



UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE CATALUNYA
BARCELONATECH
Escola d'Enginyeria de Barcelona Est

TRABAJO DE FINAL DE GRADO

Grado en Ingeniería Química

ACETONITRILO-AGUA:

**ESTUDIO Y SIMULACIÓN DE PROCESOS DE SEPARACIÓN DE
UNA MEZCLA AZEOTRÓPICA**



Memoria y Anexos

Autor/a: Jaume Gratacos Gutierrez
Director/a: Moisés Graells Sobre
Co-Director/a: Antonio Espuña Camarasa
Convocatoria: Enero 2023

Resumen

Los procesos de separación son una parte muy importante del sector químico, hay un gran número de mezclas que no se pueden separar por los métodos convencionales debido a que presentan azeótropos que impiden la obtención de los productos con el nivel de pureza requerido para las diferentes aplicaciones en las que sean necesario.

En este proyecto se realiza un estudio a con la mezcla acetonitrilo-agua que se obtiene como subproducto de la obtención de acrilonitrilo. Para encontrar un método eficiente de obtención de acetonitrilo (compuesto de gran importancia en la industria farmacéutica y como solvente) se comparan diferentes opciones viables de separación de mezclas que presentes un punto azeotrópico, donde se ha acabado eligiendo las dos más prometedoras que en este caso son la separación por cambios de presión y la destilación extractiva para diseñar unos procesos optimizando todos los elementos que conformen el sistema a través del simulador ASPEN PLUS V12.

Finalmente, se analizan diferentes opciones para reducir la energía requerida por las diferentes columnas de destilación e intercambiadores de calor y se calculan tanto los costes como el impacto ambiental que puedan tener cada una de las simulaciones para poder discernir qué proyecto finalmente sería el más adecuado para llevarse a cabo.

Conceptos clave – Acetonitrilo, Agua, Procesos de separación, Azeótropo, *ASPEN PLUS*.

Resum

Els processos de separació són una part molt important del sector químic, hi ha un gran nombre de mesclades que no es poden separar pels mètodes convencionals pel fet que presenten azeotrops que impedeixen l'obtenció dels productes amb el nivell de puresa requerit per a les diferents aplicacions en les quals siguin necessaris.

En aquest projecte es realitza un estudi amb la barreja acetonitril-aigua que s'obté com a subproducte de l'obtenció d'acrilonitril. Per a trobar un mètode eficient de separació d'acetonitril (compost de gran importància en la indústria farmacèutica i com a solvent) es comparen diferents opcions viables de separació de mesclades que presentis un punt azeotròpic. S'han triat les dues més prometedores que en aquest cas són la separació per canvis de pressió i la destil·lació extractiva per a dissenyar uns processos optimitzant tots els elements que conformin el sistema a través del simulador *ASPEN PLUS V12*.

Finalment, s'analitzen diferents opcions per a reduir l'energia requerida per les diferents columnes de destil·lació i bescanviadors de calor i es calculen tant els costos com l'impacte ambiental que puguin tenir cadascuna de les simulacions per a poder discernir quin projecte finalment seria el més adequat per a dur-se a terme.

Conceptes clau – Acetonitril, Aigua, Processos de separació, Azeotrop, *ASPEN PLUS*.

Abstract

Separation processes are a key part of the chemical sector. There are a large number of mixtures that cannot be separated by conventional methods because they have azeotropes that prevent products from being obtained with the level of purity required for the different applications in which they are necessary.

In this project, a study is realized on the acetonitrile-water mixture that is acquired as a by-product of acrylonitrile synthesis. In order to find an efficient method for obtaining acetonitrile (a compound of great importance in the pharmaceutical industry and as a solvent) different viable options are compared for separating mixtures with an azeotropic point, where the two most promising options in this case are pressure swing and extractive distillation which are design processes optimizing all the elements that make up the system through the ASPEN PLUS V12 simulator.

Finally, different options to reduce the energy required by the different distillation columns and heat exchangers are analyzed as same as the costs and environmental impact of each of the simulations in order to discern which project would finally be the most suitable to be carried out.

Key concepts - Acetonitrile, Water, Separation Processes, Azeotrope, ASPEN PLUS.

Agradecimientos

Primeramente, agradecer a mi director y codirector de estudio, los profesores Moisès Graells y Antonio Espuña respectivamente. Me han prestado las diferentes herramientas necesarias para realizar este proyecto, además de resolver las diferentes dudas que me han ido surgiendo durante el proceso de este trabajo.

También agradecer a mis amigos y familia todo el apoyo moral que ha sido necesario durante el proyecto para no rendirme y finalizar todos los objetivos que me proponía, pero sobre todo agradecer a mi pareja que ha sido la persona que ha estado a mi lado y más apoyo me ha mostrado. Especial mención a mi compañero Iván Andreu y amigo Juan Sandalinas que han estado en cualquier momento para echarme una mano y poder completar este proyecto.

Glosario

Acetonitrilo	ACN
Agua	H ₂ O
1-cloropropano	1CLP
Equilibrio líquido-líquido	ELL
Equilibrio líquido-vapor	ELV
Fracción molar componente i	x, y
Tasa de destilado	D
Relación de reflujo	RR
Número de platos de columna	N_p
Columna i	CLM
Condensador	C
Rehervidor (<i>Reboiler</i>)	R
Costes de instalación	CI
Costes de platos	CP
Costes de mantenimiento	CM
Costes de operación	CO
Costes de servicio	CS
Costes totales	CT

Índice

RESUMEN	1
RESUM	2
ABSTRACT	3
AGRADECIMIENTOS	4
GLOSARIO	5
1. PREFACIO	9
1.1. Origen del trabajo	9
1.2. Motivación	9
2. INTRODUCCIÓN	11
2.1. Objetivos del trabajo.....	11
2.2. Alcance del trabajo	11
3. MARCO TEÓRICO	13
3.1. Procesos de separación	13
3.2. Equilibrio	14
3.2.1. Equilibrio líquido-vapor (ELV).....	14
3.2.2. Equilibrio líquido-líquido (ELL).....	15
3.2.3. Mezclas ideales.....	16
3.3. Azeótropos	16
3.3.1. Mapas de curvas residuales	18
3.4. Métodos de separación de equilibrio.....	19
3.4.1. Medidas de la separación.....	19
3.5. Técnicas de separación de azeótropos.....	20
3.5.1. Cambios de presión/ <i>Pressure Swing</i>	20
3.5.2. Destilación con agente de separación	22
3.5.3. Destilación azeotrópica heterogénea	22
3.5.4. Destilación azeotrópica homogénea.....	23
3.5.5. Destilación extractiva	23
3.5.6. Destilación por sales.....	24
3.5.7. Destilación con líquidos iónicos	25
3.5.8. Destilación reactiva	26
3.5.9. <i>Chemical Drying</i> (Destilación y acción química)	27

3.5.10. Pervaporación.....	27
3.6. Acetonitrilo.....	28
3.6.1. Azeótropo Acetonitrilo-Agua	29
4. METODOLOGÍA	30
4.1. Software: <i>ASPEN PLUS V12</i>	30
4.2. Validación del modelo termodinámico	30
4.3. Simplificaciones.....	31
5. SIMULACIÓN DE LOS PROCESOS DE SEPARACIÓN	33
5.1. Método 1 (<i>Pressure Swing</i>).....	33
5.1.1. Elección del método	33
5.1.2. Paquete Termodinámico.....	34
5.1.3. Esquema del sistema	35
5.1.4. Explicación del sistema.....	36
5.1.5. Costes del sistema	39
5.2. Método 2 (Destilación Extractiva)	47
5.2.1. Elección del método	47
5.2.2. Paquete termodinámico	48
5.2.3. Esquema del sistema	49
5.2.4. Explicación del sistema.....	50
5.2.5. Costes del sistema	52
5.3. Futuras mejoras	56
6. ANÁLISIS DEL IMPACTO AMBIENTAL	57
7. CONCLUSIONES	58
8. BIBLIOGRAFÍA	60
9. ANEXO A	62
A1. Método 1 (<i>Pressure Swing</i>).....	62
A2. Método 2 (Destilación Extractiva)	89
10. ANEXO B	91
B1. Método 2 (Destilación Extractiva)	91
B2. Cálculo de costes del método 1	93
B3. Cálculo de costes del método 2	94
11. ANEXO C	96

C1.	Integración energética del método 1	96
C2.	Integración energética del método 2	97
12. ANEXO D	_____	99
D1.	Ficha de seguridad del acetonitrilo.....	100
D2.	Ficha de seguridad del agua	109
D3.	Ficha de seguridad del 1-cloropropano.....	122

1. Prefacio

Este apartado sirve como nota de presentación para definir el estudio objeto de proyecto, destacar algún aspecto en particular, mostrar su relación con trabajos relacionados o trazar las circunstancias históricas que han motivado el proyecto.

1.1. Origen del trabajo

El origen del trabajo viene definido principalmente por un concepto que se ha empleado muchas veces durante la carrera, el azeótropo, desde el principio de la carrera se ha definido que es un azeótropo y lo que conlleva que una mezcla presente un punto azeotrópico en caso de querer separarla. Es por eso que se decidió optar por un proyecto donde se tuviera que superar un azeótropo para cumplir el objetivo final del mismo.

No solo es el concepto de azeótropo, también el hecho de entender cómo funciona una columna de destilación o todo lo relacionado con los intercambiadores de energía y los procesos de integración energética para ahorrar lo máximo posible en la creación de un sistema. En general, han sido una gran cantidad de conceptos que se han aprendido durante la carrera en diferentes asignaturas los que han propiciado el realizar este tipo de proyecto.

1.2. Motivación

La motivación desde el punto de vista personal se basa en la realización de proyectos en asignaturas como simulación de procesos químicos o ingeniería de procesos químicos donde a través de un simulador se diseñaban diferentes sistemas con elementos como podrían ser reactores, columnas de destilación, compresores, bombas, etc.

Los simuladores como *ASPEN HYSYS* y *ASPEN PLUS* son muy utilizados en el sector de la industria química y es por eso que desempeñarse con ellos con soltura y facilidad puede ser de gran ayuda para el futuro, así que realizar un proyecto de estas características es útil para adquirir la habilidad necesaria para poder trabajar con soltura con este tipo de simuladores.

Desde un punto de vista de interés más global, es decir, en el momento que se tenía claro el tipo de trabajo que se quería realizar era necesario especificar qué tipo de simulación se quería realizar, y en ese momento es cuando el director y codirector comentaron el hecho de estudiar una mezcla que contenga un azeótropo para realizar una separación de los componentes. Entonces se decidió la mezcla acetonitrilo-agua, debido a sus características como que su sensibilidad a la presión o también por los

diferentes usos industriales que tiene el acetonitrilo que lo hacen un componente muy interesante con el que trabajar, ya que en muchos casos el acetonitrilo es necesario a niveles de pureza elevados.

2. Introducción

El acetonitrilo es un producto muy utilizado en muchos sectores de la industria que lo hace un componente con interés para obtenerlo con altos niveles de pureza y para eso es necesario realizar una separación del agua, pero este proceso no se puede realizar con los métodos de separación convencionales como puede ser una destilación simple. Han de ser empleados métodos más sofisticados que sean capaces de superar la barrera que supone el que la mezcla tenga un azeótropo, así que analizando las diferentes opciones se puede extraer un proceso que facilite la elección del método más adecuado para esta mezcla.

2.1. Objetivos del trabajo

El objetivo de este trabajo consiste en obtener un sistema que consiga separar el acetonitrilo del agua y que la pureza del acetonitrilo sea mayor al 99%. Pero no basta solo con que el sistema cumpla esta condición, lo que se busca es que se use el método más eficiente de las opciones estudiadas y por eso se crean más de una simulación para así compararlas y ver cuáles de las opciones escogidas es la más rentable.

Para cumplir el objetivo principal se tiene que analizar el sistema desde dos vertientes. La primera es analizar la mezcla y sus características para que den una primera idea de que opciones podrían ser las mejores. La segunda es investigar todas las opciones posibles con las que la mezcla se pueda separar para que el análisis sea más completo. Con toda esa información realizar descartes previos o hipótesis de qué métodos son teóricamente los más óptimos.

Como objetivos secundarios del trabajo se pueden destacar 3. En primer lugar, encontrar un modelo termodinámico que fuera capaz de aproximarse lo máximo posible a los valores experimentales de la mezcla para que los sistemas se aproximaran lo más posible a la realidad. Otro objetivo era el de realizar un análisis de la energía empleada en los dos sistemas y valorar diferentes opciones que consigan aprovechar la mayor cantidad de energía posible y finalmente realizar un análisis del impacto ambiental y la peligrosidad que puedan tener los productos.

2.2. Alcance del trabajo

En este proyecto se pretende realizar una búsqueda de los diferentes métodos que existen para superar el azeótropo e implementar la mejor opción en una mezcla en concreto. De todas las opciones que existen muchas se descartan previamente debido a la dificultad que representan con las herramientas que se tienen para este proyecto. Entonces, con el tiempo que se tiene se ha decidido

comparar los dos métodos que se suponen que podrían ser los más eficientes para la mezcla. En resumen, este trabajo pretende encontrar el sistema más eficiente posible para realizar la separación y si es posible encontrar un método que facilite la elección para otras mezclas utilizando siguiendo un procedimiento parecido para el empleado en este caso.

Entonces con la mezcla acetonitrilo-agua se podría entender como un proyecto donde una empresa que obtiene esta mezcla como subproducto quiere realizar la separación para vender el acetonitrilo puro, pero para eso necesitan saber qué método emplear de todos los que hay y en resumen que método les proporcionara más beneficio o unos costes menores.

3. Marco Teórico

3.1. Procesos de separación

La Ingeniería Química desde una perspectiva general se puede dividir en tres tipos de procesos industriales básicos:

- **Transporte:** procedimiento que se realiza a través de bandas, tuberías u otros conductos dependiendo de la fase del producto con el que se esté trabajando.
- **Transformación:** método donde se parte de una o más sustancias para acabar obteniendo otra u otras completamente diferentes de las originales.
- **Procesos de separación:** actividades que tienen como objetivo separar las diferentes sustancias que provengan de un flujo de alimentación o materia prima para obtener productos distintos. [1]

Los procesos de separación son de gran importancia en la industria de hoy en día, dado que es muy difícil encontrar compuestos o elementos en estado puro de forma natural. En las técnicas de separación es fundamental aprovechar ciertos fenómenos o condiciones con las que se pueda producir una segregación en las composiciones de los compuestos. En la actualidad existen una gran cantidad de métodos de separación de componentes que se pueden recoger en tres grandes categorías:

- **Separación por velocidad:** se basa en aprovechar la diferencia de velocidad de transferencia entre los diferentes componentes de la mezcla a través de una membrana, como podría ser el caso de la diálisis, donde un soluto atraviesa una membrana porosa y gracias a un gradiente de composición se impide que las sustancias de mayor tamaño pasen por el poro. Otra opción sería la de aplicar un campo como por ejemplo en la electrólisis que se crea un campo eléctrico que descompone a uno de los componentes en función de la presencia de isótopos. [2]
- **Separación por métodos mecánicos:** se utilizan principalmente propiedades como la densidad (decantación de compuestos inmiscibles donde uno es más denso que el otro para poder separarlos), el tamaño de las partículas (filtración para retener las partículas de un tamaño superior) o el magnetismo a través de imanes (separación magnética).
- **Separación de equilibrio:** este tipo de proceso se fundamenta en la distribución de los diferentes componentes entre las fases, como la diferencia de volatilidad, en la presión de vapor o en la solubilidad en la fase líquida. Las separaciones de equilibrio son las que tienen

una mayor importancia en este proyecto, por lo que se realiza una explicación en profundidad.

3.2. Equilibrio

Para comprender el concepto de la separación de equilibrio es importante conocer que es el estado de equilibrio de una mezcla. Una parte importante de las operaciones de separación de mezclas se basan en crear o añadir una nueva fase. El equilibrio representa la máxima diferencia de concentraciones entre las fases coexistentes donde el objetivo es obtener dos o más fases claramente diferenciadas dependiendo de la cantidad de componentes en la mezcla. Para el diseño de procedimientos de separación, la mayoría de los métodos utilizan el concepto de equilibrio, para delimitar la concentración máxima alcanzable. [2]

Por tanto, es necesario conocer los fenómenos relativos al equilibrio de fases. El equilibrio es una condición estática en la cual no ocurren cambios en las propiedades macroscópicas de un sistema, esto implica un equilibrio de todos los potenciales que puedan causar algún cambio en el sistema. La temperatura, la presión y la composición de las fases alcanzan valores finales en los cuales permanecen fijas, por ende el conjunto no presenta variación.

3.2.1. Equilibrio líquido-vapor (ELV)

El equilibrio líquido-vapor es descrito como un sistema donde una sola fase líquida está en equilibrio con su fase vapor, en condiciones de temperatura y presiones bajas y moderadas a la vez que se encuentren alejadas del punto crítico viene dado por [3]:

$$y_i \cdot P = x_i \cdot \gamma_i(T, X) \cdot P_i^{Sat}(T) \quad i = 1, 2 \dots n \quad (\text{Eq. 3.1})$$

Dónde:

- x_i, y_i : Composición del líquido y el vapor del componente i.
- P, T : Presión y temperatura del sistema.
- P_i^{Sat} : Presión de saturación del componente i.
- γ_i : Coeficiente de actividad en la fase líquida del componente i.

Si el valor del coeficiente de actividad es igual a 1 significa que la mezcla es ideal, si el valor es inferior o superior a 1 es que las mezclas ideales presentan desviaciones positivas o negativas de la ley de Raoult-Dalton. Si las desviaciones que se presentan son tan grandes que la temperatura de ebullición o la presión de vapor presentan un punto extremo en valores de temperatura y presión constante, significa que la mezcla es azeotrópica. [3]

El ELV es clave para poder diseñar procesos de separación y entender bien el comportamiento que tienen entre sí los productos de la mezcla, y para eso es importante entender los gráficos ELV que presenten los sistemas con los que se trabaje. Estos diagramas sirven para evaluar el estado termodinámico, propiedades y composición de la fase líquida y vapor de la mezcla a presión o temperatura constante. Los gráficos representativos de una mezcla binaria constan de tres fases principales (de arriba abajo en base a la Figura 3.1)

1. La zona de vapor sobrecalentado (*Superheated vapour*).
2. La zona donde están presentes vapor y líquido (*Vapour and liquid*).
3. La zona de líquido comprimido (*Subcooled liquid*).

Estos equilibrios también se pueden representar en diagramas X-Y donde los que forman un azeótropo difieren de los gráficos de mezclas binarias ideales. [4]

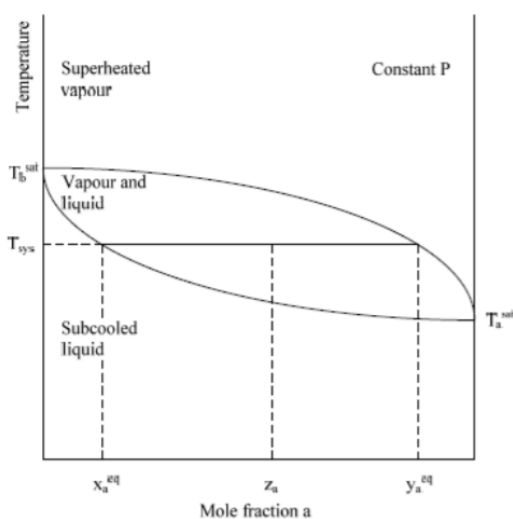


Figura 3.1. Diagrama T-X-Y de un equilibrio vapor-líquido. [4]

3.2.2. Equilibrio líquido-líquido (ELL)

Este tipo de equilibrio se basa en dos líquidos que son incapaces de mezclarse por completo, estos pueden ser parcialmente miscibles o inmiscibles, y que acaban derivando en dos fases líquidas coexistentes de diferente composición.

Entender los datos de un equilibrio líquido-líquido es esencial para poder realizar una separación eficiente de la mezcla y por eso es primordial realizar un análisis sobre el balance de masa y de los cálculos de transferencia de masa cuando se quiera realizar un diseño óptimo del sistema de separación. [3]

3.2.3. Mezclas ideales

Una mezcla ideal es una solución en la que su valor de entalpía es igual a cero, cuanto más se aproxime una mezcla a este valor más se acerca a tener un comportamiento ideal. Para confirmar que una disolución es ideal el valor del coeficiente de actividad de la fase líquida ha de ser igual a 1.

Una mezcla ideal también tiene que cumplir las siguientes características [3]:

- Las fuerzas intermoleculares promedio de atracción y repulsión en la solución no cambian al mezclar los componentes.
- El volumen de la solución varía linealmente con la composición.
- No hay absorción ni evolución de calor al mezclar los componentes. Sin embargo, en el caso de gases que se disuelven en líquidos, este criterio no incluye el calor de condensación del gas al estado líquido.
- La presión total de vapor de la solución varía linealmente con la composición expresada en fracción mol.

3.3. Azeótropos

Un azeótropo es una mezcla de como mínimo dos sustancias volátiles que forman fases en equilibrio de líquido-vapor que puestas en unas condiciones de presión, temperatura y composición, se comportan como si fueran un único componente. La composición en la que ocurre este fenómeno es conocida como punto azeotrópico y es una limitación para poder realizar la separación deseada por el hecho de que no hay diferencia entre la fase vapor y la fase líquida, provocando que los métodos de separación convencionales como la destilación simple no sean aptos. [5]

Los azeótropos se pueden categorizar según el nombre de compuestos que caracteriza la mezcla (binario y ternario), según su miscibilidad (heterogéneos y homogéneos) y su punto de ebullición (positivos y negativos).

- **Azeótropos binarios:** son mezclas azeotrópicas formadas por dos compuestos.
- **Azeótropos ternarios:** mezclas constituidas por tres compuestos.

- **Azeótropos heterogéneos:** consiste en un azeótropo donde la fase vapor coexiste con dos fases líquidas debido a que en fase líquida los dos componentes son inmiscibles entre sí.

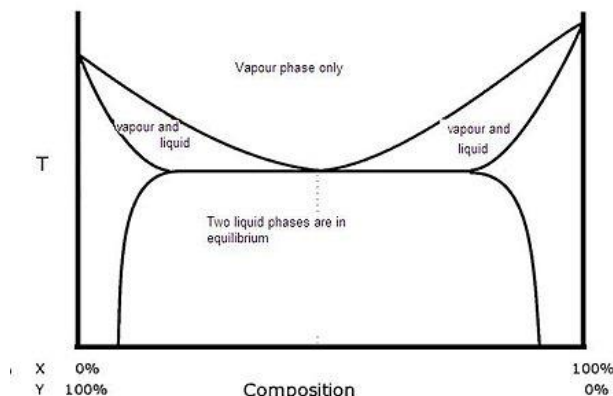


Figura 3.2. Diagrama de un azeótropo heterogéneo. Fuente: tok.wiki. Heteroazeótropo Ejemplos de heteroazeótropos y Destilación heteroazeotrópica continua. Recuperado 25 de noviembre de 2022, de <https://hmong.es/wiki/Heteroazeotrope>

- **Azeótropos homogéneos:** en este caso los constituyentes de la mezcla sí que son miscibles y, por lo tanto, solo existe una fase líquida.
- **Azeótropos positivos:** presentan desviaciones positivas en la ley de Raoult y el punto de ebullición es menor que el de los compuestos por separados. Un ejemplo podría ser la mezcla etanol-agua en el punto de 96% etanol y 4% agua a presión atmosférica, donde el azeótropo está situado a 78.15 °C y si observamos a los productos por separado el agua hierve a 100.02 °C y el etanol a 78.40 °C. [6]

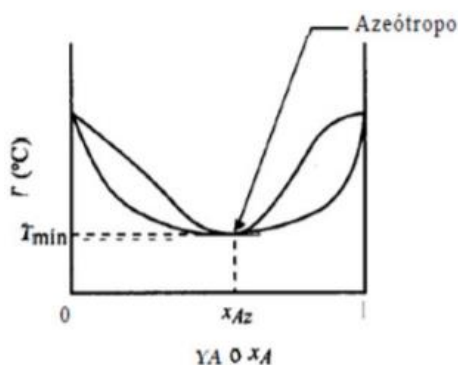


Figura 3.3. Diagrama de un azeótropo positivo. [3]

- **Azeótropos negativos:** son los que presentan desviaciones negativas en la ley de Raoult, otra característica es que el azeótropo se encuentra a una temperatura más elevada que la de los componentes de la mezcla por separado. Un ejemplo sería la mezcla anilina-fenol cuando la composición es de 58% de anilina y 42% de fenol y a presión atmosférica el azeótropo se encuentra a 186.2 °C y el fenol y anilina puros a 1 atmosfera tienen su punto de ebullición a 181.7 °C y 184.1 °C respectivamente.

3.3.1. Mapas de curvas residuales

Una curva de residuo describe el cambio de composición de la fase líquida de una mezcla durante un proceso de vaporización continuo en condiciones de un equilibrio líquido-vapor. Un conjunto de curvas residuales forman un mapa de curvas residuales.

Estos mapas sirven para analizar lo apto que puede ser un agente de separación para una mezcla azeotrópica. En el mapa se pueden ver representados los puntos de ebullición de los componentes en estado puro y de las mezclas binarias y ternarias. Las trayectorias de las curvas se mueven desde el componente menos volátil hasta el más volátil, al igual que las temperaturas indicadas por las flechas. El diagrama avanza según la temperatura va aumentando y la fase líquida se va volviendo más rica en el componente pesado, y se puede ver afectado por la cinética de las reacciones en caso de que haya en el sistema. [4]

Para explicar cómo se dibuja un mapa de curvas de residuo se considera una mezcla ternaria de los componentes A, B, C y que forman dos azeótropos binarios y ninguno ternario. En los vértices se marcan los componentes puros y su temperatura, también se marcan en el mapa los azeótropos que existan con sus respectivas temperaturas. Las curvas de residuo se originan en la mezcla ligera (azeótropo AB) y se dirigen hasta el componente más pesado entre el B o el C creando un límite imaginario que conecta los dos azeótropos binarios, la curva divisoria se conoce como límite de destilación. Es importante comprobar el comportamiento del sistema, ya sea un equilibrio líquido-líquido o vapor-líquido. [4]

El comportamiento de las curvas de residuo en las proximidades depende de su estabilidad. Si todas las curvas apuntan con la flecha hacia los puntos fijos, ese es un nudo estable. En el caso de que todas las flechas apunten en dirección contraria al punto, se le conoce como nudo inestable. En caso de que algunas flechas apunten hacia el punto y otras en dirección contraria, se conoce como punto de silla. [7]

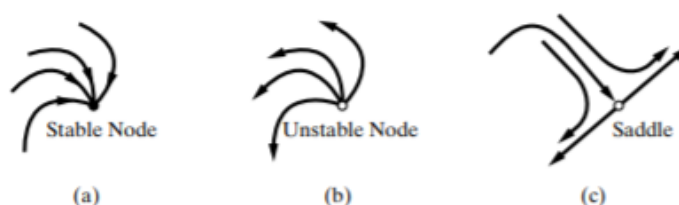


Figura 3.4. Ejemplos de Nudo estable (a), Nudo inestable (b), Punto de silla (c). [7]

Para saber que un componente es factible como agente de separación se tienen que dar las siguientes condiciones en la estructura del mapa de curvas residuales [4]:

- El agente de separación no debe dividir los componentes de la mezcla en diferentes regiones de destilación.
- El agente de separación induzca una fase de separación líquido-líquido, en otras palabras, que exista una línea de interconexión que cruce el límite de destilación.

Si se cumplen estas condiciones y el agente de separación es apto, se tiene que comparar con otros solventes que también cumplan las condiciones y escoger el más prometedor para la simulación.

3.4. Métodos de separación de equilibrio

Una vez explicado los diferentes conceptos del equilibrio es importante explicar los diferentes métodos que existen en las separaciones de equilibrio, centrándose en las técnicas de separación de azeótropos donde se explicaran los procedimientos más utilizados en la industria.

3.4.1. Medidas de la separación

Antes de explicar las diferentes técnicas es importante conocer las diferentes medidas de separación de azeótropos que existen y que sirven para poder cuantificar el grado de separación alcanzado en un proceso y así poder comparar las diferentes soluciones posibles para un problema. Las diferentes medidas que se utilizan son [2]:

- **Pureza:** Cantidad relativa del componente o componentes que interesa como producto final que está expresada como concentración, fracción molar o másica, etc.
- **Factor de separación:** Es la relación entre fracciones molares de ambos en el producto 1 dividida por la relación en el producto 2 para los componentes i y j.

$$\alpha_{ij} = \frac{x_i^{[1]}/x_j^{[1]}}{x_i^{[2]}/x_j^{[2]}} \quad (\text{Eq. 3.2})$$

Dónde:

- α : Factor de separación.
- x: Fracción másica, concentración o caudal.

En caso de que $\alpha_{ij} = 1$ la separación entre los dos componentes en los productos es inexistente. Cuanto mayor sea el valor de α_{ij} o de $1/\alpha_{ij}$, mayor es la separación conseguida, en el primer caso es i el que se concentra en el producto 1, mientras que en el segundo lo hace el componente j. El orden de los productos se elige para que el factor de separación de un valor mayor a 1.

En caso de tener un ELV el factor de separación es conocido como volatilidad relativa, que es igual al cociente de las relaciones de equilibrio para los dos componentes.

$$\alpha_{ij} = \frac{y_i/y_j}{x_i/x_j} = \frac{y_i/x_i}{y_j/x_j} = \frac{K_i}{K_j} \quad (\text{Eq. 3.3})$$

- **Rendimiento de la separación:** Es la relación entre la cantidad obtenida de un componente en un producto frente a la cantidad que se encuentra presente en la alimentación.

$$\eta_i = \frac{f_{1i}}{f_{1A}} \cdot 100 \quad (\text{Eq. 3.4})$$

- **Eficacia:** Relación entre la separación que se ha obtenido y la máxima posible. Esta relación se suele utilizar para observar la eficacia de etapas concretas de un proceso. Para un componente i en el producto o fase 1, sería:

$$E_{M1i} = \frac{x_{1S,i} - x_{1E,i}}{x_{1S,i}^* - x_{1E,i}} \quad (\text{Eq. 3.5})$$

Dónde:

- E: Entrada.
- S: Salida.
- *: máxima concentración posible bajo las condiciones consideradas.

La eficacia mide el efecto de variables de la operación o diseño en la separación ideal que se podría obtener, lo que implica determinar cuál sería esa separación ideal.

3.5. Técnicas de separación de azeótropos

Para poder obtener las composiciones de los productos deseadas cuando existe un azeótropo una destilación simple no es suficiente y por eso existen métodos más complejos para poder superar el azeótropo de la mezcla. Actualmente, se sigue investigando para obtener métodos cada vez más eficientes para separar estas disoluciones con la mayor efectividad posible y un coste reducido. Las soluciones que se utilizan actualmente podrían dividirse en tres tácticas. La primera, es realizar oscilaciones de presión de la mezcla, la segunda se basa en añadir un tercer componente para poder romper el azeótropo y en la última se utiliza una membrana que sea más permeable que uno de los dos productos para separarlos. Es importante destacar que en muchos casos se realizan combinaciones de las diferentes técnicas que se utilizan en la industria, dado que es necesario para obtener la pureza deseada o para aumentar la eficiencia del proceso.

