

ESTUDIO DEL DESEMPEÑO DINÁMICO DE SISTEMAS INTENSIFICADOS PARA LA PRODUCCIÓN DE TEOS

Jasso Villegas, Miriam Esmeralda (1), Segovia Hernández, Juan Gabriel (2)

1 [Licenciatura en Ingeniería Química, Universidad de Guanajuato] |[miriamejasso@gmail.com]

2 [Departamento Ingeniería Química, División de Ciencias Naturales y Exactas, Campus Guanajuato, Universidad de Guanajuato] |[gsegovia@ugto.mx]

Resumen

Actualmente, el ortosilicato de tetraetilo (TEOS) es uno de los organosilanos más importantes ya que se utiliza como materia prima en varios procesos. El proceso de obtención se basa en la reacción de silicio metálico con etanol, donde inicialmente se lleva a cabo la reacción en un reactor y posteriormente se lleva a cabo una etapa de separación. Sin embargo, no hay mucha información sobre nuevas tecnologías para la producción de TEOS para proponer nuevos enfoques. En este trabajo, se propone la destilación reactiva como un nuevo método de producción. Por lo tanto, este trabajo abordará la producción de TEOS por medio de dos sistemas, la convencional reacción/separación y destilación reactiva. Para evaluar ambas formas de producir TEOS, se evaluaron ambos sistemas teniendo en cuenta el costo anual total y el rendimiento de la inversión como índices económicos, y el eco-indicador 99 como índice ambiental. Como resultados, la destilación reactiva muestra un mejor rendimiento en cuanto al TAC, y en purezas superiores al 0.995% en el ROI, el sistema de reacción/separación supera al de destilación reactiva, y en cuanto al impacto ambiental, la destilación reactiva se mostró un mayor impacto con respecto al sistema de reacción/separación.

Abstract

Currently, the tetraethyl orthosilicate (TEOS) is one of the most important organosilanes, since it is used as a raw material in several processes. The production process is based on the reaction of silicon metal with ethanol, where the reaction is initially carried out in a reactor and then a separation step is carried out. However, there is not much information on new technologies for the production of TEOS to propose new approaches. In this work, reactive distillation is proposed as a new production method. Therefore, this work will address the production of TEOS by means of two systems, the conventional reaction / repair and reactive distillation. To evaluate both ways of producing TEOS, both systems were evaluated taking into account the total annual cost and the return on investment as economic indices, and the eco-indicator 99 as an environmental index. As a result, the reactive distillation shows a better performance in terms of the TAC, and in purities greater than 0.995% in the ROI, the reaction / separation system exceeds that of reactive distillation, and in terms of environmental impact, the reactive distillation was shown a greater impact with respect to the reaction / separation system.

Palabras clave

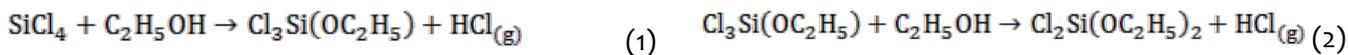
TEOS; Intensificación de Procesos; Seguridad; TAC; ROI.

INTRODUCCIÓN

Los alcoxisilanos son compuestos químicos que contienen un enlace Si-OR. De esta familia de compuestos de silicio, el tetraetoxisilano, $\text{Si}(\text{OC}_2\text{H}_5)_4$, (TEOS) es en muchos sentidos el derivado más importante y versátil, y se aprecia por su baja toxicidad. Varias industrias químicas usan este componente químico como materia prima o incluso como intermediario para compuestos de alto valor agregado [1]. Se puede utilizar para el procesamiento óptico de vidrio, recubrimientos resistentes a productos químicos, revestimientos y adhesivos resistentes al calor [2].

