



Quilemol S.A.

Projecte Final de Carrera
**PLANTA DE PRODUCCIÓ
DE CARBARIL**

**Marc Camps Rafé
Carlos León Galzas
Raquel Morera Barragán
Javier Reina Grimaldos
James Steele Cater**

UAB

Universitat Autònoma
de Barcelona

GRUP 9

Tutora: M^{re} Eugènia Suárez Ojeda

12. Propietats i dades de disseny

12. Propietats i dades de disseny

12.1. Propietats i dades de disseny

Aquest apartat es centrarà bàsicament en mostrar, mitjançant gràfics o taules, les dades i propietats necessàries pels càlculs dels disseny d'equips .

A continuació, en primer lloc es mostra a la taula 12.1.1 les propietats bàsiques dels compostos presents en el procés. Cal esmentar, que la majoria d'aquestes propietats s'han fet servir com a una estimació inicial dels càlculs.

Taula 12.1.1. Propietats bàsiques dels compostos emprats.

Reactiu	Estat físic	PM (Kg/Kmol)	T eb (°C)	T eb (K)	Densitat (kg/m3)
Carbaril	SÒLID	201,2	Es descomposa abans de bullir		1200
MIC	GAS	57,2	39,5	312,5	923
MMA	LÍQUID	31,07	-6,1	266,9	699
	GAS				0,66
AN	SÒLID	144,17	288	561	1100
CCI₄	LÍQUID	153,82	76,54	349,54	1595
HCl	GAS	36,5	-85	188	1,49
	LÍQUID		-25,4	247,6	
Fosgè	GAS	98,9	8,3	281,3	2,3
	LÍQUID				1432
MCC	LÍQUID	93,51	92	92	1186?
Cloroform	LÍQUID	119,38	61,2	334,2	1483
Toluè	LÍQUID	92,13	111	384	866,9

Les propietats emprades per a un disseny més exhaustiu són obtingudes pel simulador Aspen Hysys. Aquestes es mostren a la taula 12.1.2.

12. Propietats i dades de disseny

Taula 12.1.2. Propietats dels reactius i productes obtingudes pel simulador Aspen Hysys (I).

Equip	Corrent	Component	Cabal Volumètric (m ³ /h)	Densitat (kg/m ³)	viscositat (cP)	Entalpia molar (KJ/Kmol)	Calor específica (KJ/Kmol·C)	T (°C)
R-301	S1	MCC	1,095	1,576	1,86E-02	-1,18E+05	71,17	260
	E1	PH	0,675	2,534	1,87E-02	-2,10E+05	67,54	205
	E2	MMA	0,3509	644,5	0,1778	-4,64E+04	105,1	240
TA - 301	E1	CLH	7,854	1520	0,6453	-1,35E+05	107,4	5
	E2	S1 R301	1,194	2,79E-02	1,55E-02	-1,36E+05	69,61	166
	S1 (Caps)	HCl	0,378	2,022	1,27E-02	-9,42E+04	34,21	11,29
	S2 (Cues)	TA outlet	-	-	-	-	-	-
TD-301	E1	inlet td301	8,78	1407	0,4459	-1,39E+07	111,7	45
	S1 (Caps)	top td301	0,1532	3,84	1,09E-02	-1,98E+05	51,21	2,897
	S2 (Cues)	b td301	8,624	1373	0,3897	-1,36E+05	113,8	62,98
TD-302	E1	PH + HCl	0,1532	1369	0,4882	-2,21E+05	93,96	0
	S1 (Caps)	HCl	1,84E-02	47,62	1,36E-02	-9,29E+04	29,56	6,836
	S2 (Cues)	PH	0,1348	982,6	0,2457	-2,32E+05	143,4	142,7
TD-303	E1	HCl	0,3804	106,5	0,1612	-1,09E+05	84,61	9,5
	S1 (Caps)	HCl	0,2974	48,48	1,56E-02	-9,29E+04	37,64	47,68
	S2 (Cues)	CLH	8,29E-02	956,4	0,1341	-1,09E+05	165,3	221
R-401	E1	-	8,708	1312	0,3218	-1,33E+05	117,9	90
	S1	-	8,8	1271	0,2928	-1,23E+05	111,5	90
TD-401	E1	S1 R401	8,799	1403	0,4624	-1,29E+05	108,8	30
	S1 (Caps)	td xtra HCl	0,3159	48,45	1,56E-02	-9,29E+04	37,63	47,77
	S2 (Cues)	td xtra	8,483	933,7	0,138	-1,08E+05	156,2	216,8

