

ReactEVA “Síntesis verde, soluciones con ReactEVA”

Iker Sebastián Ramírez-Ledón¹, Diego Cervera-Pérez¹, Michel Ramses Camacho-Rosas¹

¹Universidad La Salle México, Facultad de Ciencias Químicas. Ciudad de México, México.
Iker.ramirez@lasallistas.org.mx, dcervera@lasallistas.org.mx,
mr.camacho@lasallistas.org.mx

Resumen. El proyecto propone un proceso de producción de acetato de etileno y vinilo (EVA), centrándose en el diseño del reactor. Se estudiaron reactores de tanque agitado continuo, examinando sistemas homogéneos en fase líquida o gaseosa. Se concluyó que un procedimiento en fase líquida es mejor por el uso de menos equipo, así como menor costo.

Palabras Clave: Producción de EVA, diseño de reactor, reactor CSTR.

1 Descripción de la problemática prioritaria abordada

El proyecto se centra en la producción de acetato de etileno y vinilo (EVA), un material termoplástico de gran versatilidad utilizado en diversas industrias como la del calzado, adhesivos, dispositivos médicos y películas plásticas. La importancia de esta problemática radica en la necesidad de encontrar métodos de producción que no solo sean económicamente viables, sino también sostenibles y ambientalmente responsables. La producción actual de EVA presenta varios desafíos, entre los que destacan el alto consumo de recursos y energía, así como la gestión adecuada de los residuos generados.

Actualmente, la producción de EVA se realiza mediante varios métodos que implican el uso de reactores químicos. En particular, los reactores de tanque agitado continuo (CSTR) y los reactores de flujo pistón (PFR) son los más utilizados. Sin embargo, estos métodos pueden ser costosos y no siempre eficientes en términos de maximización de la producción y minimización del impacto ambiental.

El diseño de un proceso de producción eficiente y sostenible para el EVA es crucial para reducir la dependencia de métodos tradicionales que son menos amigables con el medio ambiente. Este enfoque podría ayudar a posicionar mejor a los productores en el mercado global, al ofrecer un producto de alta calidad y bajo costo, que cumple con los estándares de sostenibilidad exigidos por los consumidores actuales.

La importancia de abordar esta problemática desde un enfoque integral, que considere tanto los aspectos económicos como los ambientales, es fundamental para avanzar hacia una industria más innovadora y sostenible. La implementación de mejores prácticas en la producción de EVA no solo tiene el potencial de generar beneficios económicos significativos, sino también de contribuir de manera positiva al medio ambiente, promoviendo un uso más eficiente de los recursos y una reducción en la generación de residuos.

2 Objetivo

Proponer y analizar la producción de EVA en reactores de tanque agitado (CSTR), evaluando distintas operativas y los métodos de separación más eficientes.

3 Propuesta teórico-metodológica

Para cumplir el objetivo propuesto, primero, se realizó una búsqueda exhaustiva de la literatura disponible sobre la producción de acetato de vinilo y etileno (EVA), enfocándose en los tipos de reactores, los procesos de separación y las condiciones operativas más eficientes. El análisis de esta información permitió identificar las metodologías más prometedoras para la producción de EVA.

El proyecto se basa en principios esenciales de la ingeniería química, específicamente en la cinética química y la termodinámica de los procesos de polimerización. La selección y el diseño de los reactores se fundamenta en estas teorías, utilizando ecuaciones de balance de masa y energía para modelar los sistemas de reacción. Se consideraron estudios previos que describen la eficiencia y los costos asociados con los reactores de tanque agitado continuo (CSTR). Por ejemplo, se ha demostrado que al incorporar polvo de llanta reciclado en la producción de EVA, se mejora la sostenibilidad, ya que se reutilizan residuos, lo que reduce el impacto ambiental. Además, esta adición aporta propiedades como mayor resistencia y amortiguación, beneficiosas en productos como suelas de zapatos y superficies deportivas.

