

UNIVERSIDAD DEL VALLE DE GUATEMALA

Facultad de Ingeniería



**Producción de Resina de Intercambio Iónico por Reciclado
Químico de Poliestireno Expandido por Sulfonación y
Entrecruzamiento**

Trabajo de graduación en modalidad de tesis presentado por Evelyn Gabriela
Bardales España

para optar por el grado académico de Licenciada en Ingeniería Química

Guatemala,

2022

UNIVERSIDAD DEL VALLE DE GUATEMALA

Facultad de Ingeniería



**Producción de Resina de Intercambio Iónico por Reciclado
Químico de Poliestireno Expandido por Sulfonación y
Entrecruzamiento**

Trabajo de graduación en modalidad de tesis presentado por Evelyn Gabriela
Bardales España

para optar por el grado académico de Licenciada en Ingeniería Química

Guatemala,

2022

Vo. Bo. :

(f)



MSc. & MBA Ing. Luis Ernesto Núñez González

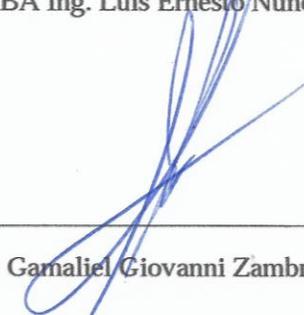
Tribunal Examinador:

(f)



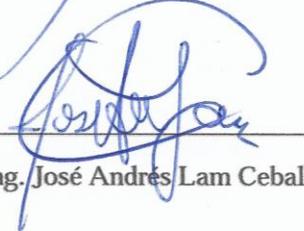
MSc. & MBA Ing. Luis Ernesto Núñez González

(f)



MSc. Ing. Gamaliel Giovanni Zambrano Ruano

(f)



Ing. José Andrés Lam Ceballos

Fecha de aprobación: Guatemala 17 de Junio de 2022

PREFACIO

La elaboración de la presente tesis ha sido posible gracias a la Fundación Juan Bautista Gutiérrez quienes me dieron la oportunidad de estudiar Ingeniería Química en la Universidad del Valle de Guatemala.

Quiero agradecer, en primer lugar, a todas aquellas personas que me han acompañado en el transcurso de la carrera, especialmente a mi mamá Evelyn, mi hermano Eduardo, mi abuela Gloria, mi tío Renatto, mi tío Erick y mi novio Raúl, quienes me impulsaron a dar lo mejor de mí siempre y me dieron su apoyo incondicional. Al resto de mi familia y a mis amigos por acompañarme con su alegría y apoyo. También quiero agradecer a mis coaches de la Fundación Juan Bautista Gutiérrez quienes me brindaron mucho apoyo, herramientas y sobre todo mucho cariño, especialmente a Doña Isabelita que creyó en mí y me dio la oportunidad de estudiar la carrera de mis sueños en la mejor universidad de Guatemala.

Además, quiero agradecerles a mis catedráticos de la universidad, especialmente al Ing. Luis Núñez quien me guió, orientó y me compartió sus conocimientos para la elaboración del presente trabajo de graduación. También, al Ing. Gamaliel Zambrano, director de la carrera de Ingeniería Química por su gran apoyo y enseñanzas durante los cinco años de la carrera.

A todos ellos reitero mi más sincero agradecimiento

ÍNDICE

Hoja de aprobación.....	II
Prefacio	III
Índice.....	IV
Lista de cuadros.....	VI
Lista de figuras	IX
Resumen	XI
I. Introducción.....	1
II. Objetivos.....	2
III. Justificación.....	3
IV. Marco teórico	5
A. Poliestireno.....	5
1. Aditivos del poliestireno.....	7
2. Poliestireno expandido (EPS)	7
B. Reciclaje de EPS	12
1. Reciclaje mecánico	12
2. Reciclaje químico	12
3. Reciclaje energético.....	13
C. Uso de poliestireno y poliestireno expandido	13
1. Nivel mundial	13
2. Guatemala.....	15
D. Sulfonación de materiales poliméricos.....	16
1. Sulfonación del poliestireno	17
E. Intercambio iónico	19
1. Técnicas y aplicaciones.....	20
2. Rapidez de intercambio iónico.....	21
3. Intercambio iónico en lecho fijo	21
4. Equilibrios.....	22
F. Resinas de intercambio iónico.....	22
1. Mecanismos de intercambio iónico.....	23
2. Clasificación de las resinas de intercambio iónico.....	23
G. Aplicación del PS sulfonado entrecruzado como intercambiador de iones	25
1. Coeficiente de distribución de Freundlich	25
H. Espectroscopía infrarroja.....	26
1. Región infrarroja.....	26
2. Vibraciones moleculares.....	26

I.	Economía circular	27
J.	Análisis financiero y análisis coste-beneficio	28
K.	Estadística	29
1.	Población y muestra.....	29
2.	Medidas de tendencial central.....	30
3.	Media aritmética	30
4.	Medidas de dispersión	30
V.	Antecedentes.....	31
VI.	Metodología	33
	Reactivos y equipos	33
	ETAPA 1: Preparación de poliestireno sulfonado entrecruzado.....	33
1.1	Pretratamiento	34
1.2	Reacción	34
	ETAPA 2: Determinación de la capacidad de retención de calcio y magnesio de resina.....	34
	ETAPA 3: Determinación de solubilidad, densidad, capacidad de retención de agua, grado de sulfonación y grupos funcionales del poliestireno sulfonado entrecruzado.....	35
3.1	Solubilidad.....	35
3.2	Densidad de retrolavado	35
3.3	Retención de agua.....	35
3.4	Grado de sulfonación.....	35
3.5	Grupos funcionales	35
	ETAPA 4: Análisis costo/beneficio de la resina obtenida del poliestireno sulfonado entrecruzado.....	35
	Registro de datos.....	36
VII.	Resultados	39
VIII.	Análisis de resultados.....	45
IX.	Conclusiones	51
X.	Recomendaciones	52
XI.	Bibliografía	53
XII.	Anexo	56
A.	Espectros IR obtenidos para las muestras de poliestireno sulfonado entrecruzado	56
B.	Datos calculados.....	71
C.	Datos originales.....	80
D.	Cálculos de muestra	90
E.	Análisis de error	95
F.	Imágenes de productos obtenidos de la reacción de sulfonación y entrecruzamiento de poliestireno.....	98
G.	Hoja de especificación de óleum.....	106

LISTA DE CUADROS

Cuadro 1. Uso de estireno en porcentajes.....	7
Cuadro 2. Propiedades del poliestireno expandido al variar su densidad.....	8
Cuadro 3. Estabilidad química del poliestireno expandido.....	9
Cuadro 4. Resistencia de los diferentes tipos de poliestireno expandido a los agentes químicos.....	10
Cuadro 5. Rendimiento de la reacción de sulfonación y entrecruzamiento del poliestireno con diferentes tiempos y proporciones de óleum.....	39
Cuadro 6. Evaluación visual de los productos obtenidos de la reacción de sulfonación y entrecruzamiento de poliestireno a diferentes condiciones.....	40
Cuadro 7. Capacidad de retención de calcio de los productos obtenidos de la reacción de sulfonación y entrecruzamiento de poliestireno a diferentes condiciones.....	40
Cuadro 8. Capacidad de retención de magnesio de los productos obtenidos de la reacción de sulfonación y entrecruzamiento de poliestireno a diferentes condiciones.....	41
Cuadro 9. Variables de reacción seleccionada con mejores resultados rendimiento/eficiencia.....	41
Cuadro 10. Grupos funcionales del producto de reacción obtenido con variables seleccionadas de 30% (v/m) óleum y 2 horas de reacción obtenidos de espectro IR.....	42
Cuadro 11. Solubilidad cualitativa de del producto de reacción obtenido con variables seleccionadas de 30% (v/m) óleum y 2 horas de reacción.....	42
Cuadro 12. Densidad, retención de agua y coeficiente de transferencia de del producto de reacción obtenido con variables seleccionadas de 30% (v/m) óleum y 2 horas de reacción.....	43
Cuadro 13. Costo por kg del producto de reacción obtenido con variables seleccionadas de 30% (v/m) óleum y 2 horas y precio promedio de resinas de intercambio iónico comerciales.....	43
Cuadro 14. Grupos funcionales del producto de reacción obtenido con variables de 20% (v/m) óleum y 1 hora de reacción obtenidos de espectro IR.....	63
Cuadro 15. Grupos funcionales del producto de reacción obtenido con variables de 20% (v/m) óleum y 2 horas de reacción obtenidos de espectro IR.....	64
Cuadro 16. Grupos funcionales del producto de reacción obtenido con variables de 20% (v/m) óleum y 3 horas de reacción obtenidos de espectro IR.....	65
Cuadro 17. Grupos funcionales del producto de reacción obtenido con variables de 30% (v/m) óleum y 1 hora de reacción obtenidos de espectro IR.....	66
Cuadro 18. Grupos funcionales del producto de reacción obtenido con variables de 30% (v/m) óleum y 3 horas de reacción obtenidos de espectro IR.....	66
Cuadro 19. Grupos funcionales del producto de reacción obtenido con variables de 40% (v/m) óleum y 1 hora de reacción obtenidos de espectro IR.....	67
Cuadro 20. Grupos funcionales del producto de reacción obtenido con variables de 40% (v/m) óleum y 2 horas de reacción obtenidos de espectro IR.....	68
Cuadro 21. Grupos funcionales del producto de reacción obtenido con variables de 40% (v/m) óleum y 3 horas de reacción obtenidos de espectro IR.....	68
Cuadro 22. Grupos funcionales del producto de reacción obtenido con variables de 50% (v/m) óleum y 1 hora de reacción obtenidos de espectro IR.....	69

Cuadro 23. Grupos funcionales del producto de reacción obtenido con variables de 50% (v/m) óleum y 2 horas de reacción obtenidos de espectro IR.	70
Cuadro 24. Grupos funcionales del producto de reacción obtenido con variables de 50% (v/m) óleum y 3 horas de reacción obtenidos de espectro IR.	71
Cuadro 25. Densidad de 12 productos de reacción de sulfonación y entrecruzamiento obtenidos a distintas condiciones de porcentaje (v/m) de óleum y tiempo de reacción.	71
Cuadro 26. Porcentaje de retención de agua (%MC) de 12 productos de reacción de sulfonación y entrecruzamiento obtenidos a distintas condiciones de porcentaje (v/m) de óleum y tiempo de reacción.	72
Cuadro 27. Solubilidad cualitativa del producto de reacción obtenido con variables de 20% (v/m) óleum.	73
Cuadro 28. Solubilidad cualitativa del producto de reacción obtenido con variables de 30% (v/m) óleum.	74
Cuadro 29. Solubilidad cualitativa del producto de reacción obtenido con variables de 40% (v/m) óleum.	74
Cuadro 30. Solubilidad cualitativa del producto de reacción obtenido con variables de 50% (v/m) óleum.	74
Cuadro 31. Coeficiente de transferencia de masa del producto de reacción obtenido con variables seleccionadas de 30% (v/m) óleum y 2 horas de reacción y resinas de intercambio iónico comerciales.	75
Cuadro 32. Costo/kg de 12 productos de reacción de sulfonación y entrecruzamiento obtenidos a distintas condiciones de porcentaje (v/m) de óleum y tiempo de reacción.	75
Cuadro 33. Flujo de efectivo para la puesta en marcha de proyecto de reciclado químico de poliestireno sulfonado en planta industrial.	77
Cuadro 34. Pérdidas, costos e ingresos de propuesta de puesta en marcha de reciclado químico de poliestireno en planta industrial para el análisis costo/beneficio del proyecto.	79
Cuadro 35. Coste medio ponderado del capital para el proceso de valoración del proyecto de reciclado químico de poliestireno en planta industrial.	80
Cuadro 36. Masa de poliestireno, reactivos y producto reacción de sulfonación y entrecruzamiento con diferentes tiempos y proporciones (v/m) de óleum corrida 1.	80
Cuadro 37. Masa de poliestireno, reactivos y producto reacción de sulfonación y entrecruzamiento con diferentes tiempos y proporciones (v/m) de óleum corrida 2.	81
Cuadro 38. Masa de poliestireno, reactivos y producto reacción de sulfonación y entrecruzamiento con diferentes tiempos y proporciones (v/m) de óleum corrida 3.	81
Cuadro 39. Porcentaje de retención de calcio y magnesio (m/v) del producto de reacción obtenido con variables de 20% (v/m) óleum.	82
Cuadro 40. Porcentaje de retención de calcio y magnesio (m/v) del producto de reacción obtenido con variables de 30% (v/m) óleum.	82
Cuadro 41. Porcentaje de retención de calcio y magnesio (m/v) del producto de reacción obtenido con variables de 40% (v/m) óleum.	83
Cuadro 42. Porcentaje de retención de calcio y magnesio (m/v) del producto de reacción obtenido con variables de 50% (v/m) óleum.	83
Cuadro 43. Datos originales para el cálculo de densidad (g/mL) del producto de reacción obtenido con variables de 20% (v/m) óleum.	84

Cuadro 44. Datos originales para el cálculo de densidad (g/mL) del producto de reacción obtenido con variables de 30% óleum (v/m).....	84
Cuadro 45. Datos originales para el cálculo de densidad (g/mL) del producto de reacción obtenido con variables de 40% óleum (v/m).....	85
Cuadro 46. Datos originales para el cálculo de densidad (g/mL) del producto de reacción obtenido con variables de 50% óleum (v/m).....	85
Cuadro 47. Porcentaje de retención de agua (%MC) de 12 productos de reacción de sulfonación y entrecruzamiento con diferentes tiempos y proporciones (v/m) de óleum corrida 1.	86
Cuadro 48. Porcentaje de retención de agua (%MC) de 12 productos de reacción de sulfonación y entrecruzamiento con diferentes tiempos y proporciones (v/m) de óleum corrida 2.	86
Cuadro 49. Porcentaje de retención de agua (%MC) de 12 productos de reacción de sulfonación y entrecruzamiento con diferentes tiempos y proporciones (v/m) de óleum corrida 3.	87
Cuadro 50. Datos originales para la gráfica de incremento del peso relativo del producto con variables seleccionadas de 30% (v/m) y 2 horas de reacción en función del tiempo en minutos durante el proceso de entrecruzamiento.....	88
Cuadro 51. Datos originales para el cálculo del coeficiente de transferencia de masa del producto con variables seleccionadas de 30% (v/m) y 2 horas de reacción y resina comercial.	89
Cuadro 52. Precios de reactivos utilizados para la producción de poliestireno sulfonado entrecruzado utilizados para el cálculo de costo/kg de producto.	89
Cuadro 53. Costos de servicios utilizados para la producción de poliestireno sulfonado entrecruzado en escala laboratorio.	89
Cuadro 54. Precio de resinas comerciales compuesta por gel poliestireno catión ácido fuerte.	90

LISTA DE FIGURAS

Figura 1. Estructura de estireno.	5
Figura 2. Estructura del poliestireno.	5
Figura 3. Macromolécula de poliestireno.	6
Figura 4. Identificación del poliestireno según código de identificación de plásticos.	6
Figura 5. Perlas de poliestireno expandido comercial.	11
Figura 6. Poliestireno expandido para embalaje.	11
Figura 7. Poliestireno expandido para aislamiento.	11
Figura 8. Poliestireno expandido para empaque de alimentos.	11
Figura 9. Consumo global de poliestireno expandido en el año 2020	14
Figura 10. Consumo global de poliestireno expandido.	14
Figura 11. Reacción química de la formación de poliestireno sulfonado.	17
Figura 12. (a) Reacción entre PS y óleum. (b) Estructura química del poliestireno sulfonado entrecruzado.	18
Figura 13. Reacción entre estireno, divinilbenceno y estireno sulfonado de sodio.	19
Figura 14. Progreso de la concentración en un lecho de intercambio iónico.	21
Figura 15. Copolímero de PS-divinilbenceno sulfonado.	22
Figura 16. Muestra de resina de intercambio iónico en forma de perla.	23
Figura 17. Estructuras moleculares de polímeros sintéticos con aplicación en intercambio iónico.	24
Figura 18. Intercambio iónico entre el PS sulfonado entrecruzado y cromo hexavalente.	25
Figura 19. Ejemplo de espectro IR.	27
Figura 20. Principios de la economía circular.	28
Figura 21. Comparación de rendimiento de reacción de 12 muestras de producto obtenidas de la reacción de sulfonación y entrecruzamiento de poliestireno a diferentes condiciones.	39
Figura 22. Incremento del peso relativo de la muestra de producto con variables seleccionadas de 30% (v/m) y 2 horas de reacción en función del tiempo en minutos durante el proceso de entrecruzamiento.	43
Figura 23. Análisis costo/beneficio del producto de reacción obtenido con variables seleccionadas de 30% (v/m) óleum y 2 horas	44
Figura 24. Espectro IR del producto de reacción obtenido con variables seleccionadas de 30% (v/m) óleum y 2 horas de reacción para la determinación de los grupos funcionales de la molécula.	56
Figura 25. Espectro IR del producto de reacción obtenido con variables de 20% (v/m) óleum y 1 hora de reacción para la determinación de los grupos funcionales de la molécula.	56
Figura 26. Espectro IR del producto de reacción obtenido con variables de 20% (v/m) óleum y 2 horas de reacción para la determinación de los grupos funcionales de la molécula.	57
Figura 27. Espectro IR del producto de reacción obtenido con variables de 20% (v/m) óleum y 3 horas de reacción para la determinación de los grupos funcionales de la molécula.	57
Figura 28. Espectro IR del producto de reacción obtenido con variables de 30% (v/m) óleum y 1 hora de reacción para la determinación de los grupos funcionales de la molécula.	58

Figura 29. Espectro IR del producto de reacción obtenido con variables de 30% (v/m) óleum y 3 horas de reacción para la determinación de los grupos funcionales de la molécula.	58
Figura 30. Espectro IR del producto de reacción obtenido con variables de 40% (v/m) óleum y 1 horas de reacción para la determinación de los grupos funcionales de la molécula.	59
Figura 31. Espectro IR del producto de reacción obtenido con variables de 40% (v/m) óleum y 2 horas de reacción para la determinación de los grupos funcionales de la molécula.	59
Figura 32. Espectro IR del producto de reacción obtenido con variables de 40% (v/m) óleum y 3 horas de reacción para la determinación de los grupos funcionales de la molécula.	60
Figura 33. Espectro IR del producto de reacción obtenido con variables de 50% (v/m) óleum y 1 horas de reacción para la determinación de los grupos funcionales de la molécula.	60
Figura 34. Espectro IR del producto de reacción obtenido con variables de 50% (v/m) óleum y 2 horas de reacción para la determinación de los grupos funcionales de la molécula.	61
Figura 35. Espectro IR del producto de reacción obtenido con variables de 50% (v/m) óleum y 3 horas de reacción para la determinación de los grupos funcionales de la molécula.	61
Figura 36. Espectros IR sobrepuestos de 12 productos de reacción de sulfonación y entrecruzamiento obtenidos a distintas condiciones de porcentaje (v/m) de óleum y tiempo de reacción.	62
Figura 37. Espectro IR de muestra de poliestireno utilizado para las reacciones de sulfonación y entrecruzamiento.	63
Figura 38. Comparación de densidad de 12 productos de reacción de sulfonación y entrecruzamiento obtenidos a distintas condiciones de porcentaje (v/m) de óleum y tiempo de reacción.	72
Figura 39. Comparación de porcentaje de retención de agua (%MC) de 12 productos de reacción de sulfonación y entrecruzamiento obtenidos a distintas condiciones de porcentaje (v/m) de óleum y tiempo de reacción.	73
Figura 40. Comparación del costo/kg de 12 productos de reacción de sulfonación y entrecruzamiento obtenidos a distintas condiciones de porcentaje (v/m) de óleum y tiempo de reacción.	76

RESUMEN

El objetivo de la presente investigación fue evaluar el proceso de reciclado químico para la producción de resina de intercambio iónico por reciclaje químico de poliestireno expandido por sulfonación y entrecruzamiento, con el fin de obtener una alternativa para los residuos de dicho polímero y promover la aplicación de la economía circular. Para lograrlo, se modificó la estructura del poliestireno a través de una reacción química con ácido sulfúrico y óleum, obteniendo una modificación del polímero que teóricamente se trata de poliestireno sulfonado entrecruzado, el cual se comprobó experimentalmente que es un material con propiedades similares a una resina de intercambio iónico. La reacción se llevó a cabo a diferentes concentraciones de óleum y con diferentes tiempos de reacción, para evaluar las características del producto y obtener los mejores resultados de producción de resina, la cual se enfoca para uso en el proceso de tratamiento de agua en la etapa de suavizado. De esta manera se determinó que las variables que presentaron mejor relación rendimiento/eficacia fue con 30% v/m de óleum y un tiempo de reacción de 2 horas, con lo que se obtuvo un rendimiento de 90.33% m/m y una capacidad de retención de calcio de 85.00% m/v y de retención de magnesio de 85.24% m/v. El producto de la reacción fue analizado por espectroscopía IR en donde se determinó que posee los grupos funcionales teóricamente necesarios para su uso como intercambiador iónico; además, se determinó que el coeficiente de transferencia de masa del producto es de 0.8191 kg/m²s. Las propiedades presentadas por el poliestireno sulfonado entrecruzado concuerdan con las propiedades de una resina de intercambio iónico comercial, por lo cual se determinó que el reciclado químico de poliestireno puede realizarse con la metodología presentada en este trabajo y es una alternativa para dicho material.

I. INTRODUCCIÓN

El poliestireno expandido (EPS) es un material polimérico y espumado el cual es usado en diversas aplicaciones y sectores de la industria, es un empaque predilecto para empaque de electrodomésticos, embalaje de alimentos, aislantes y hormigones ligeros. Es un polímero de baja densidad, liviano, proviene del petróleo, por lo que es un residuo de alto valor, de fácil reciclaje y abundante (Arandes, Bilbao, & López, 2004).

El poliestireno expandido es un residuo contaminante para el ambiente debido a que no se degrada por su naturaleza inerte; también, llega a cuerpos de agua en donde los animales lo ingieren llenando su sistema de plástico no digerible, lo que les produce muerte por inanición (IndustryAlliancePackaging, 2009). Esta problemática generada por los residuos de poliestireno expandido ha sido un tema de interés en Guatemala actualmente ya que, al no tener solución para su acumulación en los vertederos, se intentó prohibir su uso. Sin embargo, esto no evita que se sigan produciendo empaques de este tipo de polímeros por ser de fácil producción y de gran utilidad.

Para este material el reúso no es una opción rentable por lo que se opta por el reciclaje químico, el cual es un proceso de transformación fisicoquímica en la cual su estructura se modifica para obtener un material secundario valioso. El reciclado químico del poliestireno se realiza con una reacción de sulfonación y entrecruzamiento. La sulfonación se refiere a la fijación química del grupo sulfónico ($-SO_3H$), y el entrecruzamiento es identificado como un grupo sulfona ($Ar-SO_2-Ar$), este es un entrecruzamiento de bencensulfonato con un nuevo anillo aromático de otra cadena polimérica. Dentro del campo de reciclaje químico la técnica de sulfonación y entrecruzamiento es utilizada para producir materiales que pueden ser usados como resina. El poliestireno sulfonado entrecruzado teóricamente es un material con la capacidad de intercambiar iones con la solución con la que se pone en contacto ya que no todo el poliestireno se encuentra entrecruzado por lo que los grupos sulfónicos que quedan libres sirven de intercambiadores para atrapar minerales provenientes de corrientes acuosas. Esta es una reacción química de sustitución parecida a la de adsorción. Las resinas de intercambio iónico tienen diversos usos, en el presente trabajo se evaluará su uso para tratamiento de agua en la etapa de remoción de calcio y magnesio, que consiste en hacer pasar una corriente de agua a través de un lecho fijo de resina con el cual se atrapan los iones de calcio y magnesio por los grupos sulfónicos libres de la resina.

II. OBJETIVOS

A. General

Evaluar el proceso de producción de resina de intercambio iónico por reciclado químico de poliestireno expandido por sulfonación y entrecruzamiento.

B. Específicos

1. Evaluar el producto obtenido de la sulfonación y entrecruzamiento de poliestireno expandido con diferentes proporciones de agente sulfonante y tiempo de reacción para obtener el mayor rendimiento.
2. Determinar la capacidad de retención de calcio y magnesio de la resina obtenida con la reacción de poliestireno expandido utilizando ácido sulfúrico y trióxido de azufre a diferentes condiciones.
3. Evaluar la solubilidad, densidad, capacidad de retención de agua, grado de sulfonación y grupos funcionales del poliestireno sulfonado entrecruzado para su uso como resina de intercambio iónico.
4. Hacer un análisis costo/beneficio del proceso de sulfonación comparándolo con resinas disponibles comercialmente.

III. JUSTIFICACIÓN

El poliestireno expandido es considerado especialmente problemático debido a su baja densidad, el peso ligero implica que no se compacta, siendo el transporte muy costoso y, además, se considera no biodegradable, por lo que ocupa grandes espacios por mucho tiempo en los vertederos. Diez mil toneladas métricas de basura se producen cada día en Guatemala, dentro de las cuales el 12% representa plásticos de un solo uso, especialmente pajillas, vasos, bolsas, bandejas, cubiertos los cuales principalmente son de poliestireno y poliestireno expandido, estos materiales tienen un uso promedio de 45 minutos, pero tardan 500 años en degradarse en vertederos (Pérez, 2017). En el 2020 la demanda mundial de EPS fue de aproximadamente 5.5 millones de toneladas métricas, siendo el mayor consumidor Asia (53%), seguido por Europa (27%), Norte América (11%) y el resto del mundo (9%) (Markit, Chemical Economics Handbook, Expandable Polystyrene, 2021).

En el 2018 el Gobierno de Guatemala prohibió el uso y distribución de bolsas plásticas de un solo uso y otros elementos de este material con el fin de contribuir a la protección del medio ambiente. La restricción implicaba pajillas plásticas, platos y vasos, contenedores o recipientes para almacenar alimentos ya sean de plástico o de poliestireno expandido. Se fijó un plazo de dos años para que estos artículos sean sustituidos definitivamente por otros, elaborados con material compostable que cumpla con la norma de la Unión Europea UNE-EN-13432 (Reyes, 2020). En el 2021 el Ministerio de Ambiente y Recursos Naturales hizo vigente el Acuerdo Gubernativo 164-2021 que deroga la prohibición de plásticos de un solo uso, teniendo como enfoque principal la gestión integral de los residuos y desechos sólidos comunes; ya que el Acuerdo 189-2019 no eliminaba el problema de la contaminación. Además, la falta de información sobre productos degradables generó diversos problemas. Causando que en las comunidades los pobladores enterraban las bolsas plásticas “biodegradables” pensando que de esta manera desaparecerían.

El EPS presenta grandes ventajas y versatilidad en su uso, pero tiene la desventaja de que puede ser un material desechable. Este es muy usado en el sector de servicios de alimentos debido a que es un buen aislante, manteniendo la temperatura del contenido por más tiempo, es seguro su contacto con alimentos, puede reducir las enfermedades transmitidas por los alimentos en hospitales, escuelas, cafeterías y restaurantes, además es más económico; por lo que es un material difícil de reemplazar.

Por esta razón se deben de buscar alternativas para el residuo de materiales como el poliestireno expandido, para que tengan usos secundarios que promuevan la economía circular disminuyendo así el impacto ambiental de estos. El reciclaje químico es una alternativa para darle un nuevo uso a desechos de poliestireno y poliestireno expandido, de manera que se produce un nuevo material utilizando los desechos de otro. En Guatemala no hay información técnica del reciclaje químico, por lo cual es necesario realizar investigaciones que provean alternativas para materiales con los cuales no es viable el desecho, el reúso o el reciclado mecánico. Por esta razón, se realizó la presente investigación para determinar información técnica

que pueda ser base para un futuro escalamiento a un proceso industrial de reciclado químico de poliestireno expandido. Con la presente investigación se determinaron variables, estructura y características del producto que permiten hacer uso de este para el tratamiento de agua en la etapa de remoción de calcio y magnesio, ya que es un producto similar a una resina de intercambio catiónico de ácido fuerte.

IV. MARCO TEÓRICO

A. Poliestireno

El poliestireno es un termoplástico (se ablanda al calentarse y se endurece al enfriarse, este proceso es reversible y repetible) con muchas propiedades deseables. Es diáfano, transparente, fácilmente coloreable y fácil de fabricar. Posee propiedades mecánicas y térmicas buenas, pero es ligeramente frágil y se ablanda a 100°C. Es un polímero extensamente usado en la vida cotidiana debido a su durabilidad y su estabilidad química, mecánica y dimensional. Es usado en aplicaciones como manufactura de envases, empaques de productos alimenticios y embalaje para productos electrónicos; también tiene aplicaciones industriales, como componentes mecánicos y sensores químicos, biológicos y ópticos (Billmeyer, 1975).

El estireno se forma a partir de benceno y etileno, tiene una gran tendencia a reaccionar consigo mismo y polimerizar, incluso a temperatura ambiente, cuando se somete a radiaciones luminosas o entra en contacto con el oxígeno del aire. El almacenaje del monómero debe de hacerse con adición previa de inhibidores para evitar la polimerización. La mayoría del poliestireno se forma ya por polimerización en suspensión o por polimerización en masa, siendo esta última el método más utilizado hoy en día. En la polimerización en masa el estireno recibe un tratamiento exclusivamente térmico o se le agregan iniciadores adicionales que lo excitan para la reacción. La polimerización del estireno puro da como resultado un poliestireno puro el cual es un sólido incoloro, rígido, frágil y con flexibilidad limitada (Chatterjee & Prasad, 2011).

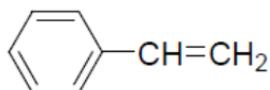


Figura 1. Estructura de estireno.

(Sanz, 2019)

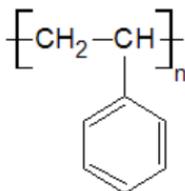


Figura 2. Estructura del poliestireno.

(Chatterjee & Prasad, 2011)

El poliestireno es un polímero lineal, es un producto comercial atáctico y amorfo, esto quiere decir que tiene una temperatura de transición vítrea de aproximadamente 100°C. Consta fundamentalmente de cadenas macromoleculares con ramificaciones. Los grupos de benceno laterales son los que le dan la característica de ser una molécula atáctica. El poliestireno es relativamente inerte químicamente. Es bastante resistente a los álcalis, haluros de ácidos, a los agentes oxidantes y reductores. Este polímero se degrada a temperaturas elevadas a una mezcla de compuestos de bajo peso molecular, siendo aproximadamente la mitad de ellos estireno (Billmeyer, 1975).

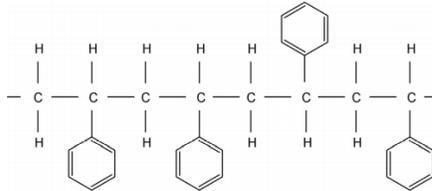


Figura 3. Macromolécula de poliestireno.

(Chatterjee & Prasad, 2011)

Una vez hecho, el poliestireno es fácil de procesar. Su estabilidad y fluidez en condiciones de moldeo inyectado lo hacen un polímero ideal para esta técnica. Sus propiedades ópticas son excelentes y su elevado índice de refracción lo hace útil para componentes ópticos de plástico. El poliestireno es un buen aislante eléctrico y tiene un factor de pérdida dieléctrica bajo a frecuencias moderadas (Brydson, 1999).

El poliestireno es fácilmente atacado por una gran diversidad de disolventes, incluso por agentes de limpieza en seco. Su estabilidad al envejecimiento atmosférico (es decir, la degradación y envejecimiento que sufre por los agentes atmosféricos, el calor, la luz ultravioleta) es mala, al ser expuesto se vuelve amarillo y se pone quebradizo. Presenta dos desventajas en sus propiedades mecánicas las cuales son la fragilidad y su relativamente baja temperatura de flexión térmica (82-88°C), lo cual indica que los artículos de poliestireno no pueden ser esterilizados (Billmeyer, 1975).

Los rasgos característicos del poliestireno son su bajo peso específico, alta transparencia y brillo, color neutro, rigidez y a su vez fragilidad. Este puede ser modificado incorporando aditivos, fibras, polímeros de alto peso molecular y con el aprovechamiento de la orientación intencional de sus moléculas y copolimerización, de manera que se pueda contrarrestar su fragilidad (Chatterjee & Prasad, 2011).



Figura 4. Identificación del poliestireno según código de identificación de plásticos.
(Aristegui, 2019)

	Mundo	USA	Eur. Occ.	Japón
Poliestireno	63	66	66	54
SBR	11	12	13	9
ABS	12	7	8	14
SAN	1	-	1	4
Resinas poliéster	4	7	6	5
Otros	9	8	6	14

SBR: caucho de estireno-butadieno; ABS: acrilonitrilo-butadieno-estireno; SAN: estireno-acrilonitrilo

Cuadro 1. Uso de estireno en porcentajes.