Producción del TEOS

La producción de TEOS se lleva a cabo mediante la reacción de esterificación del tetracloruro de silicio (SiCl_4) con etanol según el informe del siglo XIX de Von Ebelman. El proceso implica dos etapas, reacción y una etapa posterior de separación/purificación por destilación. La esterificación de tetraclorosilano con etanol procede a través de cuatro etapas consecutivas de sustitución nucleofílica bimolecular en el átomo de silicio. La reacción se describe en cuatro pasos:



Con respecto al proceso de reacción/ purificación (R/S), FIGURA 1, los requisitos de pureza dependen de la aplicación de TEOS. La pureza del 98 al 98.5% es el valor comúnmente alcanzado después de la destilación. Algunas técnicas de purificación, como la destilación a baja presión, pueden aumentar la pureza del TEOS cerca del 99,8%. Sin embargo, incluso este nivel de pureza contiene impurezas que se depositarán en una capa de película hecha de TEOS.

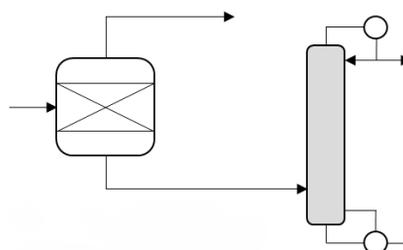


FIGURA 1. Esquema del proceso de Reacción/Purificación del TEOS.

Intensificación de Procesos

Teniendo en cuenta los antecedentes mencionados, es posible preguntarse si existe una alternativa para mejorar o incluso reducir el proceso de esterificación de dos etapas en un proceso de unidad única. El concepto de intensificación del proceso (PI) es una estrategia interesante para lograr esta mejora requerida. La filosofía de PI se ha caracterizado por cuatro lineamientos: menor tamaño, menor costo, más seguro, menor energía. De hecho, el tamaño del equipo, los costos y la seguridad del proceso son los incentivos más importantes de la PI. En términos generales, PI pretende superar las limitaciones termodinámicas a través del diseño y la operación integrados. Un ejemplo de PI es la destilación reactiva (RD), este proceso intensificado integra la reacción y la separación.

- *Destilación Reactiva*

La Destilación Reactiva es un proceso donde el reactor también es un separador, por lo tanto, esta tecnología intensificada permite eliminar las limitaciones de conversión y equilibrio de fase, lo que hace que el RD sea particularmente atractivo para las reacciones de equilibrio limitado. En muchos casos en los que se usa RD,

se ahorra un promedio de 20% con respecto a los costos de capital y los requisitos de energía en comparación con la reacción de proceso secuencial clásica, separación/purificación.

La reacción en RD incluye reacciones de catalizador heterogéneo, reacciones de catálisis homogénea y reacción térmica (no catalítica), que es el caso en la producción de TEOS, donde no se requiere catalizador. Toda la reacción tiene lugar en la fase líquida, pero las reacciones que tienen lugar en la fase gaseosa y ubican el catalizador en la fase de vapor de la columna son concebibles (FIGURA 2).

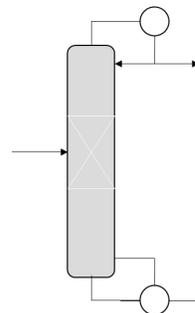


FIGURA 2. Esquema de Columna propuesta de Destilación Reactiva para la Producción de TEOS.

- Índices económicos y ambientales

Como parte de la PI, se tienen diversos análisis que se le aplican a los diseños de procesos con fines económicos y ambientales, tales como el costo total anual (TAC), rendimiento de la inversión (ROI) y el eco-indicador 99.

De manera específica este proyecto busca proponer un diseño de RD capaz de producir y separar TEOS de alta pureza en una sola columna. Además, este RD podrá producir una amplia gama de purezas TEOS en la misma columna simplemente variando las variables de operación. Para evaluar el diseño propuesto, se utiliza un marco económico y ambiental que considera tanto el costo anual total (TAC) como el retorno de la inversión (ROI) como índices económicos, eco-indicador 99. Además, para hacer una comparación justa con el proceso tradicional (reacción-separación), también se diseñará este esquema con dos etapas, evaluadas con los mismos índices.