Métodos y técnicas utilizadas

Selección de reactores: se estudiaron reactores CSTR, planteando sistemas tanto en fase líquida como en fase gaseosa. Se diseñaron modelos teóricos para ambos tipos de reactores para evaluar su rendimiento bajo diferentes condiciones operativas.

Diseño de equipos: se llevó a cabo el diseño detallado de los sistemas propuestos, incluyendo cálculos del espesor de pared y selección de materiales, basados en el código ASME VII, División 1.

Población objetivo

El proyecto está dirigido a la industria manufacturera, específicamente a los productores de materiales plásticos y polímeros. También es relevante para empresas del sector calzado, adhesivos, dispositivos médicos y empaques, que buscan optimizar sus procesos de producción y reducir su impacto ambiental.

Ecuaciones para el diseño del reactor CSTR con sistema en fase gaseosa

A continuación se presentan los cálculos para el diseño del reactor CSTR con sistemas en fases gaseosa y líquida. Primero, se determina la concentración total del gas utilizando la ecuación de los gases ideales a temperatura y presión estándar. Luego, se calcula la concentración inicial del componente A (C_{A0}) y la concentración en equilibrio (C_{B0}). Posteriormente, se determina el flujo molar de alimentación del gas o líquido y del componente A (F_{A0}), seguido de la conversión del flujo molar a términos de masa y toneladas por año.

Seguidamente, se calcula la fracción molar convertida de A utilizando la ecuación de conversión. Además, se estima el volumen del reactor (V) en función de los flujos de alimentación y los

tiempos de residencia necesarios. Finalmente, la velocidad de reacción ($-r_A$) se calcula mediante una ecuación cinética que incluye la conversión de X_A y un factor de equilibrio asociado.

Este enfoque asegura un diseño eficiente tanto en la fase gaseosa como en la fase líquida, permitiendo obtener resultados óptimos para la conversión y pureza del producto final.

$$\begin{aligned}
 FEVA &= 24,930 \text{ t/año} \times \frac{1000 \text{ kg}}{1 \text{ t}} \times \frac{1000 \text{ g}}{1 \text{ kg}} \times \frac{1 \text{ año}}{365 \text{ días}} \times \frac{1 \text{ día}}{24 \text{ h}} \times \frac{1 \text{ h}}{3600 \text{ s}} = 790.52 \text{ g/s} \\
 f_{EVA} &= \frac{FEVA}{PM_{EVA}} = \frac{790.52 \frac{\text{g}}{\text{s}}}{33.96 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} = 23.27 \frac{\text{mol}}{\text{s}} \\
 f_{A0} &= f_{EVA} \cdot \frac{C_{A0}}{C_{TOTAL}} = 23.27 \frac{\text{mol}}{\text{s}} \cdot \frac{0.144 \frac{\text{mol}}{\text{L}}}{1.665 \frac{\text{mol}}{\text{L}}} = 2.008 \frac{\text{mol}}{\text{s}} \\
 F_{A0} &= PM_{VA} \cdot f_{A0} = 86 \frac{\text{g}}{\text{mol}} \cdot 2.008 \frac{\text{mol}}{\text{s}} = 172.68 \frac{\text{g}}{\text{s}} = 0.1726 \frac{\text{kg}}{\text{s}} \\
 0.1726 \frac{\text{kg}}{\text{s}} &\times \frac{1 \text{ t}}{1000 \text{ kg}} \times \frac{3600 \text{ s}}{1 \text{ h}} \times \frac{24 \text{ h}}{1 \text{ día}} \times \frac{365 \text{ días}}{1 \text{ año}} = 5443.113 \text{ t/año} \\
 f_A &= \frac{f_{A0}(1 - X_A)}{1 + EA \cdot X_A} = \frac{2.008 \frac{\text{mol}}{\text{s}}(1 - 0.6)}{1 + \left(\frac{2}{3}\right)(0.6)} = 0.617 \frac{\text{mol}}{\text{s}} \\
 F_A &= f_A \cdot PM_{VA} = 0.617 \frac{\text{mol}}{\text{s}} \cdot 86 \frac{\text{g}}{\text{mol}} = 53.02 \frac{\text{g}}{\text{s}} = 0.053 \frac{\text{kg}}{\text{s}} \\
 V_0 &= \frac{V_f}{\rho_{EVA}} = \frac{0.7905 \frac{\text{kg}}{\text{s}}}{0.935 \frac{\text{kg}}{\text{L}}} = 0.845 \frac{\text{L}}{\text{s}} \\
 \tau &= \frac{V}{V_0} = \frac{4449.4 \text{ L}}{0.845 \frac{\text{L}}{\text{s}}} = 5265.56 \text{ s} \times \frac{1 \text{ min}}{60 \text{ s}} \times \frac{1 \text{ h}}{60 \text{ min}} = 1.46 \text{ h} \\
 -r_A &= \frac{KC_{A0}(1 - X_A)}{1 + EA \cdot X_A} = \frac{3.13 \times 10^{-10} \times 0.144 \times (1 - 0.6)}{1 + 0.5 \times 0.6} \\
 -r_A &= 1.38 \times 10^{-11} \frac{\text{mol}}{\text{L} \cdot \text{s}}
 \end{aligned}$$