3.5.1. Cambios de presión/*Pressure Swing*

La destilación por cambios de presión se basa en el desplazamiento del azeótropo, efectuando una modificación suficiente de la presión, tanto aumentarla como disminuirla, para poder alejarlo de la región de interés de la separación que se esté realizando. Para algunas mezclas, realizar este cambio de presión puede suponer un gran cambio en la composición del azeótropo para poder completar la separación. Para que el proceso sea viable sería necesario una variación del punto azeotrópico de como mínimo el 5%. [8]

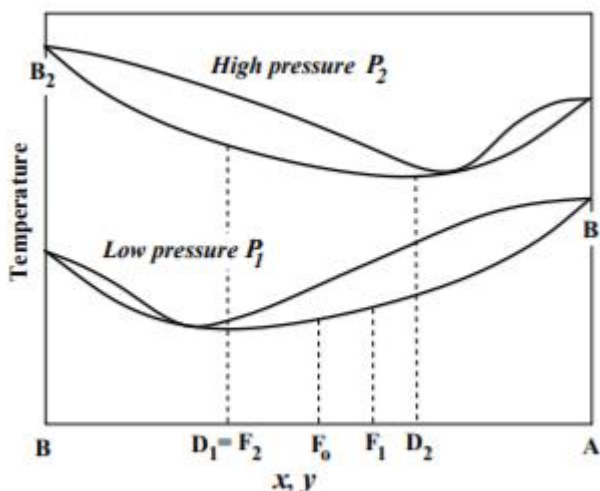


Figura 3.5. Diagrama temperatura-presión para un azeótropo sensible a los cambios de presión. [8]

El proceso se inicia introduciendo el corriente de entrada por la columna de baja presión, de la primera columna se obtiene un corriente de residuo con un nivel de pureza relativamente alto de uno de los dos componentes y un destilado que se sitúa cerca del azeótropo. Con el destilado de la anterior columna se realiza un cambio de presión a partir de una bomba o calentador y se introduce en la segunda columna, columna de alta presión. En este punto el corriente ha conseguido “esquivar” el azeótropo y ya se encuentra a su derecha y en este caso en el destilado se encuentra el azeótropo que en la gran mayoría de las ocasiones se suele recircular al inicio del proceso para mayor eficiencia del proceso, el flujo de residuos de la segunda columna es donde se encuentra el segundo componente con una pureza considerablemente alta. Es decir que los dos productos de interés se obtienen por el corriente de residuo de las dos columnas. [8]

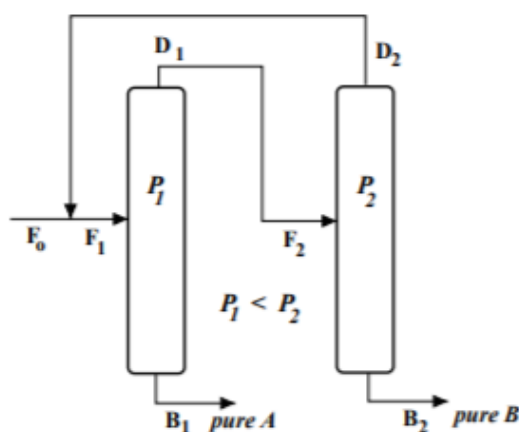


Figura 3.6. Secuencia del proceso de destilación con cambio de presión. [8]

3.5.2. Destilación con agente de separación

La destilación azeotrópica con agente de separación se basa en añadir un nuevo componente a la mezcla que consiga romper el azeótropo, así que para poder realizar un sistema eficiente es necesario realizar una búsqueda exhaustiva del mejor componente posible donde el comportamiento del sistema es clave. Se pueden observar tres tipos de agentes según su punto de ebullición [4]:

- **Heavy entrainer:** agente de separación que tiene un punto de ebullición mayor que el de los dos componentes de la mezcla azeotrópica.
- **Intermediate entrainer:** el punto de ebullición del agente se sitúa entre los puntos de los componentes de la mezcla.
- **Light entrainer:** la temperatura de ebullición de este tipo de agente es inferior respecto a la de los dos componentes a separar.

Otro factor importante es tener en cuenta que procedimiento se emprenderá debido a que según el método que se utilice se introducirá el agente en diferentes puntos del sistema, así que es importante también explicar algunos de los métodos más importantes que utilicen un agente de separación para disolver el azeótropo.

3.5.3. Destilación azeotrópica heterogénea

La destilación azeotrópica heterogénea se realiza cuando existe un equilibrio líquido-líquido en la mezcla que se quiere separar, el agente de separación se concentra en la parte superior de la columna en estado de vapor para que cuando se condense provoque que se genere una segunda fase líquida que se pueda decantar y después recircular a la como un corriente de reflujo. El proceso es posible por el hecho de que el agente divide las fases en diferentes regiones que pueden separarse en un proceso de destilación. La otra fase líquida de la mezcla se obtiene como producto en la segunda columna del proceso en el corriente de residuo. [7]

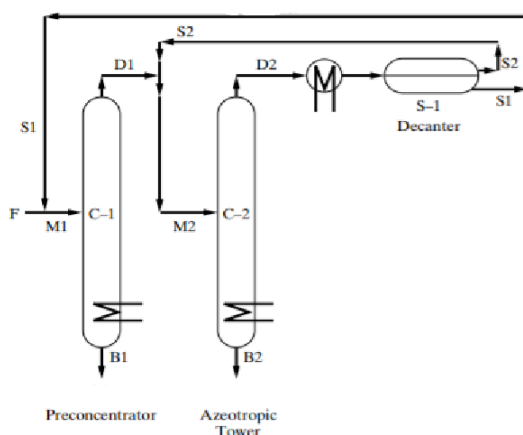


Figura 3.7. Ejemplo de una secuencia del proceso de destilación azeotrópica heterogénea. [7]

Este es un método donde controlar el comportamiento dinámico y el estado estacionario de la secuencia es complejo y difícil de controlar; sin embargo, es un procedimiento eficiente para mezclas azeotrópicas y específicamente las que tienen una volatilidad relativa baja. Otra ventaja es que si el agente separador está situado en la misma región de separación que el azeótropo heterogéneo, la cantidad que se requiere para poder romper el azeótropo es pequeña. [3]

3.5.4. Destilación azeotrópica homogénea

La destilación azeotrópica homogénea se basa en que el agente de separación sea completamente miscible con los componentes de la mezcla inicial, adicionalmente en un diagrama ternario tiene que formar una estructura con un equilibrio líquido-vapor que sea prometedora para la separación, es decir, que en el diagrama se pueda observar que se ha roto el azeótropo que presentaba la mezcla original.

Comparada con la destilación azeotrópica heterogénea, el proceso es más simple debido a que no se utiliza un decantador, ya que en este proceso solo existe una fase líquida. También cabe decir que en el caso de la destilación azeotrópica homogénea hay un menor número de alternativas y además al no tener un equilibrio líquido-líquido el número de destilaciones normalmente es mayor.

3.5.5. Destilación extractiva

La destilación extractiva es un método donde se necesita realizar una separación de dos componentes alterando su volatilidad relativa a partir de una interacción con un compuesto relativamente no volátil. El agente de separación ha de ser introducido de forma continua en la columna por la parte de arriba de la columna para que en todo momento la concentración en todos los platos se mantenga estable.

En el proceso que se utiliza se necesitan dos columnas (considerando el caso más simple, el de una mezcla binaria), una que será la columna de destilación extractiva y una segunda que su función será la de recuperar el agente de separación o solvente. La función de la primera columna es conseguir separar uno de los compuestos de la mezcla y que por el otro conducto quede una solución con el componente restante y el solvente que se introduce en la segunda columna, que como su nombre indica sirve para conseguir el segundo componente puro además de poder recuperar el agente de separación. Finalmente el agente se recircular al inicio para no desperdiciarlo y así no desperdiciarlo, además de conseguir el segundo componente puro.

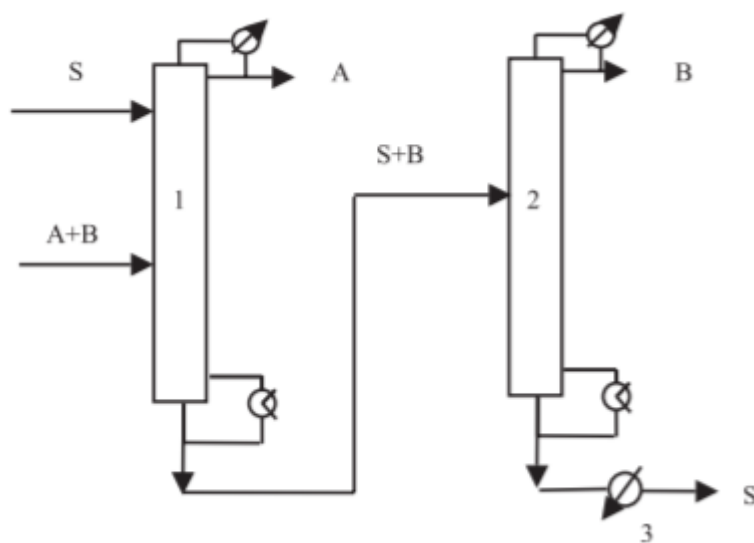


Figura 3.8. Secuencia del proceso de destilación extractiva con dos columnas. Fuente: Lei, Z., Li, C., & Chen, B. (2003). *Extractive distillation: A review. Separation and Purification Reviews*, 32(2), 121–213. <https://doi.org/10.1081/SPM-120026627>

3.5.6. Destilación por sales

La destilación por sales es un tipo de destilación extractiva donde el agente de separación son sales que se añaden directamente en el reflujo líquido y que posteriormente se separan del producto de fondo con una evaporación y una cristalización. Otra forma de introducir el solvente es a partir de una salmuera donde esté la sal disuelta, algunos posibles beneficios es que puede incrementar el efecto absorbente y reducir la volatilidad de uno de los compuestos. El componente que se ve afectado es el que sea más soluble de los dos y además de variar su volatilidad relativa se ve reducida la presión de vapor.

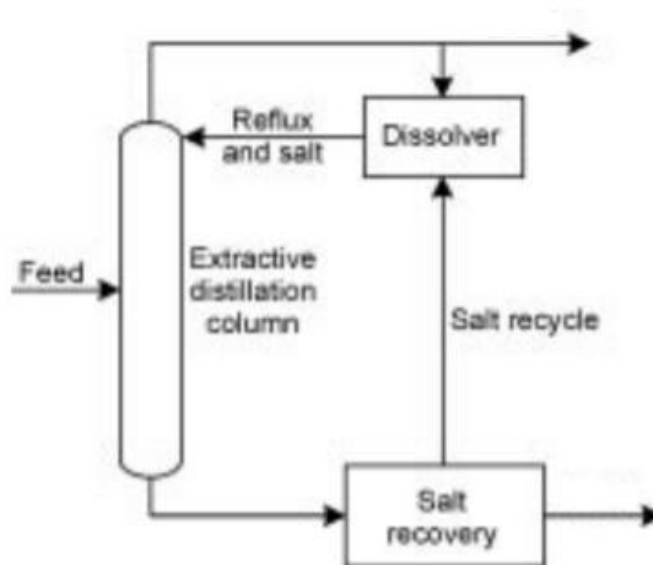


Figura 3.9. Secuencia del proceso de destilación por sales. Fuente: Huang, H. J., Ramaswamy, S., Tschirner, U. W., & Ramarao, B. v. (2010). *Separation and purification processes for lignocellulose-to-bioalcohol production*. In *Bioalcohol Production: Biochemical Conversion of Lignocellulosic Biomass* (pp. 246–277). Elsevier Inc. <https://doi.org/10.1533/9781845699611.3.246>

3.5.7. Destilación con líquidos iónicos

La destilación con líquidos iónicos se basa en que el solvente que interactúa con el azeótropo es un líquido iónico. Un líquido iónico es una sal orgánica, en la que sus cationes y aniones pueden variar virtualmente a voluntad para cambiar sus propiedades químicas y físicas, una característica fundamental es que estas sales fundidas tienen que tener un punto de fusión inferior a 100 °C. Para comparar con otros compuestos iónicos el NaCl tiene un punto de fusión de 801 °C. [9]

Las principales características que hacen de los líquidos iónicos unos solventes muy interesantes para la industria son las siguientes [10]:

- El inmenso número de combinaciones que se pueden obtener al unir cationes y aniones para obtener los ajustes deseados en algunas propiedades claves en la mezcla da una gran variedad de opciones para poder optimizar la eficiencia y coste del proceso.
- Una gran cantidad de componentes que incluyen orgánicos, inorgánicos y hasta poliméricos son solubles en líquidos iónicos, este hecho puede jugar un papel importante para incrementar la volatilidad relativa de los componentes en fase líquida.
- Una volatilidad prácticamente nula a temperatura ambiente que provoca que sean componentes con potencial para ser reutilizados y sencillos de recuperar en un proceso de evaporación en un tanque.

- Presión de vapor negligible a temperatura ambiente y condiciones de presión, esto minimiza las probabilidades de pérdida hacia la atmósfera y asimismo una reducción de los problemas de exposición de los trabajadores y la contaminación ambiental.[11]

El proceso más usado en caso de usar un líquido iónico como agente de separación es una destilación extractiva, ya que no precisa de ser vaporizado y puede ser separado fácilmente en una segunda destilación. [11]

3.5.8. Destilación reactiva

La destilación reactiva es una técnica de intensificación de procesos que se basa en la sinergia que se genera al integrar reacciones químicas y una destilación en un solo elemento. Al realizarse todo en una sola unidad y al mismo tiempo tiene que haber una buena compatibilidad entre los parámetros de operación de la reacción y la destilación. Para poder superar el azeótropo, este método se basa en la diferencia en las velocidades de las reacciones de las sustancias, formando un azeótropo con otro reactivo que suele ser un catalizador que en algunas ocasiones es sólido. Uno de los dos componentes de interés reacciona para formar otros productos que sean más sencillos de separar por destilación que los originales de la mezcla, para después una vez ya separados a partir de una reacción reversible, volver a obtener la sustancia original. La columna puede llevar incorporada un decantador si se necesita separar la mezcla inmiscible, un azeótropo heterogéneo, formada después de la reacción obtenida en la columna. [12]

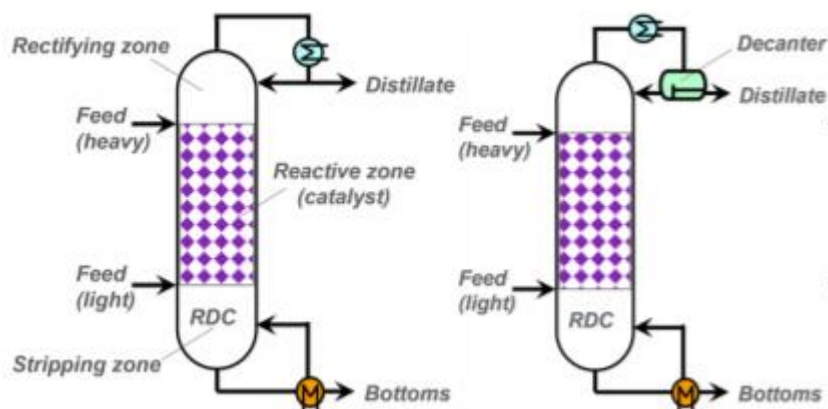


Figura 3.10. Ejemplo de una columna de destilación reactiva simple (izquierda) y una con decantador (derecha). [12]

El proceso para realizar esta destilación presenta algunas ventajas interesantes frente a la secuencia tradicional de reactor y columna [2]:

- Si la reacción llevada a cabo es exotérmica, se puede aprovechar la energía para la destilación.

- Se reducen el número de equipos y las separaciones necesarias a posteriori.
- Se evitan las restricciones que surgen en la separación debido a azeótropos o líneas frontera.
- Conseguir la conversión total de la reacción incluso en las reversibles, ya que se pueden eliminar los productos de la zona de reacción.

3.5.9. *Chemical Drying* (Destilación y acción química)

El proceso de secado azeotrópico es para sistemas con materia prima cargada de humedad que formen un azeótropo con agua usando como solventes agentes de separación vaporizados, es decir, es un procedimiento donde el objetivo es realizar un secado a un componente con un alto nivel de humedad. Con evaporar la humedad del componente a separar lo que se consigue es una variación de la volatilidad relativa que tenía previamente. El agente másico que como ya se ha dicho es un vapor, se combina con un aporte de calor para facilitar la vaporización de la materia prima. [13]

3.5.10. Pervaporación

La separación por membranas es el proceso de separar mezclas de líquidos o de gases usando una membrana semipermeable como agente de separación. En el proceso se introduce un canal de alimentación que es separada en dos, el retenido, que es la parte de la alimentación que se ve retenida por la membrana, y el permeado que consigue pasar a través de la membrana.

La pervaporación es el método de separación de mezclas líquidas por medio de vaporización parcial, utilizando una membrana no porosa que permitirá la separación de la mezcla. Se trata de un proceso en donde se alimenta una mezcla líquida y esta entra en contacto con la membrana, lo que permite la eliminación de uno o más componentes de la mezcla líquida en una corriente de vapor al otro lado de la membrana. [14]

La alimentación se calienta hasta llegar a la temperatura de operación de la mezcla con la que se esté trabajando y a continuación se pone en contacto con el lado activo de la membrana. El componente más permeable atraviesa la membrana en fase vapor (permeado) y una vez ya pasada la membrana a partir de un proceso de condensado se completa la separación de los componentes. [14] Este proceso de transferencia de masa se puede dividir en tres pasos fundamentales [14]:

1. La **sorción** de los componentes permeables de alimentación.
2. El **transporte** de los componentes a través de la membrana por difusión, según la ley de Fick.
3. La **desorción** en el lado del permeado, hacia la fase del vapor en vacío.

El proceso del vapor tras pasando la membrana crea un gradiente de concentración a ambos lados y es el que actúa como fuerza motriz del proceso. El gradiente de concentración que se genera en el

proceso de pervaporación se expresa de una mejor manera en términos de presión parcial de vapor. [14]

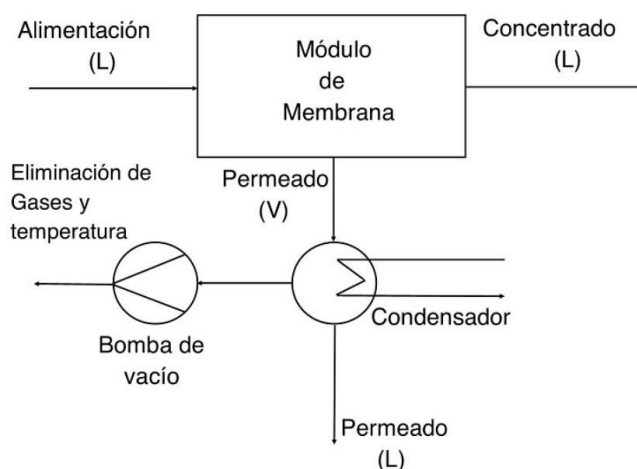
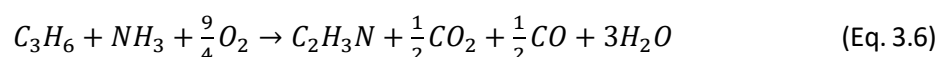


Figura 3.11. Esquema de un proceso de pervaporación. [14]

3.6. Acetonitrilo

El acetonitrilo es el compuesto objetivo de este proyecto, donde lo que se busca es obtenerlo de la forma más eficiente posible y con una pureza elevada. También conocido como Cianuro de metilo, cianometano y etanonitrilo y de fórmula molecular C_2H_3N es el nitrilo orgánico más simple, es un disolvente no halogenado, un hidrocarburo alifático y es miscible con el agua y la mayoría de solventes orgánicos. El acetonitrilo actualmente se obtiene principalmente como un subproducto de la reacción de obtención del acrilonitrilo (utilizado en la producción de plásticos y otros polímeros). El método más común actualmente de obtención del acrilonitrilo es conocido como Proceso Sohio y se basa en una oxidación en fase gaseosa de propileno y amoníaco con la ayuda de un catalizador. El acetonitrilo se obtiene con otros subproductos de la reacción que son principalmente agua y ácido cianhídrico entre otros, en el Proceso Sohio se realiza una recuperación de acetonitrilo que principalmente se realiza para facilitar la purificación del acrilonitrilo, ese acetonitrilo se suele vender por parte de las empresas a un nivel de pureza menor provocando que el precio no sea muy elevado pero así obtienen algo más de beneficio. [15]

La reacción secundaria del proceso donde se obtiene el acetonitrilo es la siguiente:



El monóxido y dióxido de carbono en el proceso se desprecian pero en esta reacción se observa como con el acetonitrilo se forma con agua en una relación de 3 a 1.

La producción de acetonitrilo se espera que aumente durante los próximos años debido a su alta demanda como solvente en la industria farmacéutica, en la industria cosmética, en productos de cuidado personal y en el ámbito de la biotecnología. En la actualidad el sector donde es requerido una mayor cantidad de acetonitrilo es la ya mencionada industria farmacéutica para la síntesis de antibióticos, ciertas vitaminas, ADN, etc. El segundo mercado está enfocado en el uso del acetonitrilo como solvente en técnicas analíticas como el HPLC (Cromatografía líquida de alta resolución) o la espectroscopia UV, a continuación el sector agroquímico para la extracción de ácidos grasos de aceites vegetales y animales, otro sector donde tiene una gran importancia es en la industria de la separación de compuestos como solvente en algunas mezclas.

3.6.1. Azeótropo Acetonitrilo-Agua

En muchos sectores donde es necesario el uso del acetonitrilo es preciso que el solvente sea lo más puro posible, sobre todo para técnicas como el HPLC, para obtener acetonitrilo puro con una gran eficiencia es clave poder realizar la separación con el agua debido a que como, se ha explicado con anterioridad, del proceso donde se obtiene actualmente la mayoría del acetonitrilo el agua está presente en la mezcla.

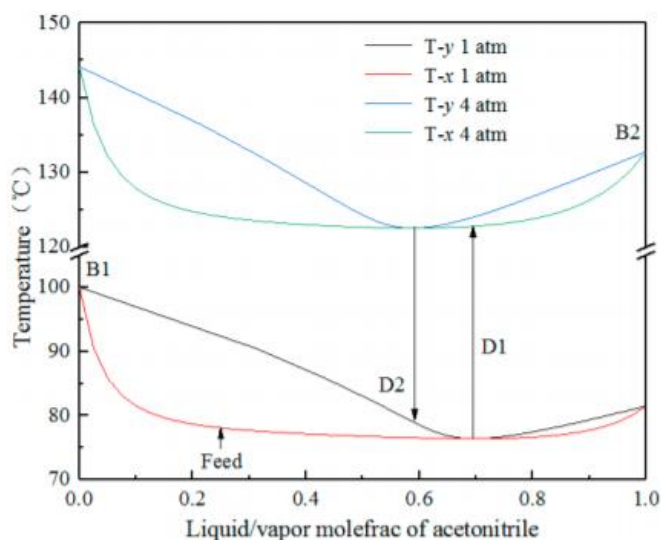


Figura 3.12. Diagrama TXY de la mezcla acetonitrilo-agua. [17]

En la Figura 3.12 se puede observar como el azeótropo de la mezcla acetonitrilo-agua es homogéneo y positivo, además de observar que con un aumento de presión de 1 atmósfera a 5 el desplazamiento del azeótropo es considerable, así que queda demostrado que esta mezcla es muy sensible a la variación de la presión.

4. Metodología

Este es un apartado previo a las simulaciones donde se explica la metódica realizada durante el proceso de la parte experimental del proyecto y las simplificaciones que se han realizado para facilitar la realización del mismo.

4.1. Software: *ASPEN PLUS V12*

El programa que se ha utilizado en las simulaciones es *ASPEN Plus V12* debido a la variedad de herramientas otorgadas por el programa para realizar el diseño de los sistemas y poder graficar con precisión las curvas de equilibrio de los diferentes casos.

ASPEN Plus V12 es un software especializado en la simulación de procesos químicos que es empleado en los artículos en los que se basa este proyecto para crear los dos métodos.

4.2. Validación del modelo termodinámico

ASPEN Plus V12 cuenta con una gran de paquetes termodinámicos a su disposición y para realizar correctamente los procesos es esencial escoger el modelo adecuado. Para eso se utilizan una serie de criterios previos para elaborar una preselección de un conjunto de modelos termodinámicos adecuados para el sistema. Los criterios a seguir son [16]:

- **Operaciones unitarias utilizadas:** Este factor depende de diferentes propiedades de los componentes:
 - Equilibrio de fases: el simulador ha de ser capaz de representar con precisión el equilibrio entre las fases existentes y los intercambios de calor.
 - Propiedades termodinámicas: cálculos de transferencia de calor y de eficiencia del proceso han de poder ser medidos.
 - Propiedades de transporte: el método tiene que poder realizar cálculos del tamaño de diferentes equipos utilizados, además de las caídas de presión en el transporte de la mezcla.
 - Propiedades volumétricas: diseño de elementos del sistema como pueden ser decantadores, columnas de destilación, etc.
- **Naturaleza de los componentes:** Los componentes se clasifican en 4 categorías:
 - No polar: mezclas de dos componentes no polares se desvían poco de la idealidad.

- Polar: mezclas de dos componentes polares pueden presentar una desviación considerable de la idealidad. Si la mezcla es entre un componente polar y uno no polar, las dos fases en la mayoría de casos no son miscibles.
- Puentes de hidrógeno: componentes capaces de formar puentes de hidrógeno.
- Electrolitos: sustancias que formen enlaces iónicos.
- **Rango de trabajo:** esencial conocer los valores mínimos y máximos con los que se trabaja en el sistema para conocer qué tipo de aproximación beneficia a la mezcla:
 - Aproximación heterogénea: Tiene en consideración la fugacidad en fase líquida de los componentes puros y corrige la desviación respecto a la idealidad. Respecto a la fase vapor se utiliza la ecuación de estado. No se debe utilizar al superar los valores críticos de uno de los componentes de la mezcla.
 - Aproximación homogénea: todas las fases usan el mismo modelo, la ecuación de estado. Permite llegar a las condiciones críticas de temperatura y presión de las sustancias.
- **Disponibilidad de valores experimentales:** un modelo requiere de un conjunto de parámetros de los componentes puros y de la interacción entre las diferentes sustancias de la mezcla que han de ser obtenidos a partir de una base de datos o la literatura o se pueden calcular con métodos predictivos como última opción.

Una vez ya realizada la preselección de los paquetes se debe realizar una comparación con los datos experimentales para discernir qué modelo se adecua más a la realidad.

4.3. Simplificaciones

Antes de empezar con las simulaciones se expondrán una serie de simplificaciones realizadas para facilitar los procesos y los cálculos de costes de los diferentes elementos:

- En todas las tuberías se despreciará la fricción, la resistencia y los posibles desprendimientos.
- No se realizará un cálculo de costes de las tuberías de los procesos.
- Las bombas de transporte y los tanques de almacenaje entre elementos se desprecian de los sistemas.
- Se ha impuesto que todos los intercambiadores serán de carcasa y tubo
- Los costes del mezclador se consideran nulos porque se percibe como la unión de dos tuberías.
- Los costes del agua de refrigeración de 32.2 °C se utilizarán para agua de refrigeración de menor temperatura.

- Para la temperatura de rocío del condensador se utilizara la temperatura en la que se encuentre el condensador de la columna
- Los costes de la columna con decantador se calcularan igual que las otras columnas de destilación.
- El decantador se supondrá que es perfectamente cilíndrico para realizar los cálculos.
- Los costes del agua se consideran negligibles.

5. Simulación de los procesos de separación

5.1. Método 1 (*Pressure Swing*)

5.1.1. Elección del método

Para poder obtener un sistema donde se obtenga acetonitrilo con un nivel alto de pureza primero es necesario realizar una búsqueda para poder encontrar distintas formas de llevar a cabo el proceso con los distintos métodos explicados en el marco teórico o incluso realizar una combinación de los mismos. En la mezcla acetonitrilo-agua, como se puede observar en la Figura 3.12, la presión ejerce una variación significativa y eso es significativo para indicar la viabilidad de ejecutar el proceso realizando un cambio de presión, como se ha dicho con anterioridad para que el modelo sea viable es necesario que la variación del punto azeotrópico sea como mínimo del 5%. En la Tabla 5.1 se puede observar que con un aumento de presión de 1 a 5 atmosferas el punto varía en 12.64%, una cifra muy por encima del valor mínimo necesario, y es por eso que se decidió que uno de los sistemas estuviera ejercido con un cambio de presión.

Tabla 5.1. Efecto de la presión en la mezcla acetonitrilo-agua. [17]

Presión (atm)	Temp. Ebullición ACN. (°C)	Temp. Ebullición H2O. (°C)	Temp. Ebullición Azeótropo (°C)	Concentración en el azeótropo (x,y)	
				ACN	H2O
1	81.48	100.0	76.40	0.6971	0.3029
2	105.3	120.7	98.06	0.6438	0.3562
3	120.9	134.1	112.0	0.6116	0.3884
4	132.8	144.2	122.6	0.5886	0.4114
5	142.5	152.4	131.2	0.5707	0.4293

5.1.2. Paquete Termodinámico

El primer paso a realizar en una simulación es obtener un paquete termodinámico adecuado para el sistema y que sea lo más parecido posible a los valores experimentales de la mezcla obtenida. A partir de los pasos explicados en el apartado 4.2 se ha llevado a cabo un descarte inicial. En este caso se busca un modelo que sea capaz de representar el equilibrio de fases entre dos componentes polares en un rango de presión y que puede llegar hasta las 10 atmosferas sin desviarse en exceso de la realidad.