12. Propietats i dades de disseny

Taula 12.1.2. Propietats dels reactius i productes obtingudes pel simulador Aspen Hysys (II).

Equip	Corrent	Component	Cabal Volumètric (m ³ /h)	Densitat (kg/m ³)	viscositat (cP)	Entalpia molar (KJ/Kmol)	Calor específica (KJ/Kmol·C)	T (°C)
TD-402	E1	inlet td402	8,483	1361	0,3945	-1,28E+05	111,8	57
	S1 (Caps)	-	0,4418	763,1	0,2857	-8,93E+04	100,5	38,81
	S2 (Cues)	-	8,042	1393	0,3942	-1,31E+05	113	61,44
TD-501	E1	S1 R3501	7,053	858,7	0,5964	-4,78E+04	183,1	75
	S1 (Caps)	MIC rec R3	4,18E-02	762,4	0,2856	-8,92E+04	100,5	38,81
	S2 (Cues)	Producte c	7,011	817,5	0,3782	-3,95E+04	200,7	116,2
R-501	E1	-	7,772	807,4	0,3715	-3,00E+04	181,3	80
	E2	T + AN	7,259	852,5	0,5475	-4,27E+04	184,1	80
	S1	-	7,053	864,7	0,8313	-3,83E+04	170,5	25
	-	MCC + CLH	8,629	1379	0,3985	-1,36E+05	113,4	60
CRIST	E1	S2 TD501	7,232	867,8	0,666	-4,52E+04	178,7	65
	S1	-	-	-	-	-	-	-

12. Propietats i dades de disseny

- Propietats necessàries pel Reactor R-501:

Taula 12.1.3.- Propietats del catalitzador Amberlist-21

PROPERTIES	
Physical form _____	Opaque spherical beads
Ionic form as shipped _____	Free Base (FB)
Concentration of active sites _____	≥ 1.30 eq/L ^[1]
	≥ 4.6 eq/kg
Moisture holding capacity ^[1] _____	56 to 62 % (FB form)
Shipping weight _____	660 g/L (41.2 lbs/ft ³)
Particle size	
Harmonic mean size _____	0.490 - 0.690 mm
Uniformity coefficient _____	≤ 1.80
Fines content ^[1] _____	< 0.300 mm : 1.0 % max
Coarse beads _____	> 1.180 mm : 2.0 % max
Nitrogen BET	
Surface area _____	35 m ² /g
Average pore diameter _____	110 Å
Total pore volume _____	0.10 cc/g
Swelling _____	Water to phenol : 77 %

^[1] Contractual value

Taula 12.1.3.- Propietats químiques del catalitzador Amberlist-21

SUGGESTED OPERATING CONDITIONS (Chemical Processing)

pH range _____	0 to 14		
Maximum operating temperature _____	100°C (210°F)		
Minimum bed depth _____	600 mm (24 inches)		
Service flow rate _____	8 to 40 BV/h (1 to 5 gpm/ft ³)		
Regenerants _____	NaOH	NH₄OH	Na₂CO₃
Flow rate (BV/h) _____	4 to 8	4 to 8	4 to 8
Flow rate (gpm/ft ³) _____	0.5 to 1.0	0.5 to 1.0	0.5 to 1.0
Concentration (%) _____	2 to 4	2 to 4	4 to 8
Level _____	120 % of ionic load		
Minimum contact time _____	30 minutes		
Slow rinse _____	2 BV (15 gal/ft ³) at regeneration flow rate		
Fast rinse _____	2 to 4 BV (15 to 30 gal/ft ³) at service flow rate		

