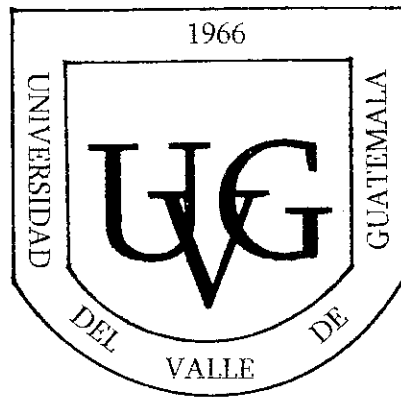


UNIVERSIDAD DEL VALLE DE GUATEMALA

Facultad de Ingeniería



**Selección de un proceso y diseño de un reactor
para la fabricación de polímeros utilizados como
floculantes en la clarificación de aguas residuales**

Ana Lucía Carrillo Chavarría

BIBLIOTECA

UNIVERSIDAD DEL VALLE DE GUATEMALA

Guatemala

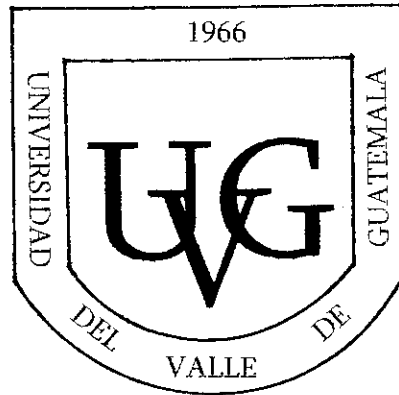
2005



**Selección de un proceso y diseño de un reactor
para la fabricación de polímeros utilizados como
floculantes en la clarificación de aguas residuales**

UNIVERSIDAD DEL VALLE DE GUATEMALA

Facultad de Ingeniería



**Selección de un proceso y diseño de un reactor
para la fabricación de polímeros utilizados como
floculantes en la clarificación de aguas residuales**

Ana Lucía Carrillo Chavarría

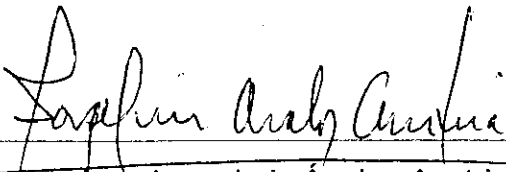
Trabajo de graduación presentado para optar al grado académico de

Licenciada en Ingeniería Química

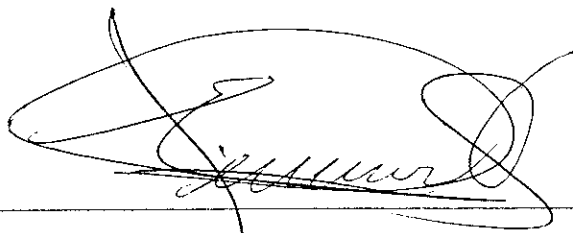
UNIVERSIDAD DEL VALLE DE GUATEMALA
FACULTAD DE INGENIERÍA
GUATEMALA

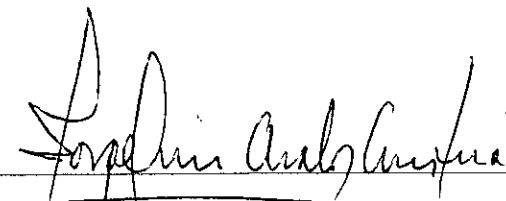
2005

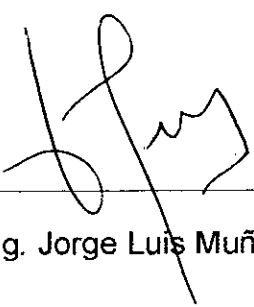
Vo. Bo.

(f): 
Ing. Jorge Luis Ávalos Austria
Asesor

Tribunal:

(f): 
Ing. José Eduardo Calderón García

(f): 
Ing. Jorge Luis Ávalos Austria

(f): 
Ing. Jorge Luis Muñoz

Fecha de aprobación: 19 de mayo de 2,005

ÍNDICE GENERAL

	Página
ÍNDICE DE FIGURAS.....	ix
ÍNDICE DE TABLAS.....	x
RESUMEN.....	xii
I. INTRODUCCIÓN.....	1
II. ANTECEDENTES.....	3
A. Polímeros.....	3
1. ¿Qué es un polímero?.....	3
2. Breve historia.....	3
3. Aplicaciones.....	4
B. Características de los polímeros.....	5
1. Fuerzas de atracción intermoleculares.....	5
2. Tipos de polímeros.....	5
C. Polímeros utilizados como floculantes.....	6
1. Los floculantes.....	7
2. Otras aplicaciones.....	8
D. Descripción y propiedades de los polímeros de DADMAC y acrilamida.....	8
1. Características del polímero cloruro de dialil dimetil amonio (DADMAC).....	8
2. Características del polímero de acrilamida.....	11
3. Disponibilidad de polímero de DADMAC y acrilamida en Guatemala.....	12
4. Mercado de los polímeros de DADMAC y acrilamida en Guatemala.....	13
E. Caracterización de los polímeros de DADMAC y acrilamida	13
1. Viscosidad.....	13
2. Masa molecular.....	14

F. Descripción y propiedades de la materia prima.....	14
1. Características del monómero de cloruro de dialil dimetil amonio.....	14
2. Características del monómero de acrilamida.....	16
3. Disponibilidad de materia prima en Guatemala.....	17
G. Clasificación de los polímeros según el mecanismo de polimerización.....	18
1. Polímeros de adición.....	18
H. Procesos de polimerización de DADMAC y acrilamida.....	21
1. Polimerización en un sistema homogéneo.....	21
2. Polimerización en un sistema heterogéneo.....	22
I. Condiciones de reacción en la polimerización de DADMAC y acrilamida.....	24
1. Presión.....	24
2. Temperatura.....	24
3. Inyección de nitrógeno gaseoso.....	24
4. Tiempo de polimerización.....	25
J. Reactores utilizados para la polimerización de DADMAC y acrilamida.....	25
1. Agitación.....	25
2. Sistema de enfriamiento.....	28
3. Características de la carcasa.....	29
4. Limpieza interior.....	30
5. Medidas de seguridad.....	31
III. JUSTIFICACIÓN.....	32
IV. OBJETIVOS.....	33
V. PROBLEMA A RESOLVER.....	34
VI. METODOLOGÍA.....	35
VII. RESULTADOS.....	37
A. Comparación de los métodos de polimerización, solución y emulsión.....	37

B. Descripción de la polimerización en emulsión de cloruro de dialil dimetil amonio (DADMAC).....	39
C. Descripción de la polimerización en emulsión de la acrilamida.....	41
D. Reacciones dentro del reactor.....	43
E. Balance de masa.....	45
F. Balance de energía.....	49
G. Diseño del reactor.....	50
H. Análisis económico.....	61
VIII. DISCUSIÓN.....	64
IX. CONCLUSIONES.....	71
X. RECOMENDACIONES.....	73
XI. BIBLIOGRAFÍA.....	74
XII. APÉNDICE.....	79

ÍNDICE DE FIGURAS

		Página
Figura No. 1	Reactor convencional con agitador en parte superior, placa deflectora y chaqueta para enfriamiento (volúmenes de 40m ³ o más).....	26
Figura No. 2	Patrones de flujo geoméricamente similares en dos reactores de diferente tamaño.....	26
Figura No. 3	Agitador de turbina ajustado en la base del reactor..	27
Figura No. 4	Reactor con enfriamiento de reflujo de vapor.....	29
Figura No. 5	Diagrama del balance de masa de la polimerización de DADMAC.....	47
Figura No. 6	Diagrama del balance de masa de la polimerización de acrilamida.....	48
Figura No. 7	Diagrama del balance de energía.....	49
Figura No. 8	Agitador de turbina de aspa inclinada.....	53
Figura No. 9	Diagrama de las dimensiones del reactor.....	59
Figura No. 10	Diagrama de flujo del proceso.....	60

ÍNDICE DE TABLAS

	Página
Tabla No. 1	Ventajas y desventajas de los métodos en emulsión agua en aceite y en solución..... 38
Tabla No. 2	Datos del balance de energía..... 50
Tabla No. 3	Dimensiones de la carcasa del reactor..... 50
Tabla No. 4	Características de la bomba de doble diafragma..... 51
Tabla No. 5	Dimensiones y características de la chaqueta de enfriamiento..... 52
Tabla No. 6	Dimensiones y características de la bomba centrífuga..... 53
Tabla No. 7	Dimensiones y características del agitador del reactor..... 54
Tabla No. 8	Dimensiones y características del sistema distribuidor de nitrógeno gaseoso al reactor..... 56
Tabla No. 9	Dimensiones y características de la válvula de seguridad..... 57
Tabla No. 10	Capacidad y dimensiones de los tanques auxiliares 58
Tabla No. 11	Flujo de fondos del proyecto..... 61
Tabla No. 12	Rentabilidad del proyecto..... 61
Tabla No. 13	Flujo de caja..... 62
Tabla No. 14	Rentabilidad del inversionista..... 62
Tabla No. 15	Tiempo de recuperación de la inversión (TR)..... 63
Tabla No. 16	Propiedades físicas de reactivos (ingredientes) y productos de las polimerizaciones de DADMAC y acrilamida..... 86
Tabla No. 17	Datos del balance de masa para los reactivos para la polimerización de DADMAC..... 91
Tabla No. 18	Datos del balance de masa para los productos para la polimerización de DADMAC..... 92

Tabla No. 19	Datos del balance de masa para los reactivos para la polimerización de acrilamida.....	92
Tabla No. 20	Datos del balance de masa para los productos para la polimerización de acrilamida.....	93
Tabla No. 21	Datos de los calores de polimerización y calores específicos de los monómeros.....	93
Tabla No. 22	Listado y costo del equipo.....	109
Tabla No. 23	Inversión inicial.....	109
Tabla No. 24	Costos y proveedores de materia prima.....	110
Tabla No. 25	Costos variables para la fabricación del polímero de DADMAC.....	111
Tabla No. 26	Costos variables para la fabricación del polímero de acrilamida.....	112
Tabla No. 27	Producción máxima anual de emulsiones poliméricas.....	113
Tabla No. 28	Costos fijos.....	114
Tabla No. 29	Costo unitario y precio de venta del polímero de DADMAC.....	115
Tabla No. 30	Costo unitario y precio de venta del polímero de acrilamida.....	116
Tabla No. 31	Depreciación del equipo, método de la línea recta...	116
Tabla No. 32	Amortización de la deuda.....	116
Tabla No. 33	Estado de resultados.....	117
Tabla No. 34	Flujo de fondos del proyecto.....	118
Tabla No. 35	Rentabilidad del proyecto.....	118
Tabla No. 36	Flujo de caja.....	119
Tabla No. 37	Rentabilidad del inversionista.....	119
Tabla No. 38	Tiempo de recuperación de la inversión (TR).....	120
Tabla No. 39	Punto de equilibrio para el polímero de DADMAC....	121
Tabla No. 40	Punto de equilibrio para el polímero de acrilamida...	122

RESUMEN

En este trabajo se presenta el diseño de un reactor y su equipo auxiliar utilizados para fabricar polímeros de cloruro de dialil dimetil amonio (polímero de DADMAC) y de acrilamida, utilizados como floculantes en el tratamiento de aguas residuales. El método que se propone para fabricar estos polímeros es el de *emulsión agua en aceite*, que brinda polímeros de alta masa molecular donde la fase acuosa está emulsificada en una fase oleosa. El método ofrece un control adecuado de la viscosidad y de la transferencia de calor aún cuando aumente la masa molecular. La concentración de ingrediente activo en las emulsiones poliméricas, es del 42.5% para el polímero de DADMAC y 61% para el de acrilamida. El diseño del reactor consta de una carcasa cilíndrica de acero inoxidable, equipado con agitador de turbina de aspa inclinada, chaqueta de enfriamiento, sistema distribuidor de nitrógeno gaseoso, válvula de seguridad, tubo de venteo y dos entradas para la alimentación. Los ingredientes utilizados son: solución acuosa de monómero de DADMAC o de acrilamida en agua desmineralizada, fase oleosa de aceite mineral, iniciador de solución de t-butil peroxi pivalato en solvente mineral (Varsol), activador de ion hierro (Fe^{+2}) de sulfato ferroso de amonio y emulsificantes (Tween 85® y/o Span 85®). La iniciación de la polimerización se realiza por medio de un sistema oxido-reducción (redox) entre el t-butil peroxi pivalato y el sulfato ferroso de amonio, generándose radicales libres que reaccionan con las moléculas de monómero. Se inyecta nitrógeno gaseoso durante una hora antes de iniciar la polimerización, para evacuar el aire dentro del reactor y crear una atmósfera inerte que permita el desempeño óptimo del sistema redox de iniciación. El análisis completo de este trabajo se realizó de manera teórica.

Se hizo un análisis económico para determinar la rentabilidad del proyecto y del inversionista, a través de indicadores como la TIR (tasa interna de retorno), 45% y 53%, respectivamente y el VAN (valor actual neto), Q10,276,866.84 y Q8,879,327.11, respectivamente. Otro resultado importante es el tiempo de recuperación de la inversión que es de 2 años con 1 mes y 6 días.

I. INTRODUCCIÓN

El tratamiento de aguas residuales industriales y domésticas, se puede realizar por dos procesos sólido-líquido de separación: tratamiento biológico y tratamiento fisicoquímico. En el biológico se emplean bacterias en forma de lodos que degradan las partículas indeseables, mientras que en el fisicoquímico se utilizan compuestos químicos para aglomerar los sólidos suspendidos y luego eliminarlos.

En el tratamiento fisicoquímico se emplean flocculantes, que son compuestos inorgánicos y/o orgánicos. Dentro de los orgánicos figuran los polímeros, no todos los polímeros son útiles para esta aplicación, sin embargo, los más utilizados como flocculantes son los polímeros solubles en agua de cloruro de dialil dimetil amonio (conocidos como polímeros de DADMAC) y los de acrilamida. Lo que caracteriza a estos compuestos son sus altas masas moleculares. La solubilidad en agua y la alta masa molecular son muy importantes para el desempeño óptimo en la operación de limpieza de aguas residuales. La calidad de estos polímeros depende principalmente del proceso de fabricación, de las materias primas empleadas, del tiempo necesario de reacción y de la estructura molecular.

Existen distintos métodos para la fabricación de polímeros, los cuales son los siguientes: polimerización: en masa, en fase gaseosa, en solución, en suspensión y en emulsión. Los polímeros de cloruro de dialil dimetil amonio y de acrilamida se fabrican por los métodos de solución y emulsión. Cada técnica de polimerización utiliza distintas condiciones y medios de reacción, entre las que se incluyen diferentes formulaciones, tiempos de polimerización y presentación final del producto. Se estudiarán y compararán ambos métodos para establecer el más adecuado para elaborar estos polímeros.

Para sintetizar polímeros con cualquiera de las técnicas de polimerización, se utiliza el mismo reactor. Un reactor es un aparato donde se lleva a cabo cualquier tipo de reacción, no necesariamente sólo la polimerización. En este trabajo se diseñó un reactor y se caracterizó el equipo auxiliar para su operación.

Para ello se estudió distintos tipos de reactores, características especiales de los utilizados en polimerización y material de construcción adecuado. También se determinó la producción anual requerida para establecer el tamaño y dimensiones del equipo. Además se realizó un análisis económico del proyecto que brinda una idea del costo de producción de este tipo de productos.

II. ANTECEDENTES

A. Polímeros

1. **¿Qué es un polímero?** Un polímero es una molécula grande compuesta de muchas unidades pequeñas llamadas meros. La unión de los meros forma enormes cadenas de las formas más diversas. El polímero posee propiedades en común con las moléculas pequeñas pero tiene características únicas (Theil, 1999).

2. **Breve historia.** La palabra polímero proviene del griego *poli* que significa muchos y *meros* parte. Un sinónimo de la palabra polímero es macromolécula. Los polímeros se encontraban en la Tierra mucho antes que la vida comenzara. Esto se apoya en el hecho que los polímeros son necesarios para las funciones esenciales de los organismos vivientes. Estos participan en la transmisión de información genética, reproducción, metabolismo, respiración, excreción y en el movimiento de varios organismos (Theil, 1999).

La química moderna comenzó en el siglo XVIII, pero no fue sino hasta inicios del siglo XX que los químicos comenzaron a apreciar la existencia de los polímeros y a comprender qué eran estos compuestos químicos. Actualmente, cuando se habla de *polímeros* se refiere generalmente a los polímeros orgánicos producidos sintéticamente y no a los biopolímeros naturales como la celulosa, la seda, el hule y las proteínas. En 1838 se preparó el primer polímero orgánico sintético, al polimerizarse accidentalmente cloruro de vinilo. El poliestireno fue descubierto en 1839. Era inevitable que se descubriera este hecho ya que el estireno se polimeriza espontáneamente a menos que se le agregue un estabilizador. Otra fecha histórica fue en 1939, cuando Charles Goodyear descubrió cómo convertir la savia, material gomoso del árbol de hule, en un material fuerte y elástico, calentándola con azufre, lo cual se conoce como vulcanización. Este proceso provocó una revolución en la fabricación de botas, llantas e impermeables. Esta fue la primera vez que alguien había entrelazado

artificialmente un biopolímero natural para darle mayor resistencia y estabilidad (Theil, 1999).

Actualmente el ser humano está rodeado de polímeros, ya que se viste con nylon y poliéster, camina sobre suelas de polipropileno, conduce automóviles donde varias partes son de plástico y hule sintético, utiliza corazones y otros órganos artificiales fabricados de polímero de silicona. Todo a su alrededor posee polímeros (Wade, 1993).

3. Aplicaciones. Los polímeros poseen una extensa variedad de aplicaciones y con el avance de la ciencia y tecnología, surgen cada día nuevos polímeros con nuevos usos. La industria de los polímeros a nivel mundial, genera oportunidades de empleo, descubrimientos científicos, avances tecnológicos e induce al desarrollo de empresas dedicadas a la manufactura de materias primas (compuestos químicos), útiles para la síntesis de los polímeros. La siguiente lista muestra información acerca de las principales aplicaciones de los polímeros (Theil, 1999):

- Plásticos para bolsas, utensilios, carros, computadoras, tubería, juguetes, etc.
- Espumas para esponjas
- Fibras como el nylon y el vidrio
- Elastómeros como el hule y la silicona
- Recubrimientos en las industrias de papel y textiles
- Adhesivos y sellantes
- Floculantes en el tratamiento de aguas residuales
- Aditivos en los aceites lubricantes
- Gel y acondicionadores para el cabello
- Cosméticos
- Ceras para pulir el piso
- Sistemas de liberación de medicamentos, resinas para dientes, lentes de contacto, implantes, prótesis, etc.
- Minería como recuperadores de minerales

- Resinas de intercambio iónico
- Pinturas, barnices y tintas
- Aisladores eléctricos
- Tenerías para acelerar curación de cueros
- Agentes impermeables

(Theil, 1999)

B. Características de los polímeros

1. Fuerzas de atracción intermoleculares. Para mantener unidos a los meros en un polímero se necesitan fuerzas de atracción intermoleculares, las cuales dependen de la composición química del polímero y pueden ser de varias clases. Están las fuerzas de Van der Waals o de dispersión, fuerzas de dipolo permanente, enlaces de hidrógeno y fuerzas iónicas (Wade, 1993).

Como se mencionó, anteriormente, los polímeros son moléculas grandes de variadas formas, donde las fuerzas intermoleculares intervienen como fuerzas de atracción y repulsión entre átomos. Este fenómeno es difícil de predecir en moléculas de esa naturaleza. Este tema resulta extenso y se sale de los alcances del presente trabajo, así que no se entrará en detalle.

2. Tipos de los polímeros. El término polímero designa una combinación de un número no especificado de unidades de meros. Un polímero no tiene la necesidad de constar de moléculas individuales todas de la misma masa molecular y no es necesario, que tengan todas la misma composición química ni la misma estructura molecular. La variabilidad en la composición y estructura, es el resultado de la presencia de grupos finales, ramificaciones ocasionales, variaciones en la orientación de unidades monómeros y la irregularidad en el orden en el que suceden los diferentes tipos de esas unidades. Por lo tanto, los polímeros se tipifican de la siguiente manera (Theil, 1999).

a. Polímero isómero. Polímero que tiene esencialmente la misma composición de porcentaje, pero difiere en la colocación de los átomos o moléculas. Aún cuando un polímero tenga la misma composición pero cambia su estructura, las propiedades químicas cambian (Wade, 1993).

b. Oligómero. Es un polímero que contiene pocas unidades de meros por lo que su masa molecular es baja. Los oligómeros son llamados productos intermedios [(Theil, 1999) y (Wade, 1993)].

c. Biopolímero. Polímero natural. Algunos ejemplos son: polinucleótidos como el ADN, polipéptidos, polisacáridos como la celulosa, seda, hule que es un latex que se obtiene de los árboles de *Hevea brasiliensis* (Shalaby et. al., 1991).

d. Homopolímero. Es un polímero que posee unidades estructurales idénticas de meros. Los homopolímeros se caracterizan por ser polímeros lineales (Theil, 1991).



donde A representa al mero.

e. Copolímero. Es un polímero formado por dos o más monómeros de distinta composición química. Al mero principal se le sigue llamando monómero y los otros meros se les llama *comonómeros*. Evidentemente al variar las proporciones de los monómeros, las propiedades de los copolímeros van variando también, de manera que el proceso de copolimerización permite hasta cierto punto fabricar polímeros a la medida. Cada tipo de monómero brinda sus características al copolímero, por ejemplo resistencia mecánica, elasticidad, flexibilidad, dureza, resistencia a altas o bajas temperaturas, etc (Theil, 1999).

C. Polímeros utilizados como floculantes

Algunos polímeros se pueden utilizar como floculantes en el tratamiento de aguas residuales. Estos polímeros deben ser solubles en agua y constar de una

masa molecular alta para tener mejor desempeño en la limpieza de aguas residuales. También se utilizan los de baja masa molecular, en donde el control del crecimiento de la dicha masa se realiza por medio de los llamados inhibidores (ver Pág. No. 31), los cuales no afectan el porcentaje de conversión del monómero en polímero. Un polímero lineal o ramificado es eficaz, mientras que uno cruzado no resulta útil ya que este es parcialmente soluble en agua. Los polímeros más utilizados en este ámbito son los de **cloruro de dimetil dialil amonio** y los de **acrilamida**, o sus copolímeros correspondientes. El polímero de cloruro de dimetil dialil amonio, está compuesto por el monómero del mismo nombre y se le conoce como polímero de DADMAC, mientras que los polímeros de acrilamida se les conoce como poliacrilamida (Internet No.7).

1. Los floculantes. Los floculantes agentes químicos que forman enlaces entre sus cadenas poliméricas y las partículas suspendidas en un líquido, causando la formación de flóculos y la aglomeración de los mismos. Un floculante es un agente separador de líquidos y sólidos. (Internet No. 6).

Esta masa de flóculos flota o se sedimenta en el agua haciendo fácil su remoción. Son utilizados en el tratamiento de aguas residuales para separar partículas no deseadas y lodos (Internet No.7).

Existen coagulantes inorgánicos como silica activada, cloruro de aluminio (AlCl_3), sulfato de aluminio [$\text{Al}_2(\text{SO}_4)_3$] conocido como alumbre, sulfato férrico [$\text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3$], sulfato ferroso (FeSO_4), cloruro férrico (FeCl_3), cloruro ferroso (FeCl_2), etc. Los polímeros floculantes también se pueden usar en combinación con coagulantes para lograr una mejor purificación de las aguas residuales. Si se utiliza una combinación de los mismos es preferible que el polímero posea baja masa molecular [(Internet No. 7) y (Krisner, 1978)].

a. Polielectrolitos y no-polielectrolitos. Un electrolito es un átomo o molécula que cuando se disuelve en agua se ioniza y se forma una estructura con carga positiva o negativa. Por lo tanto, los polielectrolitos al solubilizarse generan una o varias cargas positivas o negativas en el polímero. Mientras que los no-

polielectrolitos no generan cargas iónicas al solubilizarse. En el caso de los polímeros de DADMAC (cloruro de dimetil dialil amonio), se genera un catión o carga positiva. Los polímeros de acrilamida son no-polielectrolitos (Shalaby et.al., 1991).

Las aguas residuales contienen sólidos finos suspendidos o bien emulsiones que están dispersos debido a la repulsión mutua de sus superficies cargadas negativamente. Cuando el polímero de DADMAC o acrilamida se solubiliza en el sistema de aguas negras, el catión interfiere con la estabilización de repulsión y permite que las partículas sean atraídas. Es aquí cuando comienza el proceso de floculación (Internet No. 7).

2. Otras aplicaciones. Los polímeros de DADMAC (cloruro de dimetil dialil amonio) y los de acrilamida además de utilizarse exitosamente como agentes floculantes, también tienen otras aplicaciones como aditivos en textiles para evitar arrugas, agentes antiestáticos de telas, agentes bactericidas y fungicidas, aditivos que mejoran la resistencia al agua del papel, aceleradores en la curación de hule y resinas epóxicas, aditivos en tintas para impresiones entre otros. El uso de estos polímeros depende de los comonomeros utilizados y también depende de la estructura del polímero, si es lineal, ramificado o cruzado (Butler, 1996).

D. Descripción y propiedades de los polímeros de DADMAC y de acrilamida

1. Características del polímero cloruro de dialil dimetil amonio (DADMAC). El polímero de DADMAC es un polielectrolito y es el más utilizado de los polímeros catiónicos de amonio cuaternario. El amonio cuaternario lo hace altamente hidrofílico. Este fue el primer polímero que se aprobó por la "Administración de Alimentos y Farmacéuticos" (conocida por sus siglas en inglés como FDA: "Food and Drug Administration") para el uso de agua potable. Es extensivamente utilizado como floculante aunque tiene otros usos. (Shalaby et.al., 1991).

El polímero de DADMAC es un agente en las operaciones de separación líquido-sólido. Su uso como floculante en aguas residuales permite reducir la

cantidad de coagulantes como la alúmina y reduce la cantidad de sólidos residuales (Internet No. 2).

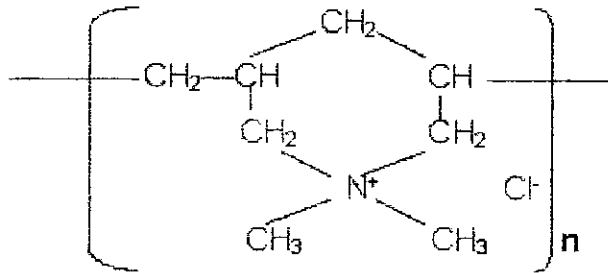
Los polímeros de DADMAC poseen de mediana a alta masa molecular, son altamente catiónicos y pueden ser soluciones acuosas, emulsiones o sólidos. Se prepara a partir monómero de cloruro de dialil dimetil amonio por medio de las técnicas de polimerización de *solución* y *emulsión agua en aceite*, utilizando iniciadores (catalizadores) que producen radicales libres (descritos más adelante). Las formulaciones del polímero de DADMAC difieren en la masa molecular y en su densidad catiónica. Los polímeros de DADMAC pueden ser copolímeros al combinarse con una gran variedad de cononómeros, por ejemplo se puede copolimerizar DADMAC y acrilamida y resulta un copolímero excelente como floculante, para la clarificación de aguas residuales (Internet No. 2).

Las aplicaciones más importantes de estos polímeros es en el tratamiento de aguas residuales: domésticas, industriales, aguas residuales que contienen aceite, eliminación de agua en lodos, también son utilizados como aditivos para tintas, en la industria del papel, medicina, textiles, tenerías entre muchas otras (Internet No. 8).

El modo de aplicación debe ser en plantas de tratamiento de aguas residuales que cuenten con sistema de filtros. Las aguas tratadas con polímeros de DADMAC pueden ser descargadas en lagos, ríos, pozas o aguas públicas. Es importante conocer que el producto es tóxico para la flora y fauna marina. Así que las aguas tratadas descargadas directamente a estuarios deben contener como mínimo 50 g/m^3 . Un estuario es la desembocadura de un río al mar (Internet No. 2).

a. Sinónimos. Se le conoce también como polímero de cloruro de dimetil dialil amonio, polímero de cloruro de N,N-dimetil-N-2-propenil-1-amonio, polímero de DMDAAC, de DDDMAC, de DMDACC y pDADMAC (Internet No. 2).

b. Estructura molecular del mero



donde **n** indica el número de unidades de mero de cloruro de dialil dimetil amonio (Shalaby et.al., 1991).

c. Especificaciones

- Masa molecular: 5,000 – 20,000,000 Kg/Kg mol
- Viscosidad: 0.1 – 40 Pa s
- Presentación: Los polímeros de DADMAC se consiguen en las siguientes presentaciones: polvo, granular, en solución en concentraciones de 2-70% (% en masa) y en emulsión en concentraciones de 25 a 50% (% en masa). Es importante conocer que los productos secos no deben estar expuestos a la humedad, ya que se solidifican al humedecerse.
- Solubilidad: En agua con ayuda de mezclado
- Apariencia: Líquido viscoso amarillento o polvo blanco.

(Internet No. 2)

d. **Toxicología.** Los datos toxicológicos demuestran que los polímeros catiónicos pueden no ser son tóxicos para el ser humano, pero pueden causar irritación (Internet No. 2).

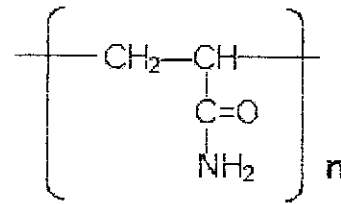
2. Características del polímero de acrilamida. El polímero de acrilamida es un no polielectrolito, es decir, que al solubilizarse en agua no se forman cargas iónicas en el polímero. La poliacrilamida se polimeriza fácilmente en soluciones acuosas o en emulsiones. La poliacrilamida contiene una parte que es insoluble en agua, lo que presenta algunos problemas en su uso (Shalaby et.al., 1991).

