

REACCIONES DE TRANSFERENCIA DE HIDRÓGENO CATALIZADAS POR COMPLEJOS METAL-PNP: ESTUDIO TEÓRICO Y DISEÑO DE UN PROCESO A ESCALA INDUSTRIAL

Lucía Esther Rodríguez Lorenzo, Dra. Jenifer Vaswani Reboso, Dr. Luis Miguel Azofra Mesa

Universidad de las Palmas de Gran Canaria. Escuela de Ingeniería Industriales y Civiles. Grado en Ingeniería Química

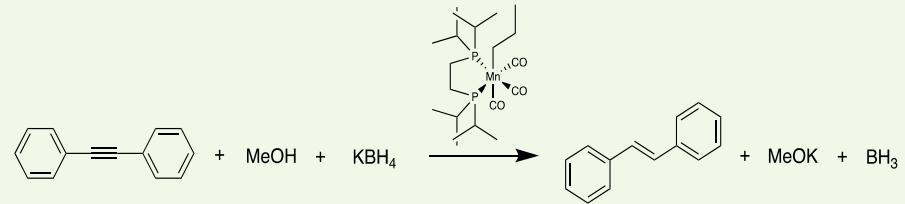
Junio 2024

1. Introducción

Los alquenos son hidrocarburos que toman un papel fundamental en multitud de industrias. Es por ello, que existen multitud de vías para su obtención. En la actualidad, la más empleada es la hidrogenación parcial de alquino en presencia de catalizadores selectivos.

Los estilbenos son compuestos fenólicos, compuestos por anillos aromáticos que pueden encontrarse en su conformación trans o cis. Estos polifenoles se emplean como colorantes en la industria textil, papelera o incluso como detergentes.

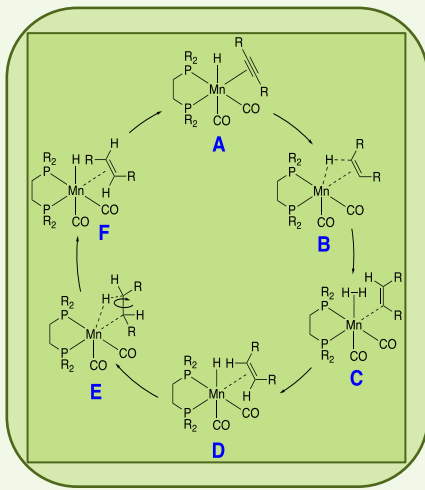
Reacción de interés



2. Objetivos

- Estudio de la síntesis de 1,2- difeniletileno a partir de difenilacetileno.
- Proponer un proceso a escala industrial de la reacción señalada en el apartado anterior.

