

Producción sostenible de isopropanol: diseño de un proceso alternativo para su purificación con contribuciones al binomio experimentación-modelización

Fecha: Junio 2023

Autora: Margarita González Román

Grado en Ingeniería Química

Tutores: Luis Jesús Fernández Suárez

Leandro Domínguez Déniz

Introducción

Hoy en día, los alcoholes de cadena corta son muy demandados en la industria química, destacando el isopropanol (IPA) por su extensa variedad de aplicaciones (Panjapakkul y El-Halwagi, 2018).

Uno de los principales desafíos de la producción del IPA radica en el proceso de separación (Zhigang y otros, 2001) debido a que el IPA forma un azeótropo con el agua, uno de los reactivos necesarios. Para lograr la purificación de este alcohol, son necesarias técnicas avanzadas de separación con un coste energético elevado y el empleo de agentes auxiliares tóxicos.

En este trabajo se ofrecen dos alternativas basadas en el proceso productivo mediante la hidratación directa de propileno y el método Deutsche Texaco. Una con una separación mediante una extracción líquido-líquido (proceso 1) y otra mediante una destilación extractiva (proceso 2). Ambas con pentanoato de etilo (PE) como entrainer o agente extractor.

Objetivos

- Estudiar la separación de la mezcla azeotrópica formada en el proceso.
- Diseñar un proceso de producción de IPA alternativo más sostenible, energéticamente eficiente y económicamente viable.

Experimentación

En este trabajo se realizó una parte experimental para determinar las siguientes propiedades:

- Volumen de exceso (v^E) y el equilibrio líquido-vapor (ELV) de las binarias agua(1)+IPA(2) e IPA(2)+PE(3)
- Equilibrio líquido-líquido (ELL) de la binaria agua(1)+PE(3) y la ternaria agua(1)+IPA(2)+PE(3)

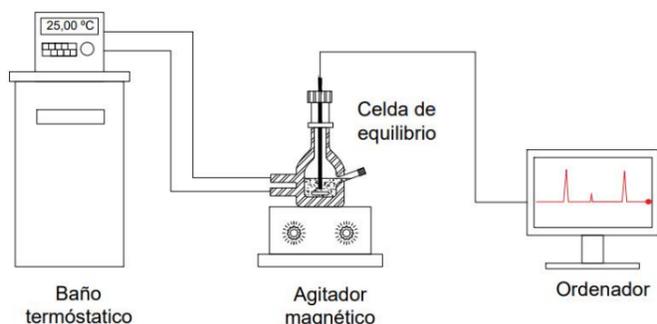


Fig. 1. Esquema del montaje de la celda de equilibrio

Simulación

Se realizó una simulación de ambos procesos, proceso 1 y proceso 2, con los datos obtenidos mediante la modelización. Además, se determinó la viabilidad de los procesos teniendo en cuenta la pureza final del producto, el porcentaje de recuperación, y el coste energético del proceso. Teniendo en cuenta estos factores se seleccionó el proceso 2 para continuar con el trabajo.

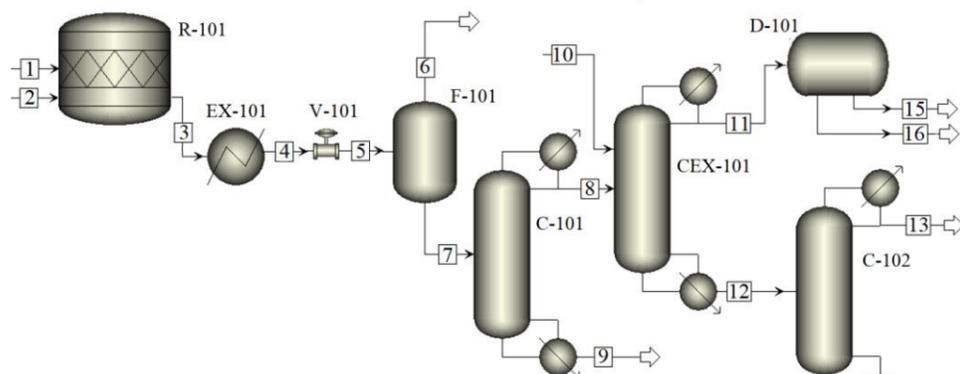


Fig. 6. Simulación del proceso 2, separación mediante destilación extractiva.