A continuación, se ha realizado una búsqueda para poder ver en documentación que paquete termodinámico se han utilizado para simulaciones con la mezcla acetonitrilo-agua, el paquete termodinámico empleado en el artículo [17] es el Wilson. Antes de aplicar el modelo se realiza una comparación gráfica para poder concluir que Wilson es un paquete termodinámico adecuado. Los valores experimentales se han obtenido del *Dortmund Data Bank*. [18]

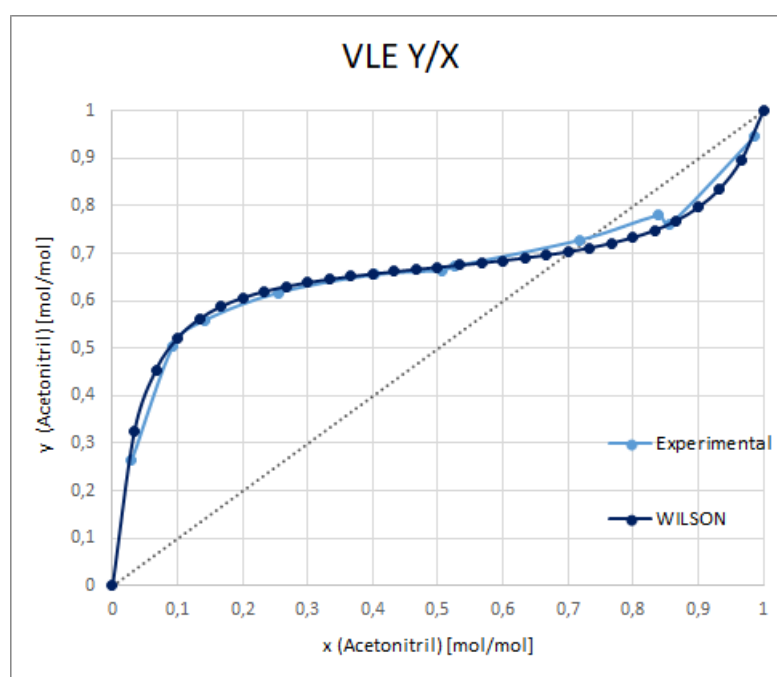


Figura 5.1. Gráfica XY para la mezcla acetonitrilo-agua para 1 atmosfera de presión. Fuente propia

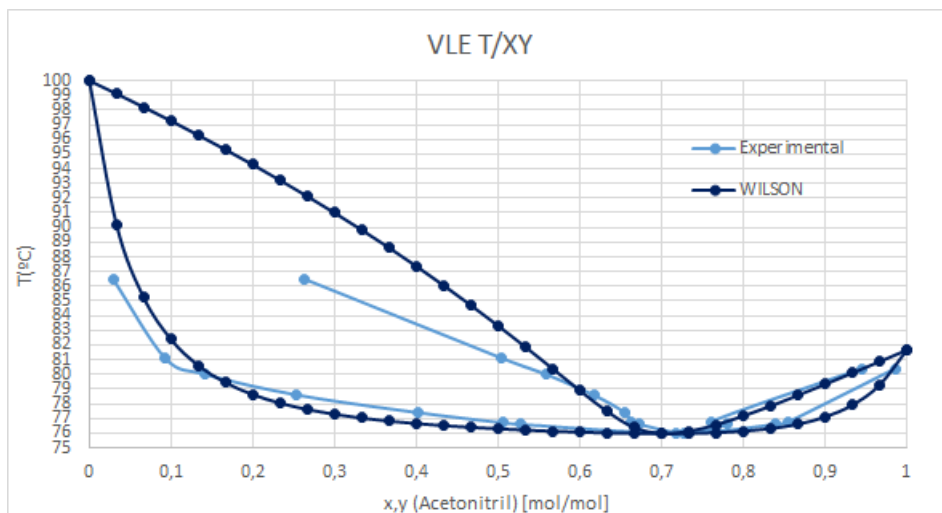


Figura 5.2. Gráfica TXY para la mezcla acetonitrilo-agua para 1 atmosfera de presión. Fuente propia

En las dos anteriores gráficas se compara los valores experimentales con los valores obtenidos en el simulador con el paquete termodinámico Wilson con una presión constante de 1 atmosfera. El objetivo es que los valores sean similares, sobre todo en la zona del azeótropo para que la simulación sea lo más parecida posible a una situación real y como se puede observar los gráficos presentan un punto azeotrópico con valores muy similares, también se ha realizado una comparación con otros paquetes termodinámicos aptos para la simulación, pero al ser valores muy similares a los obtenidos con Wilson se ha decidido seguir con el paquete que recomendaba el artículo, aparte también se ha realizado un estudio con diferentes valores de presión (20 kPa y 40 kPa) para asegurarse el correcto funcionamiento del paquete termodinámico a diferentes presiones. Los valores de las gráficas anteriores juntamente con los gráficos y tablas de los diferentes paquetes termodinámicos y los que presentan una presión diferente se encuentran en el apartado de Anexo A.

5.1.3. Esquema del sistema

Antes de explicar en detalle el sistema que se ha realizado, se introduce un esquema para facilitar la explicación del proceso que se realiza a continuación. En este caso el sistema consta de 2 columnas (CLTM), dos intercambiadores de calor (un calentador (*Heater*) y un refrigerador (*Cooler*)) y un mezclador (*MIXER*).

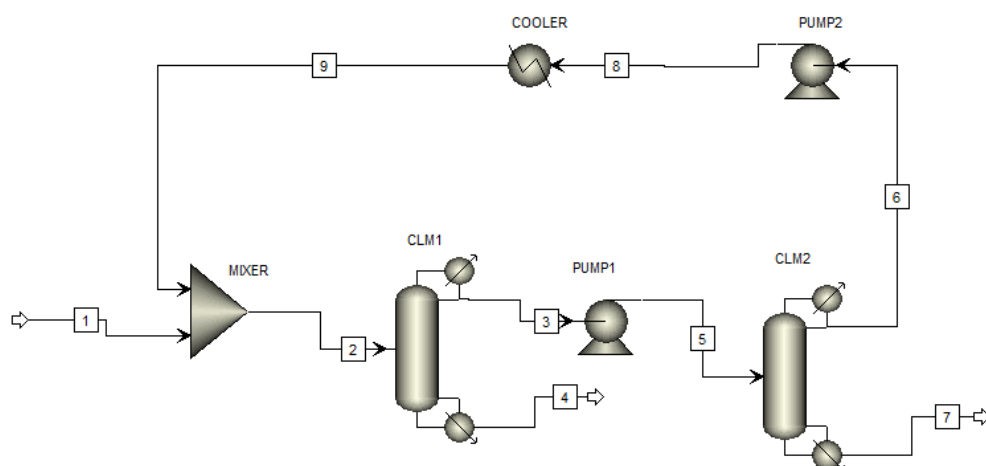


Figura 5.3. Esquema del proceso de pressure swing. Fuente propia

5.1.4. Explicación del sistema

El proceso se inicia con un cabal (1) de 500 kmol/h de 0.8 de agua y 0.2 de acetonitrilo, es decir, con 400 kmol/h de agua y 100 kmol/h de acetonitrilo, el objetivo final es ver cuántos de esos 100 kmol/h se pueden recuperar de la mezcla e intentar que ese valor sea lo más próximo al 100%, además de que la pureza sea la mayor posible, como mínimo del 99%.

Primero se mezcla el cabal 1 con la recirculación (8) de la segunda columna (CLM2), la solución obtenida (2) está compuesta por 217.687 kmol/h de acetonitrilo y 500.423 kmol/h de agua a una presión de 1 atm y a una temperatura de 24.51 °C. El objetivo en la primera columna (CLM1) es obtener por destilados una solución que se acerque lo máximo posible al punto azeotrópico para posteriormente facilitar el siguiente proceso de destilación y a demás separar la mayor cantidad de agua posible en este primer proceso que también provoca que en la siguiente columna el procedimiento sea más sencillo de realizar. En destilados (3) la composición de la mezcla es de 31.70% de agua y 68.30% de acetonitrilo que es un valor bastante próximo al punto azeotrópico de 1 atmosfera, no es necesario aproximarse más debido a que eso hará que el coste de energía sea mucho mayor que el beneficio que se obtenga. El acetonitrilo perdido por colas es de 0.00032 kmol/h que es un valor que se podría considerar negligible.

Las variables empleadas para el cálculo de la columna han sido el número de platos, el plato de introducción de la alimentación, la tasa de destilado (*Distillate Rate, D*) y la relación de reflujo (los valores se han obtenido a partir de una optimización basándose en conseguir la mayor cantidad de acetonitrilo en la corriente 7 con una pureza mayor de 99%):

Tabla 5.2. Variables de la columna CLM1.

	Núm. Platos	Plato entrada	D	RR
CLM1	10	5	318.7	0.88

El destilado (3) de la columna CLM1 se introduce en una bomba (PUMP1) para aumentar su presión hasta las 10 atmosferas de presión y en la Figura 5.4 se observa que en el punto donde está situada la mezcla y con el aumento de presión el azeótropo se ha superado y se puede realizar la segunda parte del proceso.

El trabajo necesario para realizar el proceso de aumento de la presión es la siguiente:

Tabla 5.3. Trabajo requerido por PUMP1.

	Work (kW)
PUMP1	8.119

Inicialmente, la idea era realizar el proceso con unos valores de presión menores a los utilizados, pero en el momento de realizar la simulación no se podía completar el proceso con la segunda columna (CLM2) trabajando a menos de 10 atmosferas en el condensador y vaporizador.

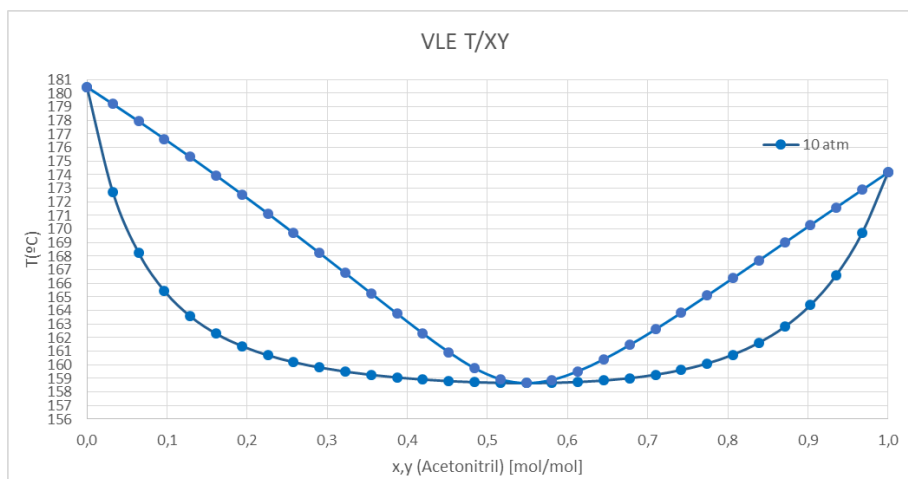


Figura 5.4. Gráfica XY para la mezcla acetonitrilo-agua para 10 atmosfera de presión. Fuente propia

Una vez aumentado la presión del corriente (5) se introduce como alimentación en CLM2 donde por destilados (6) se obtiene una mezcla de acetonitrilo y agua que se sitúa en el punto azeotrópico y que para no desperdiciar ese acetonitrilo se recircula hasta la primera columna. Por el cabal de residuo (7) se obtiene el acetonitrilo debido a que como se observa en la Figura 5.1 la volatilidad del acetonitrilo

una vez superado el azeótropo es menor a la del agua. El cabal tiene una pureza de acetonitrilo del 99.41% que es un valor superior al marcado y se obtienen 99.995 kmol/h, es decir, que se recupera casi todo el acetonitrilo de la mezcla inicial.

Como en la anterior columna, el objetivo para optimizar ha sido el obtener la mayor cantidad posible en el canal de residuo. Los valores que se han utilizado en las variables de la columna son los siguientes:

Tabla 5.4. Variables de la columna CLM2.

	Núm. Platos	Plato entrada	D	RR
CLM2	8	3	218.1	1.1

Siguiendo con el destilado de CLM2 antes de recircular se utiliza una bomba y un intercambiador de calor para refrigerar para reducir la temperatura y presión hasta 25°C y 1 atmosfera de presión, el trabajo y energía consumidos por cada uno de los componentes son los siguientes:

Tabla 5.5. Trabajo requerido por PUMP2.

	Trabajo (kW)
PUMP2	-1.245

Tabla 5.6. Energía consumida por el refrigerador.

	Energía (kW)
Cooler	-802.1

Finalmente, se conecta el corriente (8) con el conducto inicial a través de un mezclador, como se ha dicho con anterioridad, y así finalizar la recirculación del proceso y no desperdiciar nada del acetonitrilo introducido en el sistema.

Los valores de presión, temperatura y los cabales de acetonitrilo y agua de todos los corrientes del sistema están resumidos en la siguiente tabla:

Tabla 5.7. Resumen valor de las corrientes de la simulación.

Corriente	Temp. (°C)	Presión (atm)	Cabal ACN (kmol/h)	Cabal H2O (kmol/h)
1	25.00	1	100.000	400.000
2	24.51	1	217.687	500.423
3	76.53	1	217.687	101.013
4	100.02	1	0.00032	399.411
5	77.49	10	217.687	100.013
6	160.79	10	117.692	100.418
7	176.02	10	99.9947	0.5945
8	160.79	1	117.692	100.418
9	25	1	117.687	100.423

En el Anexo C1 se encuentra unas heurísticas con posibles mejores energéticas del sistema.

5.1.5. Costes del sistema

Para poder comparar los diferentes métodos es necesario realizar un análisis de los costes de los sistemas para definir qué método es más eficiente de los dos, en este caso se dividen los costes entre costes de servicio, costes de las columnas, coste del intercambiador y costes de las bombas. Para los costes se ha de tener en cuenta de que las horas de operación por año son de, 8500 según [20].

5.1.5.1. Costes de servicio

En este apartado se explican los costes de energía según el tipo de servicio (CS) que se requiera cada componente del sistema, los costes de servicio se extraen de la siguiente tabla [20]:

Tabla 5.8. Costes de servicio.

Servicio	Coste (\$/millón kcal)
Vapor (28.23 atm)	4.29
Vapor (11.22 atm)	3.24
Vapor (4.08 atm)	2.40
Vapor (1.70 atm)	1.75
Agua de enfriamiento (32.2 °C)	0.28
Amoniaco (1 °C)	6.91
Amoniaco (-17.78 °C)	12.43
Amoniaco (-21.67 °C)	16.59

A partir de esta tabla solo se necesita saber la energía necesaria de todos los elementos para calcular el coste de energía anual del sistema. Para enfriar a 25°C se supondrá que el coste de refrigeración es el mismo que el del agua de enfriamiento de 32.2°C. Por lo tanto los costes de servicio son:

Tabla 5.9. Costes energéticos del sistema.

Equipo	Elemento	Cabal Energ. (kW)	CS (\$/año)
CLM1	C1	-5601.89	71649.27
	R1	6614.33	13535.76
CLM2	C2	-3884.09	91975.72
	R2	4697.04	9612.175
Cooler	-	-802.09	1645.419
			186772.9

5.1.5.2. Costes de columnas de destilación

Antes de calcular los costes es necesario conocer las dimensiones de las columnas.

Dimensionado

Diámetro de la columna, D_C :

$$D_C = \left[\left(\frac{4}{\pi V} \right) \cdot (D) \cdot (RR + 1) \cdot (22.2) \cdot \left(\frac{T_{DV}}{273} \right) \cdot \left(\frac{1}{P} \right) \cdot \left(\frac{1}{3600} \right) \right]^{1/2} \quad (\text{Eq. 5.1})$$

Donde:

$$V = 0.761 \left(\frac{1}{P} \right)^{1/2} \quad (\text{Eq. 5.2})$$

- D_C : Diámetro de la columna, m.
- D : Flujo de destilado, kmol/h.
- RR : Relación de reflujo.
- T_{DV} : Temperatura de rocío del vapor en el condensador, K.
- P : Presión de trabajo de la columna, atm.

Altura de la columna, H_C :

$$H_C = 0.61 \cdot \left(\frac{S}{\eta} \right) + 4.27 \quad (\text{Eq. 5.3})$$

Donde:

$$S = N_P \cdot \eta \quad (\text{Eq. 5.4})$$

- H_C : Altura de la columna, m.
- S : Número de etapas ideales.
- N_P : Número de platos reales de la columna.
- η : Eficiencia promedio de los platos de la columna, se tomará como valor típico 0,8.
- Las dimensiones de las columnas son:

Tabla 5.10. Dimensionado de las columnas.

	D_C (m)	H_C (m)
CLM1	2.814	10.37
CLM2	1.541	9.150

Costes

Una vez conocidas las dimensiones se procede a calcular el coste de instalación (CI) [20]:

$$CI = 4.34 \cdot \left[7620 \cdot D_C \cdot \left(\frac{H_C}{12.2} \right)^{0.68} \right] \quad (\text{Eq. 5.5})$$

En el caso de que la presión de trabajo sea superior a 3,4 atm usamos el siguiente factor de corrección [20]:

$$\text{Factor de Corrección} = [1 + 0.0147 \cdot (P - 3.4)] \quad (\text{Eq. 5.6})$$

También se tienen que calcular los costes de instalación de los platos (CP) [20]:

$$CP = 70 \cdot \left(\frac{S}{\eta} \right) \cdot \left(\frac{D_C}{1.22} \right)^{1.9} \quad (\text{Eq. 5.7})$$

La suma de los costes de instalación de la columna y los costes de los platos es el coste total (CIT) de la columna sin tener en cuenta los gastos de mantenimiento. El coste de mantenimiento anual (CM) de las columnas se supone como el 2% del CIT de la columna de destilación. [20]

Por tanto, los costes de las columnas serían los siguientes:

Tabla 5.11. Costes de las columnas.

	CI (\$)	CP(\$)	CIT(\$)	CM (\$/año)
CLM1	83321.86	3425.328	86747.19	1734.944
CLM2	45979.95	873.0775	46853.03	937.0606

Se tiene que tener en cuenta que estos cálculos están realizados escogiendo como el material empleado en las columnas el acero al carbono, que es un material apto para el acetonitrilo y agua y no es material muy costoso, en caso de querer una compatibilidad excelente se podría usar el acero inoxidable AISI 304.

5.1.5.3. Costes de intercambiadores de calor

En este caso también es necesario conocer las dimensiones del equipo, que en los intercambiadores de calor es obtener el área de transferencia.

Dimensionado

En el caso de los intercambiadores de calor para poder realizar los cálculos de costes es necesario conocer el área de transferencia del intercambiador [21]:

$$Q = A \cdot U \cdot F \cdot DTLM \tag{Eq. 5.8}$$

Donde:

- Q: Calor intercambiado en kW.
- A: Área de transferencia del intercambiador en m².
- F: Factor de corrección, adimensional. Se tomará el valor como igual a 1 para simplificar los cálculos.
- U: Coeficiente global de transferencia de calor, en kW/m²K.

$$U = \frac{1}{\frac{D_e}{h_i \cdot D_i} + F_{se} + \frac{F_{si} \cdot D_e}{D_i} + \frac{1}{h_e}} \tag{Eq. 5.9}$$

Donde:

- D_e y D_i: Diámetros exterior e interior de los tubos del intercambiador, respectivamente, en m².
- F_{se} y F_{si}: Ensuciamiento exterior e interior, respectivamente, en m²·K/W. Se toma como valor constante e igual a 0.0002 m²·K/W para los dos.
- h_i y h_e: Coeficientes de películas de los fluidos interior y exterior, en W/m²·K.
- DTLM: Diferencia media logarítmica de temperatura de un intercambiador a contracorriente, en °C. Para calcularlo se utiliza la siguiente expresión:

$$DTLM = \frac{(T_{ic} - T_{of}) - (T_{oc} - T_{if})}{\ln\left(\frac{T_{ic} - T_{of}}{T_{oc} - T_{if}}\right)} \tag{Eq.5.10}$$

Donde:

- T_{if} y T_{of}: Temperaturas de entrada y salida del fluido frío, respectivamente, en °C.
- T_{oc} y T_{ic} son las temperaturas de salida y entrada del fluido caliente, respectivamente, en °C.

El área de los intercambiadores (A) es la siguiente:

Tabla 5.12. Dimensionado de las columnas.

	A (m ²)
COOLER	17.38

Costes

Los cálculos de coste de instalación se obtienen con la siguiente ecuación [20]:

$$CI = 3.39 \left[9000 \cdot \left(\frac{A}{92.1} \right)^{0.65} \right] \quad (\text{Eq. 5.11})$$

En el caso de que la presión de la columna sea superior a 10.2 atm se utiliza un factor de corrección:

$$\text{Factor de corrección} = [1 + 0.0147 \cdot (P - 3.4)] \quad (\text{Eq. 5.12})$$

También se calculan los costes de operación (CO) donde es necesario conocer los costes de servicio y los costes de instalación:

$$CO = (8.500 \cdot CS \cdot Q) + 0.02 \cdot CI \quad (\text{Eq. 5.13})$$

En los intercambiadores de calor el material empleado también es el acero al carbono. Y los costes son los siguientes:

Tabla 5.13. Costes de intercambiadores de calor.

	CI (\$)	CO(\$/año)
COOLER	10319.74	14158.56

5.1.5.4. Costes de las bombas

Los costes de las bombas se calculan a partir de la gráfica siguiente:

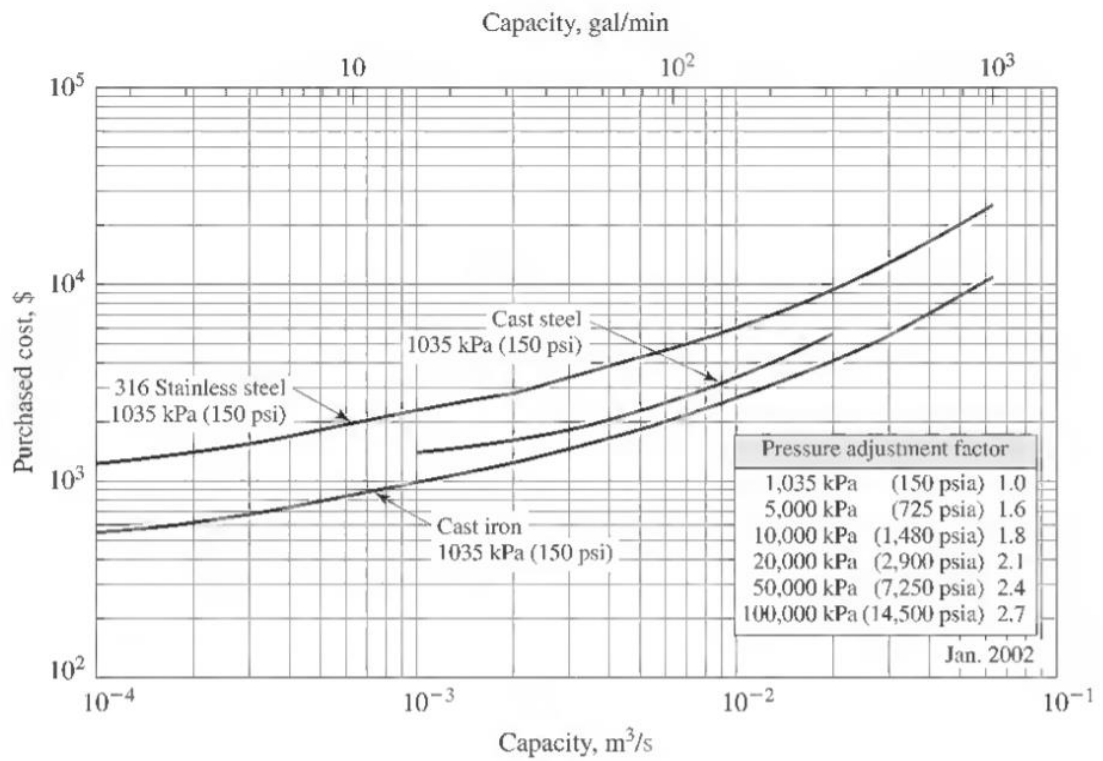


Figura 5.5. Costes de bombas (incluyen coste del motor). [22]

Teniendo en cuenta que el caudal que entra por las bombas es el siguiente:

Tabla 5.14. Caudales de entrada de las bombas.

	Caudal (m ³ /s)
PUMP1	0.0043
PUMP2	0.0031

A partir de los caudales y los gráficos se obtienen los costes de instalación:

Tabla 5.15. Caudales de entrada de las bombas.

	CI (\$)
PUMP1	3500
PUMP2	3000

Los valores se han aproximado debido a la falta de precisión. En el caso de los costes de energía que consumen las bombas se han considerado negligibles.

5.1.5.5. Costes totales

Para determinar los costes del proceso se ha tenido en cuenta una duración de vida de 10 años, y se ha utilizado el índice de construcción de plantas *Chemical Engineering* (valor inicial de 100 en los años 1957-1959), pero como extrapolar el valor del coeficiente hasta 2032 hubiera sido complicado y hubiera arrastrado muchos errores, además de que el objetivo no es conocer el precio exacto de los sistemas, sino compararlos entre ellos se ha utilizado como año inicial el año donde están calculados la gran mayoría de costes para facilitar este proceso que es el año 2000, es decir, que el último año sería el 2010. Los valores del índice son los siguientes se encuentran en el Anexo B1.

Entonces, para extrapolar los costes a cada año se utiliza la siguiente ecuación:

$$I_{t2} = I_{t1} \cdot \left(\frac{\text{Índice del año 2}}{\text{Índice de año 1}} \right) \quad (\text{Eq.5.14})$$

En este proyecto al tener dificultades para encontrar los costes de los productos a nivel industrial, se ha decidido seguir un método donde se desconoce el precio del acetonitrilo, pero se calcula a que precio se tendría que vender el acetonitrilo para que las pérdidas relacionadas con los costes sean igual a 0. El valor que se obtenga de \$/m³ no tendrá ningún valor por si solo, pero como el objetivo es comparar dos sistemas el que tenga un valor menor significara que vendiéndose a un precio menor ya llegaría al objetivo de no tener pérdidas y así se podrán comparar los dos sistemas.

Los cálculos de los costes teniendo en cuenta la inflación se encuentran en el Anexo B2, los valores de la cantidad de acetonitrilo que se ha recuperado durante toda la vida del proyecto y los costes del sistema durante los 10 años:

Tabla 5.16. Cantidad de ACN recuperada durante los 10 años.

	V (m ³)
ACN	608001.6

Tabla 5.17. Costes totales del sistema en 10 años.

	Coste Total (\$)
Pressure Swing	2638484.7

Conociendo estos valores se realiza la siguiente expresión:

$$\text{Beneficio} = V \cdot \text{PACN} - \text{Costes} \quad (\text{Eq. 5.15})$$

Donde el valor del beneficio se supone 0 y PACN (Precio de ACN) en $\$/\text{m}^3$ es el valor a encontrar. En este método el valor es:

Tabla 5.18. Precio de ACN por m^3 .

	PACN ($\$/\text{m}^3$)
Pressure Swing	4.340

El valor en sí como se ha dicho anteriormente carece de importancia y se puede ver a simple vista que no es realista porque sería vender el litro de acetonitrilo a $4.34 \cdot 10^{-3}$ \$, pero ahora se puede comparar con el otro sistema y decidir que método es más eficiente.

5.2. Método 2 (Destilación Extractiva)

5.2.1. Elección del método

En el proceso de decisión de procesos, la primera opción pasa por realizar un cambio en la presión durante el proceso que afecte al azeótropo, así que para realizar un sistema que evite grandes variaciones de presión y que se sitúe en todo momento alrededor de 1 atmósfera de presión se ha decidido optar por un proceso que añada un solvente que haga que en el sistema ternario desaparezca el azeótropo de la mezcla. Se ha descartado el utilizar agentes de separación que sean líquidos iónicos o sistemas donde sea necesario el utilizar una membrana para la separación debido a la dificultad de simular un proceso con las herramientas disponibles.

5.2.1.1. Selección del Solvente

Una vez decidido que se utilizara un agente de separación para realizar el método, es necesario realizar una búsqueda bibliográfica para encontrar un compuesto que sea apto, es decir, que cumpla las condiciones necesarias y que en el diagrama ternario se pueda observar que el azeótropo haya desaparecido. Para utilizar como solvente hay una gran cantidad de opciones viables donde destacan productos como el etilenglicol (que es el más común para realizar la separación), acetato de butilo, glicerol, benceno, etc.

A través de un estudio de todas las opciones se ha decidido utilizar finalmente el 1-Cloropropano o Cloruro de n-propano (1CLP) debido a que es poco soluble en agua y así facilita la separación de las fases, además de que observando la Figura 5.6 se llega a la conclusión de la viabilidad de utilizar este

compuesto debido a que no existe puntos azeotrópicos y no divide los componentes de la mezcla en diferentes regiones de destilación.

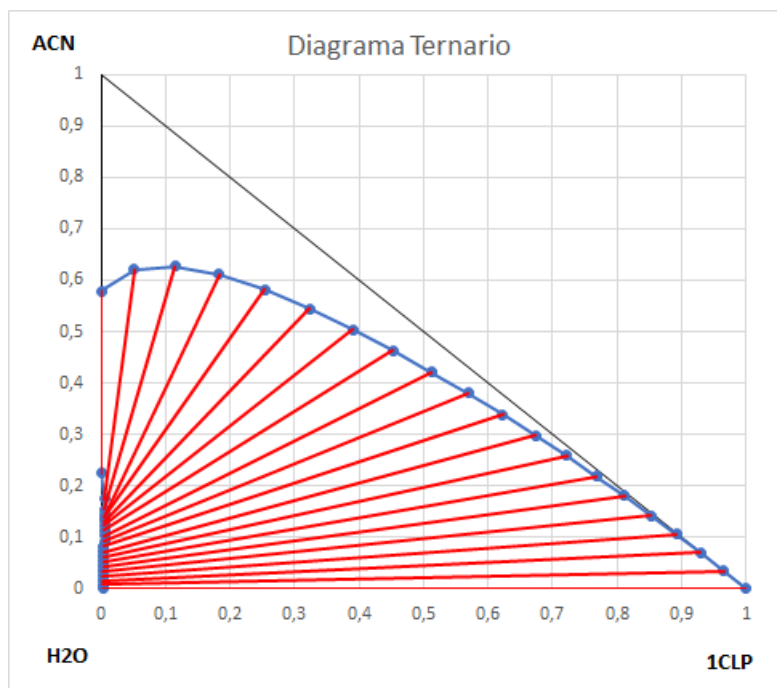


Figura 5.6. Diagrama ternario ELL de la mezcla ACN-H₂O-1CLP con NRTL a 1 atmósfera. Fuente propia

5.2.2. Paquete termodinámico

El paquete termodinámico recomendado en el artículo [19] es NRTL donde los parámetros binarios son modificados de los originales por un método de regresión para obtener un diagrama ternario que se ajuste perfectamente a los valores experimentales.

Los parámetros binarios utilizados son los siguientes:

Tabla 5.19. Parámetros binarios del paquete termodinámico NRTL.

Comp. i	Acetonitrilo	Agua	1-cloropropano
Comp. j	Agua	1-cloropropano	Acetonitrilo
a_{ij}	-0.5375	22.5775	-5.4753
a_{ji}	0.7547	14.5988	3.6972
b_{ij} (K)	420.5127	-5186.4659	1611.0853

b_{ji} (K)	326.1765	-1979.0303	-495.5049
c_{ij}	0.3	0.2689	0.3
e_{ij}	0	0	0
e_{ji}	0	0	0

Una vez introducidos los valores en el programa se grafica para comprobar que sean valores que se ajusten a los experimentales:

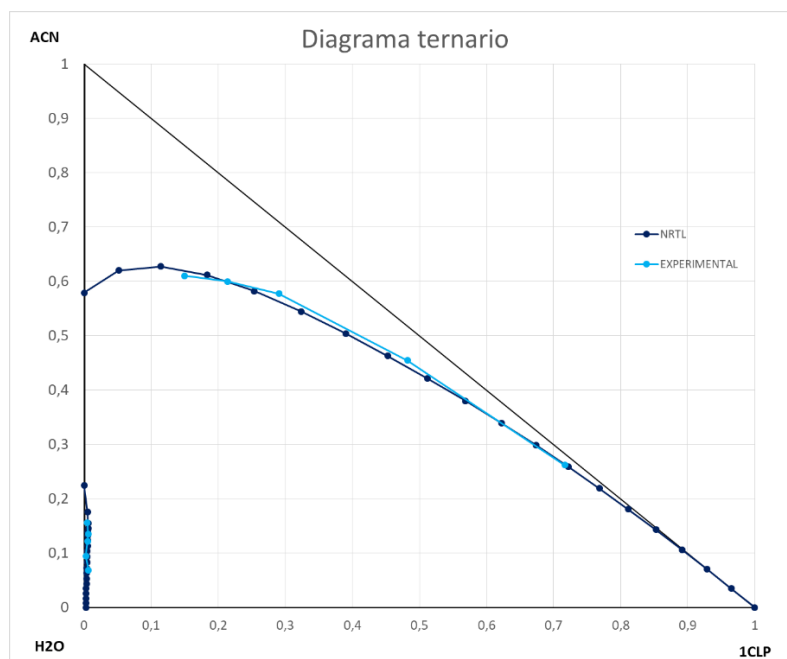


Figura 5.7. Diagrama ternario ELL de comparación de la mezcla ACN-H₂O-1CLP. (Se han eliminado las líneas de reparto para facilitar la visualización). Fuente propia

El resultado del modelo termodinámico en la curva de equilibrio sigue una tendencia muy parecida a los valores experimentales y los puntos tienen unos valores muy similares entre los de NRTL y los medidos. Por eso se llega a la conclusión de que el paquete empleado con las variaciones de los parámetros binarios es apto para la simulación.