(Sanz, 2019)

1. Aditivos del poliestireno

A elevadas temperaturas el poliestireno se descompone en monómeros de estireno y oligómeros. Cuando se repite su procesabilidad en procesos de reciclado requiere de la adición de antioxidantes, por lo general se utiliza sobre un 0.15% en peso de octadecil-3-(3.5-ditert.butil-4-hidroxifenil) propionato. Mientras que los fosfitos permiten mantener el color natural. Captadores de radiación UV o una combinación de aminos son los mejores antioxidantes para prevenir el amarillamiento del PS y proteger la superficie del material (Parres F. , 2005).

Los lubricantes mejoran la fluidez y regulan la adherencia, también pueden actuar como aceleradores del fundido, agentes cristalizantes, agentes antiblocantes y antiadherentes. Para el color, se utilizan colorantes y tintes en forma de gránulo, polvo o pasta (Parres F. , 2005).

El poliestireno es un material que arde con mucha facilidad y la propagación de la llama es muy rápida, por lo que se le adicionan agentes ignifugantes que retardan los efectos de la llama (Parres F. , 2005).

2. Poliestireno expandido (EPS)

El poliestireno expandido es una modificación del poliestireno, el cual consiste en 95% de poliestireno y 5% de un gas que forma burbujas reduciendo así la densidad del material. Es ampliamente usado como panel aislante y como material de empaque para juguetes, equipos eléctricos y electrónicos, y productos alimenticios. Tiene una apariencia de pequeños granos esféricos que pueden formar bloques muy ligeros debido a su baja densidad (Barnetson, 2004).

El procesamiento del poliestireno expandido consiste en expandir los pellets de poliestireno cuarenta veces su tamaño original en presencia de vapor, el calentamiento provoca que el agente expansor ebulle y forme un polímero celular a manera de panel. Para que el material tome la forma requerida se transfieren los granos a moldes calentados con vapor. En la etapa de pre-expansión la densidad del polímero baja a valores entre 10 y 35 kg/m³, debido al aire contenido en el interior de las celdas. Dicho aire produce vacío y deja humedad, por lo cual es necesario que los pellets reposen en silos donde son secados y la presión interna se

igual para favorecer la etapa de moldeo. El tiempo que se dejan en secado favorece la elasticidad y capacidad de expansión que adquieren los pellets, por lo que se requiere de menor energía en la etapa de transformación (Niessner & Rivetti, 2005).

El EPS se utiliza como empaque debido a su excelente resistencia al impacto o como panel para el aislamiento térmico en casas u oficinas. Sirve como material de protección para componentes electrónicos pequeños y grandes, debido a que presenta una buena absorción de golpes y se puede apilar gracias a su resistencia a la compresión. Sus propiedades como aislante térmico ayudan a mantener los alimentos frescos y protegidos. Además, no es un material higroscópico, por lo que sus propiedades mecánicas no se verán afectadas por la humedad. También es usado en la construcción, al hacer una fusión de EPS con cemento para la elaboración de paredes, pisos o ladrillos ligeros (Barnetson, 2004).

A diferencia de materiales como el PET, el poliestireno expandido es uno de los materiales menos amigables con el ambiente, ya que la polimerización del estireno no es reversible. Esto no quiere decir que el poliestireno expandido no pueda ser utilizado nuevamente, de hecho, una manera de reciclarlo es volver a utilizarlo en la producción de poliestireno expandido (d'Alzon, 2016).

a. Propiedades del EPS

Debido a la estructura celular que encierra el aire le permite absorber la energía de un impacto y retomar a su forma original después de deformarse. Por esta razón, el EPS es utilizado como un excelente material de amortiguación, sus propiedades mecánicas se ven favorecidas por el aumento de la densidad de polímero, como se puede observar en el cuadro siguiente:

Densidad (kg/m ³)	15	25	40	50
Fuerza a la tensión (kPa)	200	350	600	750
Fuerza a la flexión (kPa)	200	400	700	900
Tensión al 10% de compresión (kPa)	90	180	320	400

(Barnetson, 2004, p. 45)

Cuadro 2. Propiedades del poliestireno expandido al variar su densidad.

Las propiedades que caracterizan al poliestireno expandido se describen a continuación:

- Densidad en un rango de 10 a 35 kg/m³
- Color blanco, lo cual se debe a la refracción de la luz
- Resistencia mecánica
- Higiénico, no constituye sustrato nutritivo para microorganismos
- Aislante térmico
- Resistencia a la humedad
- Estabilidad dimensional

- Estabilidad frente a la temperatura
- Capacidad de absorción de impactos

El poliestireno expandido es estable frente a muchos productos químicos, como disolventes y reactivos.

Sustancia activa	Estabilidad
Solución salina/ Agua de mar	Estable: el EPS no se destruye con una acción prolongada
Jabones y soluciones de tensoactivos	Estable: el EPS no se destruye con una acción prolongada
Lejías	Estable: el EPS no se destruye con una acción prolongada
Ácidos diluidos	Estable: el EPS no se destruye con una acción prolongada
Ácido clorhídrico (al 35%) ácido nítrico (al 50%)	Estable: el EPS no se destruye con una acción prolongada
Ácidos concentrados al 100%	No estable: El EPS se contrae o se disuelve
Soluciones alcalinas	Estable: el EPS no se destruye con una acción prolongada
Disolventes orgánicos	No estable: El EPS se contrae o se disuelve
Hidrocarburos alifáticos saturados	No estable: El EPS se contrae o se disuelve
Aceites de parafina, vaselina	Relativamente estable: en una acción prolongada, el EPS puede contraerse o ser atacada su superficie
Aceite de diésel	No estable: El EPS se contrae o se disuelve
Carburantes	No estable: El EPS se contrae o se disuelve
Alcoholes	Estable: el EPS no se destruye con una acción prolongada
Aceites de silicona	Relativamente estable: en una acción prolongada, el EPS puede contraerse o ser atacada su superficie

Cuadro 3. Estabilidad química del poliestireno expandido.
(Méndez & Córdova, Evaluación de Alternativas de Reciclaje de Poliestireno Expandido, 2015)

Agentes	EPS Tipo Standard	EPS Difícilmente inflamable	EPS Resistente a los Aceites Diesel
Agua	+	+	+
Agua de mar	+	+	+
Ácido Clorhídrico al 36%	+	+	-
Ácido sulfúrico al 95%	+	+	-
Ácido fosfórico al 90%	+	+	-
Ácido nítrico al 68 %	+	+	-
Acido fórmico al 80 %	+	+	-
Ácido acético al 70 %	+	+	-
Hidróxido sódico al 40 %	+	+	+
Hidróxido potásico al 50 %	+	+	+
Agua amoniacal al 25 %	+	+	+
Alcohol metílico	+	+	+
Alcohol etílico	+	+	+ -
Alcohol propílico	+	+	+ -
Bencina para barnices, aceite Diesel	+	+	+ -
Carburante que contiene benceno	-	-	+
Éter acético	-	-	-
Benceno	-	-	-
Tetracloruro de carbono	-	-	-
Éter y disolventes orgánicos	-	-	-

+	Estable
+ -	Limitadamente Estable
-	Inestable

Cuadro 4. Resistencia de los diferentes tipos de poliestireno expandido a los agentes químicos. (Méndez & Córdova, Evaluación de Alternativas de Reciclaje de Poliestireno Expandido, 2015)

Los productos de poliestireno expandido presentan una excelente capacidad de aislamiento térmico, por lo que, muchas de sus aplicaciones se encuentran directamente relacionadas con esta propiedad. Esta capacidad de aislamiento térmico se debe a la propia estructura del material, debido a que aproximadamente el 98% del volumen del material es aire.

Además, este material no es higroscópico, a diferencia de otros materiales del sector de aislamiento y embalaje. Los niveles de absorción de agua son mínimos de aproximadamente 1%, mientras que el vapor de agua sí puede difundirse en el interior de la estructura del EPS.

Algunas de las formas más comunes de encontrar el poliestireno expandido son en embalajes y contenedores, como se muestra a continuación:



Figura 5. Perlas de poliestireno expandido comercial.

(PPD, 2021)



Figura 6. Poliestireno expandido para embalaje.

(DIMER, 2021)



Figura 7. Poliestireno expandido para aislamiento.

(Connor, 2019)



Figura 8. Poliestireno expandido para empaque de alimentos.

(Connor, 2019)

B. Reciclaje de EPS

El desarrollo económico sumado con el rápido crecimiento poblacional e industrial constituyen un desafío para las ciudades en el tema de generación de residuos sólidos, no solo porque el espacio en los rellenos sanitarios es limitado sino porque su incineración es costosa y contaminante. El aumento en el consumo de los plásticos conlleva la búsqueda de un tratamiento de reciclaje de sus desechos, el cual permita convertirlos de una amenaza ambiental a un recurso para la industria (Poletto, Dettenborn, Zeni, & Zattera, 2010).

Los plásticos son el material de mayor consumo en el sector de empaque, lo que implica un gran volumen de residuos con baja biodegradabilidad. Por ejemplo, el consumo global de poliestireno excede los 3 millones de toneladas con un incremento del 6% al año (Achilias, Giannoulis, & Papageorgiou, 2009).

La industria ha desarrollado equipos de compactación y densificación del poliestireno expandido, de manera que la ejecución de diferentes técnicas de reciclaje sea viable con el fin de solucionar el problema ambiental que representa (Acierno, Carotenuto, & Pecce, 2009).

En el proceso de reciclaje los desechos de EPS pierden su característica de espuma, por lo que son usados en forma sólida para hacer juguetes, artículos de oficina, madera plástica, recipientes e incluso incluirlo en el proceso de manufactura de EPS (Poletto, Dettenborn, Zeni, & Zattera, 2010).

1. Reciclaje mecánico

El reciclaje mecánico del EPS consiste en la reducción de tamaño de los residuos por métodos físicos de pulverización, compactación o densificación. Luego de haber perdido el volumen, el EPS puede ser implementado como materia prima para el modelo de productos cotidianos hechos con poliestireno o una producción de materiales de construcción. En la industria es considerado como una técnica factible a gran escala (Acierno, Carotenuto, & Pecce, 2009).

2. Reciclaje químico

El reciclaje químico permite la depolimerización del polímero o una degradación del poliestireno en otros materiales secundarios valiosos. Este proceso puede desenvolverse como una descomposición catalítica de los desechos de poliestireno a 300 – 450 °C en presencia de una atmosfera de nitrógeno, clorofluorocarbono, propano o similares. El catalizador es un óxido ácido o básico, utilizado para obtener el monómero de estireno a una temperatura relativamente baja con alta selectividad (Maharana, Negi, & Mohanty, 2007).

La síntesis de los desechos de poliestireno también es un tipo de reciclaje químico. Los residuos de EPS pueden ser sintetizados como derivados sulfonados los cuales pueden ser utilizados como

polielectrolitos en operaciones de floculación, o como resinas de intercambio iónico (Maharana, Negi, & Mohanty, 2007).

3. Reciclaje energético

El reciclaje energético es visto como una alternativa al reciclaje mecánico, este aprovecha el alto poder calorífico EPS, el cual es similar al aceite combustible y mayor al carbón. Por lo que, se pretende convertir el contenido energético del EPS en una cantidad sustancial de energía mediante la incineración de los desechos (Barnetson, 2004).

Este tipo de reciclaje no es un proceso ambientalmente amigable ya que el tratamiento de los desechos genera emisiones tóxicas provenientes de la incineración. Debido a la estructura del poliestireno que posee anillos aromáticos, estos producen grandes cantidades de hollín e hidrocarburos aromáticos policíclicos, compuestos que son perjudiciales para la salud (García, Gracia, Duque, De Lucas, & Rodriguez, 2009).

C. Uso de poliestireno y poliestireno expandido

1. Nivel mundial

De acuerdo con el Chemical Economics Handbook, Polystyrene, en mercado global del poliestireno expandido reflejó un enorme crecimiento en durante los años 2001 a 2015, donde el consumo incrementó alrededor de 91% (3,251 kton² a 6,197 kton²). Sin embargo, en el mismo documento se señala que a pesar de una clara tendencia de crecimiento, también hay una propensión a disminuir el consumo de desechables. En este sentido, mercados como el de Norte América, Europa y Japón se han caracterizado por una demanda débil, mientras que los productores de países como China, Oriente Medio, África y América Latina continúan añadiendo capacidad al mercado (IHS Markit, 2015).

En Europa alrededor del 80% de consumo de poliestireno expandido es en construcción, mientras que el 20% es para empaque y embalaje, siendo este último el más bajo a nivel mundial. Mientras en Norte América, el 41% del consumo es para construcción y el 59% restante se distribuye entre empaque y otros destinos. En la región de Asia el consumo es cerca del 50% en empaque y embalaje (IHS Markit, 2015).

En el 2017 la empresa IHS Markit determinó que el consumo mundial de EPS para dicho año fue representado principalmente por el Noreste de Asia con cerca del 50% del consumo total, seguido de Europa Oriental, Europa Central y el Medio Este. De este modo, el consumo global de EPS en aplicaciones de embalaje es el segundo mayor mercado de uso, representando el 35% de la demanda de EPS a partir del 2017 y excediendo los 3 millones de toneladas con un incremento del 6% anual (IHS Markit, 2018).

En los últimos años, el mercado de EPS se ha enfrentado a los desafíos de una sobreoferta mundial, una demanda debilitada y una continua percepción negativa de los productos de EPS. Sin embargo, la demanda mundial experimentará un aumento durante los próximos 5 años. A partir del año 2020, existe un

exceso de capacidad de EPS de más de 5.5 millones de toneladas métricas, la mayoría en China continental, lo que representa el 66% del excedente mundial. Debido a la abundancia de capacidad del Noreste de Asia, la tasa operativa de la región se encuentra cerca del 53% (IHS Markit, 2015).

La edificación y la construcción es el segmento con mayor demanda, representando más del 52% de la demanda global de EPS en 2020. Sin embargo, este uso ya no lidera la industria del EPS desde una perspectiva de crecimiento debido al estancamiento de la demanda en el Noreste de Asia y Europa Occidental, junto con una compensación en un mayor crecimiento de los envases (IHS Markit, 2015).

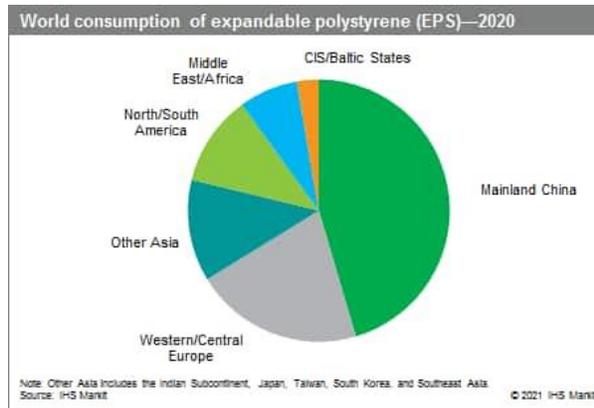


Figura 9. Consumo global de poliestireno expandido en el año 2020 (IHS Markit, 2021)

Durante los próximos cinco años, se prevé que la demanda mundial de EPS para la edificación y la construcción aumente a una tasa promedio del 2.6% anual para alcanzar más de 3.5 millones de toneladas métricas para el 2025 (IHS Markit, 2015).

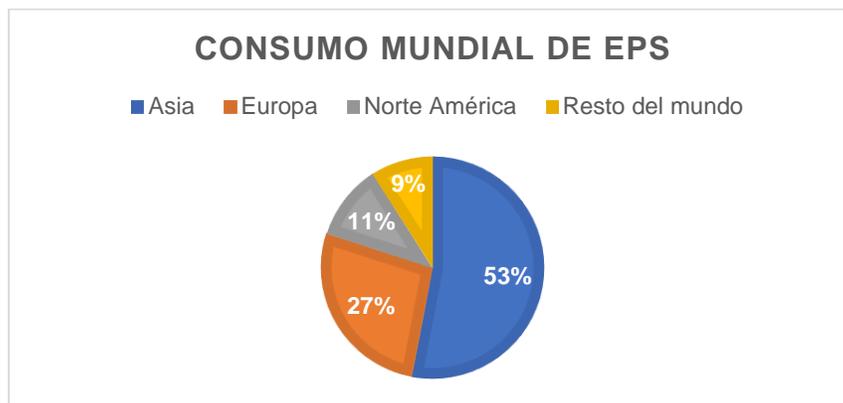


Figura 10. Consumo global de poliestireno expandido (IHS Markit, 2015)

2. Guatemala

A diario cada guatemalteco produce 1.14 libras de basura, para un total de 10 mil toneladas métricas, de las cuales el 12% representa plásticos de un solo uso, especialmente pajillas, vasos, bolsas, bandejas, cubiertos los cuales principalmente son de poliestireno y poliestireno expandido, estos materiales tienen un uso promedio de 45 minutos, pero tardan 500 años en degradarse en vertederos (Reyes, 2020). El principal problema de Guatemala es dónde almacenar los desechos de forma adecuada, ya que, de los 2400 vertederos registrados en el país, el 99% no cuenta con instrumentos ambientales que garanticen su manejo adecuado (Pérez, 2017).

En el 2018 el Gobierno de Guatemala prohibió el uso y distribución de bolsas plásticas de un solo uso y otros elementos de este material con el fin de contribuir a la protección del medio ambiente. La restricción implicaba pajillas plásticas, platos y vasos, contenedores o recipientes para almacenar alimentos ya sean de plástico o de poliestireno expandido. Sin embargo, se fijó un plazo de dos años para que estos artículos sean sustituidos definitivamente por otros, elaborados con material compostable que cumpla con la norma de la Unión Europea UNE-EN-13432 (Reyes, 2020).

De estas disposiciones se exceptúan los materiales e insumos para fines médicos y terapéuticos, así como los “importados que estén sellados de fábrica con material plástico o duroport (Reyes, 2020).

a. Acuerdo Gubernativo 189-2019

Este acuerdo no prohibía directamente su uso, sino la manufacturación de productos de plástico, de poliestireno expandido o de un solo uso dentro del territorio guatemalteco. En caso de ser productos importados, no se incurriría en sanciones, por lo que estos tipos de plástico seguirían ingresando a Guatemala (MARN, Acuerdo Gubernativo 189-2019, 2019).

El sector de fabricación y exportación de plástico genera alrededor de 10,000 empleos directos y 60,000 empleos indirectos, estando conformado por 62 empresas. Además, la industria del plástico es la industria de exportación indirecta más importante del país, teniendo exportaciones a Centroamérica, el Caribe, Estados Unidos, México y Panamá (MARN, Acuerdo Gubernativo 189-2019, 2019).

Con el acuerdo 189-2019 varios negocios o empresas dedicadas a la manufactura tuvieron que cerrar, o despedir a una gran cantidad de empleados. Además, la falta de información sobre productos degradables generó diversos problemas. Se vio que en las comunidades los pobladores enterraban las bolsas plásticas “biodegradables” pensando que de esta manera desaparecerían (MARN, Acuerdo Gubernativo 189-2019, 2019).

b. Acuerdo Gubernativo 164-2021

En el 2021 el MARN publicó el Acuerdo Gubernativo 164-2021 que deroga la prohibición de plásticos de un solo uso, teniendo como enfoque principal la gestión integral de los residuos y desechos sólidos comunes (MARN, 2021).

Con un nuevo reglamento, se establecen las normas sanitarias y ambientales que deben aplicar para la gestión de residuos. Tomando en cuenta toda la obra de infraestructura que se utilice para poder gestionar los desechos la cual debe de ser diseñada para ser accesible. También determina reglamentos para espacios de almacenamiento temporal, contenedores, vehículos de recolección de desechos, procedimientos para la recolección y los diferentes tipos de tratamiento (MARN, 2021).

Según el acuerdo, las multas serán impartidas por el MARN y pueden costar desde uno a cuarenta salarios mínimos mensuales por incumplimiento de las disposiciones (MARN, 2021).

c. Acta 25-2021 Catarina, San Marcos

En este mismo año que se derogó el acuerdo 189-2019, la Municipalidad de Catarina, San Marcos, publicó el acta 25-2021 en el que se acuerda prohibir el uso y venta de productos de plástico de un solo uso y poliestireno expandido en el municipio. Siendo las multas para personas individuales de Q5mil y para personas jurídicas multas de Q15 mil. Para empresas, una multa de Q7mil y el cierre provisional del establecimiento (Román, 2021).

Se prohibió el uso, distribución y comercialización de los siguientes productos en sus diferentes presentaciones, formas y diseños:

- Bolsas plásticas
- Pajillas
- Platos y vasos plásticos desechables
- Mezcladores o agitadores plásticos desechables
- Contenedores o recipientes desechables de plástico o duroport para almacenar y trasladar alimentos
- Productos que son de características biodegradables

La disposición excluye materiales e insumos para fines médicos o terapéuticos, así como los productos o insumos importados que estén sellados de fábrica con material plástico o duroport para preservar su contenido y ser utilizados por el público (Román, 2021).

D. Sulfonación de materiales poliméricos

El término sulfonación se refiere a la fijación química del grupo sulfónico ($-\text{SO}_3\text{H}$) a un átomo de carbono de una molécula orgánica. El uso de compuestos orgánicos sulfonados está ligado a la presencia del grupo sulfónico por su carácter hidrófilo muy polar. Al combinar este grupo con una fracción orgánica liposoluble los productos pueden ser utilizados como detergentes, emulsificantes y agentes dispersantes. Al combinarse con una cadena de tipo polisacárido tiene propiedades anticoagulantes siendo productos que se pueden utilizar en biomateriales. Por otro lado, la presencia de grupos sulfónicos en tintes, compuestos antiparásitos y agentes curtidores sintéticos los hace solubles en agua y los fija después a la fibra o a la piel que se desea trabajar. Los grupos sulfónicos están presentes en algunas resinas de intercambio iónico en las que funcionan como ácidos fuertes frente a otras resinas que llevan grupos carboxilo de carácter menos ácido.

También, los polímeros sulfonados pueden funcionar como gomas sintéticas y agentes de relleno (León & Ramírez, Síntesis, Caracterización y Aplicación del PS Entrecruzado a Partir de Residuos de PS, 2007).

Los agentes sulfonantes más energéticos son el trióxido de azufre (SO₃), el ácido sulfúrico (H₂SO₄) y el óleum (SO₃ en H₂SO₄). Este último presenta muy buena reactividad y, además, produce reacciones secundarias como el entrecruzamiento (León & Ramírez, Síntesis, Caracterización y Aplicación del PS Entrecruzado a Partir de Residuos de PS, 2007).

1. Sulfonación del poliestireno

El proceso de sulfonación homogénea para el poliestireno se puede visualizar en dos reacciones químicas. La primera es la síntesis de un copolímero sulfonable que es controlable desde dos monómeros, y la segunda es la sulfonación en ácido sulfúrico concentrado en la posición orto en residuos de hidroquinona enlazados con el grupo etersulfona en el copolímero. La degradación de la sulfonación es controlada por la cantidad de hidroquinona que se agrega en la solución. La forma ácida del polímero sulfonado puede ser convertida en su forma de sal haciéndolo reaccionar con una solución concentrada de hidróxido de sodio (León & Ramírez, Síntesis, Caracterización y Aplicación del PS Entrecruzado a Partir de Residuos de PS, 2007).

El proceso de sulfonación y entrecruzamiento del poliestireno ocurre en dos reacciones, una reacción de sulfonación y una reacción de disulfonación en donde ocurre el entrecruzamiento. La sulfonación se lleva a cabo por sustitución aromática electrofílica, en el cual es necesaria la formación del electrófilo de trióxido de azufre (SO₃) (Córdova, Elaboración de una Resina de Intercambio Iónico a partir de la Sulfonación y Entrecruzamiento de Poliestireno Expandido Reciclado para la Separación de Iones Metálicos en Solución, 2013).

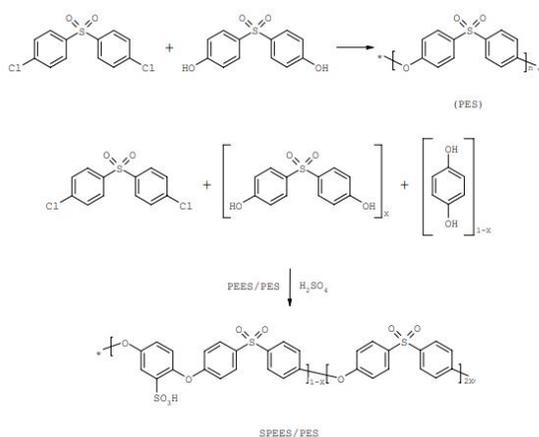


Figura 11. Reacción química de la formación de poliestireno sulfonado. (León & Ramírez, Síntesis, Caracterización y Aplicación del PS Entrecruzado a Partir de Residuos de PS, 2007)

El proceso de sulfonación de la cadena polimérica del poliestireno se ve favorecida por la activación de cada anillo aromático componente de la unidad monomérica que está presente en la cadena del grupo etileno de la unidad 84 básica del estireno. La activación del anillo es débil con orientación orto-para, y a su vez la sustitución aromática electrofílica da lugar a que el anillo bencénico posea un grupo sulfónico desactivador fuerte y orientador meta, el cual impide la bisulfonación del mismo anillo (Córdova, Elaboración de una Resina de Intercambio Iónico a partir de la Sulfonación y Entrecruzamiento de Poliestireno Expandido Reciclado para la Separación de Iones Metálicos en Solución, 2013).

Otra reacción que se presenta en el proceso de sulfonación de la resina es la disulfonación. Esta reacción da lugar al entrecruzamiento de un grupo bencensulfonato con un nuevo anillo aromático de otra cadena polimérica. El entrecruzamiento es identificado como un grupo sulfona ($\text{Ar-SO}_2\text{-Ar}$), este une las diferentes cadenas de polímero mejorando las propiedades mecánicas del material al aumentar la ramificación del polímero, pero reduce la capacidad de intercambio de iones (Córdova, Elaboración de una Resina de Intercambio Iónico a partir de la Sulfonación y Entrecruzamiento de Poliestireno Expandido Reciclado para la Separación de Iones Metálicos en Solución, 2013).

Para obtener el poliestireno sulfonado entrecruzado, se lleva a cabo la reacción con residuos de poliestireno y una solución de óleum, que consiste en ácido sulfúrico con trióxido de azufre al 33%, esto a temperatura ambiente ya que permite llevarse a cabo el entrecruzamiento entre el anillo aromático del poliestireno y el grupo sulfona, permitiendo a su vez formar grupos sulfónicos de la no formación del entrecruzamiento entre las sulfonas y el anillo aromático (León & Ramírez, Síntesis, Caracterización y Aplicación del PS Entrecruzado a Partir de Residuos de PS, 2007).

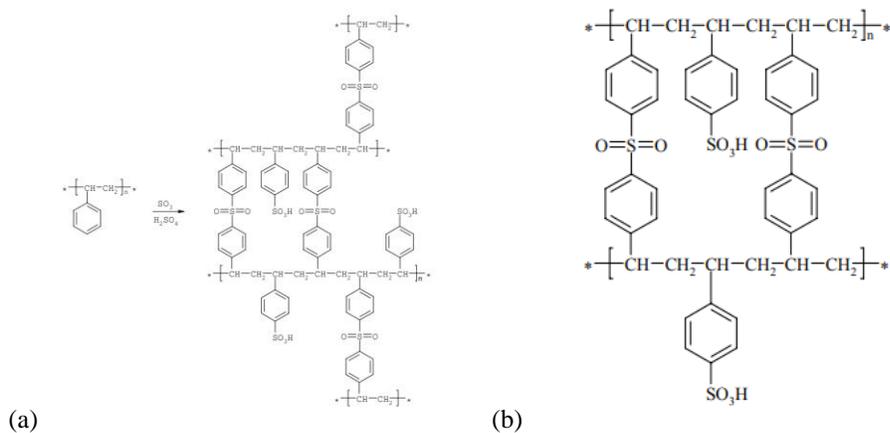


Figura 12. (a) Reacción entre PS y óleum. (b) Estructura química del poliestireno sulfonado entrecruzado.

(León & Ramírez, Síntesis, Caracterización y Aplicación del PS Entrecruzado a Partir de Residuos de PS, 2007)

El PS entrecruzado puede ser utilizado en columnas de intercambio iónico, celdas de membranas y catálisis. Estas partículas son creadas a partir del entrecruzamiento entre divinilbenceno y PS sulfonado de sodio (León & Ramírez, Síntesis, Caracterización y Aplicación del PS Entrecruzado a Partir de Residuos de PS, 2007).

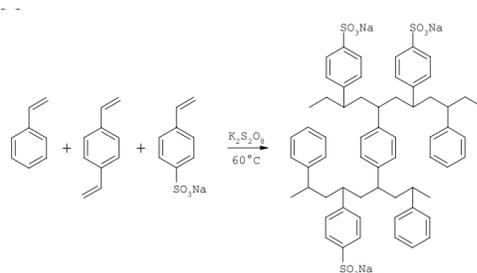


Figura 13. Reacción entre estireno, divinilbenceno y estireno sulfonado de sodio. (León & Ramírez, Síntesis, Caracterización y Aplicación del PS Entrecruzado a Partir de Residuos de PS, 2007)

El proceso de disolver un polímero por lo general es lento, y en especial para redes poliméricas altamente entrecruzadas. La adición de un disolvente solo hace que el polímero se hinche conforme este permea la matriz polimérica. En general, las fracciones con menor masa molar son más solubles, pudiendo esta propiedad aprovecharse para separar el polímero en fracciones de diferentes masas molares promedio (León & Ramírez, Síntesis, Caracterización y Aplicación del PS Entrecruzado a Partir de Residuos de PS, 2007).

E. Intercambio iónico

La configuración de un polímero en solución depende mucho del disolvente. En un buen disolvente existe una interacción más fuerte entre el disolvente y el polímero que entre las moléculas del disolvente, o entre varios segmentos de polímero. El polímero se desenrolla para la solución. En un disolvente no adecuado, los segmentos de polímero permaneces enlazados. Estas distintas conformaciones tienen una influencia en la viscosidad, siendo la viscosidad mayor para grandes cadenas extendidas que la que tiene moléculas enredadas. En este caso, puede que la interacción entre un buen disolvente y el polímero sulfonado sea nula, ya que la estructura tridimensional del polímero no permite la penetración adecuada del disolvente. Además, el PS sulfonado entrecruzado cuenta con grupos terminales sulfónicos que a la vez estos pueden permitir una baja interacción con el disolvente (León & Ramírez, Síntesis, Caracterización y Aplicación del PS Entrecruzado a Partir de Residuos de PS, 2007).

El intercambio iónico es un fenómeno que ocurre comúnmente en la naturaleza, en los suelos con altos contenidos de aluminosilicatos, donde se encuentran iones intercambiables que pueden dar lugar a un verdadero proceso de intercambio iónico cuando circula agua por dichos suelos y son eliminados ciertos iones del agua en forma natural (Valenzuela, 2006).

Las operaciones de intercambio iónico son básicamente reacciones químicas de sustitución entre un electrolito en solución y un electrolito insoluble con el cual se pone en contacto la solución. El mecanismo de estas reacciones y las técnicas utilizadas son parecidas a las de adsorción, por lo cual el intercambio iónico puede considerarse como un caso especial de la adsorción (Treybal, 1968).

El intercambio de iones es un proceso en el cual las partículas sólidas que contienen cationes o aniones intercambiables se ponen en contacto con una solución electrolítica para cambiar la composición de la solución. Las aplicaciones del intercambio de iones se ven mayormente en el ablandamiento de agua por intercambio de iones de calcio por iones sodio y desmineralización de agua por eliminación de cationes y aniones (McCabe, Smith, & Harriott, 2007).

La capacidad de intercambio iónico existe en algunos materiales naturales como arcillas y zeolitas, pero la mayoría de los procesos utilizan resinas sintéticas de intercambio iónico. Dichas resinas se producen a partir de polímeros orgánicos, tales como poliestireno unido de forma transversal en el cual se han añadido grupos ionizables. Los intercambiadores catiónicos incluyen resinas de ácidos fuertes con grupos de ácido sulfónico ($-SO_3$), resinas de ácidos débiles con grupos de ácido carboxílico ($-COO^-$), y otros tipos de ácido con fuerza intermedia (McCabe, Smith, & Harriott, 2007).

En los intercambiadores catiónicos y aniónicos, los grupos de ácidos o bases están enlazados químicamente a la matriz de la resina, y las resinas tienen una alta concentración de cargas fijas positivas o negativas. Los intercambios iónicos toman lugar cuando la actividad de los iones en una solución externa difiere a partir de que los iones se mueven en la fase de la resina (McCabe, Smith, & Harriott, 2007).

