



ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO
FACULTAD DE CIENCIAS
CARRERA INGENIERÍA QUÍMICA

DETERMINACIÓN DE LA CANTIDAD DE COMPUESTOS
AROMÁTICOS, NAFTÉNICOS Y PARAFÍNICOS DE LA
FRACCIÓN LÍQUIDA OBTENIDA DE LA PIRÓLISIS TÉRMICA
DE POLIESTIRENO

Trabajo de Titulación

Tipo: Proyecto de Investigación

Presentado para optar al grado académico de:

INGENIERO QUÍMICO

AUTOR: EDGAR PAUL OROZCO TOCTAQUIZA

DIRECTOR: ING. PAUL GUSTAVO PALMAY PAREDES

Riobamba – Ecuador

2023

© 2023, Edgar Paul Orozco Toctaquiza

Se autoriza la reproducción total o parcial, con fines académicos, por cualquier medio o procedimiento, incluyendo la cita bibliográfica del documento, siempre y cuando se reconozca el Derecho de Autor.

Yo, Edgar Paul Orozco Toctaquiza, declaro que el presente Trabajo de Titulación es de mi autoría y los resultados del mismo son auténticos. Los textos en el documento que provienen de otras fuentes están debidamente citados y referenciados.

Como autor asumo la responsabilidad legal y académica de los contenidos de este Trabajo de Titulación; el patrimonio intelectual pertenece a la Escuela Superior Politécnica de Chimborazo.

Riobamba, 09 de noviembre de 2023



Edgar Paul Orozco Toctaquiza

0605316033

ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO
FACULTAD DE CIENCIAS
CARRERA INGENIERÍA QUÍMICA

El Tribunal del Trabajo de Titulación certifica que: El Trabajo de Titulación; tipo: Proyecto de Investigación, **DETERMINACIÓN DE LA CANTIDAD DE COMPUESTOS AROMÁTICOS, NAFTÉNICOS Y PARAFÍNICOS DE LA FRACCIÓN LÍQUIDA OBTENIDA DE LA PIRÓLISIS TÉRMICA DE POLIESTIRENO**, realizado por el señor: **EDGAR PAUL OROZCO TOCTAQUIZA**, ha sido minuciosamente revisado por los Miembros del Tribunal del Trabajo de Titulación, el mismo que cumple con los requisitos científicos, técnicos, legales, en tal virtud el Tribunal Autoriza su presentación.

FIRMA

FECHA

Dr. Cesar Arturo Puente Guijarro
PRESIDENTE DEL TRIBUNAL



2023-11-09

Ing. Paul Gustavo Palmay Paredes
DIRECTOR DEL TRABAJO DE TITULACIÓN



2023-11-09

Ing. Darío Fernando Guamán Lozada
ASESOR DEL TRABAJO DE TITULACIÓN



2023-11-09

DEDICATORIA

A mis queridos padres, su inquebrantable dedicación, amor y sacrificio es el faro que ha iluminado el camino para alcanzar mis metas. A mis adorados hermanos, su constante presencia, apoyo y vínculos indelebles han sido el cimiento sobre el cual he construido mis logros. Vuestra confianza en mí ha sido un motor constante que me ha impulsado a perseverar y conjunto a la compañía de cada uno de ustedes personificó la fortaleza que me ayudo a culminar esta etapa de mi vida.

Edgar

AGRADECIMIENTO

Mi más sincero agradecimiento se dirige a la Escuela Superior Politécnica de Chimborazo, por proporcionarme un espacio enriquecedor para mi crecimiento académico. A mi tutor y asesor, cuya guía experta y paciencia constante han sido pilares fundamentales para el desarrollo de este trabajo. A mis amigos, cuya colaboración y compañía han transformado esta travesía en una experiencia memorable y llena de significado. Juntos, hemos compartido desafíos, celebrado logros y forjado conexiones duraderas, dejando una impresión perdurable en mi vida.

Edgar

ÍNDICE DE CONTENIDO

ÍNDICE DE TABLAS.....	x
ÍNDICE DE ILUSTRACIONES.....	xi
ÍNDICE DE ECUACIONES	xii
ÍNDICE DE ANEXOS	xiii
RESUMEN	xiv
ABSTRACT	xv
INTRODUCCIÓN	1

CAPÍTULO I

1. PROBLEMA DE INVESTIGACIÓN.....	2
1.1. Planteamiento del problema	2
1.2. Objetivos.....	3
1.2.1. <i>Objetivo general</i>	3
1.2.2. <i>Objetivos específicos</i>	3
1.3. Justificación.....	3
1.4. Hipótesis	4

CAPÍTULO II

2. MARCO TEÓRICO.....	5
2.1. Referencias teóricas.....	5
2.1.1. <i>Poliestireno</i>	5
2.1.1.1. <i>Tipos de poliestireno</i>	5
2.1.2. <i>Pirólisis térmica</i>	6
2.1.2.1. <i>Descomposición térmica del poliestireno</i>	7
2.1.2.2. <i>Obtención de la fracción líquida</i>	8
2.1.3. <i>Caracterización de productos líquidos pirolíticos</i>	8
2.1.3.1. <i>Propiedades de los hidrocarburos</i>	9
2.1.3.2. <i>Propiedades termodinámicas críticas</i>	11
2.1.4. <i>Clasificación de compuestos en mezclas líquidas de hidrocarburos</i>	11
2.1.4.1. <i>Compuestos aromáticos</i>	12
2.1.4.2. <i>Compuestos nafténicos</i>	13
2.1.4.3. <i>Compuestos parafínicos</i>	14

2.1.4.4.	<i>Aplicaciones de hidrocarburos aromáticos , nafténicos y parafínicos</i>	15
----------	----------------------------------------------------------------------------------	----

CAPÍTULO III

3.	MARCO METODOLÓGICO	17
3.1.	Enfoque de investigación	17
3.2.	Alcance de investigación	17
3.3.	Diseño de investigación	18
3.4.	Tipo de estudio	19
3.5.	Métodos, técnicas e instrumentos de investigación	20
3.5.1.	<i>Espectroscopía de infrarrojo de la materia prima</i>	20
3.5.2.	<i>Pruebas de pirólisis de poliestireno compacto a escala de laboratorio</i>	21
3.5.3.	<i>Análisis de propiedades fisicoquímicas</i>	23
3.5.3.1.	<i>Determinación de densidad y densidad relativa</i>	23
3.5.3.2.	<i>Determinación de la densidad API</i>	24
3.5.3.3.	<i>Determinación de la viscosidad cinemática</i>	25
3.5.3.4.	<i>Determinación del índice de refracción</i>	26
3.5.3.5.	<i>Determinación del punto de inflamación</i>	27
3.5.3.6.	<i>Determinación de la curva de destilación</i>	28
3.5.3.7.	<i>Determinación del índice de cetano calculado</i>	29
3.5.3.8.	<i>Determinación del punto de anilina</i>	29
3.5.4.	<i>Determinación de propiedades termodinámicas críticos y peso molecular</i>	31
3.5.5.	<i>Análisis de composición química de la fracción líquida</i>	33
3.5.5.1.	<i>Determinación de compuestos mediante de cromatografía de gases acoplado a espectrómetro de masas (GC-MS)</i>	33
3.5.5.2.	<i>Concentración de carbonos parafínicos, nafténicos y parafínicos</i>	33

CAPÍTULO IV

4.	MARCO DE ANÁLISIS E INTERPRETACIÓN DE RESULTADOS	35
4.1.	Procesamiento, análisis e interpretación de resultados	35
4.1.1.	<i>Resultados de espectroscopía de infrarrojo de la materia prima</i>	35
4.1.2.	<i>Resultados de pruebas de pirólisis térmica de poliestireno</i>	36
4.1.2.1.	<i>Análisis estadístico de temperaturas en las pruebas de pirólisis</i>	37
4.1.3.	<i>Obtención de fracciones pirolíticas</i>	39
4.1.3.1.	<i>Análisis estadístico de los rendimientos de las fracciones pirolíticas obtenidas</i>	39

4.1.4. Determinación de propiedades fisicoquímicas de la fracción líquida	42
4.1.4.1. <i>Determinación de la densidad</i>	42
4.1.4.2. <i>Densidad relativa</i>	43
4.1.4.3. <i>Densidad API</i>	43
4.1.4.4. <i>Viscosidad cinemática</i>	44
4.1.4.5. <i>Índice de refracción</i>	45
4.1.4.6. <i>Punto de inflamación</i>	45
4.1.4.7. <i>Curva de destilación ASTM</i>	46
4.1.4.8. <i>Índice de cetano calculado</i>	51
4.1.4.9. <i>Punto de anilina</i>	51
4.1.4.10. <i>Análisis de propiedades fisicoquímicas de la fracción líquida de pirólisis</i>	53
4.1.5. Parámetros termodinámicos críticos y peso molecular	54
4.1.6. Resultados de análisis GC-MS	57
4.1.6.1. <i>Estructura química y clasificación de las moléculas identificadas</i>	59
4.1.6.2. <i>Cantidad de compuestos presentes en la fracción líquida</i>	62
4.1.6.3. <i>Concentración de carbonos aromáticos, nafténicos y parafínicos</i>	63
4.2. Discusión	65
4.3. Comprobación de hipótesis	66

CAPÍTULO V

CONCLUSIONES	67
---------------------------	----

RECOMENDACIONES	68
------------------------------	----

BIBLIOGRAFÍA

ANEXOS

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 2-1: Tipos de poliestireno	6
Tabla 2-2: Propiedades fisicoquímicas	10
Tabla 2-3: Propiedades termodinámicas críticas.....	11
Tabla 2-4: Aplicaciones de compuestos aromáticos , nafténicos y parafínicos	16
Tabla 3-1: Condiciones de las pruebas de pirólisis térmica.....	22
Tabla 3-2: Proceso de determinación de densidad y densidad relativa.....	23
Tabla 3-3: Proceso de determinación de densidad API	24
Tabla 3-4: Proceso de determinación de viscosidad cinemática	25
Tabla 3-5: Proceso de determinación del índice de refracción	26
Tabla 3-6: Proceso de determinación del punto de inflamación	27
Tabla 3-7: Proceso de determinación de la curva de destilación	28
Tabla 3-8: Coeficientes experimentales	32
Tabla 4-1: Regiones analizadas del espectro IR	36
Tabla 4-2: Resumen de datos de las temperaturas del reactor	37
Tabla 4-3: Resultados ANOVA para igualdad de medias de las temperaturas del reactor.....	38
Tabla 4-4: Resumen de datos de rendimientos de los productos de pirólisis.....	40
Tabla 4-5: Análisis ANOVA para la media de los productos pirolíticos.....	40
Tabla 4-6: Categorías de hidrocarburos en base a su densidad API	44
Tabla 4-7: Requerimientos de viscosidad cinemática para combustibles diésel.....	44
Tabla 4-8: Comparación de puntos de inflamación con combustibles diésel	46
Tabla 4-9: Resultados de destilación ASTM D86 de la fracción líquida de pirólisis	47
Tabla 4-10: Resultados de destilación ASTM D86 de la gasolina Extra	48
Tabla 4-11: Resultados de destilación ASTM D86 del combustible diésel	48
Tabla 4-12: Propiedades de la fracción líquida de pirólisis	54
Tabla 4-13: Parámetros termodinámicos críticos.....	57
Tabla 4-14: Resultados de análisis GC-MS	59

ÍNDICE DE ILUSTRACIONES

Ilustración 2-1: Estructura química del poliestireno	5
Ilustración 2-2: Degradación térmica del poliestireno.....	7
Ilustración 2-3: Obtención de fracción líquida	8
Ilustración 2-4: Tipos de compuestos aromáticos	13
Ilustración 2-5: Tipos de compuestos nafténicos	14
Ilustración 2-6: Tipos de compuestos parafínicos	15
Ilustración 3-1: Diseño de la experimentación	19
Ilustración 3-2: Sistema de pirólisis	22
Ilustración 3-3: Sistema de determinación del punto de anilina.....	30
Ilustración 4-1: Análisis FTIR del polímero utilizado	35
Ilustración 4-2: Temperaturas del reactor en las pruebas de pirólisis	37
Ilustración 4-3: Comparación de temperaturas del reactor por el método Tukey	38
Ilustración 4-4: Rendimientos de las fracciones pirolíticas obtenidas	39
Ilustración 4-5: Comparación de medias entre los productos líquidos, sólidos y gaseosos	41
Ilustración 4-6: Comparación de desviaciones estándar de los productos pirolíticos	42
Ilustración 4-7: Curvas de destilación de la fracción líquida y combustibles comerciales	49
Ilustración 4-8: Comparación de la curva de destilación con intervalos de ebullición de productos petrolíferos	50
Ilustración 4-9: Separación de componentes de la fracción líquida	50
Ilustración 4-10: Análisis del punto de anilina.....	52
Ilustración 4-11: Cromatograma de la fracción líquida.....	58
Ilustración 4-12: Compuestos aromáticos encontrados mediante GC-MS.....	60
Ilustración 4-13: Clasificación de compuestos distintos a los aromáticos	61
Ilustración 4-14: Cantidad de compuestos clasificados por familia	61
Ilustración 4-15: Porcentaje relativo de los compuestos detectados	62
Ilustración 4-16: Concentración de carbonos presentes en la fracción líquida	64
Ilustración 4-17: Ciclopropil fenil metano	64