MATERIALES Y MÉTODOS

Eco-indicador 99

El eco-indicador99 es una metodología utilizada para evaluar la sustentabilidad de un proceso y cuantificar su impacto ambiental. Se calcula con la ecuación 3.

$$EI99 = \sum_b \sum_d \sum_{k \in K} \delta_d \omega_d \beta_b \alpha_{b,k} \quad (3)$$

Donde β_b representa la cantidad total de producto químico b liberado por unidad de flujo de referencia debido a las emisiones directas, $\alpha_{b,k}$ es el daño causado en la categoría k por unidad de químico b liberado al medio ambiente, ω_d es el factor de normalización para el daño en la categoría d. La metodología del indicador ecológico 99 considera 11 categorías de impacto agrupadas en tres categorías de daños principales: salud humana, calidad del ecosistema y recursos naturales. [3]

Costo total anual (TAC)

Para el cálculo del Costo Total Anual (TAC), fue utilizado el método publicado por Guthrie [4], el cual fue modificado por Ulrich [5]. Esta metodología realiza la estimación de costos para plantas industriales por unidades separadas, y usando las ecuaciones publicadas por Turton [6], la aproximación del costo se describe en la ecuación 1.

$$TAC = \frac{\sum_{i=1}^n C_{TM,i}}{n} + \sum_{j=1}^n C_{ut,j} \quad (1)$$

Donde TAC es el costo total anual, C_{TM} es el costo capital de la planta, n es el número total de unidades individuales y C_{ut} es el costo de utilidad. El TAC se da en dólares/año.

Tasa de Retorno de la inversión (ROI)

La tasa de retorno de la inversión (ROI), es una medida de rentabilidad que evalúa el rendimiento de un negocio dividiendo el beneficio neto entre el patrimonio neto, se calcula con la ecuación 2.

$$ROI = \frac{\sum_{i=1}^N CF_i / N}{I} \quad (2)$$

Donde N es el número de años del proyecto, y se utiliza un valor promedio de los ingresos después de los impuestos. Dividido por la inversión.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Del análisis de los índices económicos y ambientales se hizo una comparativa de los resultados obtenidos. Se tienen dos diseños distintos, donde uno es el proceso convencional R/S y otro con RD. Cada diseño tiene otros seis diseños donde se obtiene una distinta pureza de TEOS.

Eco-indicador 99

El eco-indicador 99 se mide por ecopuntos/año, donde 1 punto equivale la carga ambiental anual de un habitante europeo promedio [6]. Al comparar los resultados de las secuencias, FIGURA 3, se ve con claridad que el sistema reacción/separación supera por mucho al otro sistema. Esto se debe a que el sistema de RD tiene una gran demanda de energía, y por lo tanto de combustibles fósiles, y la fuente del eco-indicador es el acero, vapor y electricidad. Por lo que es fácil darse cuenta que el alto impacto ambiental es debido a los combustibles fósiles.

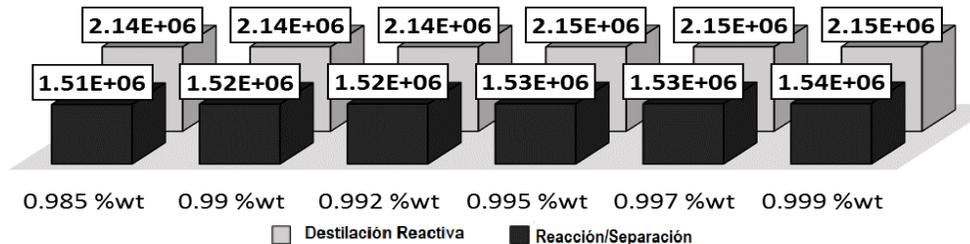


FIGURA 3. Impacto ambiental del sistema de destilación reactiva y del sistema reacción/separación [P/año].

Costo total anual (TAC)

Para el análisis del TAC de las distintas secuencias los resultados se pueden apreciar en la FIGURA 4. Se puede observar que el TAC de las secuencias de RD representa el 12% para purezas bajas del sistema R/S, mientras que el 45% para la pureza de 99.99%. La razón de este comportamiento se debe a que el TAC considera a la carga térmica del reboiler como costo del servicio y también toma en cuenta el costo capital del equipo. Por lo que, a pesar de tener un alto consumo de energía, se puede concluir que el sistema de RD es mucho mejor que el de R/S.