Las resinas de intercambio iónico son insolubles en agua, pero se hinchan en una solución acuosa en una extensión determinada por el grado de entrecruzamiento, la concentración de cargas fijas y la concentración de electrolitos en la solución. Para una resina de ácido sulfónico con un grado moderado de entrecruzamiento el volumen del hinchamiento de la resina en forma de Na en una solución diluida es de alrededor 1.8 veces el volumen de la resina seca, y la porosidad es de 45%. Las resinas se presentan en forma de esferas con tamaños entre 0.3 y 1.2 mm, y por lo general se utilizan en lechos fijos similares a los empleados para la adsorción a partir de líquidos (McCabe, Smith, & Harriott, 2007).

1. Técnicas y aplicaciones

Por lo general, las técnicas de operación utilizadas para la adsorción se utilizan también para el intercambio iónico, por lo cual hay tratamientos por lotes o por etapas de soluciones, operaciones en lecho fluidizado o fijo y operaciones continuas a contracorriente. Las percolaciones en lecho fijo son muy comunes. Se utilizan los métodos cromatográficos para el fraccionamiento de mezclas iónicas de varios componentes. Se han aplicado estas técnicas en el tratamiento de lodos de minerales para la obtención de metales valiosos. Además, para ablandamiento de aguas, la deionización total del agua se puede lograr por percolación, primero a través de un intercambiador catiónico y después a través de un intercambiador aniónico. Utilizando un

lecho formado por una mezcla íntima de cantidades equivalentes de una resina intercambiadora fuerte y una aniónica fuerte, es posible la eliminación simultánea de todos los iones hasta la neutralidad (Treybal, 1968).

2. Rapidez de intercambio iónico

La rapidez del intercambio iónico depende de la difusión de iones desde el seno del líquido hasta la superficie externa de una partícula intercambiadora, la difusión interna de iones a través del sólido hasta el sitio de intercambio, el intercambio de iones, la difusión externa de los iones liberados hasta la superficie del sólido, la difusión de los iones liberados desde la superficie del sólido hasta el líquido. La rapidez de difusión puede describirse mediante los coeficientes de transferencia de masa apropiados para la difusión a contracorriente equivalente a través del sólido y a través del líquido; en algunos casos, la resistencia a la difusión en la fase líquida es el paso controlante (Treybal, 1968).

3. Intercambio iónico en lecho fijo

Las operaciones de intercambio iónico, por lo general, se realizan en semicontinuo en un lecho fijo de resina a través de la cual fluye una disolución. Al inicio de la operación, la mayor parte de la transferencia de materia se da cerca de la entrada del lecho, donde el fluido se pone en contacto con intercambiador fresco. A medida que transcurre el tiempo, el sólido próximo a la entrada se encuentra prácticamente saturado y la mayor parte de la transferencia de materia tiene lugar lejos de la entrada. Debido a la resistencia que pone el sistema a la transferencia de iones desde el seno del líquido a los centros de intercambio, se establece un gradiente de concentración en el lecho. Mientras progresa el intercambio, la zona de transferencia de materia se traslada en el lecho hasta alcanzar su extremo inferior (Treybal, 1968).

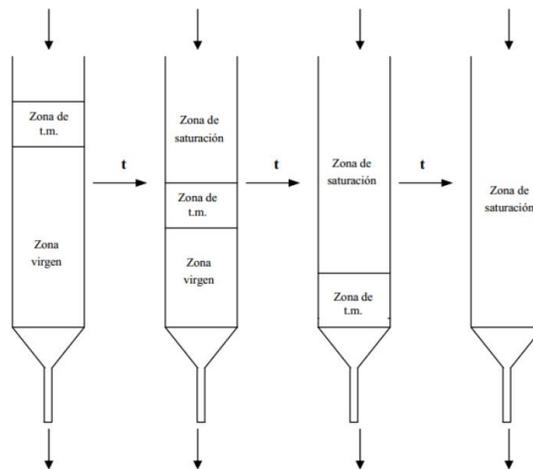


Figura 14. Progreso de la concentración en un lecho de intercambio iónico. (UAM, 2012)

4. Equilibrios

La capacidad de un intercambio de iones es el número de grupos intercambiables por unidad de masa de resina seca. Para las resinas catiónicas, la capacidad se puede expresar también como miliequivalentes por gramo de resina seca de hidrógeno formado (meq/g H⁺). Para fines prácticos, la capacidad se expresa en equivalentes por litro de lecho. La capacidad teórica de un copolímero de estirenodivinilbenceno es del orden de 5.4 meq/g H⁺ cuando cada uno de los anillos aromáticos tienen un grupo de ácido sulfónico. La capacidad de lecho correspondiente es de alrededor 2.5 equivalentes por litro (McCabe, Smith, & Harriott, 2007).

El intercambio de iones es una reacción reversible en la cuál el contranión en la resina es reemplazado por un ion diferente a partir de una solución externa. Para una reacción de intercambio catiónica de una resina de sodio formado con un ion monovalente A⁺, la reacción es



La constante de equilibrio se expresa en términos de actividades o de los coeficientes de actividades multiplicados por las concentraciones (McCabe, Smith, & Harriott, 2007).

$$K_{eq} = \frac{C_{Na} + C_{AR}}{C_A + C_{NaR}} \times \frac{Y_{Na} + Y_{AR}}{Y_A + Y_{NaR}}$$

F. Resinas de intercambio iónico

Las resinas de intercambio iónico son materiales sintéticos que consisten en una matriz inerte formada por copolímeros de poliestireno-divinilbenceno y que contienen grupos funcionales a nivel superficial (Valenzuela, 2006).

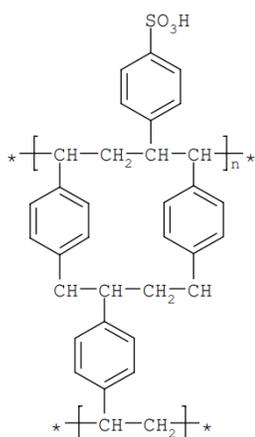


Figura 15. Copolímero de PS-divinilbenceno sulfonado.
(León & Ramírez, Síntesis, Caracterización y Aplicación del PS Entrecruzado a Partir de Residuos de PS, 2007)

Los grupos funcionales pueden intercambiar iones con otras especies de similar carga iónica que se encuentran en solución dependiendo de las propiedades del grupo funcional y del tamaño, carga y grado de polarización del ion en solución (Valenzuela, 2006).



Figura 16. Muestra de resina de intercambio iónico en forma de perla.

(Puritec, 2019)

1. Mecanismos de intercambio iónico

El proceso de intercambio iónico es una reacción química reversible entre un intercambiador iónico sólido y una solución acuosa, por medio de la cual los iones son intercambiados entre el sólido y la fase líquida. Un intercambiador puede cambiar sus cationes, actuando como intercambiador catiónico, o bien, sus aniones siendo un intercambiador aniónico. Los iones móviles que se reemplazan son llamados contraiones (Valenzuela, 2006).

Cuando un intercambiador catiónico XA entra en contacto con una solución acuosa que contiene iones B⁺, sucede el intercambio de los contraiones estableciendo un equilibrio de acuerdo a la reacción:



La capacidad de una reacción de intercambio iónico depende del coeficiente de distribución (D_B) el cual se define como la concentración de ion B⁺ por gramo de intercambiador dividido entre la concentración de ion B⁺ por mililitro de solución (Valenzuela, 2006).

2. Clasificación de las resinas de intercambio iónico

Las resinas se clasifican de acuerdo con su grupo funcional como:

Ácido Fuerte (-SO ₃ H)	
Ácido Débil (-COOH)	Intercambian cationes
Base Fuerte (-NR ₃ Cl)	
Base Débil (-R ₂ RCl)	Intercambian aniones

Las resinas de ácido fuerte y base fuerte están completamente ionizadas por lo cual muestran propiedades de intercambio iónico sobre el rango total de pH, mientras que las resinas de ácido débil y base débil están parcialmente ionizadas por lo que sus pH de intercambio se encuentran en un rango limitado (Valenzuela, 2006).

La reacción de intercambio para resinas catiónicas es:



La reacción de intercambio para resinas aniónicas es:



La transferencia de componentes toma lugar a través de la superficie de contacto entre las dos fases. La fase interior de una resina se conforma de cuatro componentes: una red polimérica tridimensional, un grupo funcional iónico, iones contrarios, y solvente (Valenzuela, 2006).

Las resinas de intercambio iónico se obtienen formando una red polimérica de enlace cruzado donde son introducidos los grupos funcionales. La naturaleza química de la red del polímero y el grado de entrecruzamiento del enlace es un factor importante en la estabilidad química y física de la resina (Valenzuela, 2006).

Las propiedades más importantes de las resinas de intercambio iónico para evaluar su eficiencia son: capacidad de intercambio, grado de expansión y selectividad (Valenzuela, 2006).

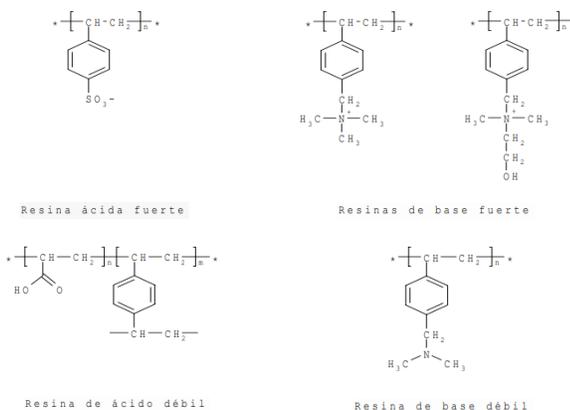


Figura 17. Estructuras moleculares de polímeros sintéticos con aplicación en intercambio iónico. (León & Ramírez, Síntesis, Caracterización y Aplicación del PS Entrecruzado a Partir de Residuos de PS, 2007)

G. Aplicación del PS sulfonado entrecruzado como intercambiador de iones

El objetivo principal del poliestireno sulfonado entrecruzado es emplearlo como una resina de intercambio iónico, debido a que no todo el poliestireno se encuentra entrecruzado por lo que quedan grupos sulfónicos libres que sirven de intercambiadores para atrapar metales provenientes de efluentes acuosos.

En la siguiente figura se muestra cómo funciona el poliestireno sulfonado entrecruzado como intercambiador de iones reteniendo unos iones metálicos. En este caso se muestra la retención de cromo hexavalente (León & Ramírez, Síntesis, Caracterización y Aplicación del PS Entrecruzado a Partir de Residuos de PS, 2007).

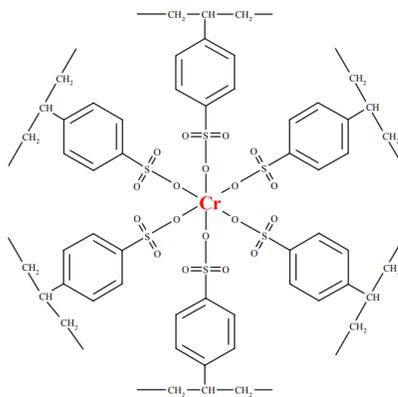


Figura 18. Intercambio iónico entre el PS sulfonado entrecruzado y cromo hexavalente. (León & Ramírez, Síntesis, Caracterización y Aplicación del PS Entrecruzado a Partir de Residuos de PS, 2007)

1. Coeficiente de distribución de Freundlich

El modelo de Freundlich es utilizado para describir la adsorción de contaminantes entre fases líquido-sólido. La ecuación es la siguiente:

$$\frac{x}{m} = k_f C^{1/n} \quad \text{ó} \quad \log\left(\frac{x}{m}\right) = \log k_f + \left(\frac{1}{n}\right) \log C \quad (1)$$

En donde x es la concentración del contaminante adsorbido, m es la masa del material adsorbente, C es la concentración del contaminante en la fase líquida, k_f es la constante de afinidad entre el material adsorbente y el contaminante adsorbido, esta es la llamada constante de Freundlich, y n es el grado de adsorción. Las constantes se determinan por regresión lineal simple. Y el valor de x se calcula con la siguiente ecuación:

$$q = \frac{(C_o - C_A) \cdot V}{m} \quad (2)$$

Donde q es la cantidad de contaminante adsorbido en el polímero. C_o y C_A son las concentraciones de contaminante en la solución inicial y en la fase acuosa después de la adsorción. V es el volumen de la fase acuosa, y m el peso del polímero (León & Ramírez, Síntesis, Caracterización y Aplicación del PS Entrecruzado a Partir de Residuos de PS, 2007).

H. Espectroscopía infrarroja

La espectroscopia infrarroja analiza las vibraciones de los enlaces y proporciona evidencia de los grupos funcionales presentes. Un espectrofotómetro infrarrojo mide la cantidad de luz absorbida o transmitida a distintas frecuencias, representando el resultado mediante un registrador. La señal del detector es proporcional a la diferencia en la intensidad de la luz entre los haces de la muestra y de la referencia, con el haz de referencia compensando cualquier absorción por el aire o por el disolvente. Los espectros infrarrojos se pueden medir usando muestras líquidas, sólidas o gaseosas que se colocan en el haz de luz infrarroja.

Los dos usos más importantes de la espectroscopia IR son:

1. Contribuir a la determinación estructural de un compuesto desconocido, al dar indicaciones de la naturaleza de los grupos funcionales presentes.
2. Identificar una muestra desconocida por comparación entre su espectro IR y el de un compuesto conocido.

1. Región infrarroja

La región infrarroja del espectro corresponde a las frecuencias que se encuentran justo por debajo de las frecuencias del visible, y por encima de las frecuencias más altas de microondas y de radar. Los espectrofotómetros operan a longitudes de onda entre 2.5×10^{-4} cm y 25×10^{-4} cm, que corresponden a energías de 4.6 a 46 kJ/mol. Los fotones infrarrojos no poseen la energía suficiente para ocasionar transiciones electrónicas, pero pueden ocasionar que los grupos de átomos vibren con respecto a los enlaces que los conectan. Estas transiciones vibracionales corresponden a distintas energías, y las moléculas absorben la radiación infrarroja solo a ciertas longitudes de onda y frecuencias.

2. Vibraciones moleculares

La frecuencia de la vibración del estiramiento depende de las masas de los átomos y de la rigidez del enlace. Los átomos más pesados vibran de manera más lenta que los más ligeros. Los enlaces más

resistentes son más rígidos, requiriendo más fuerza para estirarlos o comprimirlos. Por lo tanto, los enlaces más fuertes vibran más rápido que los enlaces débiles.

Un espectro infrarrojo es una gráfica de la energía absorbida por una molécula como una función de la frecuencia o de la longitud de onda de la luz. En la región infrarroja, las absorciones resultan por lo general a partir de los modos vibracionales de los enlaces en la molécula. La región del espectro IR que contiene la mayor parte de las vibraciones complejas (600 a 1400 cm^{-1}) se le llama región de la huella digital del espectro. Las vibraciones de los estiramientos sencillos en la región de 1600 a 3500 cm^{-1} son los más característicos y predecibles.

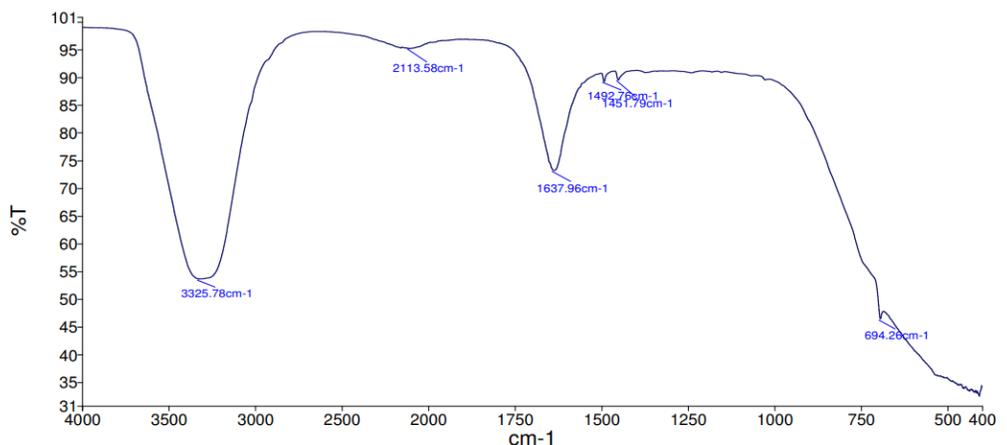


Figura 19. Ejemplo de espectro IR.

(UVG, 2021)

I. Economía circular

La economía circular es un modelo de producción y consumo que implica compartir, alquilar, reutilizar, reparar, renovar y reciclar materiales y productos existentes todas las veces que sea posible para crear un valor añadido. De esta forma, el ciclo de vida de los productos se extiende (EuroParl, 2022).

En la práctica, implica reducir los residuos al mínimo. Cuando un producto llega a su fin de vida, sus materiales se mantienen dentro de la economía siempre que sea posible. Estos pueden ser productivamente utilizados una y otra vez creando así un valor adicional (EuroParl, 2022).

La economía circular es una alternativa atractiva que busca redefinir qué es el crecimiento, con énfasis en los beneficios para toda la sociedad. Esto implica disociar la actividad económica del consumo de recursos finitos y eliminar los residuos del sistema desde el diseño (Macarthur, 2021). Se basa en tres principios:

- Eliminar residuos y contaminación desde el diseño

- Mantener productos y materiales en uso
- Regenerar sistemas naturales



Figura 20. Principios de la economía circular.

(EuroParl, 2022).

J. Análisis financiero y análisis coste-beneficio

El análisis financiero consiste en la comparación de los ingresos y los costos generados durante la vida del proyecto. La diferencia entre los ingresos y los costos totales es el valor actual neto, el beneficio que el proyecto va a reportar al agente económico que tiene derecho de propiedad sobre dichos rendimientos (Rus, 2008).

El análisis coste-beneficio tiene una aproximación diferente. En este no se comparan los ingresos con los costos, sino los beneficios sociales con los costos sociales. El resultado de restar los costos sociales de los beneficios sociales es el beneficio social neto del proyecto (Rus, 2008).

Lo que mide principalmente el análisis costo-beneficio es la relación costo-beneficio también conocida como índice neto de rentabilidad, la cual es el cociente entre el valor actual de los ingresos totales netos o beneficios netos y el valor actual de costos de inversión o costos totales de un proyecto (Arturo, 2019).

Según el análisis costo-beneficio un proyecto de inversión será rentable cuando la relación costo-beneficio sea mayor que la unidad, y no será rentable cuando dicha relación sea menor o igual a la unidad (Arturo, 2019).

$$B/C = VAI/VAC \quad (3)$$

Los pasos necesarios para calcular y analizar la relación son:

1. Identificar costos y beneficios
Se debe hacer la proyección de los costos de inversión o costos totales y de los ingresos totales netos o beneficios netos de proyecto para un periodo de tiempo determinado (Arturo, 2019).
2. Convertir costos y beneficios a un valor actual
Se debe de actualizar los datos a través de una tasa de descuento, para tomar en cuenta el valor del dinero en el tiempo (Arturo, 2019).
3. Calcular la relación costo-beneficio
Se debe dividir el valor actual de los beneficios entre el valor actual de los costos del proyecto (Arturo, 2019).
4. Analizar dicha relación
Si el valor resultante es mayor que 1 el proyecto es rentable, pero si es menor o igual a 1 el proyecto no es rentable, por lo que se debe de buscar una alternativa viable (Arturo, 2019).
5. Comparar con otros proyectos
Si se debe elegir entre varios proyectos de inversión, teniendo en cuenta el análisis cost-beneficio, se elige aquel que tenga la mayor relación costo-beneficio (Arturo, 2019).

K. Estadística

La estadística es una de las herramientas fundamentales de la investigación científica, su uso es esencial especialmente cuando se trabajan problemas de investigación en los que se miden variables cuantitativas, y su importancia es mayor en los diseños experimentales, en los cuales se debe de controlar la validez de los resultados experimentales. La estadística permite conducir la experiencia de investigación desde el planteamiento del problema hasta la comprobación de hipótesis, y la elaboración de conclusiones. Por esta razón, para realizar una investigación se deben de tener claras las aplicaciones de las diversas técnicas y medidas estadísticas en función de las necesidades específicas del trabajo de investigación que se está realizando (Lizarzabury, 2013).

1. Población y muestra

La población es el conjunto total de individuos, objetos o medidas que poseen características comunes observables. Al realizar una investigación se deben de tener en cuenta las características esenciales necesarias (Hernández, 2010).

- Homogeneidad: que los miembros de la población tengan las mismas características según las variables que se consideran en la investigación (Hernández, 2010).
- Tiempo: se refiere al periodo de tiempo donde se ubica la población de interés (Hernández, 2010).

La muestra es un subconjunto representativo de la población. Existen diferentes tipos de muestreo. El tipo de muestra seleccionada depende de la calidad y cuan representativo es necesario para la investigación. Los métodos de selección de muestra son aleatoria, estratificada y sistemática. El tamaño de

la muestra depende de la precisión con que el investigador desea llevar a cabo el estudio, pero mientras más grande sea la muestra mayor representativa de la población será (Hernández, 2010).

2. Medidas de tendencial central

Con el objetivo de resumir los datos obtenidos en un valor representativo adecuado se utilizan las siguientes medidas (Johnson & Kuby, 2012).

3. Media aritmética

La media aritmética de un conjunto de valores de una variable x está determinada por la suma de dichos valores, dividida por el número de muestra n , representada matemáticamente por:

$$x_p = \frac{\sum x_i}{n} \quad (4)$$

(Johnson & Kuby, 2012)

4. Medidas de dispersión

Describen la cantidad de dispersión que se encuentra entre los datos (Johnson & Kuby, 2012).

i. Varianza

Es la media de las desviaciones x al cuadrado respecto a la media aritmética x_p de una distribución estadística.

$$S^2 = \frac{\sum(x-x_p)^2}{n-1} \quad (5)$$

(Johnson & Kuby, 2012)

ii. Desviación estándar

Es la raíz cuadrada positiva de la varianza.

$$S = \sqrt{S^2} \quad (6)$$

V. ANTECEDENTES

En 2005, la Facultad de Química e Ingeniería Química de la Universidad Nacional Mayor de San Marcos, Perú presentó una investigación de Síntesis de un Intercambiador Catiónico a partir de Poliestireno comercial/residual, en la cual se presenta la investigación de la descomposición de las cadenas de poliestireno para su posterior entrecruzamiento con divinil benceno y polimerización (Cjuno & Arroyo, 2008).

En 2007, la *Revista Iberoamericana de Polímeros* publicó “Síntesis, Caracterización y Aplicación del PS entrecruzado a partir de Residuos de PS” donde se presenta el mecanismo de sulfonación y entrecruzamiento del poliestireno, así como el método utilizado y las pruebas hechas al producto para su uso como resina de intercambio iónico para la remoción de cromo hexavalente en aguas industriales (León y Ramírez, 2007).

En 2013, la Universidad de San Carlos de Guatemala presentó una investigación de la “Elaboración de Resina de Intercambio Iónico a partir de la Sulfonación y Entrecruzamiento de Poliestireno para la Separación de Iones Metálicos en Solución”, la cual sigue el procedimiento publicado en la *Revista Iberoamericana* con cambios en las variables del proceso (Córdova, Elaboración de Resina de Intercambio Iónico a partir de la Sulfonación y Entrecruzamiento de Poliestireno para la Separación de Iones Metálicos en Solución, 2013).

En 2014, la Universidad Autónoma de Guadalajara patentó el Procedimiento para Sulfonar Poliestireno de Medio Impacto y Utilizarlo como Catalizador en Reacciones de Esterificación de Ácidos Grasos, en donde presentan su forma de realizar la reacción de sulfonación del poliestireno, así como su posterior uso como catalizador (Aguilar & Herrera, 2014).

En 2015, la Universidad de San Carlos de Guatemala presentó una investigación la cual fue una continuación del informe antes mencionado. La investigación fue la “Evaluación de Alternativas de Reciclaje de Poliestireno Expandido (Duroport)” en donde compararon la producción de resina de intercambio iónico y la producción de un recubrimiento plástico (Méndez, Córdova, & Corado, Evaluación de Alternativas de Reciclaje de Poliestireno Expandido (Duroport), 2015)

En 2019, la Universidad Distrital Francisco José de Caldas y el Servicio Nacional de Aprendizaje SENA realizaron una revisión bibliográfica sobre “Alternativas de Bajo Impacto Ambiental para el Reciclaje de Poliestireno Expandido a Nivel Mundial” en la cual se evaluó el impacto ambiental de cada técnica por medio de una matriz en Excel. Determinando que las técnicas con menos impacto ambiental para el reciclaje de poliestireno son la mecánica y la química (Arthur-López & Pérez-Mora, 2019).

Además de los artículos e informes antes citados, se hizo uso del artículo “Chemical Recycling of Polystyrene” el cual presenta el reciclado químico de poliestireno utilizando el método de disolución/reprecipitación (Archilias, Kanellopoulou, & Lappas, 2015). El artículo “Tratamiento de residuos

de Poliestireno expandido utilizando solventes verdes” de la Universidad Pontificia Bolivariana donde se utilizó la técnica de disolución/precipitación (López, Rhenals, & Tangarife, 2013). Además, se consultó la tesis doctoral *Investigación de las Variables Limitantes en la Recuperación de Residuos de Poliestireno Procedentes del Sector Envase* (Parres F. , 2005).

El artículo “Desalcalinización del agua mediante intercambio iónico de la Universidad de Lima” presenta el intercambio iónico como una alternativa viable y de bajo costo para reducir la alcalinidad de un agua de proceso que debe mantener un contenido mínimo de sales (bicarbonato y carbonato de calcio y magnesio) (Cortijo-Herrera, 2013).

La tesis *Diseño y construcción de un ablandador de agua mediante el empleo de resinas de intercambio iónico para abastecer los equipos térmicos del laboratorio de termodinámica* plantea como solución para el daño y taponamiento de sistemas de generación de vapor, intercambiadores de calor y sistemas de bombeo de agua el diseño y construcción de un ablandador de agua de tipo iónico (Cervantes, 2015).

En el artículo “Solución de problemas en la producción de agua desmineralizada por intercambio iónico” se revisan los problemas presentados en una planta de tratamiento que produce agua de alta pureza para alimentar calderas de alta presión que utilizan sistemas de intercambio iónico (Torre, 2014).

El informe *Diseño de un sistema de control para el proceso de ablandamiento de agua mediante resinas de intercambio iónico* presenta un diseño de sistema de control automático para el intercambio iónico con un analizador de bajo coste (Sánchez, 2019).

VI. METODOLOGÍA

Reactivos y equipos

- Desechos de poliestireno expandido
- Agua destilada
- Acetona (grado reactivo)
- Ácido sulfúrico 95-97%
- Óleum (Trióxido de Azufre 65%)
- Ácido clorhídrico
- Hidróxido de sodio
- Fluorolube
- Beaker (1 L)
- Beaker (500 mL)
- Beaker (50 mL)
- Probeta (100 mL)
- Probeta (50 mL)
- Probeta (10 mL)
- Pipeta (10 mL)
- Pipeta (5 mL)
- Matraz de bola de 250 mL
- Condensador
- Embudo de adición
- Trampa para la humedad
- Columna de cromatografía
- Matraz volumétrico (1 L)
- Termómetro
- Filtros
- Horno
- Balanza
- Estufa con agitador y agitador
- Desecador
- Mortero y pistilo
- Campana de extracción
- Espectrofotómetro IR PerkinElmer

ETAPA 1: Preparación de poliestireno sulfonado entrecruzado.

- Fragmentar los 200 g de empaques de EPS a un tamaño de partícula menor o igual a 4 mm en un molino de cuchillas.
- Homogenizar el material mediante el método de cuarteo, para obtener una muestra de 50 g que represente las propiedades de todo el lote.
- Ubicar los desechos sólidos a manera de pila y mezclar hasta tener un montículo en forma de “pastilla”, dividir la pila en cuatro partes iguales (50 g), luego tomar dos para repetir el procedimiento para obtener una muestra de 25 g, repetir para obtener muestras de 12.5g.

1.1 Pretratamiento

- Preparar solución de acetona al 80% v/v.
- Agregar el poliestireno expandido a la solución de acetona, dejar desgasificar por 30 minutos.
- Filtrar la solución para recuperar el poliestireno.
- Lavar la muestra con agua destilada.
- Secar en el horno por 20 min a 60°C.
- Pesar la muestra de poliestireno recuperado

1.2 Reacción

- Colocar la muestra en un matraz bola de 250 mL con un condensador, embudo de adición, trampa para la humedad y baño maría.
- Agregar ácido sulfúrico concentrado y ácido sulfúrico fumante (óleum) en la proporción adecuada.
- Calentar en baño maría y agitar la mezcla, a la temperatura y tiempo establecido.
- Neutralizar ácido remanente con solución de hidróxido de sodio 0.1M.
- Filtrar el producto obtenido y lavar con agua fría para eliminar el exceso de ácidos que pudieron quedar libres.
- Secar el producto en una estufa a temperatura de 60°C.
- Hacer el procedimiento con proporciones de agente sulfonante 20%, 30%, 40%, con un tiempo de reacción de 1h, 2 h y 3h a una temperatura de 78°C.
- Determinar el rendimiento.

ETAPA 2: Determinación de la capacidad de retención de calcio y magnesio de resina.

- Preparar soluciones de carbonato de calcio y sulfato de magnesio a concentraciones conocidas.
- Determinar la concentración de las soluciones con el método de titulación con EDTA.
- Pesar 8.0 gramos de la resina elaborada a partir del poliestireno sulfonado entrecruzado.
- Enjuagar la muestra pesada con agua desionizada, y cargar la columna de cromatografía.
- Pasar una solución de HCl 0.1M por la columna a una velocidad de una gota por segundo, mantener la muestra cubierta con ácido en todo momento. Escurrir el líquido a nivel de la resina y desechar el efluente.
- Pasar agua desionizada por la columna de resina tratada con ácido, a una velocidad de una gota por segundo, hasta que el efluente sea de color amarillo a naranja de metilo. Escurrir a nivel de la resina y desechar el efluente.
- Pasar 100 mL de las soluciones de calcio y magnesio con concentración conocida, desechar las primeras gotas de efluente y recolectar la muestra de agua.
- Realizar el análisis de dureza de agua con el método de titulación con EDTA.
- Calcular el porcentaje de retención de calcio y magnesio.
- Repetir procedimiento para cada muestra de resina obtenida del poliestireno sulfonado entrecruzado.

ETAPA 3: Determinación de solubilidad, densidad, capacidad de retención de agua, grado de sulfonación y grupos funcionales del poliestireno sulfonado entrecruzado.

3.1 Solubilidad

- Determinar la solubilidad del poliestireno obtenido en diferentes solventes, a temperatura ambiente y a temperatura alta con agitación por 1 hora.

3.2 Densidad de retrolavado

- Pesar 4.5 gramos de la resina obtenida.
- Transferir a una probeta previamente calibrada.
- Retrolavar con agua durante 10 min a un ritmo constante.
- Drenar hasta que el nivel de agua sea entre 20-30 mL por encima de la resina.
- Registrar el volumen (mL) de la resina.

3.3 Retención de agua

- Pesar 4.5 gramos de la resina obtenida.
- Secar la muestra por 24 horas a 100°C.
- Dejar enfriar la muestra por 30 minutos en un desecador y pesar de nuevo.

3.4 Grado de sulfonación

- Durante el proceso de la reacción del poliestireno con agente sulfonante, pesar la muestra inicial, luego pesar cada 10 minutos por el tiempo de reacción.
- Realizar la gráfica del incremento de peso relativo en función del tiempo en minutos.

3.5 Grupos funcionales

- Secar la muestra de resina que se va a evaluar a 100°C por 24 horas.
- Moler la muestra en un mortero hasta obtener partículas muy finas.
- Mezclar la muestra con Fluorolube y agregar a la celda de cloruro de sodio.
- Analizar en el espectrofotómetro infrarrojo.
- Repetir procedimiento con la muestra inicial de poliestireno expandido.

ETAPA 4: Análisis costo/beneficio de la resina obtenida del poliestireno sulfonado entrecruzado

- Examinar los requerimientos y limitaciones de la sulfonación del poliestireno expandido.
- Determinar y estimar los costos de cada parte del proceso, y los beneficios que esto traerá.
- Integrar toda la información importante de cada parte del proceso.
- Determinar los costos y beneficios a través de un periodo de tiempo.
- Comparar la relación entre costo/beneficio del proceso para evaluar la mejor opción.
- Comparar los resultados del análisis costo/beneficio con el uso de resina comercial.

Registro de datos

Cuadro I. Parámetros de control del proceso de sulfonación de poliestireno.

Proporción de sulfonante (%)	Tiempo de reacción (h)	Temperatura de reacción (°C)	Masa de Poliestireno (g)	Rendimiento (%)	Descripción

Cuadro II. Capacidad de retención de calcio y magnesio de la resina.