ÍNDICE DE ECUACIONES

Ecuación 3-1: Densidad	23
Ecuación 3-2: Densidad relativa	23
Ecuación 3-3: Viscosidad cinemática	25
Ecuación 3-4: Corrección del índice de refracción a 60 °F.....	26
Ecuación 3-5: Corrección del punto de inflamación.....	27
Ecuación 3-6: Corrección de curva de destilación.....	28
Ecuación 3-7: Temperatura corregida.....	28
Ecuación 3-8: Cálculo de índice de cetano calculado.....	29
Ecuación 3-9: Factor de correlación (X).....	31
Ecuación 3-10: Cálculo de parámetros termodinámicos críticos	31
Ecuación 3-11: Porcentaje de carbonos aromáticos.....	33
Ecuación 3-12: Porcentaje de carbonos nafténicos.....	34
Ecuación 3-13: Porcentaje de carbonos nafténicos	34
Ecuación 4-1: Correlación del punto de anilina	52
Ecuación 4-2: Cálculo del VABP	55
Ecuación 4-3: Cálculo de $P_{\text{destilación}}$	55
Ecuación 4-4: Cálculo del MABP.....	56

ÍNDICE DE ANEXOS

ANEXO A: REGISTROS DE TEMPERATURAS EN LAS PRUEBAS DE PIRÓLISIS

ANEXO B: TABLA DE CORRECCIÓN PARA DENSIDAD API A 60 °F

ANEXO C: DIAGRAMA PARA DETERMINACIÓN DEL FACTOR DE CORRECCIÓN
PARA EL VABP

ANEXO D: PRUEBAS DE PIRÓLISIS TÉRMICA

ANEXO E: DETERMINACIÓN DE PROPIEDADES FISICOQUÍMICAS

RESUMEN

El uso desmedido de plásticos a base de poliestireno ha generado un alto desperdicio de este material, este problema, acompañado de la creciente demanda de combustibles, ha creado la necesidad de aprovechar estos residuos mediante pirólisis térmica y obtener combustibles que requieren ser analizados en su composición química y propiedades con el fin de determinar su utilidad, por lo tanto, el objetivo de esta investigación fue determinar la cantidad de compuestos aromáticos, nafténicos y parafínicos presentes en la fracción líquida obtenida de la pirólisis térmica de poliestireno compacto. La metodología implementada tuvo un enfoque cuantitativo con una investigación de tipo experimental, donde la variable manipulada fue la cantidad de poliestireno compacto alimentado en un reactor tipo Batch bajo condiciones de tiempo de residencia de 261 minutos, presión de -0,05 kPa y temperatura de 425 °C. La fracción líquida resultante fue sometida a análisis de acuerdo con las normas ASTM para determinar sus propiedades físicoquímicas, complementando el estudio con la determinación de sus propiedades termodinámicas críticas y el análisis de la composición química mediante cromatografía de gases acoplado a espectrometría de masas y con el método de Wuithier. Los resultados indicaron una cercanía con las propiedades físicoquímicas de los combustibles diésel con una composición representada por una concentración mayoritaria de carbonos aromáticos del 66,52% y la presencia de 17 compuestos distintos, seguido de los carbonos nafténicos que están presentes en un 24,19% y carbonos parafínicos con 9,29%. En conclusión, la fracción líquida de pirólisis de poliestireno demostró ser una mezcla de hidrocarburos con propiedades no sugeridas para su uso como combustible de forma directa, sin embargo, su carácter aromático indicó su utilidad como materia prima o aditivo en la obtención de productos petrolíferos como gasolina de alto octanaje y disolventes orgánicos.

Palabras clave: <POLIESTIRENO >, <PIRÓLISIS TÉRMICA >,< FRACCIÓN LÍQUIDA>, <PROPIEDADES >, < COMPOSICIÓN QUÍMICA>, < COMBUSTIBLE>.

2050-DBRA-UPT-2023



ABSTRACT

The excessive use of polystyrene-based plastics has generated a high waste of this material. This problem, accompanied by the growing demand for fuels, has created the need to take advantage of these wastes by thermal pyrolysis and to obtain fuels that require to be analyzed in their chemical composition and properties in order to determine their usefulness; therefore, the objective of this research was to determine the amount of aromatic, naphthenic and paraffinic compounds present in the liquid fraction obtained from the thermal pyrolysis of compact polystyrene. The methodology implemented had a quantitative approach with an experimental type investigation, where the manipulated variable was the amount of compact polystyrene fed into a Batch type reactor under conditions of residence time of 261 minutes, pressure of -0.05 kPa and temperature of 425 °C. The resulting liquid fraction was subjected to analysis according to ASTM standards to determine its physicochemical properties, complementing the study with the determination of its critical thermodynamic properties and the analysis of the chemical composition by gas chromatography coupled to mass spectrometry and with the Wuithier method. The results indicated a closeness to the physicochemical properties of diesel fuels with a composition represented by a majority concentration of aromatic carbons of 66.52% and the presence of 17 different compounds, followed by naphthenic carbons which are present in 24.19% and paraffinic carbons with 9.29%. In conclusion, the polystyrene pyrolysis liquid fraction proved to be a mixture of hydrocarbons with properties not suggested for use as fuel directly, however, its aromatic character indicated its usefulness as a raw material or additive in obtaining petroleum products such as high octane gasoline and organic solvents.

Keywords: <POLYSTYRENE >, <THERMAL PYROLYSIS >, <LIQUID FRACTION>, <PROPERTIES>, <CHEMICAL COMPOSITION>, <FUEL>.



Abg. Ana Gabriela Reinoso. Mgs.

1103696132

INTRODUCCIÓN

La pirólisis térmica de polímeros consiste en el tratamiento térmico de materia orgánica en ausencia de oxígeno, al aplicar este tratamiento a plásticos a base de polímeros como el poliestireno, se obtienen productos gaseosos, líquidos y sólidos. Este tratamiento presenta una alternativa prometedora para la reutilización de residuos plásticos, ya que permite la obtención de productos útiles a partir de materiales que estén por ser desechados, en este sentido, los productos líquidos resultantes de la pirólisis térmica, son los más valiosos debido a su posible uso como combustibles, por tal razón que es esencial conocer la composición química de la fracción líquida para establecer su utilidad como materia prima en la producción de otros productos químicos.

En este contexto, la presente investigación comienza con la obtención de la fracción líquida de la pirólisis térmica del poliestireno, la misma que es analizada bajo las normas de la Sociedad Estadounidense para Pruebas y Materiales (ASTM) para determinar sus propiedades físicoquímicas, además se complementa el estudio con la estimación de la propiedades termodinámicas críticas, para finalmente conocer su composición química con la determinación de la cantidad de compuestos aromáticos, nafténicos y parafínicos.

La metodología contempla un enfoque cuantitativo con una investigación de tipo experimental para lo cual, se utilizaron diversas técnicas y métodos analíticos, como la cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas (GC-MS). Además, se aplicaron ecuaciones y modelos matemáticos para estimar la concentración de carbonos y las propiedades presentes en la fracción líquida.

El desarrollo de esta investigación se llevó a cabo en la Escuela Superior Politécnica de Chimborazo, con el apoyo de laboratorios de la institución y otras instituciones públicas, durante el proceso, se presentaron desafíos y oportunidades respecto a la disposición de equipos y optimización de las técnicas analíticas utilizadas.

El presente trabajo de integración curricular consta de varios capítulos, en los que se describen los objetivos, la metodología utilizada, los resultados obtenidos y las conclusiones. La importancia de esta investigación radica en la obtención de información valiosa sobre la composición química de la fracción líquida obtenida de la pirólisis térmica de poliestireno, lo que puede contribuir al desarrollo de procesos más eficientes y sostenibles para el tratamiento de residuos sólidos y producción de combustibles.

CAPÍTULO I

1. PROBLEMA DE INVESTIGACIÓN

1.1. Planteamiento del problema

El uso de plásticos se ha expandido desmesuradamente en todo el mundo, su bajo costo de producción y sus características deseables, ha causado alta dependencia de este material en usos cotidianos como embalaje y envasado de alimentos. Según datos de la OCDE (2022) hasta el 2019 solo el 9% de los plásticos en todo el mundo se reciclan de forma adecuada, la mayoría de los plásticos al término de su vida útil terminan como desechos en vertederos, incinerados o arrojados al ambiente, generando grandes desafíos para la gestión de residuos. En consecuencia, esto genera un mal manejo de residuos y un mal aprovechamiento de los recursos no renovables, debido a que más del 90% del plástico tiene como materia prima el petróleo y sus derivados, además que se estima que para el año 2050 la producción de plástico alcanzara a consumir el 20% del petróleo a nivel mundial (López et al, 2020: pp.4-10).

En este contexto, la cantidad de desechos plásticos que se genera crea un desperdicio de los recursos petrolíferos, que podrían ser usados para solventar la demanda de combustibles, que según datos de la Asociación de la Industria Hidrocarburífera del Ecuador (2022, pp.32) en el 2022, el consumo de combustibles como la gasolina y el diésel en Ecuador fue de 2.543,50 millones de galones, se estima que esta cantidad irá creciendo en los próximos años, por lo que surge la necesidad de obtener combustibles alternativos que igualen o superen las características de los combustibles actuales. Es en sí, que se busca formas eficientes de la reutilización de los plásticos, mediante procesos de transformación que permitan restituir su valor económico, obteniendo nuevos productos para evitar el agotamiento de los recursos no renovables.

En este sentido, el poliestireno es un plástico ampliamente utilizado en la industria y, como tal, representa una fuente importante de residuos que pueden ser reciclados mediante técnicas como la pirólisis térmica para transformar este polímero en compuestos orgánicos líquidos, los cuales pueden ser utilizados como combustibles alternativos. Sin embargo, a pesar de su importancia y de los avances recientes en la técnica de pirólisis térmica, aún existen desafíos y áreas de investigación pendientes relacionados con la composición química de las fracciones líquidas obtenidas a partir de la pirólisis térmica de poliestireno, como es el caso de la determinación de compuestos aromáticos, nafténicos y parafínicos, así como también sus propiedades que pueden

brindar información crucial para el aprovechamiento como combustibles alternativos o como materia prima para la producción de otros productos químicos.

1.2. Objetivos

1.2.1. Objetivo general

- Determinar la cantidad de compuestos aromáticos, nafténicos y parafínicos de la fracción líquida obtenida de la pirólisis térmica de poliestireno compacto.

1.2.2. Objetivos específicos

- Realizar las pruebas de pirólisis a escala de laboratorio de la pirólisis de poliestireno compacto para obtener los productos líquidos en un reactor tipo Batch conectado a un sistema de condensación.
- Analizar las propiedades fisicoquímicas de índice de refracción, densidades y punto de anilina.
- Establecer la concentración de carbonos aromáticos nafténicos y parafínicos mediante el método de Wuithier.
- Evaluar la existencia de diferencias significativas en las varianzas de las fracciones líquidas, gaseosas y sólidas obtenidas a partir de la pirólisis térmica de poliestireno compacto mediante un análisis de varianza (ANOVA).

1.3. Justificación

La generación continua de desechos plásticos que generan contaminación ambiental y la demanda creciente de combustibles para sectores como el automotriz, agropecuario, industrial, etc. Crea la necesidad de buscar soluciones ante estas problemáticas, una alternativa es la pirólisis térmica, que consiste en una técnica que permite producir combustibles líquidos, a partir de residuos plásticos, que según su composición química estos combustibles, se asemejan a productos como keroseno, diésel y gasolina (Proaño y Crespo, 2009: p.7).