Los polímeros de acrilamida de alta masa molecular pueden modificarse para brindar propiedades no iónicas, catiónicas y aniónicas. El principal uso de los polímeros de acrilamida es como floculante, en tratamiento de aguas residuales y potable. Las aguas tratadas con poliacrilamida se pueden reutilizar como agua de proceso en las industrias o como agua potable, siempre y cuando las concentraciones sean menores a 2 g/m^3 . Otras aplicaciones son la recuperación de aceite en los afluentes, fabricación de papel, espesantes, agentes de acondicionamiento de suelos, la minería y en imprentas. También se utilizan como agentes de retención de pigmentos en las fibras de papel. La industria, en los Estados Unidos, utiliza un 20% anual de la poliacrilamida, en las industrias de fabricación de papel (Internet No. 5).

El polímero de acrilamida se sintetiza a partir de monómero de acrilamida y si se desea, se pueden fabricar copolímeros con monómeros que brinden ramificación al polímero, o bien, con monómero de cloruro de dialil dimetil amonio; este último copolímero se caracteriza por ser muy efectivo en el tratamiento de aguas residuales, además brinda una masa molecular alta y se solubiliza mejor en agua, ya que el monómero de DADMAC es muy soluble en agua. La acrilamida se polimeriza por medio de iniciadores generadores de radicales libres (ver Pág. No. 19) utilizando técnicas de polimerización en *solución* y en *emulsión agua en aceite* (Vanderhoff y Wiley, 1966).

a. Sinónimos. Al polímero de acrilamida también se le conoce como poli(acrilamida), poliamida acrílica, polímero de propenamida, 2-propenamida, polímero de ácido acrílico de amida, polietilen-carboxamida y polivinilamida (Internet No. 5).

b. Estructura molecular del mero



donde n indica el número de unidades de mero de acrilamida (Shalaby et.al., 1991)

c. Especificaciones

- Masa molecular: 5,000 – 20,000,000 Kg/Kg mol
- Viscosidad: 0.1 – 40 Pa·s
- Presentación: Los polímeros de acrilamida se encuentran en el mercado en presentaciones en polvo, solución y en emulsión en concentraciones de 40 a 75% (% en masa).
- Solubilidad: Debido a que no es un polielectrolito posee una parte insoluble en agua, sin embargo es un polímero soluble en agua.
- Apariencia: Líquido o polvo blanco.

(Internet No. 5)

d. Toxicología. La acrilamida como monómero es tóxica, sin embargo, el polímero no guarda esta característica. Las aguas se pueden tratar con poliacrilamidas siempre y cuando se elimine esta por medio de filtración. Se recomienda que el agua potable que se trata con poliacrilamida tenga una concentración final de 2 g/m³ de polímero. Más adelante se menciona la toxicología de la acrilamida como monómero (Internet No. 3).

3. Disponibilidad de polímeros de DADMAC y acrilamida en Guatemala. No existe empresa en Guatemala que fabrique este tipo de polímeros. Los

principales países productores de polímeros son: Estados Unidos, Japón, China, Brasil, Inglaterra y Australia. Debido a este inconveniente es necesario importarlos, lo cual que conlleva a altos precios, disponibilidad limitada, largo tiempo de entrega y los más preocupante, fuga de divisas en el país. La empresa Ciba Specialty Chemicals Corporation aquí en Guatemala importa, monómeros y polímeros. De los polímeros sólo cuenta con el de DADMAC y no vende poliacrilamida, además también comercializa copolímeros de DADMAC y de acrilamida importados de Virginia, Estados Unidos (Internet No. 7).

4. Mercado de los polímeros de DADMAC y acrilamida en Guatemala. El tratamiento de aguas residuales está en pleno crecimiento en Guatemala, cada vez las empresas se interesan más y más en tratar sus aguas residuales para evitar contaminación de afluentes y lograr hasta cierto punto reutilizar el agua. La demanda de los floculantes es evidente, ya que se tiene conocimiento que empresas privadas como Olmeca, Kerns, Cementos Progreso, Koramsa y Colgate entre otras y empresas nacionales como la Municipalidad capitalina, poseen plantas de tratamiento de aguas residuales, ya sean industriales y/o domésticas. La empresa Sales, Ácidos y Solventes, S.A., que apoya la investigación de este proyecto, tiene experiencia en la producción de floculantes-coagulantes inorgánicos como el sulfato férrico y el cloruro férrico. Estos productos es preciso combinarlos con polímeros de DADMAC y acrilamida para optimizar la clarificación de afluentes.

E. Caracterización de los polímeros de DADMAC y acrilamida

1. Viscosidad. La viscosidad de una solución, se refiere a la fuerza de resistencia que opone el líquido al flujo. La viscosidad de un polímero suele medirse como viscosidad intrínseca, cuyas unidades son dL/g. La viscosidad intrínseca está empíricamente relacionada con la masa molecular de polímeros lineales, pero no de ramificados ni cruzados. La viscosidad intrínseca es independiente de la concentración pero es función del tipo de solvente utilizado; los solventes más utilizados son agua, soluciones acuosas de bromuro de potasio

y cloruro de potasio. La viscosidad también se mide en viscosímetros de Ostwald-Fenske, de Brookfield o de Ubbelohde, donde se debe mantener la temperatura constante de la solución polimérica. Los resultados se dan en las unidades, Pa s. En un viscosímetro de Brookfield no se mide la resistencia al flujo, sino que el torque del polímero producido por un elemento giratorio (Billmeyer, 1971).

2. Masa molecular. La masa molecular de un polímero aumenta a medida que aumenta el grado de polimerización. Suele expresarse como un promedio del número de meros o como un promedio de masa molecular. La masa molecular suele calcularse a partir de la viscosidad intrínseca, ya que ambas propiedades son proporcionales en la polimerización.

Sin embargo, la masa molecular de toda clase de polímeros ya sean lineales, ramificados o cruzados, se puede determinar por los siguientes métodos: dispersión de luz (light scattering), ultracentrifugación, osmometría de membrana y cromatografía permeable de gel. El método más utilizado es el de cromatografía de gel permeable (Billmeyer, 1971).

F. Descripción y propiedades de la materia prima

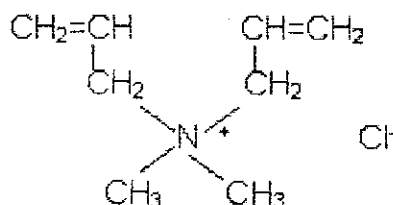
1. Características del monómero de cloruro de dialil dimetil amonio. El monómero de DADMAC es el resultado de la reacción entre alcohol alílico y dimetilamina. Este monómero se utiliza exclusivamente para la fabricación de polímeros catiónicos solubles en agua, los cuales son utilizados en las industrias de tratamiento de aguas, elaboración de papel y textilerías. Este monómero se puede copolimerizar con acrilamida para amentar el peso molecular del polímero y así mejorar la separación líquido-sólido en el tratamiento de aguas residuales (Internet No. 3).

El DADMAC fue sintetizado, por primera vez, por el químico americano G. B. Butler a finales de 1940, pero no fue sino hasta principios de 1970, que una compañía americana industrializó su producción. En 1980, Japón, Inglaterra y la

Unión Soviética lograron producir el compuesto. En 1990, China comenzó a producir el DADMAC y sus polímeros (Internet No. 1).

a. **Sinónimos.** Se le conoce también como cloruro de dimetil dialil amonio, cloruro de N,N-dimetil-N-2-propenil-1-amonio, DMDAAC, DDDMAC y DMDACC.

b. **Estructura molecular**



(Shalaby et.al., 1991)

c. **Especificaciones**

- Fórmula molecular: $C_8H_{16}ClN$
- Masa molecular: 161.67 Kg/Kg mol
- Punto de ebullición: 373.15 K
- Solubilidad: Soluble en agua
- pH: 6.0 – 8.0
- Densidad: 1077.79 Kg/m³ a 298.15 K
- Presentación: Estos monómeros están disponibles en polvo, granular y en solución.
- Apariencia: líquido incoloro o amarillento.

(Internet No. 5)

d. **Toxicología.** Según un estudio la toxicidad oral en ratas expresada como LD50 es 3,030 mg/Kg. No se considera tóxico para el ser humano. Se absorbe muy poco por la piel. Varios estudios demostraron que este compuesto no es mutagénico, por lo que no se considera un agente cancerígeno (Internet No. 3).

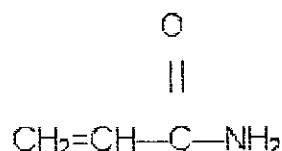
2. Características del monómero de acrilamida. El monómero de acrilamida es el resultado de la reacción entre el acrilonitrilo y agua. La acrilamida se utiliza como monómero o comonómero en polimerización. También se utiliza para sintetizar tintes, en la fabricación de lentes de contacto, construcción de túneles, represas y alcantarillas. La acrilamida es un estabilizador de suelos por lo que se utiliza en fundiciones para facilitar el manejo de arena en moldes. La acrilamida puede utilizarse como recubrimiento para objetos para el hogar, para automóviles, herramientas de trabajo. También se utiliza en preparación de cosméticos y jabones como agente espesante, se utiliza en resinas para rellenos dentales, aditivo para tratamientos para el cabello. También se utiliza como espesante de látex, adhesivos de contacto, para fabricar compuestos azo y estabilizador de tintas para impresión (Internet No. 5).

La acrilamida sólida es estable a temperatura ambiente, pero puede polimerizarse violentamente cuando se funde, bajo luz ultravioleta y al contacto con agentes oxidantes fuertes como dióxido de cloruro y de bromuro. Cuando la acrilamida se funde se descompone y produce gases tóxicos. Si se calienta a altas temperaturas puede explotar (Internet No. 5).

La acrilamida es biodegradable, su tiempo de residencia es de 4 a 20 días (Internet No. 3).

a. Sinónimos. Al monómero de acrilamida también se le conoce como amida acrílica, propenamida, 2-propenamida, solución de acrilamida, ácido acrílico de amida, etilen-carboxamida y vinil amida (Internet No. 5)

b. Estructura molecular



(Shalaby et.al., 1991)

c. Especificaciones

- Fórmula molecular: C_3H_5NO
- Masa molecular: 71.077 Kg/Kg mol
- Punto de ebullición: 398.15K
- Solubilidad: En agua es de 2,200 Kg/m³ a 298.15 K. Además, soluble en metanol, etanol, dimetil éter y acetona. Es insoluble en benceno y heptano.
- pH: Se debe evitar pH mayores de 10, ya que el polímero se degrada lentamente a esas condiciones.
- Densidad: 1080 Kg/m³ a 298.15 K
- Presentación: Estos monómeros están disponibles en polvo, granular y solución.
- Apariencia: Cristales blancos inodoros.

(Internet No. 5)

d. Toxicología. La acrilamida puede causar cáncer, puede dañar el sistema nervioso causando entumecimiento, parálisis, insensibilidad y debilidad de las manos y pies. La acrilamida es dañina si se inhala, si se absorbe por la piel, si ingiere y si existe contacto con piel y ojos. La exposición a la acrilamida causa irritación en la garganta, nariz, piel donde se produce sensación de alergia o quemadura, y en los ojos puede causar quemaduras. Puede causar la pérdida del equilibrio, mal pronunciación al hablar y sudoración. Se recomienda que el tiempo de exposición del trabajador sea de máximo 8 horas al día (Internet No. 5).

Se ha demostrado que causa daños en los testículos y puede incrementar las probabilidades de pérdida del feto y causarle efectos neurotóxicos (Internet No. 4).

3. Disponibilidad de materia prima en Guatemala. No hay evidencia que en Guatemala se fabriquen monómeros de cloruro de dialil dimetil amonio (DADMAC) ni de acrilamida. Se investigó que el país productor más cercano, que puede abastecer el mercado, es Estados Unidos. A continuación se mencionan

las compañías que fabrican dichos monómeros: American Cyanamid Company en Avondale, Louisiana y en Linden, New Jersey, Dow Chemical USA en Midland, Michigan; Nalco Chemical Company en Garyville, Louisiana; BF Goodrich Company en Cleveland, Ohio y Cosan Chemical Corporation en Carlstadt, New Jersey (Internet No. 5).

G. Clasificación de los polímeros según el mecanismo de polimerización

Existen diversos mecanismos de reacción para unir las moléculas pequeñas con otras para formar moléculas grandes. Su clasificación se basa en la forma por la cual se unen los monómeros o bien por las condiciones experimentales de reacción. Hay dos clases principales de polímeros según el mecanismo de polimerización: *polímeros de adición* y *polímeros de condensación* (Wade, 1993).

Como se mencionó en la Pág. No. 8, los polímeros de DADMAC y acrilamida, se polimerizan por medio de iniciadores generadores de radicales libres. Por lo tanto, sólo se explicarán los *polímeros de adición* en donde se incluye la polimerización por radicales libres.

1. Polímeros de adición. Estos son el resultado de la adición rápida de una molécula a la vez a una cadena creciente del polímero, por lo general, a través de un intermediario reactivo (radical libre, catión o anión) en el extremo creciente de la cadena. También se les llama de *crecimiento en cadena*. Los monómeros polimerizados por adición poseen un doble enlace, en donde se hacen adiciones sucesivas de otras moléculas de monómero. A estos se adicionan otras moléculas de monómeros, se les conoce como *monómeros insaturados*, donde se incluyen el DADMAC y la acrilamida. (Wade. 1993).

a. Polimerización por radicales libres. La polimerización se inicia mediante radicales libres de compuestos químicos, ya sean orgánicos o inorgánicos, llamados iniciadores. Hay tres pasos en esta polimerización: iniciación, propagación y terminación. *Iniciación*, se generan radicales libres por medio de los llamados iniciadores, luego uno de los radicales libres se une al

monómero para convertirlo en radical. *Propagación*, el radical reacciona ahora con otra molécula de monómero para dar un radical libre de mayor tamaño y este proceso de propagación continúa hasta que termina la cadena. La *terminación* de la cadena se alcanza por (Wade, 1993):

1) Apareamiento. Dos radicales libres en crecimiento chocan cabeza con cabeza para formar una molécula estable (Billmeyer, 1971).

2) Desproporcionamiento. Dos radicales se encuentran y se transfieren un protón de una de ellas al otro para dar dos moléculas estables, una saturada y la otra con doble enlace terminal (Billmeyer, 1971).

3) Transferencia de cadena. Puede provocar terminación o ramificación. Un radical polimérico en crecimiento puede sustraer un átomo de hidrógeno de una cadena de polímero ya terminada que se convierte en radical. Si el átomo se extrae de un extremo, el crecimiento es lineal, pero si es del cuerpo, aparecen ramificaciones (Billmeyer, 1971).

La generación de radicales libres puede realizarse por descomposición térmica de peróxidos e hidroperóxidos orgánicos y compuestos azo o diazo, por fotólisis, por irradiación gama de C^{60} o ultravioleta, por medio de un acelerador de electrones de Van Graff, por reacciones oxidación-reducción (sistema redox). Los sistemas de generación de radicales libres electroquímicos y fotoquímicos están fuera del alcance del presente trabajo por lo que no se detallarán (Vanderhoff y Wiley, 1966).

a) Iniciadores. Los compuestos que se utilizan como generadores de radicales libres se les conoce como *iniciadores*. Los iniciadores puede trabajar con o sin sistema redox. Se puede utilizar uno o varios iniciadores; en el caso de un sistema redox. Es importante no utilizar concentraciones muy altas de iniciador, ya que esto disminuye la masa molecular de los polímeros. A continuación se

mencionan unos cuantos iniciadores de los muchos que se utilizan para la polimerización de DADMAC y de acrilamida (Vanderhoff y Wiley, 1966):

1. hidroperóxido de t-butilo
2. t-butil peroxi pivalato
3. peróxido de benzoílo, de lauroílo, de acetilo y de bario
4. persulfato de potasio o de amonio
5. ácido perbenzoico
6. nitrato, sulfato o yodato de cerio
7. sulfato de amonio y cerio
8. pirofosfato de amonio y cerio
9. peróxido de metil etil cetona
10. peroxalato de dimetilo
11. 2,2'-azobis(2-amidinopropano) dihidrocloruro
12. 2,2'-azobis(isobutyronitrilo)
13. 2-(carbamoilazo)isobutyronitrilo
14. azo-bisisobutyramidina dihidrocloruro
15. 2,2'-azobis'(N,N-dimetilenisobutiramidina) dihidrocloruro
16. 2,2'-azobis-2,4-dimetilvaleronitrilo
17. ácido 4,4'-azobis-4-cianovalerico
18. ácido 4,4'-azobis(4-cianopentoico)

(Vanderhoff y Wiley, 1966)

Los anteriores iniciadores se pueden utilizar individualmente activados por calor, o se pueden utilizar como agentes oxidantes junto con un agente reductor para formar un sistema redox.

b) Agentes reductores

1. sulfato ferroso de amonio
2. borohidruro de sodio de calcio
3. cloruro cuproso o de cobalto
4. metabisulfito de sodio
5. sulfitos de hidrógeno
6. dióxido de sulfuro
7. N,N-dimetilaminopropylamina
8. N,N,N',N'-tetrametiletildiamina
9. N,N-dimetilanilina

Además del mecanismo de polimerización por radicales libres, existen otros dos mecanismos dentro de los *polímeros de adición*: *polimerización catiónica*

y *polimerización aniónica*, los cuales no se utilizan en la producción de polímeros de DADMAC y de acrilamida. (Wade, 1993).

H. Procesos de polimerización de DADMAC y acrilamida

A los procesos de polimerización también se les conoce como *técnicas o métodos de polimerización*. Existen varios métodos en general, polimerización: en masa, en suspensión, en solución y en emulsión. Los polímeros y copolímeros de DADMAC y de acrilamida utilizados como floculantes en el tratamiento de aguas residuales, se preparan adecuadamente por medio de *solución y emulsión agua en aceite* por lo que se hará énfasis en ambos métodos (Vanderhoff y Wiley, 1966).

Es conveniente clasificar los sistemas de polimerización en *homogéneos y heterogéneos*, en los homogéneos existe una sola fase, mientras que en los heterogéneos existen dos fases (Billmeyer, 1971).

1. Polimerización en un sistema homogéneo (una fase presente)

a. **Polimerización en masa.** Es el la técnica más utilizada para sintetizar *polímeros de condensación*, donde las reacciones son levemente exotérmicas. La mayor parte de la reacción se da cuando la viscosidad de la mezcla es aún baja permitiendo la agitación, transferencia de calor y eliminación de burbujas. Se produce un polímero puro sin contaminación de solventes (Billmeyer, 1971).

La polimerización en masa es difícil para monómeros insaturados como DADMAC y acrilamida, porque las reacciones son bastante exotérmicas y también se ve afectado el funcionamiento de los iniciadores ya que su velocidad depende de la temperatura. Es difícil controlar la reacción porque la viscosidad aumenta a inicios de la polimerización, lo cual dificulta la transferencia de calor y se generan puntos de recalentamiento y puntos fríos (Billmeyer, 1971).

b. **Polimerización en solución.** Esta método es útil para polimerizar monómeros insaturados como DADMAC y acrilamida, que resultan en polímeros

de alta masa molecular. El uso de solventes permite el control efectivo de la transferencia de calor. Sin embargo, tiene sus inconvenientes, el solvente debe escogerse con mucho cuidado porque puede causar transferencia de cadena (ver Pág. No. 19) y además el polímero se deberá utilizar como producto en solución y no en seco, debido a que la remoción del solvente es difícil (por destilación azeotrópica) y resulta caro e impráctico. El solvente debe ser un líquido inerte hidrofílico (Billmeyer, 1971).

A continuación se mencionan distintos solventes que se pueden emplear para la polimerización de DADMAC y acrilamida: agua destilada o desmineralizada, benceno, tolueno, xileno, metanol, etanol, isopropanol, etilen glicol, dioxano y eter etílico entre otros (Butler, 1966).

2. Polimerización en un sistema heterogéneo (dos fases presentes)

a. Polimerización gaseosa. Consiste en la polimerización de monómeros insaturados gaseosos que se cataliza con fotoiniciación. Inmediatamente, después de comenzada la reacción, se genera una fase sólida. Es poco utilizada comercialmente y requiere altas presiones (Billmeyer, 1971).

b. Polimerización en suspensión. El término *suspensión* se refiere a la polimerización en un sistema acuoso, donde el monómero está en una fase dispersa; el polímero resultante se encuentra en una fase sólida dispersa. El iniciador se disuelve en la fase del monómero, y esta mezcla se suspende en forma de pequeñas gotas (diámetro = 0.01-0.5cm) en una fase continua como el agua. La suspensión se mantiene por medio de agitación y agentes estabilizadores, los cuales incrementan la tensión superficial entre las fases. La aglomeración de polímero induce al aumento de viscosidad. Este método se utiliza para producir polímeros duros y vítreos. Existe información sobre la fabricación de polímeros de DADMAC y de acrilamida por medio de *suspensión*, pero los resultados no muestran buenas propiedades para utilizarlos como floculantes (Billmeyer, 1971).

c. **Polimerización en emulsión.** La emulsión es la mezcla de dos fases insolubles: agua y fase oleosa, tal que una de ellas se mantiene dispersa con la ayuda de un surfactante. Este método se utiliza para fabricar polímeros de DADMAC y acrilamida de alto peso molecular útiles como floculantes en el tratamiento de aguas residuales. La polimerización se lleva a cabo por medio de iniciadores generadores de radicales libres. Los radicales libres se difunden en todo el sistema y son capturados por moléculas de monómeros que luego generan la polimerización. Los iniciadores pueden ser orgánicos o inorgánicos, solubles en agua o solubles en aceite. Los monómeros de DADMAC y de acrilamida son solubles en agua, esta fase, se emulsifica en una fase oleosa con la ayuda de surfactante y agitación continua. Las gotitas de monómero emulsificado son muy pequeñas, 0.1 μm de diámetro. Los surfactantes se encuentran en forma de micelas dentro de las cuales se sitúa el monómero (Billmeyer, 1971).

Una emulsión puede ser: *aceite en agua* o *agua en aceite*, en la primera el aceite se encuentra disperso en la fase acuosa, mientras que en la segunda, la fase acuosa está dispersa en el aceite, a esta última también se le conoce como *emulsión inversa*.

1) Micelas. Son moléculas con "cabezas" polares hidrofílicas y "colas" hidrofóbicas. Los grupos hidrofílicos están unidos por puentes de hidrógeno al agua que los rodea, mientras que los grupos hidrofóbicos (monómeros) están protegidos en el interior de la micela e interactúan con otros grupos hidrofóbicos (monómeros u oligómeros) (Wade, 1993).

2) Surfactantes. También se les conoce como *agentes de superficie activa* o *agentes emulsificantes*, que mantienen estable la emulsión. Existen surfactantes para cada tipo de emulsión: *aceite en agua* o *para agua en aceite*. A continuación se mencionan algunos surfactantes utilizados: polioxietilen (20) sorbitan triolato (Tween 85®); sorbitan triolato (Span 85®); monoestereato o monolcato de sorbitan; ftalato cetílico o ftalato steárico de sodio, ftalato hexadecil de sodio, sulfato de sodio octil fenoxietoxi-2-etanol; miristato, laureato, palmitato,

oleato, estereato o resinato de sodio o potasio; sulfato lauril o estearil de sodio, entre muchos otros (Vanderhoff y Wiley, 1966).

3) Fase oleosa. Es el líquido hidrofóbico que forma la segunda fase en una emulsión. A continuación se dan algunos ejemplos: aceite mineral, benceno, tolueno, xileno, *o*-diclorobenceno, cloruro de propileno, tetracloruro de carbono, percloroetileno, espíritus minerales, kerosina y naftas entre otros (Vanderhoff y Wiley, 1966).

I. Condiciones de reacción en la polimerización de DADMAC y de acrilamida

1. Presión. Las reacciones de polimerización de los monómeros de cloruro de dialil dimetil amonio y los de acrilamida se realiza a presión atmosférica. Se puede utilizar mayor presión cuando se utilizan componentes volátiles en la reacción (Butler, 1966).

2. Temperatura. La polimerización de estos monómeros son reacciones exotérmicas; en algunos casos es necesario controlar el aumento de temperatura con un refrigerante como el agua, y en otros casos es necesario elevar la temperatura con calentamiento. El rango de temperaturas que se utiliza en estas polimerizaciones es 273.15 K – 373.15 K, pero el rango más utilizado es 298.15 K a 353.15 K [(Vanderhoff y Wiley, 1966) y (Butler, 1966)].

3. Inyección de nitrógeno gaseoso. Es preferible iniciar la polimerización bajo una atmósfera de nitrógeno gaseoso. Hay polimerizaciones que se llevan a cabo sin nitrógeno, causando disminución en la conversión del monómero, sin embargo, el cambio no es significativo. Debido a que el oxígeno es un agente oxidante interfiere con el desempeño de los iniciadores oxidantes-reductores, así que es conveniente sustituir el aire dentro del reactor, por nitrógeno gaseoso. Se debe inyectar el nitrógeno al reactor durante una hora antes de comenzar la

polimerización. También se pueden utilizar otros gases inertes como el argón y el dióxido de carbono. (Sanner, 1983 y Butler, 1966).

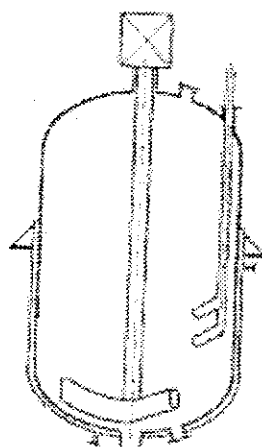
4. Tiempo de polimerización. Los tiempos de reacción en la polimerización de monómeros insaturados, solubles en agua, como el DADMAC y la acrilamida pueden ser muy variables. Depende del tipo y cantidad de iniciadores, del monómero y los comonómeros, del método de polimerización y del control de la temperatura. Para brindar una idea, se dan los siguientes períodos de tiempo de reacción que implican rangos muy amplios: ½ hora, 1 hora, 8 horas, 16 horas, 1 hasta 5 días [(Vanderhoff y Wiley, 1966) ; (Butler, 1966) y (Sanner, 1983)].

J. Reactores utilizados para la polimerización de DADMAC y acrilamida

Estos reactores son generalmente recipientes agitados en donde la polimerización se lleva a cabo como una operación continua o por lotes. Las características más importantes en un reactor es la agitación y el sistema de enfriamiento, ya que las polimerizaciones son exotérmicas. Cuando se trabaja con reactores muy grandes de 200 m³, la agitación se vuelve un problema, ya que surge la pregunta ¿será rentable el gasto de energía para agitar y mezclar? (Platzer, 1973).

1. Agitación. La agitación se realiza en polimerizaciones en solución, en emulsión y en suspensión. Cuando está presente una alta concentración de polímero, la mezcla se pone tan viscosa que se llega a los límites de agitación. La Figura No. 1, muestra un diseño convencional de reactor que puede manejar viscosidades hasta de 2 Pa s (2,000 cP) (Platzer, 1973).

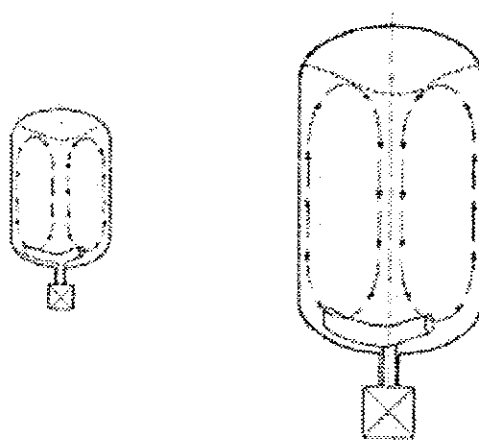
Figura No. 1. Reactor convencional con agitador en parte superior, placa deflectora y chaqueta para enfriamiento (volúmenes de 40 m³ o más)



(Platzer, 1973)

Al diseñar reactores grandes (10 m³ - 100 m³) es importante saber si las dimensiones permiten una agitación adecuada. ¿Bajo qué condiciones se establece una agitación geoméricamente similar en dos distintos tamaños de reactores? El término *agitación geoméricamente similar* se refiere a agitaciones iguales en ambos reactores (Ver Figura No. 2) (Platzer, 1973).

Figura No. 2. Patrones de flujo geoméricamente similares en dos reactores de diferente tamaño



(Platzer, 1973)

Para mantener patrones de flujo geoméricamente similares, se utiliza la siguiente ecuación (Platzer, 1973):

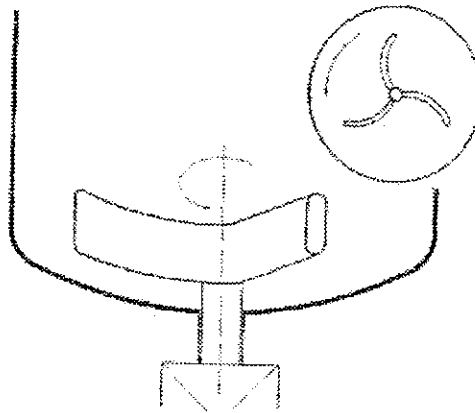
$$\mu_g = \mu_p (d_g / d_p)^{1.5}$$

donde los subíndices g y p indican reactor *grande* y *pequeño*, respectivamente, μ es la viscosidad de la mezcla y d es el diámetro del reactor. Esta ecuación demuestra que la viscosidad del reactor grande parece más alta comparada con la del reactor pequeño. La ecuación implica que se debe variar la viscosidad en dos reactores distintos para obtener la misma agitación geométrica.

Cuando el reactor a diseñar es bastante grande, no se puede utilizar un agitador que esté sujetado del techo del reactor. La varilla a utilizar sería muy larga, gruesa y cara, ya que el elemento agitador debe situarse cerca del fondo del reactor. Como solución se construyen agitadores montados en la base, en este caso, el agitador entra por debajo y no por encima de cuerpo del reactor. (Platzer, 1973).

El elemento agitador puede ser de turbinas de formas variadas, de paletas, de ancla o compuerta, de palas, de hélice, de tornillo helicoidal, entre otros. La Figura No. 3, muestra un ejemplo de turbina de tres aspás, utilizada cuando la limpieza del reactor es frecuente (Platzer, 1973).