12. Propietats i dades de disseny

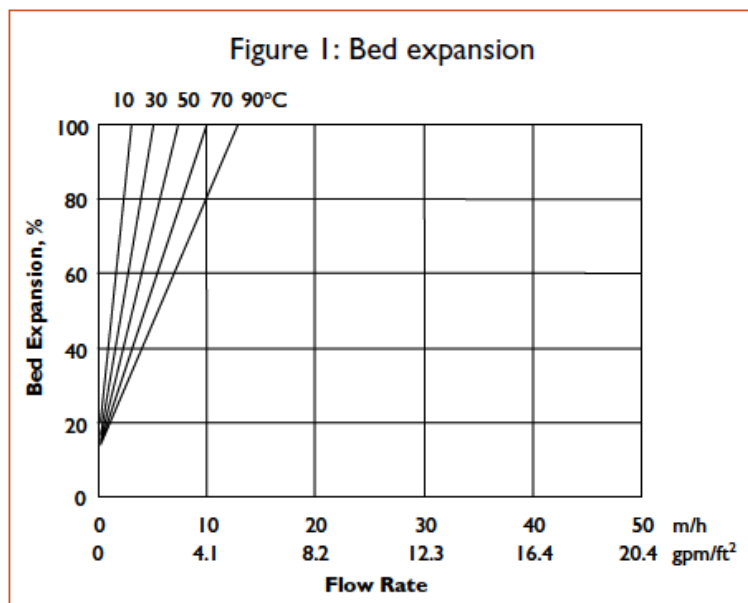


Figura 12.1.1.- Característiques hidràuliques del catalitzador Amberlist-21

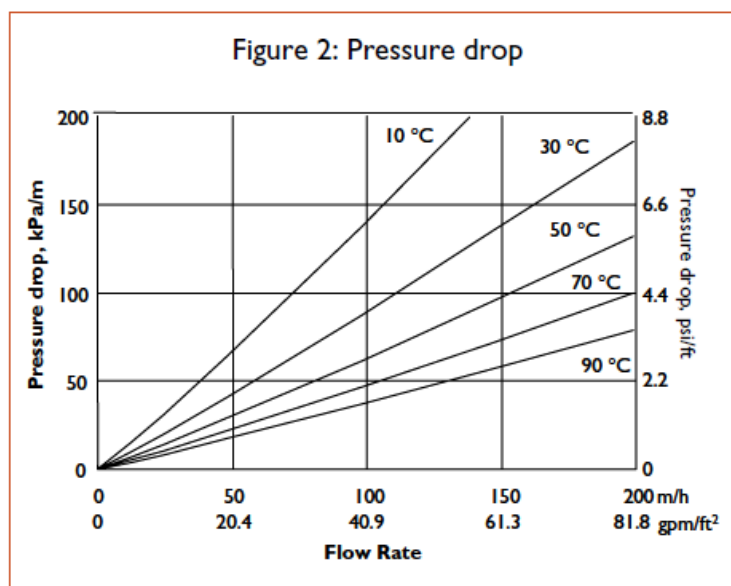


Figura 12.2.- Característiques hidràuliques del catalitzador Amberlist-21

12. Propietats i dades de disseny

Taula 12.1.5.- Propietats físiques de l'acer AISI 316L

Density, lbs./in. ³ (g/cm ³)	0.29 (7.99)
Electrical Resistivity, $\mu\Omega\cdot\text{in.}$ ($\mu\Omega\cdot\text{cm}$) 68 °F (20 °C)	29.4 (74)
Thermal Conductivity, BTU/hr.ft./°F (W/m/K)	
212 °F (100 °C)	9.4 (16.2)
932 °F (500 °C)	12.4 (21.4)
Mean Coefficient of Thermal Expansion, in./in./°F ($\mu\text{m/m/K}$)	
32 – 212 °F (0 – 100 °C)	8.9×10^{-6} (16.0)
32 – 600 °F (0 – 315 °C)	9.0×10^{-6} (16.2)
32 – 1000 °F (0 – 538 °C)	9.7×10^{-6} (17.5)
32 – 1200 °F (0 – 649 °C)	10.3×10^{-6} (18.5)
Modulus of Elasticity, ksi. (MPa)	
in tension	28.0×10^3 (193×10^3)
in torsion	11.2×10^3 (77×10^3)
Magnetic Permeability Annealed, (H/m at 200 Oersteds)	1.02 max.
Specific Heat, BTU/lbs./°F (kJ/kg/K) 32 – 212 °F (0 – 100 °C)	0.12 (0.50)
Melting Range, °F (°C)	2500 – 2550 (1371 – 1399)