En base a esto, se propone la determinación de los compuestos aromáticos, nafténicos y parafínicos de los productos líquidos de la pirólisis térmica del poliestireno compacto, mediante análisis, para caracterizar su composición y propiedades fisicoquímicas, con el propósito de generar información de la fracción líquida de producto obtenido y contribuir con el estudio del

proceso de pirólisis, generando la posibilidad de aprovechar desechos plásticos de poliestireno para encontrar nuevas fuentes de energía alternativa, que pueden igualar o superar la calidad de los combustibles comercializados actualmente en el Ecuador.

1.4. Hipótesis

De la pirólisis térmica del poliestireno, se obtendrá una fracción líquida que muestre una proporción considerable de carbonos con anillos bencénicos en su estructura molecular por la formación de monómeros de estireno, por lo que este producto estará dominado por compuestos de naturaleza aromática, con una presencia significativamente mayor en comparación con los compuestos de naturaleza nafténica y parafínica.

CAPÍTULO II

2. MARCO TEÓRICO

2.1. Referencias teóricas

2.1.1. *Poliestireno*

El poliestireno es un plástico derivado del estireno, caracterizado por ser económico y versátil, en su forma sólida es duro e incoloro, aunque también se encuentra en variantes transparentes o con colores diversos. Debido a su flexibilidad limitada, es utilizado en la fabricación de modelos de plástico, kits de montaje, cubiertos desechables, estuches de CD y otros objetos que requieren rigidez a un costo accesible. Su amplia disponibilidad y bajo precio lo convierten en una opción popular en diversas industrias (McKeen, 2015, p.43).

La estructura básica del poliestireno, también conocido como feniletileno (Ilustración 2-1), es una cadena larga de unidades repetitivas, resultado de la polimerización de monómeros de estireno, que se unen por medio de enlaces covalentes, el estireno es una molécula aromática que consiste en un anillo de benceno con un grupo etileno unido a él (Young y Lovell, 2008: pp.6-8).

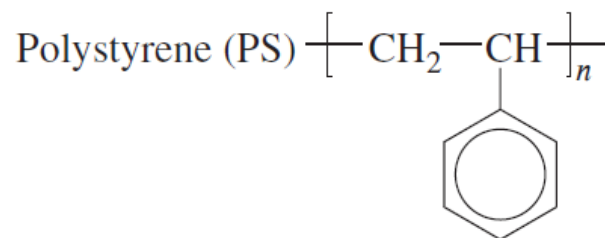


Ilustración 2-1: Estructura química del poliestireno

Fuente: (Young y Lovell, 2008, p.7)

2.1.1.1. *Tipos de poliestireno*

La industria produce una variedad de tipos de poliestireno para cumplir con diferentes funciones, considerando las propiedades requeridas. Estos tipos incluyen el poliestireno cristal, el poliestireno de alto impacto, el poliestireno expandido, el poliestireno extrusionado y el poliestireno compacto. En la Tabla 2-1 se detalla las características específicas que los hacen adecuados para diversas aplicaciones industriales y comerciales.

Tabla 2-1: Tipos de poliestireno

Tipo de Poliestireno	Descripción	Aplicaciones
Poliestireno compacto	Posee una estructura celular cerrada donde sus burbujas de aire en su interior están completamente encapsuladas lo que otorga una alta densidad y más resistencia que el poliestireno expandido.	Envases de alimentos, productos electrónicos, juguetes, piezas de automóviles y material de construcción.
Poliestireno cristal	Tiene una alta transparencia y claridad, lo que lo hace adecuado para aplicaciones que requieren visibilidad y estética.	Envases de alimentos, vasos desechables, cajas de CD/DVD, componentes de iluminación, exhibidores y material de laboratorio.
Poliestireno de Alto Impacto (HIPS)	Es una variante del poliestireno que contiene un elastómero de caucho, lo que le confiere mayor resistencia al impacto y tenacidad. Es más resistente a las roturas y fracturas que el poliestireno cristal.	Carcasas de electrodomésticos, juguetes, embalajes protector, componentes automotrices.
Poliestireno Expandido (EPS)	El poliestireno expandido, también conocido como espuma de poliestireno, se caracteriza por su estructura celular cerrada formada por burbujas de aire.	Embalaje de protección, aislamiento térmico y acústico, artículos de empaquetado, cajas de refrigeración, etc.

Fuente: (Herrera, 2015, pp.17-19); (Ubaldo, 2017, pp.4-6)

Realizado por: Orozco, Edgar, 2023

2.1.2. *Pirólisis térmica*

La pirólisis es un proceso termoquímico que se lleva a cabo en ausencia de oxígeno, para evitar la combustión, lo que implica una degradación térmica de diversos materiales sin la presencia de agentes oxidantes. Este método permite la producción de una variedad de productos, como combustibles líquidos (Peña, 2019, pp.13-14).

La pirólisis se ha consolidado como un proceso altamente efectivo y eficiente para obtener energía en forma de mezclas complejas de hidrocarburos, junto con otros productos de valor añadido. Su capacidad para generar una amplia gama de productos la distingue de otros métodos de conversión de biomasa. Un aspecto clave de la pirólisis es que la biomasa se descompone térmicamente en ausencia de oxígeno, lo que evita la combustión y favorece la formación de productos estables y residuos sólidos (Tripathi et al., 2016, pp.5-6).

Durante el proceso de pirólisis térmica, los enlaces químicos en el material orgánico se rompen debido a la alta temperatura, lo que resulta en la formación de mezclas complejas de productos gaseosos, líquidos y sólidos. Los productos obtenidos dependen en gran medida de la composición química del material orgánico y de las condiciones de operación del proceso de pirólisis térmica, como la temperatura, el tiempo de residencia y la presión.

2.1.2.1. Descomposición térmica del poliestireno

La descomposición térmica de poliestireno es un proceso consecuente de la pirólisis en el cual el polímero de poliestireno se descompone térmicamente en ausencia de oxígeno a altas temperaturas. Durante la pirólisis, el poliestireno experimenta una serie de reacciones químicas que resultan en la producción de diversos productos, distribuidos en fracciones de líquidos, gases y sólidos.

En la pirólisis de poliestireno, el material se somete a temperaturas elevadas, generalmente en un rango de 300 a 900 °C, en un ambiente sin presencia de oxígeno o en ambientes controlados con gases inertes como el nitrógeno. Bajo estas condiciones, las cadenas poliméricas del poliestireno se descomponen en unidades de menor peso molecular. Los enlaces químicos débiles entre los átomos de carbono e hidrógeno en la estructura del poliestireno se rompen, lo que conduce a la formación de nuevos hidrocarburos (Maafa, 2021, pp.3-4).

Según Lu et al. (2021, pp.3-4), durante este proceso, los enlaces químicos débiles entre los carbonos α y los carbonos enlazados al anillo de benceno se rompen, lo que conduce a la descomposición del polímero. La presencia de anillos de benceno causa un efecto estérico debido a su geometría y la disposición espacial, lo cual dificulta la ruptura de enlaces hidrógeno-carbono. Como resultado, se obtiene mayor predisposición a la generación de productos líquidos de bajo peso molecular y conformados por monómeros de estireno, como se muestra en la Ilustración 2-2.

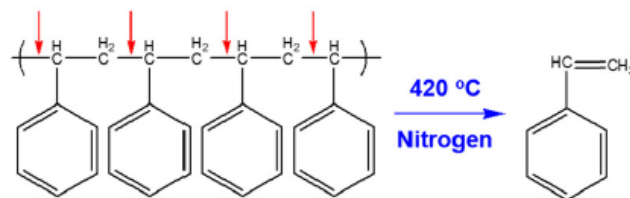


Ilustración 2-2: Degradación térmica del poliestireno

Fuente: (Lu et al., 2021, pp.3-4)

2.1.2.2. *Obtención de la fracción líquida*

Según lo indica Rejas et al. (2015, pp.3-4), la obtención de la fracción líquida a partir de pirólisis es un proceso de separación que se basa en la diferencia en la composición química y las propiedades físicas de los productos generados durante la descomposición térmica. Tal como se observa en Ilustración 2-3, la degradación térmica de residuos plásticos es un proceso en el cual se somete una mezcla de plásticos a altas temperaturas en un autoclave que también se lo considera como un reactor ya que aquí ocurren las distintas reacciones químicas de formación de productos, generando gases pirolíticos que son recuperados y condensados para obtener una fracción líquida de hidrocarburos, esta fracción se recoge en un recipiente separado, mientras que los productos gaseosos y sólidos se eliminan del sistema.

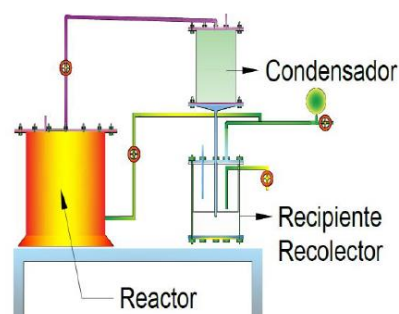


Ilustración 2-3: Obtención de fracción líquida

Fuente:(Rejas et al., 2015, pp.3-4)

2.1.3. *Caracterización de productos líquidos pirolíticos*

La caracterización de la fracción líquida resultante de la pirólisis es un proceso complejo que implica la determinación de sus propiedades físicas y químicas, así como la identificación de la amplia gama de compuestos que conforman la mezcla de hidrocarburos. El objetivo es analizar la naturaleza de estos compuestos y encontrar posibles materias primas para la producción de productos químicos, sin embargo, debido a las diferencias en volatilidad, peso molecular, grupos funcionales y las bajas concentraciones en las que se encuentran muchos de estos compuestos, resulta difícil caracterizarlos de manera exhaustiva utilizando una única técnica instrumental (Staš et al., 2014, pp.2-4).

La cromatografía de gases es la técnica más conocida y utilizada para analizar las muestras complejas de compuestos volátiles, pero la identificación y cuantificación de compuestos individuales es complicada en el caso de los oligómeros de alto peso molecular. Por ello, se han

empleado métodos de caracterización que combinan diversas técnicas térmicas, cromatográficas y espectrofotométricas para analizar los compuestos presentes, además, se han utilizado técnicas espectroscópicas como la espectrometría de masas, la espectroscopía infrarroja y la resonancia magnética nuclear, aunque ninguna de ellas permite una caracterización total e individual de los compuestos (Atienza-Martínez et al., 2017).

Es fundamental realizar una combinación adecuada de técnicas instrumentales y procedimientos de análisis para lograr una caracterización completa y precisa de la fracción líquida resultante de la pirólisis, teniendo en cuenta las limitaciones y desafíos asociados con cada método.

2.1.3.1. Propiedades de los hidrocarburos

La caracterización de las propiedades físicoquímicas de los hidrocarburos es esencial para comprender su naturaleza y comportamiento. Por lo tanto, la determinación precisa de las propiedades desempeña un papel crucial en la comprensión y aplicación de estos compuestos en una amplia gama de industrias y campos científicos. En la Tabla 2-2 se explica las definiciones de algunas de sus propiedades.