5.2.3. Esquema del sistema

Este método está compuesto de tres columnas, una de las cuales contiene un decantador, además de un mezclador. Existen dos entradas al sistema, la primera de la mezcla a separar y la segunda que contiene el solvente.

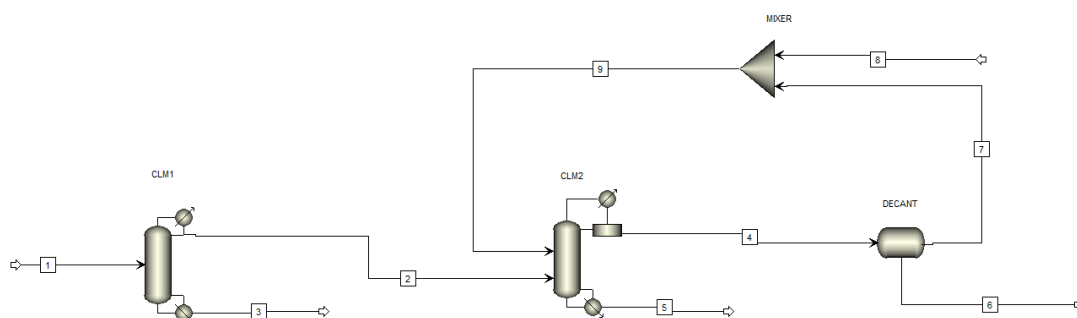


Figura 5.8. Esquema del proceso de destilación extractiva con 1-cloroporpano. Fuente propia

5.2.4. Explicación del sistema

El sistema se inicia con un cabal (1) exactamente igual (500 kmol/h totales con un 80% de agua y 20% de acetonitrilo) que el de la otra simulación para que al final poder realizar las comparaciones de manera justa con la misma cantidad de acetonitrilo entrando en el sistema. El cabal 1 se introduce en la columna CLM1 y su función es muy similar a la de la primera columna del otro proceso, llegar al punto más próximo al azeótropo para poder eliminar de la mezcla la mayor cantidad de agua posible, en este caso es para facilitar el proceso extractivo que sigue a continuación a través del solvente utilizado que en el caso de no usar esta columna también conocida como columna de pre concentración requeriría una dificultad mucho mayor. Las variables de CLM1 son las siguientes:

Tabla 5.20. Variables de la columna CLM1.

	Núm. Platos	Plato entrada	D	RR
CLM1	10	5	149	0.8

El sistema sigue con la columna del proceso extractivo donde se introduce el solvente (9) con una cantidad de 145.661 kmol/h (145 kmol/h son de NPC que están fijados en todo momento para que este valor no varíe) en un plato superior al cabal principal (2) con la mezcla deseada. La columna cuenta con un decantador situado en la parte superior que es necesaria para la separación al tratarse de una separación con un ELL.

El acetonitrilo es obtenido en el cabal 5 con una pureza superior al 99.96% y una cantidad de 99.961 kmol/h que respecto a los 100 kmol/h que se introducen en el sistema se recupera él más del 99.96 % del producto un que juntamente con la pureza es un valor más que aceptable.

Tabla 5.21. Variables de la columna CLM2.

	Núm. Platos	Plato entrada Cabal 2	Plato entrada Cabal 9	D	RR
CLM2	44	8	36	194.7	4.4

Una vez ya extraído el acetonitrilo de la mezcla, el cabal 4 (conformado por H₂O y 1CLP) se quiere recuperar la mayor cantidad posible de 1-cloropropano para recircularlo y así no desperdiciarlo. El 1CLP puro se recupera por el cabal (7) y se recircula hasta la columna CLM2, todo el 1CLP que se pierda durante el proceso se introduce nuevamente a través del corriente 8 y se une a partir de un mezclador con el cabal 7 para formar la recirculación.

El objetivo es recuperar aproximadamente todo el 1CLP y para eso se aprovecha que en la salida de CLM2 coexisten dos fases líquidas para utilizar un decantador que separe esas fases, como ya se ha mencionado antes el 1CLP se consigue por el cabal 7 y el agua restante que no se había conseguido separar en CLM1 por el cabal 6. El cabal de 1CLP recuperado es de 144.97 kmol/h, con una pureza del 99.55 %, los 0,031 kmol/h que se pierden por el cabal 6 son los que se reintroducen al sistema como ya se ha mencionado.

Los valores de presión, temperatura y los cabales de acetonitrilo y agua de todos los corrientes del sistema están resumidos en la Tabla 5.22:

Tabla 5.22. Resumen valor de las corrientes de la simulación.

Corriente	Temp. (°C)	Presión (atm)	Cabal ACN (kmol/h)	Cabal H ₂ O (kmol/h)	Cabal 1CLP (kmol/h)
1	25.00	1	100.00	400.00	0.0000
2	76.84	1	99.996	49.004	0.0000
3	100.01	1	0.0040	350.996	0.0000
4	37.37	1	0.6872	49.013	145.00
5	81.65	1	99.957	0.0038	3.22·10 ⁻³⁰
6	50.44	1	0.0390	49.000	0.0312

7	50.44	1	0.6482	0.0128	144.97
8	25	1	0.0000	0.0000	0.0313
9	46.46	1	0.6482	0.0128	145.00

En el Anexo C2 se encuentra unas heurísticas con posibles mejores energéticas del sistema.

5.2.5. Costes del sistema

Los costes de este método se calcularán utilizando las expresiones ya descritas en el apartado 5.1.5 para los costes de servicio y las columnas, este método cuenta con un decantador a diferencia del anterior que se explica el procedimiento de cálculo de los costes.

5.2.5.1. Costes de servició

Los costes de servició se obtienen con la Tabla 5.8 y en este método se dividen entre las tres columnas del proceso:

Tabla 5.23. Costes energéticos del sistema.

Equipo	Elemento	Cabal Energ. (kW)	CS (\$/año)
CLM1	C1	-2518.7	32214.55
	R1	3218.4	6586.288
CLM2	C2	-8871.61	113469.6
	R2	8818.7	18046.6
			170317.3

5.2.5.2. Costes de columnas de destilación

El proceso para calcular los costes de las columnas de este método sigue los mismos pasos que del apartado 5.1.5.2, así que primero toca calcular las dimensiones de las columnas.

Dimensionado

Los valores del diámetro y altura de las tres columnas son los siguientes:

Tabla 5.24. Dimensionado de las columnas.

	D_c (m)	H_c (m)
CLM1	1.88	10.37
CLM2	3.51	31.11

Costes

En este caso los costes de las columnas son los siguientes:

Tabla 5.25. Costes de las columnas.

	CI (\$)	CP(\$)	CIT(\$)	CM (\$)
CLM1	55771.64	1597.518	57369.16	1147.383
CLM2	219542.2	22969.76	242511.9	4850.239

5.2.5.3. Costes del decantador

Para obtener los costes del decantador es necesario conocer las dimensiones del mismo, es decir, serán necesarios conocer los valores de diámetro y longitud, para poder realizar los cálculos a partir del volumen se ha decidido fijar uno de los valores que en este caso es el diámetro. Se supondrá un diámetro de 2 metros, que con un volumen del decantador de 17 m^3 y la siguiente ecuación que es la de un cilindro:

$$V = \pi \cdot \left(\frac{1}{2} \cdot D\right)^2 \cdot L \quad (\text{Eq. 5.16})$$

Donde:

- V: Volumen del decantador, m^3 .
- D: Diámetro del decantador, m.
- L: Longitud del decantador, m.

En este caso las dimensiones con el diámetro fijado son:

Tabla 5.26. Dimensiones del decantador.

	D(m)	L
Decantador	1.00	5.41

Con estos valores se puede obtener el coste de instalación del decantador [23]:

$$CI = 17640 \cdot (D)^{1.066} \cdot (L)^{0.802} \quad (\text{Eq. 5.17})$$

Por lo tanto, los costes de instalación del decantador son:

Tabla 5.27. Costes de instalación del decantador.

	CI(\$)
Decantador	143054.78

En el decantador no existen costes de servicio, ya que no requiere de energía y los costes de mantenimiento al tratarse de sobre todo un control de seguridad y una limpieza cada cierto tiempo se consideran nulos.

5.2.5.4. Costes totales

En este apartado se recogen todos los costes calculados anteriormente y se observa el coste que tendría el proceso a lo largo de los años y el proceso realizado es similar al utilizado con el método anterior, a excepción de que en este caso existe otro componente en el sistema del cual no conocemos su coste industrial, eso significa que hay otra incógnita en el sistema, así que la solución ha sido encontrar una relación entre el acetonitrilo y el 1-cloropropano para poder llegar a la misma conclusión que en el anterior método. Para eso se ha decidido buscar los precios de laboratorio de cada componente en la misma base de datos [24] en una cantidad similar y así poder realizar todos los cálculos, la relación encontrada es la siguiente:

$$CLP = 1.904ACN \quad (\text{Eq. 5.18})$$

Esta relación se utilizará para que todos los m³ que el sistema necesite de 1CLP durante los 10 años se equiparen a los de ACN para restarlos de la cantidad de ACN que se ha conseguido separar para que eso cuente como los costes que debería tener la cantidad de 1CLP que se ha ido introduciendo en el sistema. Los volúmenes de cada producto son los siguientes:

Tabla 5.28. Cantidad de ACN recuperada.

	V (m ³)
ACN	491009.13

Tabla 5.29. Cantidad de 1CLP introducida al sistema.

	V (m ³)
1CLP	236.07

En este caso, los 236.07 m³ equivaldrían a 123.99 m³ de acetonitrilo que en lugar de estar vendiéndose se estarían comprando y por eso se restan a la cantidad de acetonitrilo vendida. Para poder calcular el valor del coste de acetonitrilo por m³ se realizan los costes del sistema durante los 10 años que se encuentran en el Anexo B3 y el valor total es:

Tabla 5.30. Costes totales del sistema en 10 años.

	Coste Total (\$)
Destilación Extractiva	2545248.49

Utilizando la ecuación 5.14 teniendo en cuenta los m³ de 1CLP en ACN:

$$0 = ((491009.13 - 123.99) \cdot PACN) - 2545248.49 \quad (\text{Eq. 5. 19})$$

Así se obtiene que el precio al que se tendría que vender el acetonitrilo para beneficio cero es:

Tabla 5.31. Preció de ACN por m³.

	PACN (\$/m ³)
Pressure Swing	5.185

Con este valor se puede determinar si este método es más o menos eficiente que el anterior. Al igual que en el anterior caso, se puede observar como este precio no es realista debido a que el acetonitrilo se tendría que vender a $5.185 \cdot 10^{-3} \text{ \$/L}$, que es un valor muy bajo.

5.3. Futuras mejoras

Aquí se recogen las diferentes ideas que se podrían haber aplicado en caso de que el proyecto siguiese su curso. En primer lugar, se podrían analizar más opciones para obtener acetonitrilo y ver si algún caso es más eficiente que los dos descritos en el proyecto. Ya centrándose en los métodos, sería razonable implementar tanques de almacenaje para los componentes de salida, también calcular posibles pérdidas en tuberías, además de calcular sus costes para una mayor precisión de los costes de los sistemas. También poder implementar las integraciones energéticas que sean posibles, pero sobre todo las que se recomiendan en los apartados de los escenarios que propone el ASPEN PLUS.

Centrándose en el primer caso sería muy beneficioso para la simulación el poder realizar el proceso con un valor menor al de 10 atmosferas de presión, ya que según los diagramas debería ser posible realizar la separación con menos presión. En el caso del segundo sistema, haber probado con otras opciones viables como solvente para poder observar si en algún caso el método hubiera sido más eficiente y necesitado menos energía.

Otro aspecto que sería ideal para el futuro es poder conocer los precios industriales de los componentes para saber realmente el coste de los dos sistemas.

6. Análisis del impacto ambiental

En este proyecto se utilizan productos con un cierto grado de peligrosidad que requieren ser tratados y almacenados adecuadamente. En el caso del acetonitrilo y el 1-cloropropano al ser compuestos altamente inflamables, deben de ser almacenados en tanques que permitan acceder a ellos con facilidad para los controles de seguridad. Han de utilizarse materiales adecuados y que no presenten un riesgo (para el acetonitrilo el acero al carbono y el acero inoxidable son recomendados), además de realizar limpiezas periódicas, tanto externas como internas. En el caso de una posible fuga, estos componentes son altamente tóxicos para las personas, sobre todo si se inhalan o se ingieren, para eso se tiene que llevar a cabo las precauciones necesarias que son explicadas en el Anexo D. Desde el punto de vista ambiental el primer método es mejor que el segundo debido a que no necesita un producto nocivo para el medio ambiente como es el 1-cloropropano, aunque en el primer caso se trabaja a presiones mayores que pueden ser más peligrosas, pero para la industria química no son muy elevadas y no supone un gran riesgo trabajar en ese rango. En el caso del agua por sí sola no es un componente peligroso del que se tenga que preocuparse en exceso, pero en este caso al tener impurezas (de acetonitrilo y/o 1-cloropropano) del proceso se tienen que realizar los procesos pertinentes para su tratamiento.

También se ha de tener en cuenta la energía necesaria en cada proceso y en este caso el segundo caso requiere de una mayor cantidad de energía para completar el proceso, pero como para calentar se trabaja con vapor y para enfriar con agua no son productos tóxicos que supongan un problema medioambiental, si se hubiera tenido que utilizar amoníaco en alguna de las diferentes simulaciones se tendría que tener en cuenta como producto potencialmente peligroso.

7. Conclusiones

Durante el curso de este proyecto se ha trabajado para obtener dos métodos capaces de separar el acetonitrilo del agua a niveles de pureza elevada y compararlos para determinar qué sistema es más eficiente. Se decidió emplear la técnica del *Pressure Swing* debido a la alta sensibilidad de la mezcla con la presión, para el segundo método se decidió utilizar un tercer componente que consiguiera que en el diagrama ternario no existiera azeótropo y se escogió el 1-cloropropano debido a que el modelo termodinámico se ajustaba realmente bien a la realidad. En los dos procesos se ha conseguido obtener el acetonitrilo con una pureza mayor al 99.4% recuperando casi todo el acetonitrilo de la mezcla.

Para realizar la comparación de los casos y al no tener los valores del precio industrial de los productos se decidió utilizar un método alternativo: comparar el precio de venta necesario para recuperar la inversión durante la vida del proyecto.

El valor obtenido para el primer método es de 4.340 \$/m³ y en el segundo es de 5.185 \$/m³.

En primer lugar, cabe aclarar que estos valores por si mismos no son acordes a la realidad, dado son valores demasiado bajos. No obstante, el objetivo de este trabajo reside en comparar que método es más eficiente de los dos a partir del mismo cabal inicial, por lo que estos valores cumplen su función a la perfección. Se puede concluir que el método del *Pressure Swing* es más eficiente que la destilación extractiva: para recuperar la inversión total de cada método en un periodo de 10 años, es posible vender el acetonitrilo a un precio menor en el primer método respecto al segundo. Por lo tanto, en caso de vender el producto al mismo precio, el *Pressure Swing* proporciona un mayor beneficio.

En este caso el dato clave es que la diferencia de litros producidos al año entre los dos sistemas que es de 11699.247 L, este valor ha resultado ser determinante para que el valor de \$/m³ sea menor en el primer sistema. Comparando los costes de los elementos y de servicio durante los 10 años de vida del proyecto se puede observar que la diferencia no es muy elevada (aproximadamente del 3,5%) siendo el primer caso el más costoso (y sin incluir los costes del agente separador, el 1-cloropropano).

Por otro lado, se ha de tener en cuenta que todos estos costes están realizados para un proyecto entre el año 2000 y 2010. De esta manera, no es necesario extrapolar el valor del índice de *Chemical Engineering* hasta el 2032. Debido a que el objetivo era comparar ambos proyectos, el año de inicio no era de importancia mientras que los dos métodos fueran calculados para el mismo periodo de

Es necesario comentar que en los dos casos el grueso de los gastos se encuentra en los costes de servicio, que suponen el 86% y 84% del coste total respectivamente de cada uno de los sistemas. Centrándose en las columnas, el coste de instalación de la destilación extractiva prácticamente duplica

al coste de instalación del *pressure swing*. Este hecho puede observarse claramente en los costes de la segunda columna; que requiere una cantidad de platos mucho mayor que todas las otras.

En conclusión, se ha conseguido obtener que método ha sido más eficiente, siendo ese el objetivo principal, otros objetivos como el de obtener modelos termodinámicos que sean capaces de aproximarse a la realidad y el de realizar un análisis de los diferentes compuestos respecto al medio ambiente también se han cumplido.

8. Bibliografía

- [1] Federico G. Salazar. (2010). PROCESOS DE SEPARACIÓN: UN ENFOQUE INTEGRADO. *Revista Ingeniería Primero*, 70–83.
- [2] Galán Casado, S. (2014). *APUNTES DE OPERACIONES DE SEPARACIÓN POR TRANSFERENCIA DE MATERIA I*.
- [3] Palacio González, E., Tamayo, L. M., Asesor, M., & Sebastián Gómez, J. (2013). *Separación ternaria de una mezcla azeotrópica isopropanol - agua*.
- [4] Deorukhkar, O. A., Rahangdale, T. B., & Mahajan, Y. S. (2016). Entrainer Selection Approach for Distillation Column. In *International Journal of Chemical Engineering Research* (Vol. 8, Issue 1). <http://www.ripublication.com>
- [5] LAWRENCE VARGAS, W., GÓMEZ RAMÍREZ, J. M., & LEAL, J. O. (2017). *MÉTODO PARA LA SEPARACIÓN DE MEZCLAS QUÍMICAS AZEOTRÓPICAS MEDIANTE ADICIÓN DE NANOPARTÍCULAS*.
- [6] Vedantu. (2022, 29 noviembre). *Azeotropes*. Recuperado 21 de noviembre de 2022, de <https://www.vedantu.com/chemistry/azeotropes>
- [7] Seider, W. D., Seader, J. D., Lewin, D. R., & Widagdo, S. *PRODUCT AND PROCESS DESIGN PRINCIPLES*, 249-269.
- [8] Hilmen, E.-K. (2000). *Separation of Azeotropic Mixtures: Tools for Analysis and Studies on Batch Distillation Operation*, 16-40.
- [9] Brennecke, J. F., & Maginn, E. J. (2001). Ionic Liquids: Innovative Fluids for Chemical Processing. *AIChE Journal*.
- [10] Lei, Z., Li, C., & Chen, B. (2003). Extractive distillation: A review. *Separation and Purification Reviews*, 32(2), 121–213. <https://doi.org/10.1081/SPM-120026627>
- [11] Pereiro, A. B., Araújo, J. M. M., Esperança, J. M. S. S., Marrucho, I. M., & Rebelo, L. P. N. (2012). Ionic liquids in separations of azeotropic systems - A review. In *Journal of Chemical Thermodynamics* (Vol. 46, pp. 2–28). <https://doi.org/10.1016/j.jct.2011.05.026>
- [12] Kiss, A. A., Jobson, M., & Gao, X. (2019). Reactive Distillation: Stepping Up to the Next Level of Process Intensification. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 58(15), 5909–5918. <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.8b05450>
- [13] Ollero de Castro, P. (2020). *Fundamentos de las operaciones de separación de transferencia de masa*.
- [14] Noguera, I. B. (2021, 12 enero). *¿Qué es la pervaporación?* Ingeniería Química Reviews. Recuperado 19 de noviembre de 2022, de <https://ingenieriaquimicareviews.com/2021/12/que-es-la-pervaporacion.html>

- [15] Himes, B. W., & Clive Greenough, R. (1993). *METHOD OF PURIFICATION OF ACETONITRILE* (Vol. 972, Issue 64).
- [16] Girard, I. Baudouin, O. ; ProSim. (2022, December 15). How to select and set up a thermodynamic model in a process simulator? [Webinar].
- [17] Li, J., Wang, K., Lian, M., Li, Z., & Du, T. (2019). Process simulation of the separation of aqueous acetonitrile solution by pressure swing distillation. *Processes*, 7(7).
<https://doi.org/10.3390/pr7070409>
- [18] *Vapor-Liquid Equilibrium Data*. (2022, 14 septiembre). Dortmund Data Bank. Recuperado 2 de octubre de 2022, de <http://www.ddbst.com/en/EED/VLE/VLE+Acetonitrile;Water.php>
- [19] Yu, B. Y., Huang, R., Zhong, X. Y., Lee, M. J., & Chien, I. L. (2017). Energy-Efficient Extraction-Distillation Process for Separating Diluted Acetonitrile-Water Mixture: Rigorous Design with Experimental Verification from Ternary Liquid-Liquid Equilibrium Data. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 56(51), 15112–15121. <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.7b04408>
- [20] Jiménez Gutiérrez, A. *DISEÑO DE PROCESOS EN INGENIERÍA QUÍMICA*, 149–176.
- [21] Sánchez Montero, R. (2020). Ingeniería básica de una planta de producción de etanol a partir de gas de síntesis. *Dpto. Ingeniería Química y Ambiental Escuela Técnica Superior de Ingeniería Universidad de Sevilla*.
- [22] Peters, M. S., Timmerhaus, K. D., & West, R. E. *Plant Design and Economics for Chemical Engineers*, 510-520.
- [23] Wu, Y. C., Chien, I. L., & Luyben, W. L. (2009). Two-stripper/decanter flowsheet for methanol recovery in the tame reactive-distillation process. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 48(23), 10532–10540. <https://doi.org/10.1021/ie900670f>
- [24] *SigmaAldrich*. Recuperado 16 de enero de 2023, de <https://www.sigmaaldrich.com/NL/en>
- [25] *Chemical Engineering Plant Cost Index*. University of Manchester, Department of Chemical Engineering. Recuperado 17 de enero de 2023, de https://personalpages.manchester.ac.uk/staff/tom.rodgers/Interactive_graphs/CEPCI.html?re-actors/CEPCI/index.html

9. Anexo A

Gráficos y tablas de las valoraciones para los paquetes termodinámicos.

A1. Método 1 (*Pressure Swing*)

Presión 1 atmosfera

Tabla 9.1. Valores experimentales a 1 atmosfera. [18]

	T [°C]	x1 [mol/mol]	y1 [mol/mol]
1	86.5	0.029	0.263
2	81.1	0.093	0.505
3	80	0.142	0.559
4	78.6	0.254	0.617
5	77.4	0.402	0.655
6	76.7	0.507	0.664
7	76.6	0.527	0.673
8	76	0.718	0.728
9	76.6	0.839	0.780
10	76.8	0.856	0.761
11	80.4	0.986	0.945

Tabla 9.2. Valores paquete termodinámico WILSON a 1 atmosfera.

	x [mol/mol]	y [mol/mol]	Tx (°C)	Ty (°C)
1	0.0000	0.0000	99.997	99.998

2	0.0333	0.3237	90.175	99.110
3	0.0667	0.4544	85.221	98.197
4	0.1000	0.5217	82.383	97.259
5	0.1333	0.5618	80.613	96.295
6	0.1667	0.5880	79.441	95.300
7	0.2000	0.6062	78.630	94.277
8	0.2333	0.6197	78.046	93.220
9	0.2667	0.6301	77.614	92.129
10	0.3000	0.6385	77.284	91.000
11	0.3333	0.6453	77.026	89.838
12	0.3667	0.6513	76.820	88.628
13	0.4000	0.6566	76.652	87.368
14	0.4333	0.6615	76.512	86.067
15	0.4667	0.6661	76.393	84.717
16	0.5000	0.6705	76.291	83.319
17	0.5333	0.6750	76.203	81.874
18	0.5667	0.6797	76.128	80.394
19	0.6000	0.6846	76.065	78.909
20	0.6333	0.6901	76.015	77.484
21	0.6667	0.6961	75.981	76.382
22	0.7000	0.7032	75.961	75.970

23	0.7333	0.7114	75.977	76.126
24	0.7667	0.7212	76.024	76.569
25	0.8000	0.7333	76.126	77.167
26	0.8333	0.7488	76.306	77.838
27	0.8667	0.7690	76.607	78.565
28	0.9000	0.7968	77.099	79.320
29	0.9333	0.8365	77.907	80.090
30	0.9667	0.8976	79.265	80.868
31	1.0000	1.0000	81.647	81.648

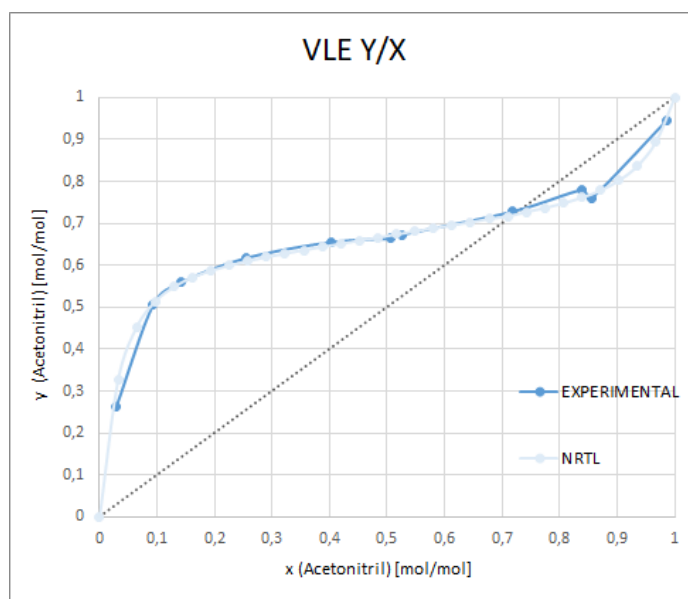


Figura 9.1. Gráfica XY con el paquete termodinámico NRTL a 1 atmosfera de presión.

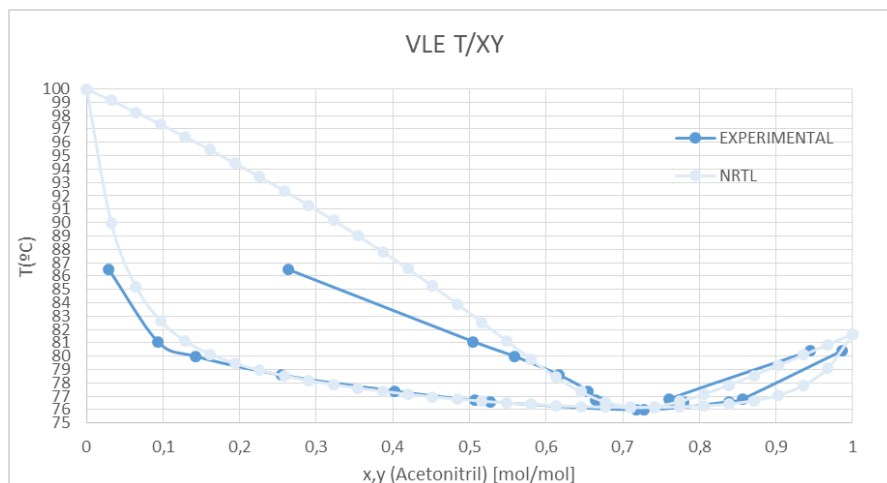


Figura 9.2. Gráfica TXY con el paquete termodinámico NRTL a 1 atmósfera de presión.

Tabla 9.3. Valores paquete termodinámico NRTL a 1 atmósfera.

	x [mol/mol]	y [mol/mol]	T _x (°C)	T _y (°C)
1	0.0000	0.0000	99.997	99.998
2	0.0333	0.3275	89.989	99.136
3	0.0645	0.4526	85.215	98.251
4	0.0968	0.5137	82.651	97.341
5	0.1290	0.5485	81.136	96.407
6	0.1613	0.5710	80.157	95.444
7	0.1935	0.5871	79.470	94.454
8	0.2258	0.5996	78.952	93.433
9	0.2581	0.6102	78.537	92.379
10	0.2903	0.6195	78.189	91.291
11	0.3226	0.6280	77.886	90.166

12	0.3548	0.6361	77.617	89.002
13	0.3871	0.6438	77.376	87.796
14	0.4194	0.6514	77.160	86.547
15	0.4516	0.6589	76.965	85.256
16	0.4839	0.6663	76.792	83.919
17	0.5161	0.6736	76.640	82.544
18	0.5484	0.6809	76.508	81.141
19	0.5806	0.6881	76.397	79.744
20	0.6129	0.6955	76.307	78.433
21	0.6452	0.7029	76.238	77.339
22	0.6774	0.7106	76.191	76.568
23	0.7098	0.7169	76.168	76.197
24	0.7419	0.7272	76.171	76.242
25	0.7742	0.7367	76.208	76.613
26	0.8065	0.7478	76.289	77.179
27	0.8387	0.7611	76.433	77.841
28	0.8710	0.7784	76.678	78.563
29	0.9032	0.8021	77.092	79.317
30	0.9355	0.8373	77.811	80.088
31	0.9677	0.8947	79.115	80.867
32	1.0000	1.0000	81.647	81.648

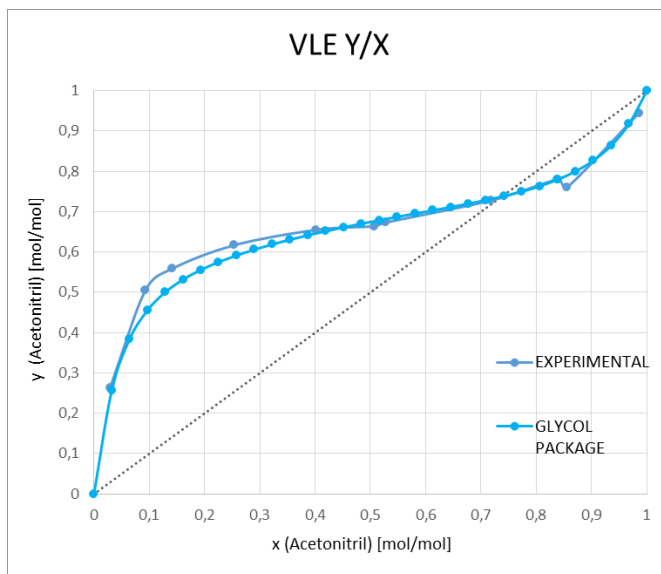


Figura 9.3. Gráfica XY con el paquete termodinámico GLYCOL PACKAGE a 1 atmosfera de presión.

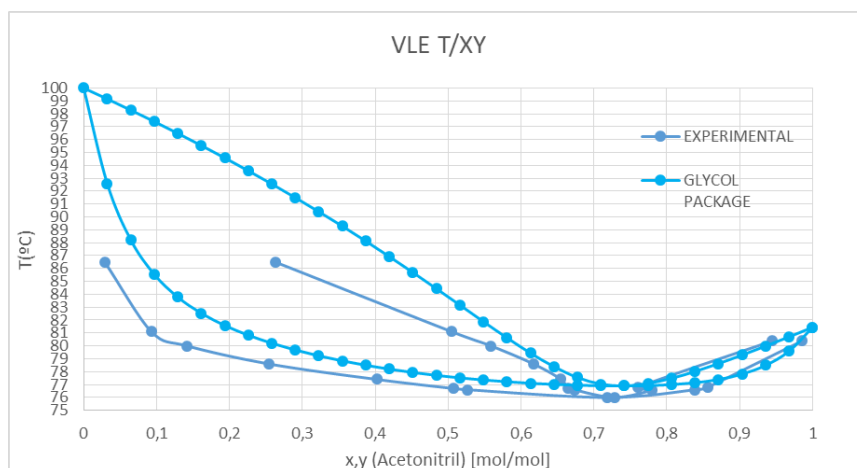


Figura 9.4. Gráfica TXY con el paquete termodinámico GLYCOL PACKAGE a 1 atmosfera de presión.