No. De muestra	Peso de resina (g)	Volumen de agua (mL)	Calcio/magnesio inicial (ppm)	Calcio/magnesio final (ppm)	Porcentaje de retención (%)

Cuadro III. Solubilidad de la resina en distintos solventes.

Disolvente	Temperatura ambiente	Temperatura alta	Agitación

Cuadro IV. Densidad de la resina.

No. de muestra	Peso de la muestra inicial (g)	Volumen de agua agregado (mL)	Volumen total (mL)	Densidad (g/mL)	Densidad promedio (g/mL)

Cuadro V. Capacidad de retención de agua de la resina.

No. de muestra	Peso de la muestra inicial (g)	Peso muestra seca (g)	Porcentaje de agua retenida (%)	Porcentaje de agua retenida promedio (%)

Cuadro VI. Grado de sulfonación del poliestireno.

Tiempo (min)	Peso de muestra (g)	Peso relativo (mol SO ₃ H + SO ₂ /g)

Cuadro VII. Grupos funcionales de la resina y del poliestireno expandido.

Muestra	No. de muestra	Frecuencia (cm ⁻¹)	Intensidad	Vibración	Grupo funcional	

Cuadro VIII. Costo de materiales para el proceso de sulfonación de poliestireno.

Material	Peso (g)	Volumen (mL)	Costo (Q)

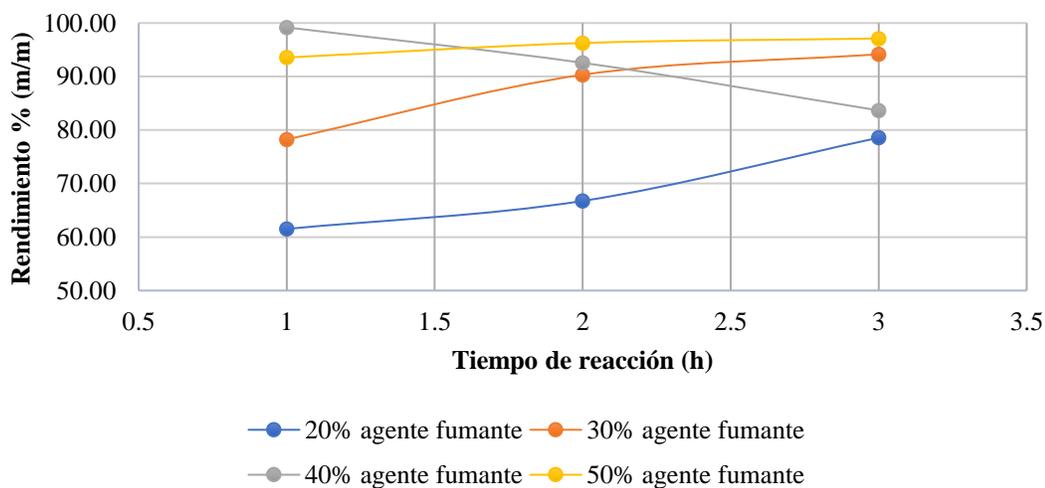
VII. RESULTADOS

Cuadro 5. Rendimiento de la reacción de sulfonación y entrecruzamiento del poliestireno con diferentes tiempos y proporciones de óleum.

% Óleum en la reacción (v/m) Anexo F	Tiempo (h)	No. Muestra	Rendimiento (% m/m)				Intervalo de confianza (\pm)
			Promedio	\pm	Desviación	Varianza	
20%	1	1	61.5242	0.0039	0.40	0.16	0.39
	2	4	66.7525	0.0042	0.08	0.01	0.08
	3	7	78.5686	0.0058	0.46	0.21	0.45
30%	1	2	78.2556	0.0047	0.32	0.10	0.31
	2	5	90.3301	0.0053	0.18	0.03	0.18
	3	8	94.1701	0.0054	0.12	0.01	0.12
40%	1	3	99.1804	0.0058	0.36	0.13	0.35
	2	6	92.5628	0.0055	0.27	0.07	0.26
	3	9	83.6646	0.0049	0.31	0.10	0.30
50%	1	10	93.5586	0.0054	0.25	0.06	0.25
	2	11	96.2646	0.0083	0.60	0.36	0.59
	3	12	97.1026	0.0057	0.20	0.04	0.20

Nota: Las reacciones se realizaron en triplicado, los datos originales se encuentran en el Cuadro 36 y el cálculo de muestra 1 se encuentran en la sección de Anexos.

Figura 21. Comparación de rendimiento de reacción de 12 muestras de producto obtenidas de la reacción de sulfonación y entrecruzamiento de poliestireno a diferentes condiciones.



Nota: Se utilizaron los promedios presentados en el Cuadro 5.

Cuadro 6. Evaluación visual de los productos obtenidos de la reacción de sulfonación y entrecruzamiento de poliestireno a diferentes condiciones.

% Óleum en la reacción (v/m) Anexo F	Tiempo (h)	No. Muestra	Calidad de la superficie		
			Uniformidad del producto	del producto	Consistencia del producto
20%	1	1	3	3	4
	2	4	4	3	4
	3	7	4	4	3
30%	1	2	5	3	5
	2	5	4	5	4
	3	8	4	5	4
40%	1	3	5	3	5
	2	6	5	4	5
	3	9	4	5	4
50%	1	10	4	5	5
	2	11	3	5	4
	3	12	4	5	5

Nota: Se evaluó la apariencia de las muestras, donde 5 es la mejor apariencia y 1 es la peor apariencia.

Cuadro 7. Capacidad de retención de calcio de los productos obtenidos de la reacción de sulfonación y entrecruzamiento de poliestireno a diferentes condiciones.

% Óleum en la reacción (v/m) Anexo F	Tiempo (h)	No. Muestra	% Retención de calcio (m/v)				Intervalo de confianza (±)
			Promedio	±	Desviación	Varianza	
20%	1	1	48.9796%	0.0464	0.0204	0.0004	0.0231
	2	4	46.2585%	0.0432	0.0312	0.0010	0.0353
	3	7	60.0000%	0.0514	0.0214	0.0005	0.0242
30%	1	2	61.6883%	0.0517	0.0406	0.0016	0.0459
	2	5	85.0000%	0.0698	0.0247	0.0006	0.0280
	3	8	85.0000%	0.0643	0.0539	0.0029	0.0610
40%	1	3	83.5714%	0.0643	0.0429	0.0018	0.0485
	2	6	72.1429%	0.0539	0.0966	0.0093	0.1093
	3	9	63.5714%	0.0526	0.0327	0.0011	0.0370
50%	1	10	71.4286%	0.0617	0.0446	0.0020	0.0505
	2	11	75.0000%	0.0603	0.0371	0.0014	0.0420
	3	12	83.5714%	0.0684	0.0214	0.0005	0.0242

Nota: Se realizó el análisis en triplicado, los datos originales se encuentran en los Cuadros 39, 40, 41, 42 y el cálculo de muestra 2 se encuentran en el Anexo.

Cuadro 8. Capacidad de retención de magnesio de los productos obtenidos de la reacción de sulfonación y entrecruzamiento de poliestireno a diferentes condiciones.

% Retención de magnesio (m/v)							
% Óleum en la reacción (v/m)	Tiempo (h)	No. Muestra	Promedio	±	Desviación	Varianza	Intervalo de confianza (±)
20%	1	1	64.2857%	0.0142	0.0143	0.0002	0.0162
	2	4	62.3810%	0.0141	0.0218	0.0005	0.0247
	3	7	68.5714%	0.0139	0.0143	0.0002	0.0162
30%	1	2	65.9722%	0.0129	0.0434	0.0019	0.0491
	2	5	85.2381%	0.0162	0.0165	0.0003	0.0187
	3	8	85.2381%	0.0154	0.0360	0.0013	0.0407
40%	1	3	84.2857%	0.0154	0.0286	0.0008	0.0323
	2	6	76.6667%	0.0142	0.0644	0.0041	0.0729
	3	9	70.9524%	0.0140	0.0218	0.0005	0.0247
50%	1	10	69.5238%	0.0151	0.0839	0.0070	0.0949
	2	11	78.5714%	0.0149	0.0247	0.0006	0.0280
	3	12	84.2857%	0.0160	0.0143	0.0002	0.0162

Nota: Se realizó el análisis en triplicado, los datos originales se encuentran en los Cuadros 39, 40, 41 y 42 y el cálculo de muestra 3 se encuentran en el Anexo.

Cuadro 9. Variables de reacción seleccionada con mejores resultados rendimiento/eficiencia.

Muestra	5
% Óleum en reacción (v/m)	30%
Tiempo de reacción (h)	2
Rendimiento (m/m)	90.3301 ± 0.0053%
Retención de calcio (m/v)	85.0000 ± 0.0698%
Retención de Magnesio (m/v)	85.2381 ± 0.0162%

Cuadro 10. Grupos funcionales del producto de reacción obtenido con variables seleccionadas de 30% (v/m) óleum y 2 horas de reacción obtenidos de espectro IR.

Longitud de onda (cm ⁻¹)	Grupo funcional		Longitud de onda teórica (cm ⁻¹)
3350.75	OH	Asociación polimérica	3400-3200
3026.2	Alqueno Cis	Tensión C-H	3040-3010
2922.68	Alcano	Tensión C-H	2962-2853
2849.87	Alcano	Tensión C-H	2962-2853
1638.87	Alqueno Cis	Tensión C-C	1658
1602.03	Aromático	Tensión C-C	1600
1492.57	Aromático	Tensión C-C	1490
1451.65	Aromático	Tensión C-C	1450
1181.41	Ácido sulfónico	Tensión S--O	1210-1150
1126.96	Sulfona	Tensión S--O	1160-1120
1051.91	Sulfona	Tensión C--S	1200-1050
1030.36	Ácido sulfónico	Tensión S--O	1060-1030
745.97	Aromático 4 átomos de hidrógeno adyacentes	Enlace C-H	750
694.3	Alqueno Cis	Enlace C-H	690

Nota: El espectro IR de la muestra correspondiente se observa en la Figura 21 en el área de Anexos. Los grupos funcionales se determinaron según los picos de absorción de energía mostrados en el espectro IR. Los grupos funcionales teóricos fueron obtenidos del libro *Química Orgánica* de L.G. Wade, Jr.

Cuadro 11. Solubilidad cualitativa de del producto de reacción obtenido con variables seleccionadas de 30% (v/m) óleum y 2 horas de reacción.

Disolvente	25°C	50°C	80°C
Agua	(-)	(-)	(-)
Acetona	(-)	(-)	(-)
Etanol	(-)	(-)	(-)
Metanol	(-)	(-)	(-)
Ácido sulfúrico	(-)	(-)	(-)
Ácido oleico	(-)	(-)	(-)
Ácido clorhídrico	(-)	(-)	(-)
Solución salina	(-)	(-)	(-)
Hidróxido de sodio	(-)	(-)	(-)

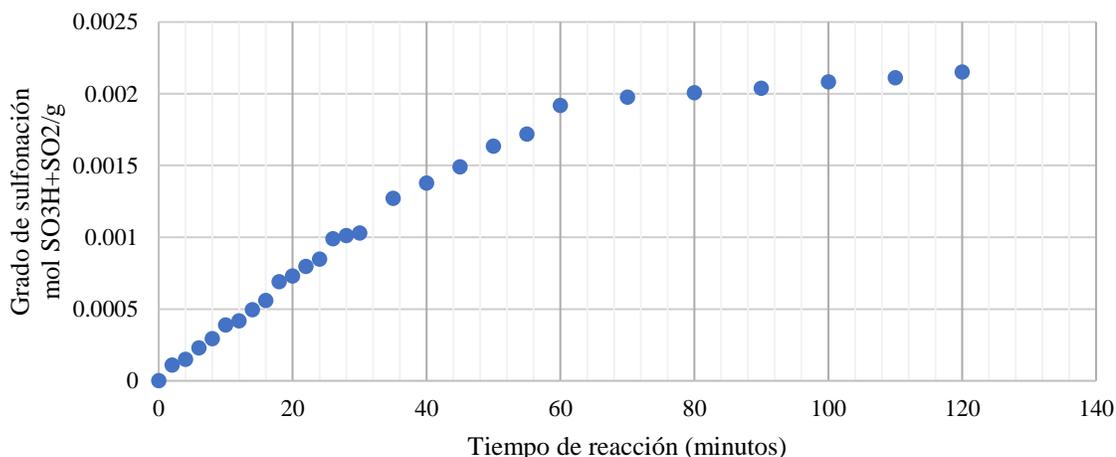
Nota: En los disolventes evaluados no mostró solubilidad el producto por lo que se tomó el análisis cualitativo.

Cuadro 12. Densidad, retención de agua y coeficiente de transferencia de del producto de reacción obtenido con variables seleccionadas de 30% (v/m) óleum y 2 horas de reacción.

Densidad (g/mL)	Desviación estándar	Varianza	Intervalo de confianza (±)	Retención de agua (%MC)	Desviación estándar	Varianza	Intervalo de confianza (±)	Coefficiente de transferencia de masa (kg/m ² s)
0.9219 ± 0.0023	0.1068	0.0114	0.1208	25.8475 ± 0.5231	2.5791	6.6517	2.5275	0.8191 ± 0.0356

Nota: Estos valores fueron comparados con datos de resina comercial. Los datos originales se encuentran en los Cuadros 44, 48 y 51 y los cálculos de muestra 4 y 6 en Anexos.

Figura 22. Incremento del peso relativo de la muestra de producto con variables seleccionadas de 30% (v/m) y 2 horas de reacción en función del tiempo en minutos durante el proceso de entrecruzamiento.



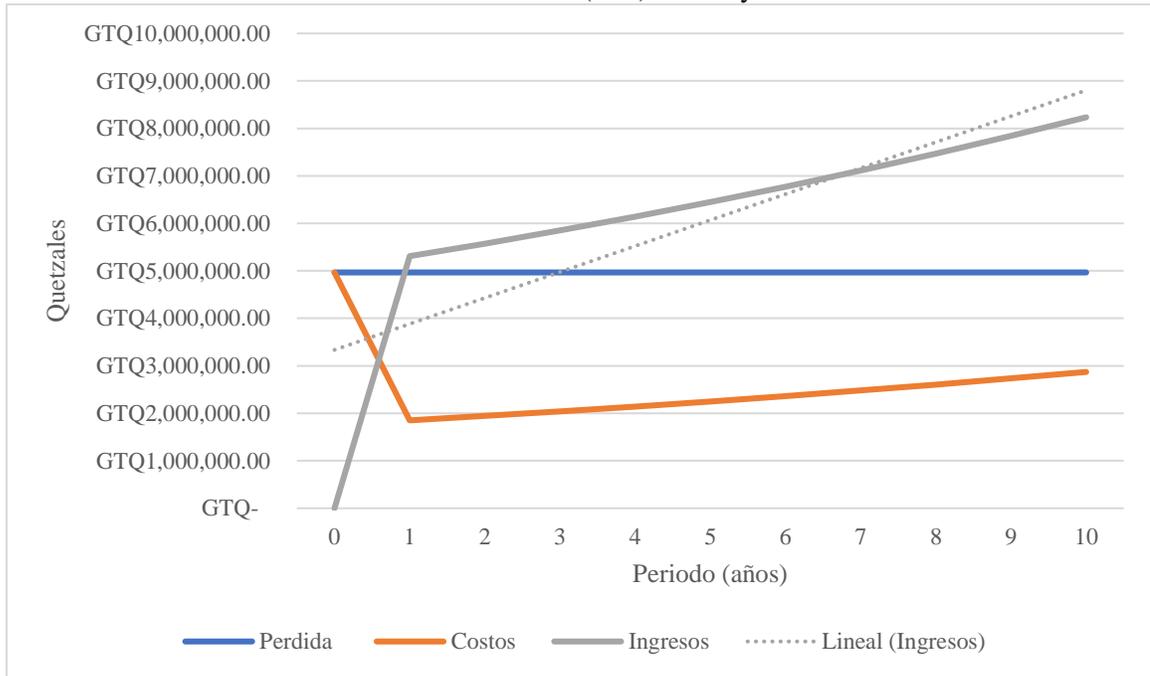
Nota: Comportamiento del inverso del peso relativo en función del tiempo de sulfonación del poliestireno durante el proceso de entrecruzamiento. Los datos originales se encuentran en el Cuadro 50 y cálculo de muestra 5 en Anexos.

Cuadro 13. Costo por kg del producto de reacción obtenido con variables seleccionadas de 30% óleum (v/m) y 2 horas y precio promedio de resinas de intercambio iónico comerciales.

Muestra	Costo (Q/kg)
Poliestireno sulfonado entrecruzado	122.95
Resina comercial	55.15

Nota: El costo se obtuvo de los reactivos utilizados y los servicios auxiliares para el proceso de producción escala laboratorio.

Figura 23. Análisis costo/beneficio del producto de reacción obtenido con variables seleccionadas de 30% (v/m) óleum y 2 horas



Nota: Se realizó una predicción para la realización del proyecto en planta industrial. Los flujos de efectivo se encuentran en los Cuadros 33, 34 y 35 en Anexos. El costo de producto se obtuvo con costo de materias primas, servicios auxiliares, salarios, etc.

VIII. ANÁLISIS DE RESULTADOS

El objetivo principal de la presente investigación fue evaluar el proceso de producción de resina de intercambio iónico por reciclaje químico de poliestireno expandido por sulfonación y entrecruzamiento, con el fin de obtener una alternativa para los desechos de poliestireno expandido y promover la aplicación de la economía circular. Para lo cual se modificó la estructura del poliestireno a través de una reacción química con ácido sulfúrico y óleum, obteniendo así, un material similar a una resina de intercambio iónico. El poliestireno expandido tuvo un pretratamiento con acetona al 80% (v/v) para la des expansión de este, sin embargo el material no requirió de una limpieza previa. La reacción se llevó a cabo a diferentes concentraciones de óleum y con diferentes tiempos de reacción, con el fin de evaluar las características del producto y obtener las mejores variables para el proceso.

La reacción se realizó con óleum ya que dicho reactivo presenta un exceso de trióxido de azufre gaseoso, lo que facilita la reacción en dos fases, requiriendo así de menor tiempo y requerimiento de calor comparado con el uso de ácido sulfúrico concentrado. Esto es debido a que la reacción de sulfonación se lleva a cabo por una sustitución aromática electrofílica, para lo cual es necesaria la formación del electrófilo de trióxido de azufre, por lo que, al utilizar óleum ya no es necesaria la energía que se utiliza en la reacción común para la formación de trióxido de azufre.

La reacción se llevó a cabo con diferentes concentraciones de óleum y diferentes tiempos de reacción. Como se puede observar en el Cuadro 5, la reacción presentó rendimientos entre 60% (m/m) y 99% (m/m). De esta manera se determinó que la reacción con 20% (v/m) de óleum presenta rendimientos bajos comparados con el 30% (v/m), 40% (v/m) y 50% (v/m) de óleum, lo cual se puede deber a que la proporción de óleum no fue la suficiente para realizar la sulfonación del poliestireno en el tiempo de 1, 2 o 3 horas y a temperatura de 80°C. El rendimiento de las reacciones de 30, 40 y 50% (v/m) para dos y tres horas fueron similares estando entre el 90 y 99% (m/m), por lo que la comparación de variables se observó de mejor manera en los espectros infrarrojo y en la capacidad de retención de calcio y magnesio.

Para la evaluación de las propiedades del poliestireno sulfonado entrecruzado se siguió la Norma ASTM D2187, la cual indica los métodos estándar para pruebas de propiedades físicas y químicas de resinas de intercambio iónico.

Se realizó una evaluación visual, mostrada en el Cuadro 6, de la uniformidad, calidad y consistencia del producto en donde se observó que las muestras 5, 6, 8, 9, 10 y 12 presentan el mejor desempeño comparado con las otras muestras. Esto es consistente con la evaluación de rendimiento realizada. El producto de la reacción se presentó como perlas esféricas tipo gel y de color ámbar, como se esperaba de acuerdo con las resinas de intercambio iónico con grupo funcional de ácido sulfónico comerciales. Las muestras en las que se utilizó 20% (v/m) de óleum presentaron un color ámbar leve y algunas esferas cambiaron a tipo gel, no

presentando uniformidad. De igual manera se presentó la muestra con 30%(v/m) de óleum y una hora de reacción. Esto demuestra que la cantidad de trióxido de azufre presente al utilizar el 20% (v/m) de óleum no es la suficiente para realizar la sulfonación a una temperatura de 80°C y un tiempo de reacción de hasta 3 horas. El producto de la reacción fue uniforme y presentó las características esperadas a partir de la muestra 5, con 30% (v/m) de óleum y 2 horas de reacción. Las muestras con 40 y 50% (v/m) de óleum presentaron uniformidad y no se observaron cambios físicos entre el tiempo de reacción.

Para determinar las variables adecuadas con las que el poliestireno sulfonado entrecruzado realizara la función de una resina de intercambio iónico, se analizó la capacidad de retención de calcio y magnesio de cada una de las muestras obtenidas. De esta manera, como se observa en los Cuadros 7 y 8, las muestras que presentaron mayores porcentajes (m/v) de retención fueron las muestras 5 y 8, con 30% (v/m) de óleum y 2 y 3 horas de reacción. La muestra 5 removió un 85% (m/v) de calcio y magnesio respecto a la concentración de entrada, de igual manera la muestra 8. De acuerdo con los resultados obtenidos se puede afirmar que el producto obtenido de la reacción de sulfonación y entrecruzamiento de poliestireno cumple con la función de una resina de intercambio iónico, en donde no todo el poliestireno se encuentra entrecruzado por lo cual los grupos sulfónicos libres sirven de intercambiadores para atrapar los minerales provenientes de las corrientes de agua. La regeneración de la resina se realizó con solución de ácido clorhídrico con un posterior lavado con agua destilada, de esta manera se comprobó que el producto de reacción de sulfonación y entrecruzamiento de poliestireno puede ser utilizado hasta 4 veces obteniendo las mismas capacidades de retención de calcio y magnesio.

La reacción de sulfonación de la cadena polimérica del poliestireno es favorecida por la activación de cada anillo aromático de la unidad monomérica presente en la cadena del grupo etileno de la unidad básica del estireno; esta activación es débil con orientación orto-para. La sustitución aromática electrofílica provoca que el anillo bencénico posea un grupo sulfónico desactivador fuerte y orientador meta. La reacción de disulfonación causa el entrecruzamiento de un grupo bencesulfonato con un nuevo anillo aromático de otra cadena. Este entrecruzamiento se identifica como un grupo sulfona. De esta manera, los grupos que deben de estar presentes en el espectro IR de las muestras para determinar que el poliestireno se encuentra sulfonado y entrecruzado son grupos sulfónicos, orientador meta, grupo sulfona y aromáticos sustituidos en para con 4 hidrógenos adyacentes, según se muestra en la Figura 10 (b).

Según los espectros IR obtenidos con el espectrofotómetro PerkinElmer Spectrum Versión 10.5.4 de la Universidad del Valle de Guatemala, la muestra 5 la cual es el producto de la reacción de sulfonación y entrecruzamiento con las variables de 30% (v/m) óleum y 2 horas de reacción presenta los grupos funcionales esperados del poliestireno sulfonado entrecruzado mencionados anteriormente, los cuales se pueden observar en el Cuadro 10. Estos fueron asociación polimérica (OH) la cual se debe a la cadena polimérica del poliestireno, aromático con 4 átomos de hidrógeno adyacentes con sustitución para el cual corresponde al entrecruzamiento ocurrido en la reacción de disulfonación, alqueno cis presente en los anillos aromáticos,

grupos de ácido sulfónico que corresponde a la parte del poliestireno que no se entrecruzó y son los grupos que quedan libres para el intercambio de iones y, por último, los grupos sulfona provenientes de la sulfonación con los cuales se unen los anillos aromáticos para el entrecruzamiento. De esta manera se determinó que las variables adecuadas en rendimiento, funcionalidad y costo para la producción de poliestireno sulfonado entrecruzado es 30% (v/m) de óleum y 2 horas de reacción. En la sección de Anexos se pueden observar los espectros de todas las muestras en donde se determinó que las muestras con 20% (v/m) de óleum y la muestra de 30% (v/m) óleum y una hora de reacción no presentan todos los grupos esperados confirmando que la reacción no ocurrió de la manera esperada con dichas condiciones debido a que el tiempo de contacto de fases pudo no ser el necesario o la temperatura debió variar. Las muestras con 40 y 50% (v/m) de óleum y 1 y 2 horas de reacción presentan los grupos funcionales esperados; sin embargo, con un mayor tiempo de reacción, muestran diferentes bandas que no se esperaban según la estructura química del poliestireno sulfonado entrecruzado, lo que indica que existió degradación de la cadena polimérica a estas condiciones.

Se realizaron pruebas de solubilidad, densidad, retención de agua y coeficiente de transferencia de masa para la caracterización de la muestra 5 y su posterior comparación con resinas de intercambio iónico comerciales. En el Cuadro 11 se muestran los disolventes que se emplearon, así como las temperaturas a las que fueron tratadas y los resultados obtenidos, en donde se observa que en los disolventes utilizados no es posible disolver el poliestireno sulfonado entrecruzado por lo que se obtuvo la prueba de solubilidad como una prueba cualitativa ya que no fue posible obtener valores cuantitativos. Esto se debe a que el entrecruzamiento de la cadena polimérica disminuye la solubilidad de la matriz polimérica, provocando que la molécula no se soluble. Con el agua el polímero tiene un comportamiento diferente que, con los demás disolventes, ya que se observó que con este absorbe cierta cantidad de agua y se hincha. La retención de agua de este material se debe a la presencia de los grupos sulfónicos hidratables. Por esta razón fue necesario evaluar el porcentaje de retención de agua en el poliestireno sulfonado entrecruzado.

El poliestireno sulfonado entrecruzado obtenido con 30% (v/m) de óleum y dos horas de reacción presentó una capacidad de retención de agua de 25.85% (MC) lo cual es bajo comparado con el 45-48% (MC) de retención de agua de una resina comercial. En la Figura 36, en el área de anexos, se puede observar que mientras aumenta el porcentaje de óleum de la reacción, la capacidad de retención de agua de las muestras disminuye, llegando hasta 18% (MC). Según la Norma ASTM D2187, los valores más altos de retención de agua indican una baja reticulación de cadena, por lo que al aumentar el porcentaje de óleum aumenta la longitud de cadena lo cual disminuye el carácter hidrofílico del material. Además, valores bajos de retención de agua son beneficiosos para la aplicación del producto de reacción como resina de intercambio iónico, ya que se tendrá menor acumulación de agua en las perlas de resina.

La densidad de la muestra de poliestireno sulfonado entrecruzado fue de 0.92 g/mL siendo mayor a la densidad de la muestra de poliestireno previo a la reacción la cual fue de 0.39 g/mL, demostrando así que es

más denso que el poliestireno, por lo que es posible utilizar el material como un adsorbedor de lecho fijo, pero debido a que la densidad es menor a la del agua, puede que estas perlas lleguen a flotar como se puede observar en la Figura 52 en el área de Anexos. La densidad de la muestra es menor a la densidad de resinas comerciales la cual es en promedio de 1.28 g/mL, lo cual demuestra un grado de entrecruzamiento menor. En la Figura 35, en la parte de anexos, se puede observar que la densidad del producto aumenta con el tiempo de reacción. Pero, se presentan valores similares para los porcentajes de 30 y 50% (v/m) óleum. El aumento de la densidad con el incremento de óleum en la reacción se debe al entrecruzamiento de la cadena polimérica, además con la formación del grupo sulfona se disminuye la cantidad de agua en la estructura. También, se pudo observar que, con el incremento del tiempo de reacción, la densidad de la muestra aumenta por lo que no se evidencia degradación de la cadena polimérica para un tiempo de hasta 3 horas.

En la Figura 22. se observa el grado de sulfonación de la muestra 5, es decir el comportamiento del inverso del peso relativo en función del tiempo de reacción de sulfonación del poliestireno. Esta gráfica demuestra que conforme el tiempo de contacto entre el poliestireno y el óleum se obtiene un mayor grado de sulfonación. Sin embargo, es posible que después de tres horas de reacción exista una degradación de la cadena polimérica. Con la gráfica del grado de sulfonación del poliestireno se pudo observar que el tiempo de contacto entre fases fue adecuado para la finalización de la reacción; además se observó que en los primeros 60 minutos el grado de sulfonación incrementó con mayor rapidez teniendo una pendiente mayor y luego de 60 minutos la pendiente fue menor mostrando que se llegará a una constante.

La operación de intercambio iónico se realizó en una columna de cromatografía simulando una torre de adsorción en semicontinuo, en un lecho fijo de resina a través del cual fluye la disolución. Utilizando este método, se obtuvo el coeficiente de transferencia de masa del poliestireno sulfonado entrecruzado obtenido como se muestra en el Cálculo de muestra 6, en este caso la muestra 5, y una resina de intercambio iónico comercial. El producto de la reacción de sulfonación y entrecruzamiento con las variables seleccionadas de 30% (v/m) óleum y 2 horas de reacción presentó un coeficiente de $0.8191 \text{ kg/m}^2\text{s}$, mientras que una resina comercial tiene un coeficiente aproximado de $0.7202 \text{ kg/m}^2\text{s}$. El poliestireno sulfonado entrecruzado utilizado como resina de intercambio iónico presentó una mayor eficacia en el proceso, lo que indica que existe un equilibrio sólido-fluido y la velocidad de transferencia de la materia es mayor.

Para obtener una comparación del poliestireno sulfonado entrecruzado obtenido y las resinas comerciales, con el fin de realizar el análisis costo/beneficio, se determinó que el costo de producir 1 kg de poliestireno sulfonado entrecruzado a partir de poliestireno expandido reciclado en laboratorio es de Q122.95 obtenido a partir de los reactivos utilizados y los servicios de agua y energía necesarios, mientras que el precio promedio de un kg de resina comercial catiónica de ácido fuerte es de Q55.15. Se determinó que el elevado costo de producción, comparado con una resina comercial, se debe al uso de ácido sulfúrico 95-97% y el óleum (ácido sulfúrico fumante 65% SO_3); además, incrementa el costo al tener que desgasificar el poliestireno expandido y el secado previo a la reacción.

El costo de producción del poliestireno sulfonado entrecruzado con las variables obtenidas de 30% (v/m) de óleum y dos horas de reacción no es rentable comparado con el precio de una resina comercial, siendo 2.22 veces el precio de una resina comercial. Sin embargo, para una institución como la Universidad del Valle de Guatemala que requiere del uso de resinas de intercambio iónico para el ablandamiento de agua utilizada en maquinaria y equipo, puede ser de interés tanto económico como material, ya que tienen los equipos y permisos adecuados para la producción de este material, además de que de esta manera se disminuye el impacto ambiental del poliestireno expandido contribuyendo a la disminución del volumen de desechos en los vertederos y en las corrientes acuosas. Por lo que se recomienda que se realice el reciclado químico del poliestireno expandido como un proyecto de curso para el entendimiento de las reacciones de sulfonación y entrecruzamiento y la puesta en práctica de la operación de transferencia de masa de intercambio iónico. De manera que el poliestireno sulfonado entrecruzado sea posteriormente usado como resina de intercambio iónico para la suavización de agua de entrada a la caldera.

Para la determinación de la rentabilidad del proyecto para una producción mayor tamaño planta industrial, se realizó el análisis económico con los flujos de efectivo en el Cuadro 32, determinando de esta manera las pérdidas, costos e ingresos del proyecto por un periodo de 10 años para la obtención de la gráfica costo/beneficio presentada en la Figura 20 en la sección de Resultados. Con esta gráfica se determinó, según los supuestos propuestos de una inversión inicial de Q38,738,700.00, los salarios necesarios para ingenieros y operarios, teniendo como venta de producto un total de 15,000 unidades mensuales durante el primer periodo teniendo un crecimiento anual de 5% con el precio de producto de Q230.00, que el punto de equilibrio será aproximadamente luego de 6 meses, teniendo ganancias después del primer periodo (1 año).

El análisis económico fue realizado a partir de lo obtenido a nivel laboratorio, sin embargo, es importante mencionar que a nivel industrial se requieren de procesos secundarios como el tratamiento de las aguas residuales debido al uso de químicos. Además, se debe tener en cuenta que la recolección de los residuos de poliestireno expandido implica costos de transporte y la compra del material. Sin embargo, se puede considerar la reducción de costos en la etapa de pretratamiento del material ya que, al realizarlo con acetona, es posible realizar la evaporación de esta a temperatura ambiente y no realizar un secado previo a la reacción. Asimismo, que el material no requiera de limpieza antes del pretratamiento es de valor agregado ya que no aumenta los costos de producción y permite el reciclaje de mayor cantidad de residuos de poliestireno expandido, a diferencia de otros tipos de reciclaje en los que el material no puede estar contaminado.

