de materia y energía, que se involucran en la obtención del citronelol, así como comprender, predecir y explicar las desviaciones de un reactor real con respecto a un reactor ideal simulado y corregirlas en base a las bases teóricas antes mencionadas.

A lo largo del desarrollo de este proyecto se presentaron algunos inconvenientes, ya que simular el proceso experimental de la "Hidrogenación selectiva de citral sobre catalizadores de platino soportados en sílice-circonia y sílice-titania para la obtención de citronelol", el no contar con información en la base de datos de dicho software, para las propiedades físicas y termodinámicas de los reactivos y productos, y al mismo tiempo no tener datos de dichas propiedades en la bibliografía, oriento el trabajo a simular el proceso, como ya se menciona anteriormente, en base a moléculas isoméricas para poder interpretar el comportamiento del citral y citronelol en el reactor y en los procesos posteriores, con lo cual se pudo solventar este inconveniente.



BIBLIOGRAFIA

Referencia electrónica:

<http://www.chemspider.com/Chemical-Structure.553578.html>

Bibliografía:

1. Ramírez López, Román. Cinética y reactores homogéneos. IPN, 2013
2. Singh, u. k.; Vannice, M.A. (2001) liquid phase citral hydrogenation over SiO₂-supported group viii metals. J. catal. 199: 79
3. Aldrich, Lista de precios y productos 2003. Bird Byron R. "Transport Phenomena". Editorial Reverté, S.A. 2ª Edición, 1998
4. Douglas J.M. 1988. Conceptual Design of Chemical Processes. McGraw-Hill. New York
5. Geankoplis. C. J. "Proceso de transporte y Operaciones Unitarias". 3ª Edición, Mexico 1995. Editorial CECSA.
6. Henley. E. J. "Operaciones de Separación por Etapas de Equilibrio en Ingeniería Química". 1ª Edición, Barcelona 1988. Editorial Reverte.
7. Boudart, M. (1974); the kinetics and mechanism of spillover. J. Catal.: 32, 304-314.
8. Boudart M. (1985); Heterogeneous catalysis by metals. J. of Molec. Catal.: 30, 27-38.
9. Burch, R.; Flambard, A.R. (1982); Strong Metal-Suport interactions in Nickel/Titania Catalysts: The importance of interfacial phenomena. J. Catal.: 78, 389-405.
10. Coloma, F.; Sepúlveda, A.; Romero, J.N.; Rodríguez, F. (1998); Gas phase hydrogenation of crotonaldehyde over platinum supported on oxidized carbon black. Carbon.: 36, 1011-1019.
11. Dalmaschio, C.J.; Mastelaro, V.R.; Nascente, P.; Bettini, J. (2010); Oxide surface modification: Synthesis and characterization of zirconia-coated alumina. J. of Colloid and Interface Science: 343, 256-262.
12. Delbecq, F.; Suatet, P. (1995); Competitive C=C and C=O adsorption of α , β -unsaturated aldehydes on Pt and Pd surfaces in relation with the selectivity of hydrogenation reactions: a theoretical approach. J. Catal.: 152, 217-236.



13. Bird Byron R. "Transport Phenomena". Editorial Reverté, S.A. 2a. Edición, 1998.
14. - Douglas J.M. 1988. Conceptual Design of Chemical Processes. McGraw-Hill. New York.
15. Henley. E. J. "Operaciones de Separación por Etapas de Equilibrio en Ingeniería Química". 1ª Edición, Barcelona 1988. Editorial Reverte.
16. Hill, Charles "An Introduction to Chemical Engineering Kinetics & Reactor Design" McGraw Hill, 1998
17. Yilmaz,S.; Aykac, H. (2008); Hydrogenation of citral over Ni and Ni-Sn catalysts chem.: 32,623-636
18. International Chemical Safety Cards. Ultima revisión: 9 de noviembre de 1999
19. Kay, Abel Et Al "La cuantificación de las incertidumbres en la práctica"
http://www.ipcc-ggip.iges.or.jp/public/gp/spanish/6_Uncertainty_ES.pdf
20. Levenspiel. O. "Ingeniería de las reacciones químicas", 2ª Edición, Barcelona 1999. Editorial Reverte.
21. The Merck Index, Eleventh edition 1999
22. Smith J.M, Van Ness H. C, Abbott M. M. "Introducción a la Termodinámica en Ingeniería Química". Editorial McGraw Hill 6a Edición, 2003.
23. William f. Smith & javad hashemi ,4ta edición "fundamentos de la ciencia e ingeniería de materiales."
24. Apesteguia, C.R; Trasarti, A.F; Marchi, A.J (2007); Desing of Catalyst systems for the one-pot synthesis of menthols from citral.J of 247,155-165.
25. Koningsberger, D.C.; Ramaker, D.E.;J. ; Ven,V. (2001); *nature of the metal-support interaction in supported Pt catalysts* catal.: 203,7-17
26. Tsai,M.C.; Muetterties, E.L(1982) *platinum metal surface chesmistry of benzene and toluene* soc. 104,2534-2539.
27. Vannice, M.A.; Singh,U.K(2000) liquid-phase hydrogenation of citral over Pt/SiO₂ catalysts catal.: 191,165-180
28. Weisz,P.B (1957). Diffusivity of porous particles chem.



ANEXOS:

I. HOJAS DE SEGURIDAD

1.1 CITRAL



FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD (según el REGLAMENTO (CE) n° 1907/2006)

PRODUCTO: CITRAL NATURAL

Fecha revisión: 30-06-2011

Fecha de emisión: 28-07-2011

Versión: 7

SECCIÓN 1: Identificación de la sustancia o la mezcla y de la sociedad o la empresa

1.1 Identificador del producto : CITRAL NATURAL

Identificación química: Citral

Num. CAS: 5392-40-5

Número CE: 226-394-6

N° Índice / N° catálogo: 605-019-00-3

Número de registro REACH:

1.2 Uso de la sustancia o preparado: Producto destinado exclusivamente para uso industrial, como ingrediente para la fabricación de mezclas.

Usos desaconsejados: No destinado a consumidor final.

1.3 Identificación de la Sociedad o Empresa.

LLUCH Essence, s.l.

C/ Lo Gaiter, 160

08820 - Prat de Llobregat

Barcelona (España)

Teléfono. +34 93 379 38 49

Fax. +34 93 370 65 04

Correo electrónico: regulatory@llucho.com

1.4 Teléfono de urgencias: +34 (0) 93 379 38 49.

Horario: Lunes a Jueves: 8.00h a 17.15h, Viernes: 8.00 a 15.00h (invierno).

Lunes a viernes: 8.00h a 15.00h (verano)

SECCIÓN 2: Identificación de los peligros

2.1 Clasificación de la sustancia o de la mezcla

Clasificación de acuerdo con el Reglamento (CE) n° 1272/2008

Irritación o corrosión cutáneas, categoría 2; Sensibilización cutánea, categoría 1.

Clasificación de acuerdo con la Directiva 67/548/CEE

Símbolo(s) de peligro – Indicación(es) de peligro:

Xi: Irritante

Frases de Riesgo:

R38: Irrita la piel.

R43: Posibilidad de sensibilización en contacto con la piel.

2.2 Elementos de la etiqueta

Número CE: 226-394-6

Citral



FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD (según el REGLAMENTO (CE) nº 1907/2006)

PRODUCTO: CITRAL NATURAL

Fecha revisión: 30-06-2011
Fecha de emisión: 28-07-2011
Versión: 7



Palabra de advertencia: Atención

Indicaciones de peligro:

H315: Provoca irritación cutánea.
H317: Puede provocar una reacción alérgica en la piel.

Consejos de prudencia:

P261: Evitar respirar el polvo/el humo/el gas/la niebla/los vapores/el aerosol.
P280: Llevar guantes de protección.
P302+P352: EN CASO DE CONTACTO CON LA PIEL: Lavar con agua y jabón abundantes.
P333+P313: En caso de irritación o erupción cutánea: Consultar a un médico.
P362: Quitarse las prendas contaminadas y lavarlas antes de volver a usarlas.
P363: Lavar las prendas contaminadas antes de volver a usarlas.

2.3 Otros peligros

El producto no contiene sustancias incluidas en la lista de Sustancias de Alta Preocupación (> 0,1 % p/p).

SECCIÓN 3: Composición/información sobre los componentes

Intervalo de concentración del componente (% peso/peso)	Número CE / Número de registro	Num. CAS	Denominación química	Símbolo(s) de Peligro. Frases de Riesgo/ Códigos de clase y categoría de peligro; Códigos de indicaciones de peligro
25 - 100%	226-394-6	5392-40-5	Citral	Xi; R38-43 Skin Irrit. 2; H315- Skin Sens. 1; H317

Los textos completos de las frases R y de los códigos de las indicaciones de peligro aquí incluidas figuran en el epígrafe 16.

SECCIÓN 4: Primeros auxilios

4.1 Descripción de los primeros auxilios

Ingestión:

Enjuagar la boca con agua. Acuda inmediatamente al médico y muéstrele la etiqueta o el envase. Mantener en reposo. No provocar el vómito.

Contacto con los ojos:

Fecha revisión: 30-06-2011

Versión: 7

Página: 2/7



FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD (según el REGLAMENTO (CE) n° 1907/2006)

PRODUCTO: CITRAL NATURAL

Fecha revisión: 30-06-2011

Fecha de emisión: 28-07-2011

Versión: 7

Retirar las lentes de contacto y lavar abundantemente con agua limpia durante por lo menos quince minutos. Solicitar asistencia médica si se producen efectos adversos.

Inhalación:

Traslade a la persona afectada al aire libre, conserve la temperatura corporal y manténgala en reposo.

Contacto con la piel:

Retirar la ropa contaminada. Lavar la piel con abundantes cantidades de agua y jabón neutro. Consulte con un médico si los síntomas persisten.

4.2 Principales síntomas y efectos, agudos y retardados:

Síntomas por inhalación: Ahogo, sopor y trastornos respiratorios.

Síntomas por contacto con los ojos: irritación, enrojecimiento.

Síntomas por contacto por la piel: Irritación, escozor, enrojecimiento.

Síntomas por ingestión: Náuseas y dolor abdominal.

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

No aplicable.

SECCIÓN 5: Medidas de lucha contra incendios

5.1 Medios de extinción:

Recomendado: Utilizar espuma o polvo seco, teniendo en cuenta el resto de sustancias y productos almacenados. No utilizar: chorro de agua directo.