Tabla 9.4. Valores paquete termodinámico GLYCOL PACKAGE a 1 atmosfera.

	x [mol/mol]	y [mol/mol]	Tx (°C)	Ty (°C)
1	0.0000	0.0000	100.000	100.001
2	0.0333	0.2569	92.597	99.157
3	0.0645	0.3842	88.227	98.291

4	0.0968	0.4555	85.550	97.401
5	0.1290	0.5004	83.786	96.488
6	0.1613	0.5319	82.533	95.548
7	0.1935	0.5559	81.585	94.580
8	0.2258	0.5753	80.831	93.584
9	0.2581	0.5917	80.210	92.558
10	0.2903	0.6061	79.684	91.500
11	0.3226	0.6190	79.231	90.409
12	0.3548	0.6308	78.839	89.288
13	0.3871	0.6416	78.497	88.122
14	0.4194	0.6518	78.199	86.926
15	0.4516	0.6613	77.939	85.697
16	0.4839	0.6703	77.714	84.439
17	0.5161	0.6789	77.521	83.167
18	0.5484	0.6871	77.357	81.881
19	0.5806	0.6952	77.218	80.627
20	0.6129	0.7033	77.104	79.443
21	0.6452	0.7115	77.014	78.394
22	0.6774	0.7200	76.947	77.552
23	0.7098	0.7289	76.906	77.036
24	0.7419	0.7389	76.894	76.897

25	0.7742	0.7502	76.914	77.091
26	0.8065	0.7633	76.994	77.486
27	0.8387	0.7796	77.141	78.018
28	0.8710	0.8001	77.394	78.625
29	0.9032	0.8270	77.812	79.289
30	0.9355	0.8640	78.490	79.986
31	0.9677	0.9176	79.596	80.705
32	1.0000	1.0000	81.437	81.438

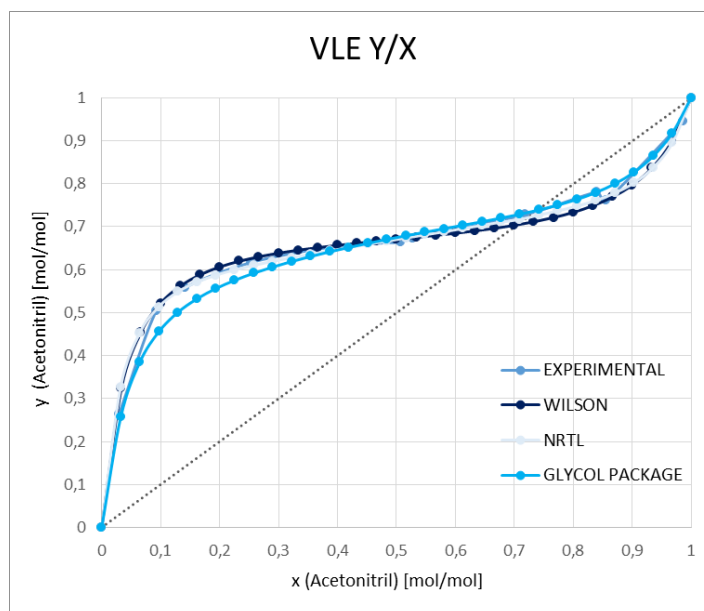


Figura 9.5. Gráfica XY comparando los paquetes termodinámicos a 1 atmósfera de presión.

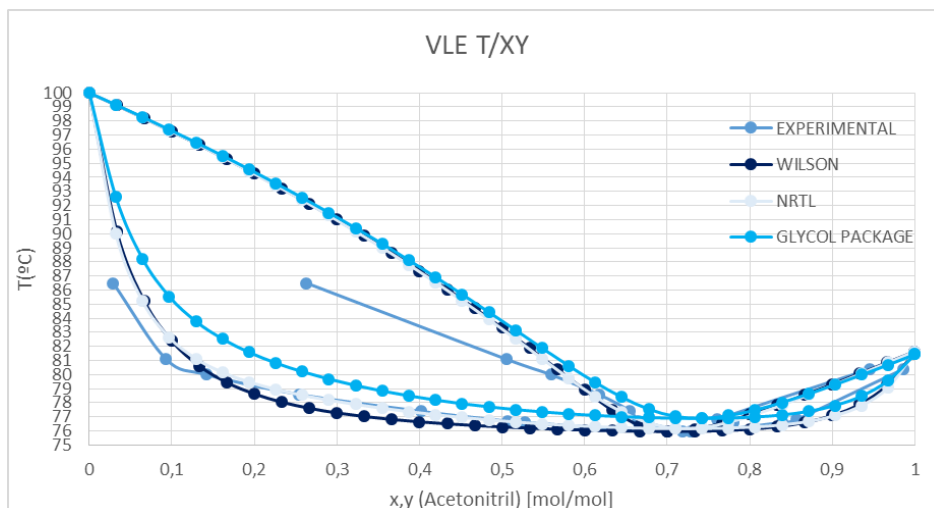


Figura 9.6. Gráfica TXY comparando los paquetes termodinámicos a 1 atm de presión.

Presión 20 kPa

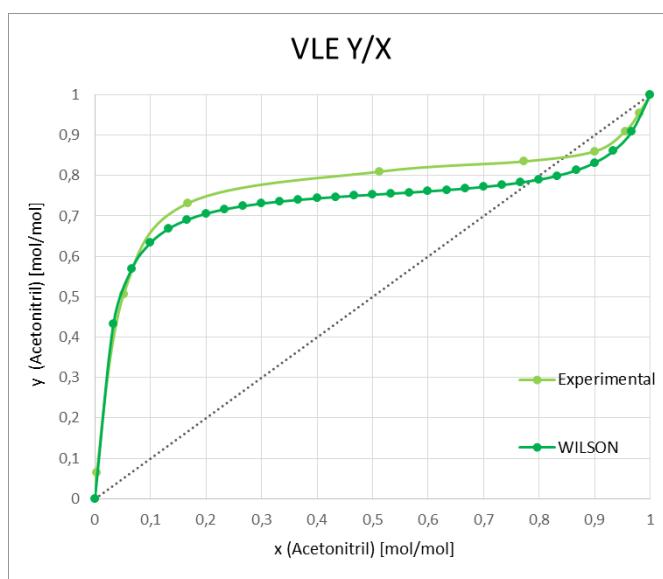


Figura 9.7. Gráfica XY con el paquete termodinámico WILSON a 20 kPa de presión.

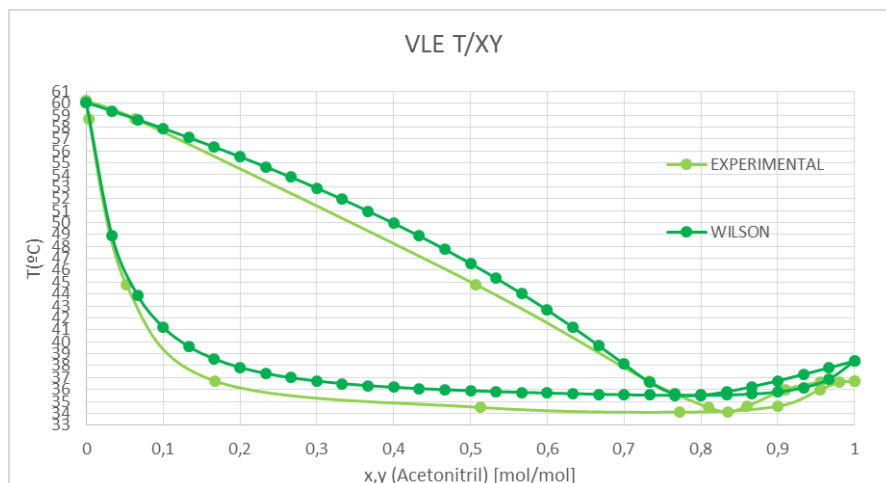


Figura 9.8. Gráfica TXY con el paquete termodinámico WILSON a 20 kPa de presión.

Tabla 9.5. Valores experimentales a 20 kPa. [18]

	T [°C]	x1 [mol/mol]	y1 [mol/mol]
1	60.2	0	0
2	58.7	0.003	0.064
3	44.8	0.052	0.507
4	36.7	0.168	0.732
5	34.5	0.513	0.810
6	34.1	0.772	0.835
7	34.6	0.900	0.860
8	36	0.955	0.91
9	36.6	0.98	0.955
10	36.7	1	1

Tabla 9.6. Valores paquete termodinámico WILSON a 20 kPa.

	x [mol/mol]	y [mol/mol]	T _x (°C)	T _y (°C)
1	0.0000	0.0000	60.065	60.066
2	0.0333	0.4322	48.908	59.363
3	0.0667	0.5697	43.914	58.641
4	0.1000	0.6332	41.225	57.897
5	0.1333	0.6686	39.607	57.131
6	0.1667	0.6907	38.565	56.339
7	0.2000	0.7057	37.856	55.522
8	0.2333	0.7164	37.355	54.676
9	0.2667	0.7244	36.988	53.800
10	0.3000	0.7307	36.712	52.891
11	0.3333	0.7358	36.498	51.947
12	0.3667	0.7400	36.329	50.964
13	0.4000	0.7436	36.193	49.945
14	0.4333	0.7469	36.081	48.875
15	0.4667	0.7498	35.985	47.748
16	0.5000	0.7526	35.903	46.572
17	0.5333	0.7554	35.830	45.337
18	0.5667	0.7581	35.765	44.035
19	0.6000	0.7611	35.706	42.663
20	0.6333	0.7643	35.653	41.216

21	0.6667	0.7678	35.605	39.700
22	0.7000	0.7719	35.563	38.126
23	0.7333	0.7767	35.529	36.603
24	0.7667	0.7825	35.504	35.619
25	0.8000	0.7899	35.506	35.538
26	0.8333	0.7996	35.536	35.816
27	0.8667	0.8128	35.619	36.240
28	0.9000	0.8317	35.798	36.735
29	0.9333	0.8605	36.155	37.270
30	0.9667	0.9086	36.868	37.824
31	1.0000	1.0000	38.388	38.390

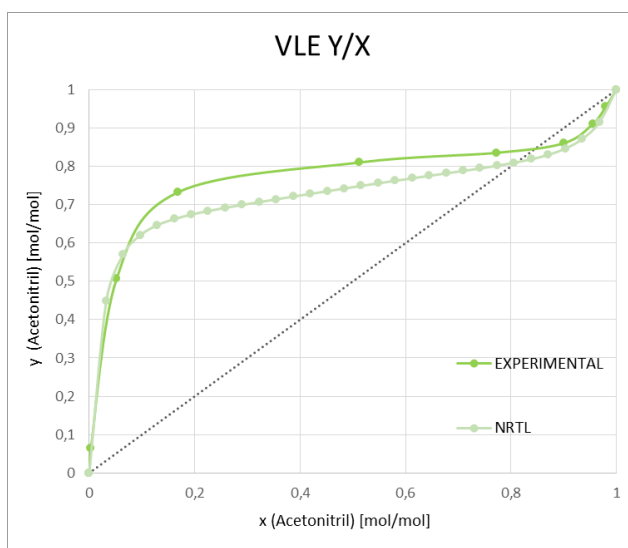


Figura 9.9. Gráfica XY con el paquete termodinámico NRTL a 20 kPa de presión.

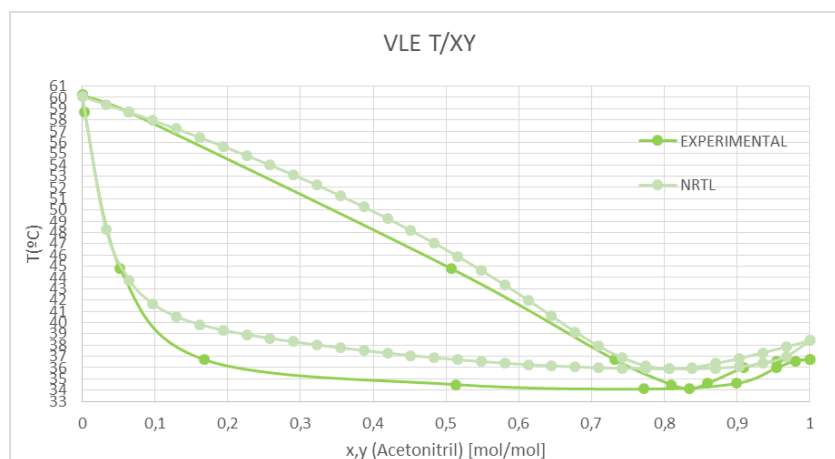


Figura 9.10. Gràfica TXY con el paquete termodinámico NRTL a 20 kPa de presión.

Tabla 9.7. Valores paquete termodinámico NRTL a 20 kPa de presión.

	x [mol/mol]	y [mol/mol]	T _x (°C)	T _y (°C)
1	0.0000	0.0000	60.065	60.066
2	0.0323	0.4483	48.291	59.382
3	0.0645	0.5701	43.784	58.681
4	0.0968	0.6201	41.685	57.959
5	0.1290	0.6462	40.544	57.215
6	0.1613	0.6624	39.833	56.448
7	0.1935	0.6740	39.332	55.657
8	0.2258	0.6833	38.938	54.839
9	0.2581	0.6916	38.603	53.992
10	0.2903	0.6992	38.302	53.116
11	0.3226	0.7066	38.025	52.206
12	0.3548	0.7138	37.765	51.260

13	0.3871	0.7210	37.521	50.276
14	0.4194	0.7280	37.292	49.249
15	0.4516	0.7350	37.078	48.178
16	0.4839	0.7420	36.881	47.057
17	0.5161	0.7488	36.700	45.881
18	0.5484	0.7556	36.537	44.646
19	0.5806	0.7622	36.392	43.352
20	0.6129	0.7687	36.265	41.996
21	0.6452	0.7751	36.157	40.589
22	0.6774	0.7815	36.066	39.184
23	0.7097	0.7878	35.993	37.914
24	0.7419	0.7944	35.938	36.883
25	0.7742	0.8014	35.900	36.176
26	0.8065	0.8091	35.882	35.891
27	0.8387	0.8182	35.895	36.020
28	0.8710	0.8299	35.954	36.370
29	0.9032	0.8462	36.088	36.820
30	0.9355	0.8714	36.376	37.320
31	0.9677	0.9147	36.994	37.848
32	1.0000	1.0000	38.388	38.390

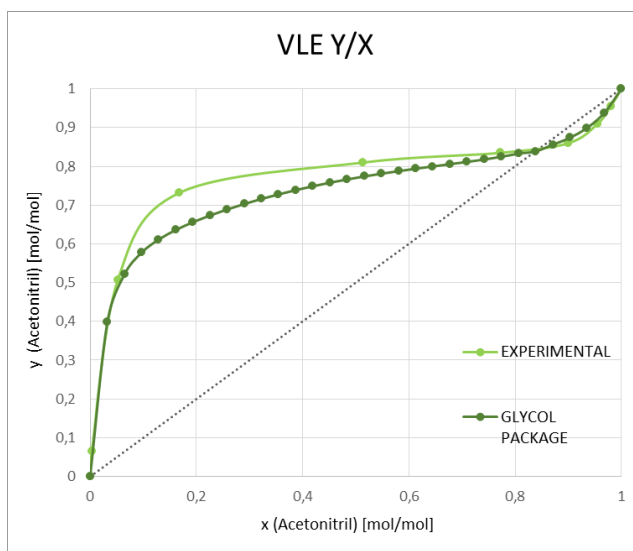


Figura 9.11. Gráfica XY con el paquete termodinámico GLYCOL PACKAGE a 20 kPa de presión.

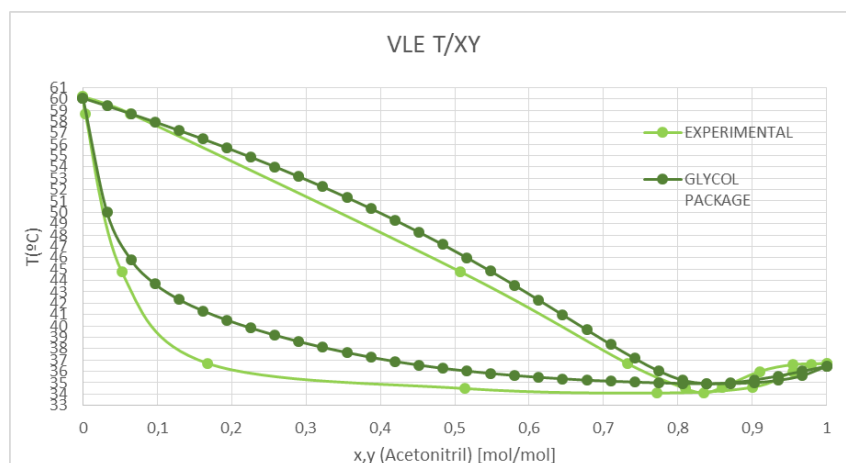


Figura 9.12. Gráfica TXY con el paquete termodinámico GLYCOL PACKAGE a 20 kPa de presión.

Tabla 9.8. Valores paquete termodinámico GLYCOL PACKAGE a 20 kPa.

	x [mol/mol]	y [mol/mol]	Tx (°C)	Ty (°C)
1	0.0000	0.0000	60.058	60.059
2	0.0323	0.3982	49.998	59.380
3	0.0645	0.5213	45.830	58.683

4	0.0968	0.5775	43.693	57.965
5	0.1290	0.6114	42.334	57.226
6	0.1613	0.6362	41.334	56.465
7	0.1935	0.6562	40.522	55.678
8	0.2258	0.6736	39.816	54.866
9	0.2581	0.6891	39.189	54.026
10	0.2903	0.7032	38.625	53.156
11	0.3226	0.7162	38.117	52.253
12	0.3548	0.7280	37.659	51.317
13	0.3871	0.7389	37.249	50.343
14	0.4194	0.7490	36.879	49.328
15	0.4516	0.7581	36.562	48.271
16	0.4839	0.7665	36.274	47.168
17	0.5161	0.7742	36.033	46.017
18	0.5484	0.7813	35.821	44.817
19	0.5806	0.7880	35.639	43.570
20	0.6129	0.7942	35.483	42.283
21	0.6452	0.8001	35.350	40.973
22	0.6774	0.8060	35.232	39.661
23	0.7097	0.8118	35.141	38.369
24	0.7419	0.8180	35.060	37.143

25	0.7742	0.8250	34.992	36.034
26	0.8065	0.8331	34.943	35.232
27	0.8387	0.8390	34.914	34.925
28	0.8710	0.8563	34.933	35.001
29	0.9032	0.8741	35.015	35.254
30	0.9355	0.8997	35.217	35.602
31	0.9677	0.9382	35.636	36.015
32	1.0000	1.0000	36.461	36.463

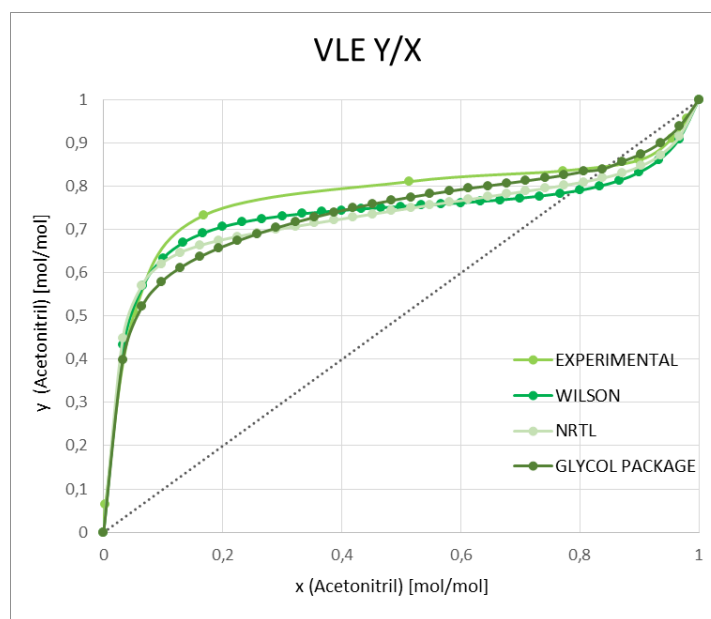


Figura 9.13. Gráfica XY comparando los paquetes termodinámicos a 20 kPa de presión.

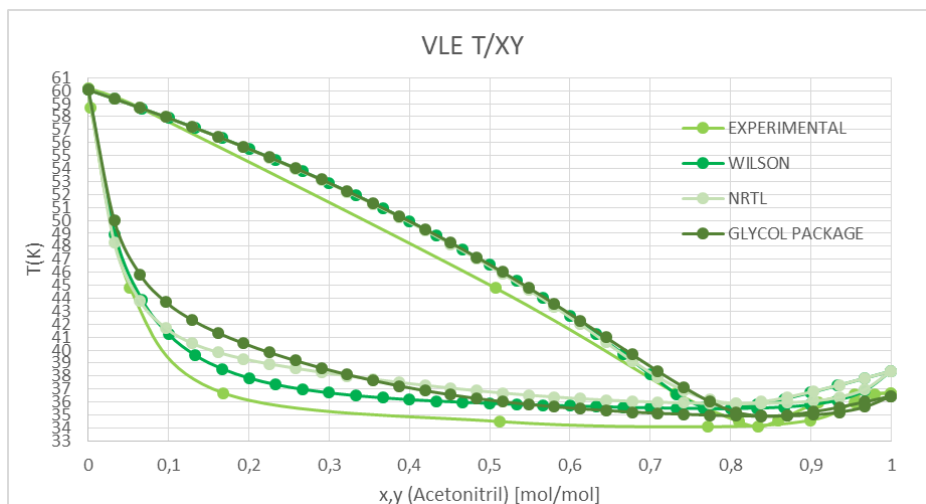


Figura 9.14. Gráfica TXY comparando los paquetes termodinámicos a 20 kPa de presión.

Presión 40 kPa

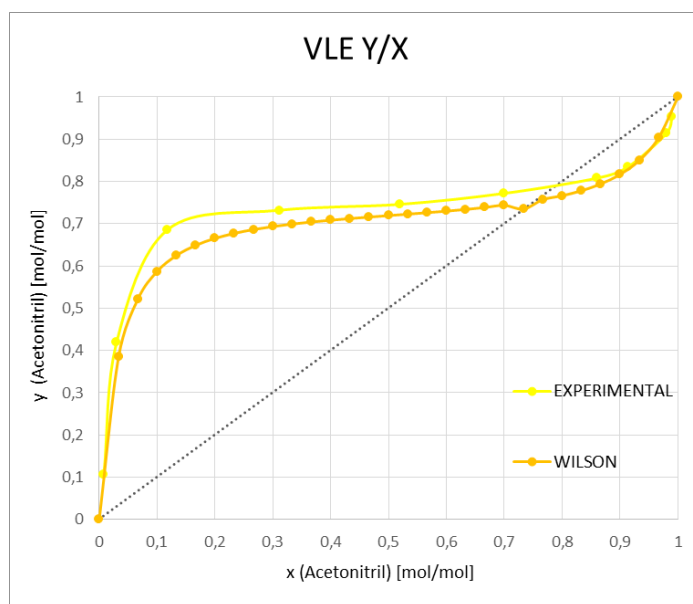


Figura 9.15. Gráfica XY con el paquete termodinámico WILSON a 40 kPa de presión.

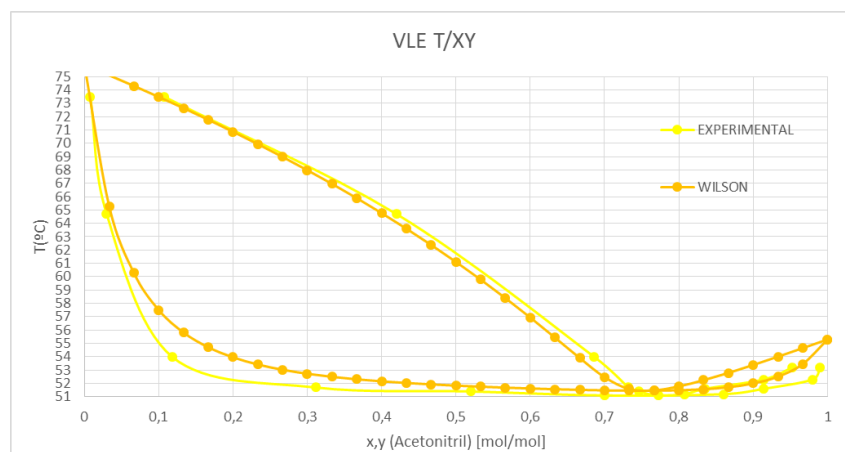


Figura 9.16. Gràfica TXY con el paquete termodinámico WILSON a 40 kPa de presión.

Tabla 9.9. Valores experimentales a 40 kPa. [18]

	T [°C]	x1 [mol/mol]	y1 [mol/mol]
1	73.5	0.008	0.107
2	64.7	0.03	0.42
3	54	0.118	0.686
4	51.7	0.311	0.732
5	51.4	0.52	0.746
6	51.1	0.7	0.772
7	51.2	0.86	0.808
8	51.6	0.914	0.835
9	52.3	0.98	0.914
10	53.2	0.99	0.953

Tabla 9.10. Valores paquete termodinámico WILSON a 40 kPa.

x [mol/mol]	y [mol/mol]	Tx (°C)	Ty (°C)
-------------	-------------	---------	---------

1	0.0000	0.0000	75.870	75.871
2	0.0333	0.3848	65.279	75.097
3	0.0667	0.5213	60.272	74.301
4	0.1000	0.5872	57.505	73.481
5	0.1333	0.6249	55.818	72.638
6	0.1667	0.6490	54.716	71.769
7	0.2000	0.6654	53.962	70.871
8	0.2333	0.6773	53.424	69.943
9	0.2667	0.6864	53.028	68.983
10	0.3000	0.6935	52.729	67.987
11	0.3333	0.6994	52.497	66.955
12	0.3667	0.7043	52.312	65.887
13	0.4000	0.7085	52.162	64.770
14	0.4333	0.7124	52.037	63.600
15	0.4667	0.7160	51.931	62.384
16	0.5000	0.7195	51.839	61.113
17	0.5333	0.7229	51.759	59.783
18	0.5667	0.7264	51.687	58.392
19	0.6000	0.7300	51.624	56.941
20	0.6333	0.7341	51.568	55.432
21	0.6667	0.7386	51.521	53.904

22	0.7000	0.7437	51.483	52.471
23	0.7333	0.7349	51.460	51.578
24	0.7667	0.7572	51.459	51.488
25	0.8000	0.7664	51.486	51.780
26	0.8333	0.7783	51.562	52.247
27	0.8667	0.7943	51.715	52.791
28	0.9000	0.8168	51.999	53.388
29	0.9333	0.8501	52.511	54.012
30	0.9667	0.9038	53.454	54.651
31	1.0000	1.0000	55.294	55.296

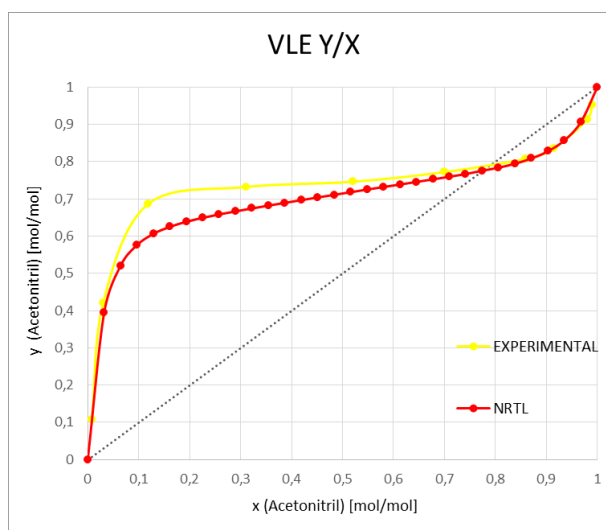


Figura 9.17. Gráfica XY con el paquete termodinámico NRTL a 40 kPa de presión.

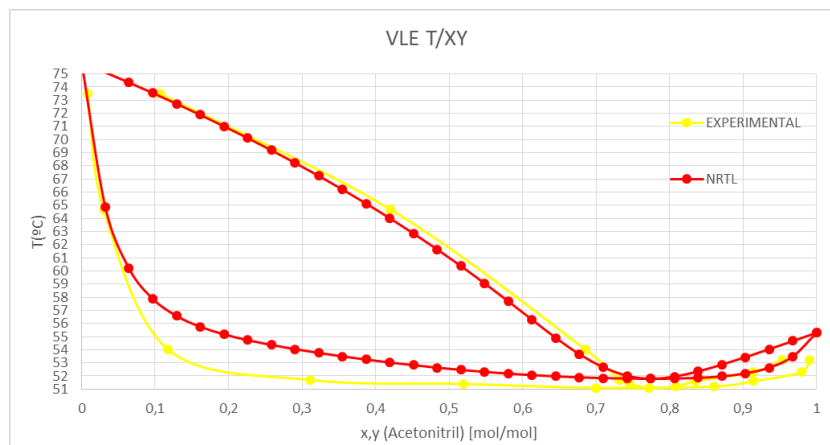


Figura 9.18. Gráfica XY con el paquete termodinámico NRTL a 40 kPa de presión.

Tabla 9.11. Valores paquete termodinámico NRTL a 40 kPa.

	x [mol/mol]	y [mol/mol]	Tx (°C)	Ty (°C)
1	0.0000	0.0000	75.870	75.871
2	0.0323	0.3955	64.846	75.119
3	0.0645	0.5208	60.188	74.346
4	0.0968	0.5763	57.878	73.551
5	0.1290	0.6063	56.576	72.733
6	0.1613	0.6251	55.753	71.890
7	0.1935	0.6386	55.177	71.021
8	0.2258	0.6493	54.733	70.124
9	0.2581	0.6584	54.367	69.195
10	0.2903	0.6667	54.048	68.236
11	0.3226	0.6745	53.761	67.241
12	0.3548	0.6821	53.498	66.208

13	0.3871	0.6895	53.256	65.135
14	0.4194	0.6968	53.032	64.018
15	0.4516	0.7040	52.826	62.855
16	0.4839	0.7111	52.638	61.642
17	0.5161	0.7181	52.468	60.375
18	0.5484	0.7251	52.317	59.058
19	0.5806	0.7320	52.184	57.688
20	0.6129	0.7388	52.071	56.285
21	0.6452	0.7456	51.976	54.907
22	0.6774	0.7525	51.900	53.658
23	0.7097	0.7596	51.843	52.678
24	0.7419	0.7669	51.807	52.025
25	0.7742	0.7758	51.793	51.795
26	0.8065	0.7840	51.803	51.956
27	0.8387	0.7948	51.862	52.353
28	0.8710	0.8087	51.973	52.864
29	0.9032	0.8280	52.204	53.437
30	0.9355	0.8573	52.638	54.041
31	0.9677	0.9064	53.495	54.665
32	1.0000	1.0000	55.294	55.296

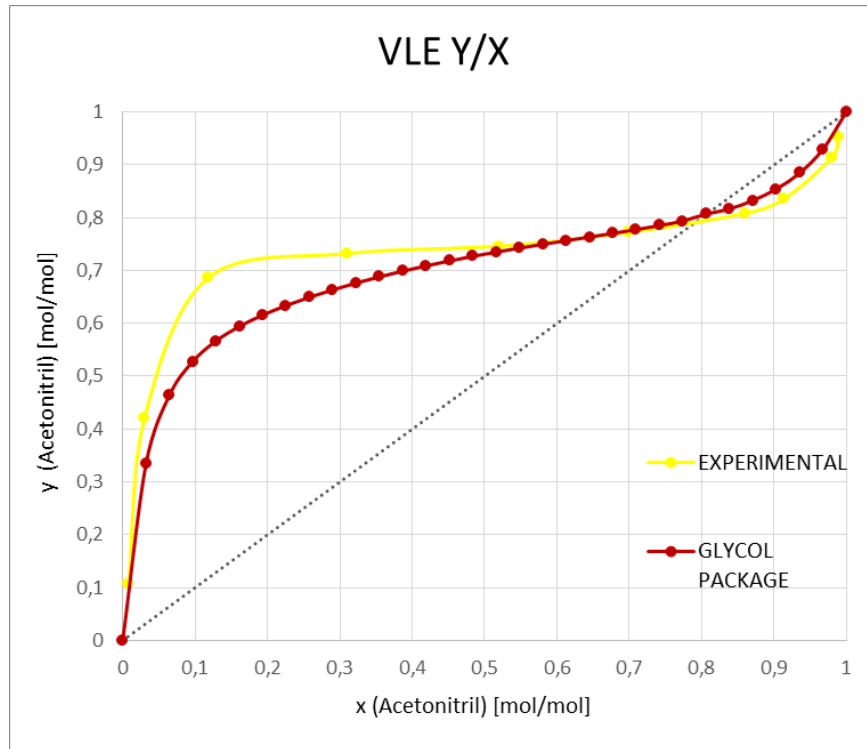


Figura 9.19. Gráfica XY con el paquete termodinámico GLYCOL PACKAGE a 40 kPa de presión.

