

Título de la Tesis: "Cloración de etileno en fase líquida"

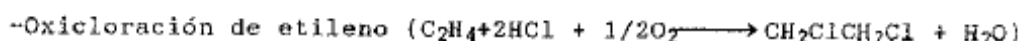
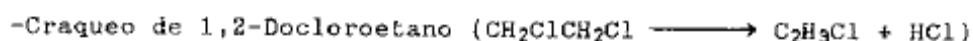
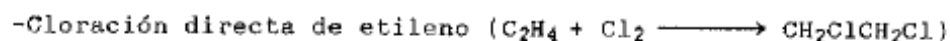
Doctorado en Ingeniería Química

Autor: Orejas, Joaquín Anibal

Director: Ing. José Porras

### Resumen

El cloruro de vinilo monómero (VCM) constituye la materia prima esencial en la obtención de policloruro de vinilo (PVC), polímero que en la actualidad posee una enorme cantidad de aplicaciones. Las distintas tecnologías que se ofrecen para la obtención de VCM (B.F. Goodrich, Dow, Stauffer, Toyo Soda, etc.) tienen en común que el producto se logra en base a tres reacciones principales:



En el presente trabajo se presenta el desarrollo de un modelo matemático, y a partir de él de un programa de simulación, correspondientes a un reactor comercial tipo columna de burbujeo con lazo de recirculación externo, en el cual tiene lugar la reacción de cloración directa de etileno.

Esta reacción, mencionada más arriba, conforma con las otras dos lo que suele denominarse "proceso balanceado" para la obtención de VCM. En la figura 1.1 se muestra el esquema simplificado de uno de estos procesos, donde como se verá, cada una de las reacciones tiene lugar en reactores específicos.

En efecto, en dicha figura se observa que las materias primas etileno y cloro ingresan al reactor de cloración directa, que será el tema central de estudio de esta tesis, para producir 1,2-Dicloroetano (DCE). Luego de dos etapas de purificación, el DCE es alimentado a un horno de pirólisis. Este equipo es en realidad un segundo reactor donde se lleva a cabo el craqueo térmico del DCE para dar el producto final, VCM. Sin embargo, una columna intercalada en el tren de purificación del producto recupera el HCl, el que es alimentado junto con etileno y aire (u oxígeno) al tercer reactor, donde se produce la reacción de oxicloración que

## Título de la Tesis: "Cloración de etileno en fase líquida"

Doctorado en Ingeniería Química

Autor: Orejas, Joaquín Anibal

Director: Ing. José Porras

también genera DCE. Este DCE, junto con el no convertido en el horno de pirólisis (alrededor del 50%), se suman al producido por el reactor de cloración directa. Como se ve, esta combinación conduce a un proceso integrado, donde se consigue un uso económico del cloro.

Centrándose ahora en el reactor de cloración directa de etileno, esta reacción se lleva a cabo burbujeando ambos reactivos en fase líquida. Este rol lo cumple el producto (DCE). Con este sistema, se consigue un íntimo mezclado de las dos fases gaseosas originales. En estas condiciones y catalizada por muy pequeñas cantidades de cloruro férrico, el que es soluble en el DCE, se produce la reacción deseada, que en condiciones industriales alcanza conversiones del orden del 100%. Además, el cloro disuelto puede reaccionar con el producto principal, DCE, y conducir a clorados mayores del etano a través de una red compleja de reacciones en serie y en paralelo que tienen lugar por mecanismo de radicales libres. Se piensa que el oxígeno, presente como impureza en la corriente de cloro alimentada al reactor, puede aumentar la selectividad a DCE como consecuencia de una inhibición de estas reacciones secundarias.

En lo que respecta al reactor de columna burbujeante propiamente dicho, en estos equipos el gas o una mezcla de gases es distribuida en la base y asciende a través de la fase líquida en forma de burbujas, constituyendo así la fase dispersa. El mezclado es originado solamente por el flujo de gas, y debido a esto la principal ventaja de estos reactores es la simplicidad de su construcción y operación. Además, tienen un bajo costo operativo debido a la ausencia de accesorios mecánicos móviles (agitadores mecánicos por ejemplo), que evita los problemas de sellado. En particular, esto último hace que estos reactores sean muy adecuados para reacciones en las que participan gases agresivos, o en

Título de la Tesis: "Cloración de etileno en fase líquida"

Doctorado en Ingeniería Química

Autor: Orejas, Joaquín Anibal

Director: Ing. José Porras

procesos que requieren altas temperaturas y/o presiones. En la industria química y petroquímica su aplicación es muy amplia, ya sea para reacciones gas-líquido o gas-líquido-sólido. En los últimos años se ha verificado una creciente aplicación de este tipo de reactores en el campo de la biotecnología, particularmente en procesos de fermentación y tratamiento de efluentes. El diseño de estos reactores al igual que la búsqueda de sus condiciones operativas óptimas, sólo puede hacerse en forma confiable y económica sobre la base de un modelo matemático adecuado del reactor. Sin embargo, a pesar de su construcción y operación simples, el diseño a priori sólo es factible aquí en casos muy sencillos, al tiempo que la predicción de la performance de estos reactores suele ser muy difícil. Esto se debe fundamentalmente a las condiciones fluidodinámicas complejas y, cuando es el caso, al desconocimiento de la cinética de las reacciones involucradas.

Volviendo al reactor de cloración directa, a pesar de su amplia aplicación industrial y del gran número de trabajos publicados en los que se estudian distintos aspectos relacionados con esta reacción, aún en la actualidad no existen en la literatura abierta trabajos que describan al reactor industrial, o los detalles de su operación, ni que presenten resultados que pudieran ser empleados para validar un modelo propuesto para predecir su performance. Todos esos aspectos serán discutidos y desarrollados en el presente trabajo.