5.2 Peligros específicos derivados de la sustancia o la mezcla:

No aplicable.

5.3 Recomendaciones para el personal de lucha contra incendios:

En caso de incendio en los alrededores, seguir las siguientes indicaciones: 1-Las altas temperaturas pueden dar lugar a presiones elevadas en el interior de los envases cerrados. 2-Evitar la inhalación de los humos o vapores que se generen. Utilizar un equipo respiratorio adecuado. 3-No permitir que los derrames de la extinción de incendios se viertan a desagües o cursos de agua.

SECCIÓN 6: Medidas en caso de vertido accidental

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

Manipular el producto con guantes adecuados. Evitar el contacto con la piel y la inhalación de vapores. Mantener una ventilación adecuada en las áreas de trabajo después de derrame accidental.

6.2 Precauciones relativas al medio ambiente:

Evite que los derrames alcancen las alcantarillas municipales y conducciones de agua corriente.

6.3 Métodos y material de contención y de limpieza:

Contener y absorber el vertido con material inerte, inorgánico y no combustible, tal como arena o tierra y trasladarlo a un contenedor para su eliminación según las reglamentaciones locales. Limpiar la superficie cuidadosamente para eliminar la contaminación residual.

6.4 Referencia a otras secciones:

Ver epígrafe 13.

SECCIÓN 7: Manipulación y almacenamiento

7.1 Precauciones para una manipulación segura:



FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD (según el REGLAMENTO (CE) n° 1907/2006)

PRODUCTO: CITRAL NATURAL

Fecha revisión: 30-06-2011

Fecha de emisión: 28-07-2011

Versión: 7

No manipule el material cerca de alimentos o agua de bebida. No fumar. Evitar el contacto con los ojos, piel, y ropa. Vestir prendas y llevar lentes protectoras. Observar las normas de higiene y seguridad en el trabajo.

7.2 Condiciones de almacenamiento seguro, incluidas posibles incompatibilidades:

Mantener el producto en el envase original bien cerrado, en un lugar bien ventilado, seco, alejado de fuentes de ignición y protegido de la luz. Almacenar según los reglamentos locales / nacionales, observando las precauciones indicadas en el etiquetado. Mantener lejos de sustancias incompatibles (ver sección de incompatibilidad).

7.3 Usos específicos finales:

No disponible

SECCIÓN 8: Controles de exposición/protección individual

8.1 Parámetros de control

No se precisa la declaración de sustancias en este apartado.

8.2 Controles de la exposición

Equipos de protección individual: Utilizar los equipos de protección individual de acuerdo con la Directiva 89/686/CEE.

Protección de los ojos: En general, se recomienda utilizar gafas de seguridad con protectores laterales para protegerse contra la salpicadura de líquidos.

Protección Respiratoria: En caso de ventilación insuficiente, utilizar un equipo respiratorio adecuado.

Protección cutánea: Evítase el contacto con la piel. Se recomienda el uso de guantes resistentes a productos químicos.
Lave y quítese los guantes inmediatamente después de usarlos. Lávese las manos con agua y jabón.

Ventilación: Proporcionar una ventilación adecuada, adaptándola a las condiciones de uso.
Utilizar un extractor local si es necesario.

SECCIÓN 9: Propiedades físicas y químicas

9.1 Información sobre propiedades físicas y químicas básicas

Aspecto: LIQUIDO

Color: INCOLORO-AMARILLO MUY PALIDO

Olor: CARACTERISTICO CON REMINISCENCIA A LIMON

Punto de Inflamación: 98 °C

Información adicional: No aplicable.

SECCIÓN 10: Estabilidad y reactividad

10.1 Reactividad: No disponible.

10.2 Estabilidad química: Estable en las condiciones normales de uso.

10.3 Posibilidad de reacciones peligrosas:

Polimerización peligrosa: No presenta reacciones peligrosas conocidas en condiciones normales de proceso.

10.4 Condiciones que deben evitarse: Calor excesivo, llamas u otras fuentes de ignición.



FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD (según el REGLAMENTO (CE) n° 1907/2006)

PRODUCTO: CITRAL NATURAL

Fecha revisión: 30-06-2011
Fecha de emisión: 28-07-2011
Versión: 7

10.6 Productos de descomposición peligrosos: Durante la combustión pueden formarse monóxido de carbono y compuestos orgánicos no identificados.

SECCIÓN 11: Información toxicológica

11.1 Información sobre los efectos toxicológicos

Efectos toxicológicos: Ver también los epígrafes 2 y 3

SECCIÓN 12: Información ecológica

- 12.1 Toxicidad aguda acuática:** No hay datos disponibles
12.2 Persistencia y degradabilidad: No disponible.
12.3 Factor de bioconcentración: Factor de bioconcentración
12.4 Movilidad en el suelo: No disponible.
12.5 Resultados de la valoración PBT y mPmB: No determinado
12.6 Otros efectos adversos: Evitar la contaminación del suelo, aguas subterráneas y superficiales.

SECCIÓN 13: Consideraciones relativas a la eliminación

13.1 Métodos para el tratamiento de residuos

Envases/contenedores: No reutilizar los envases vacíos. Vaciar los residuos en instalaciones adecuadas
Condiciones de eliminación: Eliminar conforme con las disposiciones locales y nacionales vigentes.

SECCIÓN 14: Información relativa al transporte

Transporte internacional de mercancías peligrosas por carretera (ADR)	
Número ONU:	N/A
Denominación de envío:	No sometido a ADR.
Grupo Embalaje:	-
Clase:	-
Código de restricción en túneles:	-
Etiqueta:	-
Transporte aéreo (ICAO/IATA)	
Número ONU:	N/A
Denominación de envío:	No restringido.
Clase:	-
Grupo Embalaje:	-
Transporte Marítimo (IMDG)	
Número ONU:	N/A
Denominación de envío:	No restringido.
Clase:	-
Grupo Embalaje:	-

Fecha revisión: 30-06-2011

Versión: 7

Página: 5/7



FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD (según el REGLAMENTO (CE) n° 1907/2006)

PRODUCTO: CITRAL NATURAL

Fecha revisión: 30-06-2011

Fecha de emisión: 28-07-2011

Versión: 7

FEm:	
Contaminante del mar:	No

SECCIÓN 15: Información reglamentaria

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

La(s) sustancia(s) está(n) listada(s) en los inventarios EINECS, ELINCS, NPL, o bien está(n) exenta(s).

15.2 Evaluación de la seguridad química:

No disponible.

SECCIÓN 16: Otra información

Uso restringido para fines industriales.

Texto de las frases R mencionadas en el epígrafe 3:

R38: Irrita la piel.

R43: Posibilidad de sensibilización en contacto con la piel.

Texto de los códigos de las indicaciones de peligro mencionadas en el epígrafe 3:

H315: Provoca irritación cutánea.

H317: Puede provocar una reacción alérgica en la piel.

Uso restringido para fines industriales.

Principales referencias bibliográficas y las fuentes de datos:

1. REAL DECRETO 363/1995, de 10 de Marzo de 1995 por el que se regula la Notificación de Sustancias Nuevas y Clasificación, Envasado y Etiquetado de Sustancias Peligrosas.
2. REAL DECRETO 255/2003, de 28 de febrero, por el que se aprueba el Reglamento sobre clasificación, envasado y etiquetado de preparados peligrosos.
3. REGLAMENTO (CE) no 1907/2006 del Parlamento Europeo y del Consejo, de 18 de diciembre de 2006, relativo al registro, la evaluación, la autorización y la restricción de las sustancias y preparados químicos (REACH), por el que se crea la Agencia Europea de Sustancias y Preparados Químicos, se modifica la Directiva 1999/45/CE y se derogan el Reglamento (CEE) no 793/93 del Consejo y el Reglamento (CE) no 1488/94 de la Comisión así como la Directiva 76/769/CEE del Consejo y las Directivas 91/155/CEE, 93/67/CEE, 93/105/CE y 2000/21/CE de la Comisión.
4. REGLAMENTO (CE) No 1272/2008 DEL PARLAMENTO EUROPEO Y DEL CONSEJO de 16 de diciembre de 2008 sobre clasificación, etiquetado y envasado de sustancias y mezclas, y por el que se modifican y derogan las Directivas 67/548/CEE y 1999/45/CE y se modifica el Reglamento (CE) no 1907/2006.
5. Límites de Exposición Profesional para Agentes Químicos adoptados por el Instituto Nacional de Seguridad e Higiene en el Trabajo (INSHT) para el año 2011.

Motivo de la Revisión: N/A



1.2 Citronelol



FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD (según el REGLAMENTO (CE) n° 1907/2006)

PRODUCTO: CITRONELOL 96%

Fecha revisión: 30-06-2011

Fecha de emisión: 28-07-2011

Versión: 4

SECCIÓN 1: Identificación de la sustancia o la mezcla y de la sociedad o la empresa

1.1 Identificador del producto : CITRONELOL 96%

Identificación química: Citronelol

Num. CAS: 106-22-9

Número CE: 203-375-0

Nº Índice / Nº catálogo:

Número de registro REACH:

1.2 Uso de la sustancia o preparado: Producto destinado exclusivamente para uso industrial, como ingrediente para la fabricación de mezclas.

Usos desaconsejados: No destinado a consumidor final.

1.3 Identificación de la Sociedad o Empresa.

LLUCH Essence, s.l.

C\ Lo Gaiter, 160

08820 - Prat de Llobregat

Barcelona (España)

Teléfono: +34 93 379 38 49

Fax: +34 93 370 65 04

Correo electrónico: regulatory@lluche.com

1.4 Teléfono de urgencias: +34 (0) 93 379 38 49.

Horario: Lunes a Jueves: 8.00h a 17.15h, Viernes: 8.00 a 15.00h (invierno).

Lunes a viernes: 8.00h a 15.00h (verano)

SECCIÓN 2: Identificación de los peligros

2.1 Clasificación de la sustancia o de la mezcla

Clasificación de acuerdo con el Reglamento (CE) n° 1272/2008

Irritación o corrosión cutáneas, categoría 2; Sensibilización cutánea, categoría 1; Peligroso para el medio ambiente acuático — Peligro crónico, categoría 2.

Clasificación de acuerdo con la Directiva 67/548/CEE

Símbolo(s) de peligro – Indicación(es) de peligro:

Xi: Irritante

N: Peligroso para el medio ambiente

Frases de Riesgo:

R38: Irrita la piel.

R43: Posibilidad de sensibilización en contacto con la piel.