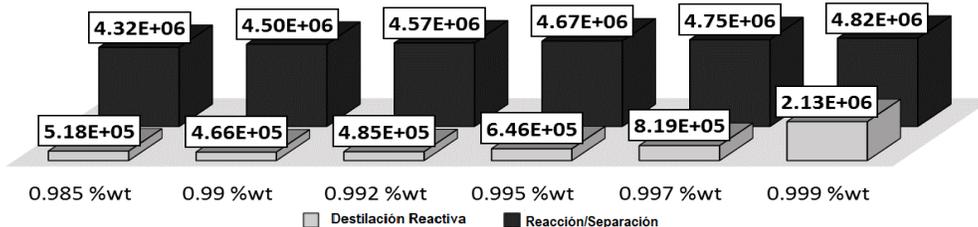


FIGURA 4. Costo total anual [USD/año], de los dos sistemas analizados.

Tasa de Retorno de la inversión (ROI)

El ROI se obtiene en unidad porcentual y mientras más alto sea el ROI, se puede decir que el proceso es mucho más rentable. En la Tabla 1, se pueden apreciar los resultados de cada una de las secuencias para las distintas purezas que se requieren, al comparar los resultados con los obtenidos con el TAC, la tendencia solo continua con las bajas purezas, mientras que con la pureza de 99.7% el ROI del sistema de reacción/separación es mucho mejor que la de RD. Por lo que se puede decir que el sistema R/S es mejor económicamente para purezas superiores a 0.995% en peso.

Tabla 1. Resultados del ROI de cada sistema.

Pureza másica (%wt)	0.985	0.99	0.992	0.995	0.997	0.999
ROI [%], Sistema R/S	51.482	51.096	50.209	49.670	48.140	45.759
ROI [%], Sistema RD	52.382	59.290	56.590	56.030	40.737	11.410

CONCLUSIONES

En el presente trabajo se enfocó en la tecnología intensificada para la producción de TEOS, la columna de destilación reactiva. Ésta se comparó con el proceso convencional evaluando los índices económicos y ambientales los cuales arrojaron valores más bajos para la destilación reactiva en el costo total anual en todos los rangos de pureza, sin embargo, al analizar la tasa de retorno, que incluye ventas y gastos, el sistema de reacción/separación muestra mejores resultados en purezas superiores al 0.995%.

Caso contrario lo que sucede respecto al impacto ambiental, donde el sistema RD presentó mayor impacto. Lo que se debe a los altos requisitos de energía del sistema. Y analizando esto, su impacto económico se ve mitigado debido a su bajo costo de capital.

Por lo que se puede concluir que la tecnología que presenta el sistema RD tiene un mejor rendimiento, a lo que intensificación de procesos se refiere, puesto que tiene un tamaño reducido de equipos, mayor rendimiento del proceso y es más económico en comparación al otro sistema.

REFERENCIAS

- [1] Mehrotra, R. C. (1988). Synthesis and reactions of metal alkoxides. *Journal of Non-Crystalline Solids*. 100(1), 1-15.
- [2] Laine, R. M., Furgal, J. C., Doan, P., Pan, D., Popova, V., & Zhang, X. (2016). Avoiding Carbothermal Reduction: Distillation of Alkoxysilanes from Biogenic, Green, and Sustainable Sources. *Angewandte Chemie International Edition*, 55(3), 1065-1069.4
- [3] Goedkoop, M., & Spriensma R. (2000). *Eco-indicator 99 Manual for Designers*. PRé Consult Amersfoort, Netherlands.
- [4] Guthrie, K.M. (1969). Capital cost estimating. *Chemical Engineering* 76(6):14-142.
- [5] Ulrich, G.D. (1984). *A guide to chemical engineering process design and economics*, Wiley, New York, USA.
- [6] Goedkoop, M.; Spriensma, R. *The eco-indicator 99. A damage oriented method for life cycle impact assessment*; Methodology report nr. 1999/36A; Pré product ecology consultants, 2001.