Tabla 2-2: Propiedades fisicoquímicas

Propiedad	Definición
Densidad	La densidad es una medida que expresa la relación entre el peso de un determinado volumen de muestra a una temperatura determinada. Se expresa en unidades de masa por unidad de volumen.
Densidad relativa	La densidad relativa es la relación entre la densidad de una sustancia en particular y la densidad de una sustancia de referencia, que generalmente es agua.
Densidad API	La densidad API es una medida utilizada en la industria petrolera para cuantificar la densidad de los líquidos petrolíferos en relación con el agua. Cuanto mayor sea el valor API, más ligero se considera el petróleo.
Viscosidad cinemática	La viscosidad cinemática es una medida de la resistencia de un fluido a fluir que se genera por el desecho de las fuerzas que genera su movimiento. Su unidad es el stoke o centistoke.
Índice de refracción	El índice de refracción es una medida de cuánto se desvía la luz al pasar a través de una sustancia en comparación con el aire o el vacío. En el campo de la química, el índice de refracción se utiliza para caracterizar e identificar sustancias.
Punto de inflamación	El <i>flash point</i> o punto de inflamación es la temperatura mínima a la cual un líquido emite suficientes vapores para formar una sustancia inflamable en contacto con una fuente de ignición externa.
Curva de destilación	La curva de destilación es la medición y representación gráfica que muestra la relación entre la temperatura y la cantidad de líquido evaporado durante el proceso de destilación. Generalmente se registra la temperatura en intervalos del 10% al 90% de volumen destilado de la muestra.
Índice de cetano	El número de cetano es una medida que se utiliza para evaluar la calidad de los combustibles diésel en términos de su capacidad para encenderse y quemar de manera eficiente en los motores diésel. Representa la velocidad de combustión del combustible diésel en comparación con la del cetano puro con un número de cetano de 100. Cuanto mayor es el número de cetano de un combustible diésel, más rápido se enciende y se quema en el motor diésel.
Punto de anilina	El punto de anilina se emplea como una herramienta para caracterizar hidrocarburos puros y analizar mezclas de hidrocarburos. Los hidrocarburos aromáticos tienen puntos de anilina más bajos, mientras que las parafinas presentan puntos más altos. Las naftenos y olefinas tienen valores intermedios entre las parafinas y los aromáticos. Esta propiedad se utiliza junto con otras características físicas en métodos correlativos para el análisis de hidrocarburo.
Peso molecular	El peso molecular es la masa total de una molécula, expresada en unidades de masa atómica o en gramos por mol. Representa la suma de las masas atómicas de todos los átomos presentes en la molécula. Es una propiedad importante para caracterizar y comparar sustancias, ya que proporciona información sobre la masa relativa de las moléculas.

Fuente: (Secretaría de energía, 2003, pp.10-26); (INEN, 2013, p.1); (Chao, 2013, pp.2-3)

Realizado por: Orozco, Edgar, 2023

2.1.3.2. Propiedades termodinámicas críticas

La determinación de los propiedades críticas es crucial para comprender el comportamiento de una sustancia en condiciones extremas. La temperatura, la presión y el volumen críticos (Tabla 2-3) son variables fundamentales que permiten analizar la transición de fase y simular el comportamiento de la sustancia en procesos industriales. Estos parámetros proporcionan un mejor entendimiento de la sustancia y son de gran importancia para diversos campos de estudio (Coleman, 2023, pp.16-21).

Tabla 2-3: Propiedades termodinámicas críticas

Propiedad	Definición
Temperatura crítica	Es la temperatura máxima a la cual una sustancia puede existir en estado líquido. Por encima de esta temperatura crítica, las fuerzas de atracción intermoleculares no pueden mantener la sustancia en fase líquida, y en su lugar, se encuentra en una sola fase que ocupa completamente el volumen del recipiente.
Presión crítica	Es la presión mínima necesaria para licuar una sustancia a su temperatura crítica. Por debajo de la presión crítica, la sustancia se encuentra en estado gaseoso, y al alcanzar o superar la presión crítica, la sustancia se licua y se convierte en un líquido. Es un punto en el cual las propiedades físicas y químicas de la fase líquida y gaseosa son idénticas y se producen cambios abruptos en densidad, viscosidad y otras propiedades.
Volumen crítico	Es el volumen específico mínimo que una sustancia puede alcanzar en estado líquido a su temperatura y presión críticas. Es el punto en el cual la sustancia ocupa el menor volumen posible en su fase líquida.
Factor acéntrico	Es una medida adimensional que describe la forma y capacidad de las moléculas de una sustancia para formar estructuras moleculares complejas. Mientras más cerca este el factor acéntrico a la unidad, indica que la sustancia tiene una mayor capacidad para formar estructuras moleculares complejas y ramificadas

Fuente: (Cengel y Boles, 2006, pp.118-123); (Coleman, 2023, pp.16-21)

Realizado por: Orozco, Edgar, 2023

2.1.4. Clasificación de compuestos en mezclas líquidas de hidrocarburos

La identificación de compuestos en mezclas líquidas de hidrocarburos obtenidas por destilación u otros tratamientos, resulta interesante debido a las diferencias en la calidad del producto, sin embargo por complejidad de este análisis, la caracterización se basa en su carácter dominante y su distribución entre las tres familias principales que las componen: parafínica, nafténica y aromática (Wauquier, 2004, p.39). Para productos líquidos obtenidas mediante pirólisis esta identificación de compuestos es de gran importancia ya que permite comprender su composición química y determinar la calidad del proceso, así como evaluar el potencial de los productos obtenidos.

2.1.4.1. *Compuestos aromáticos*

Los compuestos aromáticos son hidrocarburos cuyas moléculas contienen anillos de benceno o derivados del benceno. El anillo bencénico es la base elemental común a todos estos hidrocarburos aromáticos. Estos compuestos poseen propiedades especiales asociadas con el núcleo o anillo del benceno, que consiste en un hexágono en el cual cada vértice está unido a un grupo de carbono-hidrógeno (Mager et al., 2001, p.1). En la Ilustración 2-4 se muestra los distintos tipos de compuestos aromáticos formados por las diferentes sustituciones en los átomos de hidrógeno como:

- Radicales alquilo que pueden sustituir a los hidrógenos, formando alquil-aromáticos. Las posiciones de los sustituyentes se definen como orto, meta y para.
- Anillo aromático puede sustituir a dos hidrógenos adyacentes, formando hidrocarburos poliaromáticos condensados.
- Un anillo puede sustituir a dos hidrógenos adyacentes, formando un hidrocarburo nafteno-aromático, como en el caso de la tetralina.

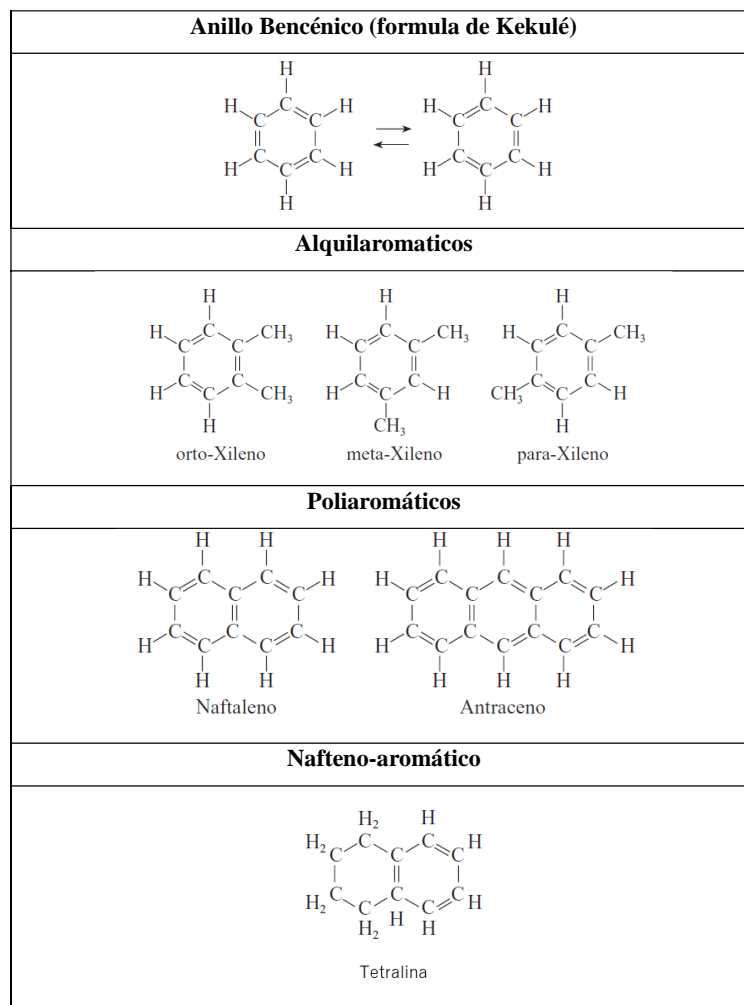


Ilustración 2-4: Tipos de compuestos aromáticos

Fuente: (Wauquier, 2004, pp.5-7)

Realizado por: Orozco, Edgar, 2023

2.1.4.2. *Compuestos nafténicos*

Los compuestos nafténicos son hidrocarburos que contienen anillos saturados de carbono, conocidos como cicloalcanos, en los cuales cada átomo de hidrógeno puede ser reemplazado por una cadena alquilo. Estos hidrocarburos presentan una ciclación de cadena carbonada, formando anillos de diferentes tamaños según el número de átomos de carbono involucrados, su cantidad de átomos de carbono en el anillo puede variar, lo que resulta en diferentes compuestos nafténicos como se indica en la Ilustración 2-5. Estos compuestos exhiben temperaturas de ebullición y densidades superiores a las de los alcanos con el mismo número de átomos de carbono, debido a la presencia de los anillos cíclicos en sus estructuras. Además, pueden existir compuestos nafténicos formados por la unión de varios anillos, como la decalina (Wauquier, 2004, pp.4-5).

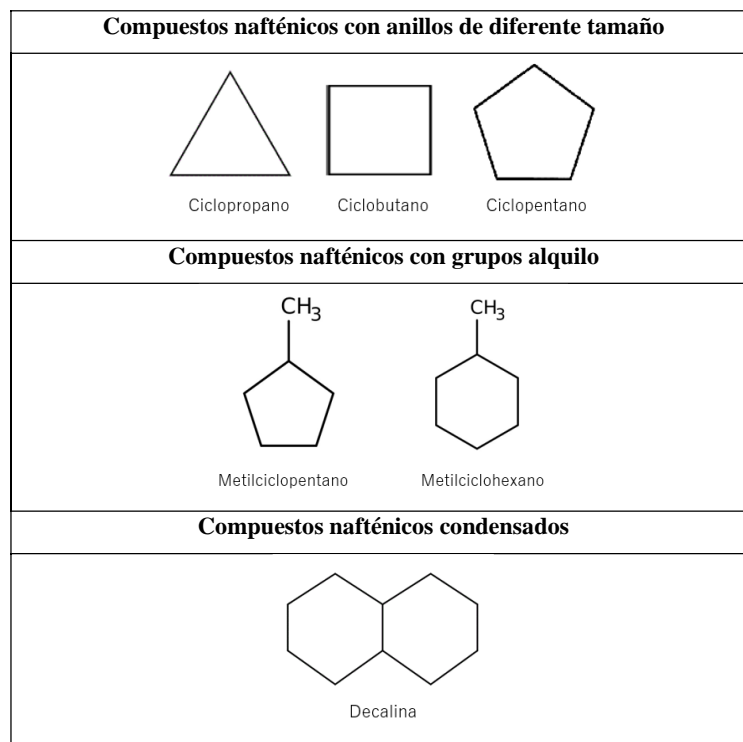


Ilustración 2-5: Tipos de compuestos nafténicos

Fuente: (Wauquier, 2004, pp.4-5)

Realizado por: Orozco, Edgar, 2023

2.1.4.3. *Compuestos parafínicos*

Los compuestos parafínicos son hidrocarburos saturados que consisten en una cadena de átomos de carbono enlazados, cada uno de ellos unido a cero, uno, dos o tres átomos de hidrógeno. Estos hidrocarburos no contienen enlaces dobles o triples entre los átomos de carbono. Cuando la cadena de carbono es recta, se conocen como parafinas normales o n-alcenos. Por lo general son los compuestos más volátiles en un crudo pero su punto de ebullición aumenta a medida que se incrementa el número de átomos de carbono en la cadena, en la Ilustración 2-6 se muestran algunos ejemplos de tipos de parafinas debido a que estos compuestos pueden ser sustituidos por átomos de carbono o cadenas hidrocarbonadas, lo que da lugar a isoparafinas, además, estas ramificaciones pueden ubicarse en diferentes puntos de la cadena, lo que resulta en moléculas isómeras, que tienen igual número de átomos de carbono pero una estructura química diferente (Viñas, 2005, pp.12-13).

Compuestos Parafínicos Normales o n-alcenos		
$\text{CH}_3 - (\text{CH}_2)_n - \text{CH}_3$	$\text{CH}_3 - \text{CH}_2 - \text{CH}_3$	$\text{CH}_3 - \text{CH}_2 - \text{CH}_2 - \text{CH}_3$
Fórmula desarrollada	Propano	n-Butano
Compuestos Parafínicos con grupos alquilo		
$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 - \text{CH} - \text{CH}_3 \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 - \text{CH} - \text{CH}_2 - \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$	
Iso-Butano	Iso-Pentano	
Isómeros de Parafinas		
$\begin{array}{c} \text{CH}_3 - \text{CH} - \text{CH}_2 - \text{CH}_2 - \text{CH}_2 - \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 - \text{CH}_2 - \text{CH} - \text{CH}_2 - \text{CH}_2 - \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$	
2 Metil hexano	3 Metil hexano	

Ilustración 2-6: Tipos de compuestos parafínicos

Fuente: (Wauquier, 2004, pp.3-4)

Realizado por: Orozco, Edgar, 2023

2.1.4.4. Aplicaciones de hidrocarburos aromáticos, nafténicos y parafínicos

Las características que ofrecen las mezclas de hidrocarburos en base a la proporción de sus compuestos aromáticos, nafténicos y parafínicos, resulta en un amplio rango de aplicaciones como la fabricación de productos químicos, combustibles, aditivos y muchos otros productos de interés comercial. En la Tabla 2-4 se destaca las aplicaciones más comunes de estos compuestos.