R51/53: Tóxico para los organismos acuáticos, puede provocar a largo plazo efectos negativos en el medio ambiente acuático.

2.2 Elementos de la etiqueta

Número CE: 203-375-0

Citronelol

Fecha revisión: 30-06-2011

Versión: 4

Página: 1/7



FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD (según el REGLAMENTO (CE) n° 1907/2006)

PRODUCTO: CITRONELOL 96%

Fecha revisión: 30-06-2011

Fecha de emisión: 28-07-2011

Versión: 4



Palabra de advertencia: Atención

Indicaciones de peligro:

H315: Provoca irritación cutánea.

H317: Puede provocar una reacción alérgica en la piel.

H411: Tóxico para los organismos acuáticos, con efectos nocivos duraderos.

Consejos de prudencia:

P273: Evitar su liberación al medio ambiente.

P280: Llevar guantes de protección.

P302+P352: EN CASO DE CONTACTO CON LA PIEL: Lavar con agua y jabón abundantes.

P333+P313: En caso de irritación o erupción cutánea: Consultar a un médico.

P362: Quitarse las prendas contaminadas y lavarlas antes de volver a usarlas.

P391: Recoger el vertido.

2.3 Otros peligros

El producto no contiene sustancias incluidas en la lista de Sustancias de Alta Preocupación (> 0,1 % p/p).

SECCIÓN 3: Composición/información sobre los componentes

Intervalo de concentración del componente (% peso/peso)	Número CE / Número de registro	Num. CAS	Denominación química	Símbolo(s) de Peligro. Frases de Riesgo/ Códigos de clase y categoría de peligro; Códigos de indicaciones de peligro
25 - 100%	203-375-0	106-22-9	Citronelol	Xi,N; R38-43-51/53 Skin Irrit. 2;H315-Skin Sens. 1;H317-Aquatic Chronic 2;H411

Los textos completos de las frases R y de los códigos de las indicaciones de peligro aquí incluidas figuran en el epígrafe 16.

SECCIÓN 4: Primeros auxilios

4.1 Descripción de los primeros auxilios



SECCIÓN 6: Medidas en caso de vertido accidental

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

Manipular el producto con guantes adecuados. Evitar el contacto con la piel y la inhalación de vapores. Mantener una ventilación adecuada en las áreas de trabajo después de derrame accidental.

6.2 Precauciones relativas al medio ambiente:

Evite que los derrames alcancen las alcantarillas municipales y conducciones de agua corriente.

6.3 Métodos y material de contención y de limpieza:

Contener y absorber el vertido con material inerte, inorgánico y no combustible, tal como arena o tierra y trasladarlo a un contenedor para su eliminación según las reglamentaciones locales. Limpiar la superficie cuidadosamente para eliminar la contaminación residual.

6.4 Referencia a otras secciones:

Ver epígrafe 13.

Ingestión:

Enjuagar la boca con agua. Acuda inmediatamente al médico y muéstrele la etiqueta o el envase. Mantener en reposo. No provocar el vómito.

Contacto con los ojos:

Retirar las lentes de contacto y lavar abundantemente con agua limpia durante por lo menos quince minutos. Solicitar asistencia médica si se producen efectos adversos.

Inhalación:

Traslade a la persona afectada al aire libre, conserve la temperatura corporal y manténgala en reposo.

Contacto con la piel:

Retirar la ropa contaminada. Lavar la piel con abundantes cantidades de agua y jabón neutro. Consulte con un médico si los síntomas persisten.

4.2 Principales síntomas y efectos, agudos y retardados:

Síntomas por inhalación: Ahogo, sopor y trastornos respiratorios.

Síntomas por contacto con los ojos: irritación, enrojecimiento.

Síntomas por contacto por la piel: Irritación, escozor, enrojecimiento.

Síntomas por ingestión: Náuseas y dolor abdominal.

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

No aplicable.

SECCIÓN 5: Medidas de lucha contra incendios

5.1 Medios de extinción:

Recomendado: Utilizar espuma o polvo seco, teniendo en cuenta el resto de sustancias y productos almacenados. No utilizar: chorro de agua directo.

5.2 Peligros específicos derivados de la sustancia o la mezcla:

No aplicable.

5.3 Recomendaciones para el personal de lucha contra incendios:

En caso de incendio en los alrededores, seguir las siguientes indicaciones: 1-Las altas temperaturas pueden dar lugar a presiones elevadas en el interior de los envases cerrados. 2-Evitar la inhalación de los humos o vapores que se generen. Utilizar un equipo respiratorio adecuado. 3-No permitir que los derrames de la extinción de incendios se viertan a desagües o cursos de agua.



SECCIÓN 7: Manipulación y almacenamiento

7.1 Precauciones para una manipulación segura:

No manipule el material cerca de alimentos o agua de bebida. No fumar. Evitar el contacto con los ojos, piel, y ropa. Vestir prendas y llevar lentes protectoras. Observar las normas de higiene y seguridad en el trabajo.

7.2 Condiciones de almacenamiento seguro, incluidas posibles incompatibilidades:

Mantener el producto en el envase original bien cerrado, en un lugar bien ventilado, seco, alejado de fuentes de ignición y protegido de la luz. Almacenar según los reglamentos locales / nacionales, observando las precauciones indicadas en el etiquetado. Mantener lejos de sustancias incompatibles (ver sección de incompatibilidad).

7.3 Usos específicos finales:

No disponible

SECCIÓN 8: Controles de exposición/protección individual

8.1 Parámetros de control

No se precisa la declaración de sustancias en este apartado.

8.2 Controles de la exposición

Equipos de protección individual: Utilizar los equipos de protección individual de acuerdo con la Directiva 89/686/CEE.

Protección de los ojos: En general, se recomienda utilizar gafas de seguridad con protectores laterales para protegerse contra la salpicadura de líquidos.

Protección Respiratoria: En caso de ventilación insuficiente, utilizar un equipo respiratorio adecuado.

Protección cutánea: Evítase el contacto con la piel. Se recomienda el uso de guantes resistentes a productos químicos. Lave y quítase los guantes inmediatamente después de usarlos. Lávese las manos con agua y jabón.

Ventilación: Proporcionar una ventilación adecuada, adaptándola a las condiciones de uso. Utilizar un extractor local si es necesario.

SECCIÓN 9: Propiedades físicas y químicas

9.1 Información sobre propiedades físicas y químicas básicas

Aspecto:	LIQUIDO
Color:	AMARILLO MUY PALIDO
Olor:	FLORAL
Punto de Inflamación:	100 °C
Información adicional:	No aplicable.

SECCIÓN 10: Estabilidad y reactividad

10.1 Reactividad: No disponible.

10.2 Estabilidad química: Estable en las condiciones normales de uso.

10.3 Posibilidad de reacciones peligrosas:

Polimerización peligrosa: No presenta reacciones peligrosas conocidas en condiciones normales de proceso.

10.4 Condiciones que deben evitarse: Calor excesivo, llamas u otras fuentes de ignición.



Las precauciones normales de los productos químicos.

10.5 Materiales incompatibles: Ácidos minerales oxidantes, Agentes reductores fuertes.

10.6 Productos de descomposición peligrosos: Durante la combustión pueden formarse monóxido de carbono y compuestos orgánicos no identificados.

SECCIÓN 11: Información toxicológica

11.1 Información sobre los efectos toxicológicos

Efectos toxicológicos: Ver también los epígrafes 2 y 3

SECCIÓN 12: Información ecológica

12.1 Toxicidad aguda acuática: No hay datos disponibles

12.2 Persistencia y degradabilidad: No disponible.

12.3 Factor de bioconcentración: Factor de bioconcentración

12.4 Movilidad en el suelo: No disponible.

12.5 Resultados de la valoración PBT y mPmB: No determinado

12.6 Otros efectos adversos: Evitar la contaminación del suelo, aguas subterráneas y superficiales.


SECCIÓN 13: Consideraciones relativas a la eliminación

13.1 Métodos para el tratamiento de residuos

Envases/contenedores: No reutilizar los envases vacíos. Vaciar los residuos en instalaciones adecuadas

Condiciones de eliminación: Eliminar conforme con las disposiciones locales y nacionales vigentes.

SECCIÓN 14: Información relativa al transporte

Transporte internacional de mercancías peligrosas por carretera (ADR)	
Número ONU:	UN3082
Denominación de envío:	SUSTANCIA LÍQUIDA PELIGROSA PARA EL MEDIO AMBIENTE, N.E.P. (Contiene Citronelol)
Grupo Embalaje:	III
Clase:	9
Código de restricción en túneles:	E
Etiqueta:	
Transporte aéreo (ICAO/IATA)	
Número ONU:	UN3082
Denominación de envío:	SUSTANCIA NOCIVA PARA EL MEDIO AMBIENTE, LÍQUIDA, N.E.P. (Contiene Citronelol)
Clase:	9
Grupo Embalaje:	III



Transporte Marítimo (IMDG)	
Número ONU:	UN3082
Denominación de envío:	SUSTANCIA LÍQUIDA PELIGROSA PARA EL MEDIO AMBIENTE, N.E.P. (Contiene Citronelol)
Clase:	9
Grupo Embalaje:	III
FEm:	F-A, S-F
Contaminante del mar:	Sí

SECCIÓN 15: Información reglamentaria

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

La(s) sustancia(s) está(n) listada(s) en los inventarios EINECS, ELINCS, NPL, o bien está(n) exenta(s).

15.2 Evaluación de la seguridad química:

No disponible.

SECCIÓN 16: Otra información

Uso restringido para fines industriales.

Texto de las frases R mencionadas en el epígrafe 3:

R38: Irrita la piel.

R43: Posibilidad de sensibilización en contacto con la piel.

R51/53: Tóxico para los organismos acuáticos, puede provocar a largo plazo efectos negativos en el medio ambiente acuático.

Texto de los códigos de las indicaciones de peligro mencionadas en el epígrafe 3:

H315: Provoca irritación cutánea.

H317: Puede provocar una reacción alérgica en la piel.

H411: Tóxico para los organismos acuáticos, con efectos nocivos duraderos.

Uso restringido para fines industriales.