Figura No. 3: Agitador de turbina ajustado en la base del reactor



(Platzer, 1973)

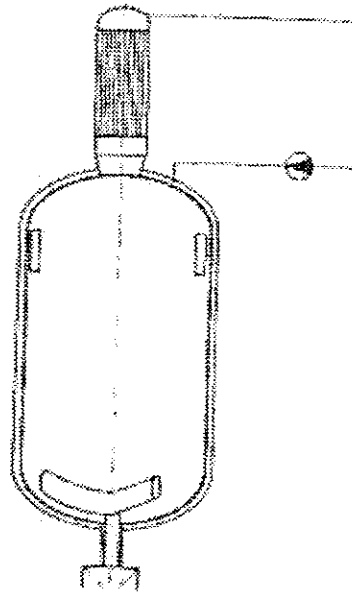
Los agitadores, de la figura anterior, se basan en una recirculación con retorno, que consiste en corrientes ascendentes en la periferia y corrientes descendentes en el centro del reactor (ver Figura No. 2). En un reactor bien agitado el tiempo de retorno del fluido debe ser corto, 30 a 100 segundos. Este tiempo se puede medir utilizando tinta, que se introduce en el vortex, y tomando el tiempo. La Figura No. 2, muestra este comportamiento.

El agitador, ya sea superior o inferior, debe tener un sistema adecuado de sellos mecánicos para evitar que se escapen los gases, como el nitrógeno que implica un costo de materia prima. El agitador puede tener un sello mecánico secundario que permita cambiar el dañado mientras esté operando. Si el agitador está colocado en el inferior del reactor, los sellos deben evitar que se derrame la mezcla y que ocurra polimerización dentro del sello (Platzer, 1973).

2. Sistema de enfriamiento. La polimerización es un proceso exotérmico por lo que debe controlarse el aumento de temperatura. Los calores específicos de polimerización brindan una idea de la cantidad de calor generada en el proceso. Con esta cantidad establecida se puede calcular el área necesaria de la chaqueta o serpentín de enfriamiento. Se utilizan serpentines cuando se requiere un área grande de enfriamiento comparada con el área de la pared del reactor. Sin embargo, los tubos del serpentín representan un obstáculo al momento de limpiar, por lo que son adecuados en reacciones donde no se forman adherencias sólidas. Se puede diseñar el serpentín fuera del reactor, a modo que recirculen los componentes del reactor por medio de una bomba, a través de un arreglo de tubos externos. (Platzer, 1973).

Otro método es enfriar con reflujo, utilizando un condensador en la parte superior del reactor. Este es un método muy efectivo, sin embargo, tiene sus inconvenientes: el gas inerte, nitrógeno, tiende a "acolchonarse" dentro del compresor, no se deben utilizar compuestos volátiles y existen limitaciones en polimerizaciones donde se genera espuma (Platzer, 1973).

Figura No. 4: Reactor con enfriamiento de reflujo de vapor



(Platzer, 1973)

El control de la temperatura en reactores grandes es el mismo que en pequeños. La temperatura se ve afectada cuando el mezclado es ineficiente o cuando el tiempo de retorno del fluido es lento, puede presentarse distintas mediciones de temperatura dentro del reactor, con diferencias de hasta 283.15 K (10 °C) (Platzer, 19873).

3. Características de la carcasa. El tratamiento de templado de la carcasa de un reactor grande puede representar un problema, ya que los fabricantes no poseen hornos con espacio suficiente para el reactor. Para evitar el templado después de soldar y para mantener dentro de un peso de transporte razonable, se fabrica la carcasa de un grosor lo más delgado posible. El grosor puede ser tan pequeño que no necesita del proceso de templado. El cuerpo del sistema de enfriamiento le brinda soporte a la carcasa. La relación de altura y diámetro para estos reactores es 1.8 : 1 (Platzer, 1973).

Los reactores grandes se colocan generalmente a la intemperie, y no presenta ningún obstáculo. La base donde se coloca el reactor puede tener 4, 6 u 8 soportes fundidos en concreto. Es importante evitar vibraciones causadas por el

agitador, para conservar en buen estado el reactor. Estas se evitan construyendo adecuadamente los soportes que rodean el cuerpo del reactor y balanceando bien el agitador (Platzer, 1973).

a. Material de construcción. Las emulsiones inversas de los polímeros de DADMAC y de acrilamida no son corrosivas. Los reactores de polimerización se construyen de acero inoxidable (Platzer, 1973).

Existen 70 tipos de acero inoxidable, que disponen de distintas aleaciones de cromo, níquel, carbono, niobio, cobre, molibdeno, selenio, tántalo y titanio, todos en distintas proporciones. El acero inoxidable es un material resistente al calor y a la corrosión, no contamina y es fácil de moldear en distintas formas. Las aleaciones de acero inoxidable tipo 304 y 316 son aptas para estos reactores. El tipo 316 contiene más molibdeno, lo cual brinda mejores propiedades anticorrosivas que el 304 (Perry y Green, 1997).

4. Limpieza interior. La limpieza se puede hacer manual o mecánicamente. En reactores muy grandes hacerlo manualmente resulta difícil y caro, pero es adecuado en reactores pequeños. La limpieza manual en un reactor grande se debe hacer con los operarios adentro del reactor, que deben utilizar andamios y cepillos raspadores. Otra forma es llenando el reactor con agua y en lugar de andamios se utilizan balsas; se va vaciando para alcanzar toda la superficie (Platzer, 1973).

La limpieza mecánica puede ser automatizada, utilizando bombas con agua presurizada (5,066–30,397 KPa). El agua a presión seguramente desprenderá las adherencias sólidas. Sin embargo, el reactor debe estar diseñado de tal forma que no haya espacios muertos a los que no se pueda llegar. Las paredes se deben secar bien con aire, para que no intervenga el agua en la polimerización (Platzer, 1973).

Otro método de limpieza es utilizar solventes calientes que son capaces de disolver las adherencias sólidas. Sin embargo, estos compuestos no deben afectar los sellos mecánicos del agitador. El solvente se aplica en forma de

chorro, la presión utilizada es mucho menor que en el caso de agua presurizada. Luego se debe recuperar el solvente por medio de equipos de filtración, destilación o precipitación. Representa un problema cuando el solvente es inflamable (Platzer, 1973).

5. Medidas de seguridad. Se deben tomar precauciones para evitar desastres durante el proceso de polimerización. Es importante tener en cuenta que el sistema de enfriamiento y agitación puedan fallar debido a apagones eléctricos. El aumento de temperatura debido a rompimiento de la tubería o chaqueta del sistema de enfriamiento puede causar que el reactor explote. Cuando hay emergencias de paro total del proceso, se deben agregar químicos adecuados (inhibidores) que den finalización inmediata a la reacción. Los siguientes son algunos de los inhibidores utilizados: benzoquinona, xiloquinona, nitrobenzeno, dinitrobenzeno, trifenil metil y difenil picrilhidrazil. Estos inhibidores también se utilizan para fabricar polímeros de baja masa molecular ya que controlan el aumento de la misma. Si el sistema de enfriamiento falla se tiene como auxiliar un sistema de liberación de presión, lo que libera los gases calientes generados en la polimerización (Platzer, 1973).

III. JUSTIFICACIÓN

Los polímeros son compuestos de alta masa molecular que poseen muchas aplicaciones, dentro de las cuales se pueden mencionar: plásticos, fibras, elastómeros, recubrimientos, adhesivos y floculantes.

El tema de la contaminación del medio ambiente es un problema de actualidad, en el que varias industrias están invirtiendo trabajo y esfuerzo para conservar los valiosos recursos naturales, como lo es el agua. Es importante hacer conciencia de esta problemática para evitar un desequilibrio biológico y lograr un desarrollo industrial sostenible. Es ahora cuando se debe cuidar el agua, de lo contrario, en un futuro cercano ésta será escasa, cara y muy contaminada. Otro factor protagónico que influye en la contaminación es el crecimiento poblacional e industrial, debido a esto es importante que se reutilice el agua al máximo en los procesos de manufactura.

Para resolver este problema se utilizan tratamientos fisicoquímicos de agua, en los que están involucrados ciertos polímeros solubles en agua que actúan como agentes floculantes. La producción de dichos polímeros aún no está desarrollada en Guatemala, por lo que el tema presenta un nuevo campo para la industria local. Las importaciones continuas demuestran que existe un mercado potencial que demanda estos polímeros. La industria de la fabricación de estos productos ayudará a la generación de fuentes de trabajo, disminución del costo del producto, a evitar la fuga de divisas debido a las importaciones que afectan el déficit nacional, al avance tecnológico e industrial del país y principalmente a la conservación de los recursos naturales como el agua.

Para la realización del proyecto se tiene el apoyo de la empresa Sales, Ácidos y Solventes, S.A., la cual posee experiencia en la venta y uso de agentes floculantes para el tratamiento de aguas residuales. La selección del proceso de polimerización y el diseño del reactor con su equipo auxiliar se hará de acuerdo a las necesidades de la empresa.

IV. OBJETIVOS

A. Objetivos generales

1. Evaluar y seleccionar un proceso para la fabricación de polímeros de cloruro de dialil dimetil amonio y de acrilamida, solubles en agua, utilizados como floculantes en la clarificación de aguas residuales.

2. Desarrollar el diseño de un reactor por lotes cerrado con agitación continua y su equipo auxiliar para la elaboración de dichos polímeros.

B. Objetivos específicos

1. Estudiar distintas técnicas de polimerización para la elaboración de polímeros solubles en agua utilizados como floculantes en la clarificación de aguas residuales.

2. Especificar las características y dimensiones del equipo a utilizar para llevar a cabo el proceso.

3. Estimar el costo del producto según los insumos necesarios para su elaboración.

V. PROBLEMA A RESOLVER

En Guatemala no se encuentran industrias que fabriquen polímeros de cloruro de dialil dimetil amonio ni de acrilamida, los cuales son utilizados como floculantes en la clarificación de aguas residuales. Por esta razón, las empresas que poseen plantas de tratamiento de aguas residuales se ven en la necesidad de comprar estos productos en el extranjero. Las importaciones traen consigo el problema, de fuga de divisas del país. Con la construcción y operación de una planta que produzca y comercialice polímeros de este tipo, se disminuyen las importaciones, se facilita el acceso y la disponibilidad de producto en el mercado y se reduce el tiempo de entrega.

VI. METODOLOGÍA

Etapa 1: Selección de un proceso de polimerización

1. Investigar documentos que presenten detalladamente los métodos de polimerización.
2. Establecer un método para llevar a cabo la polimerización.

Etapa 2: Diseño del reactor y caracterización del equipo auxiliar

3. Investigar documentos que describan las características de los reactores utilizados en polimerización.
4. Establecer las condiciones óptimas de operación.
5. Establecer la producción anual de polímeros.
6. Calcular el balance de masa y energía del proceso.
7. Determinar el tipo y cantidad de equipo auxiliar para el proceso
8. Dimensionar el reactor y el equipo auxiliar.
9. Determinar el material de construcción del reactor.
10. Realizar diagrama de flujo del proceso.
11. Localizar proveedores de materia prima locales y extranjeros.

Etapa 3: Factibilidad económica

12. Cotizar precios de materia prima, y costo del reactor y equipo auxiliar.
13. Realizar un análisis de inversión total
14. Realizar un análisis de costo de producción
 - a. Costo directos de fabricación
 - b. Costos indirectos de fabricación
 - c. Gastos de administración
15. Calcular la depreciación del equipo

16. Calcular el punto de equilibrio

- a. Análisis de ventas y precio unitario

17. Calcular la rentabilidad del proyecto mediante indicadores como:

- a. Valor actual neto
- b. Tasa interna de retorno
- c. Tiempo de recuperación del capital

La recolección en interpretación de datos en todo el proyecto, se realizará por medio de búsqueda bibliográfica, en Internet y a través de entrevistas personales con fabricantes locales de polímeros, aún cuando éstos, no sean del tipo floculantes.

Las recomendaciones del proyecto estarán orientadas hacia el desarrollo del diseño adecuado de un reactor por lotes, donde se fabriquen polímeros utilizados como floculantes para el tratamiento de aguas residuales. Además, se desea establecer el método de polimerización adecuado y las condiciones de reacción óptimas, para la fabricación de estos polímeros.

VII. RESULTADOS

A. Comparación de los métodos de polimerización, *solución* y *emulsión*

Se comparó teóricamente los métodos de polimerización *en solución* y *en emulsión agua en aceite*, ya que son los más utilizados para fabricar polímeros de cloruro de dialil dimetil amonio y de acrilamida. Ambos métodos son empleados a nivel industrial, sin embargo, poseen ventajas y desventajas, las cuales se muestran en la siguiente tabla.

Se analizó y comparó las ventajas y desventajas de ambos métodos y se estableció como el método de polimerización de este proyecto, el de *emulsión agua en aceite*. Este método se utilizará tanto para describir la polimerización del cloruro de dialil dimetil amonio como la de acrilamida. Las principales razones por las cuales se escogió el método de emulsión, son las siguientes: la viscosidad de la emulsión es controlable a pesar de la alta masa molecular del polímero, lo que hace del método un proceso apto a nivel industrial, la relación entre la velocidad de reacción y el crecimiento de la masa molecular directamente proporcional y la reducida distribución de masas moleculares. La viscosidad es una variable muy importante en el momento de escoger el método de polimerización, ya que de ésta dependerá el sistema de agitación dentro del reactor. Además, si la viscosidad es demasiado alta, la agitación se vuelve imposible, el motor del agitador se puede sobrecalentar o el agitador en sí se puede romper o doblar. Este trabajo está enfocado en la fabricación de polímeros de alta masa molecular, por lo que es importante que el aumento de la misma sea directamente proporcional a la velocidad de la reacción de polimerización.

Tabla No. 1. Ventajas y desventajas de los métodos *en emulsión agua en aceite* y *en solución*.

Método	Ventajas	Desventajas
Solución	<ol style="list-style-type: none"> 1. Brinda polímeros de alta masa molecular (Butler, 1966) 2. Control disponible del calor de polimerización por medio del solvente, el cual absorbe calor de la reacción (Billmeyer, 1971). 3. Control eficiente de agitación a bajas viscosidades. 4. Fácil dilución de los productos poliméricos en solución, en el tratamiento de aguas residuales (www.tramfloc.com). 5. Menor cantidad de ingredientes que en emulsión, es más barato (Sanner, 1983). 	<ol style="list-style-type: none"> 1. No es útil para polímeros secos, porque es difícil y caro remover el solvente (Billmeyer, 1971). 2. Cuidadosa selección del solvente para evitar transferencia de cadena, que implica terminación de la polimerización (Billmeyer, 1971). 3. Difícil control de la viscosidad de la solución, debido al aumento de la masa molecular (Schrei, 2005). 4. Limitada agitación y transferencia de calor debido a la formación de gel. (Schrei, 2005). 5. Aumento del costo del transporte si el producto se maneja como solución y no en polvo (www.tramfloc.com). 6. Relación inversamente proporcional entre la velocidad de reacción y la masa molecular (Vanderhoff, 1966). 7. Puede brindar polímeros cruzados, no útiles como floculantes en el tratamiento de aguas residuales (Morgan, 1976)
Emulsión	<ol style="list-style-type: none"> 1. Brinda polímeros de alta masa molecular (McCaffery, 1970). 2. Polimerización más rápida que en solución, operando ambos métodos a la misma temperatura (Flory, 1975). 3. Reducida distribución de masas moleculares (Billmeyer, 1971). 4. Control eficiente de la exotermia de la polimerización (McCaffery, 1970). 5. A pesar de la alta masa molecular, la viscosidad es controlable (Shalaby et al., 1991). 6. Alto porcentaje de conversión a bajas temperaturas (McCaffery, 1970). 7. Relación directamente proporcional entre la velocidad de reacción y la masa molecular (Vanderhoff, 1966). 8. Método apto para procesos industriales (escalamiento de datos) (Ravve, 1995.) 	<ol style="list-style-type: none"> 1. Contaminación con emulsificante o surfactante, provocando inestabilidad en el color del polímero (Billmeyer, 1971). 2. Algunas veces, se requiere lavado, secado y compactado del polímero . 3. Mayor cantidad de ingredientes que en solución, por lo tanto es más caro (Schrei, 2005). 4. Separación de las fases al cabo del tiempo, por lo que no son del todo estables (www.tramfloc.com). 5. Aumento del costo de transporte si se maneja como producto en emulsión (www.tramfloc.com).

B. Descripción de la polimerización *en emulsión* del cloruro de dialil dimetil amonio (DADMAC)

Se investigó procesos detallados, de polimerización *en emulsión* del monómero de DADMAC, en patentes ya vencidas, registradas en Estados Unidos. Estas patentes describen las condiciones de reacción de la polimerización, a nivel de laboratorio, sin embargo, brindan una idea clara del comportamiento del proceso a nivel industrial (Internet No. 9).

1. Patente No. 3,968,037:

Polimerización en emulsión de monómeros catiónicos¹. En la patente se utilizan monómeros catiónicos que se homopolimerizan y/o copolimerizan. El método de polimerización utilizado es el de *emulsión agua en aceite*. En estas emulsiones, la fase continua es el aceite y la fase dispersa es el medio acuoso. También, incluye el uso de agentes ramificadores que brindan floculantes muy efectivos y agentes de drenado de lodos, para el tratamiento de aguas residuales.

Los polímeros catiónicos (o polielectrolitos) producidos por este proceso, utilizan el monómero catiónico de **cloruro de dialil dimetil amonio (DADMAC)** y como comonómeros, los agentes ramificadores, de amonio de trialil y amonio de tetraalil. La patente menciona que la polimerización *en solución y en suspensión*, brinda polímeros cruzados ("crosslinking"), los cuales no son útiles como floculantes o agentes de drenado de lodos en el tratamiento de aguas residuales. El uso del método de *emulsión agua en aceite* permite producir polímeros de fácil dilución en agua. Además del monómero de DADMAC, también se utilizan otros monómeros como: cloruro de acriloxietil trimetil amonio, cloruro de metacriloxietil trimetil amonio, cloruro de vinil bencil trimetil amonio, entre otros.

Para lograr la dispersión en la fase oleosa, de la fase acuosa que incluye al monómero y a los agentes ramificadores, se utiliza un surfactante. También se necesita de iniciadores que generen radicales libres, para comenzar la polimerización. La temperatura se debe mantener en un valor adecuado hasta

¹ Emulsion polymerization of cationic monomers (Morgan, 1976)

que finalice la polimerización. El producto obtenido es una emulsión blanca o semi transparente. La concentración adecuada de polímero que se debe utilizar en el tratamiento de aguas es entre 0.1 ppm hasta 20 ppm. Al agregar el producto polimérico, se formarán rápidamente flóculos, que atraparán las partículas suspendidas en las aguas residuales. Se observará que estos flóculos se asentarán en el fondo en un corto tiempo, clarificando el agua.

Mediante pruebas se demostró que al utilizar el método de polimerización *en solución* se formaron productos de gel, que se caracterizan por ser casi insolubles en agua. El método más apto para producir polímeros utilizados como floculantes, es el de *emulsión agua en aceite*.

La fase continua (o fase oleosa) del sistema de *emulsión*, puede ser cualquier líquido orgánico insoluble en agua, que no interfiera con el sistema de radicales libres.

La concentración de monómero catiónico presente en la fase acuosa es de 5 a 95% (% masa) de la fase acuosa. La concentración del agente ramificador, si se utiliza, es de 0.005 a 5% (% moles) del monómero catiónico. El surfactante se utiliza en una concentración de 0.5 a 10% (%masa) de la masa total de la mezcla. La fase continua de la emulsión inversa, formada por el líquido insoluble en agua debe ser 25 a 90% (%masa) del total de la emulsión. La concentración de iniciador debe ser 10^{-7} a 10^{-1} mol por mol de monómero catiónico.

Se escogió el siguiente ejemplo de la patente como el proceso a seguir para la polimerización *en emulsión agua en aceite* del monómero de DADMAC. Este ejemplo muestra el proceso a nivel de laboratorio.

a. Ejemplo de la polimerización en emulsión del DADMAC. En un balón de tres bocas, equipado con agitador, termómetro, condensador, tubo de purga, manta de calentamiento y un regulador automático de temperatura, se añade 321.5 g de **aceite mineral**, 138,5 g de una solución acuosa al 72% de **DADMAC** y 40 g de una solución al 20% de **triolato de polioxietilen-20-sorbitan (Tween 85®)**. Se agita la mezcla entre 60 y 70 r.p.m. con un agitador de paletas y se calienta la mezcla a 50°C. Luego se purga la mezcla con **nitrógeno** gaseoso,

por una hora, para asegurar que todo el aire dentro del recipiente sea evacuado. No debe haber oxígeno presente en la reacción para evitar que interfiera con los iniciadores. Luego, se añade al recipiente de reacción, durante una hora, 1.4 mL de una solución (0.351 g por 100mL de solución) **sulfato ferroso de amonio** (agente reductor), seguido se añade 0.336 mL de **t-butil peroxi pivalato** (75% en **espíritus minerales**). La solución se agita de nuevo por 20 horas a 50°C, bajo una atmósfera de nitrógeno. El producto obtenido posee una viscosidad de 5,000 cP.

C. Descripción de la polimerización *en emulsión* de la acrilamida

1. Patente No. 4,077,930:

Emulsiones de polímeros y copolímeros de cloruro de dialquil dialil amonio². Los polímeros producidos por el método de emulsión son utilizados como floculantes en el tratamiento de aguas residuales, agentes de drenado de lodos y como agentes de retención.

Particularmente, el invento se refiere a las *emulsiones agua en aceite* de aceite en agua. Se utilizan uno o más monómeros que se emulsifican en la fase oleosa con la ayuda de un surfactante. Estas emulsiones se invierten solas al disolverlas en agua, no se tienen que usar otros reactivos, como el cloruro de sodio para invertirlas. Los polímeros producidos por este invento posee varias ventajas: altas masas moleculares sin incremento incontrolable de la viscosidad como ocurriría en polimerizaciones *en solución*, estabilidad de la emulsión como producto (hasta 6 meses de tiempo de vida), fácil dilución en las aguas residuales, alto porcentaje de conversión de monómero en polímero.

El proceso de este invento se puede utilizar para polimerizar o copolimerizar monómeros insaturados. Los siguientes monómeros son útiles para el proceso: **acrilamida**, metacrilamida, ácido acrílico, ácido metacrílico, sulfonato estireno de sodio, ácido sulfónico 2-acrilamido-2-metil propano, compuestos cuaternarios de amonio como: **cloruro de dialil dimetil amonio**, cloruro de dialil

² Self-inverting emulsions of dialkil diallyl ammonium chloride polymers and copolymers (Lim et al., 1978)

dietil amonio, cloruro de 3-metacriloil-2-hidroxi propil trimetil amonio, pirrolidona de vinil, entre otros.

Cuando se utilizan soluciones acuosas de los monómeros, la fase acuosa puede contener 20 a 80% (% masa) del monómero. La concentración del agente emulsificante (o surfactante) es 20% (masa) basado en la fase oleosa. El emulsificante puede ser cualquier líquido que disperse el agua. La patente describe una gran variedad de surfactante aniónicos, catiónicos y no iónicos. La fase oleosa puede ser un líquido inerte hidrofóbico como: benceno, xileno, tolueno, aceite mineral, espíritus minerales, kerosen o naftas. La cantidad de fase oleosa en relación al agua puede variar desde 5:1 hasta 1:10, siendo el rango preferido 1:1 a 1:10.

Los iniciadores generadores de radicales libres son: t-butil peroxi pivalato, peróxido de benzoílo, peróxido de laurilo, persulfato de potasio y persulfato de amonio. Estos iniciadores actúan como agentes oxidantes en un sistema redox. La concentración del iniciador está en el rango de 0.0000001 a 1% (mol) de monómero. Como agente reductor para completar el sistema redox, se utiliza sulfato ferroso de amonio.

La reacción se debe mantener entre 0°C y 100°C. El rango preferido es 25°C a 75°C. La reacción se realiza a presión atmosférica. El producto obtenido es un latex polimérico.

Se escogió el siguiente ejemplo de la patente como proceso de polimerización de la acrilamida.

a. Ejemplo de polimerización en emulsión de la acrilamida. Se disuelven 50 g de **acrilamida** en 75 g de **agua destilada** y se transfieren a un embudo. Luego se combinan en un recipiente de reacción, de 500 mL de capacidad, 87.5 g de **aceite mineral**, 31.4 g de **Tween 85®** y 6.1 g de **Span 85®**. El sistema se purga con **nitrógeno** por 1 hora, a 50°C. Se añaden a la mezcla una concentración de 3 ppm de **sulfato ferroso de amonio** y 6.5 moles de **t-butil peroxi pivalato** por mol de monómero. Se añade 1/6 de la solución de monómero al recipiente de reacción. El resto se añade en el intervalo de 1 hora, manteniendo

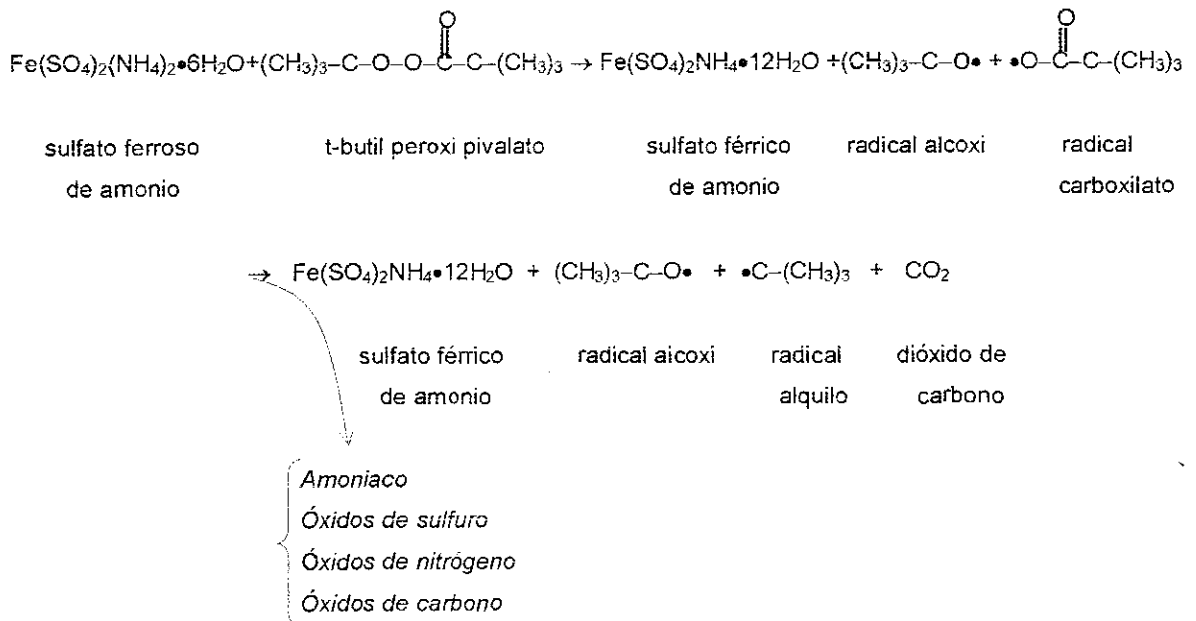
la temperatura entre 48 y 53°C. Luego se mantiene la reacción a 50°C durante 1 hora. El producto es homogéneo con viscosidad de Brookfield de 5,000 cP.

D. Reacciones dentro del reactor

El proyecto contempla dos polimerizaciones: la del monómero de DADMAC y la del monómero de acrilamida. Éstas son dos reacciones distintas que ocurren por separado, dando lugar a la formación de homopolímeros. Ambas reacciones son heterogéneas, irreversibles y exotérmicas. A continuación se muestran ambas reacciones presentadas de manera general y en la Pág. No. 85 del Apéndice³ se muestra el mecanismo completo de reacción.

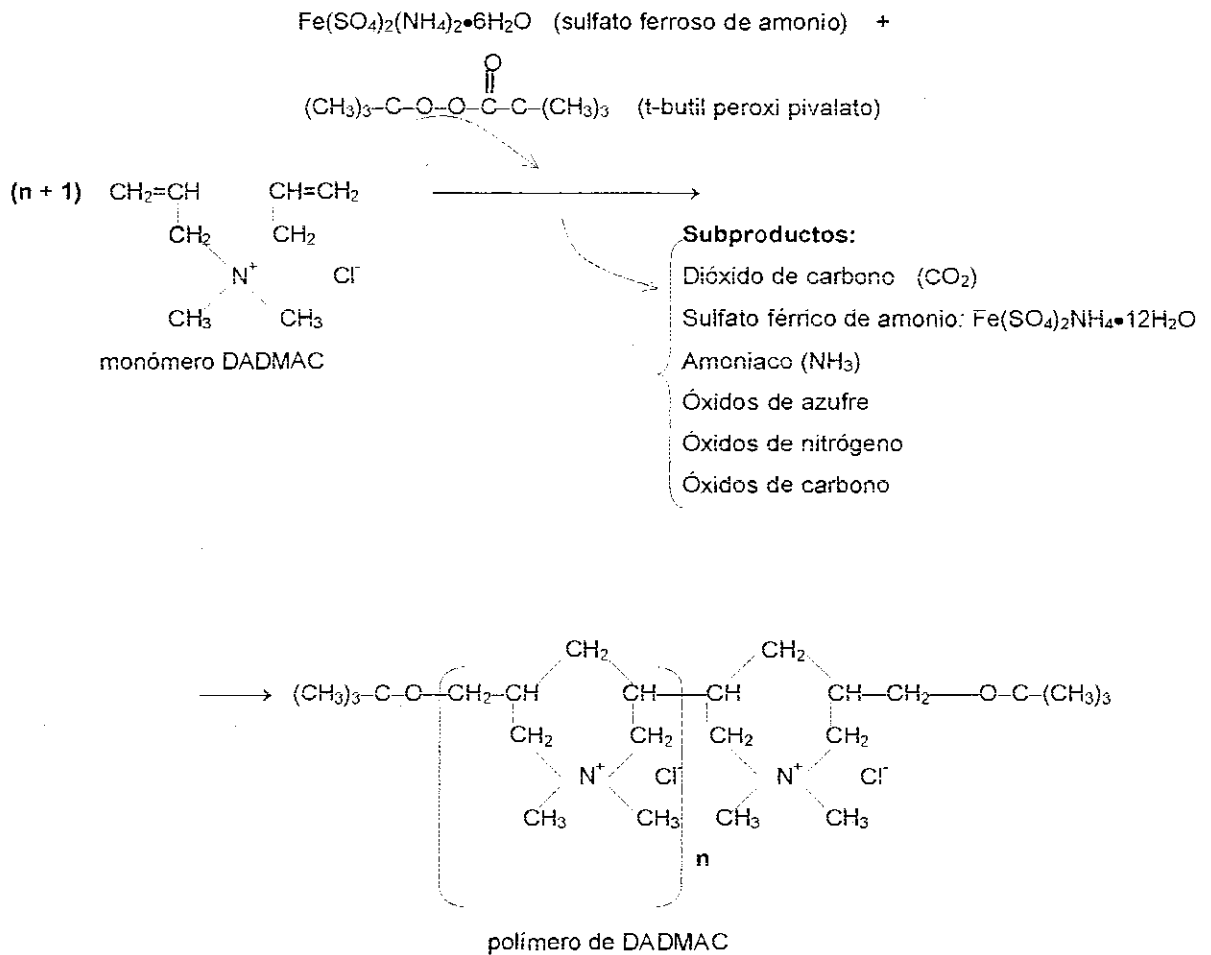
Se establece que la *masa molecular promedio* (M.M._{polímero}) de cada polímero, de DADMAC y de acrilamida, es 1,000,000 Kg/Kg mol. Esta masa molecular es apta para los polímeros utilizados como floculantes.