Tabla 2-4: Aplicaciones de compuestos aromáticos , nafténicos y parafínicos

Tipo de Compuesto	Aplicación
Aromático	Los compuestos aromáticos, en su forma pura, encuentran una amplia variedad de aplicaciones en la síntesis química de productos como plásticos, caucho sintético, pinturas, pigmentos, explosivos, pesticidas, detergentes, perfumes y fármacos. En el uso como combustible, estos compuestos tienden a dar número de octano mayor en comparación con los compuestos parafínicos y nafténicos.
Nafténico	En la industria petrolera, se utilizan en la producción de combustibles de tipo diésel por tener una mayor estabilidad térmica , lo cual resulta en una combustión más uniforme y controlada en los motores diésel, lo que reduce la formación de emisiones nocivas en comparación a los compuestos aromáticos.
Parafínico	Se utilizan como combustibles, tanto en forma de mezclas en la gasolina como en combustibles líquidos y gases para calefacción y generación de energía. Además, los compuestos parafínicos cuando poseen cadenas carbonadas largas se emplean en la fabricación de lubricantes y aceites industriales.

Fuente: (Mager et al., 2001, p.1); (Gary et al., 2007, pp.63-65)

Realizado por: Orozco, Edgar, 2023

CAPÍTULO III

3. MARCO METODOLÓGICO

3.1. Enfoque de investigación

El enfoque de la presente investigación es cuantitativo. Su objetivo es determinar la cantidad de compuestos aromáticos, nafténicos y parafínicos presentes en la fracción líquida obtenida de la pirólisis térmica de poliestireno. Para lo cual se analizó la composición, mediante cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas y con el método Wuithier. Además, se llevó a cabo pruebas de análisis mediante técnicas analíticas para determinar las propiedades fisicoquímicas y estimar las propiedades termodinámicas críticas, complementando así el enfoque cuantitativo. Se interpretará los datos obtenidos y se discutirá las posibles implicaciones y aplicaciones de los resultados.

3.2. Alcance de investigación

El alcance de investigación se enfoca en la determinación de la cantidad de compuestos aromáticos, nafténicos y parafínicos presentes en la fracción líquida obtenida de la pirólisis térmica de poliestireno, así como la determinación de las propiedades físicoquímicas y estimación de propiedades termodinámicas, utilizando técnicas específicas de cálculo y análisis que permitan discutir los resultados obtenidos.

El estudio se centrará únicamente en la fracción líquida obtenida de la pirólisis térmica de poliestireno compacto, y no se incluirán otras fuentes o tipos de polímeros. El análisis de la fracción líquida se realizará en laboratorios en base a las normas ASTM y utilizando técnicas analíticas específicas, como la cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas.

El presente estudio no considera el impacto ambiental de la producción de la fracción líquida o su uso posterior en la industria, ni la evaluación de la eficiencia o rentabilidad de las posibles aplicaciones identificadas. El objetivo final es proporcionar información detallada y precisa sobre la fracción líquida obtenida de la pirólisis térmica de poliestireno, lo que puede ser de interés para investigadores, ingenieros y empresas en el campo de la química y la energía.

3.3. Diseño de investigación

El diseño de investigación del presente trabajo es experimental, el cual involucra un muestreo completamente aleatorio y la manipulación de una variable, que en este caso es el tipo de plástico utilizado, específicamente el poliestireno compacto. Para garantizar la repetibilidad en los datos se utilizó cantidades diferentes de poliestireno compacto para la realización de tres pruebas de pirólisis térmica en un reactor tipo Batch conectado a un sistema de condensación y obtener los productos líquidos.

Posteriormente, se analizó las características fisicoquímicas de la fracción líquida, incluyendo la determinación de la cantidad de compuestos aromáticos, nafténicos y parafínicos, utilizando técnicas analíticas específicas, como la cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas. Para ampliar el análisis de la fracción líquida, también se estimaron las propiedades termodinámicas críticas de presión, temperatura y volumen críticos, utilizando correlaciones matemáticas con las propiedades fisicoquímicas encontradas.

En la recolección de datos, se utilizó instrumentos de medición y análisis de laboratorio, así como bases de datos bibliográficas y científicas, para obtener información relevante sobre la composición química y las propiedades de los compuestos presentes en la fracción líquida para finalmente, analizar los resultados y discutir las posibles implicaciones y aplicaciones de la fracción líquida obtenida de la pirólisis térmica de poliestireno. En la Ilustración 3-1 se esquematiza el diseño de la experimentación utilizado en esta investigación.

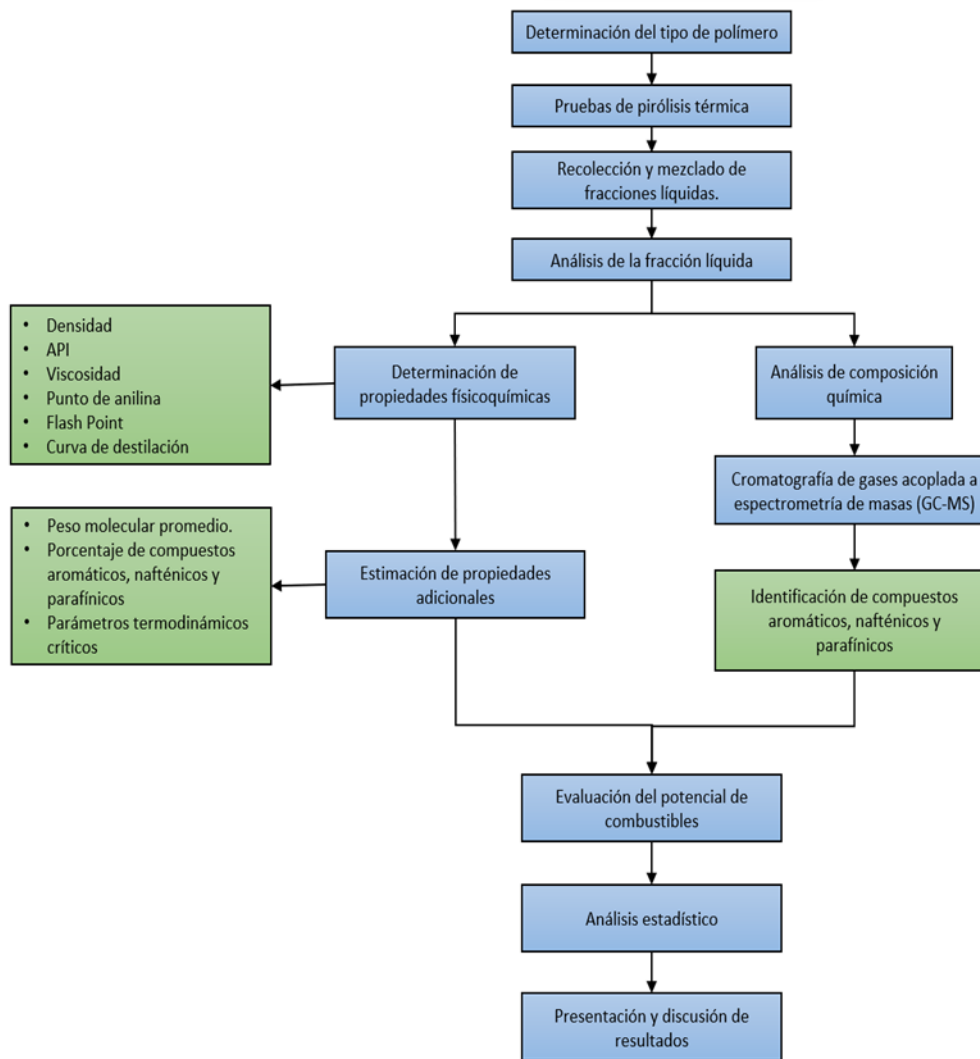


Ilustración 3-1: Diseño de la experimentación

Realizado por: Orozco, Edgar, 2023

3.4. Tipo de estudio

La investigación se basó en el estudio de un caso en particular, el cual trata de la obtención y análisis de la fracción líquida obtenida de la pirólisis térmica de poliestireno compacto. Se llevaron a cabo procesos de pirólisis en un entorno de laboratorio para obtener la fracción líquida y se realizaron análisis para determinar sus propiedades y composición. Además, se incluyen elementos documentales en el estudio, como la revisión de literatura científica y el uso de bases de datos para mejorar la interpretación de los resultados y proporcionar un análisis característico de la naturaleza de la fracción líquida por medio de la discusión de los resultados con investigaciones previas.

3.5. Métodos, técnicas e instrumentos de investigación

El método de investigación utilizado se centra en un enfoque experimental, donde la variable manipulada es el tipo de plástico, utilizando poliestireno compacto para llevar a cabo pruebas de pirólisis. Se realizó una selección aleatoria, teniendo en cuenta la verificación del poliestireno en la materia prima alimentada en un reactor tipo Batch conectado a un sistema de condensación. Se establecieron las mismas condiciones de operación para cada prueba de pirólisis, con el objetivo de obtener resultados comparables y reproducibles. Se recolectaron y midieron las muestras de la fracción líquida obtenida y se realizó un análisis estadístico para descartar diferencias significativas en el rendimiento de cada prueba.

La fracción líquida resultante de la pirólisis de poliestireno fue sometida a análisis utilizando técnicas e instrumentos de acuerdo con las normas establecidas por la *American Society for Testing and Materials* (ASTM) para determinar sus propiedades físicoquímicas y posteriormente determinar parámetros termodinámicos críticos y la cantidad de compuestos aromáticos, nafténicos y parafínicos. Los datos recopilados durante las pruebas de pirólisis y los análisis de la muestra fueron procesados y analizados. Se realizaron cálculos y se dedujeron conclusiones sobre la composición y características de los productos obtenidos, en base a comparación y discusiones con referencias bibliográficas.

3.5.1. Espectroscopía de infrarrojo de la materia prima

El polímero usado en las pruebas de pirólisis se determinó mediante espectroscopia infrarroja por transformada de Fourier, en un espectrofotómetro modelo JASCO FT/IR-4100 conectado al software Spectra Manager, siguiendo el procedimiento a continuación:

- Preparar la muestra: Se obtiene una pequeña muestra del polímero y se la tritura en partes muy pequeñas.
- Preparar el instrumento: Se asegura el correcto funcionamiento del espectrofotómetro FTIR y se limpia el área de muestra.
- Colocación de la muestra: Se deposita una pequeña cantidad de la muestra en el equipo de espectroscopia infrarroja.
- Adquisición del espectro: Se realiza la lectura del espectro FTIR de la muestra del polímero mediante el análisis de la radiación infrarroja absorbida.
- Interpretación del espectro: Se analiza el espectro obtenido, identificando las bandas de absorción características de los diferentes grupos funcionales presentes en el polímero. Se

comparan los resultados con una biblioteca de espectros de referencia para determinar el tipo de polímero.

- Análisis y registro de resultados: Se registran los resultados obtenidos, indicando el tipo de polímero identificado y cualquier observación relevante.