Principales referencias bibliográficas y las fuentes de datos:

1. REAL DECRETO 363/1995, de 10 de Marzo de 1995 por el que se regula la Notificación de Sustancias Nuevas y Clasificación, Envasado y Etiquetado de Sustancias Peligrosas.
2. REAL DECRETO 255/2003, de 28 de febrero, por el que se aprueba el Reglamento sobre clasificación, envasado y etiquetado de preparados peligrosos.
3. REGLAMENTO (CE) no 1907/2006 del Parlamento Europeo y del Consejo, de 18 de diciembre de 2006, relativo al registro, la evaluación, la autorización y la restricción de las sustancias y preparados químicos (REACH), por el que se crea la Agencia Europea de Sustancias y Preparados Químicos, se modifica la Directiva 1999/45/CE y se derogan el Reglamento (CEE) no 793/93 del Consejo y el Reglamento (CE) no 1488/94 de la Comisión así como la Directiva 76/769/CEE del Consejo y las Directivas 91/155/CEE, 93/67/CEE, 93/105/CE y 2000/21/CE de la Comisión.



1.3 HEXANO



GRUPO TRANSMERQUIM



HOJA DE DATOS DE SEGURIDAD

Nombre del Producto: **HEXANO**
Fecha de Revisión: Junio de 2009



SALUD	1
INFLAMABILIDAD	3
REACTIVIDAD	0
ESPECÍFICO	

SECCION 1 : IDENTIFICACION DEL PRODUCTO Y DE LA COMPAÑÍA

PRODUCTO

Nombre Químico: **HEXANO**
Número CAS: 110-54-3
Sinónimos: n-hexano

COMPAÑÍA: Grupo Transmerquim

Teléfonos de Emergencia

México : Interior: 01800 00 214 00 D.F. (55) 55591588
Guatemala: (502) 66285858
El Salvador: (503) 22517700
Honduras: (504) 5568403
Nicaragua: (505) 22690361 - Toxicología MINSa: (505) 22897395
Costa Rica: (506) 25370010
Panamá: (507) 5126182
Colombia: (01800 916012
Perú: 080 050847 - (511) 4416365
Ecuador: 1800 593005
Venezuela: 800 1005012

SECCION 2 : COMPOSICION / INFORMACION SOBRE LOS INGREDIENTES

HEXANO CAS: 110-54-3 >99%

SECCION 3 : IDENTIFICACION DE PELIGROS

Resumen de Emergencia. Los vapores son extremadamente inflamables. Peligroso y fatal si es ingerido. Peligroso si se inhala. Causa irritación en la piel, en los ojos y en el tracto respiratorio. Afecta el sistema nervioso central y periférico.



Ingestión: Puede producir dolor abdominal, irritación en la garganta y náuseas. Si el producto llega a los pulmones es una emergencia médica y puede causar daños severos.

Contacto con los ojos: Los vapores son irritantes y pueden causar enrojecimiento y dolor.

Contacto con la piel: Puede causar irritación, enrojecimiento, desmayo, agrietamiento y resequedad de la piel.

Carcinogenicidad: El hexano no está listado por la NTP, OSHA o IARC como un material carcinogénico.

SECCION 4 : MEDIDAS DE PRIMEROS AUXILIOS

Inhalación: Trasladar a la víctima al aire fresco. Si la respiración es difícil, suministrar oxígeno suplementario. Si la respiración se ha detenido, dar respiración artificial. Buscar atención médica inmediatamente.

Ingestión: ¡No induzca el vomito!. Administre grandes cantidades de agua. Nunca administre nada por la boca a una persona inconsciente. Buscar atención médica inmediata.

Contacto Ocular: Lave bien los ojos inmediatamente al menos durante 15 minutos, elevando los párpados superior e inferior ocasionalmente para asegurar la remoción del químico. Busque atención médica inmediata si el dolor o la irritación persisten después del lavado.

Contacto Dérmico: Lave la piel inmediatamente con abundante agua y jabón por lo menos durante 15 minutos mientras se retira la ropa y zapatos contaminados. Lave la ropa antes de usarla nuevamente. Busque atención médica inmediata si persiste la irritación.

SECCION 5 : MEDIDAS PARA EXTINCION DE INCENDIOS

Punto de Inflamabilidad:	-22°C (-7.6 °F)
Temperatura de Auto Ignición:	225 °C (437 °F)
Límites de Inflamabilidad (%V/V) :	Inferior (LEL) : 1.1%
	Superior (UEL): 7.5%

Riesgo General: Es un compuesto altamente inflamable. Sus vapores pueden viajar a una fuente de ignición y regresar en llamas. Puede generar mezclas explosivas con el aire.

Medios de Extinción: CO₂, polvo químico o espuma. El agua puede resultar ineficiente.

Instrucciones para combatir el fuego: Evacuar a todo el personal de la zona de peligro. Enfriar inmediatamente los contenedores rociándolos con agua desde un lugar seguro. El vapor puede alcanzar largas distancias, localizar la fuente de ignición y regresar en llamas.

SECCION 6: MEDIDAS PARA FUGAS ACCIDENTALES

Usar equipo de protección personal de acuerdo con lo establecido en la sección 8. Ventilar el área del escape o derrame. Retirar todas las fuentes de ignición. Aislar la zona de peligro. Contener y recuperar el líquido cuando sea posible. Recoger el líquido en un envase apropiado o absorberlo con material inerte como tierra, arena o materiales no combustibles; colocarlo en un recipiente para residuos químicos. No utilizar materiales combustibles tales como aserrín. ¡No limpiar con chorro de agua dirigido a una alcantarilla!. Si el escape o derrame no se ha encendido, utilizar rocío de agua para dispersar los vapores. Evitar que este producto llegue a drenajes, alcantarillas o cuerpos de agua.



SECCION 7: MANEJO Y ALMACENAMIENTO

Debe almacenarse en lugares frescos, secos y bien ventilados. Lejos de fuentes de calor, ignición y de la acción directa de los rayos solares. Separar de materiales incompatibles tales como agentes oxidantes. En pequeñas cantidades se almacena en frascos de vidrio, pero para cantidades considerables se debe hacer en tanques metálicos protegidos de descargas estáticas y sobre estibas de madera. Recordar que los vapores son más pesados que el aire por lo que pueden acumularse, viajar hacia fuentes de ignición y regresar, generando fuego en las zonas de almacenamiento.

SECCION 8: CONTROLES DE EXPOSICION Y PROTECCION PERSONAL

Controles de Ingeniería

Ventilación: Se recomienda proveer un extractor local o general para mantener un ambiente de trabajo fuera de los límites de exposición.

Equipos de Detección: Utilice sistemas de detección de gases diseñados de acuerdo con las necesidades. Rango recomendado del instrumento 0-100% LEL.

Protección respiratoria: Si se exceden los límites de exposición o fallan los controles de ingeniería, se debe usar un equipo auto contenido (SCBA) o máscaras con mangueras de aire y de presión directa. Los purificadores de aire no proveen suficiente protección.

Vestuario Protector: Para el manejo del producto se debe utilizar ropa impermeable protectora como guantes, botas y bata de laboratorio para prevenir el contacto con la piel, gafas de seguridad o pantalla facial completa para prevenir salpicaduras.

Otros: Regadera de seguridad y fuente lava ojos.

Equipo contra Incendios: Los socorristas o personal de rescate deben contar, como mínimo, con un aparato de respiración auto contenido y protección personal completa a prueba de fuego (equipo para línea de fuego).

SECCION 9: PROPIEDADES FISICAS Y QUIMICAS

Apariencia y color:	Líquido incoloro.
Densidad relativa (Agua=1):	0.66
Punto de Ebullición a 1 atm.:	68 °C (154 °C)
Punto de Congelación/fusión a 1 atm.:	-95 °C (-139 °F)
pH:	N.A.
Peso Molecular:	86.18
Gravedad Específica:	0.66
Presión de vapor a 21.1°C (70 °F):	17.33 Kpa (2.51 psig)
Coefficiente de distribución agua/aceite:	N.A.
Solubilidad en Agua, vol/vol 20 °C (68 °F), 1 atm.:	0.047
Volumen específico del gas a 15.6°C (60 °F), 1 atm.:	0.7813 m ³ /kg (12.5151 ft ³ /lb)

SECCION 10 : ESTABILIDAD Y REACTIVIDAD

Estabilidad química: Estable bajo condiciones ordinarias de uso y almacenamiento. El calor lo puede volver inestable.



Incompatibilidad con otros materiales: Oxidantes fuertes como cloro, fluor o perclorato de magnesio.

Condiciones a evitar: Evitar que el líquido entre en contacto con materiales incompatibles y evitar la exposición a calor, llamas y otras fuentes de ignición.

Productos de descomposición peligrosos: Monóxido de carbono, dióxido de carbono, vapor de agua y gases tóxicos e irritantes.

Polimerización Peligrosa: No ocurrirá

SECCION 11 : INFORMACION TOXICOLOGICA

Datos de Toxicidad

LD50 (oral, rata) : 28710 mg/kg

CL50: >3.367 mg/kg

Capacidad Irritante del Material: El hexano no es irritante.

Sensibilidad a Materiales: No se conoce que este producto cause sensibilidad en humanos.

Efectos del Sistema Reproductivo

Mutagenicidad: Ningún efecto mutagénico ha sido descrito para el hexano.

Embriotoxicidad: Ningún efecto embriotóxico ha sido descrito para el hexano en humanos.

Teratogenicidad: Ningún efecto teratogénico ha sido descrito para el hexano en humanos.

Toxicidad Reproductiva: Ningún efecto de toxicidad reproductiva ha sido descrito para el hexano en humanos.

SECCION 12 : INFORMACION ECOLOGICA

Aire: Los vapores son extremadamente inflamables y perjudiciales para el medio ambiente.

Agua: El producto tiende a formar una película superficial sobre el agua. Cuando el producto es diluido en cuerpos de agua superficiales o subterráneos, puede alterar propiedades que limitan su uso y pueden ser peligrosas para la fauna y la flora acuática.

Suelo: Si el producto es derramado en el suelo, la mayor parte de éste se evaporará.

SECCION 13 : CONSIDERACIONES SOBRE DISPOSICION

Los desechos de hexano se pueden incinerar o usar como combustible en condiciones controladas. Las cantidades pequeñas pueden evaporarse en una campana de extracción de gases.