1. Reacción para producir radicales libres



³ NOTA: Es importante revisar el mecanismo de ambas reacciones, para comprender la polimerización.

2. Reacción general de la polimerización del DADMAC

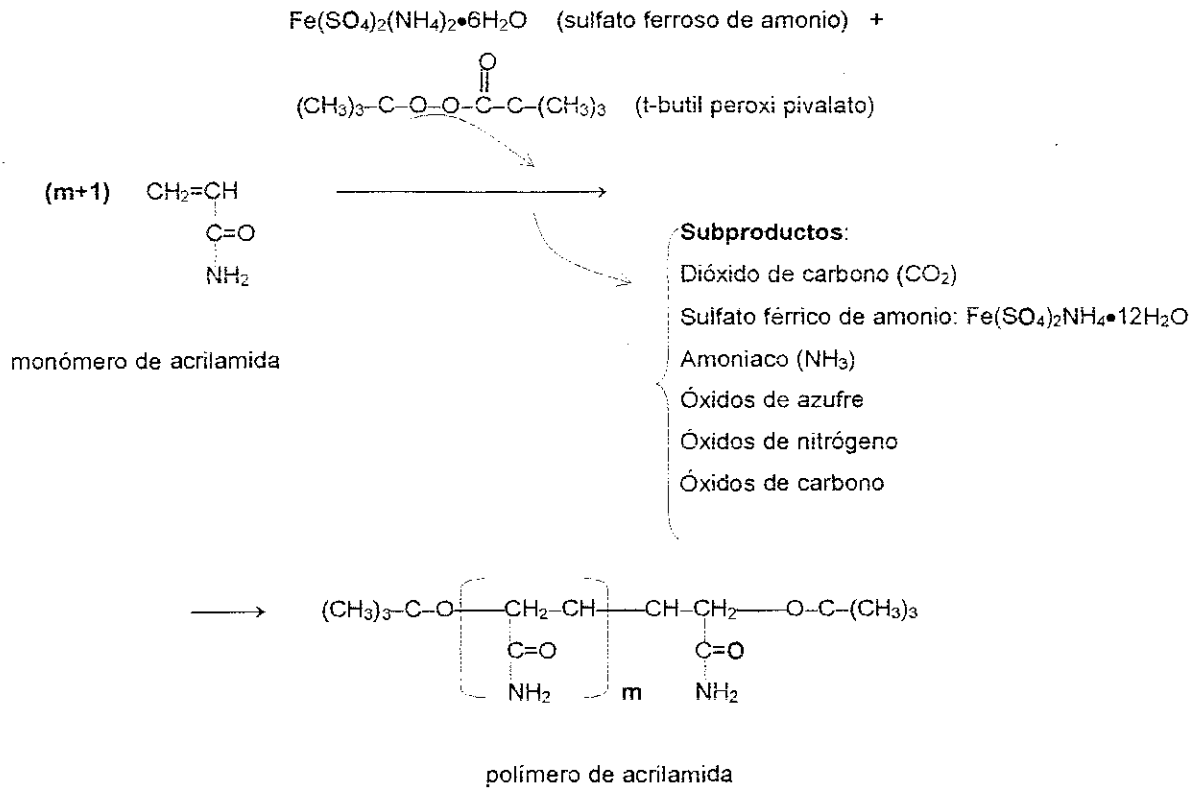


A partir de la masa molecular promedio (1,000,000 Kg/Kg mol), se calculó el número promedio de meros en el polímero de DADMAC, el cual es el siguiente (ver Pág. No. 79):

$$n + 1 = 6,185 \text{ meros}$$

Es importante hacer notar que el número de meros puede variar, ya que la masa molecular de las cadenas de polímero difiere. El polímero puede tener distinta terminación de cadena, ya que se producen dos distintos radicales libres a partir del t-butil peroxi pivalato. Dichas terminaciones no afectan las propiedades floculantes del polímero.

3. Reacción general de la polimerización de la acrilamida



A partir de la masa molecular promedio (1,000,000 Kg/Kg mol), se calculó el número promedio de meros en el polímero de acrilamida, el cual es el siguiente (ver Pág. No. 80):

$$m + 1 = 14,067 \text{ meros}$$

E. Balance de masa

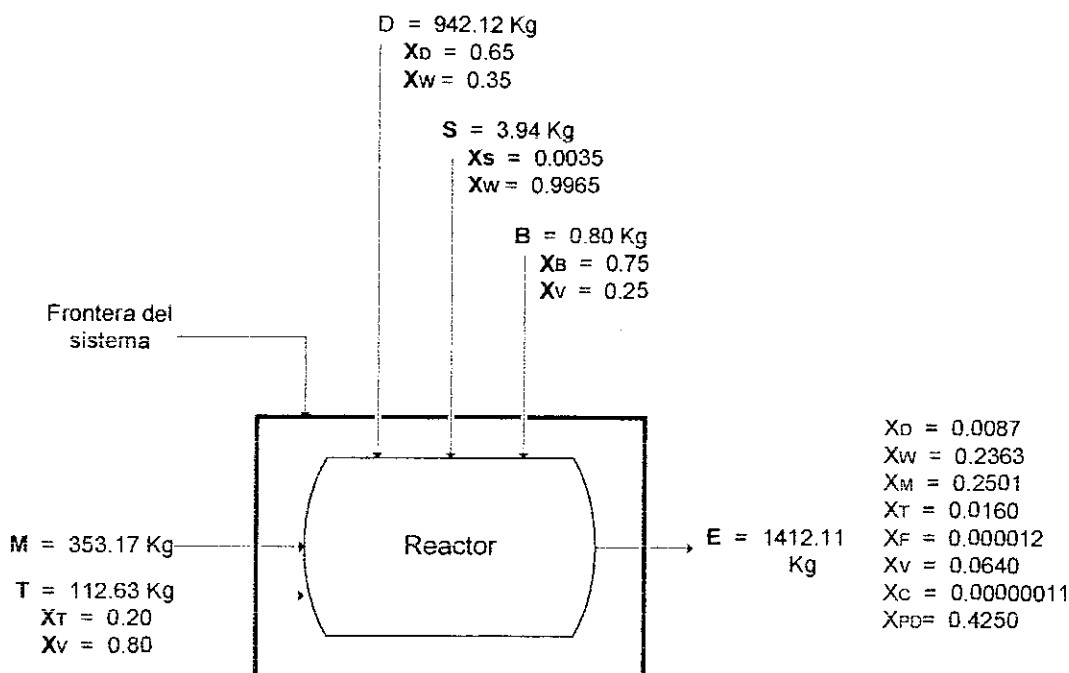
Se calculó el balance de masa de ambas polimerizaciones a partir de las cantidades de reactivos utilizadas en los ejemplos mostrados en las patentes, descritas anteriormente. El proceso de ambas polimerizaciones es semi lotes, ya que la adición de monómero o de iniciador se debe realizar en una hora.

Debido a que ambas polimerizaciones son muy exotérmicas, es importante que los ingredientes no se añadan todos juntos al mismo tiempo, porque podría ocurrir una explosión.

1. Balance de masa polimerización del DADMAC. Se utilizó la formulación del ejemplo de la Patente No. 3,968,037 (ver Pág. No. 40), para definir las cantidades involucradas en la producción del polímero de DADMAC. Mediante cálculos (ver Pág. No. 88) se escaló las cantidades adecuadas de reactivos, para llevar a cabo la polimerización en el reactor de 2,000 L. La conversión teórica del monómero de DADMAC en polímero es del 98%.

a. Tiempo de polimerización del DADMAC. Para realizar el balance de masa se tomó como base de cálculo el tiempo total que toma el proceso de polimerización del DADMAC, 22 horas. Este tiempo es acumulado, porque se necesita 1 hora para preparar la materia prima, 1 hora para inyectar nitrógeno gaseoso y desplazar el aire dentro del reactor y 20 horas para llevar a cabo la polimerización. El tiempo en ambas polimerizaciones, a nivel laboratorio y a nivel industrial, son los mismos siempre y cuando se mantengan las condiciones de reacción similares.

Figura No. 5. Diagrama del balance de masa de la polimerización de DADMAC



donde: D, S, B, M y T indican las corrientes de entrada, E es la corriente de salida y las X_i indican la fracción másica de cada corriente.

Nomenclatura:

D = solución de monómero de DADMAC

M = aceite mineral

W = agua

T = polioxietilen-20-sorbitan (Tween 85®)

S = solución de sulfato ferroso de amonio (Fe_{+2})

E = Emulsión polimérica

F = sulfato férrico de amonio (Fe^{+3})

C = dióxido de carbono

B = solución de t-butil peroxi pivalato (iniciador)

PD = polímero de DADMAC

Balance de masa general:

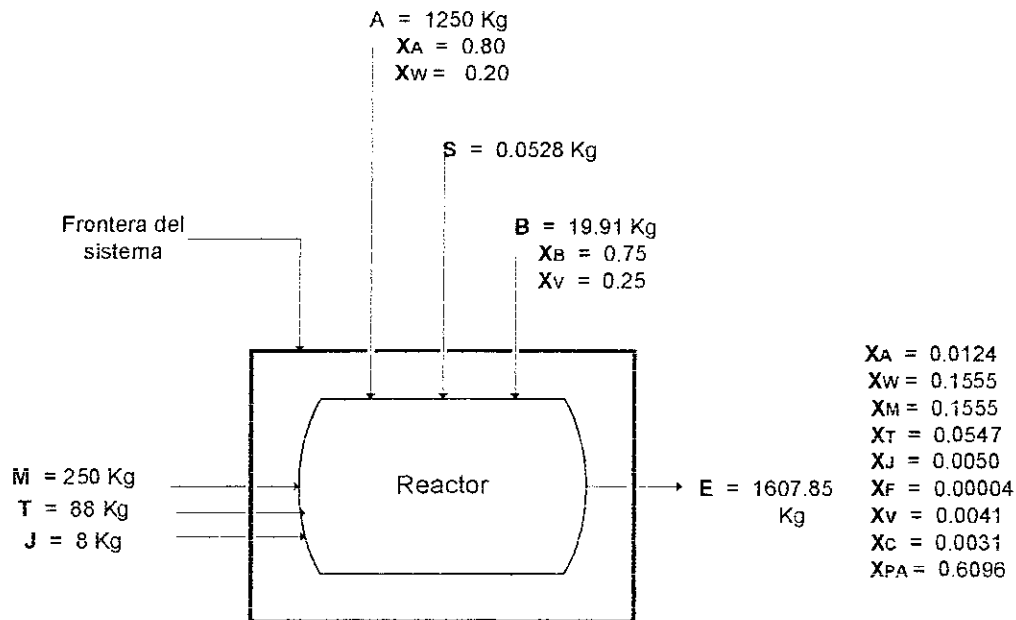
$$D + W + S + B + M + T = E$$

2. Balance de masa polimerización de acrilamida. Se utilizó la formulación del ejemplo de la Patente No. 4,077,930 (ver Pág. No 42), para definir las

cantidades involucradas en la producción del polímero de acrilamida. Los cálculos para determinar las cantidades se pueden ver en la Pág. No. 88 del Apéndice. La conversión del monómero de acrilamida en polímero es del 98%. Debido a que la acrilamida es un compuesto cancerígeno, el monómero residual, del 2%, representa un problema de contaminación de aguas residuales tratadas. Para resolver este inconveniente se realiza un post-tratamiento, el cual consiste en añadir más iniciadores (t-butil peroxi pivalato y sulfato ferroso de amonio) de 0.01 a 0.5% (% masa) de monómero, para lograr la polimerización completa de la acrilamida.

a. Tiempo de polimerización de la acrilamida. La base de cálculo es el tiempo total del proceso de polimerización de la acrilamida, 4 horas. Este tiempo es acumulado, ya que se necesita 1 hora para preparar la materia prima, 1 hora para inyectar nitrógeno gaseoso y 2 horas para llevar a cabo la polimerización. El tiempo de polimerización es el mismo siempre y cuando se mantengan las condiciones de reacción similares.

Figura No. 6. Diagrama del balance de masa de la polimerización de acrilamida



donde: A, S, B, M, T y J indican las corrientes de entrada, E es la corriente de salida y las X_i indican la fracción másica de cada corriente.

Nomenclatura:

A = solución de monómero de acrilamida

W = agua

S = solución de sulfato ferroso de amonio (Fe^{+2})

F = sulfato férrico de amonio (Fe^{+3})

B = solución de t-butil peroxi pivalato (iniciador)

V = varsol (o espíritus minerales)

M = aceite mineral

T = polioxietilen-20-sorbitan (Tween 85®)

J = trioleato de sorbitan (Span 85®)

E = emulsión polimérica

C = dióxido de carbono

PA = polímero de acrilamida

Balance de masa general:

$$A + W + S + B + M + T + J = E$$

F. Balance de energía

El balance de energía se realizó por medio de un balance de calor, entre el calor generado en la polimerización y el calor retirado por el agua de enfriamiento de la chaqueta del reactor:

$$Q_{\text{generado}} = Q_{\text{retirado}}$$

Figura No. 7. Diagrama del balance de energía

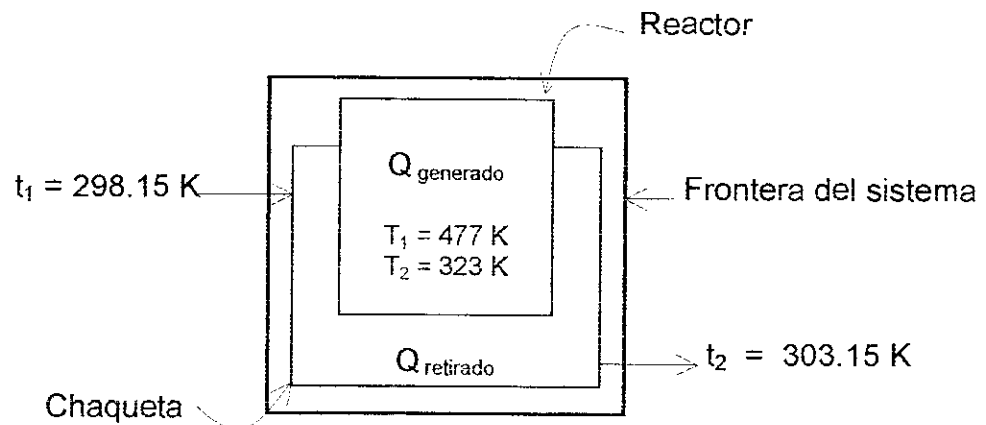


Tabla No. 2. Datos del balance de energía

Característica	Polimerización de	
	DADMAC	Acilamida
Temperatura generada en la polimerización, T_1	325.15 K (52 °C)	477.15 K (204 °C)
Temperatura constante durante la polimerización, T_2	323.15 K (50 °C)	
Agua de enfriamiento en la chaqueta:		
* Temperatura de entrada, t_1	298.15 K (25 °C)	
* Temperatura de salida, t_2	303.15 K (30°C)	
Calor generado	6.26 KJ/s	79.62 KJ/s
Calor retirado	6.26 KJ/s	79.62 KJ/s

G. Diseño del reactor

1. **Carcasa.** El volumen total requerido del reactor es 2 m^3 . La forma del cuerpo del reactor es cilíndrica y ambos extremos, llamados cabezas, son de forma elipsoidal. El reactor debe estar sostenido sobre 4 bases de concreto. En la siguiente tabla se dan las dimensiones de la carcasa del reactor.

Tabla No. 3. Dimensiones de la carcasa del reactor

Característica	Símbolo	
Diámetro interior del reactor	D	1.06 m
Diámetro exterior del reactor	D_e	1.0728 m
Altura del cilindro	h	1.91 m
Altura de cada cabeza	h_{cabeza}	0.26 m
Altura total del reactor	h_T	2.44 m
Volumen cilindro	V_{cilindro}	1.68 m^3
Volumen de ambas cabezas	V_{cabezas}	0.32 m^3
Volumen total del reactor	V_T	2 m^3
Material del reactor	--	Acero inoxidable 304
Grosor de la lámina del reactor	t	0.0064 m (¼ pulg)
Diámetro de la descarga	D_d	0.076 m (3 pulg)

El producto obtenido es una emulsión polimérica, que se descarga del reactor por medio de una válvula de bola, colocada en la parte inferior central del reactor. El orificio de descarga es de 0.076 m (3 pulg) de diámetro ⁴.

a. **Bomba para evacuar el producto del reactor.** Se debe utilizar una bomba de desplazamiento positivo, reciprocante, de doble diafragma. Este tipo de bomba es útil para productos viscosos como las emulsiones poliméricas de este proyecto. Estas bombas trabajan con flujo de aire comprimido, para realizar el movimiento de ambos diafragmas. La bomba se diseñó por medio de curvas de potencia⁵. Se requiere vaciar el reactor en un tiempo de 15 min y descargar el producto en un tanque de almacenamiento. La altura de la descarga en el tanque de almacenamiento está a 2 m de altura de la bomba. La siguiente tabla muestra las características y capacidades de la bomba.

Tabla No. 4. Características de la bomba de doble diafragma

Característica	
Marca	Wilden
Modelo	P200 Advanced
Material húmedo de construcción:	Polipropileno
* Rango de temperatura de trabajo	273.15 K – 352.15 K (0°C a 79°C)
Material de los diafragmas	Wil Flex® (termoplástico)
* Rango de temperatura de trabajo	268.75 K a 377.15 K (-4.4°C a 104.4°C)
Caudal requerido	0.0017 m ³ /s (27 gal/min)
Caudal máximo	0.0029 m ³ /s (46 gal/min)
Cabeza total requerida	2 m
Cabeza total máxima	9.63 m
Potencia	0.56 KW (³ / ₄ hp)
Presión de descarga	13.79 KPa (2 psi)
Presión de ingreso del aire	275.8 KPa (40 psi)
Consumo de aire	34 m ³ /h

⁴ Información proporcionada por Talleres Hernández, 13 ave. 4-27 zona 1.

⁵ Información proporcionada por Hidasa, 36 calle 0.41 zona 12.

2. **Sistema de enfriamiento.** Se eligió utilizar una chaqueta de enfriamiento en lugar de un serpentín, porque es de fácil construcción y no interviene al momento de limpiar interiormente el reactor. La siguiente tabla muestra las dimensiones y características de la chaqueta de enfriamiento.

Tabla No. 5. Dimensiones y características de la chaqueta de enfriamiento.

Característica	Símbolo	
Temperatura de entrada del agua	t_1	298.15 K (25 °C)
Temperatura de salida del agua	t_2	303.15 K (30 °C)
Flujo de agua máximo	q_a	0.003 m ³ /s (47 gal/min)
Diámetro	d_{ch}	1.12 m
Distancia del espacio entre chaqueta y reactor	e_e	0.03 m
Área de enfriamiento	A	8.36 m ²
Altura de la chaqueta	h_{ch}	1.91 m
Material de construcción	---	Acero inoxidable 304
Grosor de la lámina de la chaqueta ⁶	t_{ch}	0.003 m (1/8 pulg)

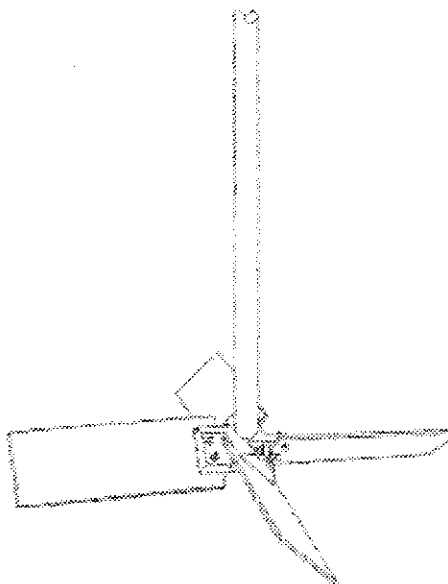
a. **Bomba para agua de enfriamiento.** El diámetro de la tubería de agua de enfriamiento es de 0.051 m (2 pulg). Se debe colocar un rotámetro en la tubería para poder regular el flujo de agua requerido en cada polimerización. Para recircular el agua de la chaqueta hacia la torre de enfriamiento se utiliza una bomba centrífuga con las siguientes características.

⁶ Información proporcionada por Talleres Hernández, 13 ave 4-27 zona I.

Tabla No. 6. Dimensiones y características de la bomba centrífuga ⁷

Características	
Marca	Gould Pumps
Modelo	3656/3756 S-Group 22F
Material de construcción	Hierro
Velocidad motor	1750 rpm
Tamaño (diámetro descarga x diámetro succión - diámetro impulsor)	1 x 2 - 7
Cabeza total requerida	3 m
Motor trifásico	0.37 KW (½ hp)

3. Agitación. Se escogió un agitador de turbina axial que puede operar con viscosidades de hasta 75,000 cP. La viscosidad de los polímeros de este trabajo es 5,000 cP (5 Pa s). El agitador tiene varias funciones: emulsificar dos líquidos inmiscibles, la fase oleosa y la fase acuosa; y permitir la transferencia de calor y de masa.

Figura No. 8. Agitador de turbina de aspa inclinada

(Perry y Green, 1997)

A este agitador se le conoce como *turbina de aspa inclinada*, proporciona un movimiento axial, un poco radial y otro poco tangencial. El material de

⁷ Información proporcionada por Hidasa, 36 calle 0-41 zona 12.

construcción, es acero inoxidable tipo 304. La velocidad rotacional es de 60 r.p.m. (6.28 rad/s), la cual se debe mantener constante, todo el tiempo que dure la polimerización y aún cuando se enfríe el polímero. La siguiente tabla muestra las dimensiones y características del agitador.

Tabla No. 7. Dimensiones y características del agitador del reactor

Característica	Símbolo	
Material del agitador	---	Acero inoxidable 304
Diámetro del impulsor	D_i	0.53 m
Número de aspas	N_a	4
Ancho de cada aspa	W	0.106 m
Inclinación de las aspas	θ_a	45 °
Grosor de lámina de cada aspa	t_a	0.127 m (½ pulg)
Largo de la varilla (eje) de agitación	L_v	1.91 m
Diámetro del eje ("shaft") de agitación	d_e	0.051 m (2 pulg)
Distancia del agitador al suelo del reactor	E	0.265 m
Velocidad rotacional	N	6.18 rad/s (60 r.p.m.)
Potencia total requerida del motor	P_{total}	14.9 KW (20 hp)

Se escogió que el grosor de la lámina del impulsor fuera más grande que el grosor de la pared del reactor, para evitar deformación de las aspas y desgaste al agitar. El grosor será de 0.127 m (½ pulg). El eje (varilla) del agitador debe ser una barra de acero inoxidable 304, el diámetro será de 0.051 m (2 pulg)⁸.

a. Motorreductor del agitador del reactor. El motorreductor a utilizar para el agitador es un motor eléctrico, trifásico y cerrado, marca Siti de 14.9 KW (20 hp). Como se mencionó anteriormente, el agitador debe girar a 6.28 rad/s (60 rev/min), sin embargo, el eje del motor brinda directamente 1,750 rev/min. Para ajustar la velocidad rotacional deseada se utiliza una caja reductora ajustada al motor, a esto en conjunto se le conoce como motorreductor. La relación de la caja

⁸ Información proporcionada por Talleres Hernández, 13 ave. 4-27 zona 1; y por Metco, S.A., Villa Nueva carretera a Amatitlán Km. 13.2 Villalobos.

reductora es de 30 a 1. Esto quiere decir que, mientras el eje del motor gira 30 veces, el eje de la caja reductora gira 1 vez ⁹.

El agitador debe tener un sello mecánico para evitar que el nitrógeno gaseoso se escape. Se escogió un sello mecánico tipo 9T marca John Crane de teflón ¹⁰ de 0.051 m (2 pulg) de diámetro.

4. Flujo de nitrógeno gaseoso. El nitrógeno se utiliza para desplazar el aire que hay dentro del reactor hacia la atmósfera. El nitrógeno gaseoso se alimentará a partir de tanques presurizados¹¹. El nitrógeno se inyecta al reactor por medio de un tubo con perforaciones alrededor, doblado en forma de anillo, colocado en la periferia inferior del reactor. Este tubo es de acero inoxidable 304. Los agujeros permiten la distribución de nitrógeno, por medio de burbujeo en la emulsión. La inyección de nitrógeno gaseoso debe realizarse en el lapso de una hora, solamente antes de iniciar la polimerización, según las patentes No. 3,968,037 y 4,077,930, mencionadas anteriormente. En la parte superior del reactor se debe colocar un tubo de venteo, para permitir la evacuación del aire y mantener el reactor a presión atmosférica. El nitrógeno gaseoso inyectado saldrá del reactor poco a poco por el tubo de venteo durante el resto de la polimerización.

⁹ Información proporcionada por ABB Control, Calzada Aguilar Bâtres 45-99 zona 12.

¹⁰ Información proporcionada por Agroinco, S.A. 5 calle 0-95 zona 9.

¹¹ El nitrógeno gaseoso se vende en Productos del Aire, S.A. Se compra la carga de nitrógeno gaseoso y se alquilan los tanques. La presión a la que está almacenado el nitrógeno dentro de los tanques es 2,200 psi.

Tabla No. 8. Dimensiones y características del sistema distribuidor de nitrógeno gaseoso al reactor

Característica	Símbolo	
Flujo de nitrógeno	m_N	0.000139 m ³ /s (500 L/h)
Diámetro nominal del tubo ¹²	d_N	0.0254 m (1 pulg)
Diámetro externo del tubo	d_{Ne}	0.0334 m
Diámetro interno del tubo	d_{Ni}	0.0266 m
Grosor del tubo	t_N	0.00338 m
Número de agujeros	N_p	30
Diámetro de cada agujero	d_a	0.002 m (0.20 cm)
Velocidad del N ₂ en cada agujero	V_i	0.25 m/s
Distancia de separación entre el anillo y la pared del reactor	x_N	0.02 m (2 cm)
Diámetro exterior del anillo	d	0.95 m
Diámetro nominal del tubo de venteo	d_v	0.0254 m (1 pulg)
2 codos acoplados al tubo de venteo para formar una "J" invertida	---	90 °

El tubo de alimentación de nitrógeno se debe colocar en la parte superior del reactor, para no interferir con el flujo de agua dentro de la chaqueta de enfriamiento.

Se debe colocar una válvula de cheque en la tubería de alimentación del nitrógeno, para evitar que la emulsión, dentro del reactor, regrese a los tanques presurizados.

5. Válvula de seguridad. Si por alguna razón, el sistema de enfriamiento falla, esta válvula se abre completamente con un aumento súbito de presión, evitando una explosión por la exotermia de la polimerización. La válvula se debe colocar en la parte superior del reactor.

¹² Tubo normalizado de acero inoxidable cédula 40.

Tabla No. 9. Dimensiones y características de la válvula de seguridad ¹³

Característica	
Marca	Helbert
Tipo	HNVR
Serie	420
Medida	0.013 m (½ pulg)
Material de construcción	Bronce
Sello y vástago	Acero inoxidable
Sello de seguridad	Plomo
Capacidad	689.48 Kpa (100 psi)
Descarga	0.086 Kg/s (680 lb/h)

6. Limpieza del reactor. Es necesario limpiar el reactor después de cada lote de distinta polimerización, o bien, al final del día. La limpieza se puede realizar con manguera y agua a presión. Se debe colocar una puerta en la parte superior del reactor, llamado "manhole" o "manway". El diámetro estándar de un "manhole" es de 0.61 m (24 pulg).

7. Tanques de alimentación de ingredientes. Se analizó ambos procesos de polimerización (ver ejemplos de las patentes No. 3,968,037 y 4,077,930) para determinar el número y capacidad de los tanques de proceso de los ingredientes. Algunos tanques requieren agitador y otros control del flujo hacia el reactor, o ambos. El control del flujo del ingrediente se debe realizar por medio de una válvula de bola y un rotámetro instalados en la tubería que va del tanque alimentador al reactor. La forma de los tanques es cilíndrica y en posición vertical. La siguiente tabla muestra la capacidad de los tanques.

¹³ Información proporcionada por AP&P, S. A. 16 ave. 7-18 zona 12.