3.5.2. Pruebas de pirólisis de poliestireno compacto a escala de laboratorio

Se realizaron tres pruebas de pirólisis con cantidades diferentes de poliestireno compacto para garantizar la repetibilidad de los datos. Estas pruebas se realizaron mediante un sistema de pirólisis que consistió en un reactor tipo Batch conectado a un sistema de condensación como se indica en la Ilustración 3-2, el procedimiento se detalla a continuación:

- Preparar el reactor: asegurarse de que el reactor esté limpio y seco, y conectarlo al sistema de condensación.
- Preparar la muestra: cortar el poliestireno compacto en pequeños trozos, lavar, secar y pesar una cantidad precisa para la prueba.
- Cargar la muestra: colocar los trozos de poliestireno en el reactor.
- Cerrar el reactor: asegurarse de que el reactor esté completamente cerrado y sellado para evitar fugas.
- Encender el sistema de condensación y establecer la temperatura de 10° C.
- Calentar el reactor: encender el sistema de calentamiento y establecer la temperatura adecuada para la pirólisis.
- Realizar las pruebas de pirólisis de poliestireno bajo las condiciones que se detallan en la Tabla 3-1.
- Registrar los datos de temperatura y tiempo de reacción con intervalos de 3 minutos.
- Recoger los productos líquidos: después de un tiempo determinado de pirólisis, recoger los productos líquidos condensados en el sistema de condensación.
- Separar la fracción líquida: separar la fracción líquida obtenida de la pirólisis del resto de los productos.



Ilustración 3-2: Sistema de pirólisis

Realizado por: Orozco, Edgar, 2023

Tabla 3-1: Condiciones de las pruebas de pirólisis térmica

Prueba	Cantidad de poliestireno (g)	Temperatura (°C)	Tiempo de residencia (min)	Presión (kPa)
1	750	425	261	-0,05
2	500			
3	250			

Realizado por: Orozco, Edgar, 2023

3.5.3. Análisis de propiedades fisicoquímicas

3.5.3.1. Determinación de densidad y densidad relativa

Tabla 3-2: Proceso de determinación de densidad y densidad relativa

Densidad y densidad relativa ASTM D1217	
Materiales y Equipos	Reactivos
<ul style="list-style-type: none"> • Picnómetro con termómetro incorporado 	<ul style="list-style-type: none"> • Muestra líquida
Procedimiento	
<ul style="list-style-type: none"> • Preparación del picnómetro: limpiar y secar cuidadosamente el picnómetro. • Pesar el picnómetro vacío y seco. • Llenar el picnómetro con la muestra líquida de interés hasta que esté completamente lleno y no haya burbujas de aire. • Limpiar y secar cuidadosamente el picnómetro lleno. • Pesar el picnómetro lleno . • Determinación de la temperatura: Medir y registrar la temperatura del líquido en el picnómetro. • Calcular la densidades mediante la siguientes ecuaciones: $\rho_{\text{densidad}} = \frac{(w_2 - w_1)}{v}$ <p>Ecuación 3-1: Densidad</p> $\rho_{\text{relativa}} = \frac{\rho_{\text{densidad}}}{\rho_{\text{Referencia H2O}}}$ <p>Ecuación 3-2: Densidad relativa</p> <p>Donde:</p> <p>w₁: peso del picnómetro vacío, en g</p> <p>w₂: peso del picnómetro lleno, en g</p> <p>v: volumen calibrado del picnómetro, en mL</p> <p>ρ_{densidad}: densidad a una determinada temperatura, en g/mL</p> <p>ρ_{relativa}: es la densidad relativa</p> <p>ρ_{Referencia H2O}: es la densidad de referencia del agua a la temperatura que se determinó ρ_{densidad}</p>	

Fuente:(ASTM, 2008b)

Realizado por: Orozco, Edgar, 2023

3.5.3.2. *Determinación de la densidad API*

Tabla 3-3: Proceso de determinación de densidad API

Densidad API ASTM D1298	
Materiales y Equipos	Reactivos
<ul style="list-style-type: none">• Juego de hidrómetros graduados en °API• Probeta de 500 mL• Termómetro	<ul style="list-style-type: none">• Muestra líquida
Procedimiento	
<ul style="list-style-type: none">• Preparación de la muestra: limpiar y secar la probeta de 500 mL.• Llena la probeta con 500 mL de muestra líquida.• Medición de la densidad: Colocar el hidrómetro cuidadosamente en el probeta de muestra sin que toque las paredes.• Permitir que el hidrómetro se estabilice y registrar la lectura en la escala graduada.• Realizar múltiples mediciones y registrar los resultados y temperatura observada.• Cálculo de la densidad API: utilizar tablas de corrección ASTM para determinar la densidad API a 60 °F.	

Fuente:(ASTM, 2008b)

Realizado por: Orozco, Edgar, 2023

3.5.3.3. Determinación de la viscosidad cinemática

Tabla 3-4: Proceso de determinación de viscosidad cinemática

Viscosidad Cinemática ASTM D445	
Materiales y Equipos	Reactivos
<ul style="list-style-type: none"> • Viscosímetro capilar • Baño de temperatura constante • Cronometro 	<ul style="list-style-type: none"> • Muestra líquida • Agua destilada
Procedimiento	
<ul style="list-style-type: none"> • Preparación del equipo: Asegurar que el viscosímetro capilar esté limpio y en buen estado. • Llena el baño de temperatura con agua destilada y ajústalo a la temperatura de ensayo requerida. • Llena el viscosímetro capilar con la muestra de fluido a analizar, asegurándose de eliminar cualquier burbuja de aire. • Medición de la viscosidad: sumergir el viscosímetro capilar lleno de muestra en el baño de temperatura y permitir que se establezca durante un período de tiempo determinado según la norma ASTM D445. • Iniciar el cronómetro y registra el tiempo que tarda la muestra en fluir entre dos puntos de referencia en el viscosímetro capilar. • Repite la medición al menos tres veces y calcula el promedio de los tiempos registrados. • Cálculo de la viscosidad: <div style="text-align: center; margin: 10px 0;"> $v = C_{\text{viscosímetro}} * t_{\text{promedio}}$ </div> <p style="text-align: center;">Ecuación 3-3: Viscosidad cinemática</p> <p>Donde:</p> <p>v: Viscosidad cinemática, en cSt.</p> <p>t_{promedio}: Promedio de los tiempos registrados, en s.</p> <p>C_{viscosímetro}: Factor de viscosidad cinemática del viscosímetro, en mm²/s².</p>	

Fuente:(ASTM, 2008a)

Realizado por: Orozco, Edgar, 2023

3.5.3.4. Determinación del índice de refracción

Tabla 3-5: Proceso de determinación del índice de refracción

Índice de refracción ASTM D1218	
Materiales y Equipos	Reactivos
<ul style="list-style-type: none"> • Refractómetro modelo KEM RA-620 	<ul style="list-style-type: none"> • Muestra líquida
Procedimiento	
<ul style="list-style-type: none"> • Asegurarse de que el refractómetro esté calibrado correctamente. • Tomar una muestra líquida representativa. • Colocar una pequeña cantidad de la muestra en el prisma del refractómetro. • Leer y registrar el índice de refracción nDt en el refractómetro. • Calcular el índice de refracción corregido nD60 utilizando la fórmula de corrección. $nD60 = nDt + [0,00045 * (60 - t)]$ <p style="text-align: center;">Ecuación 3-4: Corrección del índice de refracción a 60 °F</p> <p>Donde:</p> <p>nD60: índice de refracción a 60 °F</p> <p>nDt: índice de refracción a temperatura t</p> <p>t: temperatura de medición del índice de refracción, en °F</p>	

Fuente:(ASTM, 2006)

Realizado por: Orozco, Edgar, 2023

3.5.3.5. *Determinación del punto de inflamación*

Tabla 3-6: Proceso de determinación del punto de inflamación

Punto de inflamación ASTM D93	
Materiales y Equipos	Reactivos
<ul style="list-style-type: none"> • Equipo manual de copa cerrada Pensky-Martens • Termómetro 	<ul style="list-style-type: none"> • Muestra líquida
Procedimiento	
<ul style="list-style-type: none"> • Preparar el equipo y los materiales necesarios, incluyendo el vaso de prueba, el termómetro, el calentador y la muestra líquida. • Verificar que el equipo esté limpio y en buenas condiciones de funcionamiento. • Colocar la muestra líquida en el vaso de prueba hasta la marca de nivel requerida. • Colocar el termómetro en posición para medir la temperatura en el vaso de prueba. • Calentar gradualmente la muestra con el calentador, manteniendo un ritmo constante. • Encender la llama del equipo y acercarla a la muestra con cada aumento de un grado de temperatura. • Observar continuamente la muestra durante el calentamiento y buscar los primeros signos de inflamación, como la formación de vapores o la aparición de una llama. • Registrar la temperatura cuando se observa el punto de inflamación. • Repetir el procedimiento con las muestras adicionales, si es necesario. • Limpiar y almacenar correctamente el equipo después de completar las pruebas. • Reportar el resultado corregido mediante la siguiente ecuación: <p style="text-align: center;">Punto de inflamación corregido = $C + 0,0033(760 - P)$</p> <p style="text-align: center;">Ecuación 3-5: Corrección del punto de inflamación</p> <p>Donde:</p> <p>C: punto de inflamación observado, en °C</p> <p>P: Presión barométrica a la que se realizó el análisis, en mmHg</p>	

Fuente:(ASTM, 2005)

Realizado por: Orozco, Edgar, 2023

3.5.3.6. *Determinación de la curva de destilación*

Tabla 3-7: Proceso de determinación de la curva de destilación

Curva de destilación ASTM D86	
Materiales y Equipos	Reactivos
<ul style="list-style-type: none"> • Equipo de destilación ASTM D86 • Probeta de recolección de destilado 	<ul style="list-style-type: none"> • Muestra líquida
Procedimiento	
<ul style="list-style-type: none"> • Preparación del equipo: asegurarse de que el equipo esté limpio y en buenas condiciones, colocar el termómetro correctamente en base a la norma. • Medir 100mL de muestra líquida. • Colocar la muestra en el matraz de destilación y asegurar correctamente el conjunto. • Conectar el equipo de destilación al sistema de calentamiento y enfriamiento. • Calentar gradualmente la muestra, registrando las temperaturas en intervalos regulares. • Continuar el proceso de destilación hasta que no se obtenga más destilado o se tenga el 90% en volumen de destilado respecto a la muestra líquida. • Registrar y analizar los datos de temperatura y volumen destilado en función del tiempo o del porcentaje destilado. • Calcular y graficar las temperaturas corregidas utilizando las siguientes fórmulas de corrección: $\Delta T = 0,00012 * (760 - P) * (273 + T_{\text{registrada}})$ <p style="text-align: center;">Ecuación 3-6: Corrección de curva de destilación</p> $T_{\text{corregida}} = \Delta T + T_{\text{registrada}}$ <p style="text-align: center;">Ecuación 3-7: Temperatura corregida</p>	
<p>Donde:</p> <p>ΔT: Diferencia entre temperatura corregida y registrada, en °F</p> <p>P : Presión barométrica a la que se realizó el análisis, en mmHg</p> <p>$T_{\text{registrada}}$: Temperatura registrada, en °F</p> <p>$T_{\text{corregida}}$: Temperatura corregida, en °F</p>	

Fuente:(ASTM, 2008c)

Realizado por: Orozco, Edgar, 2023

3.5.3.7. Determinación del índice de cetano calculado

El cálculo del índice de cetano se determina en base a la norma ASTM D4737, con la ecuación que se detalla a continuación:

$$CCI = 45,2 + (0,08992)(T_{10N}) + [0,131 + (0,901)(B)][T_{50N}] + [0,0523 - (0,420)(B)][T_{90N}] + [0,00049][(T_{10N})^2 - (T_{90N})^2] + (107)(B) + (60)(B)^2$$

Ecuación 3-8: Cálculo de índice de cetano calculado

Donde:

CCI: Índice de cetano calculado por ecuación de cuatro variables

D: Densidad al 15°C, en g/mL

DN=D-0,85

$B = [e^{(-3,5)(DN)}] - 1$

T_{10} : temperatura corregida al 10 % de destilado, en °C

$T_{10N} = T_{10} - 215$

T_{50} : temperatura corregida al 50 % de destilado, en °C

$T_{50N} = T_{50} - 260$

T_{90} : temperatura corregida al 90 % de destilado, en °C

$T_{90N} = T_{90} - 310$

3.5.3.8. Determinación del punto de anilina

La propiedad de punto de anilina se determinó en base al método A de la norma ASTM D611, este método se llevó a cabo mediante materiales y equipos de laboratorio específicos, que se detallan a continuación:

- Tubo de ensayo
- Probeta de 50 ml
- Plancha calefactora
- Soporte universal
- Pinzas universales
- Termómetro de mercurio
- Fuente de luz



Ilustración 3-3: Sistema de determinación del punto de anilina

Realizado por: Orozco, Edgar, 2023

La realización del análisis requirió acoplar un sistema de determinación de punto de anilina como se indica en la Ilustración 3-3. Este sistema consistió en utilizar un tubo de ensayo como tubo de prueba y una probeta como chaqueta de calentamiento. Debido a la capacidad higroscópica de la anilina se utilizó glicerina dentro de la chaqueta de calentamiento y se realizó el siguiente procedimiento:

- Colocar 10 mL de anilina y 10 mL de la muestra líquida en el tubo de prueba.
- Encender la plancha calefactora al igual que la fuente de luz y agitar continuamente hasta que la solución sea totalmente miscible y translúcida.
- Retirar la fuente de calor y enfriar el tubo de prueba hasta evidenciar turbidez o la no penetración de la luz en la solución.
- Colocar el termómetro y registrar la temperatura a la que se evidencia turbidez, ese es el punto de anilina.
- Repetir el calentamiento y enfriamiento con la misma solución para determinar con mejor precisión el punto de anilina.