SECCION 14 : INFORMACION SOBRE TRANSPORTE

Numero Naciones Unidas: UN 1208

Clase de peligro D.O.T.: 3

Rótulo y etiqueta D.O.T.: LIQUIDO INFLAMABLE

SECCION 15 : INFORMACION REGLAMENTARIA

Esta hoja de seguridad cumple con la normativa legal de:

México: NOM-018-STs-2000

Guatemala: Código de Trabajo, decreto 1441

Panamá: Resolución #124, 20 de marzo de 2001



HOJA DE DATOS DE SEGURIDAD (HDS) HIDROGENO – H₂ (GAS)

INFRA S.A. DE C.V. Félix Guzmán No. 16 3° Piso. Col. El Parque. C.P. 53398. Naucalpan de Juárez. Estado de México, México. TELEFONO DE EMERGENCIA: 01-800-221-98-44 (24 HORAS)	Clave del Documento: HDS-H2-GAS	Revisión No. : 07
	Fecha de Emisión: 1999-12	Fecha de Revisión: 2011-07

DATOS GENERALES DEL PRODUCTO

Nombre Químico ⁽¹⁾ : Hidrogeno	Nombre Comercial: Hidrogeno	Sinónimos: Hidrogeno
Formula: H₂	Familia Química: No Metales	Inf. Relevante: Gas Inflamable Gas Asfixiante

IDENTIFICACION DEL PRODUCTO

No. CAS ⁽²⁾ : 1333-74-0	No. ONU ⁽³⁾ : 1049	IPVS (IDLH) ⁽⁴⁾ : NA
LMPE-PPT ⁽⁵⁾ : NA	LMPE-CT ⁽⁶⁾ : NA	LMPE-P ⁽⁷⁾ : NA

CLASIFICACION DE RIESGOS

NFPA ⁽⁸⁾ : Rombo de Riesgos	Salud (S): 0	Inflamabilidad (I): 4	Reactividad (R): 0	Riesgos Especiales (RE):
	HMIS ⁽⁹⁾ : Rectángulo de Riesgos	Salud (S): 0	Inflamabilidad (I): 4	Reactividad (R): 0

PROPIEDADES FISICAS Y QUIMICAS DEL PRODUCTO ⁽¹⁰⁾

Temperatura de Ebullición: 20.384 K (-252.8 °C) @ 101.325 kPa	Temperatura de Fusión: 13.95 K (-259.2 °C) @ 7.075 kPa	Temperatura de Inflamación: 255 K (-18.15 °C)	Temperatura de Autoignición: 844.3 K (571.2 °C)
Densidad: 0.08235 kg/m³ @ 101.325 kPa ; 25 °C	pH: NA	Peso Molecular: 2.016 g/mol	Estado Físico: Gas
Color: Incoloro	Olor: Inodoro	Velocidad de Evaporación: ND	Solubilidad en Agua: 0.0182 cm³ / 1 cm³ Agua @ 101.325 kPa ; 20 °C
Presión de Vapor: ND	Porcentaje de Volatilidad: ND	Limite Superior de Inflamabilidad / Volatilidad: 75.0 %	Limite Inferior de Inflamabilidad / Volatilidad: 4.0 %

1.4 HIDROGENO



RIESGOS DE FUEGO O EXPLOSION

Medio de Extinción:	
Agua:	Se puede utilizar
Espuma:	Se puede utilizar
Dióxido de Carbono (CO ₂):	Se puede utilizar
Polvo Químico:	Se puede utilizar
Otros Métodos:	Se pueden utilizar todos los medios de extinción conocidos
Equipo de Protección Específico para el Combate de Incendios: Utilizar un aparato de respiración autónomo, así como ropa protectora retardante a la llama.	
Procedimiento y Precauciones Especiales durante el combate de Incendios: Inflamable por electricidad estática. Arde con llama invisible. El gas es más ligero que el aire y puede acumularse en las partes altas de espacios cerrados. Ante la exposición al calor intenso o fuego, el cilindro se vaciará rápidamente y/o se romperá violentamente. Mantener los envases y los alrededores fríos con agua pulverizada. Extinguir el incendio sólo cuando la fuga de gas pueda ser detenida. Si es posible, cortar la fuente del gas y dejar que el incendio se extinga por sí solo. No extinguir una fuga de gas inflamada si no es absolutamente necesario. Se puede producir la re-ignición espontánea explosiva. Extinguir los otros fuegos. Alejarse del envase y enfriarlo con agua desde un lugar protegido. Mantener fríos los cilindros adyacentes mediante pulverización con gran cantidad de agua hasta que el fuego se extinga por sí solo. En caso de que las llamas sean extinguidas accidentalmente, puede producirse una re-ignición explosiva, y por eso deben tomarse las medidas necesarias; p.ej: la evacuación total para proteger a las personas de los fragmentos del cilindro y del humo tóxico en caso de ruptura. NOTA: La presencia de una llama de hidrógeno puede ser detectada acercando cuidadosamente material combustible (p.ej: una rama de árbol o un trapo envuelto en una madera) extendido para que el fuego se haga visible.	
Condiciones que Conducen a Otro Riesgo Especial: ND	
Productos de la Combustión que sean Nocivos para la Salud: ND	
Datos de Reactividad:	
Condiciones de Estabilidad:	Estable en condiciones normales
Condiciones de Inestabilidad:	ND
Incompatibilidad:	Oxígeno, Oxidantes.
Residuos Peligrosos de la Descomposición:	ND
Polimerización Espontánea:	ND
Otros:	Calor, llamas y chispas. Puede formar mezclas inflamables con el aire y agentes oxidantes.

RIESGOS A LA SALUD Y PRIMEROS AUXILIOS

Vía de Ingreso al Organismo:	
Ingestión:	La ingestión no está considerada como una vía potencial de exposición.
Inhalación:	A elevadas concentraciones puede causar asfixia. Los síntomas pueden incluir la pérdida de la consciencia o de la movilidad. La víctima puede no haberse dado cuenta de la asfixia. La asfixia puede causar la inconsciencia tan inadvertida y rápidamente que la víctima puede ser incapaz de protegerse.
Contacto:	Sin efectos negativos
Sustancia Química:	
Carcinogénica:	Sin efectos negativos
Mutagénica:	Sin efectos negativos
Teratogénica:	Sin efectos negativos
Información Complementaria:	
CL ₅₀ ⁽¹⁾ :	NA
DL ₅₀ ⁽¹²⁾ :	NA



<p>Emergencia y Primeros Auxilios: Retirar a la víctima a un área no contaminada llevando colocado el equipo de respiración autónomo. Mantener a la víctima caliente y en reposo. Llamar al médico. Brindar respiración artificial si se detiene la respiración.</p>	
<p>Medidas Precautorias en Caso de:</p> <p>Ingestión: NA</p> <p>Inhalación: Salir al aire libre. Si la respiración es difícil o se detiene, proporcione respiración asistida. Se puede suministrar oxígeno suplementario. Si se detiene el corazón, el personal capacitado debe comenzar de inmediato la resucitación cardiopulmonar. En caso de dificultad respiratoria, brindar oxígeno.</p> <p>Contacto: NA</p>	
<p>Otros Riesgos o Efectos a la Salud: La exposición a una atmósfera con deficiencia de oxígeno puede causar los siguientes síntomas: Vértigo. Salivación. Náusea. Vómitos. Pérdida de movilidad / consciencia.</p>	
<p>Antídotos: NA</p>	
<p>Información Importante para la Atención Médica Primaria: NA</p>	
<p>Controles de Exposición:</p> <p>Disposiciones de ingeniería: Es necesario garantizar la ventilación natural o a prueba de explosiones de manera que el gas inflamable no alcance su límite inferior de explosión.</p> <p>Protección respiratoria: Disponer de aparato de respiración autónomo para uso en caso de emergencia.</p> <p>Protección de las manos: Para el trabajo con cilindros se aconsejan guantes reforzados. La caducidad de los guantes seleccionados debe ser mayor que el periodo de uso previsto.</p> <p>Protección de los ojos: Se aconseja el uso de gafas de protección durante la manipulación de cilindros.</p> <p>Protección de la piel y del cuerpo: Durante la manipulación de cilindros se aconseja el uso de zapatos de protección. Llevar cuando sea apropiado ropa protectora retardante a la llama.</p> <p>Instrucciones especiales de protección e higiene: Asegurarse de una ventilación adecuada, especialmente en locales cerrados para evitar la acumulación de concentraciones superiores al límite de exposición.</p>	

INFORMACION SOBRE TRANSPORTACION ⁽¹³⁾ ⁽¹⁴⁾ ⁽¹⁵⁾

<p>Evitar el transporte en los vehículos donde el espacio de la carga no esté separado del compartimiento del conductor. Asegurar que el conductor está enterado de los riesgos potenciales de la carga y que conoce que hacer en caso de un accidente o de una emergencia. Debe portar el rombo de señalamiento de seguridad (gas no inflamable) con el número de naciones unidas ubicando en la unidad según NOM-004-STC/2008. Cada envase requiere una etiqueta de identificación con información de riesgos primarios y secundarios. La unidad deberá contar con su hoja de emergencia en transportación con la información necesaria para atender una emergencia según NOM-005-STC/2008.</p> <p>Los cilindros deberán ser transportados en posición vertical y en unidades bien ventiladas, nunca transporte en el compartimiento de pasajeros del vehículo.</p>		
<p>Incompatibilidad para el Transportes ⁽¹⁶⁾:</p> <p>No debe cargarse, transportarse o almacenarse junto con sustancias, materiales o residuos peligrosos con clase o división de riesgo 1.1, 1.2, 1.3, 1.5, 2.3 Zona A, en la misma unidad o vehículo de transporte, así como el cualquier instalación de almacenamiento.</p> <p>No debe cargarse, transportarse o almacenarse junto con sustancias, materiales o residuos peligrosos con clase o división de riesgo 1.4, 2.3 Zona B, 6.1 GEE / Zona A, 7, en la misma unidad o vehículo de transporte, así como el cualquier instalación de almacenamiento, a menos que se encuentren separados de manera tal que, en caso de derrame de los envases y embalajes, en condiciones de incidentes normales de transporte, no se propicie la mezcla y reacción de las sustancias, materiales o residuos peligrosos.</p>		
<p>No. Guía Respuesta a Emergencias ⁽¹⁷⁾: 115 Gases inflamables (incluyendo líquidos refrigerados)</p>		
<p>División ⁽¹⁵⁾:</p> <p>2.1</p>	<p>Riesgo Primario ⁽¹⁵⁾⁽¹⁶⁾:</p> <p>2.1</p> 	<p>Riesgo Secundario ⁽¹⁵⁾⁽¹⁶⁾:</p> <p>Ninguno</p>