Cada reacción, prueba y análisis fue realizado en triplicado para obtener estadística y realizar una valoración del método, por lo que se obtuvo la desviación estándar y varianza de cada dato obtenido. De esta manera se determinó que el método presentó consistencia y es repetible y eficaz. Además, el análisis de error realizado a partir de las incertidumbres de los equipos demostró la validez del método. Por lo que se concluye que el método es eficaz y repetible. La principal fuente de error es causada por el tiempo insuficiente de contacto entre fases sólido-líquido durante la reacción para el 20% (v/m) óleum, y la degradación de la cadena

polimérica para tiempos y porcentajes (v/m) de óleum altos. Por lo que se recomienda evaluar el proceso con 20% (v/m) óleum con mayores tiempos de reacción y variación de temperatura, de manera que se compare el costo de producción con las condiciones de 30% (v/m) óleum y 2 horas de reacción. Además, de evaluar la reacción con 40 y 50% (v/m) con temperaturas menores a 80°C para determinar si la degradación se ve influenciada por la temperatura.

IX. CONCLUSIONES

1. El producto de reacción de sulfonación y entrecruzamiento con variables de 30, 40 y 50% (v/m) óleum y un tiempo de reacción de dos y tres horas presentaron una apariencia de perlas esféricas tipo gel y de color ámbar con uniformidad, calidad y consistencia, además dichas reacciones presentaron rendimientos entre 90 y 99% (m/m).
2. Los productos de reacción de sulfonación y entrecruzamiento de poliestireno presentaron una capacidad de retención de calcio y magnesio de 46 a 85% (m/v), de los cuales los productos de las reacciones con 30% (v/m) de óleum y dos y tres horas de reacción presentaron los mejores resultados con $85.2381 \pm 0.0142\%$ (m/v) de retención.
3. El producto de reacción de sulfonación y entrecruzamiento con variables de 30% (v/m) óleum y dos horas de reacción presentó los mejores resultados en comparación con las otras variables. Dicha muestra presentó una densidad de 0.9219 ± 0.1068 g/mL, capacidad de retención de agua de 25.8475 ± 2.5791 %MC, un coeficiente de transferencia de masa de 0.8191 ± 0.0144 kg/m²s, los grupos funcionales esperados según la estructura química del poliestireno sulfonado entrecruzado y no presentó solubilidad en los disolventes evaluados.
4. La reacción de sulfonación y entrecruzamiento de poliestireno de desecho con variables de 30%(v/m) óleum y 2 horas de reacción presentó las características de una resina de intercambio catiónico ácido fuerte, siendo eficaz para su uso en el ablandamiento de agua en la etapa de remoción de calcio y magnesio.
5. Se determinó que el costo de producción del poliestireno sulfonado entrecruzado a partir de desechos de poliestireno expandido es de Q122.95/kg, obtenido del costo de materia prima y servicios auxiliares, siendo 2.22 el precio de una resina comercial.
6. El análisis costo/beneficio de la puesta en marcha del proyecto de producción de poliestireno sulfonado entrecruzado a nivel industrial presentó un punto de equilibrio aproximadamente a los 6 meses después del inicio del proyecto, teniendo ganancias después del primer año.

X. RECOMENDACIONES

1. Realizar un estudio de la reacción de sulfonación en función de la temperatura de reacción para evaluar el comportamiento del rendimiento con esta, así como la degradación de las cadenas poliméricas del poliestireno.
2. Realizar el análisis de la reacción de sulfonación y entrecruzamiento con 20% (v/m) óleum con mayores tiempos de reacción, de manera que se determine las variables que presentan un costo mínimo de producción.
3. Realizar un estudio sobre el contacto entre fases sólido-líquido del poliestireno y la mezcla de ácido sulfúrico y óleum para determinar las mejores condiciones de contacto entre estas con el fin de mejorar la eficiencia de la reacción.
4. Evaluar de manera cuantificable por medio de espectroscopía de masas la degradación de la cadena polimérica del poliestireno sulfonado entrecruzado para diferentes condiciones de tiempo, temperatura y porcentaje de agente fumante.
5. Realizar la determinación de tamaño de partícula del poliestireno sulfonado entrecruzado por el método de cristalografía y por espectroscopia de masas MALDI-TOF.
6. Evaluar el tamaño de cadena del poliestireno sulfonado entrecruzado utilizando cromatografía por permeación en gel.
7. Evaluar la implementación del proyecto a escala planta piloto en la Universidad del Valle de Guatemala para el uso del producto dentro del laboratorio y su venta a clientes potenciales.

XI. BIBLIOGRAFÍA

- Achilias, D., Giannoulis, A., & Papageorgiou, G. (2009). Recycling of polymers from plastic packing materials using the dissolution - precipitation technique. *Polymer Bulletin*, 449-465.
- Acierno, S., Carotenuto, C., & Pecce, M. (2009). Compressive and Thermal Properties of Recycled EPS Foams. *Polymer-Plastic Technology and Engineering*, 13-19.
- Aguilar, E., & Herrera, E. (2014). *Procedimiento para Sulfonar Poliestireno de Medio Impacto y Utilizarlo como Catalizador en Reacciones de Esterificación de Ácidos Grasos*. Jalisco, México: Universidad Autónoma de Guadalajara, A.C.
- Arandes, J., Bilbao, J., & López, D. (2004). Reciclado de Residuos Plásticos. *Revista Iberoamericana de Polímeros*, 28-45.
- Archilias, I., Kanellopoulou, P., & Lappas, E. (2015). Chemical Recycling of Polystyrene. *Aristotle University of Thessaloniki*.
- Arístegui. (12 de abril de 2019). *Arístegui Maquinaria*. Obtenido de Identificación de los plásticos por sus códigos: <https://www.aristegui.info/identificacion-de-los-plasticos-por-sus-codigos/>
- Arthur-López, L., & Pérez-Mora, W. (2019). Alternativas de bajo impacto ambiental para el reciclaje de poliestireno expandido a nivel mundial. *Informador Técnico*, 83(2), 209-219.
- Arturo, K. (14 de 09 de 2019). *¿Qué es el análisis costo-beneficio*. Obtenido de <https://www.crecenegocios.com/analisis-costo-beneficio/>
- ASTM. (2009). *Standard Test Methods for Physical and Chemical Properties of Particulate Ion-Exchange Resins*. ASTM D2187-94.
- Barnetson, A. (2004). Expanded Polystyrene: Development, Processing, Applications and Key Issues. *Handbook of Polymer Foams*, 37-54.
- Billmeyer, F. (1975). *Ciencia de los polímeros*. Barcelona: Reverté.
- Brydson, J. (1999). *Plastic Materials*. Oxford.
- Cervantes, L. (2015). *Diseño y construcción de un ablandador de agua mediante el empleo de resinas de intercambio iónico para abastecer los equipos térmicos del laboratorio de termodinámica*. Quito: Universidad Politécnica Salesiana .
- Chatterjee, G., & Prasad, S. (2011). Polystyrene: Properties and its applications in sensing platforms. *Materials Science and Technologies*, 119-141.
- Cjuno, A., & Arroyo, J. (2008). *Síntesis de un intercambiador catiónico a partir de poliestireno comercial/residual*. Perú: Universidad Nacional Mayor de San Marcos.
- Connor, N. (22 de 09 de 2019). *Thermal Engineering*. Obtenido de Poliestireno expandido: <https://www.thermal-engineering.org/es/que-es-el-poliestireno-expandido-eps-definicion/>
- Córdova, O. (2013). *Elaboración de Resina de Intercambio Iónico a partir de la Sulfonación y Entrecruzamiento de Poliestireno para la Separación de Iones Metálicos en Solución*. Guatemala: Universidad de San Carlos de Guatemala.

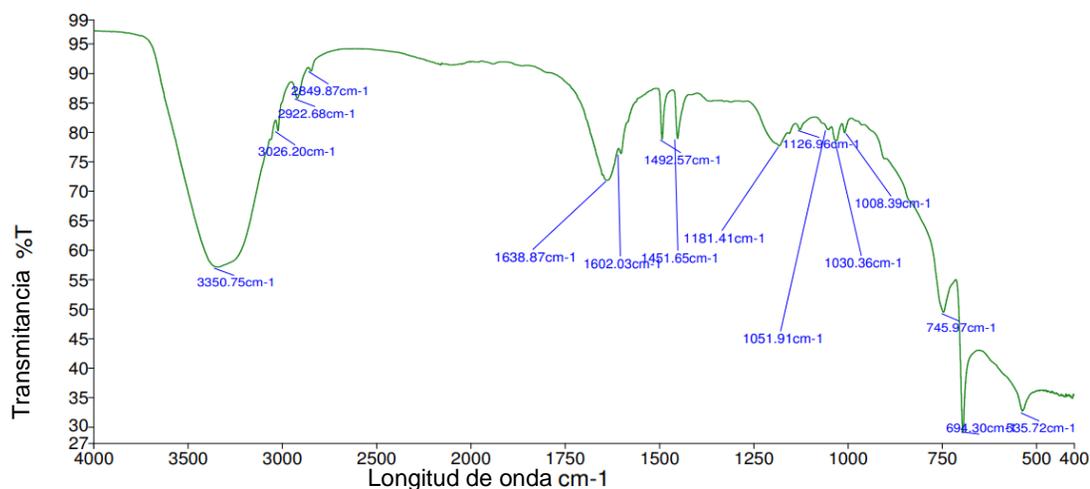
- Córdova, O. (2013). *Elaboración de una Resina de Intercambio Iónico a partir de la Sulfonación y Entrecruzamiento de Poliestireno Expandido Reciclado para la Separación de Iones Metálicos en Solución*. Guatemala: USAC.
- Cortijo-Herrera, D. (2013). Desalcalinización del agua mediante intercambio iónico. *Revista de la Facultad de Ingeniería y Arquitectura*(031), 221-238.
- d'Alzon, E. (2016). *Colegio Emmanuel d'Alzon*. Obtenido de https://issuu.com/elpensamientoverde/docs/poliestireno_expandido_y_el_medio_a
- DIMER. (2021). *DIMER*. Obtenido de Productos de poliestireno expandido: <http://www.dimer.com.mx/>
- EuroParl. (21 de abril de 2022). *Economía Circular*. Obtenido de Parlamento Europeo: <https://www.europarl.europa.eu/news/es/headlines/economy/20151201STO05603/economia-circular-definicion-importancia-y-beneficios#:~:text=La%20econom%C3%ADa%20circular%20es%20un,para%20crear%20un%20valor%20a%C3%B1adido>.
- García, M., Gracia, I., Duque, G., De Lucas, A., & Rodriguez, F. (2009). Recycling extruded polystyrene by dissolution with suitable solvents. *Journal of Material Cycles and Waste Management*, 2-5.
- Hernández, S. (2010). *Población y Muestra*. Hidalgo: Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo.
- IndustryAlliancePackaging. (2009). *Expanded Polystyrene Packaging Environmental Profile Analysis*. Obtenido de http://www.epspackaging.org/images/stories/EPS_Environmental_Profile_Analysis-iores.pdf.
- Johnson, R., & Kuby, P. (2012). *Estadística Elemental*. México D.F.: Cengage Learning.
- León, R., & Ramírez, M. (2007). Síntesis, Caracterización y Aplicación del PS Entrecruzado a partir de Residuos de PS. *Revista Iberoamericana de Polímeros*, 8(2), 112-137.
- León, R., & Ramírez, M. (Marzo de 2007). Síntesis, Caracterización y Aplicación del PS Entrecruzado a Partir de Residuos de PS. *Revista Iberoamericana de Polímero*, 8(2).
- Lizarzabury, L. (2013). Uso de la estadística en trabajos de investigación en la Universidad San Pedro. *Memorias del II congreso de Investigación, Ciencia y Tecnología*, 935-939.
- López, D., Rhenals, P., & Tangarife, M. (2013). Tratamiento de residuos de Poliestireno expandido utilizando solventes verdes. *Universidad Pontificia Bolivariana*, 991-1003.
- Macarthur, E. (Agosto de 2021). *Economía Circular*. Obtenido de Ellen Macarthur Foundation: <https://archive.ellenmacarthurfoundation.org/es/economia-circular/concepto>
- Maharana, T., Negi, Y., & Mohanty, B. (2007). Recycling of Polystyrene. *Journal Polymer-Plastics Technology and Engineering*, 729-736.
- Markit, I. (2015). *Chemical Economics Handbook, Expandable Polystyrene*. S&P Global.
- Markit, I. (2018). *Chemical Economics Handbook, Expandable Polystyrene*. S&P Global.
- Markit, I. (2021). *Chemical Economics Handbook, Expandable Polystyrene*. S&P Global.
- MARN. (2019). *Acuerdo Gubernativo 189-2019*. Guatemala: Ministerio de Ambiente y Recursos Naturales.
- MARN. (2021). *Acuerdo Gubernativo 164-2021*. Guatemala: Ministerio de Ambiente y Recursos Naturales.
- McCabe, W., Smith, J., & Harriott, P. (2007). *Operaciones unitarias en ingeniería química*. México: McGraw-Hill.

- Méndez, H., & Córdova, Ó. (2015). *Evaluación de Alternativas de Reciclaje de Poliestireno Expandido*. Guatemala: Dirección General de Investigación USAC.
- Niessner, N., & Rivetti, F. (2005). Practical Guide to Structures, Properties and Applications of Styrenic Polymers. *ISBN*.
- Parres, F. (2005). *Investigación de las variables limitantes en la recuperación de residuos de poliestireno procedentes del sector envase*. Valencia: Universidad Politécnica de Valencia.
- Pérez, C. (12 de octubre de 2017). Hasta 95% de los desechos que producimos pueden ser reciclados. *Prensa Libre*.
- Poletto, M., Dettenborn, J., Zeni, M., & Zattera, J. (2010). Characterization of composites based on expanded polystyrene wastes and wood flour. *Journal Waste Management*, 779-784.
- PPD. (2021). *PPD Group*. Obtenido de EPS - Poliestireno expandible: <https://www.ppdgroup.com/es/servicios-soluciones/eps-poliestireno-expandible/>
- Puritec. (4 de noviembre de 2019). *Problemas comunes con las resinas de intercambio iónico*. Obtenido de <https://www.manantialwater.com.mx/blog/problemas-comunes-resinas-de-intercambio-ionico/>
- Reyes, E. (12 de octubre de 2020). ¿Qué hacer a diario con 10 mil toneladas de desechos? *Nómada*.
- Román, J. (2 de septiembre de 2021). Acta 25-2021, Catarina, San Marcos. *Prensa Libre*.
- Rus, G. d. (2008). *Análisis Coste-Beneficio*. Barcelona: Ariel.
- Sánchez, R. (2019). *Diseño de un sistema de control para el proceso de ablandamiento de agua mediante resinas de intercambio iónico*. Madrid: Universidad Politécnica de Madrid.
- Sanz, A. (11 de 2019). *Química Orgánica Industrial*. Obtenido de Productos derivados de los hidrocarburos aromáticos: <https://www.eii.uva.es/organica/qoi/tema-09.php>
- Torre, G. (2014). *Solución de problemas en la producción de agua desmineralizada por intercambio iónico*. Perú: Universidad Nacional de Ingeniería.
- Treybal, R. (1968). *Mass-transfer operations Second Edition*. New York: McGraw-Hill Book Co.
- UAM. (2012). *Material de apoyo sobre intercambio iónico*. Madrid: Universidad Autónoma de Madrid.
- Valenzuela, A. (2006). Estudio de la resina AuRIX® 100 de intercambio iónico para recuperar oro en las soluciones cianuradas. *Universidad de Sonora*, 36-45.

XII. ANEXO

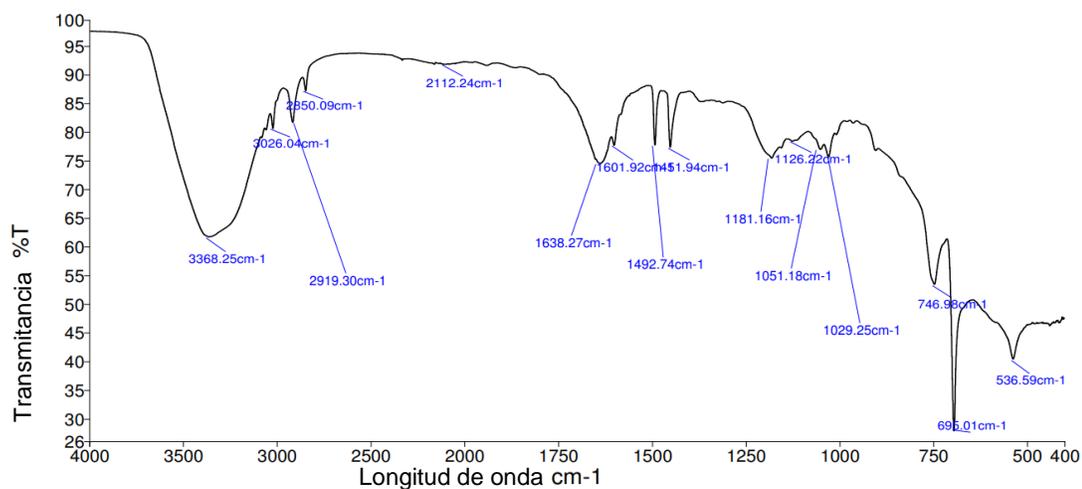
A. Espectros IR obtenidos para las muestras de poliestireno sulfonado entrecruzado

Figura 24. Espectro IR del producto de reacción obtenido con variables seleccionadas de 30% (v/m) óleum y 2 horas de reacción para la determinación de los grupos funcionales de la molécula.



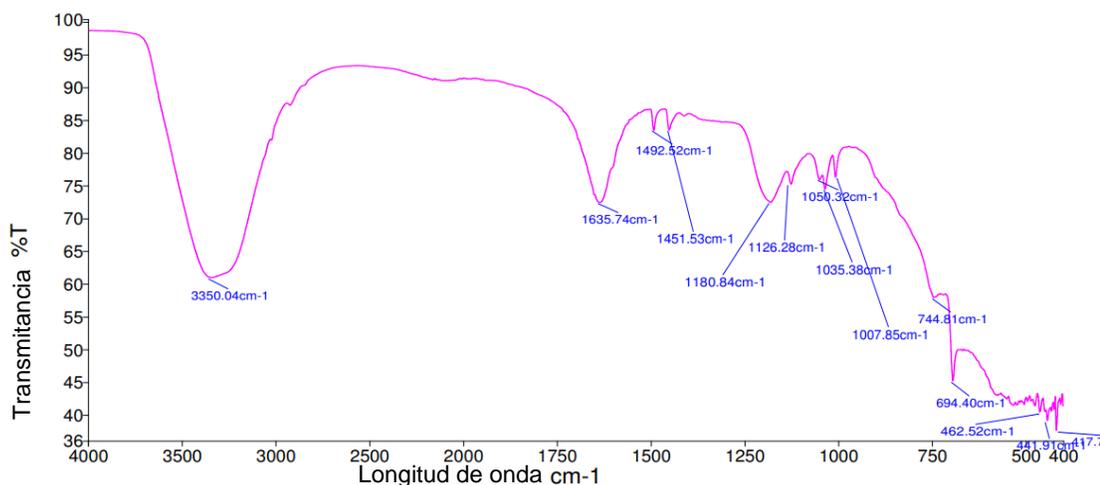
Nota: Los picos representan las absorciones de energía causados por los modos vibracionales de los enlaces de la molécula, esto permite la identificación de los grupos funcionales. Los grupos funcionales según el pico presentado se encuentra en el Cuadro 10 en Resultados.

Figura 25. Espectro IR del producto de reacción obtenido con variables de 20% (v/m) óleum y 1 hora de reacción para la determinación de los grupos funcionales de la molécula.



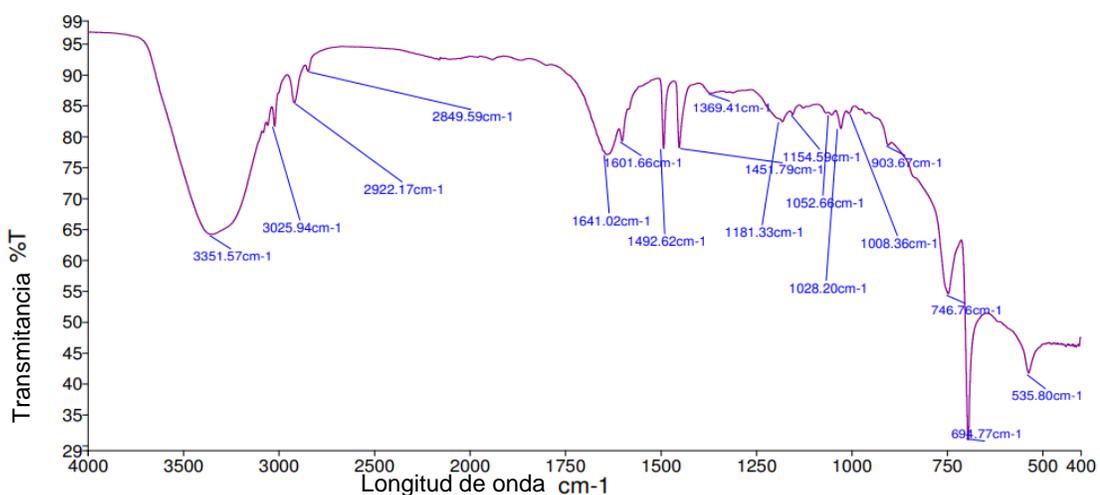
Nota: Los picos representan las absorciones de energía causados por los modos vibracionales de los enlaces de la molécula, esto permite la identificación de los grupos funcionales. Los grupos funcionales según el pico presentado se encuentra en el Cuadro 14 en Anexos.

Figura 26. Espectro IR del producto de reacción obtenido con variables de 20% (v/m) óleum y 2 horas de reacción para la determinación de los grupos funcionales de la molécula.



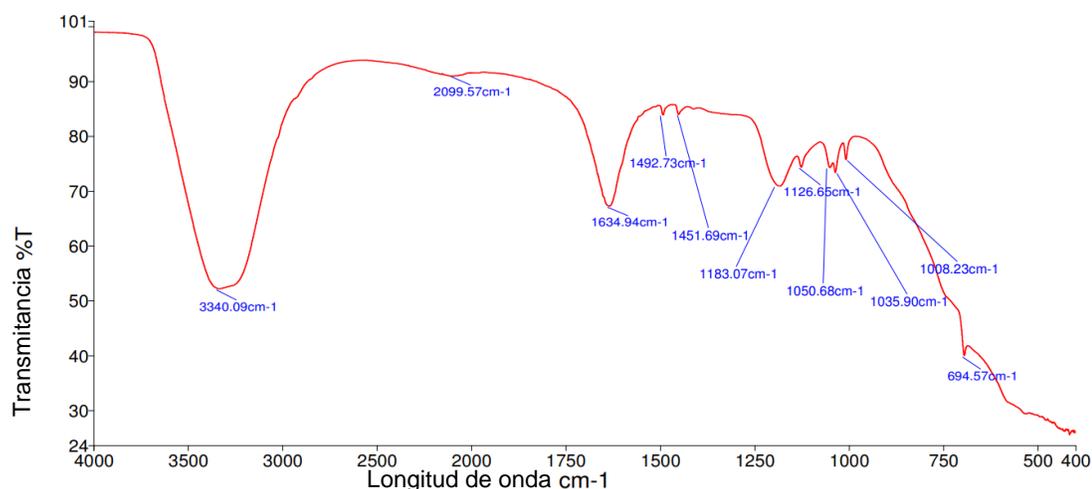
Nota: Los picos representan las absorciones de energía causados por los modos vibracionales de los enlaces de la molécula, esto permite la identificación de los grupos funcionales. Los grupos funcionales según el pico presentado se encuentra en el Cuadro 15 en Anexos.

Figura 27. Espectro IR del producto de reacción obtenido con variables de 20% (v/m) óleum y 3 horas de reacción para la determinación de los grupos funcionales de la molécula.



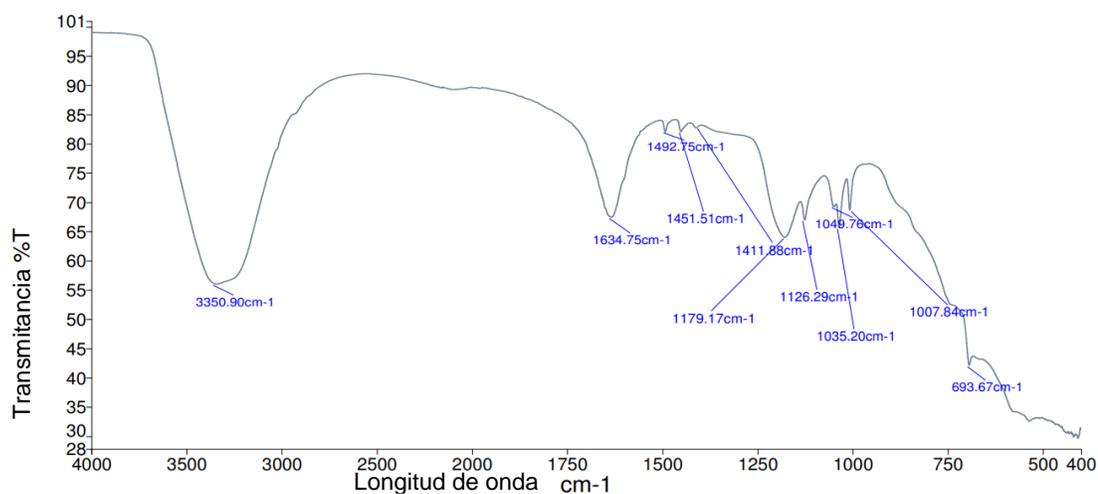
Nota: Los picos representan las absorciones de energía causados por los modos vibracionales de los enlaces de la molécula, esto permite la identificación de los grupos funcionales. Los grupos funcionales según el pico presentado se encuentra en el Cuadro 16 en Anexos.

Figura 28. Espectro IR del producto de reacción obtenido con variables de 30% (v/m) óleum y 1 horas de reacción para la determinación de los grupos funcionales de la molécula.



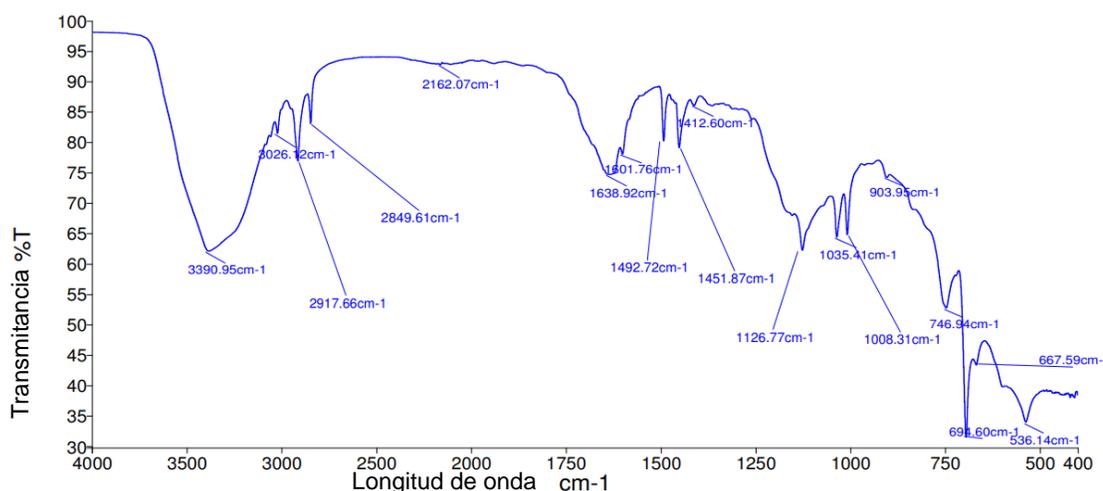
Nota: Los picos representan las absorciones de energía causados por los modos vibracionales de los enlaces de la molécula, esto permite la identificación de los grupos funcionales. Los grupos funcionales según el pico presentado se encuentra en el Cuadro 17 en Anexos.

Figura 29. Espectro IR del producto de reacción obtenido con variables de 30% (v/m) óleum y 3 horas de reacción para la determinación de los grupos funcionales de la molécula.



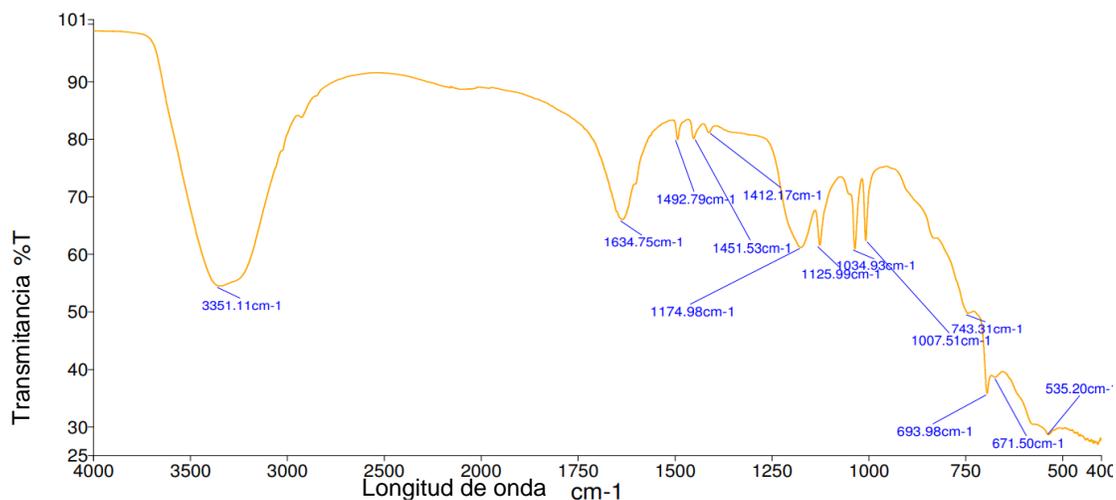
Nota: Los picos representan las absorciones de energía causados por los modos vibracionales de los enlaces de la molécula, esto permite la identificación de los grupos funcionales. Los grupos funcionales según el pico presentado se encuentra en el Cuadro 18 en Anexos.

Figura 30. Espectro IR del producto de reacción obtenido con variables de 40% (v/m) óleum y 1 horas de reacción para la determinación de los grupos funcionales de la molécula.



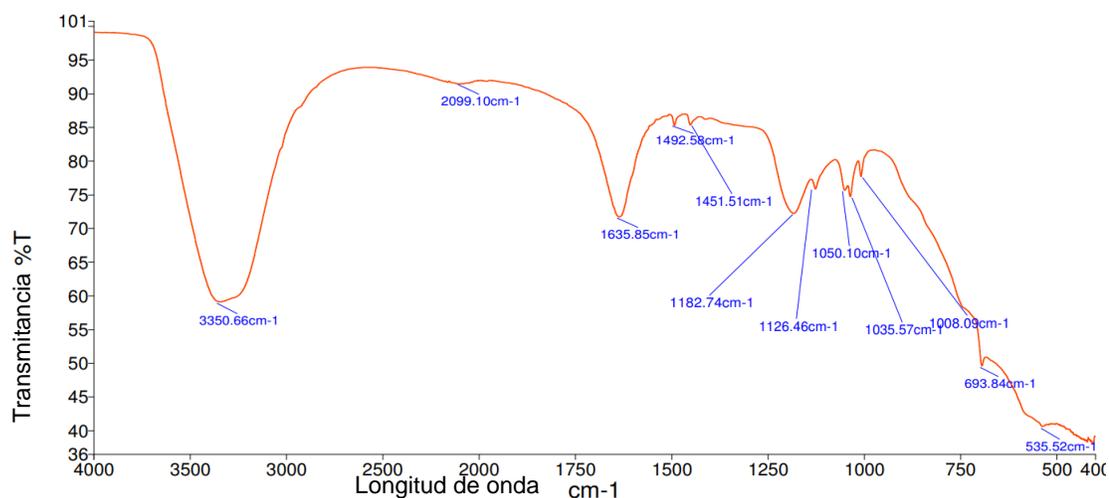
Nota: Los picos representan las absorciones de energía causados por los modos vibracionales de los enlaces de la molécula, esto permite la identificación de los grupos funcionales. Los grupos funcionales según el pico presentado se encuentra en el Cuadro 19 en Anexos.

Figura 31. Espectro IR del producto de reacción obtenido con variables de 40% (v/m) óleum y 2 horas de reacción para la determinación de los grupos funcionales de la molécula.