3.5.4. *Determinación de propiedades termodinámicas críticos y peso molecular*

Se estimó la temperatura crítica, presión crítica, volumen crítico y el peso molecular ,utilizando correlaciones empíricas entre los resultados de las propiedades de la fracción líquida y coeficientes experimentales preestablecidos, según Bahadori et al. (2016, pp.2-6) este método permite calcular los parámetros termodinámicos críticos y el peso molecular con errores mínimos, mediante las siguientes ecuaciones:

$$\text{Factor de correlación} = SG_{15} * MABP$$

Ecuación 3-9: Factor de correlación (X)

$$Y = a + (b * X) + (c * X^2) + (d * X^3)$$

Ecuación 3-10: Cálculo de parámetros termodinámicos críticos

Donde:

Y:Parametro termodinámico crítico

a,b,c,d: Coeficientes experimentales para cada parámetro, especificados en la Tabla 3-8

SG₁₅: Gravedad especifica o densidad relativa a 15,56°C

MABP: Punto de ebullición medio, en K

Tabla 3-8: Coeficientes experimentales

Coeficiente	Peso molecular (g/mol)	Presión Crítica (kPa)	Temperatura Crítica (K)	Volumen Crítico (m³ /kgmol)	Factor acéntrico
a	63,81617892759220	5912,37181859684	196,9021673853400	0,2576251890570	0,35403211727964
b	-0,2095157494730	-13,7312722627300	1,5698434637770	-0,0007090948197	-0,0018202490224
c	0,0013325646670	0,0120147149500	-0,0010724369800	0,0000052138595	0,0000069421461
d	-0,0000003565738	-0,0000034834100	0,0000004382170	0,0000000023559	-0,00000000403905

Fuente: (Bahadori et al., 2016, pp.3)

Realizado por: Orozco, Edgar, 2023

3.5.5. *Análisis de composición química de la fracción líquida*

3.5.5.1. *Determinación de compuestos mediante de cromatografía de gases acoplado a espectrómetro de masas (GC-MS)*

La determinación de los compuestos presentes en la fracción líquida se realizó mediante análisis GC-MS bajo parámetros de control específicos, el horno se configuró para mantener una temperatura inicial de 70 °C con una velocidad de aumento de 10 °C/min hasta alcanzar de 325 °C. La inyección de la muestra se realizó con un inyector de tamaño 10 µL, con un volumen de inyección de 1 µL. En el sistema de inyección el gas portador fue helio, en proporción de 10:1 a una presión de 2.8588 psi y flujo de 18.511 mL/min. Se utilizó una columna Agilent 19091J-413 HP-5 de 30 m de longitud, con un diámetro interno de 320 µm y una película de 0.25 µm. La temperatura inicial de la columna fue de 70 °C, con una presión de 2.8588 psi y un flujo de 1.5 mL/min.

En la adquisición de datos de masas, se utilizó el modo de escaneo, con un tiempo de retardo de disolvente de 1.4 minutos. El archivo de ajuste utilizado fue ATUNE.U., se configuró un tiempo de ejecución de 650 minutos y se establecieron los parámetros de escaneo de tiempos de retención, probabilidad y porcentaje relativo.

3.5.5.2. *Concentración de carbonos parafínicos, nafténicos y parafínicos*

En la determinación de la concentración de carbonos aromáticos, parafinas y nafténicos en la fracción líquida, se aplicó el método de Wuithier, este método se basa en el cálculo de la concentración de carbonos para cada uno de estos grupos utilizando datos de densidad relativa, punto de anilina e índice de refracción (Wuithier, 1971; citado en Proaño y Crespo, 2009). A continuación, se explica las ecuaciones empleadas en el método:

$$\%Ca = 1039,4(n) - 470,4(d) - 0,315(PA) - 1094,3$$

Ecuación 3-11: Porcentaje de carbonos aromáticos

Donde:

%Ca: Contenido de carbonos aromáticos, en %

n: Índice de refracción a 15,56° C.

d: densidad relativa a 15,56° C.

PA: Punto de anilina en °C.

$$\%C_n = -1573,3(n) - 840,15(d) - 0,4619(PA) - 1662,2$$

Ecuación 3-12: Porcentaje de carbonos nafténicos

Donde:

C_n: Contenido de carbonos nafténicos

n: índice de refracción a 15° C.

d: densidad relativa a 15° C.

PA: Punto de anilina en °C.

$$\% C_{\text{parafínicos}} = 100 - (\%Ca + \%C_n)$$

Ecuación 3-13: Porcentaje de
carbonos nafténicos

Donde:

%C_{parafínicos}: Contenido de carbonos parafínicos.

Ca: Concentración de carbonos aromáticos.

C_n: Concentración de carbonos nafténicos.

CAPÍTULO IV

4. MARCO DE ANÁLISIS E INTERPRETACIÓN DE RESULTADOS

4.1. Procesamiento, análisis e interpretación de resultados

4.1.1. Resultados de espectroscopía de infrarrojo de la materia prima

En la Ilustración 4-1 se puede apreciar el espectro infrarrojo (IR) que indica la presencia de poliestireno en la muestra correspondiente a la materia prima utilizada para el proceso de pirólisis térmica. Se analizaron los picos formados en base a sus posiciones de transmitancia frente al número de onda, mostrando 5 regiones características que se detallan en la Tabla 4-1.

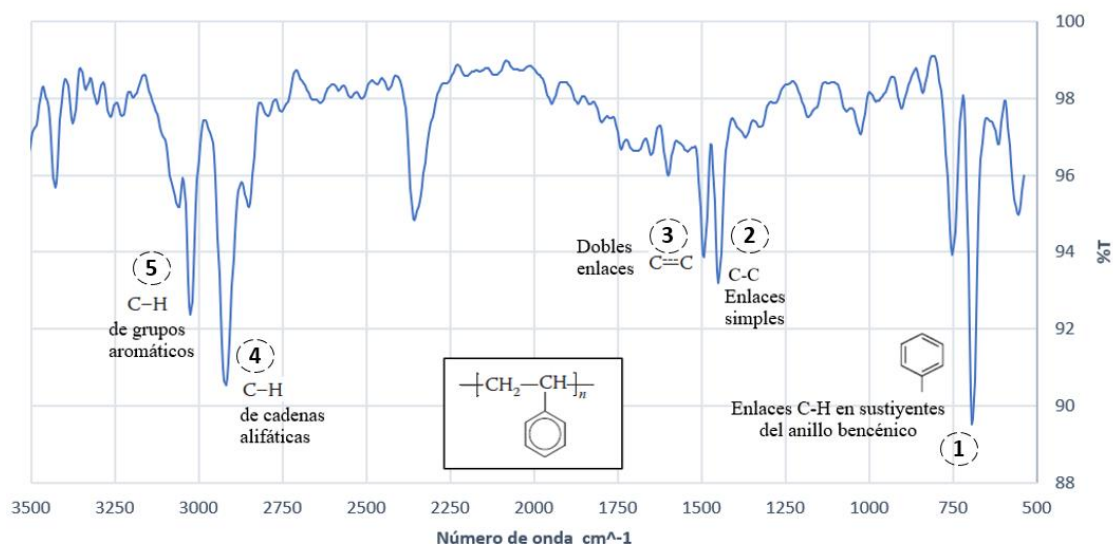


Ilustración 4-1: Análisis FTIR del polímero utilizado

Fuente: Laboratorio de Análisis Instrumental ESPOCH

Realizado por: Orozco Edgar, 2023

Tabla 4-1: Regiones analizadas del espectro IR

No.	Número de onda (cm ⁻¹)	% Transmitancia
1	694,248	89,5049
	752,102	93,931
2	1492,63	93.8577
3	1450,21	93.1949
4	2919,7	90.5431
5	3062,41	95.1578

Realizado por: Orozco Edgar, 2023

Se identificó que las bandas ubicadas en la región 694,248 cm⁻¹ y 752,102 cm⁻¹ indican la presencia de enlaces carbono-hidrogeno en sustituyentes del anillo bencénico, lo que sugiere la presencia de monómeros de estireno en la estructura del polímero. La banda de 1450,21 cm⁻¹ indica la existencia de enlaces simples carbono-carbono presentes en cadenas poliméricas. La banda ubicada de 1492,63 cm⁻¹ se atribuye a la presencia de enlaces dobles entre carbonos en el anillo bencénico. Por otro lado, la banda de 2919,7 cm⁻¹ se relaciona con los enlaces carbono-hidrogeno de las cadenas alifáticas, mientras que la banda de 3062,41 cm⁻¹ indica la presencia de enlaces carbono-hidrogeno en un grupo aromático. Este análisis FTIR es semejante a los realizados por Young y Lovell, (2008, p.352-354).

4.1.2. Resultados de pruebas de pirólisis térmica de poliestireno

Los resultados muestran el proceso térmico llevado a cabo en las tres pruebas de pirólisis del poliestireno. En la Ilustración 4-2 se grafican las temperaturas registradas en el reactor Batch durante un tiempo de residencia de 261 minutos, los datos se detallan en el ANEXO A. Se puede observar que las temperaturas en el reactor experimentaron un aumento gradual, alcanzando finalmente el punto de control o setpoint configurado en el equipo (425 °C), las oscilaciones posteriores se deben a la histéresis que ejecuta el control on-off del sistema.

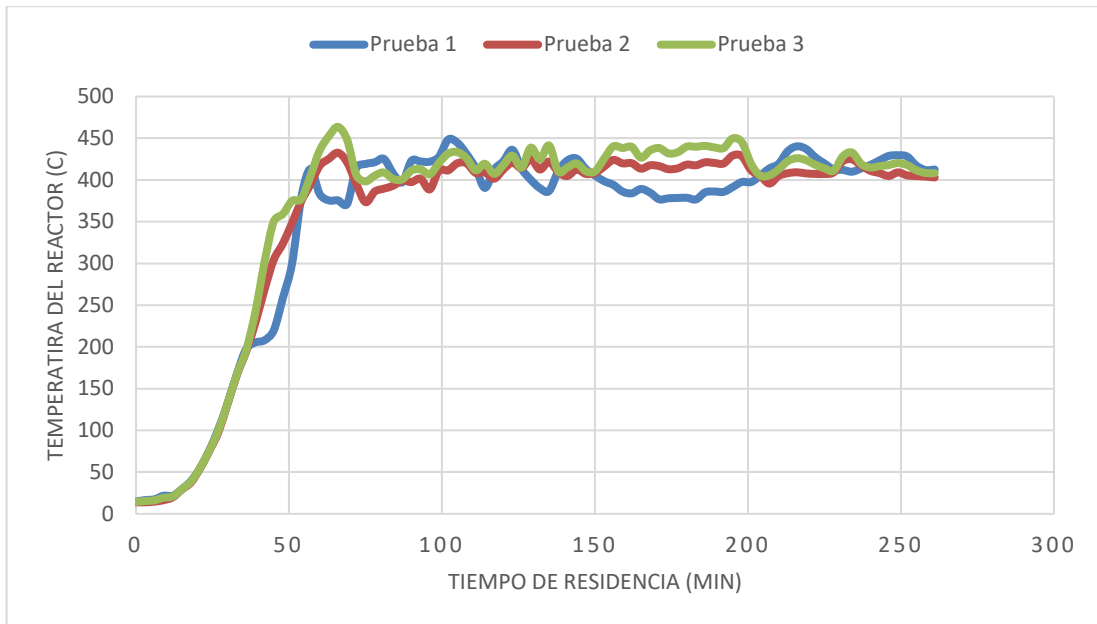


Ilustración 4-2: Temperaturas del reactor en las pruebas de pirólisis

Realizado por: Orozco Edgar, 2023

4.1.2.1. *Análisis estadístico de temperaturas en las pruebas de pirólisis*

Se realizó un análisis estadístico para determinar posibles diferencias significativas en las condiciones de temperaturas de reacción en las tres pruebas de pirólisis. Se utilizó un análisis de varianza (ANOVA) con los datos presentados en el ANEXO A y se resumen en la Tabla 4-2. En el análisis se planteó como hipótesis nula que todas las medias son iguales y como hipótesis alterna que no todas las medias son iguales, con un nivel de significancia del 0,05.