Taula 12.1.6.- Composició química en % pes de l'acer AISI 316L

COMPOSITION	TYPE 316L (wt %)
Carbon	0.03 max
Manganese	2.00 max.
Phosphorus	0.045 max.
Sulfur	0.03 max.
Silicon	0.75 max.
Chromium	16.00 – 18.00
Nickel	10.00 – 14.00
Molybdenum	2.00 – 3.00
Nitrogen	0.10 max.
Iron	Balance

12. Propietats i dades de disseny

Taula 12.1.5.- Propietats físiques de l'acer AISI 304L a 100°C

Densitat (Kg/m³)	7,90
Calor específica (J/Kg-K)	500
Conductivitat Tèrmica (W/m-K)	16.3

Taula 12.1.6.- Límits elàstics dels acers en funció de la T (°F) (304-304L,316-316L)

Specification		Maximum Allowable Stress, ksi (Multiply by 1000 to Obtain psi), for Metal Temp., °F, Not Exceeding												
Number	Grade	-20 to 100	200	300	400	500	600	650	700	750	800	850	900	950
SA-240	304	18,8	17,8	16,6	16,2	15,9	15,9	15,9	15,9	15,5	15,2	14,9	14,7	14,4
SA-240	304L	15,7	15,7	15,3	14,7	14,4	14	13,7	13,5	13,3	13	—	—	—
SA-240	316	18,8	18,8	18,4	18,1	18,0	17,0	16,7	16,3	16,1	15,9	15,7	15,5	15,4
SA-240	316L	15,7	15,7	15,7	15,5	14,4	13,5	13,2	12,9	12,6	12,4	12,1	—	—

A continuació, es mostren les propietats dels fluids de procés emprats.

Taula 12.1.7.- Propietats generals del fluid refrigerant paratherm CR.

Product Name	Paratherm CR
Chemical Name	Synthetic Hydrocarbon Blend
Appearance	Water White Liquid
Odor	Sweet Odor
Maximum Recommended Film Temperature	550°F/288°C
Maximum Recommended Operating Temperature	425°F/218°C
Minimum Operating Temperature 20 cPs (20 mPa-s)	-127°F/-88°C
Minimum Start-up Temperature 300 cPs (300 mPa-s)	-170°F/-112°C
Viscosity cSt:	
40°C (104°F)	0.81
100°C (212°F)	0.53
218°C (425°F)	0.38
Density at 60°F/15.5°C lb/gal (kg/m ³)	6.9 (833)
Flash Point Closed Cup (D56)	>102°F/39°C
Autoignition Temperature (maximum 10 sec ignition delay)	>430°F/221°C
Freeze Point	<-166°F/<-110°C
Boiling Point (14.7 psia/101 kPa)	358°F/181°C
Vapor Pressure @ maximum operating temperature psia (kPa)	21 (148)
% Volume expansion over recommended operating temperature per 100°F (°C)	8.7 (15.7)
Average Molecular Weight	130
Dielectric Breakdown voltage D1816-04 (kV, 0.1" gap)	36.11
Dielectric Constant (1 KHz) D924-04	2.59
Dissipation Factor (1 KHz) D924-04	0.00145
Volume Resistivity at 100V (Ω-cm) D257-07	8.3X10 ¹¹
Heat of Combustion (approximate) BTU/lb (kJ/kg)	17,000 (39,400)
Heat of Vaporization (approximate) BTU/lb (kJ/kg)	148 (343)

* These are typical laboratory values, and are not guaranteed for all samples

12. Propietats i dades de disseny

Taula 12.1.8.- Propietats físico-químiques del fluid refrigerant paratherm CR.