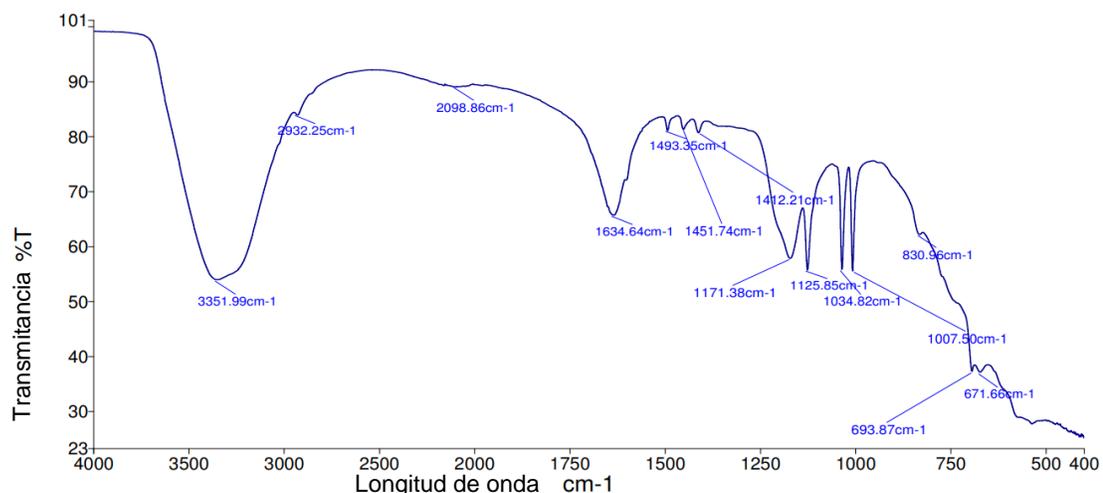
Nota: Los picos representan las absorciones de energía causados por los modos vibracionales de los enlaces de la molécula, esto permite la identificación de los grupos funcionales. Los grupos funcionales según el pico presentado se encuentra en el Cuadro 20 en Anexos.

Figura 32. Espectro IR del producto de reacción obtenido con variables de 40% (v/m) óleum y 3 horas de reacción para la determinación de los grupos funcionales de la molécula.



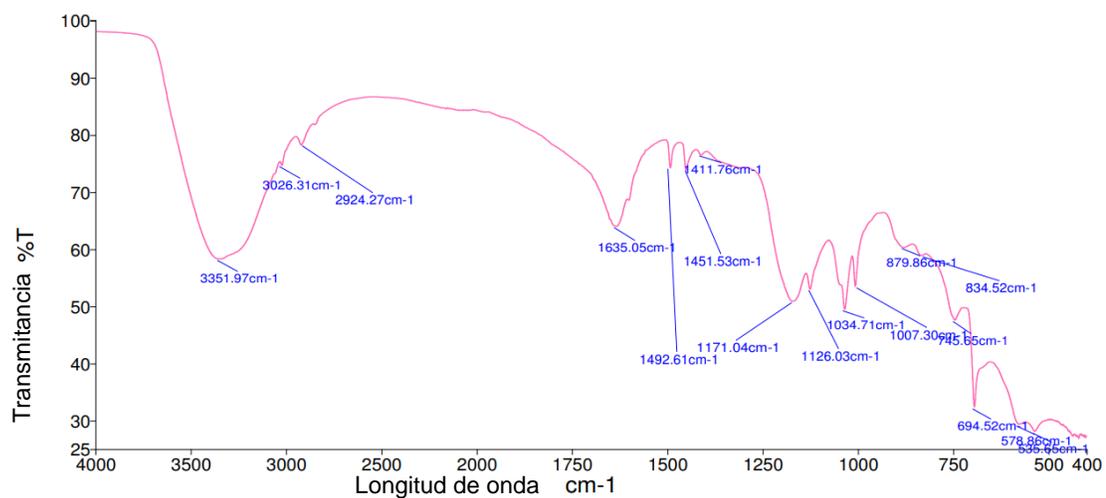
Nota: Los picos representan las absorciones de energía causados por los modos vibracionales de los enlaces de la molécula, esto permite la identificación de los grupos funcionales. Los grupos funcionales según el pico presentado se encuentra en el Cuadro 21 en Anexos.

Figura 33. Espectro IR del producto de reacción obtenido con variables de 50% (v/m) óleum y 1 hora de reacción para la determinación de los grupos funcionales de la molécula.



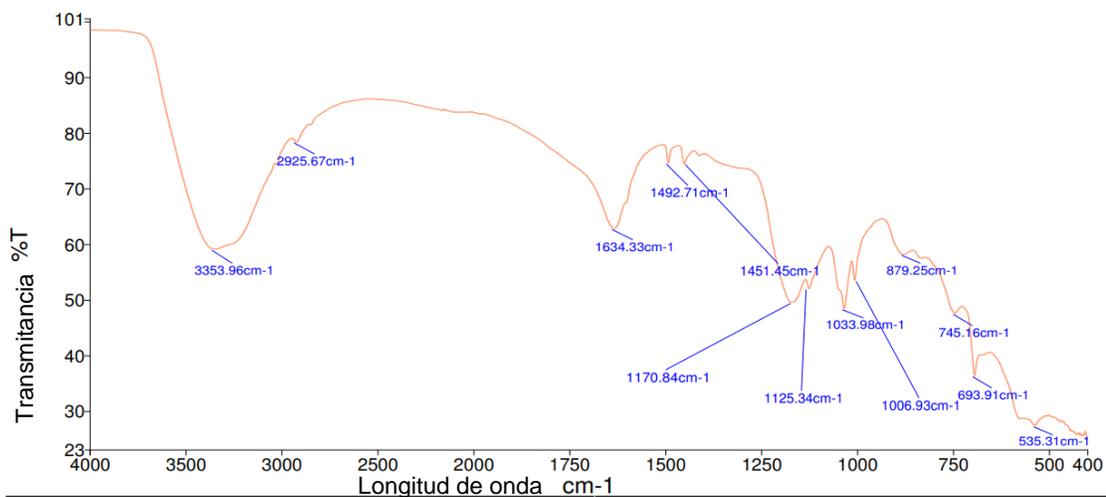
Nota: Los picos representan las absorciones de energía causados por los modos vibracionales de los enlaces de la molécula, esto permite la identificación de los grupos funcionales. Los grupos funcionales según el pico presentado se encuentra en el Cuadro 22 en Anexos.

Figura 34. Espectro IR del producto de reacción obtenido con variables de 50% (v/m) óleum y 2 horas de reacción para la determinación de los grupos funcionales de la molécula.



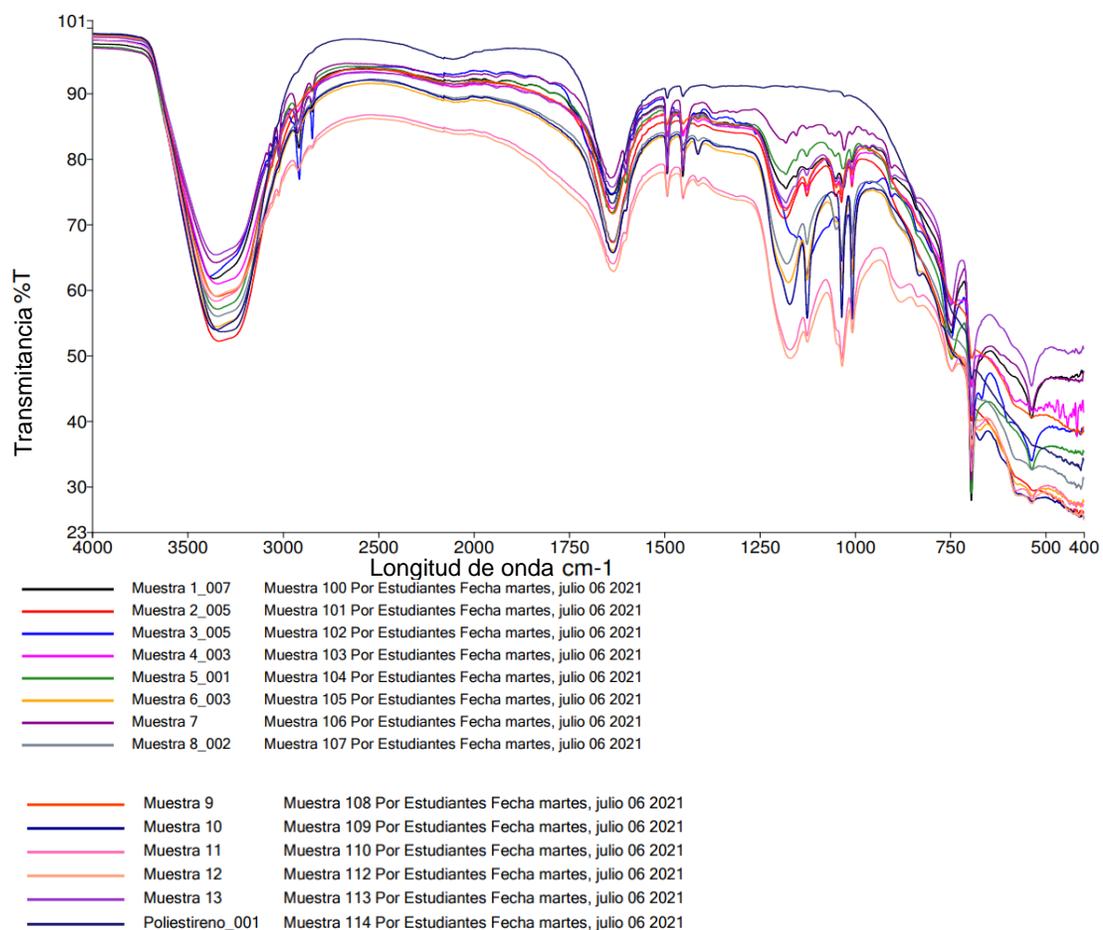
Nota: Los picos representan las absorciones de energía causados por los modos vibracionales de los enlaces de la molécula, esto permite la identificación de los grupos funcionales. Los grupos funcionales según el pico presentado se encuentra en el Cuadro 23 en Anexos.

Figura 35. Espectro IR del producto de reacción obtenido con variables de 50% (v/m) óleum y 3 horas de reacción para la determinación de los grupos funcionales de la molécula.



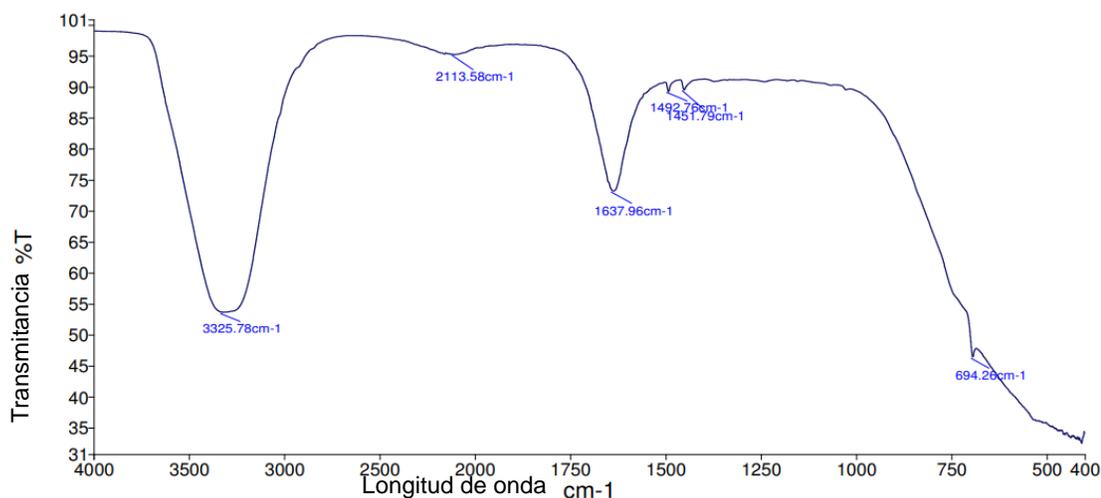
Nota: Los picos representan las absorciones de energía causados por los modos vibracionales de los enlaces de la molécula, esto permite la identificación de los grupos funcionales. Los grupos funcionales según el pico presentado se encuentra en el Cuadro 24 en Anexos.

Figura 36. Espectros IR sobrepuestos de 12 productos de reacción de sulfonación y entrecruzamiento obtenidos a distintas condiciones de porcentaje (v/m) de óleum y tiempo de reacción.



Nota: Comparación de picos de absorción de molécula de productos de 12 reacciones de sulfonación y entrecruzamiento de poliestireno.

Figura 37. Espectro IR de muestra de poliestireno utilizado para las reacciones de sulfonación y entrecruzamiento.



Nota: El poliestireno utilizado fue de desecho.

Cuadro 14. Grupos funcionales del producto de reacción obtenido con variables de 20% (v/m) óleum y 1 hora de reacción obtenidos de espectro IR.

Longitud de onda (cm ⁻¹)	Grupo funcional		Longitud de onda teórica (cm ⁻¹)
3368.25	OH	Asociación polimérica	3400-3200
3026.04	Alqueno cis	Tensión C-H	3040-3010
2919.3	Alcano	Tensión C-H	2962-2853
2850.09	Alcano	Tensión C-H	2962-2853
2112.24	Metileno	Enlace alcano	
1638.27	alqueno cis	Tensión C-C	1658
1601.92	Aromático	Tensión C-C	1600
1492.74	Aromático	Tensión C-C	1490
1451.94	Aromático	Tensión C-C	1450
1181.16	Ácido sulfónico	Tensión S--O	1210-1150
1126.22	Sulfonas	Tensión S--O	1160-1120
1051.18	Sulfonas	Vibraciones de tensión C--S	1200-1050
1029.25	Ácido sulfónico	Vibraciones de tensión S--O	1060-1030
746.98	Aromático 4 átomos de hidrógeno adyacentes	Enlace C-H	750
695.01	Alqueno cis	Enlace C-H	690

Nota: Nota: El espectro IR de la muestra correspondiente se observa en la Figura 25 en el área de Anexos. Los grupos funcionales se determinaron según los picos de absorción de energía mostrados en el espectro IR. Los grupos funcionales teóricos fueron obtenidos del libro *Química Orgánica* de L.G. Wade, Jr.

Cuadro 15. Grupos funcionales del producto de reacción obtenido con variables de 20% (v/m) óleum y 2 horas de reacción obtenidos de espectro IR.

Longitud de onda (cm-1)	Grupo funcional		Longitud de onda teórica (cm-1)
3350.04	OH	Asociación polimérica	3400-3200
1635.74	Alqueno cis	Tensión C-C	1658
1492.52	Aromático	Tensión C-C	1490
1451.53	Aromático	Tensión C-C	1450
1180.84	Ácido sulfónico	Tensión S--O	1210-1150
1126.28	Sulfonas	Tensión S--O	1160-1120
1050.32	Sulfonas	Vibraciones de tensión C--S	1200-1050
1035.38	Ácido sulfónico	Vibraciones de tensión S--O	650
1007.85	Sulfonato iónico		
744.81	Aromático 4 átomos de hidrógeno adyacente	Enlace C-H	750
694.4	Alqueno cis	Enlace C-H	690

Nota: Nota: El espectro IR de la muestra correspondiente se observa en la Figura 26 en el área de Anexos. Los grupos funcionales se determinaron según los picos de absorción de energía mostrados en el espectro IR. Los grupos funcionales teóricos fueron obtenidos del libro *Química Orgánica* de L.G. Wade, Jr.

Cuadro 16. Grupos funcionales del producto de reacción obtenido con variables de 20% (v/m) óleum y 3 horas de reacción obtenidos de espectro IR.

Longitud de onda (cm ⁻¹)	Grupo funcional		Longitud de onda teórica (cm ⁻¹)
3351.57	OH	Asociación polimérica	3400-3200
3025.94	Alqueno cis	Tensión C-H	3040-3010
2922.17	Alcano	Tensión C-H	2962-2853
2849.59	Alcano	Tensión C-H	2962-2853
1641.02	Alqueno cis	Tensión C-C	1658
1601.66	Aromático	Tensión C-C	1600
1492.62	Aromático	Tensión C-C	1490
1451.79	Aromático	Tensión C-C	1450
1369.41	Alcano di metilo	Enlace C-H	1370-1365
1181.33	Ácido sulfónico	Tensión S--O	1210-1150
1154.59	Sulfonas	Tensión S--O	1160-1120
1052.66	Sulfonas	Vibraciones de tensión C--S	1200-1050
1028.2	Ácido sulfónico	Vibraciones de tensión S--O	1060-1030
1008.36	Sulfonato iónico		
903.67	Alqueno disustituido	Enlace C-H	915-905
746.76	Aromático 4 átomos de hidrógeno adyacentes	Enlace C-H	750
694.77	Alqueno cis	Enlace C-H	690

Nota: Nota: El espectro IR de la muestra correspondiente se observa en la Figura 27 en el área de Anexos. Los grupos funcionales se determinaron según los picos de absorción de energía mostrados en el espectro IR. Los grupos funcionales teóricos fueron obtenidos del libro *Química Orgánica* de L.G. Wade, Jr.

Cuadro 17. Grupos funcionales del producto de reacción obtenido con variables de 30% (v/m) óleum y 1 hora de reacción obtenidos de espectro IR.

Longitud de onda (cm ⁻¹)	Grupo funcional		Longitud de onda teórica (cm ⁻¹)
3340.09	OH	Asociación polimérica	3400-3200
2099.57	Alquino monosustituido	Tensión C-C	2140-2100
1634.94	Alqueno cis	Tensión C-C	1658
1492.73	Aromático	Tensión C-C	1490
1451.69	Aromático	Tensión C-C	1450
1183.07	Ácido sulfónico	Tensión S--O	1210-1150
1126.65	Sulfonas	Tensión S--O	1160-1120
1050.68	Sulfonas	Vibraciones de tensión C--S	1200-1050
1035.9	Ácido sulfónico	Vibraciones de tensión S--O	1060-1030
1008.23	Sulfato iónico		
694.57	Aromático 5 átomos de hidrógeno adyacentes	Enlace C-H	700

Nota: Nota: El espectro IR de la muestra correspondiente se observa en la Figura 28 en el área de Anexos. Los grupos funcionales se determinaron según los picos de absorción de energía mostrados en el espectro IR. Los grupos funcionales teóricos fueron obtenidos del libro *Química Orgánica* de L.G. Wade, Jr.

Cuadro 18. Grupos funcionales del producto de reacción obtenido con variables de 30% (v/m) óleum y 3 horas de reacción obtenidos de espectro IR.

Longitud de onda (cm ⁻¹)	Grupo funcional		Longitud de onda teórica (cm ⁻¹)
3350.9	OH	Asociación polimérica	3400-3200
1634.75	Alqueno cis	Tensión C-C	1658
1492.75	Aromático	Tensión C-C	1490
1451.51	Aromático	Tensión C-C	1450
1411.88	Alqueno monosustituido	Enlace C-H	1420-1410
1179.17	Ácido sulfónico	Tensión S--O	1210-1150
1126.29	Sulfonas	Tensión S--O	1160-1120
1049.76	Sulfonas	Vibraciones de tensión C--S	1200-1050
1035.2	Ácido sulfónico	Vibraciones de tensión S--O	1060-1030
1007.84	Sulfato iónico		
693.67	Aromático 5 átomos de hidrógeno adyacentes	Enlace C-H	700

Nota: Nota: El espectro IR de la muestra correspondiente se observa en la Figura 29 en el área de Anexos. Los grupos funcionales se determinaron según los picos de absorción de energía mostrados en el espectro IR. Los grupos funcionales teóricos fueron obtenidos del libro *Química Orgánica* de L.G. Wade, Jr.

Cuadro 19. Grupos funcionales del producto de reacción obtenido con variables de 40% (v/m) óleum y 1 hora de reacción obtenidos de espectro IR.

Longitud de onda (cm ⁻¹)	Grupo funcional		Longitud de onda teórica (cm ⁻¹)
3390.95	OH	Asociación polimérica	3400-3200
3026.12	Alqueno cis	Tensión C-H	3040-3010
2917.66	Alcano	Tensión C-H	2962-2853
2849.61	Alcano	Tensión C-H	2962-2853
2162.07	Alcano metileno		
1638.92	Alqueno cis	Tensión C-C	1658
1601.76	Aromático	Tensión C-C	1600
1492.72	Aromático	Tensión C-C	1490
1451.87	Aromático	Tensión C-C	1450
1412.6	Alqueno monosustituido	Enlace C-H	1420-1410
1126.77	Sulfonas	Vibraciones de tensión S--O	1160-1120
1035.41	Ácido sulfónico	Vibraciones de tensión S--O	1060-1030
1008.31	Sulfato iónico		
903.95	Alqueno disustituido	Enlace C-H	915-905
746.94	Aromático 4 átomos de hidrógeno adyacentes	Enlace C-H	750
694.6	Alqueno cis	Enlace C-H	690
667.59	Ácido sulfónico	Vibraciones de tensión S--O	650

Nota: Nota: El espectro IR de la muestra correspondiente se observa en la Figura 30 en el área de Anexos. Los grupos funcionales se determinaron según los picos de absorción de energía mostrados en el espectro IR. Los grupos funcionales teóricos fueron obtenidos del libro *Química Orgánica* de L.G. Wade, Jr.

Cuadro 20. Grupos funcionales del producto de reacción obtenido con variables de 40% (v/m) óleum y 2 horas de reacción obtenidos de espectro IR.

Longitud de onda (cm ⁻¹)	Grupo funcional		Longitud de onda teórica (cm ⁻¹)
3351.11	O-H	Asociación polimérica	3400-3200
1634.75	Alqueno cis	Tensión C-C	1658
1492.79	Aromático	Tensión C-C	1490
1451.53	Aromático	Tensión C-C	1450
1412.17	Alqueno monosustituido	Enlace C-H	1420-1410
1174.98	Ácido sulfónico	Vibraciones de tensión S--O	1210-1150
1125.99	Sulfonas	Vibraciones de tensión S--O	1160-1120
1034.93	Ácido sulfónico	Vibraciones de tensión S--O	1060-1030
1007.51	Sulfato iónico		
743.31	Aromático 4 átomos de hidrógeno adyacentes	Enlace C-H	750
693.98	Alqueno cis	Enlace C-H	690
671.5	Ácido sulfónico	Vibraciones de tensión S--O	650

Nota: Nota: El espectro IR de la muestra correspondiente se observa en la Figura 31 en el área de Anexos. Los grupos funcionales se determinaron según los picos de absorción de energía mostrados en el espectro IR. Los grupos funcionales teóricos fueron obtenidos del libro *Química Orgánica* de L.G. Wade, Jr.

Cuadro 21. Grupos funcionales del producto de reacción obtenido con variables de 40% (v/m) óleum y 3 horas de reacción obtenidos de espectro IR.

Longitud de onda (cm ⁻¹)	Grupo funcional		Longitud de onda teórica (cm ⁻¹)
3350.66	OH	Asociación polimérica	3400-3200
2099.1	Alqueno monosustituido	Tensión C-C	2140-2100
1635.85	Alqueno cis	Tensión C-C	1658
1492.58	Aromático	Tensión C-C	1490
1451.51	Aromático	Tensión C-C	1450
1182.74	Ácido sulfónico	Tensión S--O	1210-1150
1126.46	Sulfonas	Tensión S--O	1160-1120
1050.1	Ácido sulfónico	Vibraciones de tensión S--O	1060-1030
1035.57	Ácido sulfónico	Vibraciones de tensión S--O	1060-1031
1008.09	Sulfato iónico		
693.84	Alqueno cis	Enlace C-H	690

Nota: Nota: El espectro IR de la muestra correspondiente se observa en la Figura 32 en el área de Anexos. Los grupos funcionales se determinaron según los picos de absorción de energía mostrados en el espectro IR. Los grupos funcionales teóricos fueron obtenidos del libro *Química Orgánica* de L.G. Wade, Jr.

Cuadro 22. Grupos funcionales del producto de reacción obtenido con variables de 50% (v/m) óleum y 1 hora de reacción obtenidos de espectro IR.

Longitud de onda (cm ⁻¹)	Grupo funcional		Longitud de onda teórica (cm ⁻¹)
3351.99	OH	Asociación polimérica	3400-3200
2932.25	Alcano	Tensión C-H	2962-2853
2098.86	Alquino monosustituido	Tensión C-C	2140-2100
1634.64	Alqueno cis	Tensión C-C	1658
1493.35	Aromático	Tensión C-C	1490
1451.74	Aromático	Tensión C-C	1450
1412.21	Alqueno monosustituido	Enlace C-H	1420-1410
1171.38	Ácido sulfónico	Tensión S--O	1210-1150
1125.85	Sulfonas	Tensión S--O	1160-1120
1034.82	Ácido sulfónico	Vibraciones de tensión S--O	1060-1030
1007.5	Sulfato iónico		
830.96	Aromático 2 átomos de hidrógeno adyacentes	Enlace C-H	830
693.87	Alqueno cis	Enlace C-H	690
671.66	Ácido sulfónico	Vibraciones de tensión S--O	650

Nota: Nota: El espectro IR de la muestra correspondiente se observa en la Figura 33 en el área de Anexos. Los grupos funcionales se determinaron según los picos de absorción de energía mostrados en el espectro IR. Los grupos funcionales teóricos fueron obtenidos del libro *Química Orgánica* de L.G. Wade, Jr.

Cuadro 23. Grupos funcionales del producto de reacción obtenido con variables de 50% (v/m) óleum y 2 horas de reacción obtenidos de espectro IR.

Longitud de onda (cm ⁻¹)	Grupo funcional		Longitud de onda teórica (cm ⁻¹)
3351.97	OH	Asociación polimérica	3400-3200
3026.31	alqueno cis	Tensión C-H	3040-3010
2924.27	Alcano	Tensión C-H	2962-2853
1635.05	Alqueno cis	Tensión C-C	1658
1492.61	Aromático	Tensión C-C	1490
1451.53	Aromático	Tensión C-C	1450
1411.76	Alqueno monosustituido	Enlace C-H	1420-1410
1171.04	Ácido sulfónico	Vibraciones de tensión S--O	1210-1150
1126.03	Sulfonas	Vibraciones de tensión S--O	1160-1120
1034.71	Ácido sulfónico	Vibraciones de tensión S--O	1060-1030
1007.3	Sulfato iónico		
879.86	Aromático 1 átomo de hidrógeno adyacente	Enlace C-H	880
834.52	Aromático 2 átomos de hidrógeno adyacentes	Enlace C-H	830
745.65	Aromático 4 átomos de hidrógeno adyacentes	Enlace C-H	750
694.52	Alqueno cis	Enlace C-H	690

Nota: Nota: El espectro IR de la muestra correspondiente se observa en la Figura 34 en el área de Anexos. Los grupos funcionales se determinaron según los picos de absorción de energía mostrados en el espectro IR. Los grupos funcionales teóricos fueron obtenidos del libro *Química Orgánica* de L.G. Wade, Jr.

Cuadro 24. Grupos funcionales del producto de reacción obtenido con variables de 50% (v/m) óleum y 3 horas de reacción obtenidos de espectro IR.

Longitud de onda (cm ⁻¹)	Grupo funcional		Longitud de onda teórica (cm ⁻¹)
3353.96	OH	Asociación polimérica	3400-3200
2925.67	Alcano	Tensión C-H	2962-2853
1634.33	Alqueno cis	Tensión C-C	1658
1492.71	Aromático	Tensión C-C	1490
1451.45	Aromático	Tensión C-C	1450
1170.84	Ácido sulfónico	Tensión S--O	1210-1150
1125.34	Sulfonas	Tensión S--O	1160-1120
1033.98	Ácido sulfónico	Vibraciones de tensión S--O	1060-1030
1006.93	Sulfato iónico		
879.25	Aromático 1 átomo de hidrógeno adyacente	Enlace C-H	880
745.16	Aromático 4 átomos de hidrógeno adyacentes	Enlace C-H	750
693.91	Alqueno cis	Enlace C-H	690

Nota: El espectro IR de la muestra correspondiente se observa en la Figura 35 en el área de Anexos. Los grupos funcionales se determinaron según los picos de absorción de energía mostrados en el espectro IR. Los grupos funcionales teóricos fueron obtenidos del libro *Química Orgánica* de L.G. Wade, Jr.

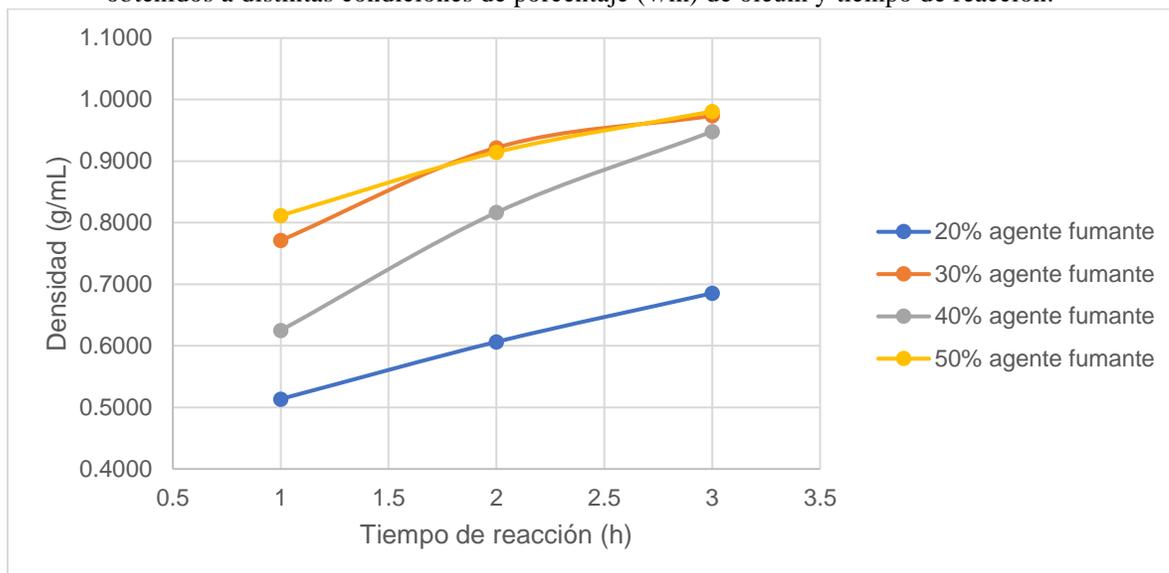
B. Datos calculados

Cuadro 25. Densidad de 12 productos de reacción de sulfonación y entrecruzamiento obtenidos a distintas condiciones de porcentaje (v/m) de óleum y tiempo de reacción.

% Óleum en la reacción (v/m)	Tiempo (h)	No. Muestra	Densidad (g/mL)			
			Promedio	±	Desviación	Varianza
20%	1	1	0.5136	0.0089	0.1125	0.0127
	2	4	0.6065	0.0099	0.1222	0.0149
	3	7	0.6854	0.0102	0.0920	0.0085
30%	1	2	0.7712	0.0112	0.1893	0.0359
	2	5	0.9219	0.0176	0.1068	0.0114
	3	8	0.9737	0.0196	0.1623	0.0263
40%	1	3	0.6250	0.0109	0.0171	0.0003
	2	6	0.8166	0.0174	0.1144	0.0131
	3	9	0.9481	0.0124	0.0837	0.0070
50%	1	10	0.8117	0.0153	0.0160	0.0003
	2	11	0.9147	0.0189	0.0304	0.0009
	3	12	0.9807	0.0193	0.0084	0.0001

Nota: Las densidades fueron calculadas como se muestra en el cálculo 4 y los datos originales se encuentran en los Cuadros 43, 44, 45 y 46.

Figura 38. Comparación de densidad de 12 productos de reacción de sulfonación y entrecruzamiento obtenidos a distintas condiciones de porcentaje (v/m) de óleo y tiempo de reacción.