Ecuaciones para el diseño del reactor CSTR con sistema en fase líquida

$$\begin{aligned}
 C_T &= \frac{\rho_{EVA}}{PM_{EVA}} = \frac{0.935 \frac{\text{g}}{\text{mL}}}{33.96 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} = 0.0275 \frac{\text{mol}}{\text{mL}} = 27.5 \frac{\text{mol}}{\text{L}} \\
 C_{A0} &= C_A = X_A C_{TOTAL} = 0.087 \left(27.5 \frac{\text{mol}}{\text{L}} \right) = 2.392 \frac{\text{mol}}{\text{L}} \\
 e &= C_{B0} = 0.913 \left(27.5 \frac{\text{mol}}{\text{L}} \right) = 25.107 \frac{\text{mol}}{\text{L}} \\
 C_A &= C_{A0}(1 - X_A) = 2.392 \frac{\text{mol}}{\text{L}}(1 - 0.6) = 0.956 \frac{\text{mol}}{\text{L}} \\
 FEVA &= 24,930 \text{ t/año} \times \frac{1000 \text{ kg}}{1 \text{ t}} \times \frac{1000 \text{ g}}{1 \text{ kg}} \times \frac{1 \text{ año}}{365 \text{ días}} \times \frac{1 \text{ día}}{24 \text{ h}} \times \frac{1 \text{ h}}{3600 \text{ s}} = 790.52 \text{ g/s} \\
 f_{EVA} &= \frac{FEVA}{PM_{EVA}} = \frac{790.52 \frac{\text{g}}{\text{s}}}{33.96 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} = 23.27 \frac{\text{mol}}{\text{s}} \\
 f_{A0} &= 2.024 \frac{\text{mol}}{\text{s}} \\
 F_{A0} &= PM_{VA} \cdot f_{A0} = 86 \frac{\text{g}}{\text{mol}} \cdot 2.024 \frac{\text{mol}}{\text{s}} = 174.064 \frac{\text{g}}{\text{s}} = 0.1740 \frac{\text{kg}}{\text{s}} \\
 f_A &= f_{A0}(1 - X_A) = 2.024 \frac{\text{mol}}{\text{s}}(1 - 0.6) = 0.809 \frac{\text{mol}}{\text{s}} \\
 F_A &= f_A \cdot PM_{VA} = 0.809 \frac{\text{mol}}{\text{s}} \cdot 86 \frac{\text{g}}{\text{mol}} = 69.574 \frac{\text{g}}{\text{s}} = 0.069 \frac{\text{kg}}{\text{s}} \\
 V_0 &= V_f = \frac{FEVA}{\rho_{EVA}} = \frac{0.7905 \frac{\text{kg}}{\text{s}}}{0.935 \frac{\text{kg}}{\text{L}}} = 0.845 \frac{\text{L}}{\text{s}} \\
 \tau &= \frac{V}{V_0} = \frac{4449.4 \text{ L}}{0.845 \frac{\text{L}}{\text{s}}} = 5265.56 \text{ s} \times \frac{1 \text{ min}}{60 \text{ s}} \times \frac{1 \text{ h}}{60 \text{ min}} = 1.46 \text{ h} \\
 -r_A &= KC_{A0}(1 - X_A) \\
 -r_A &= 3.13 \times 10^{-10} \cdot 2.392 \cdot (1 - 0.6) \\
 -r_A &= 2.99 \times 10^{-10} \frac{\text{mol}}{\text{L} \cdot \text{s}}
 \end{aligned}$$