3. Resultados y discusión



3.1 Mecanismo de reacción

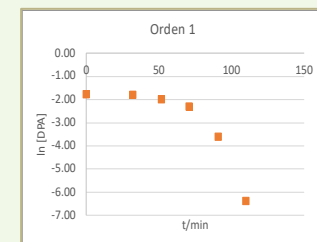
3.4 Reactor

— Cálculo del orden

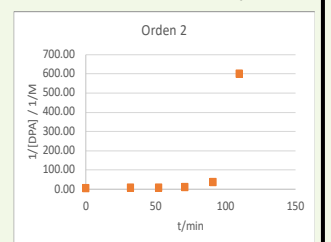
Orden 0: $[DPA] = [DPA]_0 - kt$



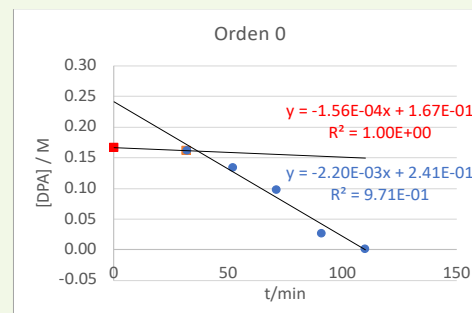
Orden 1: $\ln [DPA] = \ln [DPA]_0 - kt$



Orden 2: $\frac{1}{[DPA]} = \frac{1}{[DPA]_0} + kt$



— Cálculo de las constantes cinéticas y el tiempo de la reacción



$k_1 = 1.56 \cdot 10^{-4} \text{ M} \quad t_1 = 34,19 \text{ min}$

$k_2 = 2.20 \cdot 10^{-3} \text{ M} \quad t_2 = 70,99 \text{ min}$

$t = t_1 + t_2 = 105.18 \text{ min} = 1.75 \text{ h}$

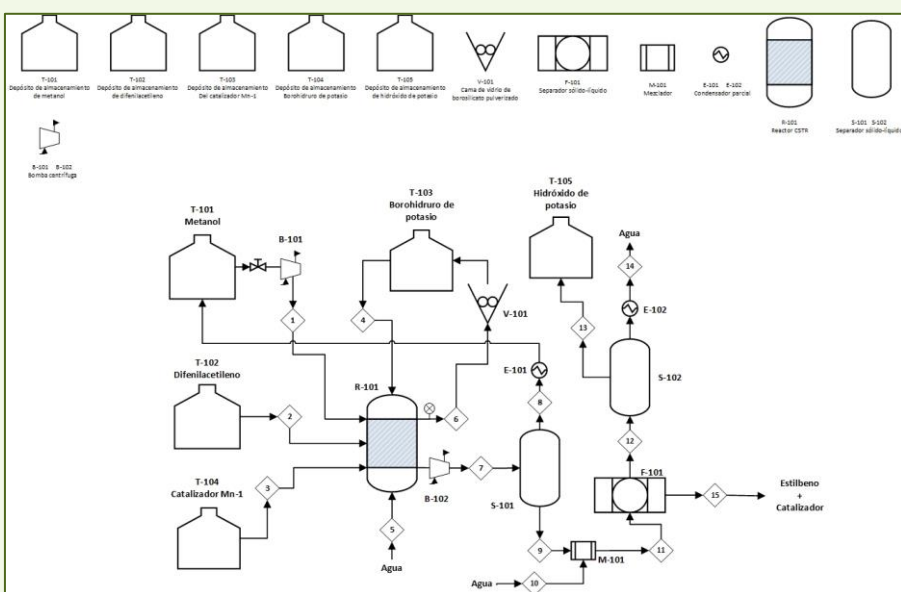
— Cálculo de las dimensiones del reactor

$$V = L\pi r^2 = \frac{3}{4}\pi D^3$$

$$\frac{H}{D} = 3$$

Equipo	Volumen (m ³)	Diámetro (m)	Altura (m)
R-101	101.89	3.51	10.53

3.2 Diagrama del flujo del proceso



3.3 Balance de masa

CORRIENTES	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
COMPUESTOS	Fracciones molares											
acetofenona	1,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
isopropanol	0,00	1,00	0,98	0,67	0,00	0,80	0,98	0,68	1,00	0,00	1	0,00
1-feniletanol	0,00	0,00	0,00	0,16	0,00	0,19	0,00	0,32	0,00	1,00	0,00	0,00
propanona	0,00	0,00	0,00	0,16	1,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0
catalizador	0,00	0,00	0,02	0,01	0,00	0,01	0,02	0,00	0,00	0,00	0,00	1,00
Cantidad (kg)	50,00	70,00	66,31	186,31	24,17	162,14	58,81	103,33	52,50	50,84	52,50	6,31
Cantidad (kmol)	0,42	1,16	1,02	2,60	0,42	2,18	0,89	1,29	0,87	0,42	0,87	0,02

4. Conclusiones

- El catalizador empleado en el proceso es un catalizador organometálico donde el átomo central es un átomo de manganeso que se un a un ligando PP y moléculas de monóxido de carbono.
- La reacción ocurre en un reactor discontinuo a 60°C y 30 bar.
- La cinética de la reacción es de orden cero con dos etapas y un tiempo de reacción de aproximadamente dos horas.

5. Referencias

- M. C. MacInnis, D. F. MacLean, R. J. Lundgren, R. McDonald, L. Turculet, *Organometallics* **2007**, *26*, 6522–6525.
- L.-P. He, T. Chen, D.-X. Xue, M. Eddaoudi, K.-W. Huang, *J. Organomet. Chem.* **2012**, *700*, 202–206.
- S. Werkmeister, J. Neumann, K. Junge, M. Beller, *Chem. – A Eur. J.* **2015**, *21*, 12226–12250.