°C	°F	Density			Viscosity		Specific Heat cal/(g·°C)	Thermal Conductivity W/(m·K)	Vapor Pressure	
		g/ml	lb/gal	kg/m ³	cSt mm ² /s	cP mPa·s			mm Hg	kPa
-120	-184	0.9682	8.09	969			0.334	0.1508		
-115	-175	0.9631	8.05	964			0.339	0.1504		
-110	-166	0.9581	8.00	959			0.343	0.1500		
-105	-157	0.9531	7.96	954			0.348	0.1496		
-100	-148	0.9480	7.92	949	36.7	34.8	0.352	0.1492		
-95	-139	0.9430	7.88	944			0.357	0.1488		
-90	-130	0.9380	7.84	939			0.361	0.1484		
-85	-121	0.9329	7.79	934			0.366	0.1480		
-80	-112	0.9279	7.75	929			0.370	0.1476		
-75	-103	0.9229	7.71	924	5.73	5.29	0.374	0.1472		
-70	94	0.9178	7.67	919			0.379	0.1468		
-65	-85	0.9128	7.63	914			0.383	0.1464		
-60	-76	0.9078	7.58	909			0.388	0.1460		
-55	-67	0.9027	7.54	904			0.392	0.1457		
-50	-58	0.8977	7.50	899	3.01	2.70	0.397	0.1453		
-45	-49	0.8927	7.46	894			0.401	0.1449		
-40	-40	0.8876	7.42	889			0.405	0.1445		
-35	-31	0.8826	7.37	884			0.410	0.1441		
-30	-22	0.8776	7.33	879			0.414	0.1437		
-25	-13	0.8725	7.29	873	2.02	1.76	0.419	0.1433		
-20	-4	0.8675	7.25	868			0.423	0.1429		
-15	5	0.8625	7.21	863			0.428	0.1425		
-10	14	0.8574	7.16	858			0.432	0.1421		
-5	23	0.8524	7.12	853			0.437	0.1418		
0	32	0.8474	7.08	848	1.18	1.00	0.441	0.1414	1.40	0.19
5	41	0.8423	7.04	843			0.445	0.1411		
10	50	0.8373	7.00	838			0.450	0.1407		
15	59	0.8323	6.95	833			0.454	0.1404		
20	68	0.8272	6.91	828			0.459	0.1400		
25	77	0.8222	6.87	823			0.463	0.1396	6.55	0.87
30	86	0.8171	6.83	818			0.468	0.1393		
35	95	0.8121	6.78	813			0.472	0.1389		
40	104	0.8071	6.74	808			0.477	0.1386		
45	113	0.8020	6.70	803			0.481	0.1382		
50	122	0.7970	6.66	798			0.485	0.1379	20.1	2.68
55	131	0.7920	6.62	793			0.490	0.1375		
60	140	0.7869	6.57	788			0.494	0.1371		
65	149	0.7819	6.53	783			0.499	0.1368		
70	158	0.7769	6.49	778			0.503	0.1364		
75	167	0.7718	6.45	773			0.508	0.1361	52.0	6.94
80	176	0.7668	6.41	768			0.512	0.1357		
85	185	0.7618	6.36	763			0.516	0.1354		
90	194	0.7567	6.32	758			0.521	0.1350		
95	203	0.7517	6.28	753			0.525	0.1346		
100	212	0.7467	6.24	747			0.530	0.1342	118	15.7
105	221	0.7416	6.20	742			0.534	0.1338		
110	230	0.7366	6.15	737			0.539	0.1334		
115	239	0.7316	6.11	732			0.543	0.1329		
120	248	0.7265	6.07	727			0.548	0.1325		
125	257	0.7215	6.03	722			0.552	0.1321	244	32.5
130	266	0.7165	5.99	717			0.556	0.1317		
135	275	0.7114	5.94	712			0.561	0.1313		
140	284	0.7064	5.90	707			0.565	0.1308		
145	293	0.7014	5.86	702			0.570	0.1304		
150	302	0.6963	5.82	697			0.574	0.1300	465	62.0
155	311	0.6913	5.78	692			0.579	0.1296		
160	320	0.6863	5.73	687			0.583	0.1291		
165	329	0.6812	5.69	682			0.587	0.1287		
170	338	0.6762	5.65	677			0.592	0.1283		
175	347	0.6711	5.61	672			0.596	0.1279	725	96.7
180	356	0.6661	5.57	667			0.601	0.1275		
185	365	0.6611	5.52	662			0.605	0.1270		
190	374	0.6560	5.48	657			0.610	0.1266		
195	383	0.6510	5.44	652			0.614	0.1262		
200	392	0.6460	5.40	647			0.619	0.1258	900	120