INFORMACION SOBRE ECOLOGIA ⁽¹⁹⁾

<p>No hay datos disponibles sobre este producto.</p> <p>Método de Eliminación de Desechos: Contactar a INFRA si es necesaria información y asesoramiento. Devolver el producto no usado a INFRA en el cilindro original. No descargar en áreas donde hay riesgo de que se forme una mezcla explosiva con el aire. El gas residual debe ser quemado a través de un quemador adecuado que disponga de anti-retroceso de llama.</p>
--



INFORMACION DEL ETIQUETADO ⁽²⁰⁾

<p>Precauciones: GAS INFLAMABLE ENVASADO A ALTA PRESIÓN PUEDE FORMAR MEZCLAS EXPLOSIVAS CON EL AIRE SI LA VÁLVULA ES ABIERTA A LA ATMÓSFERA PUEDE INCENDIARSE SE QUEMA CON FLAMA INVISIBLE Manténgase alejado del calor, flama o chispa Almacene y use con ventilación adecuada El cilindro no debe exceder de 52°C (125°F) No abrir la válvula hasta que esté conectada al equipo a utilizar Use equipo para el rango de presión del cilindro Utilice dispositivos para evitar el retroceso de flujo en la tubería Aproxímese con cuidado a cualquier área con fuga Cierre la válvula después de usar el cilindro y cuando este vacío Usar de acuerdo a la hoja de seguridad</p>
<p>Primeros Auxilios: NA</p>

Signos y Referencias:

- (1) De acuerdo con: La Unión Internacional de Química Pura y Aplicada (IUPAC).
- (2) No. CAS: Número establecido por la Chemical Abstracts Service, de acuerdo a la NOM-018-STPS-2000, Sistema para la identificación y comunicación de peligros y riesgos por sustancias químicamente peligrosas en los centros de trabajo.
- (3) No. ONU: Número asignado a la Sustancia Peligrosa, según las Recomendaciones de la Organización de las Naciones Unidas para el Transporte de Mercancías Peligrosas, de acuerdo a la NOM-002-SCT/2003, Listado de las sustancias y materiales peligrosos más usualmente.
- (4) IPVS (IDLH): Concentración Inmediatamente Peligrosa para la Vida o la Salud, de acuerdo al Pocket Guide to Chemical Hazards.
- (5) LMP5-PP1: Límite Máximo Permissible de Exposición Promedio Ponderado en el Tiempo, de acuerdo a la NOM-010-STPS-1999, Condiciones de Seguridad e Higiene en los Centros de Trabajo donde se Manejen, Transporten, Procesen o Almacenen Sustancias Químicas Capaces de Generar Contaminación en el Medio Ambiente Laboral.
- (6) LMP5-CT: Límite Máximo Permissible de Exposición para Corto Tiempo, de acuerdo a la NOM-010-STPS-1999, Condiciones de Seguridad e Higiene en los Centros de Trabajo donde se Manejen, Transporten, Procesen o Almacenen Sustancias Químicas Capaces de Generar Contaminación en el Medio Ambiente Laboral.
- (7) LMP5-P: Límite Máximo Permissible de Exposición Pico.
- (8) NFPA: Asociación Nacional de Protección contra Incendios (National Fire Protection Association), de acuerdo a la NOM-018-STPS-2000, Sistema para la identificación y comunicación de peligros y riesgos por sustancias químicamente peligrosas en los centros de trabajo.
- (9) HMS: Sistema de Identificación de Materiales Peligrosos (Hazardous Materials Identification System), de acuerdo a la NOM-018-STPS-2000, Sistema para la identificación y comunicación de peligros y riesgos por sustancias químicamente peligrosas en los centros de trabajo.
- (10) Matheson Gas Data Book.
- (11) CL50: Concentración Letal para el 50% de la población experimentada.
- (12) DL50: Dosis Letal para el 50% de la población experimentada.
- (13) De acuerdo con: El Reglamento para el Transporte Terrestre de Materiales y Residuos Peligrosos.
- (14) De acuerdo con: NOM-004-SCT/2008 Sistema de Identificación de Unidades Destinadas al Transporte Terrestre de Materiales y Residuos Peligrosos, Recomendaciones de la Organización de las Naciones Unidas para el Transporte de Mercancías Peligrosas.
- (15) De acuerdo con: NOM-002-SCT/2003, Listado de las sustancias y materiales peligrosos más usualmente transportados.
- (16) De acuerdo con: NOM-010-SCT/2009, Disposiciones de compatibilidad y segregación para el almacenamiento y transporte de sustancias, materiales y residuos peligrosos.
- (17) Guía de Respuesta en Caso de Emergencia 2008, Secretaría de Comunicaciones y Transportes.
- (18) De acuerdo con: NOM-003-SCT/2008, Características de las etiquetas de empaques y embalajes, destinadas al transporte de sustancias, materiales y residuos peligrosos.
- (19) De acuerdo con: Las Disposiciones de la Secretaría de Medio Ambiente, Recursos Naturales y Pesca, en Materia de Agua, Aire, Suelo y Residuos Peligrosos.
- (20) CGA-C-7 Guide to preparation of precautionary labeling and marking of compressed gas container.
- (21) NA: No Aplica.
- (22) ND: No Disponible.



1.5 NITROGENO

NITRÓGENO – N₂ (GAS)

INFRA S.A. DE C.V. Félix Guzmán No. 18 3° Piso. Col. El Parque. C.P. 53398. Naucaalpan de Juárez. Estado de México, México. TELEFONO DE EMERGENCIA: 01-800-221-98-44 (24 HORAS)	Clave del Documento: HDS-N2-GAS	Revisión No. : 05
	Fecha de Emisión: 1999-12	Fecha de Revisión: 2011-07

DATOS GENERALES DEL PRODUCTO

Nombre Químico ⁽¹⁾ : Nitrógeno	Nombre Comercial: Nitrógeno, INFRA FRESCOPACK	Sinónimos: Nitrógeno
Formula: N₂	Familia Química: No Metales	Inf. Relevante: Gas Inerte Asfixiante simple

IDENTIFICACION DEL PRODUCTO

No. CAS ⁽²⁾ : 7727-37-9	No. ONU ⁽³⁾ : 1066	IPVS (IDLH) ⁽⁴⁾ : NA
LMPE-PPT ⁽⁵⁾ : NA	LMPE-CT ⁽⁶⁾ : NA	LMPE-P ⁽⁷⁾ : NA

CLASIFICACION DE RIESGOS

NFPA ⁽⁸⁾ : Rombo de Riesgos	Salud (S):	Inflamabilidad (I):	Reactividad (R):	Riesgos Especiales (RE):
	1	0	0	
HMIS ⁽⁹⁾ : Rectángulo de Riesgos	Salud (S):	Inflamabilidad (I):	Reactividad (R):	Equipo de Protección Personal (EPP): A Lentes de seguridad
	1	0	0	

PROPIEDADES FISICAS Y QUIMICAS DEL PRODUCTO ⁽¹⁰⁾

Temperatura de Ebullición: 77.352 K (-195.8 °C) @ 101.325 kPa	Temperatura de Fusión: 63.149 K (-210.0 °C) @ 12.53 kPa	Temperatura de Inflamación: NA	Temperatura de Autoignición: NA
Densidad: 1.1455 kg/m³ @ 101.325 kPa ; 25 °C	pH: NA	Peso Molecular: 28.0134 g/mol	Estado Físico: Gas
Color: Incoloro	Olor: Inodoro	Velocidad de Evaporación: ND	Solubilidad en Agua: 1.485 cm³ / 100 cm³ Agua @ 101.325 kPa ; 25 °C
Presión de Vapor: ND	Porcentaje de Volatilidad: NA	Límite Superior de Inflamabilidad / Volatilidad: NA	Límite Inferior de Inflamabilidad / Volatilidad: NA



RIESGOS DE FUEGO O EXPLOSION

Medio de Extinción:	
Agua:	Se puede utilizar
Espuma:	Se puede utilizar
Dióxido de Carbono (CO ₂):	Se puede utilizar
Polvo Químico:	Se puede utilizar
Otros Métodos:	Se pueden utilizar todos los medios de extinción conocidos
Equipo de Protección Específico para el Combate de Incendios: Utilizar un aparato de respiración autónomo.	
Procedimiento y Precauciones Especiales durante el combate de Incendios: Ante la exposición al calor intenso o fuego, el cilindro se vaciará rápidamente y/o se romperá violentamente. El producto no es inflamable y no soporta la combustión. Alejarse del envase y enfriarlo con agua desde un lugar protegido. Mantener los envases y los alrededores fríos con agua pulverizada.	
Condiciones que Conducen a Otro Riesgo Especial: ND	
Productos de la Combustión que sean Nocivos para la Salud: ND	
Datos de Reactividad:	
Condiciones de Estabilidad:	Estable en condiciones normales.
Condiciones de Inestabilidad:	NA
Incompatibilidad:	NA
Residuos Peligrosos de la Descomposición:	NA
Polimerización Espontánea:	NA
Otros:	NA

RIESGOS A LA SALUD Y PRIMEROS AUXILIOS

Vía de Ingreso al Organismo:	
Ingestión:	Sin efectos negativos
Inhalación:	Altas concentraciones pueden causar asfixia. La asfixia puede causar la inconsciencia tan inadvertida y rápidamente que la víctima puede ser incapaz de protegerse. La exposición a una atmósfera con deficiencia de oxígeno puede causar los siguientes síntomas: Vértigo. Salivación. Náusea. Vómitos. Pérdida de movilidad / consciencia.
Contacto:	Sin efectos negativos
Sustancia Química:	
Carcinogénica:	Sin efectos negativos
Mutagénica:	Sin efectos negativos
Teratogénica:	Sin efectos negativos
Información Complementaria:	
CL ₅₀ ⁽¹¹⁾ :	NA
DL ₅₀ ⁽¹²⁾ :	NA

INDICACIONES EN CASO DE FUGA O DERRAME

Procedimiento y Precauciones Inmediatas: Evacuar el personal a zonas seguras. Utilizar equipos de respiración autónoma cuando entren en el área a menos que esté probado que la atmósfera es segura. Vigilar el nivel de oxígeno. Ventilar la zona. No descargar dentro de ningún lugar donde su acumulación pudiera ser peligrosa. Impedir nuevos escapes o derrames de forma segura.
Método de Mitigación: Si es posible, detener el caudal de producto. Aumentar la ventilación del área y controlar el nivel de oxígeno. Si la fuga tiene lugar en el cilindro o en su válvula, llamar al número de emergencia de INFRA. Si la fuga se encuentra en la instalación del usuario, cerrar la válvula del cilindro y efectuar un venteo de seguridad de la presión antes de efectuar cualquier reparación.