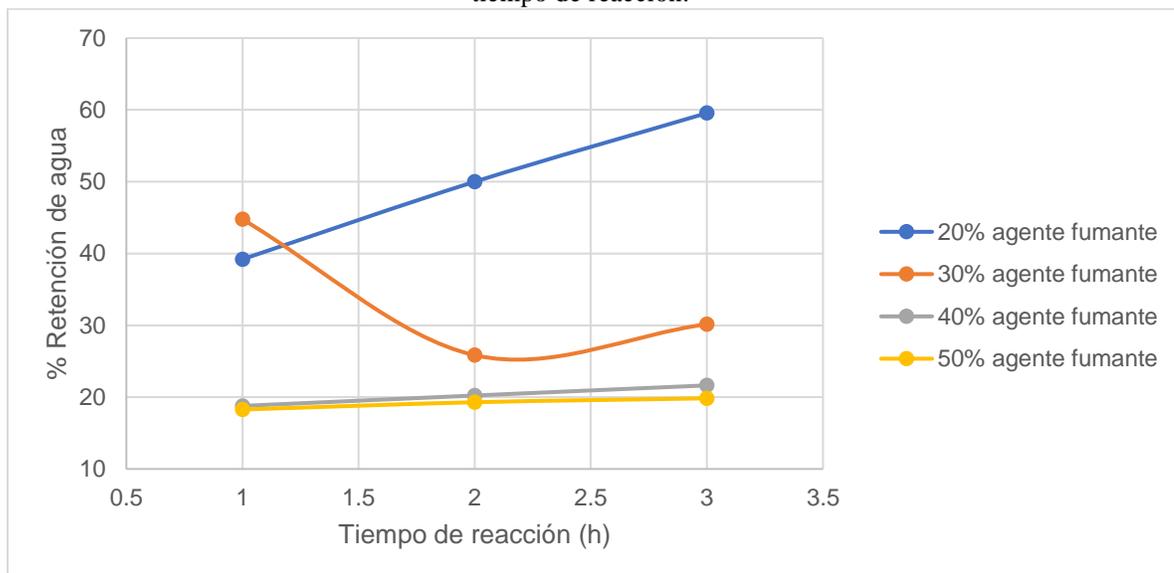


Nota: Se utilizaron los valores del Cuadro 25.

Cuadro 26. Porcentaje de retención de agua (%MC) de 12 productos de reacción de sulfonación y entrecruzamiento obtenidos a distintas condiciones de porcentaje (v/m) de óleo y tiempo de reacción.

% Óleum en la reacción (v/m)	Tiempo (h)	No. Muestra	Retención de agua (%MC)			
			Promedio	±	Desviación	Varianza
20%	1	1	39.2000	0.0001	2.69506957	7.2634
	2	4	49.9925	0.0001	3.28866108	10.8152917
	3	7	59.5525	0.0001	3.4789977	12.103425
30%	1	2	44.7600	0.0001	1.72921948	2.9902
	2	5	25.8475	0.0001	2.57908737	6.65169167
	3	8	30.1600	0.0001	4.16120976	17.3156667
40%	1	3	18.7850	0.0001	1.29415352	1.67483333
	2	6	20.2275	0.0001	2.95985782	8.76075833
	3	9	21.6375	0.0001	1.07797263	1.162025
50%	1	10	18.2800	0.0001	2.06425128	4.26113333
	2	11	19.2925	0.0001	2.06667809	4.27115833
	3	12	19.8375	0.0001	1.35076213	1.82455833

Figura 39. Comparación de porcentaje de retención de agua (%MC) de 12 productos de reacción de sulfonación y entrecruzamiento obtenidos a distintas condiciones de porcentaje (v/m) de óleum y tiempo de reacción.



Nota: Se utilizaron los valores del Cuadro 26.

Cuadro 27. Solubilidad cualitativa del producto de reacción obtenido con variables de 20% (v/m) óleum.

Muestra	1			4			7		
	25°C	50°C	80°C	25°C	50°C	80°C	25°C	50°C	80°C
Agua	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)
Acetona	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)
Etanol	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)
Metanol	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)
Ácido sulfúrico	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)
Ácido oléico	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)
Ácido clorhídrico	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)
Solución salina	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)
Hidróxido de sodio	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)

Cuadro 28. Solubilidad cualitativa del producto de reacción obtenido con variables de 30% (v/m) óleum.

Muestra	2			5			8		
Disolvente	25°C	50°C	80°C	25°C	50°C	80°C	25°C	50°C	80°C
Agua	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)
Acetona	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)
Etanol	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)
Metanol	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)
Ácido sulfúrico	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)
Ácido oléico	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)
Ácido clorhídrico	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)
Solución salina	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)
Hidróxido de sodio	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)

Cuadro 29. Solubilidad cualitativa del producto de reacción obtenido con variables de 40% (v/m) óleum.

Muestra	3			6			9		
Disolvente	25°C	50°C	80°C	25°C	50°C	80°C	25°C	50°C	80°C
Agua	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)
Acetona	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)
Etanol	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)
Metanol	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)
Ácido sulfúrico	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)
Ácido oléico	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)
Ácido clorhídrico	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)
Solución salina	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)
Hidróxido de sodio	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)

Cuadro 30. Solubilidad cualitativa del producto de reacción obtenido con variables de 50% (v/m) óleum.

Muestra	10			11			12		
Disolvente	25°C	50°C	80°C	25°C	50°C	80°C	25°C	50°C	80°C
Agua	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)
Acetona	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)
Etanol	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)
Metanol	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)
Ácido sulfúrico	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)
Ácido oléico	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)
Ácido clorhídrico	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)
Solución salina	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)
Hidróxido de sodio	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)

Cuadro 31. Coeficiente de transferencia de masa del producto de reacción obtenido con variables seleccionadas de 30% (v/m) óleum y 2 horas de reacción y resinas de intercambio iónico comerciales.

Muestra	Coeficiente de transferencia de masa (kg/m²s)
Poliestireno sulfonado entrecruzado	0.8191
Resina comercial	0.7202

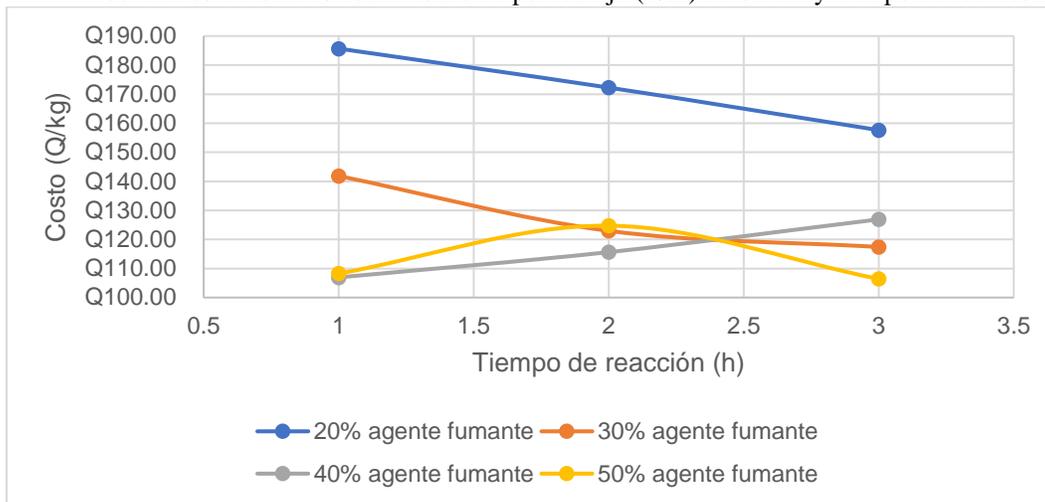
Nota: Los coeficientes fueron obtenidos como se muestra en el cálculo 6 y los datos originales se encuentran en el Cuadro 51.

Cuadro 32. Costo/kg de 12 productos de reacción de sulfonación y entrecruzamiento obtenidos a distintas condiciones de porcentaje (v/m) de óleum y tiempo de reacción.

% Óleum en la reacción (v/m)	Tiempo (h)	No. Muestra	Costo/kg
20%	1	1	Q 185.67
	2	4	Q 172.25
	3	7	Q 157.63
30%	1	2	Q 141.83
	2	5	Q 122.95
	3	8	Q 117.40
40%	1	3	Q 106.93
	2	6	Q 115.63
	3	9	Q 126.90
50%	1	10	Q 108.26
	2	11	Q 124.72
	3	12	Q 106.43

Nota: Es el costo de producción en laboratorio obtenido del precio de los reactivos y de los servicios de agua y energía necesarios.

Figura 40. Comparación del costo/kg de 12 productos de reacción de sulfonación y entrecruzamiento obtenidos a distintas condiciones de porcentaje (v/m) de óleum y tiempo de reacción.



Nota: Se utilizaron los datos del Cuadro 32.

Cuadro 33. Flujo de efectivo para la puesta en marcha de proyecto de reciclado químico de poliestireno sulfonado en planta industrial.

FLUJOS	Tasa de crecimiento anual 5%											
	Año en numero	Y0	Y1	Y2	Y3	Y4	Y5	Y6	Y7	Y8	Y9	Y10
Año Calendario	2022	2023	2024	2025	2026	2027	2028	2029	2030	2031	2032	
Ingresos												
Venta de reciclaje	0	GTQ 5,307,692.31	GTQ 5,573,076.92	GTQ 5,851,730.77	GTQ 6,144,317.31	GTQ 6,451,533.17	GTQ 6,774,109.83	GTQ 7,112,815.32	GTQ 7,468,456.09	GTQ 7,841,878.89	GTQ 8,233,972.84	
TOTAL INGRESOS		GTQ 5,307,692.31	GTQ 5,573,076.92	GTQ 5,851,730.77	GTQ 6,144,317.31	GTQ 6,451,533.17	GTQ 6,774,109.83	GTQ 7,112,815.32	GTQ 7,468,456.09	GTQ 7,841,878.89	GTQ 8,233,972.84	
COSTOS Y GASTOS												
Costo de reactivos												
Acetona		GTQ 21,600.00	GTQ 22,680.00	GTQ 23,814.00	GTQ 25,004.70	GTQ 26,254.94	GTQ 27,567.68	GTQ 28,946.07	GTQ 30,393.37	GTQ 31,913.04	GTQ 33,508.69	
Agua destilada		GTQ 124,200.00	GTQ 130,410.00	GTQ 136,930.50	GTQ 143,777.03	GTQ 150,965.88	GTQ 158,514.17	GTQ 166,439.88	GTQ 174,761.87	GTQ 183,499.97	GTQ 192,674.96	
Ácido sulfúrico concentrado		GTQ 295,200.00	GTQ 309,960.00	GTQ 325,458.00	GTQ 341,730.90	GTQ 358,817.45	GTQ 376,758.32	GTQ 395,596.23	GTQ 415,376.04	GTQ 436,144.85	GTQ 457,952.09	
Óleum		GTQ 70,200.00	GTQ 73,710.00	GTQ 77,395.50	GTQ 81,265.28	GTQ 85,328.54	GTQ 89,594.97	GTQ 94,074.71	GTQ 98,778.45	GTQ 103,717.37	GTQ 108,903.24	
Hidróxido de Sodio		GTQ 59,400.00	GTQ 62,370.00	GTQ 65,488.50	GTQ 68,762.93	GTQ 72,201.07	GTQ 75,811.12	GTQ 79,601.68	GTQ 83,581.77	GTQ 87,760.85	GTQ 92,148.90	
Costos												
Sueldos		GTQ 215,488.62	GTQ 226,263.05	GTQ 237,576.20	GTQ 249,455.01	GTQ 261,927.76	GTQ 275,024.15	GTQ 288,775.35	GTQ 303,214.12	GTQ 318,374.83	GTQ 334,293.57	
Materia Prima		GTQ 720,000.00	GTQ 756,000.00	GTQ 793,800.00	GTQ 833,490.00	GTQ 875,164.50	GTQ 918,922.73	GTQ 964,868.86	GTQ 1,013,112.30	GTQ 1,063,767.92	GTQ 1,116,956.32	
Insumos		GTQ 7,200.00	GTQ 7,560.00	GTQ 7,938.00	GTQ 8,334.90	GTQ 8,751.65	GTQ 9,189.23	GTQ 9,648.69	GTQ 10,131.12	GTQ 10,637.68	GTQ 11,169.56	
Fletes		GTQ 12,000.00	GTQ 12,600.00	GTQ 13,230.00	GTQ 13,891.50	GTQ 14,586.08	GTQ 15,315.38	GTQ 16,081.15	GTQ 16,885.21	GTQ 17,729.47	GTQ 18,615.94	

Servicio de agua	GTQ 30,769.00	GTQ 32,307.45	GTQ 33,922.82	GTQ 35,618.96	GTQ 37,399.91	GTQ 39,269.91	GTQ 41,233.40	GTQ 43,295.07	GTQ 45,459.83	GTQ 47,732.82
Servicio de energía	GTQ 43,961.00	GTQ 46,159.05	GTQ 48,467.00	GTQ 50,890.35	GTQ 53,434.87	GTQ 56,106.61	GTQ 58,911.94	GTQ 61,857.54	GTQ 64,950.42	GTQ 68,197.94
Gastos										
Sueldos administrativos	GTQ 216,977.69	GTQ 227,826.58	GTQ 239,217.91	GTQ 251,178.80	GTQ 263,737.74	GTQ 276,924.63	GTQ 290,770.86	GTQ 305,309.40	GTQ 320,574.87	GTQ 336,603.62
Gasto publicidad	GTQ 12,000.00	GTQ 12,600.00	GTQ 13,230.00	GTQ 13,891.50	GTQ 14,586.08	GTQ 15,315.38	GTQ 16,081.15	GTQ 16,885.21	GTQ 17,729.47	GTQ 18,615.94
Transporte	GTQ 6,000.00	GTQ 6,300.00	GTQ 6,615.00	GTQ 6,945.75	GTQ 7,293.04	GTQ 7,657.69	GTQ 8,040.57	GTQ 8,442.60	GTQ 8,864.73	GTQ 9,307.97
Mantenimiento	GTQ 15,000.00	GTQ 15,750.00	GTQ 16,537.50	GTQ 17,364.38	GTQ 18,232.59	GTQ 19,144.22	GTQ 20,101.43	GTQ 21,106.51	GTQ 22,161.83	GTQ 23,269.92
Capacitaciones	GTQ 1,000.00	GTQ 1,050.00	GTQ 1,102.50	GTQ 1,157.63	GTQ 1,215.51	GTQ 1,276.28	GTQ 1,340.10	GTQ 1,407.10	GTQ 1,477.46	GTQ 1,551.33
TOTAL COSTOS Y GASTOS	GTQ 1,850,996.31	GTQ 1,943,546.12	GTQ 2,040,723.43	GTQ 2,142,759.60	GTQ 2,249,897.58	GTQ 2,362,392.46	GTQ 2,480,512.08	GTQ 2,604,537.69	GTQ 2,734,764.57	GTQ 2,871,502.80
EBITDA	GTQ 3,456,696.00	GTQ 3,629,530.80	GTQ 3,811,007.34	GTQ 4,001,557.71	GTQ 4,201,635.59	GTQ 4,411,717.37	GTQ 4,632,303.24	GTQ 4,863,918.40	GTQ 5,107,114.32	GTQ 5,362,470.04
Depreciación de maquinaria	GTQ (496,650.00)	GTQ (521,482.50)	GTQ (547,556.63)	GTQ (574,934.46)	GTQ (603,681.18)	GTQ (633,865.24)	GTQ (665,558.50)	GTQ (698,836.42)	GTQ (733,778.25)	GTQ (770,467.16)
EBT	GTQ 2,960,046.00	GTQ 3,108,048.30	GTQ 3,263,450.72	GTQ 3,426,623.25	GTQ 3,597,954.41	GTQ 3,777,852.13	GTQ 3,966,744.74	GTQ 4,165,081.98	GTQ 4,373,336.08	GTQ 4,592,002.88
Impuestos	GTQ (740,011.50)	GTQ (777,012.08)	GTQ (815,862.68)	GTQ (856,655.81)	GTQ (899,488.60)	GTQ (944,463.03)	GTQ (991,686.19)	GTQ (1,041,270.49)	GTQ (1,093,334.02)	GTQ (1,148,000.72)
Utilidad	GTQ 2,220,034.50	GTQ 2,331,036.23	GTQ 2,447,588.04	GTQ 2,569,967.44	GTQ 2,698,465.81	GTQ 2,833,389.10	GTQ 2,975,058.56	GTQ 3,123,811.48	GTQ 3,280,002.06	GTQ 3,444,002.16

INVERSIÓN GTQ
(4,966,500.00)

Cashflow										
Utilidad Neta	GTQ									
	2,220,034.50	2,331,036.23	2,447,588.04	2,569,967.44	2,698,465.81	2,833,389.10	2,975,058.56	3,123,811.48	3,280,002.06	3,444,002.16
Depreciación	GTQ									
	(496,650.00)	(521,482.50)	(547,556.63)	(574,934.46)	(603,681.18)	(633,865.24)	(665,558.50)	(698,836.42)	(733,778.25)	(770,467.16)
TOTAL CASHFLOW	GTQ									
	2,716,684.50	2,852,518.73	2,995,144.66	3,144,901.89	3,302,146.99	3,467,254.34	3,640,617.06	3,822,647.91	4,013,780.30	4,214,469.32

EBITDA	GTQ	GTQ	GTQ	GTQ	GTQ	GTQ	GTQ	GTQ	GTQ	GTQ
	3,456,696.00	3,629,530.80	3,811,007.34	4,001,557.71	4,201,635.59	4,411,717.37	4,632,303.24	4,863,918.40	5,107,114.32	5,362,470.04
CashFlow	GTQ	GTQ	GTQ	GTQ	GTQ	GTQ	GTQ	GTQ	GTQ	GTQ
	2,716,684.50	2,852,518.73	2,995,144.66	3,144,901.89	3,302,146.99	3,467,254.34	3,640,617.06	3,822,647.91	4,013,780.30	4,214,469.32
FreeCashFlow	GTQ	GTQ	GTQ	GTQ	GTQ	GTQ	GTQ	GTQ	GTQ	GTQ
	(4,966,500.00)	3,456,696.00	3,629,530.80	3,811,007.34	4,001,557.71	4,201,635.59	4,411,717.37	4,632,303.24	4,863,918.40	5,107,114.32

TIR 74%

VPN GTQ
15,656,879.46

WACC 15.03%

Nota: Los cálculos para el flujo de efectivo fueron realizados para la reacción de sulfonación y entrecruzamiento con 30% (v/m) óleum y 2 horas de reacción.

Cuadro 34. Pérdidas, costos e ingresos de propuesta de puesta en marcha de reciclado químico de poliestireno en planta industrial para el análisis costo/beneficio del proyecto.

Periodo	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Pérdida	GTQ 4,966,500.00										
Costos	GTQ 4,966,500.00	GTQ 1,850,996.31	GTQ 1,943,546.12	GTQ 2,040,723.43	GTQ 2,142,759.60	GTQ 2,249,897.58	GTQ 2,362,392.46	GTQ 2,480,512.08	GTQ 2,604,537.69	GTQ 2,734,764.57	GTQ 2,871,502.80
Ingresos	GTQ -	GTQ 5,307,692.31	GTQ 5,573,076.92	GTQ 5,851,730.77	GTQ 6,144,317.31	GTQ 6,451,533.17	GTQ 6,774,109.83	GTQ 7,112,815.32	GTQ 7,468,456.09	GTQ 7,841,878.89	GTQ 8,233,972.84

Nota: Los cálculos fueron realizados para la reacción de sulfonación y entrecruzamiento con 30% (v/m) óleum y 2 horas de reacción.

Cuadro 35. Coste medio ponderado del capital para el proceso de valoración del proyecto de reciclado químico de poliestireno en planta industrial.

WACC	
Kd (Costo de la deuda)	10.70%
Ke (Costo del Capital/Inversionistas)	10.70%
tasa de impuestos	4.00%
rf	10.70%
B	1.22
Prima de riesgo	4.57%
Relación deuda/capital	19.24%
WACC	15.03%

Nota: Los cálculos para el flujo de efectivo fueron realizados para la reacción de sulfonación y entrecruzamiento con 30% (v/m) óleum y 2 horas de reacción.

C. Datos originales

Cuadro 36. Masa de poliestireno, reactivos y producto reacción de sulfonación y entrecruzamiento con diferentes tiempos y proporciones (v/m) de óleum corrida 1.

% Óleum en la reacción (mL/g)	Tiempo (h)	No. Muestra	Masa poliestireno (g ± 0.00005 g)	Masa ácido sulfúrico (g ± 0.00005 g)	Masa óleum (g ± 0.00005 g)	Masa reactivo total (g ± 0.00005 g)	Masa final (g ± 0.00005 g)
20%	1	1	9.9267	14.6121	3.9508	18.5629	17.6320
	2	4	10.0355	14.7723	3.9941	18.7664	19.2181
	3	7	8.2315	12.1168	3.2761	15.3929	18.6366
30%	1	2	10.0267	12.9144	5.9859	18.9003	22.5719
	2	5	10.1071	13.0179	6.0339	19.0519	26.3488
	3	8	10.4528	13.4632	6.2403	19.7035	28.3612
40%	1	3	10.1502	11.2058	8.0796	19.2854	29.3201
	2	6	10.0386	11.0826	7.9907	19.0733	27.0117
	3	9	10.3064	11.3783	8.2039	19.5822	25.0775
50%	1	10	10.3515	9.5234	10.2997	19.8231	28.3000
	2	11	6.8916	6.3403	6.8571	13.1974	19.5000
	3	12	10.1265	9.3164	10.0759	19.3922	28.7000

Cuadro 37. Masa de poliestireno, reactivos y producto reacción de sulfonación y entrecruzamiento con diferentes tiempos y proporciones (v/m) de óleum corrida 2.

% Óleum en la reacción (mL/g)	Tiempo (h)	No. Muestra	Masa poliestireno (g ± 0.00005 g)	Masa ácido sulfúrico (g ± 0.00005 g)	Masa óleum (g ± 0.00005 g)	Masa reactivo total (g ± 0.00005 g)	Masa final (g ± 0.00005 g)
20%	1	1	10.0451	14.7864	3.9979	18.7843	17.7571
	2	4	10.1025	14.8709	4.0208	18.8917	19.3645
	3	7	10.2560	15.0968	4.0819	19.1787	23.1200
30%	1	2	10.1053	13.0156	6.0329	19.0485	22.7634
	2	5	10.1071	13.0179	6.0339	19.0519	26.3488
	3	8	10.5528	13.5920	6.3000	19.8920	28.6612
40%	1	3	10.2567	11.3234	8.1643	19.4877	29.5201
	2	6	10.1520	11.2078	8.0810	19.2888	27.2317
	3	9	10.1098	11.1612	8.0474	19.2086	24.5980
50%	1	10	10.0451	9.2415	9.9949	19.2364	27.3194
	2	11	10.2610	9.4401	10.2097	19.6498	28.6203
	3	12	10.1200	9.3104	10.0694	19.3798	28.5690

Cuadro 38. Masa de poliestireno, reactivos y producto reacción de sulfonación y entrecruzamiento con diferentes tiempos y proporciones (v/m) de óleum corrida 3.

% Óleum en la reacción (mL/g)	Tiempo (h)	No. Muestra	Masa poliestireno (g)	Masa ácido sulfúrico (g)	Masa óleum (g)	Masa reactivo total (g)	Masa final (g)
20%	1	1	10.0023	14.7234	3.9809	18.7043	17.7012
	2	4	10.1043	14.8735	4.0215	18.8950	19.3281
	3	7	10.0678	14.8198	4.0070	18.8268	22.8012
30%	1	2	10.1081	13.0192	6.0345	19.0538	22.8018
	2	5	10.0098	12.8926	5.9759	18.8685	26.0132
	3	8	10.2078	13.1476	6.0941	19.2417	27.7801
40%	1	3	10.0501	11.0953	7.9999	19.0952	28.7801
	2	6	10.2134	11.2756	8.1299	19.4055	27.3117
	3	9	10.3515	11.4281	8.2398	19.6679	25.0985
50%	1	10	10.2475	9.4277	10.1963	19.6240	27.8945
	2	11	10.0010	9.2009	9.9510	19.1519	27.9712
	3	12	10.0136	9.2125	9.9635	19.1760	28.4012

Cuadro 39. Porcentaje de retención de calcio y magnesio (m/v) del producto de reacción obtenido con variables de 20% (v/m) óleum.

	Concentración (g/galón ± 0.005)	Magnesio	Calcio
Muestra 1			
Mezcla 30/70	21.00	30.00	70.00
Prueba 1	24.00	34.29	80.00
Prueba 2	25.00	35.71	83.33
Prueba 3	23.00	32.86	76.67
Muestra 4			
Mezcla 30/70	21.00	30.00	70.00
Prueba 1	21.00	30.00	70.00
Prueba 2	24.00	34.29	80.00
Prueba 3	23.00	32.86	76.67
Muestra 7			
Mezcla 30/70	20.00	30.00	70.00
Prueba 1	27.00	40.50	94.50
Prueba 2	28.00	42.00	98.00
Prueba 3	29.00	43.50	101.50

Cuadro 40. Porcentaje de retención de calcio y magnesio (m/v) del producto de reacción obtenido con variables de 30% (v/m) óleum.

	Concentración (g/galón ± 0.005)	Magnesio	Calcio
Muestra 2			
Mezcla 30/70	22.00	30.00	70.00
Prueba 1	30.00	40.91	95.45
Prueba 2	31.00	42.27	98.64
Prueba 3	34.00	46.36	108.18
Muestra 5			
Mezcla 30/70	20.00	30.00	70.00
Prueba 1	41.00	61.50	143.50
Prueba 2	39.00	58.50	136.50
Prueba 3	39.00	58.50	136.50
Muestra 8			
Mezcla 30/70	20.00	30.00	70.00
Prueba 1	37.00	55.50	129.50
Prueba 2	42.00	63.00	147.00
Prueba 3	40.00	60.00	140.00

Cuadro 41. Porcentaje de retención de calcio y magnesio (m/v) del producto de reacción obtenido con variables de 40% (v/m) óleum.

	Concentración (g/galón ± 0.005)	Magnesio	Calcio
Muestra 3			
Mezcla 30/70	20.00	30.00	70.00
Prueba 1	37.00	55.50	129.50
Prueba 2	41.00	61.50	143.50
Prueba 3	39.00	58.50	136.50
Muestra 6			
Mezcla 30/70	20.00	30.00	70.00
Prueba 1	29.00	43.50	101.50
Prueba 2	34.00	51.00	119.00
Prueba 3	38.00	57.00	133.00
Muestra 9			
Mezcla 30/70	20.00	30.00	70.00
Prueba 1	28.00	42.00	98.00
Prueba 2	31.00	46.50	108.50
Prueba 3	30.00	45.00	105.00

Cuadro 42. Porcentaje de retención de calcio y magnesio (m/v) del producto de reacción obtenido con variables de 50% (v/m) óleum.

	Concentración (g/galón ± 0.005)	Magnesio	Calcio
Muestra 10			
Mezcla 30/70	20.00	30.00	70.00
Prueba 1	35.00	52.50	122.50
Prueba 2	34.00	51.00	119.00
Prueba 3	31.00	46.50	108.50
Muestra 11			
Mezcla 30/70	20.00	30.00	70.00
Prueba 1	34.00	51.00	119.00
Prueba 2	34.00	51.00	119.00
Prueba 3	37.00	55.50	129.50
Muestra 12			
Mezcla 30/70	20.00	30.00	70.00
Prueba 1	40.00	60.00	140.00
Prueba 2	38.00	57.00	133.00
Prueba 3	39.00	58.50	136.50

Cuadro 43. Datos originales para el cálculo de densidad (g/mL) del producto de reacción obtenido con variables de 20% (v/m) óleum.

Muestra	1				4				7			
No.	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4
Peso (g ± 0.00005g)	4.6432	4.4089	4.6213	4.2013	3.0748	4.1024	4.5672	3.7093	3.5009	4.0254	3.9854	4.0154
Volumen de agua (mL ± 0.05 mL)	50.0	50.0	50.0	50.0	65.0	65.0	65.0	65.0	55.0	55.0	55.0	55.0
Volumen final (mL ± 0.5 mL)	58.0	57.0	60.0	61.0	70.0	72.0	71.0	73.0	60.0	61.0	60.0	62.0
Diferencia de volumen (mL)	8.0	7.0	10.0	11.0	5.0	7.0	6.0	8.0	5.0	6.0	5.0	7.0

Cuadro 44. Datos originales para el cálculo de densidad (g/mL) del producto de reacción obtenido con variables de 30% (v/m) óleum.

Muestra	2				5				8			
No.	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4
Peso (g ± 0.00005g)	4.5987	4.5010	5.1024	3.9845	4.0616	4.5123	4.4578	4.6752	4.5404	4.5024	4.3416	4.6547
Volumen de agua (mL ± 0.05 mL)	58.0	55.0	55.0	55.0	70.0	70.0	70.0	70.0	50.0	50.0	50.0	50.0
Volumen final (mL ± 0.05 mL)	66.0	61.5	60.0	60.0	74.0	75.0	74.5	76.0	55.0	54.0	54.0	56.0
Diferencia de volumen (mL)	8.0	6.5	5.0	5.0	4.0	5.0	4.5	6.0	5.0	4.0	4.0	6.0

Cuadro 45. Datos originales para el cálculo de densidad (g/mL) del producto de reacción obtenido con variables de 40% óleum (v/m).

Muestra	3				6				9			
No.	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4
Peso (g ± 0.00005g)	4.3357	4.4315	4.5312	4.5045	5.4799	4.5893	4.9769	4.3457	5.1702	4.5013	5.1365	5.0091
Volumen de agua (mL ± 0.05 mL)	40.0	45.0	45.0	40.0	50.0	50.0	50.0	50.0	50.0	50.0	50.0	50.0
Volumen final (mL ± 0.05 mL)	47.0	52.0	52.5	47.0	56.0	55.0	57.0	56.0	55.0	55.0	56.0	55.0
Diferencia de volumen (mL)	7.0	7.0	7.5	7.0	6.0	5.0	7.0	6.0	5.0	5.0	6.0	5.0

Cuadro 46. Datos originales para el cálculo de densidad (g/mL) del producto de reacción obtenido con variables de 50% (v/m) óleum.

Muestra	10				11				12			
No.	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4
Peso (g ± 0.00005g)	6.4474	6.359	6.5024	6.2476	10.0097	9.679	9.9800	10.1002	6.8812	6.9001	7.7456	6.9014
Volumen de agua (mL ± 0.05 mL)	50.0	50.0	50.0	50.0	50.0	50.0	50.0	50.0	50.0	50.0	50.0	50.0
Volumen final (mL ± 0.05 mL)	58.0	58.0	58.0	57.5	60.5	61.0	61.0	61.0	57.0	57.0	58.0	57.0
Diferencia de volumen (mL)	8.0	8.0	8.0	7.5	10.5	11.0	11.0	11.0	7.0	7.0	8.0	7.0

Cuadro 47. Porcentaje de retención de agua (%MC) de 12 productos de reacción de sulfonación y entrecruzamiento con diferentes tiempos y proporciones (v/m) de óleum corrida 1.

% Óleum en la reacción (mL/g)	Tiempo (h)	No. Muestra	Retención de agua (%MC ± 0.005)
20%	1	1	39.39
	2	4	49.16
	3	7	59.08
30%	1	2	44.41
	2	5	25.90
	3	8	29.48
40%	1	3	18.43
	2	6	19.06
	3	9	21.14
50%	1	10	18.29
	2	11	19.86
	3	12	19.12

Cuadro 48. Porcentaje de retención de agua (%MC) de 12 productos de reacción de sulfonación y entrecruzamiento con diferentes tiempos y proporciones (v/m) de óleum corrida 2.

% Óleum en la reacción (mL/g)	Tiempo (h)	No. Muestra	Retención de agua (%MC ± 0.005)
20%	1	1	35.91
	2	4	46.19
	3	7	55.12
30%	1	2	43.20
	2	5	22.59
	3	8	25.47
40%	1	3	17.29
	2	6	17.89
	3	9	20.36
50%	1	10	15.48
	2	11	16.23
	3	12	18.43

Cuadro 49. Porcentaje de retención de agua (%MC) de 12 productos de reacción de sulfonación y entrecruzamiento con diferentes tiempos y proporciones (v/m) de óleum corrida 3.

% Óleum en la reacción (mL/g)	Tiempo (h)	No. Muestra	Retención de agua (%MC ± 0.005)
20%	1	1	42.50
	2	4	54.12
	3	7	63.49
30%	1	2	47.23
	2	5	28.90
	3	8	35.59
40%	1	3	20.40
	2	6	24.56
	3	9	22.65
50%	1	10	20.40
	2	11	20.54
	3	12	21.50

Cuadro 50. Datos originales para la gráfica de incremento del peso relativo del producto con variables seleccionadas de 30% (v/m) y 2 horas de reacción en función del tiempo en minutos durante el proceso de entrecruzamiento.

Tiempo (min)	Peso muestra (g)	mol SO₃H + SO₂/g
0	10.1071	0.0000
2	10.2845	0.0001
4	10.3802	0.0001
6	10.5720	0.0002
8	10.7356	0.0003
10	10.9846	0.0004
12	11.0624	0.0004
14	11.2743	0.0005
16	11.4587	0.0005
18	11.8514	0.0007
20	11.9746	0.0007
22	12.1953	0.0008
24	12.3650	0.0008
26	12.8623	0.0010
28	12.9426	0.0010
30	13.0078	0.0010
35	13.9867	0.0012
40	14.4578	0.0014
45	14.9995	0.0015
50	15.7624	0.0016
55	16.2365	0.0017
60	17.0467	0.0018
70	17.8953	0.0020
80	18.1045	0.0020
90	19.4032	0.0022
100	20.4566	0.0023
110	23.8493	0.0026
120	26.3488	0.0028

Nota: La gráfica obtenida a partir de estos datos se encuentra en la Figura 19 en Resultados.