12. Propietats i dades de disseny

Taula 12.1.9.- Propietats de l'oli tèrmic paratherm HR.

Chemical Name	Alkylated Aromatic
Appearance	Colorless
Odor	Slight Odor
Maximum Recommended Film Temperature	700°F/371°C
Maximum Recommended Operating Temperature - Fired Heaters	650°F/343°C
Maximum Recommended Operating Temperature - All Others	675°F/357°C
Minimum Operating Temperature 20 cPs (20 mPa-s)	78°F/26°C
Minimum Start-up Temperature 300 cPs (300 mPa-s)	11°F/ -12°C
Viscosity cSt:	
40°C (104°F)	11
100°C (212°F)	2.4
343°C (650°F)	0.36
Density at 60°F/15.5°C lb/gal (kg/m ³)	8 (964)
Flash Point Pensky-Martens Closed Cup (D93)	>300°F/149°C
Autoignition Temperature (Maximum 10 second ignition delay)	>780°F/416°C
Boiling Point (14.7 psia/101 kPa)	638°F/337°C
Vapor Pressure @ Maximum operating temp psia (kPa)	28.8/195
% Volume expansion over recommended operating temperature per 100°F (°C)	5.5 (9.9)
Average Molecular Weight	240

** These are typical laboratory values, and are not guaranteed for all samples*

Taula 12.1.10.- Propietats físico-químiques de l'oli tèrmic paratherm HR.

Temperature	Temperature	Viscosity	Viscosity	Viscosity	Density	Density	Density	Thermal Conductivity	Specific Heat	Vapor Pressure	Vapor Pressure
°F	°C	cPs	cSt	lb/ft-hr	g/cc	lb/gal	lb/ft ³	BTU/hr-ft-°F	BTU/lb-°F	mmhg	psia
0	-18	544	549	1316	0.99	8.3	62	0.068	0.44		
25	-4	134	136	323	0.98	8.2	61	0.068	0.45		
50	10	50	52	122	0.97	8.1	61	0.068	0.46		
75	24	21	22	52	0.96	8.0	60	0.068	0.46		
100	38	12	12	28	0.95	7.9	59	0.068	0.47		
125	52	7.1	7.5	17	0.94	7.8	59	0.068	0.48		
150	66	4.7	5.1	11	0.93	7.8	58	0.067	0.49		
175	79	3.3	3.6	8.1	0.92	7.7	57	0.067	0.49		
200	93	2.5	2.7	6.0	0.91	7.6	57	0.066	0.50		
225	107	1.9	2.1	4.6	0.90	7.5	56	0.066	0.51		
250	121	1.5	1.7	3.8	0.89	7.4	56	0.065	0.52		
275	135	1.3	1.5	3.1	0.88	7.3	55	0.065	0.52		
300	149	1.1	1.3	2.7	0.87	7.3	54	0.064	0.53		
325	163	0.95	1.1	2.3	0.86	7.2	54	0.064	0.54		
350	177	0.82	0.96	2.0	0.85	7.1	53	0.063	0.55		
375	191	0.72	0.86	1.7	0.84	7.0	52	0.062	0.55		
400	204	0.64	0.77	1.5	0.83	6.9	52	0.061	0.56	25	0.5
425	218	0.57	0.69	1.4	0.82	6.8	51	0.060	0.57	39	0.8
450	232	0.51	0.63	1.2	0.81	6.8	51	0.059	0.58	59	1.1
475	246	0.46	0.57	1.1	0.80	6.7	50	0.059	0.58	88	1.7
500	260	0.42	0.53	1.00	0.79	6.6	49	0.057	0.59	128	2.5
525	274	0.38	0.49	0.92	0.78	6.5	49	0.056	0.60	182	3.5
550	288	0.35	0.46	0.85	0.77	6.4	48	0.055	0.61	256	5.0
575	302	0.32	0.42	0.77	0.76	6.3	47	0.054	0.61	354	6.8
600	316	0.30	0.40	0.73	0.75	6.3	47	0.053	0.62	483	9.3
625	329	0.28	0.38	0.68	0.74	6.2	46	0.052	0.63	651	12.6
650	343	0.26	0.36	0.63	0.73	6.1	46	0.050	0.64	867	16.8
675	357	0.24	0.33	0.58	0.72	6.0	45	0.049	0.64	1142	22.1
700	371	0.22	0.31	0.53	0.71	5.9	44	0.047	0.65	1489	28.8