PROTECCION ESPECIAL ESPECÍFICA PARA SITUACIONES DE EMERGENCIA

Equipo de Protección Especial Específico: NA

INFORMACION SOBRE TRANSPORTACION ⁽¹³⁾ ⁽¹⁴⁾ ⁽¹⁵⁾

Evitar el transporte en los vehículos donde el espacio de la carga no esté separado del compartimiento del conductor. Asegurar que el conductor está enterado de los riesgos potenciales de la carga y que conoce que hacer en caso de un accidente o de una emergencia. Debe portar el rombo de señalamiento de seguridad (gas no inflamable) con el número de naciones unidas ubicando en la unidad según NOM-004-STC/2008. Cada envase requiere una etiqueta de identificación con información de riesgos primarios y secundarios. La unidad deberá contar con su hoja de emergencia en transportación con la información necesaria para atender una emergencia según NOM-005-STC/2008.
Los cilindros deberán ser transportados en posición vertical y en unidades bien ventiladas, nunca transporte en el compartimiento de pasajeros del vehículo.
Incompatibilidad para el Transportes ⁽¹⁶⁾ : No debe cargarse, transportarse o almacenarse junto con sustancias, materiales o residuos peligrosos con clase o división de riesgo 1.1, 1.2, 1.5, en la misma unidad o vehículo de transporte, así como el cualquier instalación de almacenamiento.
No. Guía Respuesta a Emergencias ⁽¹⁷⁾ : 121 Gases inertes



INFORMACION DEL ETIQUETADO (20)

<p>Precauciones: GAS ENVASADO A ALTA PRESIÓN PUEDE CAUSAR RÁPIDAMENTE ASFIXIA Almacene y use con ventilación adecuada Use equipo para el rango de presión del cilindro Utilice dispositivo para evitar el retroceso en el flujo de la tubería El cilindro no debe exceder 52°C (125°F) Cerrar válvula después de usar y cuando este vacío Usar de acuerdo a la hoja de seguridad</p>
<p>Primeros Auxilios: En caso de inhalación traslade a la persona al aire libre, si no respira brinde respiración artificial, administre oxígeno y llame al médico.</p>

Siglas y Referencias:

- (1) De acuerdo con: La Unión Internacional de Química Pura y Aplicada (IUPAC).
- (2) No. CAS: Número establecido por la Chemical Abstracts Service, de acuerdo a la NOM-015-STPS-2000, Sistema para la identificación y comunicación de peligros y riesgos por sustancias químicamente peligrosas en los centros de trabajo.
- (3) No. ONU: Número asignado a la Sustancia Peligrosa, según las Recomendaciones de la Organización de las Naciones Unidas para el Transporte de Mercancías Peligrosas, de acuerdo a la NOM-003-SCT/2003, Libro de las sustancias y materiales peligrosos más usualmente.
- (4) IPVS (IDLH): Concentración Inmediatamente Peligrosa para la Vida o la Salud, de acuerdo al Pocket Guide to Chemical Hazards.
- (5) LMPIS-PPT: Límite Máximo Permissible de Exposición Promedio Ponderado en el Tiempo, de acuerdo a la NOM-010-STPS-1999, Condiciones de Seguridad e Higiene en los Centros de Trabajo donde se Manejen, Transporten, Procesen o Almacenen Sustancias Químicas Capaces de Generar Contaminación en el Medio Ambiente Laboral.
- (6) LMPIS-CT: Límite Máximo Permissible de Exposición para Corto Tiempo, de acuerdo a la NOM-010-STPS-1999, Condiciones de Seguridad e Higiene en los Centros de Trabajo donde se Manejen, Transporten, Procesen o Almacenen Sustancias Químicas Capaces de Generar Contaminación en el Medio Ambiente Laboral.
- (7) LMPIS-P: Límite Máximo Permissible de Exposición Pico.
- (8) NFPA: Asociación Nacional de Protección contra Incendios (National Fire Protection Association), de acuerdo a la NOM-015-STPS-2000, Sistema para la identificación y comunicación de peligros y riesgos por sustancias químicamente peligrosas en los centros de trabajo.
- (9) HMIS: Sistema de Identificación de Materiales Peligrosos (Hazardous Materials Identification System), de acuerdo a la NOM-015-STPS-2000, Sistema para la identificación y comunicación de peligros y riesgos por sustancias químicamente peligrosas en los centros de trabajo.
- (10) Matheson Gas Data Book.
- (11) CL50: Concentración Letal para el 50% de la población experimentada.
- (12) DL50: Dosis Letal para el 50% de la población experimentada.
- (13) De acuerdo con: El Reglamento para el Transporte Terrestre de Materiales y Residuos Peligrosos.
- (14) De acuerdo con: NOM-004-SCT/2008, Sistema de Identificación de Unidades Destinadas al Transporte Terrestre de Materiales y Residuos Peligrosos. (Recomendaciones de la Organización de las Naciones Unidas para el Transporte de Mercancías Peligrosas).
- (15) De acuerdo con: NOM-002-SCT/2003, Libro de las sustancias y materiales peligrosos más usualmente transportados.
- (16) De acuerdo con: NOM-010-SCT/2000, Disposiciones de compatibilidad y segregación para el almacenamiento y transporte de sustancias, materiales y residuos peligrosos.
- (17) Guía de Respuesta en Caso de Emergencia 2003, Secretaría de Comunicaciones y Transportes.
- (18) De acuerdo con: NOM-003-SCT/2008, Características de las etiquetas de empaques y embalajes, destinadas al transporte de sustancias, materiales y residuos peligrosos.
- (19) De acuerdo con: Las Disposiciones de la Secretaría de Medio Ambiente, Recursos Naturales y Pesca, en Materia de Agua, Aire, Suelo y Residuos Peligrosos.
- (20) CGA G-7 Guide to preparation of precautionary labeling and marking of compressed gas container.
- (21) NA: No Aplica.
- (22) ND: No Disponible.



II.- DISEÑO MECÁNICO DEL REACTOR

CALCULATIONS SHEET		Date:	22-Abr-13
		Job Number:	
FORM: NA	DOCUMENT No:		
CUSTOMER: NA	COMPONENT REF:		0
DETAILS: VESSEL OF 1000 LITROS			
CONTENTS			
Objetives			2
Approach			2
References			2
Assumptions			3
Constants and Conversions			3
Property Data			3
Design Data			4
Loads Sheets			5
Calculations			
Shell			6
Top Head			9
Bottom head			11

REVIEWED: JTG
Revision: 0

PAGE 1



CALCULATIONS
SHEET

Date: 22-Abr-13
Job Number: 0

OBJETIVES:

- * Estimate the maximum allowable working pressure on vessel.
- * Estimate the maximum allowable external working pressure on vessel

APPROACH:

Apply the equations of **ASME Code, Section VIII, Division I, Edition 2001, Addenda 2002**, for estimate the maximum allowable working pressure (internal and external) on vessel.

REFERENCES:

- ASME Code
- * ASME Code, Section II, Part A, p363-370.1 "Specification for heat-resisting chromium and chromium-nickel stainless steel plate, sheet, and strip for pressure vessel" edition 2001, addenda 2002.
 - * ASME Code, Section II, Part A, p843-854 "Specification for stainless steel bar and shapes for use boilers and others pressure vessels" edition 2001, addenda 2002.
 - * ASME Code, Section II, Part C, p203-210 "Specification for bare stainless steel welding electrodes and rods" edition 2001, addenda 2002.
 - * ASME Code, Section II, Part C, p211-227 "Appendix Guide to specification for bare stainless steel welding electrodes and rods" edition 2001, addenda 2002.
 - * ASME Code, Section II, Part D, p70-73 line 12 and p94-97 line 24, Table 1A "Section I; Section III, Class 2 and 3; and section VIII, Division 1. Maximum allowable stress values for Ferrous materials" Also, Fig. G p614-615 and Fig. HA-4 p621. Edition 2001, addenda 2002.
 - * **ASME Code, Section VIII, Division I, Edition 2001, addenda 2002.** Subsection A "General Requirements" Part UG p9-110; Subsection B "Requirements pertaining to methods of fabrication of pressure vessels" Part UW p111-152; Subsection C Requirements pertaining to classes of materials" Part UHA p211-222; Mandatory Appendix 1 "Supplementary design formulas" p315-330 and Mandatory Appendix 2 "Rules for bolted flange connections with ring type gaskets" p331-350.

REVIEWED: JTG
Revision: 0

PAGE 2



**CALCULATIONS
SHEET**

Date: 22-Abr-13
Job Number: 0

General information Buthod, Paul. "Pressure Vessel Handbook" tenth edition, Pressure Vessel Handbook Publishing Inc. USA. 500pp. 1995

Detail Drawing Drawing No.

Perry's Green, Don W., Editor, "Manual del Ingeniero Químico" 7th edition, Mc Graw-Hill, México pp65-77. 1997

ASSUMPTIONS:

None

CONSTANTS AND CONVERSIONS:

1 Kg/cm² = 14.223 psi (approximate)
1 cm = 0.3937 in (approximate)
1 ft = 12 in
deg. C = (deg.F-32)/0.555

PROPERTY DATA:

The density of the water, ρ , is:

$$\rho = 62.4 \frac{\text{lb}_f}{\text{ft}^3}$$

Note: For the stress allowable of the plate, see "Calculations" below

REVIEWED: JTG
Revision: 0

PAGE 3



CALCULATIONS SHEET	Date: 22-Abr-13 Job Number: 0
-------------------------------	----------------------------------

DESIGN DATA:

<u>Service</u>		
Shell:	Water	
Jacket:	Steam	
 <u>Design Pressure</u>		
Shell:		
Internal	$P_i = 239.92$	psi
External	$P_e = 56.89$	psi
 <u>Design Temperature</u>		
	$temp = 211.7$	degF
 <u>MDMT</u>		
	MDMT=	39.2degF
 Corrosion allowance		
	C=	0.00 in
 Post weld heat treat		
	None, exempt by UHA-32	
 Impact test:		
	None, exempt by UHA-51 (d)(1)(d), (e) and (f)	
 <u>Radiography:</u>		
Shell:		
Longitudinal joint	None (70%)	$E_d = 1.00$
Circumferential joint	None (70%)	$E_x = 1.00$
 Heads:		
Heat to shell joint	None (70%)	$E_h = 1.00$
Category A Joint	None (70%)	$E_h = 1.00$
 <u>Material:</u>		
Shell:	SA-240 T-304L	
Top Head	SA-240 T-304L	
Bottom Head	SA-240 T-304L	
Ferrules	SA-240 T-304L	
Manway Neck	SA-240 T-304L	
Manway Head	SA-240 T-304L	