Modelización y resultados

Los datos obtenidos en la experimentación realizada fueron modelizados y ajustados a dos ecuaciones, ecuación 1 y ecuación 2.

$$g^E = z_i z_j \sum_{k=0}^2 g_k z_i^k = z_i (1 - z_i) (g_0 + g_1 z_i + g_2 z_i^2) \quad \text{Ecuación 1}$$

$$\frac{g^E}{RT} = x_i (1 - x_i) \left[\frac{G_{ji} \tau_{ji}}{x_i + (1 - x_i) G_{ji}} + \frac{G_{ij} \tau_{ij}}{(1 - x_i) + x_i G_{ij}} \right] \quad \text{Ecuación 2}$$

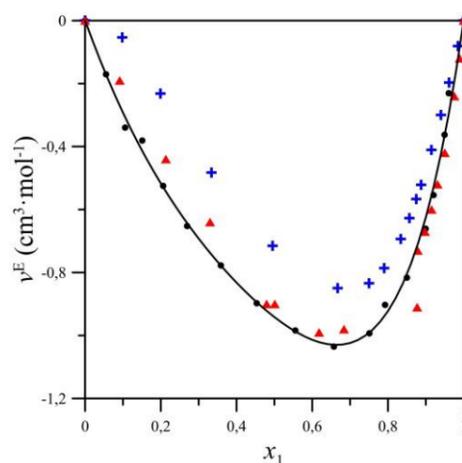


Fig. 2. v^E ($T=298$ K) agua(1)+IPA(2)

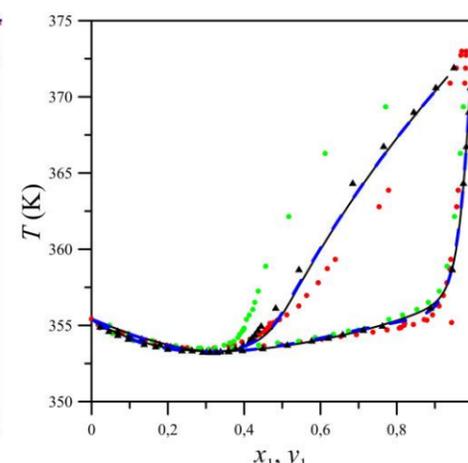


Fig. 3. T vs a x_1, y_1 del ELV agua(1)+IPA(2)

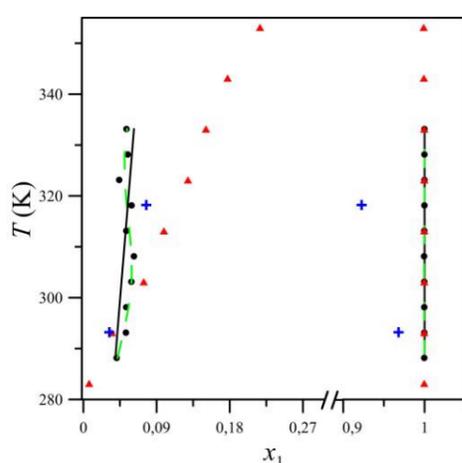


Fig. 4. ELL agua(1)+PE(2)

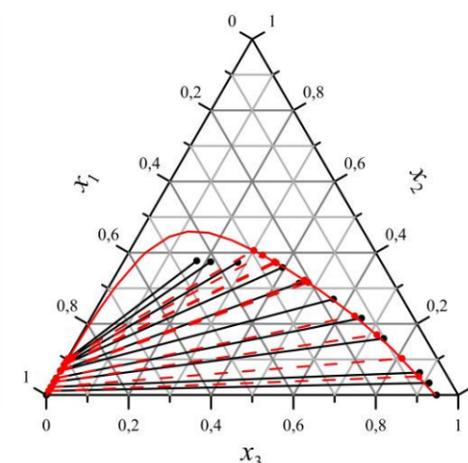


Fig. 5. ELL ($T=298$ K) agua(1)+IPA(2)+PE(3)

Diseño

En este Trabajo de Fin de Grado se diseñaron las tres columnas necesarias para realizar la etapa de separación del proceso seccionado, proceso 2. Dicho diseño se realizó mediante el uso del simulador Aspen Plus ©.

Conclusiones

- Las dos técnicas de extracción propuestas son válidas para resolver el problema de separación. No obstante, la destilación extractiva es preferible.
- El pentanoato de etilo es un entrainer adecuado para este proceso, y representa una alternativa más sostenible que los agentes de extracción utilizados tradicionalmente.

Bibliografía

Zhigang, T.; Rongqi, Z.; and Zhanting, D. (2001). Separation of isopropanol from aqueous solution by salting-out extraction. Journal of Chemical Technology and Biotechnology, 76, 757–763.

Panjapakkul, W.; and El-Halwagi, M. M. (2018). Technoeconomic Analysis of Alternative Pathways of Isopropanol Production. ACS Sustainable Chemistry Engineering, 6, 10260–10272.