12. Propietats i dades de disseny

Pel càlcul de les propietats crítiques de la temperatura, la pressió i el volum es fa ús del mètode de Lydersen.

El mètode de Lydersen serveix per saber les propietats crítiques, així com la temperatura (T_c), la pressió (P_c) i el volum (V_c), dels components en funció del grup funcional que hi estan presents en ell.

Group	$G_i (T_c)$	$G_i (P_c)$	$G_i (V_c)$	Group	$G_i (T_c)$	$G_i (P_c)$	$G_i (V_c)$
-CH ₃ , -CH ₂ -	0.020	0.227	55.0	>CH	0.012	0.210	51.0
-C<	-	0.210	41.0	=CH ₂ , #CH	0.018	0.198	45.0
=C<, =C=	-	0.198	36.0	=C-H, #C-	0.005	0.153	36.0
-CH ₂ -(Ring)	0.013	0.184	44.5	>CH-(Ring)	0.012	0.192	46.0
>C<-(Ring)	-0.007	0.154	31.0	=CH-, =C<, =C=(Ring)	0.011	0.154	37.0
-F	0.018	0.224	18.0	-Cl	0.017	0.320	49.0
-Br	0.010	0.500	70.0	-I	0.012	0.830	95.0
-OH	0.082	0.060	18.0	-OH(Aromat)	0.031	-0.020	3.0
-O-	0.021	0.160	20.0	-O-(Ring)	0.014	0.120	8.0
>C=O	0.040	0.290	60.0	>C=O(Ring)	0.033	0.200	50.0
HC=O-	0.048	0.330	73.0	-COOH	0.085	0.400	80.0
-COO-	0.047	0.470	80.0	-NH ₂	0.031	0.095	28.0
>NH	0.031	0.135	37.0	>NH(Ring)	0.024	0.090	27.0
>N	0.014	0.170	42.0	>N-(Ring)	0.007	0.130	32.0
-CN	0.060	0.360	80.0	-NO ₂	0.055	0.420	78.0
-SH, -S-	0.015	0.270	55.0	-S-(Ring)	0.008	0.240	45.0
=S	0.003	0.240	47.0	>Si<	0.030	0.540	-
-B<	0.030	-	-				

Taula 12.2.10. Propietats crítiques segons el grup funcional i radical

A continuació, es mostren la dels compostos calculats mitjançant el mètode de Lydersen.

Taula 12.2.11. Propietats crítiques dels components MCC, AN i Carbaril

Component	T_c (°C)	P_c (atm)	V_c (cm ³)
MCC	277,48	55,03	241
AN	542,48	42,21	413
Carbaril	469,88	28,98	570