Cuadro 51. Datos originales para el cálculo del coeficiente de transferencia de masa del producto con variables seleccionadas de 30% (v/m) y 2 horas de reacción y resina comercial.

Columna de cromatografía		Poliestireno sulfonado entrecruzado		Resina comercial	
Altura (m ± 0.00005m)	0.2660	Altura (m ± 0.00005m)	0.0654	Altura (m ± 0.00005m)	0.0320
De 0 a 100 mL (m ± 0.00005m)	0.1800	Diámetro (m ± 0.00005m)	0.003	Diámetro (m ± 0.00005m)	0.0013
Diámetro (m ± 0.00005m)	0.055	Peso de una partícula (g ± 0.00005g)	0.0013	Ss (gpm/ft ³ ± 0.05)	3.5
Tiempo (minutos)	15	Tiempo (minutos)	15	Tiempo (minutos)	15

Nota: Las pruebas de retención de calcio y magnesio fueron realizadas en una columna de cromatografía, simulando una torre de adsorción con lecho fijo.

Cuadro 52. Precios de reactivos utilizados para la producción de poliestireno sulfonado entrecruzado utilizados para el cálculo de costo/kg de producto.

Reactivo	Presentación	Unidad	Precio
Acetona	3.78541	L	Q 90.00
Agua destilada	19.5	L	Q 13.40
Ácido sulfúrico concentrado	2.5	L	Q 580.00
Óleum	2.5	L	Q 320.00
Hidróxido de Sodio	5	kg	Q 1,664.00
Poliestireno	-		Q -

Cuadro 53. Costos de servicios utilizados para la producción de poliestireno sulfonado entrecruzado en escala laboratorio.

Procedimiento	Equipo	Tiempo (min)	Temperatura	Consumo kW
Secado	Horno	20	60°C	1.5
Secado	Horno	30	60°C	1.5
Reacción	Estufa	120	80°C	0.4

Cuadro 54. Precio de resinas comerciales compuesta por gel poliestireno catión ácido fuerte.

Nombre	Presentación (kg)	Precio
Aquafine	24.0	Q 827.00
Purolite C-100E/C-120E	21.0	Q 862.00
Resinex K-8 FG	21.3	Q 1,172.00
Purikor	23.3	Q 740.00
Aquatrol Cat100e	22.5	Q 824.00

Referencias:

EWS Water Treatment Depot: ews.com.gt

Purelite: purelite.com

Aquasistemas: aquasistemas.com.gt

D. Cálculos de muestra

Cálculo 1: Rendimiento de reacción de sulfonación y entrecruzamiento del poliestireno.

$$\% = \frac{\text{Masa final (g)}}{\text{Masa inicial (g)} + \text{Masa reactivo (g)}} * 100 \quad (7)$$

$$\frac{26.3488 \pm 0.00005 \text{ g}}{10.1071 \pm 0.00005 \text{ g} + 19.0519 \pm 0.00005 \text{ g}} * 100 = 90.3625 \pm 0.0005 \%$$

NOTA: El cálculo fue realizado con la masa del producto, la masa de los reactivos y la masa de poliestireno inicial. Se realizó el mismo cálculo para todas las muestras obtenidas. Las masas utilizadas para este cálculo se encuentran en los Cuadros 36, 37 y 38 en el área de Datos Originales. Los rendimientos obtenidos se encuentran en el Cuadro 5 en el área de resultados.

Cálculo 2: Capacidad de retención de calcio del producto de la reacción de sulfonación y entrecruzamiento del poliestireno.

$$\% = \frac{[\text{Solución calcio inicial} (\frac{g}{galón}) - \text{Solución final} (\frac{g}{galón})]}{[\text{Solución calcio inicial} (\frac{g}{galón})]} * 100 \quad (8)$$

$$\frac{70.00 \pm 0.005 \frac{g}{galón} - 35.71 \pm 0.005 \frac{g}{galón}}{70.00 \pm 0.005 \frac{g}{galón}} * 100 = 48.99 \pm 0.01 \%$$

NOTA: El cálculo fue realizado con los datos de concentración de la solución inicial y la solución luego de pasar por el lecho fijo de producto de reacción de sulfonación y entrecruzamiento. Se realizó el mismo cálculo para todas las muestras obtenidas. Los datos utilizados se encuentran en los Cuadros 39, 40 y 41 en el área de Datos originales y la capacidad de retención de los 12 productos se encuentra en el Cuadro 7 en el área de Resultados.

Cálculo 3: Capacidad de retención de magnesio del producto de la reacción de sulfonación y entrecruzamiento del poliestireno.

$$\% = \frac{[\text{Solución magnesio inicial} (\frac{g}{galón}) - \text{Solución final} (\frac{g}{galón})]}{[\text{Solución magnesio inicial} (\frac{g}{galón})]} * 100 \quad (9)$$

$$\frac{58.00 \pm 0.005 \frac{g}{galón} - 38.00 \pm 0.005 \frac{g}{galón}}{38.00 \pm 0.005 \frac{g}{galón}} * 100 = 52.63 \pm 0.01 \%$$

NOTA: El cálculo fue realizado con los datos de concentración de la solución inicial y la solución luego de pasar por el lecho fijo de producto de reacción de sulfonación y entrecruzamiento. Se realizó el mismo cálculo para todas las muestras obtenidas. Los datos utilizados se encuentran en los Cuadros 39, 40 y 41 en el área de Datos originales y la capacidad de retención de los 12 productos se encuentra en el Cuadro 8 en el área de Resultados.

Cálculo 4: Densidad de muestras de producto de reacción de sulfonación y entrecruzamiento del poliestireno.

$$\rho = \frac{\text{Masa de poliestireno sulfonado entrecruzado (g)}}{\text{Volumen de agua final (mL)} - \text{volumen de agua inicial (mL)}} \quad (10)$$

$$\frac{5.1024 \pm 0.00005 \text{ g}}{60.0 \pm 0.05 \text{ mL} - 55.0 \pm 0.05 \text{ mL}} = 1.0205 \pm 0.0176 \text{ g/mL}$$

NOTA: El cálculo de densidad se realizó con una muestra de producto de reacción de sulfonación y entrecruzamiento de poliestireno de aproximadamente 5 g y la diferencia de volumen de agua luego de agregar la muestra a una probeta. Se realizó el mismo cálculo para todas las muestras obtenidas. Los datos de masa y volumen se encuentran en los Cuadros 43, 44, 45 y 46 en el área de datos originales. Las densidades obtenidas se encuentran en el Cuadro 25 del área de Datos calculados.

Cálculo 5: Grado de sulfonación de poliestireno durante la reacción de sulfonación y entrecruzamiento.

$$\text{mol } SO_3H + SO_2/g = \frac{\frac{\text{Masa de poliestireno sulfonado (g)} - \text{Masa poliestireno inicial (g)}}{\text{Masa molar } SO_3H + SO_2 \left(\frac{g}{\text{mol}}\right)}}{\text{Masa poliestireno sulfonado (g)}} \quad (11)$$

$$\frac{\frac{10.2845 \pm 0.00005 \text{ g} - 10.1071 \pm 0.00005 \text{ g}}{222.236 \text{ g/mol}}}{10.2845 \pm 0.00005 \text{ g}} = 0.0008 \pm 0.0000 \text{ mol } SO_3H + SO_2/g$$

NOTA: El cálculo para el grado de sulfonación se realizó con el inverso del peso relativo en función del tiempo de sulfonación en minutos durante el proceso de entrecruzamiento. Se utilizó la masa del poliestireno conforme avanza la reacción y los pesos moleculares del ácido sulfónico y del dióxido de azufre. Se realizó el mismo cálculo para todos los puntos obtenidos. Las masas de poliestireno se encuentran en el Cuadro 50 en el área de Datos originales y la gráfica obtenida se encuentra en la Figura 19 en el área de Resultados.

Cálculo 6: Coeficiente de transferencia de masa de producto de la reacción de sulfonación y entrecruzamiento del poliestireno.

$$\text{Área Superficial esfera} = 4\pi(D/2)^2 \quad (12)$$

$$\text{Área Superficial perla} = 4\pi(0.003 \pm 0.0005m/2)^2 = 0.00002827 \pm 0.00000001 m^2$$

$$\text{Volumen esfera} = \left(\frac{4}{3}\right)\pi(D/2)^3 \quad (13)$$

$$\text{Volumen perla} = \left(\frac{4}{3}\right)\pi(0.003 \pm 0.0005m/2)^3 = 0.000000014 \pm 0.000000001 m^3$$

$$\text{Volumen cilindro} = \pi(D/2)^2 * h \quad (14)$$

$$\text{Volumen total} = \pi(0.055 \pm 0.0005 m/2)^2 * 0.0654m = 0.0001554 \pm 0.0000001 m^3$$

$$N = \frac{\text{Volumen total cilindro}}{\text{Volumen perla}} \quad (15)$$

$$N = \frac{0.0001554 \pm 0.0000001 m^3}{0.000000014 \pm 0.000000001 m^3} * 0.75 = 8243 \pm 5 \text{ perlas}$$

$$\text{Área superficial total} = \text{número de perlas} * \text{área superficial perla} \quad (16)$$

$$\text{Área superficial total} = 8243 \pm 5 \text{ perlas} * 0.00002827 \pm 0.00000001 m^2 = 0.2331 \pm 0.0002 m^2$$

$$\text{Área de superficie específica} = \frac{\text{Área superficial total}}{\text{Peso de perla}} \quad (17)$$

$$\text{Área de superficie específica} = \frac{0.2331 \pm 0.0002 m^2}{0.0013 \pm 0.00005 g} = 180.5297 \pm 6.9452 \frac{m^2}{g}$$

$$Ls = \frac{\text{Flujo másico del líquido} \left(\frac{kg}{s}\right)}{\text{Área transversal} (m^2)} \quad (18)$$

$$Ls = \frac{0.000997 \pm 0.000001 kg/s}{2 * 0.0113 \pm 0.0002 m^2} = 0.04411 \pm 0.00078 kg \text{ agua suave}/m^2s$$

$$Ss = \frac{Ls*(Y_0 - Y_1)}{(X_0 - X_1)} \quad (19)$$

$$Ss = \frac{0.04411 \pm 0.00078 kg \text{ agua suave}/m^2s * (70.00 - 61.50) \pm 0.007}{(143.50 - 136.50) \pm 0.007} = 0.05357 \pm 0.00094 kg/m^2 s$$

$$Ks = \frac{Ss \left(\frac{kg}{m^2s}\right)}{Hts (m)} \quad (20)$$

$$Ks = \frac{0.05357 \pm 0.00094 kg/ms}{0.0654 \pm 0.00005 m} = 0.8191 kg/m^2s$$

NOTA: El cálculo se realizó simulando una torre de adsorción de lecho fijo. Se realizó el mismo cálculo para el coeficiente de transferencia de masa de resina comercial. Los datos utilizados para el cálculo se encuentran en el Cuadro 51 en el área de Datos originales y los coeficientes de transferencia de masa se encuentran en el Cuadro 31 del área de Datos calculados.

Cálculo 7: Costo de producción de poliestireno sulfonado entrecruzado a partir de poliestireno expandido usado.

$$\begin{aligned} \text{Costo (Q)} &= \left(\frac{5\text{mL}}{1000}\right) * \frac{Q23.78}{L} \text{acetona} + 1 L * \frac{Q0.69}{L} \text{agua destilada} + \left(\frac{7.07\text{mL}}{1000}\right) \\ &\quad * \frac{Q232}{L} \text{ácido sulfúrico} + \left(\frac{3.03\text{mL}}{1000}\right) * \frac{Q128}{L} \text{óleum} + \left(\frac{1\text{g}}{1000}\right) \\ &\quad * \frac{Q332.80}{\text{kg}} \text{hidróxido de sodio} = \frac{Q3.17}{10.1071 \text{ g}} = Q0.12 * 1000 \\ &= Q120.25 + Q2.71 \text{ servicio eléctrico} = \frac{Q122.95}{\text{kg}} \text{de producto} \end{aligned}$$

NOTA: El cálculo se realizó con el costo de los reactivos utilizados y el costo de servicios auxiliares de agua y energía. Este cálculo se realizó para el costo de producción a escala laboratorio y se escaló a planta industrial. Se realizó el mismo cálculo para todas las muestras de poliestireno sulfonado entrecruzado. Los datos utilizados para el cálculo se encuentran en los Cuadros 52 y 53 en el área de Datos originales.

Cálculo 8: Promedio de rendimiento de la reacción de sulfonación y entrecruzamiento de tres corridas.

$$x_p = \frac{90.3625 + 90.0788 + 90.5165}{3} = 90.3301 \pm 0.0053\% \left(\frac{m}{m}\right)$$

Nota: El cálculo se realizó utilizando la ecuación (4) en el área de Marco Teórico. Los datos utilizados fueron los rendimientos obtenidos con el Cálculo 1 y presentados en el Cuadro 5 en el área de Resultados. El mismo cálculo se realizó para todos los cálculos previamente presentados.

Cálculo 9: Varianza de rendimiento de la reacción de sulfonación y entrecruzamiento de tres corridas.

$$S^2 = \frac{(90.3625 - 90.3301)^2 + (90.0788 - 90.3301)^2 + (90.5165 - 90.3301)^2}{3 - 1} = 0.0333$$

Nota: El cálculo se realizó utilizando la ecuación (5) en el área de Marco Teórico. Los datos utilizados fueron los rendimientos obtenidos con el Cálculo 1 y el promedio obtenido con el Cálculo 8 y presentados en el Cuadro 5 en el área de Resultados. El mismo cálculo se realizó para todos los cálculos previamente presentados.

Cálculo 10: Desviación estándar de rendimiento de la reacción de sulfonación y entrecruzamiento de tres corridas.

$$S = \sqrt{0.0333} = 0.1826$$

Nota: El cálculo se realizó utilizando la ecuación (6) en el área de Marco Teórico. Los datos utilizados fueron los rendimientos obtenidos con el Cálculo 1 y la varianza del Cálculo 9 y presentados en el Cuadro 5 en el área de Resultados. El mismo cálculo se realizó para todos los cálculos previamente presentados.

E. Análisis de error

Propagación de error suma y resta

$$S_y = \sqrt{(S_a)^2 + (S_b)^2} \quad (21)$$

S_a = incertidumbre del primer dato

S_b = incertidumbre del segundo dato

Propagación de error multiplicación y división

$$S_y = Y \sqrt{\left(\frac{S_a}{a}\right)^2 + \left(\frac{S_b}{b}\right)^2} \quad (22)$$

S_a = incertidumbre del primer dato

a = primer dato

S_b = incertidumbre del segundo dato

b = segundo dato

Cálculo 11: Análisis de error de rendimiento de la reacción de sulfonación y entrecruzamiento de tres corridas.

$$\Delta = \sqrt{(0.00005)^2 + (0.00005)^2} = \pm 0.00007 \text{ g}$$
$$\Delta = 90.3301\% \sqrt{\left(\frac{0.00007 \text{ g}}{29.1590 \text{ g}}\right)^2 + \left(\frac{0.00005 \text{ g}}{26.3488 \text{ g}}\right)^2} = 0.0003\% \left(\frac{m}{m}\right)$$

Nota: El cálculo se realizó utilizando la ecuación (21) y (22). Los datos utilizados fueron los rendimientos obtenidos con el Cálculo 1 y las incertidumbres presentadas en el Cuadro 36 en el área de Datos originales. El mismo cálculo fue realizado para los rendimientos de los 12 productos de reacción y presentados en el Cuadro 5 en el área de Resultados.

Cálculo 12: Análisis de error de capacidad de retención de calcio del producto de la reacción de sulfonación y entrecruzamiento del poliestireno.

$$\Delta = \sqrt{(0.005)^2 + (0.005)^2} = \pm 0.007 \text{ g/galón}$$
$$\Delta = 81.25\% \sqrt{\left(\frac{0.007 \text{ g/galón}}{48.75 \text{ g/galón}}\right)^2 + \left(\frac{0.005 \text{ g/galón}}{60.00 \text{ g/galón}}\right)^2} = 0.01\% \left(\frac{m}{V}\right)$$

Nota: El cálculo se realizó utilizando la ecuación (21) y (22). Los datos utilizados fueron la capacidad de retención de calcio obtenidas con el Cálculo 2 y las incertidumbres presentadas en los Cuadros 39, 40 y 41 en el área de Datos originales. El mismo cálculo fue realizado para las capacidades de retención de calcio de los 12 productos de reacción y presentados en el Cuadro 7 en el área de Resultados.

Cálculo 13: Análisis de error de capacidad de retención de magnesio del producto de la reacción de sulfonación y entrecruzamiento del poliestireno.

$$\Delta = \sqrt{(0.005)^2 + (0.005)^2} = \pm 0.007 \text{ g/galón}$$

$$\Delta = 52.63\% \sqrt{\left(\frac{0.007 \text{ g/galón}}{20.00 \text{ g/galón}}\right)^2 + \left(\frac{0.005 \text{ g/galón}}{38.00 \text{ g/galón}}\right)^2} = 0.01\% \left(\frac{m}{V}\right)$$

Nota: El cálculo se realizó utilizando la ecuación (21) y (22). Los datos utilizados fueron la densidad obtenida con el Cálculo 3 y las incertidumbres presentadas en los Cuadros 39, 40 y 41 en el área de Datos originales. El mismo cálculo fue realizado para las capacidades de retención de calcio de los 12 productos de reacción y presentados en el Cuadro 8 en el área de Resultados.

Cálculo 14: Análisis de error de la densidad de muestras de producto de reacción de sulfonación y entrecruzamiento del poliestireno.

$$\Delta = \sqrt{(0.05)^2 + (0.05)^2} = \pm 0.07 \text{ mL}$$

$$\Delta = 1.0205 \text{ g/mL} \sqrt{\left(\frac{0.07 \text{ mL}}{5.0 \text{ mL}}\right)^2 + \left(\frac{0.00005 \text{ g}}{5.1024 \text{ g}}\right)^2} = 0.0176 \text{ g/mL}$$

Nota: El cálculo se realizó utilizando la ecuación (21) y (22). Los datos utilizados fueron la capacidad de retención de calcio obtenidas con el Cálculo 4 y las incertidumbres presentadas en los Cuadros 43, 44, 45 y 46 en el área de Datos originales. El mismo cálculo fue realizado para las densidades de los 12 productos de reacción y presentados en el Cuadro 25 en el área de Datos calculados.

Cálculo 15: Análisis de error del grado de sulfonación de poliestireno durante la reacción de sulfonación y entrecruzamiento.

$$\Delta = \sqrt{(0.00005)^2 + (0.00005)^2} = \pm 0.00007 \text{ g}$$

$$\Delta = 0.0008 \text{ mol } SO_3H + SO_2/g \sqrt{\left(\frac{0.00007 \text{ g}}{0.1774 \text{ g}}\right)^2 + \left(\frac{0.00005 \text{ g}}{10.2845 \text{ g}}\right)^2} = 0.0000003 \text{ mol } SO_3H + SO_2/g$$

Nota: El cálculo se realizó utilizando la ecuación (21) y (22). Los datos utilizados fueron el grado de sulfonación obtenido con el Cálculo 5 y las incertidumbres presentadas en el Cuadro 36 en el área de Datos originales. El mismo cálculo fue realizado para el grado de sulfonación de cada masa y presentados en el Cuadro 50 en el área de Datos originales.

Cálculo 16: Análisis de error del coeficiente de transferencia de masa de producto de la reacción de sulfonación y entrecruzamiento del poliestireno.

$$\Delta = 8243 \text{ perlas} \sqrt{\left(\frac{0.00000001 \text{ m}^3}{0.0001554 \text{ m}^3}\right)^2 + \left(\frac{0.000000001 \text{ m}^3}{0.000000014 \text{ m}^3}\right)^2} = 5 \text{ perlas}$$

$$\Delta = 0.2331 \text{ m}^2 \sqrt{\left(\frac{0.00000001 \text{ m}^2}{0.00002827 \text{ m}^2}\right)^2 + \left(\frac{5 \text{ perlas}}{8243 \text{ perlas}}\right)^2} = 0.0002 \text{ m}^2$$

$$\Delta = 180.5297 \frac{\text{m}^2}{\text{g}} \sqrt{\left(\frac{0.0002 \text{ m}^2}{0.2331 \text{ m}^2}\right)^2 + \left(\frac{0.00005 \text{ g}}{0.0013 \text{ g}}\right)^2} = 6.9452 \frac{\text{m}^2}{\text{g}}$$

$$\Delta = 0.04411 \text{ kg/m}^2\text{s} \sqrt{\left(\frac{0.000001 \frac{\text{kg}}{\text{s}}}{0.000997 \frac{\text{kg}}{\text{s}}}\right)^2 + \left(\frac{0.0002 \text{ m}^2}{0.0113 \text{ m}^2}\right)^2} = 0.00078 \text{ kg/m}^2\text{s}$$

$$\Delta = 0.05357 \text{ kg/m}^2\text{s} \sqrt{\left(\frac{0.00078 \frac{\text{kg}}{\text{m}^2\text{s}}}{0.04411 \frac{\text{kg}}{\text{m}^2\text{s}}}\right)^2 + \left(\frac{0.007 \text{ g/galón}}{8.50 \text{ g/galón}}\right)^2 + \left(\frac{0.007 \text{ g/galón}}{7.00 \text{ g/galón}}\right)^2} = 0.00094 \text{ kg/m}^2\text{s}$$

$$\Delta = 0.8191 \text{ kg/m}^2\text{s} \sqrt{\left(\frac{0.00094 \frac{\text{kg}}{\text{m}^2\text{s}}}{0.05357 \frac{\text{kg}}{\text{m}^2\text{s}}}\right)^2 + \left(\frac{0.00005 \text{ m}}{0.0654 \text{ m}}\right)^2} = 0.0144 \text{ kg/m}^2\text{s}$$

Nota: El cálculo se realizó utilizando la ecuación (22). Los datos utilizados fueron el coeficiente de transferencia de masa obtenido con el Cálculo 7 y las incertidumbres presentadas en el Cuadro 51 en el área de Datos originales.

F. Imágenes de productos obtenidos de la reacción de sulfonación y entrecruzamiento de poliestireno.

Figura 41. Muestra de producto de reacción de sulfonación y entrecruzamiento con variables 20% (v/m) óleum y 1 hora de reacción.



Fuente: Elaboración propia

Imagen tomada en el Laboratorio de Operaciones Unitarias de la Universidad del Valle

Figura 42. Muestra de producto de reacción de sulfonación y entrecruzamiento con variables 30% (v/m) óleum y 1 hora de reacción.



Fuente: Elaboración propia

Imagen tomada en el Laboratorio de Operaciones Unitarias de la Universidad del Valle

Figura 43. Muestra de producto de reacción de sulfonación y entrecruzamiento con variables 40% (v/m) óleum y 1 hora de reacción.



Fuente: Elaboración propia
Imagen tomada en el Laboratorio de Operaciones Unitarias de la Universidad del Valle

Figura 44. Muestra de producto de reacción de sulfonación y entrecruzamiento con variables 20% (v/m) óleum y 2 horas de reacción.



Fuente: Elaboración propia
Imagen tomada en el Laboratorio de Operaciones Unitarias de la Universidad del Valle

Figura 45. Muestra de producto de reacción de sulfonación y entrecruzamiento con variables 30% (v/m) óleum y 2 horas de reacción.



Fuente: Elaboración propia
Imagen tomada en el Laboratorio de Operaciones Unitarias de la Universidad del Valle

Figura 46. Muestra de producto de reacción de sulfonación y entrecruzamiento con variables 40% (v/m) óleum y 2 horas de reacción.



Fuente: Elaboración propia
Imagen tomada en el Laboratorio de Operaciones Unitarias de la Universidad del Valle

Figura 47. Muestra de producto de reacción de sulfonación y entrecruzamiento con variables 20% (v/m) óleum y 3 horas de reacción.



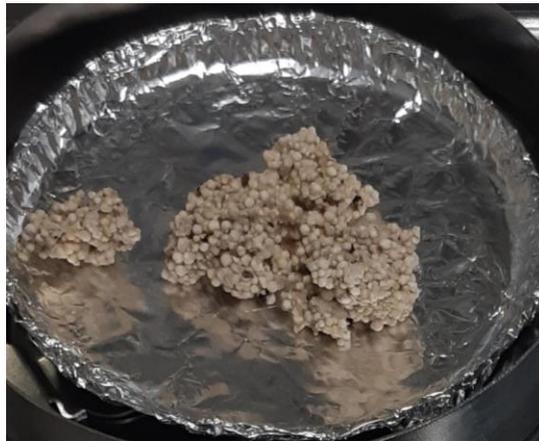
Fuente: Elaboración propia
Imagen tomada en el Laboratorio de Operaciones Unitarias de la Universidad del Valle

Figura 48. Muestra de producto de reacción de sulfonación y entrecruzamiento con variables 30% (v/m) óleum y 3 horas de reacción.



Fuente: Elaboración propia
Imagen tomada en el Laboratorio de Operaciones Unitarias de la Universidad del Valle

Figura 49. Muestra de producto de reacción de sulfonación y entrecruzamiento con variables 40% (v/m) óleum y 3 horas de reacción.



Fuente: Elaboración propia
Imagen tomada en el Laboratorio de Operaciones Unitarias de la Universidad del Valle

Figura 50. Muestra de producto de reacción de sulfonación y entrecruzamiento con variables 50% (v/m) óleum y 1 hora de reacción.



Fuente: Elaboración propia
Imagen tomada en el Laboratorio de Operaciones Unitarias de la Universidad del Valle

Figura 51. Muestra de producto de reacción de sulfonación y entrecruzamiento con variables 50% (v/m) óleum y 2 horas de reacción.



Fuente: Elaboración propia
Imagen tomada en el Laboratorio de Operaciones Unitarias de la Universidad del Valle

Figura 52. Muestra de producto de reacción de sulfonación y entrecruzamiento con variables 50% (v/m) óleum y 3 horas de reacción.



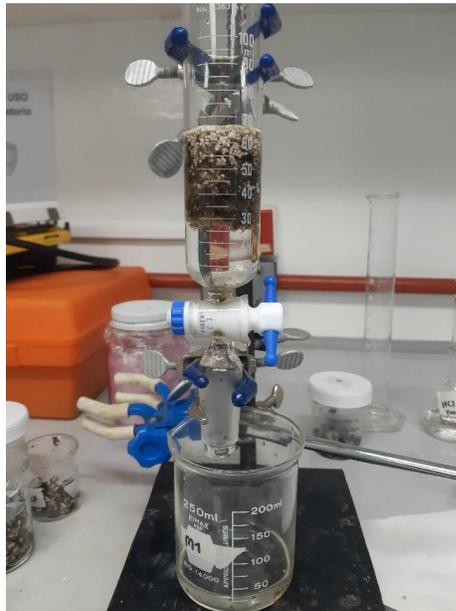
Fuente: Elaboración propia
Imagen tomada en el Laboratorio de Operaciones Unitarias de la Universidad del Valle

Figura 51. Pretratamiento de desexpansión de poliestireno de desecho con acetona.



Fuente: Elaboración propia
Imagen tomada en el Laboratorio de Operaciones Unitarias de la Universidad del Valle

Figura 53. Columna de cromatografía con producto de reacción de sulfonación y entrecruzamiento con óleum de poliestireno para prueba de intercambio iónico.



Fuente: Elaboración propia

Imagen tomada en el Laboratorio de Operaciones Unitarias de la Universidad del Valle

Nota: Se utilizó una columna de cromatografía para simular una torre de adsorción de lecho fijo.

Figura 54. Columna de cromatografía con producto de reacción de sulfonación y entrecruzamiento con óleum de poliestireno en proceso de intercambio iónico.



Fuente: Elaboración propia

Imagen tomada en el Laboratorio de Operaciones Unitarias de la Universidad del Valle

Figura 55. Columna de cromatografía con producto de reacción de sulfonación y entrecruzamiento con óleum de poliestireno luego de intercambio iónico.



Fuente: Elaboración propia
Imagen tomada en el Laboratorio de Operaciones Unitarias de la Universidad del Valle

G. Hoja de especificación de óleum

Sección 1: Identificación de sustancia y empresa

1.1 Identificador del producto

Artículo número	100720
Denominación	Ácido Sulfúrico fumante 65% SO ₃ EMPLURA
Marca	Merck Millipore
No. CAS	8014-95-7

1.2 Usos pertinentes identificados de la sustancia

Usos identificados	Material para uso en aplicaciones técnicas
--------------------	--

1.3 Datos del proveedor

Compañía	Merck KGaA Frankfurter Str. 250 D-64271 DARMSTADT
Departamento responsable	LS-QHC * e-mail: prodsafe@merckgroup.com

Sección 2: Identificación de peligros

2.1 Clasificación de la sustancia

Clasificación (REGLAMENTO (CE) No 1272/2008)

Corrosivos para los metales	Categoría 1, H290
Corrosiones cutáneas	Categoría 1A, H314
Toxicidad específica en determinados órganos - exposición única	Categoría 3, Sistema respiratorio, H335

2.2 Elementos de la etiqueta

Pictogramas de peligro	
Palabras de advertencia	Peligro
Indicaciones de peligro	H290 Puede ser corrosivo para los metales. H314 Provoca quemaduras graves en la piel y lesiones oculares graves. H335 Puede irritar las vías respiratorias. EUH014 Reacciona violentamente con el agua
Consejos de prudencia	Prevención P280 Llevar guantes/ prendas/ gafas/ máscara de protección. Intervención P301 + P330 + P331 EN CASO DE INGESTIÓN: Enjuagar la boca. NO provocar el vómito. P305 + P351 + P338 EN CASO DE CONTACTO CON LOS OJOS: Enjuagar con agua

cuidadosamente durante varios minutos. Quitar las lentes de contacto cuando estén presentes y pueda hacerse con facilidad. Proseguir con el lavado.
P308 + P310 EN CASO DE exposición manifiesta o presunta: Llamar inmediatamente a un CENTRO DE TOXICOLOGÍA o a un médico.

Sección 3: Composición/información sobre los componentes

3.1 Sustancia

No aplicable

3.2 Mezcla

Fórmula	H ₂ SO ₄ *SO ₃ (1:2) H ₂ O ₄ S*SO ₃ (1:2) (Hill)
No. Índice	016-019-00-2
No. EC	231-976-8
Masa molar	258.20 g/mol

Trióxido de Azufre	
No. CAS	7446-11-9
No. EC	231-197-3
Concentración	>=50 - <70%

Ácido Sulfúrico	
No. CAS	7664-93-9
No. EC	231-639-5
Concentración	>=30 - <50%

Sección 4: Primeros Auxilios

4.1 Descripción de primeros auxilios

Recomendaciones generales	El socorrista necesita protegerse a sí mismo.
Tras inhalación	Aire fresco. Llamar al médico
En caso de contacto con la piel	Quitar inmediatamente todas las prendas contaminadas. Aclararse la piel con agua/ ducharse. Llame inmediatamente al médico.
Tras contacto con los ojos	Aclarar con abundante agua. Llamar inmediatamente al oftalmólogo. Retirar las lentillas.
Tras ingestión	Hacer beber agua (máximo 2 vasos), evitar el vómito (¡peligro de perforación!). Llame inmediatamente al médico. No proceder a pruebas de neutralización.

4.2 Principales síntomas y efectos, agudos y retardados

Irritación y corrosión, Tos, Insuficiencia respiratoria. Riesgo de ceguera

Sección 5: Propiedades físicas y químicas básicas

Forma	Líquido
Color	Incoloro a marrón
Olor	Picante
pH	<1 a 100g/l 20°C
Punto de fusión	Aprox. 1°C
Punto de ebullición	64°C A 1.013 hPa
Presión de vapor	105 hPa A 20°C
Densidad relativa del vapor	2.76
Densidad	1.99 g/cm ³ A 20°C
Solubilidad	A 20°C soluble (Desprendimiento de calor)
Viscosidad dinámica	21.6 mPa.s
Propiedades explosivas	No clasificado como explosivo
Propiedades comburentes	Potencial comburente
Corrosivo	Puede ser corrosivo para metales

Sección 6: Estabilidad y reactividad

Reactividad	Corrosivo
Estabilidad química	Sensible a la humedad
Peligro de ignición o formación de gases o vapores combustibles	Sustancias inflamables, solvente orgánico
Riesgo de explosión/reacción exotérmica	Agua, metales alcalinos, óxidos alcalinos, amoniaco, cloratos, metales alcalinotérreos, óxidos metálicos, sustancias orgánicas, permanganatos, bases
Condiciones que deben evitarse	Humedad
Materiales incompatibles	Tejido de plantas/animales Metales