Tabla No. 10. Capacidad y dimensiones de tanques auxiliares

Líquido	Capacidad (m ³)	Diámetro (m)	Altura (m)	Tipo de control	Flujo (m ³ /s)
Tanques de alimentación					
Solución de monómero (DADMAC o acrilamida)	1.14	1.07	1.62	A, R	3.17E ⁻⁴
Solución de t-butil peroxi pivalato	0.05	0.35	0.52	NA, R	1.97E ⁻⁷
Aceite mineral	0.50	0.75	1.12	NA, NR	4.2 E ⁻⁴
Tween 85® y Span 85®	0.20	0.55	0.83	A, NR	4.2 E ⁻⁴
Tanque de almacenamiento					
Producto	2	1.16	1.83	NA, NR	1.7 E ⁻³

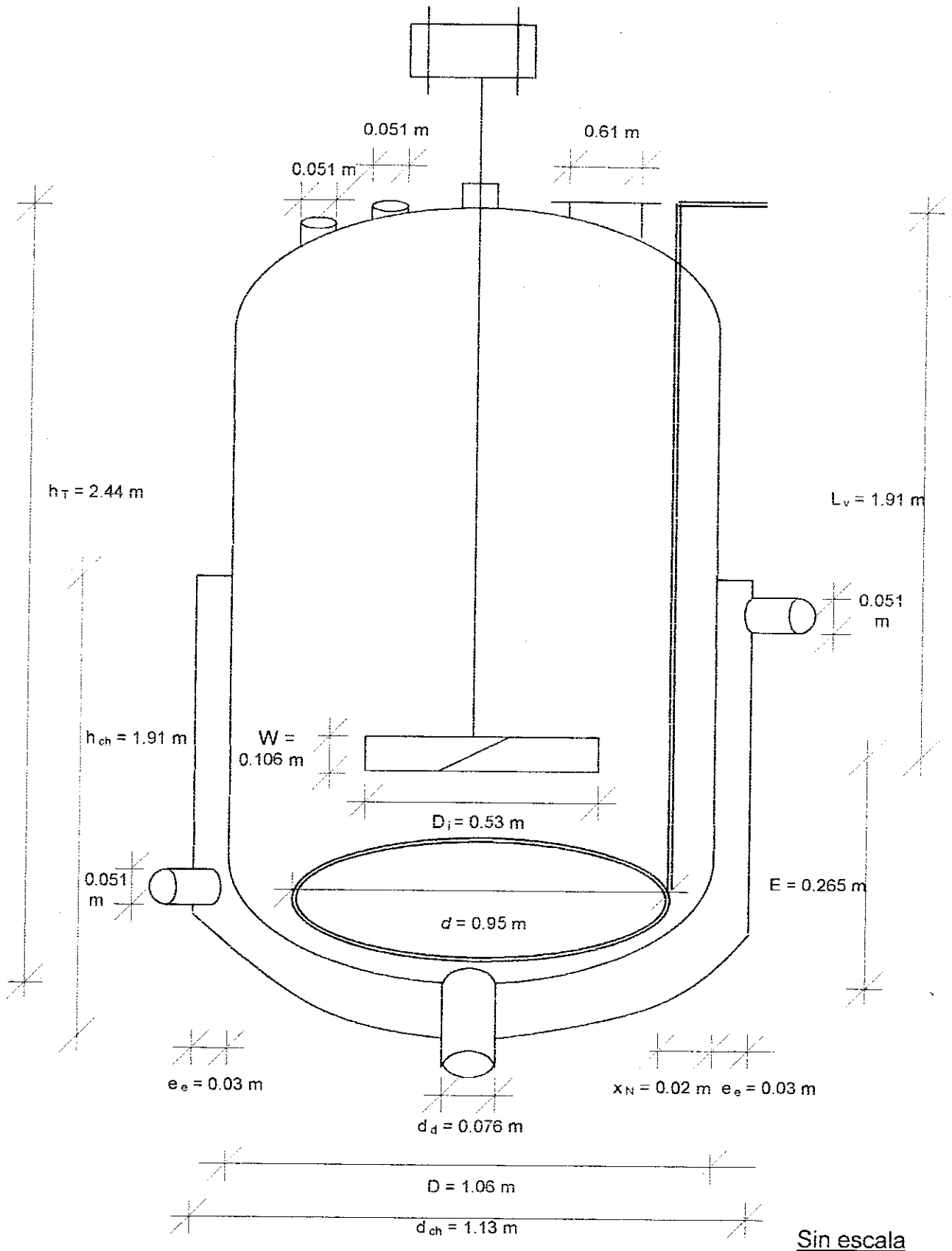
* A: agitación

*** R: regulación de flujo durante polimerización

** NA: no agitación

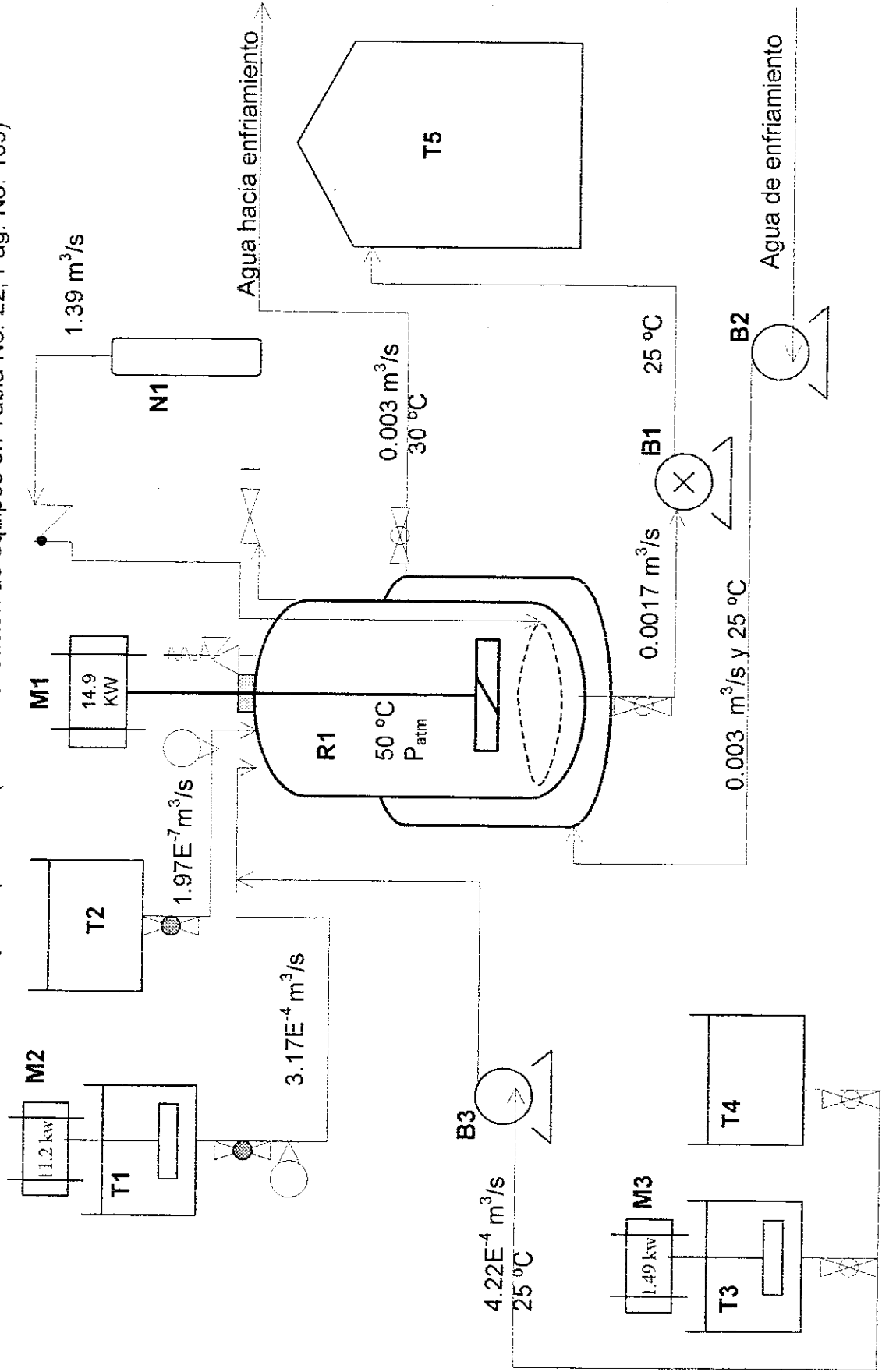
**** NR: no regulación de flujo durante polimerización

Figura No. 9. Diagrama de las dimensiones del reactor



Sin escala

Figura No. 10. Diagrama de flujo del proceso (ver identificación de equipos en Tabla No. 22, Pág. No. 109)



H. Análisis económico

Tabla No. 11. Flujo de fondos del proyecto

	año 0	año 1	año 2	año 3	año 4	año 5	año 6	año 7	año 8	año 9	año 10
Utilidad antes de intereses											
e impuestos (Q)		564,102.17	1,546,727.41	2,312,155.03	3,024,394.85	3,595,224.52	4,488,676.19	5,181,779.81	5,923,375.00	6,716,856.15	7,565,855.28
Impuestos (Q)		112,087.79	420,279.31	661,568.88	886,851.07	1,068,834.66	1,351,434.24	1,572,601.47	1,809,557.70	2,063,445.98	2,335,493.93
Utilidad después de impuestos y antes de intereses (Q)		452,014.37	1,126,448.10	1,650,586.15	2,137,543.78	2,526,389.86	3,137,241.95	3,609,178.34	4,113,817.30	4,653,410.17	5,230,361.35
Depreciación (Q)		24,473.47	24,473.47	24,473.47	24,473.47	24,473.47	24,473.47	24,473.47	24,473.47	24,473.47	24,473.47
Flujo de fondos (Q) =	-3,375,477.22	476,487.84	1,150,921.57	1,675,059.62	2,162,017.25	2,550,863.32	3,161,715.41	3,633,651.81	4,138,290.77	4,677,883.63	5,254,834.82

Tabla No. 12. Rentabilidad del proyecto

	año 0	año 1	año 2	año 3	año 4	año 5	año 6	año 7	año 8	año 9	año 10
Flujo de fondos del proyecto (Q)	-3,375,477.22	476,487.84	1,150,921.57	1,675,059.62	2,162,017.25	2,550,863.32	3,161,715.41	3,633,651.81	4,138,290.77	4,677,883.63	5,254,834.82
VAN = Q	10,276,866.84	Se utilizó una tasa de descuento del 12% en el VAN									
TIR =	45 %										

Tabla No. 13. Flujo de caja

	año 0	año 1	año 2	año 3	año 4	año 5	año 6	año 7	año 8	año 9	año 10
Caja Inicial (Q)		20,000.00	97,784.83	350,003.39	626,360.00	889,674.24	1,141,834.56	1,404,846.96	1,639,795.76	1,879,383.52	2,258,564.15
Utilidad antes de intereses		564,102.17	1,546,727.41	2,312,155.03	3,024,394.85	3,595,224.52	4,488,676.19	5,181,779.81	5,923,375.00	6,716,856.15	7,565,855.28
Interés del préstamo (Q)		202,528.63	190,987.71	178,061.87	163,584.94	147,370.77	129,210.90	108,871.85	86,092.11	60,578.80	32,003.89
Utilidad después de intereses y antes de impuestos (Q)		361,573.53	1,355,739.70	2,134,093.16	2,860,809.92	3,447,853.75	4,359,465.29	5,072,907.97	5,837,282.89	6,656,277.35	7,533,851.38
Impuestos (Q)		112,087.79	420,279.31	661,568.88	886,851.07	1,068,834.66	1,351,434.24	1,572,601.47	1,809,557.70	2,053,445.98	2,335,493.93
Utilidad después de intereses		249,485.74	935,460.39	1,472,524.28	1,973,958.84	2,379,019.09	3,008,031.05	3,500,306.50	4,027,725.19	4,592,831.37	5,198,357.46
e Impuestos (Q)		24,473.47	24,473.47	24,473.47	24,473.47	24,473.47	24,473.47	24,473.47	24,473.47	24,473.47	24,473.47
Depreciación (Q)											
Inversión de capital (Q)	-1,687,738.61										
Flujo de fondos (Q) =	-1,687,738.61	273,959.20	959,933.86	1,496,997.75	1,998,432.31	2,403,492.56	3,032,504.51	3,524,779.96	4,052,198.66	4,617,304.84	5,222,830.92
Amortización del capital (Q)		96,174.37	107,715.30	120,641.13	135,118.07	151,332.24	169,492.11	189,831.16	212,610.90	238,124.21	266,699.11
Disponibles para dividendos (Q)		177,784.83	852,218.56	1,376,356.61	1,863,314.24	2,252,160.32	2,853,012.41	3,334,948.80	3,859,587.76	4,379,180.63	4,956,131.81
Dividendos (Q)		100,000.00	600,000.00	1,100,000.00	1,600,000.00	2,000,000.00	2,600,000.00	3,100,000.00	3,600,000.00	4,000,000.00	4,500,000.00
Saldo anual de caja (Q)		77,784.83	252,218.56	276,356.61	263,314.24	252,160.32	263,012.41	234,948.80	239,587.76	379,180.63	456,131.81
Caja final (Q)		97,784.83	350,003.39	626,360.00	889,674.24	1,141,834.56	1,404,846.96	1,639,795.76	1,879,383.52	2,258,564.15	2,714,695.96

Tabla No. 14. Rentabilidad del inversionista

	año 0	año 1	año 2	año 3	año 4	año 5	año 6	año 7	año 8	año 9	año 10
Disponibles para dividendos		177,784.83	852,218.56	1,376,356.61	1,863,314.24	2,252,160.32	2,853,012.41	3,334,948.80	3,859,587.76	4,379,180.63	4,956,131.81
Dividendos	-1,687,738.61	100,000.00	600,000.00	1,100,000.00	1,600,000.00	2,000,000.00	2,600,000.00	3,100,000.00	3,600,000.00	4,000,000.00	4,500,000.00
VAN = Q 8,879,327.11											
TIR = 53 %											

Se utilizó una tasa de descuento del 12% en el VAN

Tabla No. 15. Tiempo de recuperación de la inversión (TR)

	año 0	año 1	año 2	año 3	año 4	año 5	año 6	año 7	año 8	año 9	año 10
Flujo de fondos acumulativo (Q)	-1,687,738.61	-1,413,779.41	-453,845.55	1,043,152.20	3,041,584.51	5,445,077.07	8,477,581.58	12,002,361.54	16,054,560.20	20,671,865.04	25,894,695.96
TR = 2 años, 1 mes y 6 días											

VIII. DISCUSIÓN

Para fabricar los polímeros de cloruro de dialil dimetil amonio (DADMAC) y de acrilamida se escogió el método de polimerización en *emulsión agua en aceite* y no el método *en solución*. Como se recordará la *emulsión agua en aceite* implica que la fase acuosa esté dispersa como minúsculas gotas en una fase oleosa como el aceite mineral. La *emulsión aguas en aceite*, según la literatura investigada, brinda mejores resultados para la fabricación de polímeros utilizados como floculantes en el tratamiento de aguas residuales. Ambos métodos brindan polímeros de alta masa molecular, lo cual es la clave para un buen floculante. Sin embargo, el método en emulsión permite obtener un reducido rango de masas moleculares. Esto se refiere a que en la emulsión existirán cadenas poliméricas de distinto tamaño, unas de mayor masa molecular que otras. Además, se tiene mejor control de la viscosidad aunque la masa molecular del polímero vaya en aumento. El control de la viscosidad es un punto crítico en el proceso, ya que si esta crece demasiado ocurren problemas con la agitación y se dificulta la transferencia de calor.

La *emulsión agua en aceite* también ofrece menores tiempos de polimerización, que para fines económicos resulta eficiente emplear pocas horas en el proceso y obtener buena calidad, que tardar días y obtener la misma calidad. En la *emulsión agua en aceite* existe una relación directamente proporcional entre el crecimiento de la masa molecular y la velocidad de reacción. Esta ventaja ofrece un producto de alta masa molecular en menor tiempo del que se emplearía en *solución*. También, se alcanza una alta conversión del monómero a pesar de la baja temperatura de operación. En este proyecto se polimeriza a 323.15 K (50 °C). Una de las principales desventajas por las que no se utilizó el método *en solución*, es que se produce gel debido al aumento de la viscosidad. Con un gel se dificulta la transferencia de calor y la solubilidad en agua se torna casi imposible.

Sin embargo, el método *en emulsión agua en aceite* también posee su lado negativo, como son: mayores costos de materia prima, difícil aislamiento del

polímero en sí debido a la presencia de dos fases y emulsificantes. Otros inconvenientes que pueden presentarse son la separación de las fases de la emulsión polimérica al cabo del tiempo y altos costos de transporte del producto. El primero, ocurre aproximadamente al cabo de 8 meses, sin embargo, una agitación moderada antes de aplicar el productos a las aguas residuales permite de nuevo la mezcla de las fases. El segundo inconveniente se refiere a que el consumidor paga mayor costo al transportar el polímero, agua y otros ingredientes, que si sólo se trasportara sólo el polímero.

Se investigó varias patentes vencidas, de Estados Unidos para escoger el proceso adecuado para fabricar los polímeros de DADMAC y de acrilamida. Se escogió la patente No. 3,968,037 para fabricar el polímero de DADMAC y la patente No. 4,077,930 para el polímero de acrilamida. En ambos procesos existen parámetros de concentración de ingredientes que se deben cumplir para obtener un polímero eficaz como floculante. Para producir polímeros de alta masa molecular se debe utilizar baja concentración de iniciador. Los iniciadores forman radicales libres al accionarse por el ion hierro (Fe^{+2}). Si existieran demasiados radicales libres, es decir, mucha concentración de iniciador, habría mayor probabilidad de choque entre las mismas moléculas de radicales libres, que entre los radicales libres y las moléculas de monómero. Debido a este fenómeno, se requiere tener una alta concentración de monómero y una baja de iniciador. Estos procesos requieren bajas temperaturas de polimerización, 323.15 K (50 °C) para obtener polímero de alta masa molecular. Si sube demasiado la temperatura aumenta la energía cinética de las moléculas, formándose cadenas poliméricas cortas de baja masa molecular. Ambas polimerizaciones son exotérmicas, mayor es la de acrilamida. Por esta razón se debe adicionar el monómero, o en otro caso los iniciadores, en el lapso de una hora. Esto permite que el calor producido se retire de manera controlada, por medio de agua como refrigerante. En ningún momento se deben adicionar todos los ingredientes al mismo tiempo porque podría ocurrir una explosión.

Para llevar a cabo este proceso no se requiere calentamiento ya que ambas polimerizaciones son exotérmicas. El iniciador, t-butil peroxi pivalato debe ser

activado por el ion hierro (Fe^{+2}) presente en el compuesto de sulfato ferroso de amonio. Esta reacción es del tipo redox. Se comienza a producir calor cuando los radicales libres del iniciador t-butil peroxi pivalato reaccionan con las moléculas de monómero.

Los polímeros utilizados como floculantes pueden poseer un amplio rango de masas moleculares, desde 5,000 hasta 20,000,000 Kg/Kg mol. Se estableció como la masa molecular promedio de cada polímero, 1,000,000 Kg/Kg mol, que asegurará un buen desempeño como floculante en el tratamiento de aguas. Una masa molecular mayor puede presentar dificultades al incrementarse la viscosidad de la emulsión, en la operación del reactor. En ambas polimerizaciones se producen varios subproductos, como sulfato férrico de amonio, dióxido de carbono, óxidos de nitrógeno, óxidos de azufre y amoniaco. Estos subproductos no afectan las propiedades de la emulsión polimérica ya que se producen en cantidades muy pequeñas.

En el balance de masa se muestran las cantidades necesarias de ingredientes, para producir un polímero de DADMAC al 42.5% y uno de acrilamida al 61%. Estas son las concentraciones a las que se encuentran estos polímeros en emulsión en el mercado. Esto muestra que los resultados obtenidos en aguas tratadas implican menor cantidad de polímero de DADMAC y mayor de polímero de acrilamida. La conversión teórica de los monómeros de DADMAC y de acrilamida es del 98%. El monómero residual queda emulsificado en el producto. Para el caso de la acrilamida, que es cancerígena, es necesario realizar un post tratamiento, que consiste en adicionar más cantidad de iniciadores para permitir la total polimerización. A pesar de la toxicidad de la acrilamida como monómero, el polímero se ha venido utilizando desde hace mucho tiempo en tratamientos de agua potable.

Para fabricar estos polímeros se diseñó un reactor de forma cilíndrica, con ambas cabezas elipsoidales, dispuesto de forma vertical. Las cabezas son la tapadera y el fondo del reactor. El reactor tendrá dos entradas para añadir los ingredientes, en una se adicionará la solución de monómero junto con la solución de activador de sulfato ferroso de amonio, en esta misma entrarán la fase oleosa

de aceite mineral y los emulsificantes. La otra entrada será para el iniciador t-butil peroxi pivalato. Se dispuso de esta manera las entradas, para evitar el contacto, dentro de las tuberías, entre el iniciador t-butil y el monómero con el sulfato ferrosos de amonio. De esta forma se evita que comience la polimerización antes de entrar al reactor. En la polimerización de acrilamida, la solución de esta debe agregarse en el lapso de una hora, para evitar una reacción violenta, En el caso de la polimerización de DADMAC, el iniciador de t-butil peroxi pivalato debe ser el que se adicione en una hora. Los tanques de alimentación de la solución de monómero y de iniciador se deben colocar arriba del reactor, para aprovechar la fuerza de gravedad en su adición. El control del flujo del fluido se realizará con válvulas de globo y rotámetros. Los tanques de alimentación de los ingredientes de aceite mineral y emulsificantes, estarán colocados el suelo y se necesitará una bomba centrífuga para añadirlos al reactor.

Antes de comenzar la polimerización, se debe evacuar el aire contenido dentro del reactor con nitrógeno gaseoso, el cual brinda un ambiente inerte dentro del reactor. El oxígeno presente en el aire es un oxidante que puede intervenir en el sistema redox de iniciación de la polimerización. La inyección de nitrógeno se debe realizar en el lapso de una hora antes de iniciar la polimerización. El nitrógeno gaseoso se introducirá al reactor por medio de un sistema distribuidor de gas, en forma de un anillo perforado. Este anillo construido de un tubo de acero inoxidable, de 0.0254 m (1 pulg) de diámetro, tendrá perforaciones para permitir el burbujeo del gas inerte en la emulsión. El aire se evacuará a través de un tubo de venteo de diámetro 0.0254 m (1 pulg). Al cumplirse la hora se detiene la alimentación de nitrógeno al reactor. El nitrógeno se escapará del reactor poco a poco a través del tubo de venteo, durante el tiempo que tarde la polimerización. No podrá ingresar de nuevo aire ya que la presión dentro del reactor se igualará a la presión atmosférica.

El reactor estará equipado con un agitador de turbina de aspa inclinada. Esta forma permite mantener la mezcla emulsificada durante la reacción sin romper las cadenas de polímero. Se optó por diseñar este tipo de agitador ya que la inclinación del aspa evita cortar el polímero y además puede operar en

condiciones de viscosidad de hasta 75,000 cP (la viscosidad de estos polímeros es de 5,000 cP). El agitador se introducirá al reactor por la parte superior. Esta disposición es adecuada para reactores pequeños como éste de 2 m³. Cuando los reactores son demasiado grandes, se acostumbra que el agitador entre por la parte de abajo, para evitar que la varilla de agitación se rompa debido al esfuerzo. Se debe mantener una agitación constante de 60 r.p.m. durante toda la polimerización. En el caso de polimerización del DADMAC se debe agitar durante 22 horas, mientras que para la acrilamida sólo 4 horas. La agitación facilita la transferencia de calor en la emulsión y evita puntos muertos de reacción entre moléculas. La potencia del motor del agitador es 14.9 KW (20 hp), pero se necesita una caja reductora para obtener 60 r.p.m de velocidad en el agitador. Esta caja debe tener una relación de 30 a 1, es decir, que mientras el eje del motor gira 30 veces, el eje de la caja reductora girará sólo 1 vez.

Como material de construcción del reactor y del agitador, se utilizó acero inoxidable 304. Este material es usual en el diseño de reactores de polimerización, además se utiliza el tipo 304 y no el 316, ya que estas emulsiones poliméricas no son corrosivas.

El reactor debe estar equipado con un sistema de enfriamiento. Para esto se diseñó una chaqueta construida de acero inoxidable 304. Se optó por diseñar una chaqueta y no un serpentín interno. Con la chaqueta se cubre el área de enfriamiento necesaria en el reactor, además es de fácil construcción y no interviene en el proceso dentro del reactor. Un serpentín interno dificulta la limpieza del reactor. El refrigerante es agua enfriada en una torre de enfriamiento. El caudal de agua de enfriamiento, 0.003 m³/s (47 gal/min), se determinó a partir del calor generado por la polimerización de acrilamida, que es la más exotérmica. El sistema de enfriamiento debe mantener una temperatura constante dentro del reactor de 323.15 K (50 °C) durante toda la polimerización, en ambas polimerizaciones. Este tipo de polimerizaciones se realiza a baja temperatura, para lograr obtener polímeros de alta masa molecular. Ya que la temperatura de operación es baja, no se producirá vapor de agua, sólo gases en pequeñas cantidades como dióxido de carbono y amoníaco. El tamaño de la chaqueta se

diseñó a partir del calor producido por la polimerización de acrilamida, que es mayor que el producido en la polimerización de DADMAC. La polimerización de acrilamida puede alcanzar 477.15 K (204 °C), mientras que la de DADMAC alcanza 325.15 K (52 °C). Si el sistema de enfriamiento trabaja adecuadamente, estas temperaturas no se alcanzarán.

Ambas polimerizaciones, de DADMAC y de acrilamida, se llevarán a cabo a presión atmosférica. El reactor tendrá un venteo, tubo de 0.0254 m (1 pulg) de diámetro, que permitirá el escape de los gases producidos al medio ambiente.

Para vaciar el producto del reactor se utilizará una bomba de doble diafragma. Este tipo de bomba reciprocante es útil para manejar soluciones viscosas, los diafragmas permiten que el fluido se maneje con suavidad, que para efectos de los polímeros es muy importante no romper sus cadenas. El material de la bomba es polipropileno y el de los diafragmas es un termoplástico llamado Wil-Flex®. Los materiales de construcción de la bomba resultan adecuados para las emulsiones poliméricas de DADMAC y de acrilamida, las cuales no son corrosivas ni abrasivas. Se optó por una bomba de plástico y no una de acero inoxidable, para reducir el costo del equipo.

Para efectos de seguridad, se colocará una válvula de seguridad en el reactor. Esta se abre completamente al ocurrir un aumento súbito de presión dentro del reactor, permitiendo la salida de los gases calientes a la atmósfera. En caso de fallar el sistema de enfriamiento, se generan gases elevándose la presión dentro del reactor.

El reactor debe limpiarse al cambiar de distinta polimerización. Se puede dejar sin limpiar, sólo si el siguiente lote es de la misma polimerización. Para limpiarlo, se diseñó una pequeña puerta (conocida como "manhole") en la parte superior del reactor. Esta puerta es de 0.61 m (24 pulg) de diámetro, que es una medida estándar para que entre una persona de tamaño promedio. La limpieza se puede realizar con agua a presión con una manguera.

El análisis económico se realizó para determinar la rentabilidad del proyecto y la rentabilidad para el inversionista, se estimó para un período de 10 años. Los resultados muestran una TIR (tasa interna de retorno) del proyecto de 45% y de

53% del inversionista y un VAN (valor actual neto) de Q10,276,866.84 y Q8,879,327.11, respectivamente. Estos valores muestran que el proyecto es rentable y factible económicamente para llevarlo a cabo comercialmente. El inversionista recupera el capital invertido en 2 años, 1 mes y 6 días.

Se calculó el capital de trabajo para los primeros 6 meses de producción, empleando el valor del costo total de fabricación utilizado el primer año. Este capital de trabajo se utiliza para cubrir cualquier gasto de fabricación, administrativo o imprevisto que se presente mientras aún no hay utilidades.

Se determinó que la mitad del valor de la inversión inicial sea aportado por el inversionista y la otra mitad se haga un préstamo a un banco.

Los mayores costos de fabricación de estos polímeros son los de materia prima, ya que se utilizan reactivos muy específicos que no se encuentran en Guatemala.

IX. CONCLUSIONES

1. El método de polimerización de *emulsión agua en aceite*, presenta mejores ventajas que el método de *solución*. Permite mejores condiciones de operación y brinda productos eficaces como floculantes para el tratamiento de aguas residuales.
2. Para producir polímeros de alta masa molecular (1,000,000 Kg/Kg mol) se debe utilizar baja concentración de iniciador: de 0.0000001 a 1% (% mol por mol de monómero) y alta concentración de monómero en solución acuosa: de 5 a 95% (% masa); además es necesario mantener una temperatura baja y constante durante la polimerización, 323.15K (50 °C). El crecimiento de la masa molecular del polímero está determinado principalmente por la concentración de iniciador utilizada.
3. La masa molecular promedio de ambos polímeros, de DADMAC y acrilamida, es 1,000,000 Kg/Kg mol, para asegurar un buen desempeño como floculante en el tratamiento de aguas residuales.
4. Las *emulsiones agua en aceite* disponibles en el mercado poseen una concentración del 40% (% masa) de polímero de DADMAC y del 60% (% masa) de polímero de acrilamida.
5. No se requiere una fuente de calor para iniciar las polimerizaciones de DADMAC y de acrilamida, ya que ambas reacciones son exotérmicas. Se requiere enfriamiento con agua, a través de una chaqueta, para mantener una temperatura de operación constante de 323.15 K (50 °C) dentro del reactor.
6. Las emulsiones poliméricas no son corrosivas ni abrasivas, por lo que el material del reactor y del agitador es acero inoxidable tipo 304.

7. El análisis económico demuestra que el proyecto es rentable y que la inversión se recupera en 2 años, 1 mes y 6 días. La tasa interna de retorno del proyecto es 45% y del inversionista es 53%, mientras que el valor actual neto correspondiente es Q 10,276,866.84 y Q 8,879,327.11.

X. RECOMENDACIONES

1. Utilizar agua desmineralizada como ingrediente para evitar que los iones en solución intervengan con el sistema redox de iniciación de la polimerización.
2. Colocar una segunda bomba centrífuga en la línea de agua de enfriamiento, para prevenir sobrecalentamiento en el reactor durante la polimerización, en caso de que falle la bomba centrífuga principal. El costo de esta segunda bomba no está contemplado en el costo del equipo.
3. Es necesario realizar pruebas de presión hidrostática al reactor, al menos cada mes, para verificar el funcionamiento adecuado de la válvula de seguridad.
4. Al terminar la polimerización es necesario enfriar el producto dentro del reactor, antes de trasladarlo al tanque de almacenamiento. Para lograr el enfriamiento se debe continuar con la agitación y el flujo de agua de enfriamiento en el reactor.