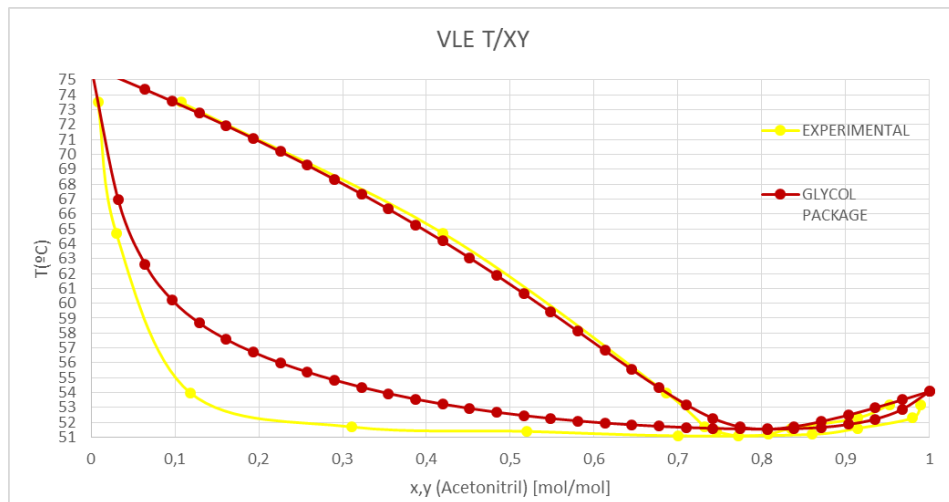


Figura 9.20. Gráfica TXY con el paquete termodinámico GLYCOL PACKAGE a 40 kPa de presión.

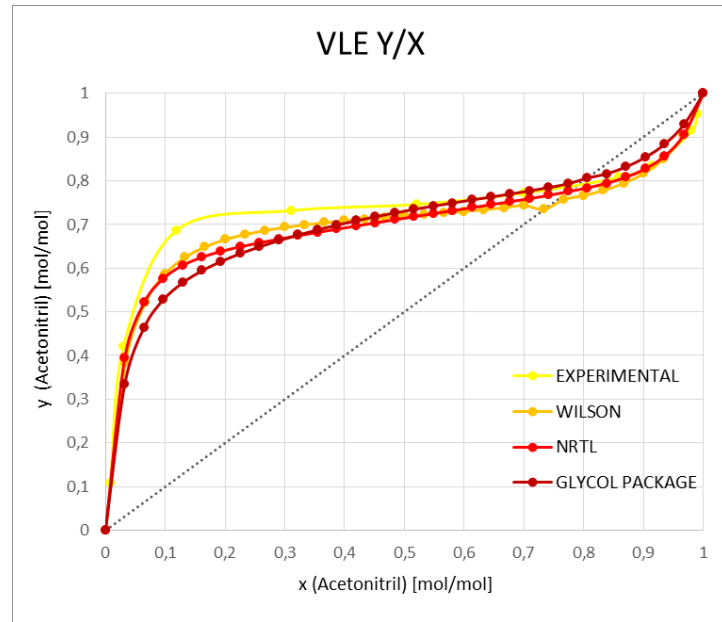


Figura 9.21. Gráfica XY comparando los paquetes termodinámicos a 40 kPa de presión.

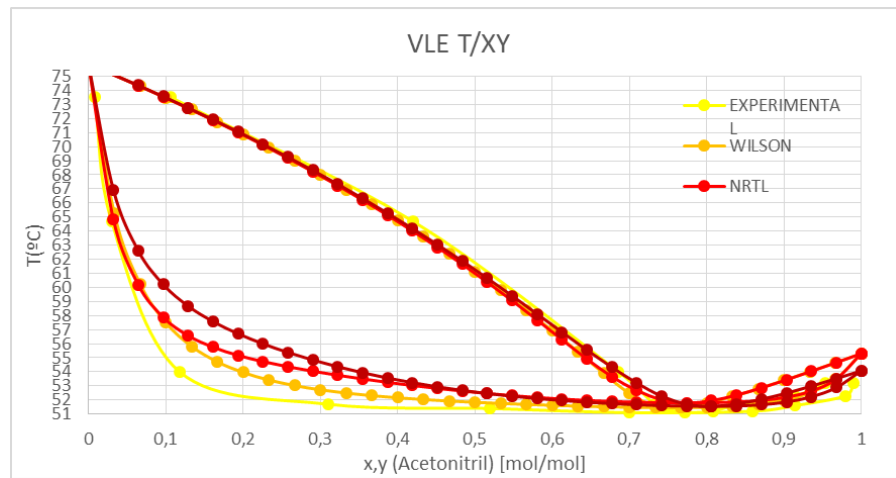


Figura 9.22. Gráfica XY comparando los paquetes termodinámicos a 40 kPa de presión.

Presión 10 atm

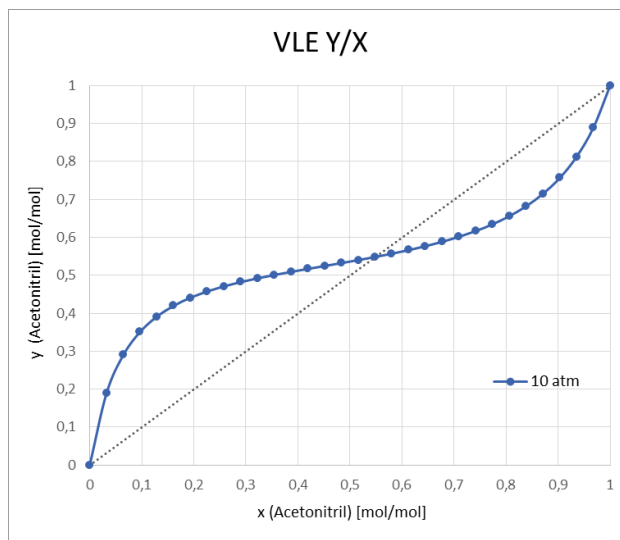


Figura 9.23 Gráfica XY para la mezcla acetoniitrilo-agua para 10 atmosfera de presión.

Tabla 9.12. Valores a 10 atmosferas de presión.

	x [mol/mol]	y [mol/mol]	T _x (°C)	T _y (°C)
1	0.0000	0.0000	180.463	180.464
2	0.0323	0.1894	172.740	179.215
3	0.0645	0.2901	168.249	177.939
4	0.0968	0.3510	165.437	176.635
5	0.1290	0.3913	163.579	175.307
6	0.1613	0.4198	162.295	173.948
7	0.1935	0.4410	161.379	172.561
8	0.2258	0.4576	160.705	171.146
9	0.2581	0.4710	160.198	169.704
10	0.2903	0.4823	159.807	168.238
11	0.3226	0.4922	159.502	166.754

12	0.3548	0.5011	159.261	165.259
13	0.3871	0.5093	159.070	163.775
14	0.4194	0.5171	158.920	162.312
15	0.4516	0.5248	158.805	160.941
16	0.4839	0.5324	158.722	159.762
17	0.5161	0.5402	158.669	158.941
18	0.5484	0.5484	158.653	158.654
19	0.5806	0.5571	158.674	158.897
20	0.6129	0.5665	158.735	159.526
21	0.6452	0.5768	158.843	160.408
22	0.6774	0.5885	159.020	161.460
23	0.7097	0.6016	159.272	162.608
24	0.7419	0.6168	159.622	163.829
25	0.7742	0.6347	160.101	165.094
26	0.8065	0.6561	160.748	166.384
27	0.8387	0.6822	161.621	167.686
28	0.8710	0.7148	162.801	168.993
29	0.9032	0.7568	164.407	170.298
30	0.9355	0.8123	166.620	171.597
31	0.9677	0.8890	169.722	172.887
32	1.0000	1.0000	174.165	174.167

A2. Método 2 (Destilación Extractiva)

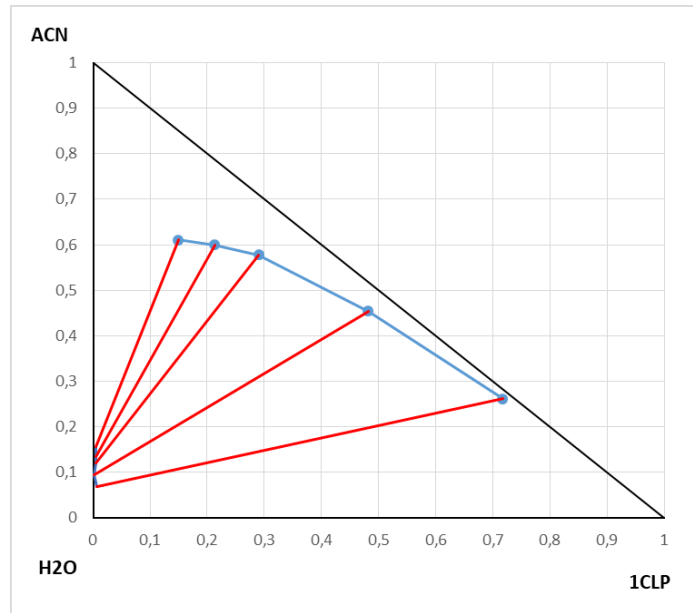


Figura 9.24. Diagrama ternario de los valores experimentales a 1 atmosfera de presión.

Tabla 9.13. Valores experimentales 1 atmosfera.

	ORGANIC-RICH PHASE			WATER-RICH PHASE		
	x 1CLP [mol/mol]	x ACN [mol/mol]	x H2O [mol/mol]	x 1CLP [mol/mol]	x ACN [mol/mol]	x H2O [mol/mol]
1	0.7169	0.2620	0.0211	0.0065	0.0680	0.9255
2	0.4822	0.4544	0.0634	0.0026	0.0944	0.9030
3	0.2903	0.5774	0.1323	0.0051	0.1212	0.8737
4	0.2134	0.5997	0.1869	0.0060	0.1348	0.8592
5	0.1494	0.6103	0.2403	0.0046	0.1554	0.8400

Tabla 9.14. Valores del paquete termodinámico NRTL a 1 atmosfera.

ORGANIC-RICH PHASE			WATER-RICH PHASE		
x	x	x	x	x	x

	1CLP [mol/mol]	ACN [mol/mol]	H2O [mol/mol]	1CLP [mol/mol]	ACN [mol/mol]	H2O [mol/mol]
1	0.0000	0.4210	0.5790	0.0000	0.7758	0.2242
2	0.0514	0.3285	0.6201	0.0049	0.8198	0.1753
3	0.1144	0.2580	0.6277	0.0057	0.8397	0.1546
4	0.1832	0.2048	0.6120	0.0057	0.8491	0.1451
5	0.2539	0.1639	0.5822	0.0057	0.8556	0.1387
6	0.3234	0.1317	0.5449	0.0055	0.8627	0.1318
7	0.3899	0.1059	0.5043	0.0053	0.8714	0.1233
8	0.4527	0.0845	0.4628	0.0051	0.8813	0.1136
9	0.5122	0.0666	0.4213	0.0048	0.8919	0.1033
10	0.5687	0.0513	0.3800	0.0045	0.9026	0.0929
11	0.6225	0.0384	0.3391	0.0042	0.9132	0.0826
12	0.6736	0.0277	0.2986	0.0040	0.9235	0.0725
13	0.7222	0.0192	0.2586	0.0037	0.9336	0.0627
14	0.7681	0.0127	0.2193	0.0035	0.9434	0.0531
15	0.8115	0.0079	0.1807	0.0033	0.9530	0.0437
16	0.8526	0.0045	0.1429	0.0031	0.9624	0.0345
17	0.8917	0.0023	0.1060	0.0029	0.9716	0.0254
18	0.9290	0.0011	0.0699	0.0027	0.9806	0.0166
19	0.9650	0.0004	0.0346	0.0026	0.9893	0.0081
20	0.9999	0.0001	0.0000	0.0024	0.9976	0.0000

10. Anexo B

B1. Método 2 (Destilación Extractiva)

Tabla 10.1. Índice Chemical Engineering des de 1995 hasta 2022. [25]

	Índice
1995	381.1
1996	381.7
1997	386.5
1998	389.5
1999	390.6
2000	394.1
2001	394.3
2002	395.6
2003	402
2004	444.2
2005	468.2
2006	499.6
2007	525.4
2008	575.4
2009	521.9
2010	550.8
2011	585.7

2012	584.6
2013	567.3
2014	576.1
2015	556.8
2016	541.7
2017	567.5
2018	603.1
2019	607.5
2020	596.2
2021	708
2022	813

B2. Cálculo de costes del método 1

Tabla 10.2. Costes del método 1.

	A	HORIZONTE (AÑO)										
		0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
COLUMNAS	CIT (\$)	133600.22	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	CM (\$)	-	2673	2682	2726	3012	3174	3387	3562	3901	3538	3734
	CS (\$)	-	186867.68	187483.78	190516.89	210516.42	221890.57	236771.74	248998.94	272695.07	247340.21	261036.57
COOLER	CI (\$)	10319.74	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	CO (\$)	-	14166	14212	14442	15958	16821	17949	18876	20672	18750	19788
	CS (\$)	-	1646	1652	1678	1855	1955	2086	2194	2402	2179	2300
BOMBAS	CI (\$)	6475.35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

-	CT (\$)	150395,31	205353,04	206030,09	209363,24	231341.17	243840.46	260193.71	273630.46	299670.66	271807.64	286858.88
-	CTac (\$)	150395.31	355748.36	561778.45	771141.68	1002482.85	1246323.31	1506517.03	1780147.48	2079818.14	2351625.79	2638484.67

B3. Cálculo de costes del método 2

Tabla 10.3. Costes del método 2.

A	HORIZONTE (AÑO)											
	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	
COLUMNAS	CIT (\$)	299881.10	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	CM (\$)	-	6000.67	6020.45	6117.85	6760.07	7125.31	7603.18	7995.81	8756.74	7942.55	8382.37
	CS (\$)	-	170403.73	170965.55	173731.43	191968.90	202340.93	215910.99	227060.92	248669.31	225548.34	238037.98

DECANTADOR	CI (\$)	108024.31	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
-	CT (\$)	407905.41	176404.40	176986.00	179849.27	198728.97	209466.24	223514.17	235056.74	257426.05	233490.89	246420.35
-	CTa c (\$)	407905.41	584309.81	761295.81	941145.09	1139874.06	1349340.30	1572854.47	1807911.21	2065337.26	2298828.15	2545248.49

11. Anexo C

En este apartado se explicarán heurísticas para una mejora energética de los sistemas.

C1. Integración energética del método 1

En este apartado se plantea una posible heurística para ahorrar energía del sistema en un futuro, para esta mejora energética no se ha tenido en cuenta el *Cooler* debido a que comparado con los valores de energía de las columnas se ha omitido para facilitar el encontrar una conclusión, y por ese motivo no se ha calculado el ΔT_{min} .

A continuación se realiza un gráfico con las entalpías donde de manera arbitraria se decide que la primera columna se inicie en un valor de entalpia de 0 kW hasta el valor de entalpia que necesita, seguido se introduce la segunda columna con sus valores específicos de temperatura en el condensador y el rehevridor. Esto se hace para poder visualizar el consumo de las columnas una detrás de otra, es decir, que ninguna columna proporcione energía a otra y realizar una restructuración del sistema para obtener un modelo más eficiente y lo más compacto posible. La energía de las columnas está distribuida de la siguiente forma:

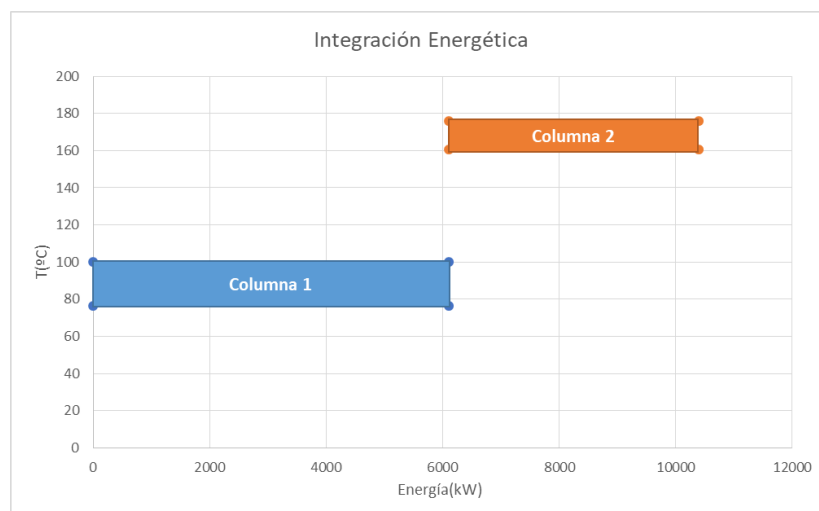


Figura 11.1. Valores energéticos de las columnas. Fuente propia

Entonces lo que se busca es compactar el valor de las columnas para dar una posible idea de donde se podría aprovechar la energía, en este caso al tener dos columnas el resultado sería:

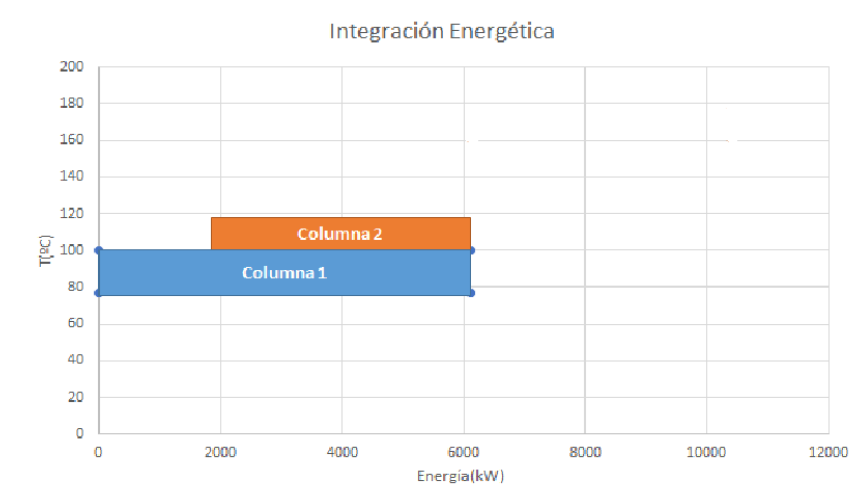


Figura 11.2. Integración energética de las columnas. Fuente propia

Realizando este proceso también se puede observar con facilidad que columna es la que requiera más energía de todas, en este caso se puede concluir que se podría aprovechar la energía de la columna 2, del condensador por ejemplo, para que la aprovechase la columna 1.

C2. Integración energética del método 2

Para la integración energética del segundo método se ha utilizado el mismo sistema que para el primero, es decir, encontrar si se puede aprovechar la energía de una columna para ahorrar en la otra columna, en este caso se obtiene:

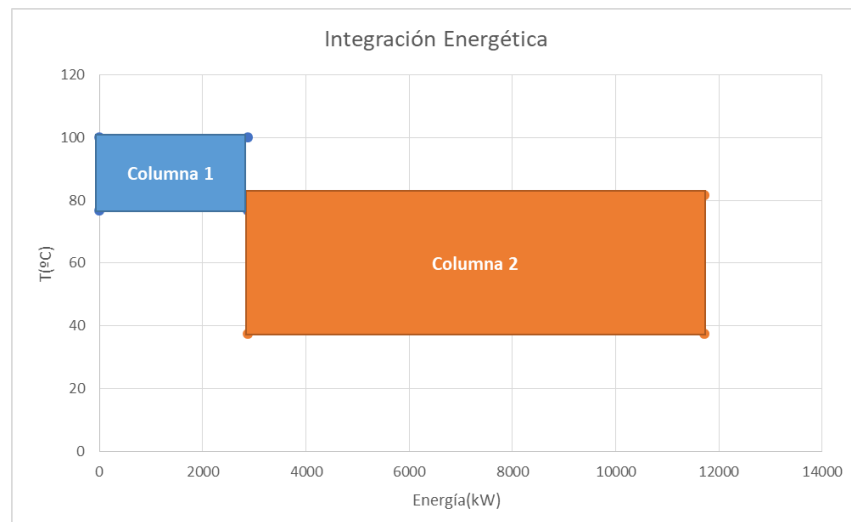


Figura 11.3. Valores energéticos de las columnas. Fuente propia

Teniendo en cuenta que solo existen dos columnas, el resultado podría ser el siguiente:

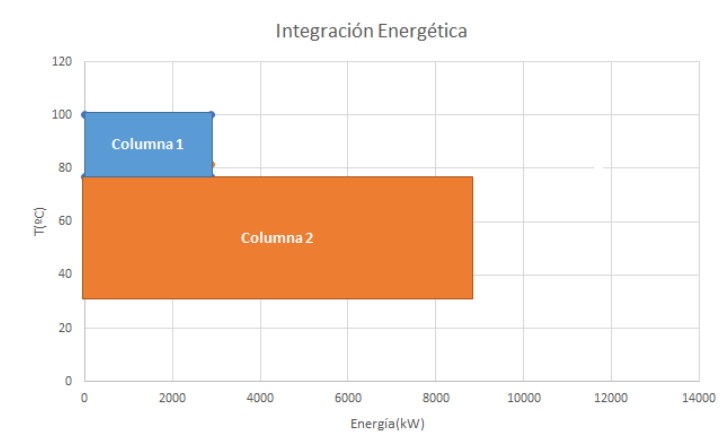


Figura 11.4. Integración energética de las columnas. Fuente propia

En este caso se visualiza como la energía de la columna 1 podría ser aprovechada para la columna 2 para ahorrar algo de energía, en este caso al ser la columna que proporciona energía menor que la del anterior método se debería de poder ahorrar menos energía.

12. Anexo D

En este anexo se encuentran las fichas de seguridad de los compuestos del proyecto.



D1. Ficha de seguridad del acetonitrilo



Acetonitrilo, HPLC grade

Fichas de datos de seguridad

conforme al Reglamento (CE) N° 1907/2006 (REACH), modificado por el Reglamento (UE) 2015/830
 Fecha de emisión: 31/10/2018 Versión: 1.0

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

1.1. Identificador del producto

Forma del producto	: Sustancia
Nombre comercial	: Acetonitrilo, HPLC grade
N° Índice	: 608-001-00-3
N° CE	: 200-835-2
N° CAS	: 75-05-8
Número de registro REACH	: 01-2119471307-38
Código de producto	: CL00.0174
Tipo de producto	: Materia pura
Fórmula química	: C ₂ H ₃ N
Sinónimos	: acetonitrilo / cianuro de metilo

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

1.2.1. Usos pertinentes identificados

Uso de la sustancia/mezcla : Sustancia para laboratorio

1.2.2. Usos desaconsejados

No se dispone de más información

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

Chem-Lab nv
 Industriezone "De Arend" 2
 Zedelgem - Belgium
 T +32 50 288320
info@chem-lab.be - www.chem-lab.be

1.4. Teléfono de emergencia

Número de emergencia : +32 50 28 83 20

SECCIÓN 2: Identificación de los peligros

2.1. Clasificación de la sustancia o de la mezcla

Clasificación según reglamento (UE) No. 1272/2008 [CLP]

Líquidos inflamables, categoría 2	H225
Toxicidad aguda (por inhalación), categoría 4	H332
Toxicidad aguda (cutánea), categoría 4	H312
Toxicidad aguda (oral), categoría 4	H302
Lesiones oculares graves o irritación ocular, categoría 2	H319
Texto completo de las frases H: véase la Sección 16	

Efectos adversos fisicoquímicos, para la salud humana y el medio ambiente

No se dispone de más información

2.2. Elementos de la etiqueta

Etiquetado según el Reglamento (CE) N° 1272/2008 [CLP]

Pictogramas de peligro (CLP) :



GHS02 GHS07

Palabra de advertencia (CLP) :

Peligro

Indicaciones de peligro (CLP) :

H225 - Líquido y vapores muy inflamables.
 H302+H312+H332 - Nocivo en caso de ingestión, contacto con la piel o inhalación.
 H319 - Provoca irritación ocular grave.

Consejos de prudencia (CLP) :

P210 - Mantener alejado del calor, de superficies calientes, de chispas, de llamas abiertas y de cualquier otra fuente de ignición. No fumar.
 P305+P351+P338 - EN CASO DE CONTACTO CON LOS OJOS: Enjuagar con agua cuidadosamente durante varios minutos. Quitar las lentes de contacto cuando estén presentes y pueda hacerse con facilidad. Proseguir con el lavado.
 P403+P235 - Almacenar en un lugar bien ventilado. Mantener en lugar fresco.

2.3. Otros peligros

Esta sustancia/mezcla no cumple los criterios PBT del anexo XIII del reglamento REACH

Esta sustancia/mezcla no cumple los criterios mPmB del anexo XIII del reglamento REACH

Acetonitrilo, HPLC grade

Fichas de datos de seguridad

conforme al Reglamento (CE) N° 1907/2006 (REACH), modificado por el Reglamento (UE) 2015/830

SECCIÓN 3: Composición/información sobre los componentes

3.1. Sustancias

Tipo de sustancia : Monoconstituyente

Nombre	Identificador del producto	%	Clasificación según reglamento (UE) No. 1272/2008 [CLP]
Acetonitrilo, HPLC grade	(N° CAS) 75-05-8 (N° CE) 200-835-2 (N° Índice) 608-001-00-3 (REACH-no) 01-2119471307-38	100	Flam. Liq. 2, H225 Acute Tox. 4 (Inhalation), H332 Acute Tox. 4 (Dermal), H312 Acute Tox. 4 (Oral), H302 Eye Irrit. 2, H319

Texto de las frases H: véase la sección 16.

3.2. Mezclas

No aplicable

SECCIÓN 4: Primeros auxilios

4.1. Descripción de los primeros auxilios

Medidas de primeros auxilios general	: Controlar las funciones vitales. Víctima inconsciente: mantener vías respiratorias abiertas. Paro de respiración: respiración artificial u oxígeno. Paro cardíaco: reanimación de la víctima. Consciente y dificultad para respirar: posición semi-sentado. Choque: preferentemente tumbado boca arriba, piernas elevadas. Vómito: evitar asfixia/pneumonía respiratoria. Cubrir la víctima para evitar enfriamiento (no calentar). Tener en observación permanente. Ofrecer apoyo psicológico. Calmar a la víctima y evitarle cualquier esfuerzo. Según su estado: médico/hospital.
Medidas de primeros auxilios en caso de inhalación	: Llevar a la víctima a un espacio ventilado. No dar respiración boca a boca. Problemas respiratorios: consultar médico/servicio médico.
Medidas de primeros auxilios en caso de contacto con la piel	: Lavar inmediatamente con abundante agua. Puede lavarse con jabón. No utilizar productos (químicos) neutralizantes. Si la irritación persiste, consultar con un médico.
Medidas de primeros auxilios en caso de contacto con los ojos	: Enjuagar inmediatamente con abundante agua. Quitar las lentes de contacto, si lleva y resulta fácil. Seguir aclarando. Si la irritación persiste, consultar con un oftalmólogo.
Medidas de primeros auxilios en caso de ingestión	: Lavar la boca con agua. Inmediatamente después de la ingestión: dar a beber mucha agua. No provocar vómito. Llamar centro de asistencia (www.big.be/antligif.htm). En caso de malestar, consultar al médico/servicio médico. Ingestión de gran cantidad: hospitalizar de inmediato. Enseñar el embalaje/vómito al médico/hospital. Médico: administrar un antídoto químico.

4.2. Principales síntomas y efectos, agudos y retardados

Síntomas/efectos después de inhalación	: EXPOSICIÓN A CONCENTRACIONES ELEVADAS: Irritación de las vías respiratorias. Irritación de las mucosas nasales. POSIBLE APARICIÓN ULTERIOR DE LOS SIGUIENTES SÍNTOMAS: Sensación de debilidad. Cefaleas. Vértigo. Confusión mental. Náusea. Vómito. Cambio en el hemograma/la composición sanguínea. Salivación abundante. Perturbación del ritmo cardíaco. Dificultades respiratorias. Pérdida del conocimiento. Calambres/contracciones musculares incontroladas. Riesgo de edema pulmonar.
Síntomas/efectos después de contacto con la piel	: POSIBLE APARICIÓN ULTERIOR DE LOS SIGUIENTES SÍNTOMAS: Síntomas similares a los causados por inhalación.
Síntomas/efectos después del contacto con el ojo	: Irritación del tejido ocular.
Síntomas/efectos después de ingestión	: Riesgo de neumonía por aspiración. POSIBLE APARICIÓN ULTERIOR DE LOS SIGUIENTES SÍNTOMAS: Síntomas similares a los causados por inhalación.
Síntomas crónicos	: POR EXPOSICIÓN/CONTACTO PROLONGADO O REPETIDO: No hay información específica disponible. LOS PRODUCTOS SIMILARES CAUSAN LOS SÍNTOMAS SIGUIENTES: Goteo de la nariz. Sensación de debilidad. Cefaleas. Vértigo. Dolores gastrointestinales. Pérdida del apetito. Pérdida de peso.

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

No se dispone de más información

SECCIÓN 5: Medidas de lucha contra incendios

5.1. Medios de extinción

Medios de extinción apropiados	: Extintor de polvo ABC de acción rápida. Extintor de polvo BC de acción rápida. Extintor de espuma clase B de acción rápida. Extintor de CO2 de acción rápida. Espuma clase B (resistente al alcohol). Agua pulverizada si el charco no puede expandirse.
Medios de extinción no apropiados	: Agua (extintor de acción rápida, carrete); riesgo de expansión del charco. Agua; riesgo de expansión del charco.

Acetonitrilo, HPLC grade

Fichas de datos de seguridad

conforme al Reglamento (CE) N° 1907/2006 (REACH), modificado por el Reglamento (UE) 2015/830

5.2. Peligros específicos derivados de la sustancia o la mezcla

Peligro de incendio	: PELIGRO DIRECTO DE INFLAMACIÓN: Líquido y vapores muy inflamables. Gas/vapor inflamable al aire dentro de límites de explosividad. PELIGRO INDIRECTO DE INFLAMACIÓN: Posible carga electrostática con riesgo superior de ignición. Inflamación posible por contacto con chispa. Gas/vapor se propaga por el suelo: riesgo de inflamación. Reacciones con riesgo de incendio: véase "Peligro de reactividad".
Peligro de explosión	: PELIGRO DIRECTO DE EXPLOSIÓN: Gas/vapor explosivo al aire dentro de límites de explosividad. PELIGRO INDIRECTO DE EXPLOSIÓN: Inflamable en contacto con chispas. Reacciones causando riesgo de explosión: véase "Reactividad".
Productos de descomposición peligrosos en caso de incendio	: En combustión: liberación de gases/vapores tóxicos y corrosivos (óxidos de nitrógeno, monóxido de carbono - dióxido de carbono).