4 Discusión de resultados

El producto final obtenido a partir del CSTR líquido mostró una mayor pureza y consistencia en comparación con el obtenido del CSTR gas. Esto se debe a las condiciones de operación más controladas y uniformes en el CSTR líquido, lo que resulta en un producto de mayor valor agregado y alineado con los estándares de calidad requeridos por la industria.

La implementación del proceso contribuye significativamente al ODS 9 que pretende conseguir infraestructuras sostenibles, resilientes y de calidad para todos, impulsar una nueva industria bajo criterios de sostenibilidad que adopte tecnologías y procesos industriales limpios. Al mejorar la eficiencia y reducir los costos operativos y el impacto ambiental, se promueve una industria más sostenible y responsable. Además, la alta calidad del EVA producido tiene aplicaciones en diversas industrias, lo que puede estimular el crecimiento económico y la creación de empleo, aspectos también relacionados con el ODS 8: Trabajo Decente y Crecimiento Económico.

5 Conclusiones y perspectivas futuras

El proyecto ReactEVA logró diseñar un proceso más eficiente y sostenible para la producción de acetato de etileno y vinilo (EVA), considerando el uso de reactores de tanque agitado continuo (CSTR). Los resultados indican que el CSTR en fase gaseosa proporciona mayor eficiencia en la conversión de reactivos, mientras que el CSTR en fase líquida ofrece un producto final de mayor pureza. El proceso propuesto contribuye a la reducción del impacto ambiental y cumple con los Objetivos de Desarrollo Sostenible (ODS) 9 y 12, promoviendo la innovación industrial y una producción más limpia.

No obstante, el enfoque utilizado se basó en un modelo ideal y homogéneo del sistema, por lo que en el futuro será necesario revisar de manera más detallada el proceso, considerando el mecanismo de reacción, los catalizadores involucrados y las características de los sistemas heterogéneos. Además, sería crucial realizar simulaciones numéricas completas de la producción en el reactor para comparar los modelos propuestos con mayor precisión y evaluar su viabilidad en condiciones industriales reales.

6 Agradecimientos

Los autores agradecen profundamente a la Mtra. Mireille Evangelina Bravo Gutiérrez por su invaluable apoyo, paciencia y orientación durante todo el proceso de desarrollo del proyecto. Su experiencia en la materia de Cinética y Reactores Homogéneos fue clave para comprender y aplicar los conceptos fundamentales en el diseño de reactores, lo que permitió alcanzar los objetivos planteados. Su constante disposición para resolver dudas y su compromiso con el aprendizaje fueron una fuente de inspiración y motivación para todos los integrantes del equipo.

Asimismo, extendemos nuestro agradecimiento a la Universidad La Salle México por proporcionar los recursos y el entorno académico necesarios para llevar a cabo esta investigación. También queremos reconocer el apoyo de la Facultad de Ciencias Químicas, ya que hizo posible la elaboración exitosa de este trabajo.