XI. BIBLIOGRAFÍA

1. Bartholomew, C. H. y W. C. Hecker. *Catalytic reactor design*. Revista Chemical Engineering. E.E.U.U. Junio (1994).
2. Billmeyer, F. W. *Textbook of polymer science*. 2ª ed. Wiley-Interscience. New York, E.E.U.U. (1971), 598 pp.
3. Brandrup, J. Y E. H. Immergut. *Polymer handbook*. 2ª ed. John Wiley & Sons. New York, E.E.U.U. (1975).
4. Butler, G. B. *Water soluble quaternary ammonium polymers*. Patente No. 3,288,770. Gainesville, Florida. Noviembre 29 (1966).
5. Butler, G. B. y H. Pledger. *Method of enhancing polymerization of dialkil diallyl ammonium compounds to produce high molecular polymers*. Patente No. 4,742,134. Gainesville, Florida. Mayo 3 (1988).
6. Clarke, L. *Manual for process engineering calculation*. McGraw-Hill. New York, E.E.U.U. (1962). 492 pp.
7. Cusack, R. W. *Choosing the right reactor*. Revista Chemical Engineering. E.E.U.U. Diciembre (1999).
8. Dietsche, W. *Mix or match: choose the best mixers every time*. Revista Chemical Engineering. E.E.U.U. Agosto (1998).
9. Dickey, D. S. y R. R. Hemrajani. *Recipes for fluid mixing*. Revista Chemical Engineering. E.E.U.U. Marzo (1992).

10. Flory, P. J. *Principles of polymer chemistry*. Cornell University Press. Ithaca, E.E.U.U. (1975). 672 pp.
11. Himmelblau, D. M. *Principios básicos y cálculos en ingeniería química*. 6ª ed. Prentice Hall. México (1997). 728 pp.
12. Bischoff, K. B. *Chemical Reaction Engineering*. American Chemical Society. Washington, D. C. (1972). 685 pp.
13. Krisher, A. S. *Raw water treatment in the CPI*. Revista Chemical Engineering. E.E.U.U. Agosto 28 (1978).
14. Lim, S. K., Bloomquist, A. E. y R. J. Schaper. *Self-inverting emulsions of dialkyl diallyl ammonium chloride polymers and copolymers*. Patente No. 4,077,930. Pittsburg, Pennsylvania. Marzo 7 (1978).
15. McCabe, W. L., Smith, J. C. y P. Harriot. *Operaciones unitarias en ingeniería química*. 4ª ed. McGraw-Hill. España (1991). 1,112 pp.
16. McCaffery, E. M. *Laboratory preparation for macromolecular chemistry*. McGraw-Hill. New York (1970). 40 pp.
17. Morgan, J. E. *Emulsion polymerization of cationic monomers*. Patente No. 3,968,037. Pittsburgh, Pennsylvania. Julio 6 (1976).
18. Nagata, S. *Mixing: Principles and applications*. John Wiley & Sons. New York (1975). 458 pp.
19. Perry, R. H. y D. W. Green. *Perry's chemical engineers' handbook*. 7ª ed. McGraw-Hill. New York (1997).

20. Pethrick, R. A. *Polymer Yearbook*. Harwood academic publisher. New York (1991). 456 pp.
21. Platzner, N. J. *Polymerization kinetics and technology*. American Chemical Society. Washington (1973). 288 pp.
22. Ravve, A. *Principles of polymer chemistry*. Plenum Press. New York (1995). 496 pp.
23. Rohsenow, W. M. y J. P. Hartnett. *Handbook of heat transfer*. McGraw-Hill. New York (1973).
24. Sanner, J. W. *Aqueous phase polymerization of water miscible monomers*. Patente No. 4,376,850. Midland, Michigan. Marzo 15 (1983).
25. Shalaby, W. S., McCormick, C. L. y G. B. Butler. *Water-soluble polymers: synthesis, solution properties and applications*. American Chemical Society. Washington, D. C. (1991). 523 pp.
26. Theil, M. H. *Elementary polymer chemistry*. Departamento de ingeniería química textil y de ciencia. © Copyright Michael H. (1999). 318 pp.
27. Vanderhoff, J. W. y R. M. Wiley. *Water-in-oil emulsion polymerization process for polymerizing water-soluble monomers*. Patente No. 3,284,393. Midland, Michigan. Noviembre 8 (1966).
28. Wade, Jr. L. G. *Química orgánica*. 2ª ed. Prentice Hall Hispanoamericana, S.A. México (1993). 1312 pp.

Bibliografía de Internet

1. <http://www.cationchem.com/e-product.htm>
2. http://www.el.erdc.usace.army.mil/zebra/zmis/zmishelp3/zm_control_guide_veligon.htm
3. <http://www.epa.gov/chemrtk/dialdime/c15208tp.pdf>
4. http://www.hazmap.nlm.nih.gov/cgi-bin/hazmap_generic?tbl=TblAgents&id=57
5. <http://www.nsc.org/ehc/chemical/Acrylami.htm>
6. <http://www.p2pays.org/ref/10/09949.htm>
7. <http://www.tramfloc.com/tf27t.html>
8. <http://www.shinetownchem.com/productsInt.htm>
9. www.uspto.gov
10. www.cibasc.com
11. www.twilight.com.mx/BG/visc/BF/Brookfield.htm

Entrevistas personales

1. Cano Mynor, . *Poliquímicos, S. A.* 25 ave. 7-44 zona 4 Mixco Col. Bosques de San Nicolás.
2. Hernández, R., Daniel G.. *Talleres Hernández, mecánica industrial.* 13 ave. 4-27 zona 1 Ciudad Guatemala. Enero-Abril (2005).
3. Portillo, F. *Hidasa.* 36 calle 0-41 zona 12. Abril (2005).
4. Schrei, Erick. *Clariant Guatemala.* Calzada Roosevelt Km. 15.5 zona 7 Mixco, Guatemala. Enero-Abril (2005).

Otras fuentes de información

1. *ABB Control,* Calzada Aguilar Bártres 45-99 zona 12.
2. *Agroinco, S. A.* 5ª calle 0-95 zona 9.
3. *AP&P, S.A. Coporación.* 16 ave. 7-18 zona 12.
4. *Distribuidora técnica , S. A.* Calzada Aguilar Bártres 17-58 zona 11.
5. *Orión Representaciones Int., S. A.* 5ª calle 3-21 zona 9.
6. *Productos del Aire, S. A.* 41 calle 6-27 zona 8.
7. *Tipic, S. A.* Avenida Petapa 53-01 zona 12.

XII. APÉNDICE

A. Cálculo de la fórmula molecular de los polímeros

1. **Fórmula molecular polímero de DADMAC.** Como se mencionó anteriormente, se establece que la *masa molecular promedio* ($M.M_{polímero}$) de este polímero es 1,000,000 Kg/Kg mol. Cada mero posee una masa molecular ($M.M_{mero}$) de 161.67 Kg/Kg mol, y cada terminación ($M.M_{terminación}$) de 73.11 Kg/Kg mol, asumiendo que ambas terminaciones del polímero serán $(CH_3)_3-C-O-$.

$$M.M_{polímero} = (M.M_{mero} \times e) + M.M_{terminaciones}$$

donde, e = número de meros

$$\begin{aligned} 1,000,000 \text{ Kg/Kg mol} &= 161.67 \text{ Kg/Kg mol} \times n + 2 \times (73.11 \text{ Kg/Kg mol}) \\ 1,000,000 &= 161.67 \times n + 146.23 \text{ despejando } n... \\ e &= 6,184.5 \text{ meros} \end{aligned}$$

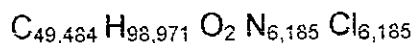
Número de átomos de carbono:

$$\begin{array}{l} \text{Átomos carbono mero} = 6,184.5 \text{ meros} \times (16 \text{ átomos de C} / 1 \text{ mero}) \\ \quad \quad \quad = 49,476 \text{ átomos C} \\ \text{Átomos carbono terminación} = 8 \text{ átomos C} \end{array} \left. \vphantom{\begin{array}{l} \text{Átomos carbono mero} \\ \text{Átomos carbono terminación} \end{array}} \right\} \begin{array}{l} \text{Átomos carbono totales} = 49,484 \\ \text{átomos C} \end{array}$$

Esta operación se repite para calcular el número de átomos de hidrógeno, nitrógeno, cloro y oxígeno. Los resultados son:

$$\begin{array}{ll} \text{Átomos hidrógeno} = 98,971 \text{ átomos H} & \text{Átomos cloro} = 6,185 \text{ átomos Cl} \\ \text{Átomos nitrógeno} = 6,185 \text{ átomos N} & \text{Átomos oxígeno} = 2 \text{ átomos O} \end{array}$$

Por lo tanto, la fórmula molecular del polímero de DADMAC es:



2. **Fórmula molecular polímero de acrilamida.** Se establece que la *masa molecular promedio* ($M.M_{polímero}$) es 1,000,000 Kg/Kg mol. Cada mero tiene una

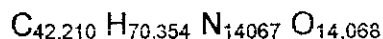
masa molecular ($M.M_{\text{mero}}$) de 71.077 Kg/Kg mol, y cada terminación ($M.M_{\text{terminación}}$) de 73.11 Kg/Kg mol, asumiendo que ambas terminaciones del polímero serán $(\text{CH}_3)_3\text{C}-\text{O}-$.

$$M.M_{\text{polimero}} = (M.M_{\text{mero}} \times f) + M.M_{\text{terminaciones}}$$

donde, f = número de meros

$$\begin{aligned} 1,000,000 \text{ Kg/Kg mol} &= 71.077 \text{ Kg/Kg mol} \times n + 2 \times (73.11 \text{ Kg/Kg mol}) \\ 1,000,000 &= 71.077 \times n + 146.23 \quad \text{despejando } n... \\ f &= 14,067.2 \text{ meros} \end{aligned}$$

Se utilizó el mismo procedimiento para el cálculo del número de átomos del polímero de DADMAC, para obtener el número de átomos de carbono, hidrógeno, nitrógeno y oxígeno para el polímero de acrilamida. El resultado de la fórmula molecular del polímero de acrilamida es:



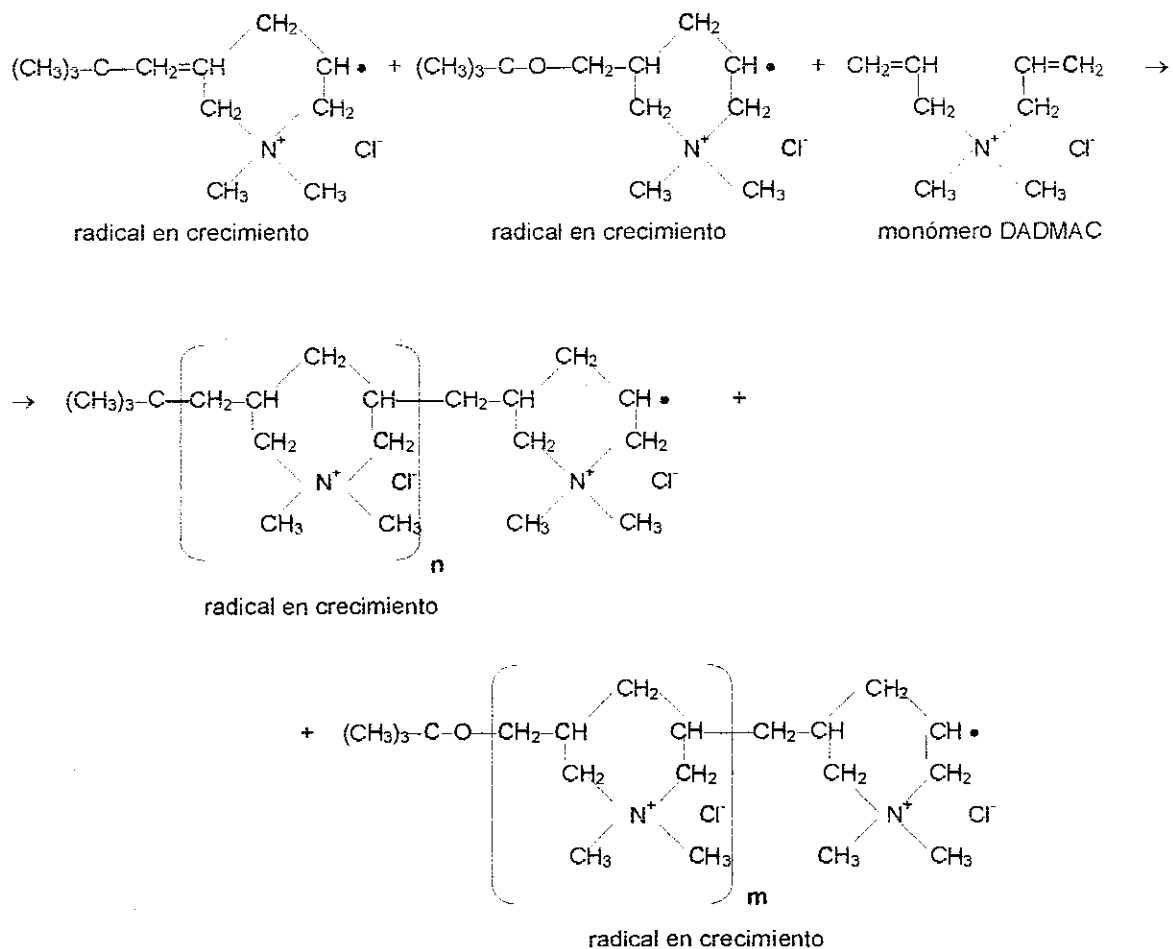
B. Mecanismo de la reacción de polimerización del DADMAC

Al mecanismo de polimerización del cloruro de dialil dimetil amonio se le conoce como *ciclopimerización*. La polimerización por radicales libres consta de 4 pasos: formación de los radicales libres por medio de un sistema redox, iniciación, propagación y terminación de la polimerización.

Generación de radicales libres. Los radicales libres se generan a partir de la reacción oxidación-reducción entre los iniciadores t-butil peroxi pivalato y sulfato ferroso de amonio. El primero es el agente oxidante y el segundo es el agente reductor. El t-butil peroxi pivalato es un peroxiester que posee un enlace oxígeno-oxígeno característico de los peróxidos. Este enlace es bastante débil, por lo que se rompe al reaccionar con el sulfato ferroso de amonio, dando lugar a los radicales libres (Wade, 1993).

reacción. Los radicales libres tienden a reaccionar entre sí, por lo que una alta concentración de iniciador, implica que el polímero resultante posea baja masa molecular. Esto ocurre debido a que hay mayor probabilidad de choque entre las moléculas de radicales libres que entre las moléculas de monómero con radicales libres y con radicales en crecimiento. Es por esta razón que la polimerización de DADMAC se debe realizar con baja concentración de iniciador (Billmeyer, 1971).

La concentración de iniciadores debe estar entre el rango de concentración: 0.0000001 a 1% (mol) de monómero (Morgan, 1976.)



donde, n y m indican el número de meros.

Terminación. La terminación puede ocurrir de dos formas: por apareamiento cabeza con cabeza de radicales libres formándose una molécula estable, o por

entre dos radicales con terminaciones: $((\text{CH}_3)_3\text{C}-\text{O}-)$. Además no todas las cadenas poseen la misma masa molecular, unas tienen más meros que otras, es por eso que se escogió una masa molecular promedio de 1,000,000 Kg/Kg mol. Se limitó a describir el polímero de DADMAC con la terminación del radical alcoxi únicamente, aunque también puede tener terminaciones del radical alquilo, o una mezcla de ambos radicales.

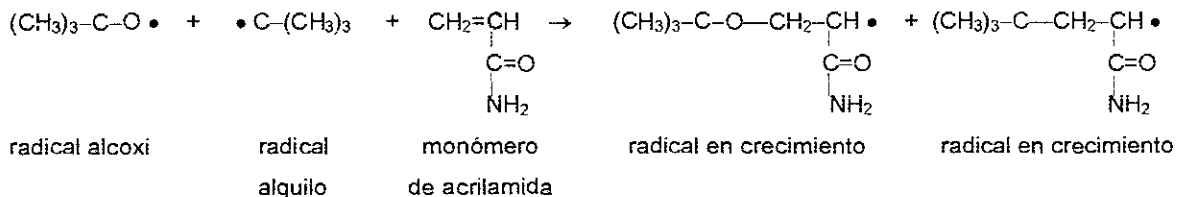
Aún cuando puedan existir cadenas de polímero distintas dentro de la misma emulsión, el polímero sigue teniendo la propiedad característica de ser utilizado como floculante en el tratamiento de aguas residuales.

C. Mecanismo de la reacción de polimerización de la acrilamida

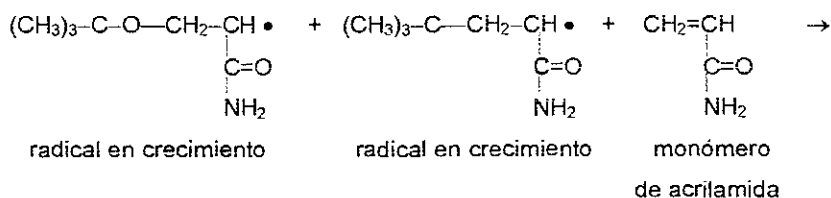
La acrilamida al polimerizarse produce un polímero no iónico, lo cual limita la solubilidad en agua. Sin embargo, los enlaces amida ($-\text{C}-\text{NH}_2$) permiten que el polímero sea soluble en agua. Además, este enlace brinda resistencia al polímero a desactivarse en presencia de agua dura.

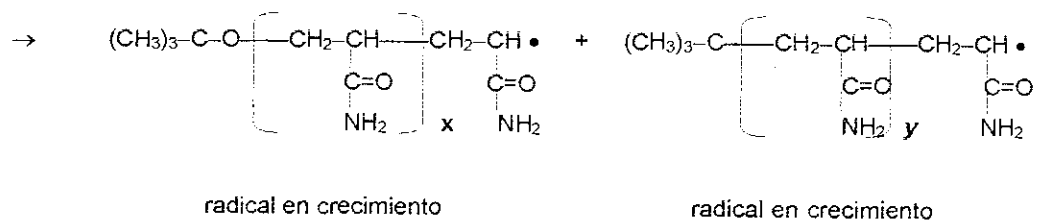
Generación de radicales libres. Ver Pág. No. 81

Iniciación



Propagación

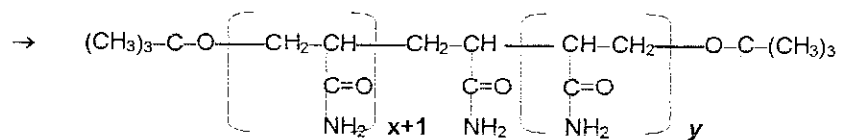
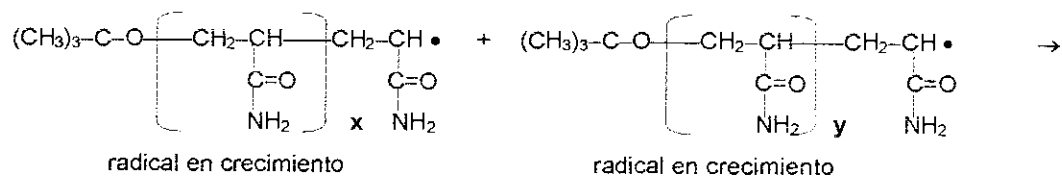




donde, x y y indican el número de meros.

Terminación

Por apareamiento:



polímero de acrilamida

Tabla No. 16. Propiedades físicas de reactivos (ingredientes) y productos de las polymerizaciones de DADMAC y de acrilamida

Nombre del compuesto	Nombre comercial	Fórmula molecular	Masa molecular (Kg/Kg mol)	Densidad (Kg/m ³) a 298.15 K	Apariencia	Solubilidad
Monómeros:						
Cloruro de dialil dimetil amonio	Ageflex mDADMAC ⁱ	C ₈ H ₁₆ NCI	161.67	1,036	Líquido incoloro o amarillento	Agua
Acrilamida	Acrylamide ⁱⁱ	C ₃ H ₅ ON	71.08	1,121.63	Cristales blancos	Agua, metanol, etanol, dimetil éter, acetona. Insoluble: benceno y heptano.
Iniciadores:						
t-butil peroxi pivalato al 75% en espíritus minerales	Luperox 11M75 ⁱⁱⁱ	C ₉ H ₁₆ O ₃	174.24	849.57	Líquido incoloro	Tolueno, xileno, benceno, espíritus minerales metanol, isopropanol, metilenglicol, acetona. Insoluble: agua
Sulfato ferroso de amonio ^{iv}	El mismo	Fe(SO ₄) ₂ (NH ₄) ₂ •6H ₂ O	392.13	1,857.23	Cristales azul verdoso pálido	Agua
Fase Oleosa:						
Aceite Mineral ^v	El mismo	ND	ND	919.21	Líquido transparente	Solventes orgánicos Insoluble: agua
Surfactantes:						
Trioleato de polioxietilen-20-sorbitan ^{vi}	Tween 85 [®]	ND	ND	1,017.01	Líquido amarillento	Benceno, tolueno, xileno, aceite mineral y espíritus minerales. Insoluble: agua

ⁱ Monómero distribuido por CIBA, Guatemala.

ⁱⁱ Monómero distribuido por Dahuachem International Economic and Trade Corp., China.

ⁱⁱⁱ Distribuido por Arkema Canada Inc., Canadá.

^{iv} Distribuido Industrial Safety & Supplies, U.S.A.

^v Distribuido por Brenntag, S. A, Guatemala.

^{vi} Distribuido por The Lab Depot, Inc., U.S.A.

Trioleato de sorbitan ^{vii}	Span 85®	ND	ND	930.10	Líquido color ámbar	Isopropanol, xileno, aceite mineral, espíritu minerales. Insoluble: agua
Solventes:						
Agua	El mismo	H ₂ O	18.01	997.07	Líquido transparente	
Espiritus minerales o solvente mineral ^{viii}	Varsol®	ND	ND	759.65	Líquido transparente amarillento	Solventes orgánicos. Insoluble: agua
Polímeros:						
Polímero de DADMAC	---	C ₄₉ H ₈₉ O ₇ N ₆ Cl ₁₈ S	1,000,000*	1077.79	Emulsión agua en aceite	Agua
Polímero de acrilamida	---	C ₄₂ H ₇₀ N ₄ O ₁₀ S	1,000,000*	1080	Emulsión agua en aceite	Agua
Subproductos:						
Sulfato férrico de amonio	El mismo	Fe(SO ₄) ₂ NH ₄ •12H ₂ O	482.18	1704.99	Cristales transparentes violeta pálido	Agua
Dióxido de carbono	El mismo	CO ₂	44.01	ND	Gas	Agua

** ND: no disponible

* Masa molecular promedio

D. Cálculo del balance de masa

Para realizar los cálculos en este inciso, se utilizó datos de la Tabla No. 16 de la Pág. No. 86 . El ejemplo de la Pág. No. 40, de la Patente No. 3,968,037, muestra la formulación y procedimiento para fabricar un polímero de DADMAC. El procedimiento está diseñado para un recipiente de reacción de 0.001 m³ (1 L), mientras que el proyecto contempla el diseño de un reactor a escala industrial, de 2 m³ (2,000 L). La conversión del monómero en polímero es del 98%. Se realizó los siguientes cálculos para determinar el balance de masa de la polimerización del DADMAC.

Cálculos con respecto a los reactivos, para reactor de 0.001 m³:

* *Cálculo de la masa de aceite mineral:*

$$\begin{aligned}\text{Kg a. mineral} &= 321.5 \text{ g aceite mineral} \times (1 \text{ Kg} / 1000 \text{ g}) \\ &= 0.3215 \text{ Kg aceite mineral}\end{aligned}$$

* *Cálculo para la solución acuosa de DADMAC:* Como se observa en la formulación del ejemplo, se debe utilizar una solución de monómero de DADMAC al 72.2%, pero en el mercado se encuentra el monómero en una solución al 65%.

$$\begin{aligned}\text{Kg DADMAC} &= 0.1385 \text{ Kg solución} \times (65 \text{ Kg DADMAC} / 100 \text{ Kg solución}) \\ &= 0.0900 \text{ Kg DADMAC}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\text{Kg Agua} &= 0.1385 \text{ Kg solución} \times [(100 \text{ Kg solución} - 65 \text{ Kg DADMAC}) / 100 \text{ Kg solución}] \\ &= 0.0485 \text{ Kg agua}\end{aligned}$$

* *Cálculo para la solución al 20% de Tween 85 en espíritus minerales (Varsol):*

$$\begin{aligned}\text{Kg Tween 85} &= 0.04 \text{ Kg solución} \times (20 \text{ Kg Tween 85} / 100 \text{ Kg solución}) \\ &= 0.008 \text{ Kg Tween 85}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\text{Kg Varsol} &= 0.04 \text{ Kg solución} \times [(100 \text{ Kg solución} - 20 \text{ Kg Tween 85}) / 100 \text{ Kg solución}] \\ &= 0.032 \text{ Kg Varsol}\end{aligned}$$

* *Cálculo de la solución acuosa de sulfato ferroso de amonio (Fe^{+2}):*

$$\begin{aligned} \text{Kg } Fe^{+2} &= 1.4 \text{ mL solución} \times (3.53 \times 10^{-4} \text{ Kg } Fe^{+2} / 100 \text{ mL solución}) \\ &= 4.942 \times 10^{-6} \text{ Kg } Fe^{+2} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Kg Agua} \rightarrow [100 \text{ mL solución} \times (1 \text{ g} / 1 \text{ mL}) = 0.351 \text{ g } Fe^{+2} + X \text{ g agua}] \times (1 \text{ Kg} / 1000\text{g}) \text{ despejando } X... \\ X = 0.0996 \text{ Kg agua} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &= 1.4 \text{ mL solución} \times (0.0996 \text{ Kg agua} / 100 \text{ mL solución}) \\ &= 0.0140 \text{ Kg agua} \end{aligned}$$

* *Cálculo de la solución al 75% de t-butil peroxi pivalato en espíritus minerales¹:*

$$\begin{aligned} \text{Kg t-butil} &= [0.336 \text{ mL} \times (0.85 \text{ g solución} / 1 \text{ mL solución}) \times (75 \text{ g t-butil} / 100 \text{ g solución})] \times (1 \text{ Kg} / 1000\text{g}) \\ &= 2.14 \times 10^{-4} \text{ Kg t-butil} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Kg Varsol} &= \{0.336 \text{ mL solución} \times (0.85 \text{ g solución} / 1 \text{ mL solución}) \times \\ &\quad \times [(100 \text{ g solución} - 75 \text{ g t-butil}) / 100\text{g solución}]\} \times (1 \text{ Kg} / 1000 \text{ g}) \\ &= 7.14 \times 10^{-5} \text{ Kg Varsol} \end{aligned}$$

Cálculo con respecto a los productos, para reactor de 0.001 m³:

* *Cálculo del polímero producido:*

$$\begin{aligned} \text{Kg polímero} &= [0.1000 \text{ Kg DADMAC} \times (1 \text{ Kg mol DADMAC} / 161.67 \text{ Kg DADMAC}) \times (1 \text{ Kg mol polímero} \\ \text{DADMAC}^2 &\quad \text{DADMAC} / 6185 \text{ Kg mol mero}) \times (1,000,000 \text{ Kg polímero DADMAC} / 1 \text{ Kg mol polímero} \\ &\quad \text{DADMAC})] \times (98/100) \\ &= 0.098 \text{ Kg} \end{aligned}$$

* *Cálculo del monómero residual:*

$$\begin{aligned} \text{Kg DADMAC} &= (0.1000 \text{ Kg DADMAC} - 0.098 \text{ Kg polímero DADMAC}) \\ &= 0.002 \text{ Kg DADMAC} \end{aligned}$$

* *Cálculo del agua:* El agua es una especie no reactiva por lo que todo lo que entra al sistema, sale de igual manera.

¹ El t-butil peroxi pivalato se encuentra en el mercado en solución al 75% en espíritus minerales (Varsol).

² La conversión teórica del monómero de DADMAC es del 98%.

$$\begin{aligned}\text{Kg agua} &= 0.0385 \text{ Kg agua} + 0.0140 \text{ Kg agua} \\ &= 0.0525 \text{ Kg agua}\end{aligned}$$

La cantidad de aceite mineral, espíritus minerales (Varsol) y Tween 85® utilizados a la entrada del reactor, es la misma que sale del reactor, ya que son especies no reactivas. Estas especies forman la *emulsión agua en aceite*.

* *Cálculo de los iniciadores:* El sulfato ferroso de amonio (Fe^{+2}) se convierte totalmente en sulfato férrico de amonio (Fe^{+3}), que indica su estado oxidado.

$$\text{Kg t-butil}^3 = 0.00 \text{ Kg}$$

$$\begin{aligned}\text{Kg Fe}^{+3\ 4} &= 4.942 \times 10^{-6} \text{ Kg Fe}^{+2} \times (1 \text{ Kg mol Fe}^{+2} / 392.13 \text{ Kg Fe}^{+2}) \times (1 \text{ Kg mol Fe}^{+2} / 1 \text{ Kg mol Fe}^{+3}) \times \\ &\quad \times (482.20 \text{ Kg Fe}^{+3} / 1 \text{ Kg mol Fe}^{+3}) \\ &= 6.077 \times 10^{-6} \text{ Kg Fe}^{+3}\end{aligned}$$

* *Cálculo del dióxido de carbono:* Se produce una pequeña cantidad de CO_2 en la reacción oxido-reducción entre los iniciadores, ver Pág. No. 81.

$$\begin{aligned}\text{Kg CO}_2 &= 2.14 \times 10^{-4} \text{ Kg t-butil} \times (1 \text{ Kg mol t-butil} / 174.24 \text{ Kg t-butil}) (1 \text{ Kg mol CO}_2 / 1 \text{ Kg mol t-butil}) \times \\ &\quad \times (44.01 \text{ Kg CO}_2 / 1 \text{ Kg mol CO}_2) \\ &= 5.30 \times 10^{-5} \text{ Kg CO}_2\end{aligned}$$

* *Cálculo de las fracciones másicas:*

$$X_i = \text{masa}_i / \sum \text{masas}$$

donde, i = cualquier especie o compuesto. Se calculó como ejemplo la fracción másica del agua en la solución de sulfato ferroso de amonio (Fe^{+2}).

$$\begin{aligned}X_w &= (0.0140 \text{ Kg agua}) / (0.0140 \text{ Kg agua} + 4.942 \times 10^{-6} \text{ Kg Fe}^{+2}) \\ &= 0.9965\end{aligned}$$

^{3, 4} La conversión teórica de los iniciadores es del 100%.