5.3. Recomendaciones para el personal de lucha contra incendios

Instrucciones para extinción de incendio	: Enfriar depósitos con agua pulverizada/llevar a lugar seguro. No desplazar la carga expuesta al calor. Diluir el gas tóxico con agua pulverizada.
Protección durante la extinción de incendios	: Calentamiento/fuego: aparato aire comprimido/oxígeno.

SECCIÓN 6: Medidas en caso de vertido accidental

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

6.1.1. Para el personal que no forma parte de los servicios de emergencia

Equipo de protección	: Guantes. Gafas bien ajustadas. Protección de la cabeza y el cuello. Ropa de seguridad. Escape importante/espacio cerrado: aparato aire comprimido. Escape importante/en espacio cerrado: traje antigas. Reacción peligrosa: aparato aire comprimido/oxígeno. Reacción peligrosa: traje antigas.
Procedimientos de emergencia	: Colocarse del lado del viento. Delimitar la zona de peligro. Considerar la evacuación. Impedir paso a espacios subterráneos. Cerrar puertas y ventanas de edificios vecinos. Parar motores y no fumar. Evitar llamas descubiertas y chispas. Aparatos y lámparas apropiados para atmósfera explosiva. Cerrar los recipientes. Limpiar la ropa contaminada.

6.1.2. Para el personal de emergencia

No se dispone de más información

6.2. Precauciones relativas al medio ambiente

Impedir propagación en las alcantarillas.

6.3. Métodos y material de contención y de limpieza

Para retención	: Recoger/bombear producto derramado en recipiente apropiado. Detener el escape cortando el origen. Contener el líquido derramado. Tratar de reducir la evaporación. Medir concentración de mezcla explosiva de gas y aire. Cortina de agua para diluir/dispersar gas/vapor inflamable. Proveer conexión a tierra de los aparatos y recipientes. No emplear aire comprimido para bombear.
Procedimientos de limpieza	: Absorber líquido derramado con material incombustible p.ej.: arena/tierra/vermiculita. Recoger producto absorbido en recipientes con tapa. Recoger minuciosamente sólidos derramados y residuos. Vaciar las cisternas deterioradas/enfriadas. No emplear aire comprimido para bombear. Aclarar superficies ensuciadas con abundante agua. Entregar producto recogido al fabricante/organismo competente. Limpiar material y ropa al terminar el trabajo.

6.4. Referencia a otras secciones

No se dispone de más información

SECCIÓN 7: Manipulación y almacenamiento

7.1. Precauciones para una manipulación segura

Precauciones para una manipulación segura	: Utilizar aparatos/lámparas con seguridad de chispas y explosión. Tomar precauciones contra cargas electrostáticas. Mantener lejos de llamas descubiertas/del calor. Mantener lejos de fuentes de ignición/chispas. Medir periódicamente la concentración en el aire. Para el trabajo, proveer aspiración local/ventilación. Conforme a la normativa. Retirar de inmediato la ropa contaminada. Limpiar la ropa contaminada. Manipular recipientes vacíos sucios como los llenos. Limpiar/secar cuidadosamente la instalación antes de usar. No tirar los residuos a la alcantarilla. No emplear aire comprimido para el bombeado. Evitar el contacto del producto con el agua. Mantener el embalaje bien cerrado.
Medidas de higiene	: Observar higiene normal.

7.2. Condiciones de almacenamiento seguro, incluidas posibles incompatibilidades

Calor y fuentes de ignición	: CONSERVAR EL PRODUCTO ALEJADO DE: fuentes de calor. fuentes de ignición.
Información sobre almacenamiento mixto	: CONSERVAR EL PRODUCTO ALEJADO DE: agentes de oxidación. agentes de reducción. ácidos (fuertes). bases (fuertes). agua/humedad.
Lugar de almacenamiento	: Conservar en un lugar seco. Ventilación a nivel del suelo. Local protegido contra el fuego. Se necesita una cubeta para recoger desbordamiento. Conexión de la cisterna a tierra. Conservar a temperatura ambiente. Proteger contra la luz directa del sol. Cumple las normas aplicables.
Normativa particular en cuanto al envase	: REQUISITOS ESPECIALES: hermético. seco. limpio. correctamente rotulado. ajustado a las normas. Colocar el embalaje frágil en un contenedor sólido.

Acetonitrilo, HPLC grade

Fichas de datos de seguridad

conforme al Reglamento (CE) N° 1907/2006 (REACH), modificado por el Reglamento (UE) 2015/830

Material de embalaje : MATERIAL APROPIADO: acero inoxidable, aluminio, hierro, polietileno, vidrio. MATERIAL A EVITAR: cobre, plásticos.

7.3. Usos específicos finales

No se dispone de más información

SECCIÓN 8: Controles de exposición/protección individual

8.1. Parámetros de control

Acetonitrilo, HPLC grade (75-05-8)

UE	IOELV TWA (mg/m³)	70 mg/m³
UE	IOELV TWA (ppm)	40 ppm
Bélgica	Valor límite (mg/m³)	34 mg/m³
Bélgica	Valor límite (ppm)	20 ppm
Francia	VME (mg/m³)	70 mg/m³
Francia	VME (ppm)	40 ppm
Países Bajos	Grenswaarde TGG 8H (mg/m³)	34 mg/m³
Países Bajos	Grenswaarde TGG 8H (ppm)	20 ppm
Reino Unido	WEL TWA (mg/m³)	68 mg/m³
Reino Unido	WEL TWA (ppm)	40 ppm
Reino Unido	WEL STEL (mg/m³)	102 mg/m³
Reino Unido	WEL STEL (ppm)	60 ppm
USA - ACGIH	ACGIH TWA (ppm)	20 ppm

Acetonitrilo, HPLC grade (75-05-8)

DNEL/DMEL (Trabajadores)

Aguda - efectos sistémicos, inhalación	68 mg/m³
Aguda - efectos locales, inhalación	68 mg/m³
A largo plazo - efectos sistémicos, cutáneos	32,2 mg/kg peso corporal/día
A largo plazo - efectos sistémicos, inhalación	68 mg/m³
A largo plazo - efectos locales, inhalación	68 mg/m³

DNEL/DMEL (Población en general)

Aguda - efectos sistémicos, inhalación	220 mg/m³
Aguda - efectos sistémicos, oral	0,6 mg/kg peso corporal/día
Aguda - efectos locales, inhalación	22 mg/m³
A largo plazo - efectos sistémicos, inhalación	4,8 mg/m³
A largo plazo - efectos locales, inhalación	4,8 mg/m³

PNEC (Agua)

PNEC agua (agua dulce)	10 mg/l
PNEC agua (agua de mar)	1 mg/l

PNEC (Sedimentos)

PNEC sedimentos (agua dulce)	7,53 mg/kg de peso en seco
------------------------------	----------------------------

PNEC (Tierra)

PNEC tierra	2,41 mg/kg de peso en seco
-------------	----------------------------

PNEC (STP)

PNEC estación depuradora	32 mg/l
--------------------------	---------

8.2. Controles de la exposición

Ropa de protección - selección del material:

BUENA RESISTENCIA: caucho al butilo, polietileno clorado, tetrafluoroetileno, neopreno/caucho al butilo, neopreno/caucho natural, polietileno/alcohol etilvinílico. RESISTENCIA MEDIA: PVA. BAJA RESISTENCIA: caucho nitrílico, polietileno, caucho natural, neopreno, PVC, viton

Acetonitrilo, HPLC grade

Fichas de datos de seguridad

conforme al Reglamento (CE) N° 1907/2006 (REACH), modificado por el Reglamento (UE) 2015/830

Protección de las manos:
Guantes
Protección ocular:
Gafas bien ajustadas
Protección de la piel y del cuerpo:
Protección de la cabeza y del cuello. Ropa de seguridad
Protección de las vías respiratorias:
Máscara completa con filtro de tipo A si conc. en el aire > valor límite de exposición

SECCIÓN 9: Propiedades físicas y químicas

9.1. Información sobre propiedades físicas y químicas básicas

Forma/estado	: Líquido
Apariencia	: Líquido.
Masa molecular	: 41,05 g/mol
Color	: Incoloro.
Olor	: Olor suave. Olor aromático. Olor de éter.
Umbral olfativo	: No hay datos disponibles
pH	: No hay datos disponibles
Velocidad de evaporación relativa (acetato de butilo=1)	: 5,8
Punto de fusión	: -46 °C
Punto de solidificación	: No hay datos disponibles
Punto de ebullición	: 82 °C (1013 hPa)
Punto de inflamación	: 6 °C (Recipiente abierto)
Temperatura crítica	: 275 °C
Temperatura de autoignición	: 524 °C
Temperatura de descomposición	: > 120 °C
Inflamabilidad (sólido, gas)	: No hay datos disponibles
Presión de vapor	: 94,61 hPa (20 °C)
Presión crítica	: 48320 hPa
Densidad relativa de vapor a 20 °C	: 1,4
Densidad relativa	: 0,79 (20 °C)
Densidad relativa de mezcla saturada de vapor/aire	: 1,04
Densidad	: 787 kg/m³
Solubilidad	: Soluble en agua. Soluble en etanol. Soluble en éter. Soluble en acetona. Soluble en cloroformo. Soluble en acetato de metilo. Soluble en dicloroetano. Soluble en tetraclorometano. Soluble en tetracloroetano. Soluble en metanol. Soluble en acetato de etilo. Soluble en aceites/grasas. Agua: 100 g/100 ml (25 °C, completa) Etanol: completa Éter: completa Acetona: completa
Log Pow	: -0,54 (Enfoque sobre el peso de las pruebas, Equivalente o similar a OCDE 107, 25 °C)
Viscosidad, cinemática	: 3,8 mm²/s
Viscosidad, dinámica	: 3 mPa.s (40 °C)
Propiedades explosivas	: No hay datos disponibles
Propiedad de provocar incendios	: No hay datos disponibles
Límites de explosión	: 3,0 - 16,0 vol % 50 - 274 g/m³
Límite inferior de explosividad (LIE)	: 3 vol %
Límite superior de explosividad (LSE)	: 16 vol %

9.2. Otros datos

Conductividad	: 60000 pS/m
Concentración de saturación	: 163 g/m³
Contenido de COV	: 100 %

Acetonitrilo, HPLC grade

Fichas de datos de seguridad

conforme al Reglamento (CE) N° 1907/2006 (REACH), modificado por el Reglamento (UE) 2015/830

Otras propiedades : Gas/vapor más pesado que el aire a 20°C. Claro. Volátil. Reacción neutra. Puede acumular carga electrostática.

SECCIÓN 10: Estabilidad y reactividad

10.1. Reactividad

Reacciona violentamente con los oxidantes (fuertes): riesgo (superior) de incendio/explosión. Reacciona violentamente con los reductores (fuertes).

10.2. Estabilidad química

Inestable en exposición a la humedad.

10.3. Posibilidad de reacciones peligrosas

No se dispone de más información

10.4. Condiciones que deben evitarse

No se dispone de más información

10.5. Materiales incompatibles

No se dispone de más información

10.6. Productos de descomposición peligrosos

Violenta reacción exotérmica con (algunos) ácidos: liberación de gases/vapores tóxicos y corrosivos (óxidos de nitrógeno). Si es calentado: liberación de gases/vapores tóxicos/combustibles (ácido cianhídrico). Reacciona lentamente con agua (humedad): liberación de gases/vapores corrosivos (amoníaco, óxidos de nitrógeno).

SECCIÓN 11: Información toxicológica

11.1. Información sobre los efectos toxicológicos

Toxicidad aguda (oral) : Oral: Nocivo en caso de ingestión.

Toxicidad aguda (cutánea) : Cutáneo: Nocivo en contacto con la piel.

Toxicidad aguda (inhalación) : Inhalación: Nocivo en caso de inhalación.

Acetonitrilo, HPLC grade (75-05-8)

DL50 oral	617 mg/kg de peso corporal (Equivalente o similar a OCDE 401, Ratón, Masculino/femenino, Valor experimental, Oral, 14 día(s))
DL50 cutáneo conejo	> 2000 mg/kg de peso corporal (Equivalente o similar a OCDE 402, 24 h, Conejo, Masculino/femenino, Valor experimental, Dérmico, 14 día(s))

Corrosión o irritación cutáneas : No clasificado

Lesiones oculares graves o irritación ocular : Provoca irritación ocular grave.

Sensibilización respiratoria o cutánea : No clasificado

Mutagenicidad en células germinales : No clasificado

Carcinogenicidad : No clasificado

Toxicidad para la reproducción : No clasificado

Toxicidad específica en determinados órganos (STOT) – exposición única : No clasificado

Toxicidad específica en determinados órganos (STOT) – exposición repetida : No clasificado

Peligro por aspiración : No clasificado

Acetonitrilo, HPLC grade (75-05-8)

Viscosidad, cinemática	3,8 mm²/s
Efectos adversos y posibles síntomas para la salud humana	: Umbral de olor superior al valor límite de exposición. Tolerancia olfactiva puede manifestarse. Nocivo en caso de ingestión. Nocivo en contacto con la piel. No irritante para la piel. Nocivo en caso de inhalación. Irrita ligeramente las vías respiratorias. Provoca irritación ocular grave.

SECCIÓN 12: Información ecológica

12.1. Toxicidad

Ecología - general : No clasificado como peligroso para el medio ambiente según los criterios del Reglamento (CE) N° 1272/2008.

Ecología - aire : No figura en la lista de los gases fluorados de efecto invernadero (Reglamento (UE) n° 517/2014). No clasificado como peligroso para la capa de ozono (Reglamento (CE) n° 1005/2009).

Ecología - agua : No nocivo para crustáceos. Inofensivo para los peces. Contamina las aguas subterráneas. Ninguna inhibición del lodo activado. No retarda la nitrificación del sedimento activado. Inofensivo para las algas. Inofensivo para las bacterias.

Toxicidad acuática aguda : No clasificado

Toxicidad acuática crónica : No clasificado

Acetonitrilo, HPLC grade

Fichas de datos de seguridad

conforme al Reglamento (CE) N° 1907/2006 (REACH), modificado por el Reglamento (UE) 2015/830

Acetonitrilo, HPLC grade (75-05-8)	
CL50 peces 1	1640 mg/l (Otros, 96 h, Pimephales promelas, Sistema con corriente, Agua dulce (no salada), Valor experimental, Agua blanda (no alcalina))
CE50 Daphnia 1	> 1000 mg/l (OCDE 202, 48 h, Daphnia magna, Sistema semiestático, Agua dulce (no salada), Valor experimental, GLP)
ErC50 (algas)	9696 mg/l (ISO 10253, 72 h, Phaeodactylum, Sistema estático, Agua salada, Valor experimental, GLP)

12.2. Persistencia y degradabilidad

Acetonitrilo, HPLC grade (75-05-8)	
Persistencia y degradabilidad	Fácilmente biodegradable en agua.
Demanda Bioquímica de Oxígeno (DBO)	0,17 g O ₂ /g sustancia
DthO	3,12 g O ₂ /g sustancia

12.3. Potencial de bioacumulación

Acetonitrilo, HPLC grade (75-05-8)	
FBC otros organismos acuáticos 1	3,162 (BCFWIN, Peso de las pruebas)
Log Pow	-0,54 (Enfoque sobre el peso de las pruebas, Equivalente o similar a OCDE 107, 25 °C)
Potencial de bioacumulación	No bioacumulable.

12.4. Movilidad en el suelo

Acetonitrilo, HPLC grade (75-05-8)	
Tensión superficial	0,029 N/m (20 °C)
Log Koc	0,65 (log Koc, Valor calculado)
Ecología - suelo	Muy móvil en el suelo.

12.5. Resultados de la valoración PBT y mPmB

Acetonitrilo, HPLC grade (75-05-8)	
Esta sustancia/mezcla no cumple los criterios PBT del anexo XIII del reglamento REACH	
Esta sustancia/mezcla no cumple los criterios mPmB del anexo XIII del reglamento REACH	

12.6. Otros efectos adversos

No se dispone de más información

SECCIÓN 13: Consideraciones relativas a la eliminación

13.1. Métodos para el tratamiento de residuos

Recomendaciones para la eliminación de productos/envases	: No tirar a la alcantarilla o el entorno. Eliminar los residuos de acuerdo con las prescripciones locales y/o nacionales. Los residuos peligrosos no pueden ser mezclados con otros residuos. No se pueden mezclar diferentes tipos de residuos peligrosos si esto puede generar un riesgo de contaminación o crear problemas para la gestión posterior de los residuos. Los residuos peligrosos deben ser gestionados de manera responsable. Todas las entidades que almacenan, transportan o manejan residuos peligrosos tomarán las medidas necesarias para evitar los riesgos de contaminación o de daños a personas o animales. Reciclar por destilación. No descargar en vertedero. Eliminar en incinerador de disolventes homologado con recuperación de energía.
Indicaciones adicionales	: Residuo peligroso según Directiva 2008/98/CE, como modificada por Reglamento (UE) n° 1357/2014 y Reglamento (UE) n° 2017/997.
Código del catálogo europeo de residuos (CER)	: 15 01 10* - Envases que contienen restos de sustancias peligrosas o están contaminados por ellas 07 01 04* - Otros disolventes, líquidos de limpieza y licores madre orgánicos

SECCIÓN 14: Información relativa al transporte






Según los requisitos de ADR / RID / IMDG / IATA / ADN

ADR	IMDG	IATA	ADN	RID
14.1. Número ONU				
1648	1648	1648	1648	1648
14.2. Designación oficial de transporte de las Naciones Unidas				
Acetonitrilo	Acetonitrile	Acetonitrile	Acetonitrilo	Acetonitrilo

Acetonitrilo, HPLC grade

Fichas de datos de seguridad

conforme al Reglamento (CE) N° 1907/2006 (REACH), modificado por el Reglamento (UE) 2015/830

Descripción del documento del transporte				
UN 1648 Acetonitrilo, 3, II, (D/E)	UN 1648 Acetonitrilo, 3, II	UN 1648 Acetonitrilo, 3, II	UN 1648 Acetonitrilo, 3, II	UN 1648 Acetonitrilo, 3, II
14.3. Clase(s) de peligro para el transporte				
3	3	3	3	3
				
14.4. Grupo de embalaje				
II	II	II	II	II
14.5. Peligros para el medio ambiente				
Peligroso para el medio ambiente : No	Peligroso para el medio ambiente : No Contaminante marino : No	Peligroso para el medio ambiente : No	Peligroso para el medio ambiente : No	Peligroso para el medio ambiente : No
No se dispone de información adicional				

14.6. Precauciones particulares para los usuarios

Transporte por vía terrestre

Reglamento del transporte (ADR) : Sujeto a las disposiciones
 Código de clasificación (ADR) : F1
 N° Peligro (código Kemler) : 33
 Panel naranja :



Código de restricción en túneles (ADR) : D/E
 Código EAC : •2YE

Transporte marítimo

Reglamento del transporte (IMDG) : Sujeto a las disposiciones
 N.º FS (Fuego) : F-E
 N.º FS (Derrame) : S-D

Transporte aéreo

Reglamento del transporte (IATA) : Sujeto a las disposiciones

Transporte por vía fluvial

Código de clasificación (ADN) : F1
 Transporte admitido (ADN) : T

Transporte ferroviario

Reglamento del transporte (RID) : Sujeto a las disposiciones
 Código de clasificación (RID) : F1

14.7. Transporte a granel con arreglo al anexo II del Convenio MARPOL y el Código IBC

No aplicable

SECCIÓN 15: Información reglamentaria

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

15.1.1. UE-Reglamentos

Sin restricciones según el anexo XVII de REACH
 Acetonitrilo, HPLC grade no figura en la lista de sustancias candidatas de REACH
 Acetonitrilo, HPLC grade no figura en la lista del Anexo XIV de REACH

Contenido de COV : 100 %
 Directiva 2012/18/EU (SEVESO III)

Acetonitrilo, HPLC grade

Fichas de datos de seguridad

conforme al Reglamento (CE) N° 1907/2006 (REACH), modificado por el Reglamento (UE) 2015/830

15.1.2. Reglamentos nacionales

Alemania

- Referencia a AwSV : Clase de peligro para el agua (WGK) 2, Presenta peligro para el agua (Clasificación según AwSV; No ID 8)
- 12ª orden de aplicación de la Ley Federal alemana sobre la limitación de molestias - 12.BImSchV : No sujeto al 12o BImSchV (decreto de protección contra las emisiones) (Reglamento sobre accidentes graves)
- TA Luft (directiva técnica de protección del aire) : 5.2.5 Sustancias orgánicas

Países Bajos

- SZW-lijst van kankerverwekkende stoffen : La sustancia no figura en la lista
- SZW-lijst van mutagene stoffen : La sustancia no figura en la lista
- NIET-limitatieve lijst van voor de voortplanting giftige stoffen – Borstvoeding : La sustancia no figura en la lista
- NIET-limitatieve lijst van voor de voortplanting giftige stoffen – Vruchtbaarheid : La sustancia no figura en la lista
- NIET-limitatieve lijst van voor de voortplanting giftige stoffen – Ontwikkeling : La sustancia no figura en la lista

Dinamarca

- Clase de peligro de incendios : Clase I-1
- Unidad de almacenamiento : 1 litro
- Comentarios sobre la clasificación : F <Flam. Liq. 2>; Directrices que se deben seguir de gestión de emergencias para el almacenamiento de líquidos inflamables
- Reglamento nacional danés : Las mujeres embarazadas/lactantes que trabajen con el producto no deben entrar en contacto directo con el mismo

15.2. Evaluación de la seguridad química

No se dispone de más información

SECCIÓN 16: Otra información

Texto íntegro de las frases H y EUH:	
Acute Tox. 4 (Dermal)	Toxicidad aguda (cutánea), categoría 4
Acute Tox. 4 (Inhalation)	Toxicidad aguda (por inhalación), categoría 4
Acute Tox. 4 (Oral)	Toxicidad aguda (oral), categoría 4
Eye Irrit. 2	Lesiones oculares graves o irritación ocular, categoría 2
Flam. Liq. 2	Líquidos inflamables, categoría 2
H225	Líquido y vapores muy inflamables.
H302	Nocivo en caso de ingestión.
H312	Nocivo en contacto con la piel.
H319	Provoca irritación ocular grave.
H332	Nocivo en caso de inhalación.

SDS Zonder Big

Esta información se basa en nuestro conocimiento actual y tiene como finalidad describir el producto para la tutela de la salud, seguridad y medio ambiente. Por lo tanto, no debe ser interpretada como garantía de ninguna característica específica del producto

D2. Ficha de seguridad del agua



Información de seguridad voluntaria apoyándose en el formato de ficha de datos de seguridad conforme al Reglamento (CE) n.º 1907/2006 (REACH)



Agua , destilada doble

número de artículo: **3478**
 Versión: **5.1 es**
 Reemplaza la versión de: 19.04.2021
 Versión: (5)

fecha de emisión: 29.10.2015
 Revisión: 24.03.2022

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

1.1 Identificador del producto

Identificación de la sustancia	Agua , destilada doble
Número de artículo	3478
Número de registro (REACH)	Según reglamento (CE) n° 1907/2006 [REACH], no es obligatorio de registrar la sustancia.
Número CE	231-791-2
Número CAS	7732-18-5

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

Usos pertinentes identificados:	Producto químico de laboratorio Uso analítico y de laboratorio
Usos desaconsejados:	No utilizar en productos que estarán en contacto directo con alimentos. No utilizar para propósitos privados (domésticos).

1.3 Datos del proveedor de la ficha de datos de seguridad

Carl Roth GmbH + Co KG
 Schoemperlenstr. 3-5
 D-76185 Karlsruhe
 Alemania

Teléfono:+49 (0) 721 - 56 06 0
Fax: +49 (0) 721 - 56 06 149
e-mail: sicherheit@carlroth.de
Sitio web: www.carlroth.de

Persona competente responsable de la ficha de datos de seguridad: :Department Health, Safety and Environment

e-mail (persona competente): **sicherheit@carlroth.de**

Proveedor (importador):
 QUIMIVITA S.A.
 Calle Balmes 245, 6a Planta
 08006 Barcelona
 +34 932 380 094
 -
 ranguita@quimivita.es
 www.quimivita.es

1.4 Teléfono de emergencia

Nombre	Calle	Código postal/ ciudad	Teléfono	Sitio web
Servicio de Información Toxicológica Instituto Nacional de Toxicología y Ciencias Forenses	Jose Echegaray nº 4 Las Rozas	28232 Madrid	+34 91 562 0420	

Información de seguridad voluntaria apoyándose en el formato de ficha de datos de seguridad conforme al Reglamento (CE) n.º 1907/2006 (REACH)



Agua , destilada doble

número de artículo: **3478**

1.5 Importador

QUIMIVITA S.A.
Calle Balmes 245, 6a Planta
08006 Barcelona
España

Teléfono: +34 932 380 094

Fax: -

e-Mail: ranguita@quimivita.es

Sitio web: www.quimivita.es

SECCIÓN 2: Identificación de los peligros

2.1 Clasificación de la sustancia o de la mezcla

Clasificación según el Reglamento (CE) no 1272/2008 (CLP)

Esta sustancia no reúne los criterios para ser clasificada conforme al Reglamento no 1272/2008/CE.

2.2 Elementos de la etiqueta

Etiquetado según el Reglamento (CE) no 1272/2008 (CLP)

no es necesario

2.3 Otros peligros

Resultados de la valoración PBT y mPmB

La evaluación de esta sustancia determina que no es PBT ni mPmB.

SECCIÓN 3: Composición/información sobre los componentes

3.1 Sustancias

Nombre de la sustancia	Agua
Fórmula molecular	H ₂ O
Masa molar	18,02 g/mol
No CAS	7732-18-5
No CE	231-791-2

SECCIÓN 4: Primeros auxilios

4.1 Descripción de los primeros auxilios



Notas generales

No son necesarias medidas especiales.

En caso de inhalación

No hay peligro identificado.

En caso de contacto con la piel

No hay peligro identificado.

España (es)

Página 2 / 12

Información de seguridad voluntaria apoyándose en el formato de ficha de datos de seguridad conforme al Reglamento (CE) n.º 1907/2006 (REACH)



Agua , destilada doble

número de artículo: **3478**

En caso de contacto con los ojos

No hay peligro identificado.

En caso de ingestión

Enjuagarse la boca. Llamar a un médico si la persona se encuentra mal.

4.2 Principales síntomas y efectos, agudos y retardados

A la fecha no se conocen síntomas y efectos.

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

ninguno

SECCIÓN 5: Medidas de lucha contra incendios

5.1 Medios de extinción



Medios de extinción apropiados

El producto en sí no es combustible

Medios de extinción no apropiados

sin límite

5.2 Peligros específicos derivados de la sustancia o la mezcla

No combustible.

5.3 Recomendaciones para el personal de lucha contra incendios

No son necesarias medidas especiales.

SECCIÓN 6: Medidas en caso de vertido accidental

6.1 Precauciones personales, equipo de protección y procedimientos de emergencia



Para el personal que no forma parte de los servicios de emergencia

No son necesarias medidas especiales.

6.2 Precauciones relativas al medio ambiente

No es necesario.

6.3 Métodos y material de contención y de limpieza

Consejos sobre la manera de contener un vertido

No son necesarias medidas especiales.

Indicaciones adecuadas sobre la manera de limpiar un vertido

Limpiar con materiales absorbentes (p.ej. paño, vellón).

Otras indicaciones relativas a los vertidos y las fugas

Colocar en recipientes apropiados para su eliminación.

España (es)

Página 3 / 12

Información de seguridad voluntaria apoyándose en el formato de ficha de datos de seguridad conforme al Reglamento (CE) n.º 1907/2006 (REACH)



Agua , destilada doble

número de artículo: **3478**

6.4 Referencia a otras secciones

Productos de combustión peligrosos: véase sección 5. Equipo de protección personal: véase sección 8. Materiales incompatibles: véase sección 10. Consideraciones relativas a la eliminación: véase sección 13.

SECCIÓN 7: Manipulación y almacenamiento

7.1 Precauciones para una manipulación segura

No son necesarias medidas especiales.

Recomendaciones sobre medidas generales de higiene en el trabajo

Manténgase lejos de alimentos, bebidas y piensos.

7.2 Condiciones de almacenamiento seguro, incluidas posibles incompatibilidades

Mantener el recipiente herméticamente cerrado.

Sustancias o mezclas incompatibles

Observe el almacenamiento compatible de productos químicos.

Atención a otras indicaciones:

Diseño específico de locales o depósitos de almacenamiento

Temperatura recomendada de almacenamiento: 15 – 25 °C

7.3 Usos específicos finales

No hay información disponible.

SECCIÓN 8: Controles de exposición/protección individual

8.1 Parámetros de control

Valores límites nacionales

Valores límites de exposición profesional (límites de exposición en el lugar de trabajo)

Esta información no está disponible.

8.2 Controles de exposición

Medidas de protección individual (equipo de protección personal)

Protección de los ojos/la cara



Llevar gafas de protección contra salpicaduras.

Protección de la piel



• protección de las manos

Protección de mano no es necesaria.

Información de seguridad voluntaria apoyándose en el formato de ficha de datos de seguridad conforme al Reglamento (CE) n.º 1907/2006 (REACH)



Agua , destilada doble

número de artículo: **3478**

Protección respiratoria



Normalmente no es necesaria protección respiratoria personal.

Controles de exposición medioambiental

Mantener el producto alejado de los desagües y de las aguas superficiales y subterráneas.

SECCIÓN 9: Propiedades físicas y químicas

9.1 Información sobre propiedades físicas y químicas básicas

Estado físico	líquido
Color	incolor
Olor	inodoro
Punto de fusión/punto de congelación	0 °C
Punto de ebullición o punto inicial de ebullición e intervalo de ebullición	100 °C a 1.013 hPa
Inflamabilidad	no combustible
Límite superior e inferior de explosividad	no determinado
Punto de inflamación	no determinado
Temperatura de auto-inflamación	no determinado
Temperatura de descomposición	no relevantes
pH (valor)	7 (20 °C)
Viscosidad cinemática	no determinado
<u>Solubilidad(es)</u>	
Hidrosolubilidad	miscible en cualquier proporción
<u>Coefficiente de reparto</u>	
Coefficiente de reparto n-octanol/agua (valor logarítmico):	no relevantes (inorgánico)
Presión de vapor	23 hPa a 20 °C
<u>Densidad y/o densidad relativa</u>	
Densidad	1 g/cm ³ a 20 °C
Densidad de vapor	las informaciones sobre esta propiedad no están disponibles
Características de las partículas	no relevantes (líquido)

Información de seguridad voluntaria apoyándose en el formato de ficha de datos de seguridad conforme al Reglamento (CE) n.º 1907/2006 (REACH)



Agua , destilada doble

número de artículo: **3478**

Otros parámetros de seguridad

Propiedades comburentes ninguno

9.2 Otros datos

Información relativa a las clases de peligro físico: clases de peligro conforme al SGA (peligros físicos): no relevantes

Otras características de seguridad:

Miscibilidad completamente miscible con agua

SECCIÓN 10: Estabilidad y reactividad

10.1 Reactividad

Este material no es reactivo bajo condiciones ambientales normales.

10.2 Estabilidad química

El material es estable bajo condiciones ambientales normales y en condiciones previsibles de temperatura y presión durante su almacenamiento y manipulación.