7 Referencias

1. Tecnología del Plástico, T. R. P. (2023, 8 agosto). Etilvinilacetato o EVA: Propiedades, ventajas y oportunidades. Plastico. <https://www.plastico.com/es/noticias/etilvinilacetato-o-eva-propiedades-ventajas-y-oportunidades>
2. Orbit Intelligence. (2024). EVA [AND] Production [AND] Shoes. Orbit Intelligence by Questel. <https://www.orbit.com/#PexmPortfolioPatentPatentDocumentPage>
3. Connor, N. (2023, 24 julio). Ethylene Vinyl acetate | Formula, Properties & Application. Material Properties. <https://material-properties.org/ethylene-vinyl-acetate/>
4. Faga, M. G., Duraccio, D., Di Maro, M., Pedraza, R., Bartoli, M., D'Ayala, G. G., Torsello, D., Ghigo, G., & Giulio, M. (2022). Ethylene-Vinyl Acetate (EVA) Containing Waste Hemp-Derived Biochar Fibers: Mechanical, Electrical, Thermal and Tribological Behavior. *Polymers*, 14(19), 4171. <https://doi.org/10.3390/polym14194171>
5. Mark, J. E., et al. (2013). *Physical Properties of Polymers Handbook* (2nd ed.). Springer Science & Business Media.

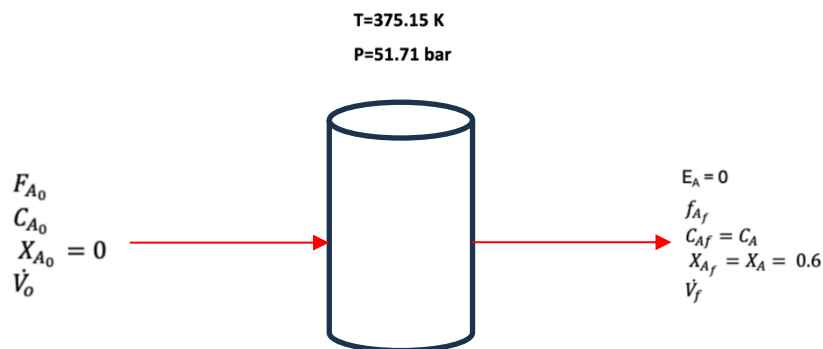


Figura 1. CSTR en fase gas

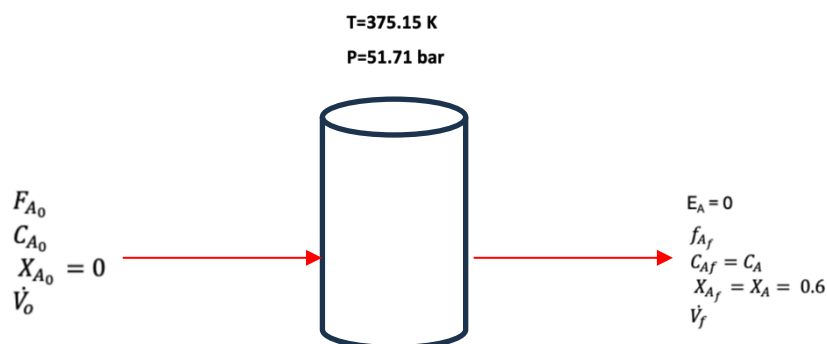


Figura 2. CSTR en fase líquida

Tabla 1. y 2: Comparación de precios tanto en fase gaseosa como líquido

Gas		Liquid	
Process Stage	Annual Equipment Amortization (USD)	Process Stage	Annual Equipment Amortization (USD)
Production of EVA-Raw Materials	\$21,772,452.00	Ethylene Compression	\$25,000
Production of EVA-Equipment (Amortization)	\$70,000.00	Ethylene Cooling	\$10,000
Production of EVA-Operation	\$170,000.00	Mixing of Ethylene and Vinyl Acetate	\$5,000
Treatment of Tire Powder-Raw Materials	\$5,000.00	Reaction in the CSTR Reactor	\$50,000
Treatment of Tire Powder-Operation	\$45,000.00	Treatment of Tire Powder-Raw Materials	\$5,000.00
Mixing and Foaming-Operation	\$80,000.00	Decantation	\$10,000
Devolatization and Drying-Equipment (Amortization)	\$65,000.00	Centrifugation	\$20,000
Devolatization and Drying-Operation	\$105,000.00	Drying	\$25,000
Total	\$22,312,452.00	Raw Materials	\$21,949,056.00
		Total	\$22,099,056