* *Cálculo del volumen total del sistema:* Se calculó a partir de las densidades de cada compuesto. Es importante calcular el volumen de la emulsión ocupado en el reactor. El volumen del reactor no se utiliza a su máxima capacidad, sino que se utilizará el 75% del volumen total por razones de seguridad.

$$V_{\text{útil reactor}} = 2 \text{ m}^3 \times (75 / 100) \\ = 1.5 \text{ m}^3$$

Con todos los resultados anteriores se realizó un programa en una hoja electrónica de Microsoft Excel®. Se escaló los datos de laboratorio, utilizando como base de cálculo el volumen útil del reactor, 1.5 m³. Las siguientes tablas muestran la masa, el volumen y la fracción másica de cada componente.

Tabla No. 17. Datos del balance de masa para los reactivos para la polimerización de DADMAC

Nombre del reactivo	Especie	Nombre de la corriente	Cantidad Kg	Volumen m ³	Fracción másica X _i
Monómero de DADMAC	R ⁵	D	612.38	0.59	0.4335
Agua disolución monómero	NR ⁶	W	329.74	0.33	0.2334
Aceite mineral	NR	M	353.17	0.38	0.2500
Tween 85	NR	T	22.53	0.02	0.0159
Varsol disolución Tween 85	NR	V	90.10	0.12	0.0638
Sulfato ferroso de amonio (Fe ⁺²)	R	S	0.014	0.00001	0.0000098
Agua disolución Fe ⁺²	NR	W	3.93	0.00394	0.0028
t-butil peroxi pivalato	R	B	0.60	0.00071	0.0004
Varsol disolución t-butil	NR	V	0.20	0.00026	0.0001
TOTAL entrante =			1,412.11	1.51	1.0000

⁵ R significa especie reaccionante.

⁶ NR significa especie no reaccionante.

Tabla No. 18. Datos del balance de masa para los productos de la polimerización de DADMAC

Nombre del producto	Especie	Nombre de la corriente	Cantidad Kg	Volumen m ³	Fracción másica X _i
Monómero de DADMAC	R	D	12.25	0.012	0.0087
Agua total	NR	W	333.67	0.33	0.2363
Aceite mineral	NR	M	353.17	0.38	0.2501
Tween 85	NR	T	22.53	0.022	0.016
Varsol	NR	V	90.10	0.1186	0.064
Sulfato férrico de amonio (Fe ⁺³)	R	F	0.02	9.98E-06	0.000012
Sulfato ferroso de amonio (Fe ⁺²)	R	S	0	0	0
Polímero de DADMAC	R	PD	600.17	0.57	0.4250
Dióxido de carbono	R	C	0.00015	—	1.08E-07
t-butil peroxi pivalato	R	B	0	0	0
TOTAL saliente =			1,412.11	1.51	1.0000

El cálculo para el balance de masa de acrilamida se realizó de la misma forma que para del DADMAC, excepto que se utilizó las cantidades del ejemplo de la Patente No. 4,077,930. Este procedimiento está diseñado para un recipiente de reacción de 0.0005 m³ (0.5 L), pero por medio del programa de Microsoft Excel® se escaló las cantidades de reactivos y productos para un reactor de 2 m³.

Tabla No. 19. Datos del balance de masa para los reactivos para la polimerización de acrilamida

Nombre del reactivo	Especie	Nombre de la corriente	Cantidad Kg	Volumen m ³	Fracción másica X _i
Monómero de acrilamida	R	A	1000.00	0.89	0.6188
Agua disolución acrilamida	NR	W	250.00	0.24	0.1547
Aceite mineral	NR	M	250.00	0.26	0.1547
Tween 85	NR	T	88.00	0.086	0.0545
Span 85	NR	J	8.00	0.0086	0.0050
Sulfato ferroso de amonio (Fe ⁺²)	R	S	0.05276	0.000028	0.00003
t-butil peroxi pivalato al 75%	R	B	19.92	0.023	0.0123
Varsol disolución t-butil	NR	V	6.64	0.0087	0.0041
TOTAL entrante =			1,607.85	1.52	1.0000

Tabla No. 20. Datos del balance de masa para los productos para la polimerización de acrilamida

Nombre del reactivo	Especie	Nombre de la corriente	Cantidad Kg	Volumen m ³	Fracción másica X _i
Monómero de acrilamida	R	A	20.00	0.0178	0.0124
Agua	NR	W	250.00	0.24	0.1555
Aceite mineral	NR	M	250.00	0.26	0.1555
Tween 85	NR	T	88.00	0.086	0.0547
Span 85	NR	J	8.00	0.0086	0.0050
Sulfato férrico de amonio (Fe ⁺³)	R	F	0.065	0.000038	0.00004
Varsol disolución t-butil	NR	V	6.64	0.0087	0.0041
Dióxido de carbono	R	C	5.03	---	0.0031
Polímero de acrilamida	R	PA	980.12	0.90	0.6096
Sulfato ferroso de amonio (Fe ⁺²)	R	S	0	0	0
t-butil peroxi pivalato	R	B	0	0	0
TOTAL saliente =			1,607.85	1.52	1.0000

E. Cálculo del balance de energía

Tabla No. 21. Datos de calores de polimerización y calores específicos de los monómeros ⁷

Monómero	Calor de polimerización KJ/Kg	Calor específico KJ/(Kg K)
DADMAC	734.99	2.26
Acrilamida	1,146.60	2.4

* *Cálculo de flujo de calor generado (Q_{generado}) en cada polimerización:* Para la masa del monómero, ver Tablas No. 17 y 19, del balance de masa. Ver el tiempo de polimerización en las Pág. No. 40 y 42.

$$Q_{\text{generado}} = [(Masa \text{ de monómero}) (\text{Calor de polimerización})] / \text{tiempo de polimerización}$$

$$Q_{\text{DADMAC}} = [(612.38 \text{ Kg}) (734.99 \text{ KJ/Kg})] / 20 \text{ horas}$$

$$= 22,523 \text{ KJ/h} = 6.26 \text{ KJ/s}$$

$$Q_{\text{acrilamida}} = [(1000 \text{ Kg}) (1,146.60 \text{ KJ/Kg})] / 4 \text{ horas}$$

$$= 286,650 \text{ KJ/h} = 79.62 \text{ KJ/s}$$

⁷ Esta información fue proporcionada por Ciba Specialty Chemicals, www.cibasc.com

* *Cálculo de la temperatura generada en cada polimerización:* Se calculó dividiendo el calor de polimerización entre el calor específico de cada monómero, ver la tabla anterior.

$$\begin{aligned} T_{\text{DADMAC}} &= (734.99 \text{ KJ} / \text{Kg}) (\text{Kg K} / 2.26 \text{ KJ}) \\ &= 325.15 \text{ K} = 52 \text{ }^\circ\text{C} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} T_{\text{acrilamida}} &= (1,146.60 \text{ KJ} / \text{Kg}) (\text{Kg K} / 2.4 \text{ KJ}) \\ &= 477 \text{ K} = 204 \text{ }^\circ\text{C} \end{aligned}$$

* *Cálculo del flujo de agua de enfriamiento:* Se calculó a partir del flujo de calor generado en cada polimerización. Como refrigerante se utiliza agua enfriada en una torre de enfriamiento. Se establece que el agua entrante a la chaqueta de enfriamiento, esta a 298.15 K (25 °C) y el agua saliente de la chaqueta se calienta a 303.15 K (30°C).

Para la polimerización de DADMAC:

$$\begin{aligned} Q_{\text{generado}} &= Q_{\text{retirado}} \\ &= m_a C (t_2 - t_1) \end{aligned}$$

donde, m_a es el flujo másico de agua de enfriamiento, t_1 y t_2 son la temperatura de entrada y de salida a la chaqueta y C es el calor específico del agua a 298.15 K (25°C) obtenido del Manual del Ingeniero Químico.

$$22523 \text{ KJ/h} = m_a \times 4.1795 \text{ KJ} / \text{Kg K} \times (303.15 \text{ K} - 298.15 \text{ K}) \quad \text{despejando } m_a \dots$$

$$m_a = 1077.78 \text{ Kg/h} \quad \text{para convertir el flujo másico de agua a flujo volumétrico se utilizó la densidad del agua a } 25^\circ\text{C}, 997.07 \text{ Kg/m}^3 \text{ (Perry y Green, 1997).}$$

$$\begin{aligned} q_a &= 1077.78 \text{ Kg/h} \times (\text{m}^3 / 997.07 \text{ Kg}) \times (1 \text{ h} / 3600 \text{ s}) \\ &= 0.0003 \text{ m}^3/\text{s} \approx 4 \text{ gal/min} \end{aligned}$$

Para la polimerización de acrilamida:

$$Q_{\text{generado}} = Q_{\text{retirado}}$$

$$= m_a \times C \times (t_2 - t_1)$$

$$286,650 \text{ KJ/h} = m_a \times 4.1795 \text{ KJ/Kg K} \times (303.15\text{K} - 298.15\text{K}) \quad \text{despejando } m_a \dots$$

$$m_a = 13,717 \text{ Kg/h}$$

$$q_a = 13,717 \text{ Kg/h} \times (1 / 997.07 \text{ m}^3/\text{Kg}) \times (1 \text{ h} / 3600 \text{ s})$$

$$= 0.003 \text{ m}^3 / \text{s} \approx 47 \text{ gal} / \text{min}$$

F. Cálculo de las dimensiones de la carcasa del reactor

Se utilizó la fórmula de volumen para un cilindro y la fórmula del volumen de cabeza para los dos extremos⁸. Se estableció que la cabeza y el fondo del reactor fueran elipsoidales, para permitir una adecuada agitación.

$$V_{\text{reactor}} = V_{\text{cilindro}} + V_{\text{cabezas}}$$

$$= (\pi r^2 h) + 2 \times (\pi D^3/24)$$

donde, la relación diámetro y altura para el cilindro y para la cabeza: (ver Pág. No. 29):

$$h = 1.8 D \quad (\text{Platzer, 1973})$$

$$h_{\text{cabeza}} = D/4 \quad (\text{Perry y Green, 1997}) \quad \text{donde } D = 2 r$$

reemplazando datos en la ecuación de V_{reactor} ...

$$2 \text{ m}^3 = [\pi r^2 (1.8 \times 2 r)] + 2 \times \{[\pi (2 r)^3]/24\}$$

$$= 3.6 \pi r^3 + 0.6667 \pi r^3 \quad \text{despejando } r \dots$$

$$r = 0.53 \text{ m} \quad \text{sustituyendo } r \text{ en } D, h \text{ y } h_{\text{cabeza}} \dots$$

$$D = 1.06 \text{ m}$$

$$h = 1.91 \text{ m}$$

$$h_{\text{cabeza}} = 0.27 \text{ m}$$

⁸ La fórmula del volumen de cabeza de un tanque se obtuvo del Manual del Ingeniero Químico.

Para calcular el grosor de la pared del reactor, se utilizó la siguiente ecuación:

$$t = (P D) / \{2 [(S E) + (P \gamma)]\} + C \quad (\text{Perry y Green, 1997})$$

donde, P es la presión interna, D es el diámetro exterior del reactor, S es el máximo esfuerzo permisible (129,621 Pa), E es un factor de calidad (0.95), γ es un coeficiente para materiales dúctiles ferrosos y no ferrosos (0.4) y C es la tolerancia debido a corrosión y erosión (1/64"). Los datos utilizados en esta fórmula se obtuvieron del Manual del Ingeniero Químico.

* *Calculando el área del reactor.*

$$\begin{aligned} \text{Área}_{\text{cilindro}} &= 2 \pi r h \\ &= 2 \pi \times 0.53 \text{ m} \times 1.91 \text{ m} \\ &= 6.36 \text{ m}^2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Área}_{\text{cabezas}} &= 2 \times (4 \pi r^2) \\ &= 8 \pi \times (0.53 \text{ m})^2 \\ &= 7.06 \text{ m}^2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Área}_{\text{total reactor}} &= 6.36 \text{ m}^2 + 7.06 \text{ m}^2 \\ &= 13.42 \text{ m}^2 \end{aligned}$$

* *Calculando la presión del líquido dentro del tanque:*

$$\begin{aligned} P &= P_{\text{emulsión}} \\ &= (\text{Masa}_{\text{emulsión}} \times \text{gravedad}) / \text{área} \\ &= (1,607.85 \text{ Kg} \times 9.81 \text{ m/s}^2) / 13.42 \text{ m}^2 \\ &= 1175.34 \text{ Pa} \end{aligned}$$

* *Calculando el grosor de la lámina del cilindro:*

$$\begin{aligned} t &= (1175.34 \text{ Pa} \times 1.06 \text{ m}) / (2 [(129,621 \text{ Pa} \times 0.95) + (1175.34 \times 0.4)]) + 0.00039 \text{ m} \\ &= 0.00543 \text{ m} = 0.22 \text{ pulg} \end{aligned}$$

en el mercado no se encuentra lámina de este grosor, por lo que se debe utilizar una lámina de 0.00640 m de grosor que equivale a 1/4 " (= 0.25 pulg).

* *Cálculo del flujo de evacuación del producto:* Este se calculó a partir del volumen total de cada polimerización y el tiempo determinado para vaciar el reactor, 15 min. Para verificar el volumen de emulsión, ver Tablas No. 17 y 19, de las Pág. No. 91 y 92.

$$\begin{aligned} q_{\text{evacuación}} &= (1.51 \text{ m}^3 / 15 \text{ min}) (1 \text{ min} / 60 \text{ s}) \\ \text{DADMAC} &= 0.00167 \text{ m}^3/\text{s} = (26.60 \text{ gal/min}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} q_{\text{evacuación}} &= (1.52 \text{ m}^3 / 15 \text{ min}) (1 \text{ min} / 60 \text{ s}) \\ \text{acrilamida} &= 0.00169 \text{ m}^3/\text{s} = (26.77 \text{ gal/min}) \end{aligned}$$

Se observa que el flujo máximo que debe mover la bomba de doble diafragma es $0.0017 \text{ m}^3/\text{s}$ (27 gal/min).

G. Cálculo de las dimensiones de la chaqueta

Para calcular el área de enfriamiento en el reactor, se utilizó los datos de la polimerización de acrilamida, ya que es la reacción más exotérmica.

* *Cálculo de coeficientes de película de transferencia de calor.* Para calcular el coeficiente interno, se utilizó la fórmula de transferencia de calor especial para lotes agitados.

$$(hD)/\kappa = a (N_{RE})^b [(c\mu) / \kappa]^{1/3} (\mu / \mu_w)^m \quad (\text{Perry y Green, 1997})$$

donde, h puede ser: h_i , coeficiente de película interno (dentro del reactor) o h_o , coeficiente de película externo (en la chaqueta); D es el diámetro del reactor; κ es la conductividad térmica; a ($= 0.53$), b ($= 2/3$) y m ($= 0.24$) son constantes especiales para el tipo de agitador de turbina inclinada; c es el calor específico, μ es la viscosidad y μ_w es la viscosidad cerca de la pared.

Para calcular h_i , se utilizó el valor κ de una emulsión de acetato de polivinilo, ya que no se cuenta con los valores exactos para la emulsión polimérica de

DAMAC ni para acrilamida. Se utilizó el acetato de polivinilo como comparación porque también es una emulsión polimérica viscosa. Este valor es: $\kappa = 0.510 \text{ W/m K}$

El valor de C, calor específico, de la emulsión de acrilamida, se calculó de la siguiente manera:

$$Q_{\text{acrilamida}} = m_{\text{acrilamida}} C_{\text{emulsión}} \Delta t$$

donde, $Q_{\text{acrilamida}}$ es el calor generado en la polimerización de acrilamida, $m_{\text{acrilamida}}$ es la masa de emulsión dentro del reactor, $C_{\text{emulsión}}$ es el calor específico de la emulsión y Δt es la diferencia de temperatura en la polimerización.

$$(1000 \text{ Kg acrilamida} \times 1146.6 \text{ KJ/Kg}) = 1607.85 \text{ Kg} \times C_{\text{emulsión}} \times (477.15 \text{ K} - 323.15 \text{ K})$$

$$\begin{aligned} C_{\text{emulsión}} &= 1.1466 \times 10^6 \text{ KJ} / [(1607.85 \text{ Kg emulsión}) \times 154 \text{ K}] \\ &= 4.63 \text{ KJ/Kg K} = 4,630 \text{ J/Kg K} \end{aligned}$$

Para la viscosidad se utilizó la de la emulsión polimérica, 5 Pa s. Para calcular h_o , se utilizó κ , c y μ del agua a 25°C, obtenidos del Manual del Ingeniero Químico.

$$\begin{aligned} h_i &= [(0.53 \times 0.510 \text{ W/m K}) / 1.06 \text{ m}] \times (370)^{2/3} \times [(4630 \text{ J/Kg K} \times 5 \text{ Pa s}) / 0.510 \text{ W /mK}]^{1/3} \\ &= 468.82 \text{ W /m}^2 \text{ K} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} h_o &= [(0.53 \times 0.643 \text{ W/m K}) / 1.06 \text{ m}] \times (370)^{2/3} \times \\ &\quad \times [(4186 \text{ J/Kg K} \times 0.000549 \text{ Pa s}) / 0.643 \text{ W /mK}]^{1/3} \times (1)^{0.24} \\ &= 25.33 \text{ W /m}^2 \text{ K} \end{aligned}$$

* *Cálculo del coeficiente global de transferencia de calor.*

$$U = 1 / [(D_e / D) f_i + (D_e / (D h_i)) + (x_w / k_w) (D_e / D_L) + (1 / h_o) + f_o]$$

(McCabe, 1991)

donde, U es el coeficiente global de transferencia de transferencia de calor en la pared del reactor; D y D_e son el diámetro interno y el externo del reactor, 1.06 m y 1.0728; D_L es el diámetro medio logarítmico; f_i y f_o son los factores de

ensuciamiento interno y externo del reactor, $f_i = 0$ porque no hay ensuciamiento dentro del reactor y $f_o = 0.001$ para la chaqueta (Clarke, 1962); x_w es el grosor de la pared del reactor, 0.0064 m; k_w es la conductividad térmica del acero inoxidable, 16.27 W /m K (Perry y Green, 1997) y h_i y h_o son los coeficientes de película interno y externo.

$$\begin{aligned} D_L &= (D_o - D) / \ln (D_o / D) && \text{(McCabe, 1991)} \\ &= (1.0728 \text{ m} - 1.06 \text{ m}) / \ln (1.0728 \text{ m} / 1.06 \text{ m}) \\ &= 1.06639 \text{ m} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} U &= 1 / [(1.728 \text{ m} / (1.06 \text{ m} \times 468.82 \text{ W/m K}) + (0.0064 \text{ m} / 16.27 \text{ W/m K}) (1.0728 \text{ m} / \\ &\quad 1.064 \text{ m}) + (1 / 25.33 \text{ W/m K}) + 0.001] \\ &= 22.55 \text{ W / m}^2 \text{ K} \end{aligned}$$

* *Cálculo de la temperatura media logarítmica:*

$$\begin{aligned} \text{LMTD} &= (\Delta T_2 - \Delta T_1) / \ln (\Delta T_2 / \Delta T_1) && \text{donde, } \Delta T_1 = T_2 - t_1 \\ &&& \Delta T_2 = T_1 - t_2 \end{aligned}$$

donde, T_1 y T_2 son las temperaturas caliente y fría de la emulsión dentro del reactor y t_1 y t_2 son las temperaturas del agua a la entrada y a la salida de la chaqueta. Para ver el valor de estas temperaturas, hacer referencia al Balance de Energía, de la página No. 49.

LMTD para polimerización de acrilamida:

$$\begin{aligned} \Delta T_1 &= 323.15 \text{ K} - 298.15 \text{ K} \\ &= 25 \text{ K} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Delta T_2 &= 477.15 \text{ K} - 303.15 \text{ K} \\ &= 174 \text{ K} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{LMTD} &= (174 \text{ K} - 25 \text{ K}) / \ln (174 \text{ K} / 25 \text{ K}) \\ &= 76.80 \text{ K} \end{aligned}$$

* *Cálculo del área de chaqueta:* Se utilizó la fórmula para el diseño de equipo de transferencia de calor, y se despejó.

$$q = A U \text{LMTD}$$

donde, q es el calor generado en la polimerización; A es el área de enfriamiento; U es el coeficiente global de transferencia de calor (U_o); LMTD es la temperatura media logarítmica.

$$\begin{aligned} A &= [(79.62 \text{ KJ/s}) (1000 \text{ J} / 1 \text{ KJ})] / (22.55 \text{ W/m}^2 \text{ K} \times 76.80 \text{ K}) \\ &= 8.63 \text{ m}^2 \end{aligned}$$

El área máxima de enfriamiento ($A_{\text{enfriamiento}}$) es 8.63 m^2 .

* *Cálculo del diámetro de la chaqueta:* Se calculó por medio de la suma entre el diámetro del reactor (D) y el espacio (e_e) que hay entre la pared de la chaqueta y la pared del reactor, que es de 3 cm (0.03 m)⁹.

$$\begin{aligned} D_{\text{ch}} &= D + 2 e_e \\ &= 1.06 \text{ m} + (2 \times 0.03 \text{ m}) \\ &= 1.12 \text{ m} \end{aligned}$$

* *Cálculo de la altura de la chaqueta:*

$$\begin{aligned} A_{\text{enfriamiento}} - A_{1 \text{ cabeza}} &= A_{\text{cilindro cubierto}} \\ 8.63 \text{ m}^2 - 3.53 \text{ m}^2 &= 2 \pi r h_{\text{cilindro chaqueta}} \\ 5.1 \text{ m}^2 &= 2 \pi \times 0.53 \text{ m} \times h_{\text{cilindro chaqueta}} \end{aligned}$$

donde, $A_{\text{enfriamiento}}$ es el área calculada anteriormente, $A_{1 \text{ cabeza}}$ es el área del extremo inferior del reactor, $A_{\text{cilindro cubierto}}$ es el área del cilindro del reactor cubierto por la chaqueta y $h_{\text{cilindro chaqueta}}$ es la altura en el cilindro del reactor a donde llegará la chaqueta.

$$h_{\text{cilindro chaqueta}} = 1.53 \text{ m}$$

⁹ Información proporcionada por Talleres Hernández, 13 ave. 4-27 zona 1.

Altura de la cabeza de la chaqueta: la relación entre diámetro y altura, para cabezas elipsoidales, es el siguiente:

$$\begin{aligned} h_{\text{cabeza}} &= D/4 && \text{(Perry y Green, 1997)} \\ &= 1.53 \text{ m} / 4 \\ &= 0.38 \text{ m} \end{aligned}$$

La altura total de la chaqueta es:

$$\begin{aligned} h_{\text{ch}} &= h_{\text{cilindro chaqueta}} + h_{\text{cabeza}} \\ &= 1.53 \text{ m} + 0.38 \text{ m} \\ &= 1.91 \text{ m} \end{aligned}$$

H. Cálculo de las dimensiones y potencia requerida del agitador

Como se mencionó, el agitador será del tipo de *turbina de aspa inclinada*, con 4 aspas inclinadas a 45°. El diámetro del impulsor del agitador varía entre 10% y 70% del diámetro del reactor. Se utilizan impulsores grandes para altas viscosidades.

* *Cálculo del diámetro del impulsor:*

$$D_i / D = 0.50 \quad \text{(Dickey y Hemrajani, 1992)}$$

donde D_i y D , son el diámetro del impulsor diámetro del reactor, respectivamente.

$$\begin{aligned} D_i &= 0.50 \times 1.06 \text{ m} \\ &= 0.53 \text{ m} \end{aligned}$$

* *Cálculo del ancho de cada aspa:*

$$W / D = (1/10) \quad \text{(Nagata, 1975)}$$

$$\begin{aligned} W &= (1/10) \times 1.06 \text{ m} \\ &= 0.106 \text{ m} \end{aligned}$$

donde W es el ancho del aspa.

* *Cálculo de la distancia del agitador al suelo del reactor.*

$$E / D_t = \frac{1}{4} \quad (\text{Nagata, 1975})$$

$$E = 0.265 \text{ m}$$

donde, E es la distancia entre el agitador y el suelo del reactor.

* *Cálculo aproximado del largo de la varilla del agitador:*

$$\begin{aligned} L_v &= h_T - E \\ &= 2.44 \text{ m} - 0.53 \text{ m} \\ &= 1.91 \text{ m} \end{aligned}$$

donde h_T es la altura total del reactor y E es la distancia entre el agitador y el suelo del reactor.

* *Cálculo de la densidad de las emulsiones poliméricas:* Se utilizó los datos de la Tabla No. 16. La densidad (ρ) es la razón entre masa y volumen de la emulsión polimérica.

$$\begin{aligned} \rho_{\text{DADMAC}} &= 1,412.22 \text{ Kg} / 1.51 \text{ m}^3 \\ &= 935.17 \text{ Kg/m}^3 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \rho_{\text{acrilamida}} &= 1,607.85 \text{ Kg} / 1.52 \text{ m}^3 \\ &= 1,057.80 \text{ Kg/m}^3 \end{aligned}$$

* *Conversión de unidades de la viscosidad:* La viscosidad de ambas emulsiones inversas poliméricas es de 5,000 cP.

$$\begin{aligned} \mu &= 5,000 \text{ cP} \times (1 \text{ Pa s} / 1,000 \text{ cP}) \\ &= 5 \text{ Pa s} \end{aligned}$$

* *Conversión de unidades de la velocidad rotacional:*

$$\begin{aligned} \omega &= 60 \text{ rev/min} \times (0.1047 \text{ rad/s} / 1 \text{ rev/min}) \\ &= 6.28 \text{ rad/s} \end{aligned}$$

* *Cálculo del Número de Reynolds:*

$$N_{RE} = (D_i^2 N \rho) / \mu \quad (\text{Perry y Green, 1997})$$

donde, D_i es el diámetro del impulsor, N es la velocidad rotacional del impulsor (rad/s), ρ es la densidad y μ es la viscosidad del fluido.

N_{RE} para DADMAC:

$$\begin{aligned} N_{RE} &= [(0.53 \text{ m})^2 \times 6.28 \text{ rad/s} \times 935.17 \text{ Kg/m}^3] / 5 \text{ Pa s} \\ &= 329.94 \approx 330 \end{aligned}$$

N_{RE} para acrilamida:

$$\begin{aligned} N_{RE} &= [(0.53 \text{ m})^2 \times 6.28 \text{ rad/s} \times 1057.80 \text{ Kg/m}^3] / 5 \text{ Pa s} \\ &= 373.20 \approx 370 \end{aligned}$$

El rango del Número de Reynolds es: $330 < N_{RE} < 370$

Se utiliza el N_{RE} y la densidad más grandes para dimensionar el agitador, valores que pertenecen a la emulsión inversa del polímero de acrilamida.

* *Cálculo del Número de Potencia (N_P):* Se utilizó la Gráfica No. 6-40 del Manual del Ingeniero Químico, donde se muestra el Número de Potencia en función del Número de Reynolds.

$$N_{RE} \text{ de } 370 \rightarrow N_P = 1.28 \quad (\text{Perry y Green, 1997})$$

* *Cálculo de la potencia requerida:* El Número de potencia (N_P) es el siguiente:

$$N_P = P / (\rho N^3 D_i^5) \quad (\text{Perry y Green, 1997}) \quad \text{despejando P...}$$

$$\begin{aligned} P &= N_P \rho N^3 D_i^5 \\ &= 1.28 \times 1057.8 \text{ Kg/m}^3 \times (6.28 \text{ rad/s})^3 \times (0.53 \text{ m})^5 \\ &= 14.024 \text{ W} \end{aligned}$$

Este resultado, 14.02 KW, representa el 90% de la potencia total requerida del motor para mover el agitador (Dickey y Hemrajani, 1992).

$$P = 0.90 P_{\text{total}}$$

$$\begin{aligned} P_{\text{total}} &= 14.02 \text{ KW} / 0.90 \\ &= 15.0 \text{ KW} (= 20.1 \text{ hp}) \end{aligned}$$

Debido a que no existe un motor de 15.0 KW (≈ 20.1 hp), se debe utilizar un motor de 14.9 KW (≈ 20 hp).

I. Cálculo de la alimentación de nitrógeno gaseoso

El distribuidor de nitrógeno es un tubo de acero inoxidable con diámetro interior de 0.0266 m y de diámetro nominal de 0.0254 m (1 pulg).

* *Cálculo del flujo de nitrógeno:* Se calculó a partir del volumen restante en el reactor que no está ocupado por la emulsión. La evacuación del aire dentro del reactor se debe realizar en el lapso de 1 hora.

$$\begin{aligned} V_{\text{sin ocupar}} &= 2.0 \text{ m}^3 - 1.5 \text{ m}^3 \\ &= 0.5 \text{ m}^3 \end{aligned}$$

$$m_N = 0.5 \text{ m}^3 / 1 \text{ h} = 0.000139 \text{ m}^3/\text{s}$$

donde, m_N es el flujo de nitrógeno gaseoso.