10.3 Posibilidad de reacciones peligrosas

Reacciones fuertes con: Metales alcalinos, Carburo, Metal alcalinotérreo

10.4 Condiciones que deben evitarse

No se conocen condiciones particulares que deban evitarse.

10.5 Materiales incompatibles

No hay información adicional.

10.6 Productos de descomposición peligrosos

Productos de combustión peligrosos: véase sección 5.

SECCIÓN 11: Información toxicológica

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

Clasificación conforme al SGA (1272/2008/CE, CLP)

Esta sustancia no reúne los criterios para ser clasificada conforme al Reglamento no 1272/2008/CE.

Toxicidad aguda

No se clasificará como toxicidad aguda.

Corrosión o irritación cutánea

No se clasificará como corrosivo/irritante para la piel.

Lesiones oculares graves o irritación ocular

No se clasificará como causante de lesiones oculares graves o como irritante ocular.

Sensibilización respiratoria o cutánea

No se clasificará como sensibilizante respiratoria o sensibilizante cutánea.

Mutagenicidad en células germinales

No se clasificará como mutágeno en células germinales.

Información de seguridad voluntaria apoyándose en el formato de ficha de datos de seguridad conforme al Reglamento (CE) n.º 1907/2006 (REACH)



Agua , destilada doble

número de artículo: **3478**

Carcinogenicidad

No se clasificará como carcinógeno.

Toxicidad para la reproducción

No se clasificará como tóxico para la reproducción.

Toxicidad específica en determinados órganos - exposición única

No se clasifica como tóxico específico en determinados órganos (exposición única).

Toxicidad específica en determinados órganos - exposición repetida

No se clasifica como tóxico específico en determinados órganos (exposición repetida).

Peligro por aspiración

No se clasifica como peligroso en caso de aspiración.

Síntomas relacionados con las características físicas, químicas y toxicológicas

• **En caso de ingestión**

No se dispone de datos.

• **En caso de contacto con los ojos**

No se dispone de datos.

• **En caso de inhalación**

No se dispone de datos.

• **En caso de contacto con la piel**

No se dispone de datos.

• **Otros datos**

No se conocen efectos para la salud.

11.2 Propiedades de alteración endocrina

No incluido en la lista.

11.3 Información relativa a otros peligros

No hay información adicional.

SECCIÓN 12: Información ecológica

12.1 Toxicidad

No se clasificará como peligroso para el medio ambiente acuático.

Biodegradación

Métodos para determinar la desintegración no se pueden aplicar para materiales inorgánicos.

12.2 Procesos de degradación

No se dispone de datos.

12.3 Potencial de bioacumulación

No se dispone de datos.

12.4 Movilidad en el suelo

No se dispone de datos.

Información de seguridad voluntaria apoyándose en el formato de ficha de datos de seguridad conforme al Reglamento (CE) n.º 1907/2006 (REACH)



Agua , destilada doble

número de artículo: **3478**

12.5 Resultados de la valoración PBT y mPmB

No se dispone de datos.

12.6 Propiedades de alteración endocrina

No incluido en la lista.

12.7 Otros efectos adversos

No se dispone de datos.

SECCIÓN 13: Consideraciones relativas a la eliminación

13.1 Métodos para el tratamiento de residuos



Contactar al eliminador aprobado correspondiente para una eliminación de residuos.

Información pertinente para el tratamiento de las aguas residuales

No tirar los residuos por el desagüe.

13.2 Disposiciones sobre prevención de residuos

La coordinación de los números de clave de los residuos/marcas de residuos según CER hay que efectuarla específicamente de ramo y proceso. Abfallverzeichnis-Verordnung (reglamento sobre catálogo de residuos, Alemania).

13.3 Observaciones

Los residuos se deben clasificar en las categorías aceptadas por los centros locales o nacionales de tratamiento de residuos. Por favor considerar las disposiciones nacionales o regionales pertinentes.

SECCIÓN 14: Información relativa al transporte

- | | |
|---|--|
| 14.1 Número ONU o número ID | no está sometido a las reglamentaciones de transporte |
| 14.2 Designación oficial de transporte de las Naciones Unidas | no asignado |
| 14.3 Clase(s) de peligro para el transporte | ninguno |
| 14.4 Grupo de embalaje | no asignado |
| 14.5 Peligros para el medio ambiente | no peligroso para el medio ambiente conforme al reglamento para el transporte de mercancías peligrosas |
| 14.6 Precauciones particulares para los usuarios | No hay información adicional. |
| 14.7 Transporte marítimo a granel con arreglo a los instrumentos de la OMI | El transporte a granel de la mercancía no está previsto. |
| 14.8 Información para cada uno de los Reglamentos tipo de las Naciones Unidas | |
| Transporte de mercancías peligrosas por carretera, por ferrocarril o por vía navegable (ADR/RID/ADN) - Información adicional | No está sometido al ADR, RID y al ADN. |

Información de seguridad voluntaria apoyándose en el formato de ficha de datos de seguridad conforme al Reglamento (CE) n.º 1907/2006 (REACH)



Agua , destilada doble

número de artículo: **3478**

Código marítimo internacional de mercancías peligrosas (IMDG) - Información adicional

No está sometido al IMDG.

Organización de Aviación Civil Internacional (OACI-IATA/DGR) - Información adicional

No está sometido a la OACI-IATA.

SECCIÓN 15: Información reglamentaria

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

Disposiciones pertinentes de la Unión Europea (UE)

Restricciones conforme a REACH, Anexo XVII

no incluido en la lista

Lista de sustancias sujetas a autorización (REACH, Anexo XIV)/SVHC - lista de candidatos

No incluido en la lista.

Directiva Seveso

2012/18/UE (Seveso III)			
No	Sustancia peligrosa/categorías de peligro	Cantidades umbral (en toneladas) de aplicación de los requisitos de nivel inferior e superior	Notas
	no asignado		

Directiva Decopaint

Contenido de COV	0 % -0 g/l
------------------	---------------

Directiva sobre Emisiones Industriales (DEI)

Contenido de COV	0 %
Contenido de COV (Contenido de agua fue descontado)	-0 g/l

Directiva sobre restricciones a la utilización de determinadas sustancias peligrosas en aparatos eléctricos y electrónicos (RoHS)

no incluido en la lista

Reglamento relativo al establecimiento de un registro europeo de emisiones y transferencias de contaminantes (PRTR)

no incluido en la lista

Directiva Marco del Agua (DMA)

no incluido en la lista

Reglamento sobre la comercialización y la utilización de precursores de explosivos

no incluido en la lista

Reglamento sobre precursores de drogas

no incluido en la lista

Reglamento sobre las sustancias que agotan la capa de ozono (SAO)

no incluido en la lista

España (es)

Página 9 / 12

Información de seguridad voluntaria apoyándose en el formato de ficha de datos de seguridad conforme al Reglamento (CE) n.º 1907/2006 (REACH)



Agua, destilada doble

número de artículo: 3478

Reglamento relativo a la exportación e importación de productos químicos peligrosos (PIC)
no incluido en la lista

Reglamento sobre contaminantes orgánicos persistentes (POP)
no incluido en la lista

Otros datos

Directiva 94/33/CE relativa a la protección de los jóvenes en el trabajo. Tener en cuenta la ocupación limitada según la ley de protección a la madre (92/85/CEE) para embarazadas o madres que dan el pecho.

Catálogos nacionales

País	Inventario	Estatuto
AU	AICS	la sustancia es enumerada
CA	DSL	la sustancia es enumerada
CN	IECSC	la sustancia es enumerada
EU	ECSI	la sustancia es enumerada
JP	CSCL-ENCS	la sustancia es enumerada
KR	KECI	la sustancia es enumerada
MX	INSQ	la sustancia es enumerada
NZ	NZIoC	la sustancia es enumerada
PH	PICCS	la sustancia es enumerada
TW	TCSI	la sustancia es enumerada
US	TSCA	la sustancia es enumerada

Leyenda

AICS	Australian Inventory of Chemical Substances
CSCL-ENCS	List of Existing and New Chemical Substances (CSCL-ENCS)
DSL	Domestic Substances List (DSL)
ECSI	CE inventario de sustancias (EINECS, ELINCS, NLP)
IECSC	Inventory of Existing Chemical Substances Produced or Imported in China
INSQ	Inventario Nacional de Sustancias Químicas
KECI	Korea Existing Chemicals Inventory
NZIoC	New Zealand Inventory of Chemicals
PICCS	Philippine Inventory of Chemicals and Chemical Substances (PICCS)
TCSI	Taiwan Chemical Substance Inventory
TSCA	Ley de Control de Sustancias Tóxicas

15.2 Evaluación de la seguridad química

No se ha realizado una evaluación de la seguridad química de esta sustancia.

SECCIÓN 16: Otra información

Indicación de modificaciones (ficha de datos de seguridad revisada)

Adaptación al reglamento: Reglamento (CE) no 1907/2006 (REACH), modificado por 2020/878/UE

Reestructuración: sección 9, sección 14

Información de seguridad voluntaria apoyándose en el formato de ficha de datos de seguridad conforme al Reglamento (CE) n.º 1907/2006 (REACH)



Agua , destilada doble

número de artículo: **3478**

Sección	Inscripción anterior (texto/valor)	Inscripción actual (texto/valor)	Relevante para la seguridad
2.2	Palabra de advertencia: no es necesario		sí
2.3	Otros peligros: No hay información adicional.	Otros peligros	sí
2.3		Resultados de la valoración PBT y mPmB: La evaluación de esta sustancia determina que no es PBT ni mPmB.	sí

Abreviaturas y los acrónimos

Abrev.	Descripciones de las abreviaturas utilizadas
ADN	Accord européen relatif au transport international des marchandises dangereuses par voies de navigation intérieures (Acuerdo Europeo sobre Transporte Internacional de Mercancías Peligrosas por Vías Navegables Interiores)
ADR	Accord relatif au transport international des marchandises dangereuses par route (Acuerdo relativo al transporte internacional de mercancías peligrosas por carretera)
CAS	Chemical Abstracts Service (número identificador único carente de significado químico)
CLP	Reglamento (CE) no 1272/2008 sobre clasificación, etiquetado y envasado (Classification, Labelling and Packaging) de sustancias y mezclas
COV	Compuestos orgánicos volátiles
DGR	Dangerous Goods Regulations (reglamento para el transporte de mercancías peligrosas, véase IATA/DGR)
EINECS	European Inventory of Existing Commercial Chemical Substances (catálogo europeo de sustancias químicas comercializadas)
ELINCS	European List of Notified Chemical Substances (lista europea de sustancias químicas notificadas)
IATA	Asociación Internacional de Transporte Aéreo
IATA/DGR	Dangerous Goods Regulations (DGR) for the air transport (IATA) (Reglamento para el transporte de mercancías peligrosas por aire)
IMDG	International Maritime Dangerous Goods Code (código marítimo internacional de mercancías peligrosas)
mPmB	Muy persistente y muy bioacumulable
NLP	No-Longer Polymer (ex-polímero)
No CE	El inventario de la CE (EINECS, ELINCS y lista NLP) es la fuente para el número CE como identificador de sustancias de la UE (Unión Europea)
OACI	Organisation de l'Aviation Civile International
PBT	Persistente, Bioacumulable y Tóxico
REACH	Registration, Evaluation, Authorisation and Restriction of Chemicals (registro, evaluación, autorización y restricción de las sustancias y preparados químicos)
RID	Règlement concernant le transport International ferroviaire des marchandises Dangereuses (Reglamento referente al transporte internacional por ferrocarril de mercancías peligrosas)
SGA	"Sistema Globalmente Armonizado de clasificación y etiquetado de sustancias químicas" elaborado por Naciones Unidas
SVHC	Substance of Very High Concern (sustancia extremadamente preocupante)

Información de seguridad voluntaria apoyándose en el formato de ficha de datos de seguridad conforme al Reglamento (CE) n.º 1907/2006 (REACH)



Agua , destilada doble

número de artículo: **3478**

Principales referencias bibliográficas y fuentes de datos

Reglamento (CE) no 1272/2008 sobre clasificación, etiquetado y envasado (Classification, Labelling and Packaging) de sustancias y mezclas. Reglamento (CE) no 1907/2006 (REACH), modificado por 2020/878/UE.

Acuerdo relativo al transporte internacional de mercancías peligrosas por carretera (ADR). Reglamento referente al transporte internacional por ferrocarril de mercancías peligrosas (RID). Código marítimo internacional de mercancías peligrosas (IMDG). Dangerous Goods Regulations (DGR) for the air transport (IATA) (Reglamento para el transporte de mercancías peligrosas por aire).

Cláusula de exención de responsabilidad

Esta información se basa en los conocimientos de que disponemos hasta el momento. Esta FDS se refiere exclusivamente a este producto.

D3. Ficha de seguridad del 1-cloropropano

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo el Reglamento (CE) No. 1907/2006

Versión 8.2
Fecha de revisión 02.02.2021
Fecha de impresión 22.02.2021**SECCIÓN 1. Identificación de la sustancia o la mezcla y de la sociedad o la empresa****1.1 Identificadores del producto**

Nombre del producto : 1-Cloropropano para síntesis

Referencia : 8.18841

Artículo número : 818841

Marca : Millipore

No. Índice : 602-018-00-X

REACH No. : Un número de registro no está disponible para esta sustancia, ya que la sustancia o sus usos están exentos del registro, el tonelaje anual no requiere registro o dicho registro está previsto para una fecha posterior

No. CAS : 540-54-5

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

Usos identificados : Producto químico para síntesis

1.3 Datos del proveedor de la ficha de datos de seguridadCompañía : Merck Life Science S.L.
Calle Maria de Molina 40
E-28006 MADRID

Teléfono : +34 916 619 977

Fax : +34 916 619 642

E-mail de contacto : serviciotecnico@merckgroup.com

1.4 Teléfono de emergenciaTeléfono de Urgencia : 900-868538 (CHEMTREC España)
+(34)-931768545 (CHEMTREC
internacional)**SECCIÓN 2. Identificación de los peligros****2.1 Clasificación de la sustancia o de la mezcla****Clasificación de acuerdo con el Reglamento (CE) 1272/2008**

Líquidos inflamables (Categoría 2), H225

Toxicidad aguda, Oral (Categoría 4), H302


Toxicidad aguda, Inhalación (Categoría 4), H332

Toxicidad aguda, Cutáneo (Categoría 4), H312


Para el texto integro de las Declaraciones-H mencionadas en esta sección, véase la Sección 16.

2.2 Elementos de la etiqueta

Etiquetado de acuerdo con el Reglamento (CE) 1272/2008

Pictograma	
Palabra de advertencia	Peligro
Indicación(es) de peligro	
H225	Líquido y vapores muy inflamables.
H302 + H312 + H332	Nocivo en caso de ingestión, contacto con la piel o inhalación.
Declaración(es) de prudencia	
P210	Mantener alejado del calor, de superficies calientes, de chispas, de llamas abiertas y de cualquier otra fuente de ignición. No fumar.
P233	Mantener el recipiente herméticamente cerrado.
P280	Llevar guantes/ ropa de protección/ equipo de protección para los ojos/ la cara/ los oídos.
P301 + P312	EN CASO DE INGESTIÓN: Llamar a un CENTRO DE TOXICOLOGÍA/ médico si la persona se encuentra mal.
P303 + P361 + P353	EN CASO DE CONTACTO CON LA PIEL (o el pelo): Quitar inmediatamente toda la ropa contaminada. Enjuagar la piel con agua.
P304 + P340 + P312	EN CASO DE INHALACIÓN: Transportar a la persona al aire libre y mantenerla en una posición que le facilite la respiración. Llamar a un CENTRO DE TOXICOLOGÍA/ médico si la persona se encuentra mal.
Declaración Suplementaria del Peligro	ninguno(a)

Etiquetado reducido (<= 125 ml)

Pictograma	
Palabra de advertencia	Peligro
Indicación(es) de peligro	ninguno(a)
Declaración(es) de prudencia	ninguno(a)
Declaración Suplementaria del Peligro	ninguno(a)

2.3 Otros Peligros

Esta sustancia/mezcla no contiene componentes que se consideren que sean bioacumulativos y tóxicos persistentes (PBT) o muy bioacumulativos y muy persistentes (vPvB) a niveles del 0,1% o superiores.

SECCIÓN 3. Composición/información sobre los componentes

3.1 Sustancias

Formula	: C ₃ H ₇ Cl
Peso molecular	: 78,54 g/mol
No. CAS	: 540-54-5
No. CE	: 208-749-7
No. Índice	: 602-018-00-X

Millipore- 8.18841

The life science business of Merck operates as MilliporeSigma in the US and Canada

Página 2 de 10

MERCK



UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE CATALUNYA
BARCELONATECH
Escola d'Enginyeria de Barcelona Est

Componente	Clasificación	Concentración
1-Chloropropane		
No. CAS	540-54-5	Flam. Liq. 2; Acute Tox. 4; H225, H302, H332, H312
No. CE	208-749-7	
No. Índice	602-018-00-X	
		<= 100 %

Para el texto integro de las Declaraciones-H mencionadas en esta sección, véase la Sección 16.

SECCIÓN 4. Primeros auxilios

4.1 Descripción de los primeros auxilios

Recomendaciones generales

Mostrar esta ficha de seguridad al doctor que esté de servicio.

Si es inhalado

Tras inhalación: aire fresco. En caso de parada respiratoria: Respiración asistida o por medios instrumentales. ¡Suministración de oxígeno en caso necesario! Llamar inmediatamente al médico.

En caso de contacto con la piel

En caso de contacto con la piel: Quitar inmediatamente todas las prendas contaminadas. Aclararse la piel con agua/ ducharse. Consultar a un médico.

En caso de contacto con los ojos

Tras contacto con los ojos: aclarar con abundante agua. Retirar las lentillas.

Por ingestión

Tras ingestión: hacer beber agua inmediatamente (máximo 2 vasos). Consultar a un médico.

4.2 Principales síntomas y efectos, agudos y retardados

Los síntomas y efectos más importantes conocidos se describen en la etiqueta (ver sección 2.2) y / o en la sección 11

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

Sin datos disponibles

SECCIÓN 5. Medidas de lucha contra incendios

5.1 Medios de extinción

Medios de extinción apropiados

Dióxido de carbono (CO₂) Espuma Polvo seco

Medios de extinción no apropiados

No existen limitaciones de agentes extinguidores para esta sustancia/mezcla.

5.2 Peligros específicos derivados de la sustancia o la mezcla

Óxidos de carbono

Gas cloruro de hidrógeno

Inflamable.

El fuego puede provocar emanaciones de:

Gas cloruro de hidrógeno

Prestar atención al retorno de la llama.

Millipore- 8.18841

Página 3 de 10

The life science business of Merck operates as MilliporeSigma in the US and Canada



Los vapores son más pesados que el aire y pueden expandirse a lo largo del suelo. En caso de incendio posible formación de gases de combustión o vapores peligrosos. Son posibles mezclas explosivas con el aire a temperaturas normales.

5.3 Recomendaciones para el personal de lucha contra incendios

Permanencia en el área de riesgo sólo con sistemas de respiración artificiales e independientes del ambiente. Protección de la piel mediante observación de una distancia de seguridad y uso de ropa protectora adecuada .

5.4 Otros datos

Separar el recipiente de la zona de peligro y refrigerarlo con agua. Reprimir los gases/vapores/neblinas con agua pulverizada. Impedir la contaminación de las aguas superficiales o subterráneas por el agua que ha servido a la extinción de incendios.

SECCIÓN 6. Medidas en caso de vertido accidental

6.1 Precauciones personales, equipo de protección y procedimientos de emergencia

Indicaciones para el personal que no forma parte de los servicios de emergencia: No respirar los vapores, aerosoles. Evitar el contacto con la sustancia. Asegúrese una ventilación apropiada. Manténgase alejado del calor y de las fuentes de ignición. Evacúe el área de peligro, respete los procedimientos de emergencia, consulte con expertos. Equipo de protección individual, ver sección 8.

6.2 Precauciones relativas al medio ambiente

No dejar que el producto entre en el sistema de alcantarillado. Riesgo de explosión.

6.3 Métodos y material de contención y de limpieza

Cubra las alcantarillas. Recoja, una y aspire los derrames. Observe posibles restricciones de materiales (véanse indicaciones en las secciones 7 o 10). Recoger con materiales absorbentes, p. ej. con Chemizorb®. Proceder a la eliminación de los residuos. Aclarar.

6.4 Referencia a otras secciones

Para eliminación de desechos ver sección 13.

SECCIÓN 7. Manipulación y almacenamiento

7.1 Precauciones para una manipulación segura

Consejos para una manipulación segura

Trabajar bajo campana extractora. No inhalar la sustancia/la mezcla. Evítase la generación de vapores/aerosoles.

Indicaciones para la protección contra incendio y explosión

Mantener apartado de las llamas abiertas, de las superficies calientes y de los focos de ignición. Tomar medidas de precaución contra descargas electrostáticas.

Medidas de higiene

Sustituir inmediatamente la ropa contaminada. Protección preventiva de la piel. Lavar cara y manos al término del trabajo.

Ver precauciones en la sección 2.2

7.2 Condiciones de almacenamiento seguro, incluidas posibles incompatibilidades

Condiciones de almacenamiento

Conservar el envase herméticamente cerrado en un lugar seco y bien ventilado. Manténgase alejado del calor y de las fuentes de ignición.

Almacenar a $\leq 20^{\circ}\text{C}$.

7.3 Usos específicos finales

Aparte de los usos mencionados en la sección 1.2 no se estipulan otros usos específicos

Millipore- 8.18841

Página 4 de 10

The life science business of Merck operates as MilliporeSigma in the US and Canada



SECCIÓN 8. Controles de exposición/protección individual**8.1 Parámetros de control****Componentes con valores límite ambientales de exposición profesional.**

No contiene sustancias con valores límites de exposición profesional.

8.2 Controles de la exposición**Protección personal****Protección de los ojos/ la cara**

Use equipo de protección para los ojos probado y aprobado según las normas gubernamentales correspondientes, tales como NIOSH (EE.UU.) o EN 166 (UE).
Gafas de seguridad

Protección de la piel

Esta recomendación solo es válida para el producto mencionado en la ficha de datos de seguridad, suministrado por nosotros y para el fin indicado. Al disolver o mezclar en otras sustancias y cuando las condiciones difieran de las indicadas en EN374, debe dirigirse al suministrador de guantes con distintivo CE (por ejem. KCL GmbH, D-36124 Eichenzell, Internet: www.kcl.de)

Salpicaduras

Material: Vitón®

espesura minima de capa: 0,7 mm

Tiempo de penetración: 480 min

Material probado: Vitoject® (KCL 890 / Aldrich Z677698, Talla M)

Protección Corporal

Vestimenta protectora antiestática retardante de la flama.

Protección respiratoria

necesaria en presencia de vapores/aerosoles.

Nuestras recomendaciones sobre protección respiratoria se basan en las normas siguientes: DIN EN 143, DIN 14387 y otras normas relativas al uso de la protección respiratoria usada.

Tipo de Filtro recomendado: Filtro tipo AX

El empresario debe garantizar que el mantenimiento, la limpieza y la prueba técnica de los protectores respiratorios se hagan según las instrucciones del productor de las mismas. Éstas medidas deben ser documentadas debidamente.

Control de exposición ambiental

No dejar que el producto entre en el sistema de alcantarillado. Riesgo de explosión.

SECCIÓN 9. Propiedades físicas y químicas**9.1 Información sobre propiedades físicas y químicas básicas**

- | | |
|--------------------|-----------------------------------|
| a) Aspecto | Forma: líquido
Color: incoloro |
| b) Olor | Sin datos disponibles |
| c) Umbral olfativo | Sin datos disponibles |
| d) pH | Sin datos disponibles |

Millipore- 8.18841

Página 5 de 10

The life science business of Merck operates as MilliporeSigma in the US and Canada

e) Punto de fusión/ punto de congelación	Punto/intervalo de fusión: -123 °C
f) Punto inicial de ebullición e intervalo de ebullición	46 - 47 °C a 1.013 hPa
g) Punto de inflamación	-18 °C - copa cerrada
h) Tasa de evaporación	Sin datos disponibles
i) Inflamabilidad (sólido, gas)	Sin datos disponibles
j) Inflamabilidad superior/inferior o límites explosivos	Límite superior de explosividad: 11 %(v) Límites inferior de explosividad: 2,6 %(v)
k) Presión de vapor	533,29 hPa a 29,4 °C
l) Densidad de vapor	2,71 - (Aire = 1.0)
m) Densidad relativa	0,892 gcm ³
n) Solubilidad en agua	2,76 g/l a 30 °C
o) Coeficiente de reparto n- octanol/agua	log Pow: 2,04 a 20 °C - No es de esperar una bioacumulación.
p) Temperatura de auto-inflamación	520 °C a 1.013,25 hPa
q) Temperatura de descomposición	Sin datos disponibles
r) Viscosidad	Viscosidad, cinemática: Sin datos disponibles Viscosidad, dinámica: Sin datos disponibles
s) Propiedades explosivas	Sin datos disponibles
t) Propiedades comburentes	Sin datos disponibles

9.2 Otra información de seguridad

Tensión superficial 21,78 mN/m a 20 °C

Densidad relativa del vapor 2,71 - (Aire = 1.0)

SECCIÓN 10. Estabilidad y reactividad

10.1 Reactividad

Los vapores pueden formar una mezcla explosiva con el aire.

10.2 Estabilidad química

El producto es químicamente estable bajo condiciones normales (a temperatura ambiental).

10.3 Posibilidad de reacciones peligrosas

Riesgo de explosión con:

Metales alcalinos
Metales ligeros

Millipore- 8.18841

Página 6 de 10

The life science business of Merck operates as MilliporeSigma in the US and Canada

Reacción exotérmica con:
Metales alcalinos
Metales alcalinotérreos
Metales ligeros
Oxidantes

10.4 Condiciones que deben evitarse

Calentamiento.

10.5 Materiales incompatibles

plásticos diversos, Metales ligeros

10.6 Productos de descomposición peligrosos

En caso de incendio: véase sección 5

SECCIÓN 11. Información toxicológica

11.1 Información sobre los efectos toxicológicos

Toxicidad aguda

DL50 Oral - Rata - machos y hembras - > 2.000 mg/kg
(Directrices de ensayo 401 del OECD)

Observaciones:

(Reglamento (CE) No 1272/2008, Anexo VI)

CL50 Inhalación - 4 h - 11 mg/l

Síntomas: irritación de las mucosas, Tos, Insuficiencia respiratoria

Estimación de la toxicidad aguda Cutáneo - 1.100,1 mg/kg

(Juicio de expertos)

Corrosión o irritación cutáneas

Piel - Conejo

Resultado: No irrita la piel - 4 h

(Directrices de ensayo 404 del OECD)

Irritaciones Acción desengrasante con formación de piel resquebrajada y agrietada.

Lesiones o irritación ocular graves

Ojos - Conejo

Resultado: No irrita los ojos

(Directrices de ensayo 405 del OECD)

Sensibilización respiratoria o cutánea

Prueba de Maximización - Conejillo de indias

Resultado: negativo

(Directrices de ensayo 406 del OECD)

Mutagenicidad en células germinales

Prueba de Ames

Escherichia coli/Salmonella typhimurium

Resultado: negativo

Carcinogenicidad

IARC: No se identifica ningún componente de este producto, que presente niveles mayores que o igual a 0,1% como agente carcinógeno humano probable, posible o confirmado por la (IARC) Agencia Internacional de Investigaciones sobre Carcinógenos.

Toxicidad para la reproducción

Sin datos disponibles

Millipore- 8.18841

Página 7 de 10

The life science business of Merck operates as MilliporeSigma in the US and Canada



Toxicidad específica en determinados órganos - exposición única

Sin datos disponibles

Toxicidad aguda por inhalación - irritación de las mucosas, Tos, Insuficiencia respiratoria

Toxicidad específica en determinados órganos - exposiciones repetidas

Sin datos disponibles

Peligro de aspiración

Sin datos disponibles

11.2 Información Adicional

sin datos disponibles

Tos, Insuficiencia respiratoria, Dolor de cabeza, Náusea, Vómitos

Según nuestras informaciones, creemos que no se han investigado adecuadamente las propiedades químicas, físicas y toxicológicas.

Efectos sistémicos:

Tras absorción:

Dolor de cabeza

Náusea

Cansancio

Vértigo

ansiedad, espasmos

narcosis

Manipular con las precauciones de higiene industrial adecuadas, y respetar las prácticas de seguridad.

SECCIÓN 12. Información ecológica**12.1 Toxicidad**

Sin datos disponibles

Toxicidad para las algas	Ensayo estático CE50r - Desmodesmus subspicatus (alga verde) - 500 mg/l - 72 h (Directrices de ensayo 201 del OECD)
--------------------------	---

12.2 Persistencia y degradabilidad

Biodegradabilidad	aeróbico - Tiempo de exposición 28 d Resultado: 14 % - No es fácilmente biodegradable. (Directrices de ensayo 301D del OECD)
-------------------	--

12.3 Potencial de bioacumulación

Sin datos disponibles

12.4 Movilidad en el suelo

Sin datos disponibles

12.5 Resultados de la valoración PBT y mPmB

Esta sustancia/mezcla no contiene componentes que se consideren que sean bioacumulativos y tóxicos persistentes (PBT) o muy bioacumulativos y muy persistentes (vPvB) a niveles del 0,1% o superiores.

Millipore- 8.18841

Pagina 8 de 10

The life science business of Merck operates as MilliporeSigma in the US and Canada

MERCK

Legislación nacional

Seveso III: Directiva 2012/18/UE del Parlamento Europeo y del Consejo relativa al control de los riesgos inherentes a los accidentes graves en los que intervengan sustancias peligrosas.

P5c

LÍQUIDOS
INFLAMABLES

Otras regulaciones

Obsérvense las restricciones considerando la protección maternal de acuerdo a las más rigurosas nacionales.

Tomar nota de la Directiva 94/33/CEE sobre la protección laboral de los jóvenes.

15.2 Evaluación de la seguridad química

Para este producto no se ha llevado a cabo una evaluación de la seguridad química

SECCIÓN 16. Otra información**Texto íntegro de las Declaraciones-H referidas en las secciones 2 y 3.**

H225	Líquido y vapores muy inflamables.
H302	Nocivo en caso de ingestión.
H302 + H312 + H332	Nocivo en caso de ingestión, contacto con la piel o inhalación.
H312	Nocivo en contacto con la piel.
H332	Nocivo en caso de inhalación.

Otros datos

La información indicada arriba se considera correcta pero no pretende ser exhaustiva y deberá utilizarse únicamente como orientación. La información contenida en este documento esta basada en el presente estado de nuestro conocimiento y es aplicable a las precauciones de seguridad apropiadas para el producto. No representa ninguna garantía de las propiedades del producto. La Corporación Sigma-Aldrich y sus Compañías Afiliadas, no responderán por ningún daño resultante de la manipulación o contacto con el producto indicado arriba. Dirijase a www.sigma-aldrich.com y/o a los términos y condiciones de venta en el reverso de la factura o de la nota de entrega. Copyright 2020 Sigma-Aldrich Co. LLC. Se autoriza la reproducción en número ilimitado de copias para uso exclusivamente interno.

La marca que aparece en el encabezado y/o el pie de página de este documento puede no coincidir visualmente con el producto adquirido mientras hacemos la transición de nuestra marca. Sin embargo, toda la información del documento relativa al producto permanece sin cambios y coincide con el producto solicitado. Para más información, póngase en contacto con mlsbranding@sial.com

Millipore- 8.18841

The life science business of Merck operates as MilliporeSigma in the US and Canada

Página 10 de 10

MERCK