CALCULATIONS SHEET	Date: 22-Abr-13 Job Number: 0
-------------------------------	----------------------------------

LOADS SHEET:
VESSEL SUPPORT REQUIREMENTS (ASME SECTION VIII DIVISION 1 UGA-22 EDITION: 2001)

YES	NO	ITEM
✓		Internal Pressure
✓		External Pressure
	✓	Weight the Vessel
✓		Weight of Normal Contents Under Operating Conditions (Static Head)
	✓	Weight of Normal Contents Under Test Conditions (Static Head)
	✓	Super Imposed Static Reactions from Weight of Attachment Equipment
	✓	The Attachment of internal
	✓	The Attachment of Vessel Supports (Skirt, Leg, Saddles, etc)
	✓	The Attachment of Lifting Lugs
	✓	Cyclic and Dynamic Reactions Due to Pressure
	✓	Cyclic and Dynamic Reactions Due to Thermal variations
	✓	Cyclic and Dynamic Reactions Due to Equipment Mounted on the Vessel
	✓	Cyclic and Dynamic Reactions Due to Mechanical Loading
	✓	Wind Reactions
	✓	Seismic reactions
	✓	Impact Reactions such as those due to Fluid Shock
	✓	Temperature Gradients
	✓	Differential Thermal Expansion
	✓	Abnormal Pressure, such as cause by Deflagration

REVIEWED: JTG
 Revision: 0

PAGE 5



CALCULATIONS SHEET	Date: 22-Abr-13 Job Number: 0
-------------------------------	----------------------------------

CALCULATIONS:

Shell Cylinder

Component: Cylinder
 Material Specification: SA 240 T-304L
 Material Stress allowable at design temperature: $S = 16700$ psi
 Material Test Impact: Exempt per UHA-51 (d)(1)(a),(e) and (f)
 Post Weld Heat Treat: Exempt per UHA-32

Corrosion Allowance: $C = 0.00$ in

Radiography:
 Category A Joints: none: $E_s = 1.00$
 Category B Joints: none: $E_{sc} = 1.00$

Hardware Data:
 Internal radius: $R = 20.512$ in
 Nominal thickness: $t_s = 0.375$ in
 Line of Support Length: $L_s = 51.2$ in

Design data:
 Internal Design Pressure: $P_i = 287.904$ psi
 External Design Pressure: $P_e = 68.268$ psi

Static liquid head
 $h_w = 51.200$ in
 $P_h = \rho \cdot h_w$ $\rho = 0.036 \frac{\text{lb}_f}{\text{in}^3}$
 $P_h = 1.843$ psi

REVIEWED: JTG
 Revision: 0

PAGE 6



CALCULATIONS Date: 22-Abr-13
SHEET Job Number: 0

Infernal Pressure

Longitudinal Joints
 Design Thickness (t): UG-27 (c)(1) Circumferential Stress (Longitudinal Joints)
 (Operating, hot and Corroded at temp= 212 degF)

$P_i = 287.904 \text{ psi}$ $R = 20.512 \text{ in}$ $S = 16700 \text{ psi}$ $E_{sc} = 1.00$

$C = 0.000 \text{ in}$ $P_n = 1.843 \text{ psi}$

$$t = \frac{(P_i + P_n)R}{S E_{sc} - 0.6(P_i + P_n)} + C \quad t = 0.360 \text{ in}$$

Maximum allowable Pressure (P): UG-27 (c)(1) Circumferential Stress (Longitudinal Joints)
 (Operating, hot and Corroded at temp= 212 degF)

$S = 16700 \text{ psi}$ $E_{sc} = 1.00$ $t = 0.360 \text{ in}$ $R = 20.512 \text{ in}$

$C = 0.000 \text{ in}$

$$P = \frac{S E_{sc} (t - C)}{R + 0.6(t - C)} \quad P = 289.747 \text{ psi}$$

Circumferential Joints
 Design Thickness (t): UG-27 (c)(2) Circumferential Stress (Longitudinal Joints)
 (Operating, hot and Corroded at temp= 212 degF)

$P_i = 287.904 \text{ psi}$ $R = 20.512 \text{ in}$ $S = 16700 \text{ psi}$ $E_{sc} = 1.00$

$C = 0.000 \text{ in}$ $P_n = 1.843 \text{ psi}$

$$t = \frac{(P_i + P_n)R}{2 S E_{sc} - 0.4(P_i + P_n)} + C \quad t = 0.177 \text{ in}$$

$f = 0.375 \text{ nominal thickness}$

REVIEWED: JTG
 Revision: 0

PAGE 7



CALCULATIONS SHEET

Date: 22-Apr-13
Job Number: 0

Maximum allowable Pressure (P): UG-27 (c)(1) Circumferential Stress (Longitudinal Joints)
(Operating, hot and Corroded at temp= 212 degF)

S= 16700 in E_{pc} = 1.00 t = 0.3750 R= 20.512

C= 0.000

$$P = \frac{2.5 E_{pc} (t - C)}{R + 0.4(t - C)} \quad P = 615.116 \text{ psi}$$

External Pressure
Maximum Allowable External Working Pressure (Hot and Corroded at temp = 212 degF) UG-28 (c)

R= 20.512 in t_s = 1.250 in L_s = 26.100 in

$$D_o = 2(R + t_s)$$

D_o = 43.524

L_s = 26.100 in

$$\frac{L_s}{D_o} = 0.600$$

t_s = 1.250 in

$$\frac{D_o}{t_s} = 34.819$$

From Fig. G: A = 0.080000 in

From Fig. HA-4 B = 11000 psi

$$P_a = \frac{3B}{4 \left[\frac{D_o}{t_s} \right]} \quad P_a = 421.224 \text{ psi}$$

REVIEWED: JTG
Revision: 0

PAGE 8



Calculations SHEET	Date: 22-Abr-13 Job Number: 0
-------------------------------	----------------------------------

TOP HEAD

Component: Torispherical Head
 Material Specification: SA-240 T-304L
 Material Stress allowable at design temperature: S = 16700 psi
 Material Test Impact: Exempt per UHA-51 (d)(1)(j), (e) and (f)
 Post weld Heat Treat: Exempt per UHA-32

Corrosion Allowance: C = 0.000 in
 Radiography: Category A Joints: none Eh = 1.00

Hardware Data:
 Dish Radius: L = 40.945 in
 Inside Knuckle radius: r = 2.05 in
 Head thickness: th = 0.750 in

Design data:
 Internal Design Pressure: P_i = 287.904 psi
 External Design Pressure: P_e = 68.268 psi

Internal Pressure
 Design Thickness (Hot and Corroded at temp = 212 degF) 1-4(d)

P_i = 287.904 psi L = 40.945 in S = 16700 psi E_n = 1.00 r = 2.047 in
 C = 0.000 in

$$t = \frac{0.885 P_i L}{S E_n - 0.1 P_i} \quad t = 0.626 \text{ in}$$

REVIEWED: JTG
 Revision: 0

PAGE 9



CALCULATIONS
SHEET

Date: 22-Apr-13
 Job Number: 0

Maximum Allowable Working Pressure (Hot and Corroded at temp = 211.73 degF) 1-4(d)

C= 0.000 in L= 40.945 in S= 16700 psi Eh= 1.00 r= 2.047 in

t= 0.626 in

$$P = \frac{S E_y t}{0.885 L + 0.1 t (0.6 t - C)} \quad P = 267.904 \text{ psi}$$

External Pressure

Maximum Allowable Working Pressure (Hot and Corroded at temp = 211.7 degF) UG-33(e)

L= 40.945 in f_n= 0.750 in C= 0.000 in

A= $\frac{0.125}{\frac{L}{f_n}}$ A= 0.002290

From Fig. HA-4 B= 8000 psi

$$P_a = \frac{3 B}{4 \left(\frac{D_o}{t_s} \right)} \quad P_a = 109.904 \text{ psi}$$

REVIEWED: JTG
 Revision: 0



CALCULATIONS SHEET	Date: 22-Abr-13 Job Number: 0
-------------------------------	----------------------------------

BOTTOM HEAD

Component: Torispherical Head
 Material Specification: SA-240 T-304L
 Material Stress allowable at design temperature: S= 16700 psi
 Material Test Impact: Exempt per UHA-51 (d)(1)(d), (e) and (f)
 Post weld Heat Treat: Exempt per UHA-32

Corrosion Allowance: C= 0.000 in
 Radiography: Category A Joints: none Eh= 1.00

Hardware Data:
 Dish Radius: L= 40.945 in
 Inside Knuckle radius: r= 2.047 in
 Head thickness: f_n= 0.750 in

Design data:
 Internal Design Pressure: P_i= 287.904 psi
 External Design Pressure: P_e= 68.268 psi

Static liquid head:
 h_w= 51.200 in
 P_n= ρ · h_w
 P_n= 1.843 psi

Internal Pressure
 Design Thickness (Operating, hot and Corroded at temp= 211.73 degF) 1-4(d)
 P_i= 287.904 psi L= 40.945 in S= 16700 psi Eh= 1.00 P_n= 1.843
 C= 0.000 in

$$f = \frac{0.885 P_i L}{S E_s - 0.1 P_i} \quad f = 0.630 \text{ in}$$

REVIEWED: JTG
 Revision: 0

PAGE 11



CALCULATIONS SHEET	Date: 22-Abr-13 Job Number: 0
-------------------------------	----------------------------------

Maximum Allowable Working Pressure (Hot and Corroded at temp = 211.73 degF) 1-4(d)

C= 0.000 in L= 40.945 in S= 16700 psi Eh= 1.00

f= 0.630 in

$$P = \frac{S E_y f}{0.885 L + 0.1 f + 0.6(f - C)} \quad P = 289.744 \text{ psi}$$

External Pressure
 Maximum Allowable Working Pressure (Hot and Corroded at temp = 211.7 degF) UG-33(e).

L= 40.945 in f_n= 0.750 in C= 0.000

$$A = \frac{0.125}{\frac{L}{f_n}} \quad A = 0.002290$$

From Fig. HA-4 B= 8000 psi

$$P_a = \frac{3B}{4 \left(\frac{D_o}{f_s} \right)} \quad P_a = 109.904 \text{ psi}$$

REVIEWED: JTG
 Revision: 0



II.1- DISEÑO PROPUESTO