* *Cálculo de la velocidad del flujo en el tubo:*

$$\begin{aligned} V_i &= m_N / \text{área tubo} = m_N / (\pi r^2) \\ &= 0.000139 \text{ m}^3/\text{s} / (\pi (0.0266 \text{ m} / 2)^2) \\ &= 0.25 \text{ m/s} \end{aligned}$$

* *Cálculo del área de los agujeros y diámetro de agujero:*

$$A_p / A_o = \sqrt{(10) \times C_o}$$

donde A_p es el área seccional del tubo, A_o es el área total de los agujeros y C_o es un coeficiente de la caída de presión de tubos. Se obtuvo del Manual del Ingeniero Químico un valor de C_o de 1.87.

$$\begin{aligned} A_o &= [\pi (0.0266 \text{ m} / 2)^2] / (\sqrt{(10)} \times 1.87) \\ &= 0.000094 \text{ m}^2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} A_{pa} &= A_o / 30 && \text{donde } A_{pa} \text{ es el área por cada agujero} \\ &= 0.000094 \text{ m}^2 / 30 \\ &= 0.00000314 \text{ m}^2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} d_a &= 2 * \sqrt{(A_{pa} / \pi)} \\ &= 2 * \sqrt{(0.00000314 \text{ m}^2 / \pi)} \\ &= 0.0016 \text{ m} \approx 0.002 \text{ m} \end{aligned}$$

* *Cálculo del diámetro exterior del anillo:* Se estableció que la separación entre el anillo y la pared del reactor es 0.02 m (2 cm).

$$d = D - (2 d_{NE} + 2 X_N)$$

donde D es el diámetro del reactor, d_{NE} es el diámetro exterior del tubo y X_N es la distancia de separación entre el anillo y la pared del reactor.

$$\begin{aligned} d &= 1.06 \text{ m} - (2 \times 0.0334 \text{ m} + 2 \times 0.02 \text{ m}) \\ &= 0.953 \text{ m} \end{aligned}$$

* *Cálculo del diámetro del tubo de venteo:* El flujo de nitrógeno es de 0.000139 m^3/s , el cual es alimentado por medio de una tubería de 0.0254 m (1 pulg) de diámetro nominal; de este mismo diámetro debe ser el del tubo de venteo, para asegurar que el aire evacuado salga la misma velocidad.

$$d_v = 0.0254 \text{ m (1 pulg)}$$

donde, d_v es el diámetro del tubo de venteo. El largo (o alto) del tubo de venteo dependerá de la altura del techo de la fábrica, ya que los gases generados deben evacuarse a la atmósfera.

El tubo de venteo debe tener la forma de "J" invertida, para evitar que entre basura o agua al reactor, para ello se deben acoplar dos codos de 90°.

J. Cálculo de las dimensiones de los tanques de alimentación

* *Cálculo de la capacidad de los tanques de alimentación:* Se calculó con los datos de volumen de cada ingrediente, de las Tablas No. 17 y 19, Págs. No. 91 y 92. Se tomó el valor más alto de volumen para cada ingrediente de ambas polimerizaciones. Como ejemplo calculará el volumen de solución de monómero.

Volumen del tanque para solución de monómero: V indica el volumen ocupado por cada ingrediente.

$$\begin{aligned} V_{\text{solución DADMAC}} &= V_{\text{monómero DADMAC}} + V_{\text{agua}} \\ &= 0.59 \text{ m}^3 + 0.33 \text{ m}^3 \\ &= 0.92 \text{ m}^3 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} V_{\text{solución acrilamida}} &= V_{\text{monómero acrilamida}} + V_{\text{agua}} \\ &= 0.89 \text{ m}^3 + 0.25 \text{ m}^3 \\ &= 1.14 \text{ m}^3 \end{aligned}$$

Para determinar la capacidad del tanque de alimentación de solución de monómero, se tomó el valor más grande de los volúmenes anteriores y se sobredimensionó un 30% para evitar derrames del líquido al agitar, para disolver el monómero sólido en el agua.

$$\begin{aligned} V_{\text{solución monómero}} &= V_{\text{solución acrilamida}} \times 1.30 \\ &= 1.14 \text{ m}^3 \times 1.30 \\ &= 1.48 \text{ m}^3 \end{aligned}$$

* *Cálculo de las dimensiones del tanque:* Se calculó el diámetro y altura de cada tanque a partir de la fórmula de volumen de un cilindro.

$$V_{\text{tanque solución de monómero}} = \pi r_T^2 h_T \quad \text{donde } r_T = D_T / 2 \text{ y } h_T = 1.5 D_T$$

donde, r_T es el radio, D_T es el diámetro y h_T es la altura del tanque.

$$\begin{aligned} 1.48 \text{ m}^3 &= \pi (D_T / 2)^2 \times 1.5 D_T \\ &= 0.375 \pi D_T^3 \quad \text{despejando } D_T \dots \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} D_T &= [1.48 \text{ m}^3 / (\pi \times 0.375 \text{ m})]^{1/3} \\ &= 1.07 \text{ m} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} h_T &= D_T \times 1.5 \\ &= 1.07 \text{ m} \times 1.5 \\ &= 1.62 \text{ m} \end{aligned}$$

* *Cálculo de los flujos de alimentación:*

Flujo de monómero:

El flujo de solución de monómero alimentado al reactor se calculó sólo para la polimerización de acrilamida, ya que este proceso exige que el monómero se alimente al reactor durante 1 hora (ver ejemplo de Patente No. 4,077,930, Pág. No. 42).

$$f_{\text{acrilamida}} = V_{\text{acrilamida}} / \theta_{\text{acrilamida}}$$

donde, $f_{\text{acrilamida}}$ es el flujo de solución de monómero, $V_{\text{acrilamida}}$ es el volumen total de solución de acrilamida (ver Tabla No. 19) y $\theta_{\text{acrilamida}}$ es el tiempo de adición de la solución de acrilamida en el proceso de polimerización.

$$\begin{aligned} q_{\text{acrilamida}} &= [(1.14 \text{ m}^3) / 1 \text{ hora}] \times (1 \text{ hora} / 3600 \text{ s}) \\ &= 0.000317 \text{ m}^3/\text{s} = 3.17 \text{ E}^{-4} \text{ m}^3/\text{s} \end{aligned}$$

Flujo de iniciador:

El flujo de alimentación del iniciador se aplica sólo para el t-butil peroxi pivalato en la polimerización de DADMAC. En la Patente No. 3,968,037 (ver Pág. No. 40) describe que el t-butil peroxi pivalato debe adicionarse durante 1 hora.

$$\begin{aligned} f_{t\text{-butil}} &= (0.000710 \text{ m}^3 / 1 \text{ hora}) (1 \text{ hora} / 3600 \text{ s}) \\ &= 1.97 \text{ E}^{-7} \text{ m}^3/\text{s} \end{aligned}$$

Flujo de aceite mineral y emulsificantes:

Para este cálculo se tomó el volumen más grande, en ambas polimerizaciones, de estos tres ingredientes. Se requieren 15 minutos para agregar estos ingredientes. El volumen más grande es el de aceite mineral, en la polimerización de DADMAC, 0.38 m^3 (Ver Tabla No. 17 ,Pág. No. 91)

$$\begin{aligned} q_{\text{aceite mineral}} &= V_{\text{aceite mineral}} / \theta_{\text{aceite mineral}} \\ &= (0.38 \text{ m}^3 / 15 \text{ min}) (1 \text{ min} / 60\text{s}) \\ &= 0.00042 \text{ m}^3/\text{s} = 4.22 \text{ E}^{-4} \text{ m}^3/\text{s} \end{aligned}$$

K. Cálculos del análisis económico

Se realizó un análisis económico para evaluar la rentabilidad del proyecto. Se calculó la inversión inicial a partir del costo total del equipo de fabricación de los polímeros, además se calculó el Capital de Trabajo, estimado para 6 meses, en base a los costos totales del primer año de producción. También se incluyó en la Inversión Inicial, el Registro de Marca, que representa el costo de registrar una nueva marca. Se estima que cada registro de marca vale Q 5,000.00 y por ser dos polímeros el costo asciende a Q 10,000.00.

El rubro de "Instalaciones" (Tabla No. 23, Pág. No. 109) se refiere al costo de la mano de obra para el montaje del equipo, donde también se incluye el costo de tuberías, válvulas y accesorios.

Tabla No. 22. Listado y costo del equipo

Equipo	Identificación	Capacidad	Costo (Q)	Proveedor
Reactor de polimerización, incluye: Agitador, chaqueta, sello mecánico, válvula de seguridad, venteo y distribuidor de nitrógeno.	R1	2 m ³	79,200.00	Talleres Hernández
Motorreductor de agitación del reactor	M1	14.9 KW	21,401.60	ABB Control
Bomba de doble diafragma	B1	0.55 KW	5,932.08	Hidasa
Bomba centrífuga agua enfriamiento	B2	0.37 KW	6,757.56	Hidasa
Bomba centrífuga de materia prima	B3	0.37 KW	6,757.56	Hidasa
Tanque solución de monómero	T1	1.15 m ³	30,800.00	Talleres Hernández
Tanque t-butil peroxi pivalato	T3	0.05 m ³	1,056.00	Talleres Hernández
Tanque Tween 85 y Span 85	T4	0.20 m ³	5,280.00	Talleres Hernández
Tanque aceite mineral	T5	0.5 m ³	3,520.00	Talleres Hernández
Tanque almacenamiento	T6	2.0 m ³	7,356.80	Tipic, S.A
Motorreductor agitación tanque monómero	M2	11.2 KW	16,321.10	Distribuidora técnica, S.A.
Motorreductor agitación para emulsificante	M4	1.49 KW	3,874.75	ABB Control
COSTO TOTAL EQUIPO =			188,257.43	

Tabla No. 23. Inversión inicial

ACTIVOS FIJOS	Q
1. Terrenos	-
2. Edificios e infraestructura	-
3. Maquinaria y equipo	188,257.43
4. Instalaciones	56,477.23
5. Vehículos	0.00
6. Mobiliario y equipo	0.00
TOTAL (Q) =	244,734.66
INVERSION DIFERIDA	
7. Gastos de organización	0.00
8. Imprevistos	24,473.47
TOTAL (Q) =	24,473.47
CAPITAL DE TRABAJO	3,096,269.09
REGISTROS DE MARCA	10,000.00
INVERSION INICIAL (Q) =	3,375,477.22

Tabla No. 24 . Costos y proveedores de materia prima

Materia Prima	Cantidad por lote (Kg)	Cantidad al año (Kg)	Costo unitario (Q/Kg)	Costo total anual (Q)	Presentación	Nombre del proveedor
Monómero DADMAC	612.38	70,423.70	16.72	1,177,484.26	Saco de 25 Kg	CIBA, Guatemala
Monómero acrilamida	1,000.00	115,000.00	14.60	1,679,000.00	Tonel de 1,066 Kg	Dahuachem International Economic and Trade Corp., China
Agua desmineralizada						
* Agua DADMAC	333.67	67,122.05	0.51	34,259.09	Garrafón de 18.9 L	Xajanal, Guatemala
* Agua acrilamida	250.00	28,750.00				
t-butil peroxi pivalato						
* Para DADMAC	0.60	2,359.80	101.00	238,339.80	Tonel de 55 gal	Arkema, Canadá
* Para acrilamida	19.92	2,290.80				
sulfato ferroso de amonio						
* Para DADMAC	0.01	7.68	99.50	763.90	50 Kg	Industrial & Safety Supplies, EEUU
* Para acrilamida	0.05	1.61				
		6.07				
Aceite mineral						
* Para DADMAC	353.17	69,364.55	8.80	610,408.04	Tonel de 55 gal	Brenntag, Guatemala
* Para acrilamida	250.00	40,614.55				
Varsol (espíritus minerales)						
	90.10	10,361.50	7.44	77,048.11	Tonel de 55 gal	Brenntag, Guatemala
Tween 85						
* Para DADMAC	22.53	12,710.95	94.21	1,197,498.60	20 L	The Lab Depot, Inc., EEUU
* Para acrilamida	88.00	2,590.95				
		10,120.00				
Span 85						
	8.00	920.00	146.28	134,577.60	20 L	The Lab Depot, Inc., EEUU
Nitrógeno gaseoso (m ³)						
	0.50	115.00	20.60	2,368.92	Tanques 6 m ³	Productos del Aire, S. A., Guatemala
TOTAL ANUAL MATERIA PRIMA =		348,270.23Kg	Q	5,151,748.34		

Tabla No. 25. Costos variables para la fabricación del polímero de DADMAC

MATERIA PRIMA	Cantidad (Kg)	Costo Unitario (Q/Kg)	
Monómero DADMAC	70,423.70	16.72	
Agua desmineralizada	38,372.05	0.51	
t-butyl peroxi pivalato	69.00	101.00	
sulfato ferroso de amonio	1.61	99.50	
Aceite mineral	40,614.55	8.80	
Varsol (espíritus minerales)	10,361.50	7.44	
Emulsificante Tween 85	2,590.95	94.21	
Nitrógeno gaseoso	57.50	20.60	
		TOTAL ANUAL (Q) =	1,883,932.57
MATERIAL DE EMPAQUE (garrafas de 15 gal)	Unidades	Costo unitario (Q/u)	
	3,058.96	52.36	
		TOTAL ANUAL (Q) =	160,167.17
MANO DE OBRA DIRECTA	No. Empleados	Costo mensual (Q/mes)	
Operarios	2	1,500.00	
		3,000.00	
Prestaciones mensuales	Planilla mensual =	4,234.80	
		TOTAL ANUAL (Q) =	43,408.80
ENERGÍA ELÉCTRICA	Potencia (KW)	Costo unitario (Q/KW-h)	
Agitación en la polimerización	34,302.20	3.5	
Preparación solución de monómero	644.00	"	
Preparación de solución Tween 85	85.68	"	
Evacuación del producto del reactor	16.07	"	
Agua de enfriamiento	936.10	"	
		TOTAL ANUAL (Q) =	125,944.16
DESPERDICIOS		TOTAL ANUAL (Q) =	12,000.00
		TOTAL COSTOS VARIABLES ANUALES =	2,189,278.70

Tabla No. 26. Costos variables para la fabricación del polímero de acrilamida

MATERIA PRIMA			
Monómero acrilamida	Cantidad (Kg)	Costo Unitario (Q/Kg)	
	115,000.00	14.60	
Agua desmineralizada	28,750.00	0.51	
t-butil peroxi pivalato	2,290.80	101.00	
sulfato ferroso de amonio	6.07	99.50	
Aceite mineral	28,750.00	8.80	
Emulsificante Tween 85	10,120.00	94.21	
Emulsificante Span 85	920.00	146.28	
Nitrógeno gaseoso	57.50	20.60	
		TOTAL ANUAL (Q) =	3,267,815.77
MATERIAL DE EMPAQUE			
(garrafas de 15 gal)	Unidades	Costo unitario (Q/u)	
	3,079.22	52.36	
		TOTAL ANUAL (Q) =	161,227.88
MANO DE OBRA DIRECTA			
Operarios	No. Empleados	Costo mensual (Q/mes)	
	2	1,500.00	
Prestaciones mensuales	Planilla mensual =	3,000.00	
		4,234.80	
		TOTAL ANUAL (Q) =	43,408.80
ENERGÍA ELÉCTRICA			
Agitación en la polimerización	Potencia (KW)	Costo unitario (Q/KW-h)	
	6,860.44	3.5	
Preparación solución de monómero	644.00	"	
Evacuación del producto del reactor	16.07	"	
Agua de enfriamiento	170.20	"	
		TOTAL ANUAL (Q) =	26,917.49
DESPERDICIOS			
		TOTAL ANUAL (Q) =	12,000.00
		TOTAL COSTOS VARIABLES ANUALES =	3,475,195.94

Tabla No. 27. Producción máxima anual de emulsiones poliméricas

	Polimerización	
	DADMAC	acrilamida
Lote	1	1
Día/lote	1	1
Producción al día (Kg)	1,412.11	1,607.85
Producción anual (Kg)	162,392.65	184,902.75
Producción anual (ton métricas)	162.39	184.90
Densidad (Kg/m ³)	935.17	1057.80
		TOTAL ANUAL =
		347,295.40 Kg
		347.30 Tm

Para calcular los costos fijos se utilizó una Tasa de Inflación del 7% para cada año en todos los elementos del costo.

Tabla No. 28. Costos fijos

Elemento de Costo	año 1	año 2	año 3	año 4	año 5	año 6	año 7	año 8	año 9	año 10
Sueldos y prestaciones	144,000.00	154,080.00	164,865.60	176,406.19	188,754.63	201,967.45	216,105.17	231,232.53	247,418.81	264,738.13
Gastos de oficina	36,000.00	38,520.00	41,216.40	44,101.55	47,188.66	50,491.86	54,026.29	57,808.13	61,854.70	66,184.53
Repuestos de vehículos	12,000.00	12,840.00	13,738.80	14,700.52	15,729.55	16,830.62	18,008.76	19,259.38	20,618.23	22,061.51
Otros	24,000.00	25,680.00	27,477.60	29,401.03	31,459.10	33,661.24	36,017.53	38,538.76	41,236.47	44,123.02
Comunicaciones	18,000.00	19,260.00	20,608.20	22,050.77	23,594.33	25,245.93	27,013.15	28,904.07	30,927.35	33,092.27
Electricidad de oficinas	14,400.00	15,408.00	16,486.56	17,640.62	18,875.46	20,196.74	21,610.52	23,123.25	24,741.88	26,473.81
Papelaría y gastos de oficina	6,000.00	6,420.00	6,869.40	7,350.26	7,864.78	8,415.31	9,004.38	9,634.69	10,309.12	11,030.76
Mantenimiento de producción	90,000.00	96,300.00	103,041.00	110,253.87	117,971.64	126,229.66	135,065.73	144,520.33	154,636.76	165,461.33
Mantenimiento de oficinas	6,000.00	6,420.00	6,869.40	7,350.26	7,864.78	8,415.31	9,004.38	9,634.69	10,309.12	11,030.76
Ventas										
Sueldos y prestaciones	60,000.00	64,200.00	68,694.00	73,502.58	78,647.76	84,153.10	90,043.82	96,346.89	103,091.17	110,307.55
Fletes y gastos de ventas	200,000.00	214,000.00	228,980.00	245,008.60	262,159.20	280,510.35	300,146.07	321,156.30	343,637.24	367,691.84
TOTAL (Q) =	610,400.00	653,128.00	698,846.96	747,766.25	800,109.88	856,117.58	916,045.81	980,169.01	1,048,780.84	1,122,195.50
Seguro de la fábrica	3,671.02	3,303.92	2,936.82	2,569.71	2,202.61	1,835.51	1,468.41	1,101.31	734.20	367.10
TOTAL (Q) =	614,071.02	656,431.92	701,783.78	750,335.96	802,312.50	857,953.09	917,514.21	981,270.32	1,049,515.05	1,122,562.61

Los precios de venta se fijaron en función de los precios de productos similares en el mercado. Se utilizó el tipo de cambio de USD 1.00 = Q 7.70. Además, se utilizó una tasa de inflación del 7% anual, para el determinar el Precio de Venta Unitario para cada emulsión polímero (Ver Tablas No.29 y 30).

La producción máxima de emulsión de polímero de DADMAC es 162,392.65 Kg, mientras que para la emulsión de polímero de acrilamida es 184,902.75 Kg.

Tabla No. 29. Costo unitario y precio de venta para el polímero de DADMAC

	año 1	año 2	año 3	año 4	año 5	año 6	año 7	año 8	año 9	año 10
Nivel de producción	50%	75%	85%	90%	90%	95%	95%	95%	95%	95%
Producción (Kg)	81,196.33	121,794.49	138,033.75	146,153.39	146,153.39	154,273.02	154,273.02	154,273.02	154,273.02	154,273.02
Costos variables (Q)	1,094,639.35	1,641,959.03	1,860,886.90	1,970,350.83	1,970,350.83	2,079,814.77	2,079,814.77	2,079,814.77	2,079,814.77	2,079,814.77
Costos fijos (Q)	614,071.02	656,431.92	701,783.78	750,335.96	802,312.50	857,953.09	917,514.21	981,270.32	1,049,515.05	1,122,562.61
COSTO UNITARIO (Q/Kg) =	21.04	18.87	18.57	18.62	18.97	19.04	19.43	19.84	20.28	20.76
Precio de venta unitario (Q/Kg)										
(USD 2.75/Kg polidADMAC) =	21.18	22.66	24.24	25.94	27.76	29.70	31.78	34.00	36.38	38.93
TOTAL DE VENTAS (Q) =	1,719,332.18	2,759,528.15	3,346,387.81	3,781,260.54	4,056,648.77	4,581,759.42	4,902,482.58	5,245,656.36	5,612,852.31	6,005,751.97

Tabla No. 33. Estado de resultados

	año 1	año 2	año 3	año 4	año 5	año 6	año 7	año 8	año 9	año 10
Ventas										
Polímero DADMAC (Q)	1,719,332.18	2,759,528.15	3,346,387.81	3,791,250.54	4,056,648.77	4,581,759.42	4,902,482.58	5,245,656.36	5,612,852.31	6,005,751.97
Polímero acrilamida (Q)	2,356,308.19	3,781,874.65	4,586,153.33	5,195,841.95	5,559,550.88	6,279,203.86	6,718,748.13	7,189,060.50	7,692,294.73	8,230,755.36
TOTAL (Q) =	4,075,640.38	6,541,402.80	7,932,541.13	8,987,102.48	9,616,199.66	10,860,963.28	11,621,230.71	12,434,716.86	13,305,147.04	14,236,507.33
Costos Variables										
Polímero DADMAC (Q)	1,094,639.35	1,641,959.03	1,860,886.90	1,970,350.83	1,970,350.83	2,079,814.77	2,079,814.77	2,079,814.77	2,079,814.77	2,079,814.77
Polímero acrilamida (Q)	1,737,597.97	2,606,396.95	2,953,916.55	3,127,676.35	3,127,676.35	3,301,436.14	3,301,436.14	3,301,436.14	3,301,436.14	3,301,436.14
TOTAL (Q) =	2,832,237.32	4,248,355.98	4,814,803.45	5,098,027.18	5,098,027.18	5,381,250.91	5,381,250.91	5,381,250.91	5,381,250.91	5,381,250.91
Utilidad Bruta (Q) =	1,243,403.06	2,293,046.82	3,117,737.69	3,889,075.31	4,518,172.48	5,479,712.37	6,239,979.80	7,053,465.95	7,923,896.13	8,855,256.42
Costos fijos (Q)	614,071.02	656,431.92	701,783.78	750,335.96	802,312.50	857,953.09	917,514.21	981,270.32	1,049,515.05	1,122,562.61
Comisión de ventas (Q)	40,756.40	65,414.03	79,325.41	89,871.02	96,162.00	108,609.63	116,212.31	124,347.17	133,051.47	142,365.07
Depreciación (Q)	24,473.47	24,473.47	24,473.47	24,473.47	24,473.47	24,473.47	24,473.47	24,473.47	24,473.47	24,473.47
Intereses (Q)	202,528.63	190,987.71	178,061.87	163,584.94	147,370.77	129,210.90	108,871.85	86,092.11	60,578.80	32,003.89
TOTAL (Q) =	881,829.52	937,307.12	983,644.53	1,028,265.39	1,070,318.73	1,120,247.08	1,167,071.83	1,216,183.06	1,267,618.78	1,321,405.04
Utilidad antes de impuestos (Q)	361,573.53	1,355,739.70	2,134,093.16	2,860,809.92	3,447,853.75	4,359,465.29	5,072,907.97	5,837,282.89	6,656,277.35	7,533,851.38
Impuestos (Q)	112,087.79	420,279.31	661,568.88	886,851.07	1,068,834.66	1,351,434.24	1,572,601.47	1,809,557.70	2,063,445.98	2,335,493.93
Utilidad Neta (Q) =	249,485.74	935,460.39	1,472,524.28	1,973,958.84	2,379,019.09	3,008,031.05	3,500,306.50	4,027,725.19	4,592,831.37	5,198,357.45

Tabla No. 34. Flujo de fondos del proyecto

	año 0	año 1	año 2	año 3	año 4	año 5	año 6	año 7	año 8	año 9	año 10
Utilidad antes de intereses e impuestos (Q)		564,102.17	1,546,727.41	2,312,155.03	3,024,394.85	3,595,224.52	4,489,676.19	5,181,779.81	5,923,375.00	6,716,856.15	7,565,655.28
Impuestos (Q)		112,087.79	420,279.31	661,568.88	886,851.07	1,068,834.66	1,351,434.24	1,572,601.47	1,809,557.70	2,063,445.98	2,335,493.93
Utilidad después de impuestos y antes de intereses (Q)		452,014.37	1,126,448.10	1,650,586.15	2,137,543.78	2,526,389.86	3,137,241.95	3,609,178.34	4,113,817.30	4,653,410.17	5,230,161.35
Depreciación (Q)		24,473.47	24,473.47	24,473.47	24,473.47	24,473.47	24,473.47	24,473.47	24,473.47	24,473.47	24,473.47
Flujo de fondos (Q) =	-3,375,477.22	476,487.84	1,150,921.57	1,675,059.62	2,162,017.25	2,550,863.32	3,161,715.41	3,633,651.81	4,138,290.77	4,677,883.63	5,254,834.82

Tabla No. 35. Rentabilidad del proyecto

	año 0	año 1	año 2	año 3	año 4	año 5	año 6	año 7	año 8	año 9	año 10
Flujo de fondos del proyecto (Q)	-3,375,477.22	476,487.84	1,150,921.57	1,675,059.62	2,162,017.25	2,550,863.32	3,161,715.41	3,633,651.81	4,138,290.77	4,677,883.63	5,254,834.82
VAN = Q	10,276,866.84	Se utilizó una tasa de descuento del 12% para el VAN.									
TIR =	45 %										

Tabla No. 38. Tiempo de recuperación de la inversión (TR)

	año 0	año 1	año 2	año 3	año 4	año 5	año 6	año 7	año 8	año 9	año 10
Flujo de fondos acumulativo (Q)	-1,687,738.61	-1,413,779.41	-453,845.55	1,043,152.20	3,041,584.51	5,445,077.07	8,477,581.58	12,002,361.54	16,054,560.20	20,671,865.04	25,894,695.96

TR = 2 años, 1 mes y 6 días

Se graficó los datos de la tabla anterior. El punto donde el flujo de fondos acumulativo es igual a cero, indica el período, en años, para recuperar la inversión. Para calcular el tiempo de recuperación de la inversión, se realizó una regresión polinomial, se igualó a cero y se despejó el año. La inversión se recupera al inicio del segundo año.

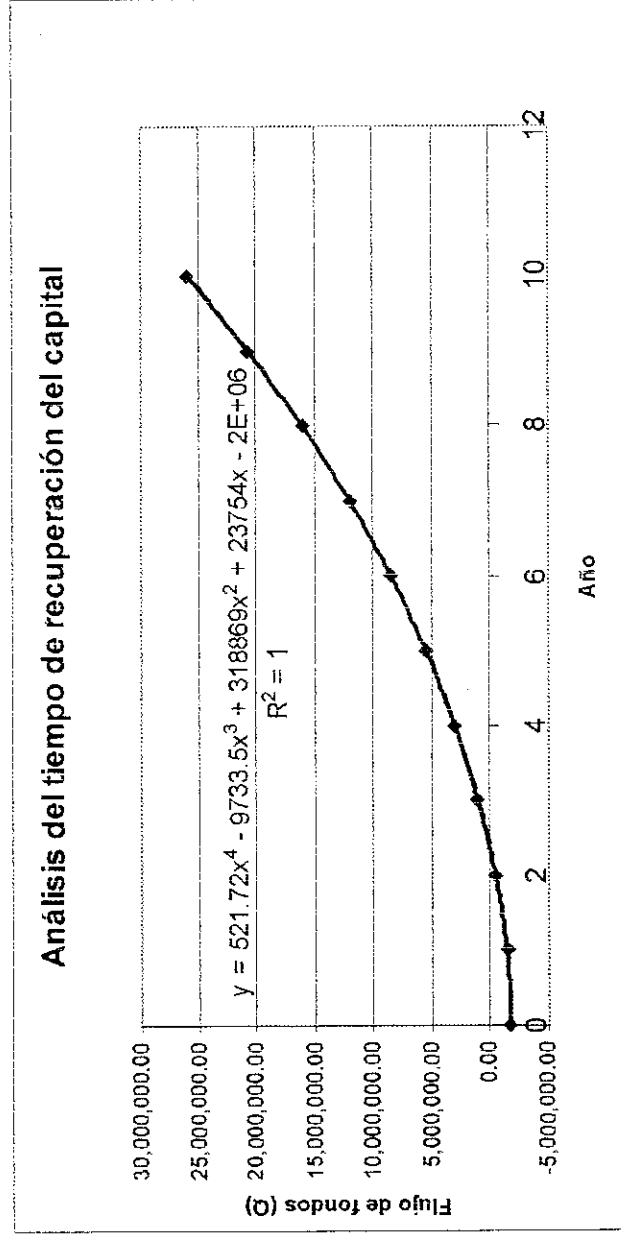


Tabla No. 40. Punto de equilibrio para el polimero de acrilamida

	año 0	año 1	año 2	año 3	año 4	año 5	año 6	año 7	año 8	año 9	año 10
Producción (Kg)	0.00	62,461.38	1,249,227.76	1,873,841.74	2,500,000.00	3,127,633.42	3,755,267.00	4,382,900.58	5,010,534.16	5,638,167.74	6,265,801.32
Costos variables (Q)	0.00	737,597.61	2,468,390.96	3,603,071.26	4,737,751.56	5,872,431.86	7,007,112.16	8,141,792.46	9,276,472.76	10,411,153.06	11,545,833.36
Costos fijos (Q)	614,071.09	614,071.09	614,071.09	614,071.09	614,071.09	614,071.09	614,071.09	614,071.09	614,071.09	614,071.09	614,071.09
Costos totales (Q)	614,071.09	1,351,668.70	3,282,462.05	4,217,142.35	5,351,822.65	6,485,902.95	7,620,183.25	8,754,463.55	9,888,743.85	11,023,024.15	12,157,304.45
Ventas (Q)	0	2,159,308.13	4,318,616.26	6,477,924.39	8,637,232.52	10,796,540.65	12,955,848.78	15,115,156.91	17,274,465.04	19,433,773.17	21,593,081.30

Punto de equilibrio:

Producción (Kg) = 92,461.38

Ventas (Q) = 2,356,308.19

Punto de equilibrio del polimero de acrilamida

Costos variables (Q)	6,000,000.00
Costos fijos (Q)	7,000,000.00
Costos totales (Q)	13,000,000.00
Ventas (Q)	14,000,000.00

Unidades monetarias (Q)

Producción (Kg)

Producción (Kg)