Tabla 4-2: Resumen de datos de las temperaturas del reactor

Grupos	Cuenta	Promedio	Varianza
Prueba 1	88	347,92	16123,48
Prueba 2	88	352,90	15814,71
Prueba 3	88	364,57	16793,58

Realizado por: Orozco Edgar, 2023

Los resultados del análisis ANOVA se indican en la Tabla 4-3. De este análisis se concluye que se acepta la hipótesis nula, lo que indica que no existe diferencias significativas entre las medias de las pruebas de pirólisis debido a que el valor F (0,40) es menor que su valor crítico (3,03). Esto se refuerza con el valor P (0,67) que supera el nivel de significancia establecido (0,05).

Tabla 4-3: Resultados ANOVA para igualdad de medias de las temperaturas del reactor

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Valor P	Valor crítico para F
Entre grupos	12852,06	2	6426,03	0,40	0,67	3,03
Dentro de los grupos	4239663,84	261	16243,92			
Total	4252515,89	263				

Realizado por: Orozco Edgar, 2023

Además, para comparar las diferencias de medias entre las pruebas, se realizó una comparación múltiple con el método de Tukey, como se indica en la Ilustración 4-3. Los resultados de este análisis también confirman que no existen diferencias significativas entre ninguna de las pruebas de pirólisis. Los resultados sugieren que se logró mantener las condiciones de temperatura controladas e idénticas para las tres pruebas de pirólisis realizadas.

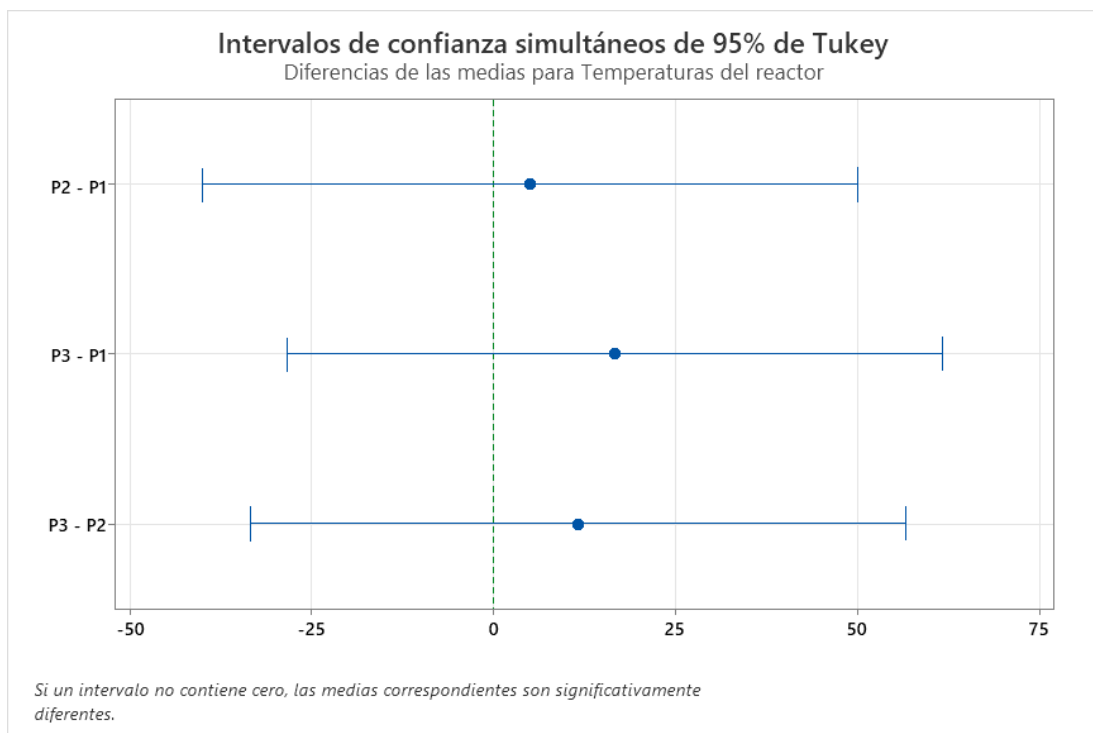


Ilustración 4-3: Comparación de temperaturas del reactor por el método Tukey

Realizado por: Orozco Edgar, 2023

4.1.3. Obtención de fracciones pirolíticas

Los rendimientos de los productos obtenidos en cada prueba de pirólisis realizada se indican en la Ilustración 4-4, se observa que hay un mayor rendimiento de la fracción líquida que posee un rendimiento promedio de 68,85% y por otra parte los rendimientos de los otros productos son muy inferiores. Estos resultados son consistentes con investigaciones previas como la de Lu et al. (2021, pp.3-4), donde el rendimiento oscila los 76,24 % , sin embargo, los datos obtenidos deben ser evaluados para confirmar la existencia de diferencias significativas de las fracciones líquidas, gaseosas y sólidas en las pruebas de pirólisis del poliestireno.

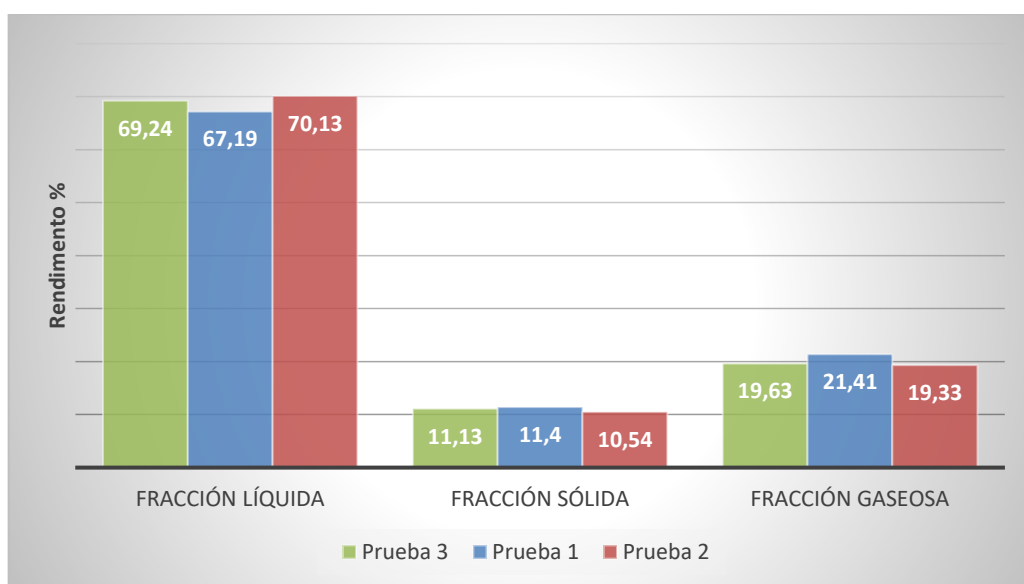


Ilustración 4-4: Rendimientos de las fracciones pirolíticas obtenidas

Realizado por: Orozco Edgar, 2023

4.1.3.1. Análisis estadístico de los rendimientos de las fracciones pirolíticas obtenidas

Los datos mostrados en la Tabla 4-4 indican un rendimiento promedio de la fracción líquida de 68,85%, fracción sólida de 11,02% y la fracción gaseosa de 20,12%, para justificar la predominancia de los productos líquidos se aplicó un análisis ANOVA con el fin de determinar las posibles diferencias entre los rendimientos de los distintos productos pirolíticos obtenidos. Se planteó como hipótesis nula que todas las medias son iguales, mientras que la hipótesis alternativa consideró que no todas son iguales, con un nivel de significancia de 0,05.

Tabla 4-4: Resumen de datos de rendimientos de los productos de pirólisis

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Fracción líquida	3	206,56	68,85	2,27
Fracción sólida	3	33,07	11,02	0,19
Fracción gaseosa	3	60,37	20,12	1,26

Realizado por: Orozco Edgar, 2023

Los resultados del análisis se indican en la Tabla 4-5 , se puede apreciar que las medias entre las fracciones de productos líquidos, sólidos y gaseosos tienen diferencias significativas ya que el valor F (2332,76) es mayor a su valor crítico (5,14). Esto se refuerza mediante la Ilustración 4-5, donde se observa por el método de Tukey que existe gran diferencia entre los productos comparados con la fracción líquida, dado esta fracción se obtiene en mayor cantidad.

Tabla 4-5: Análisis ANOVA para la media de los productos pirolíticos

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Valor p	Valor crítico para f
Entre grupos	5801,73	2	2900,87	2332,76	0,00	5,14
Dentro de los grupos	7,46	6	1,24353			
Total	5809,19	8				

Realizado por: Orozco Edgar, 2023

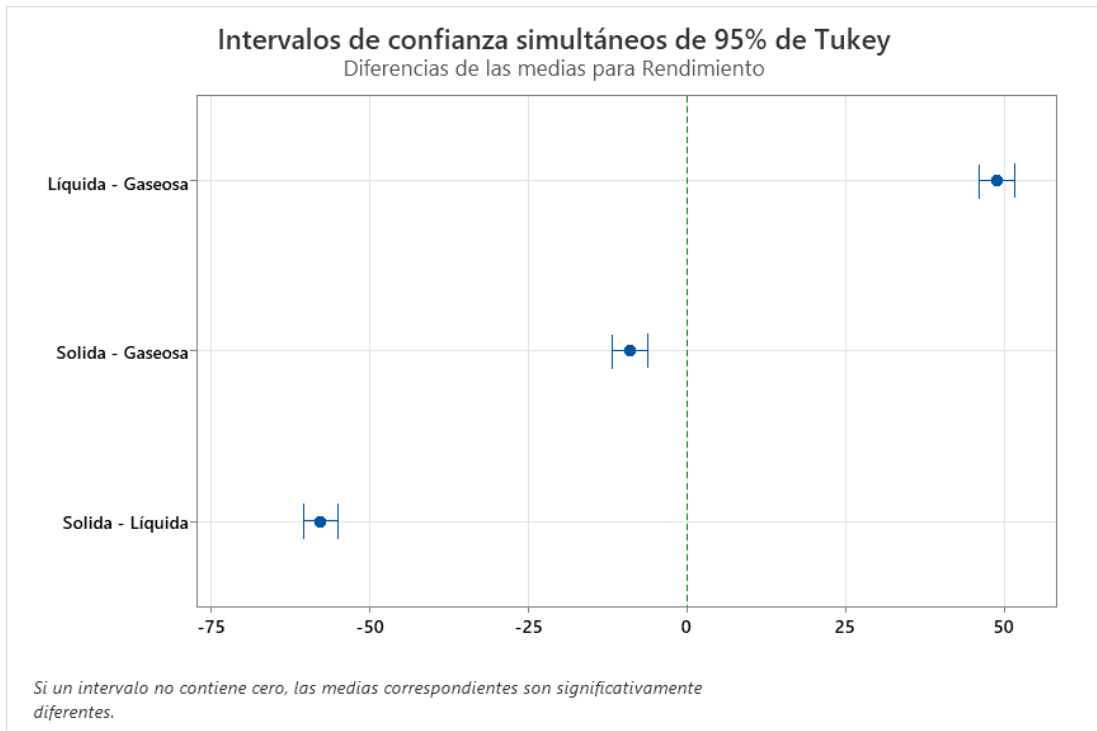


Ilustración 4-5: Comparación de medias entre los productos líquidos, sólidos y gaseosos

Realizado por: Orozco Edgar, 2023

Por otra parte, en la Ilustración 4-6 se muestra una comparación de las desviaciones estándar en el rendimiento de los productos pirolíticos en cada prueba, se evidencia que, para cada prueba de pirólisis, el rendimiento de las fracciones no presenta diferencias significativas, por lo que se concluye que la cantidad de poliestireno alimentado en cada prueba no afecta los rendimientos de los productos líquidos, sólidos y gaseosos finales.

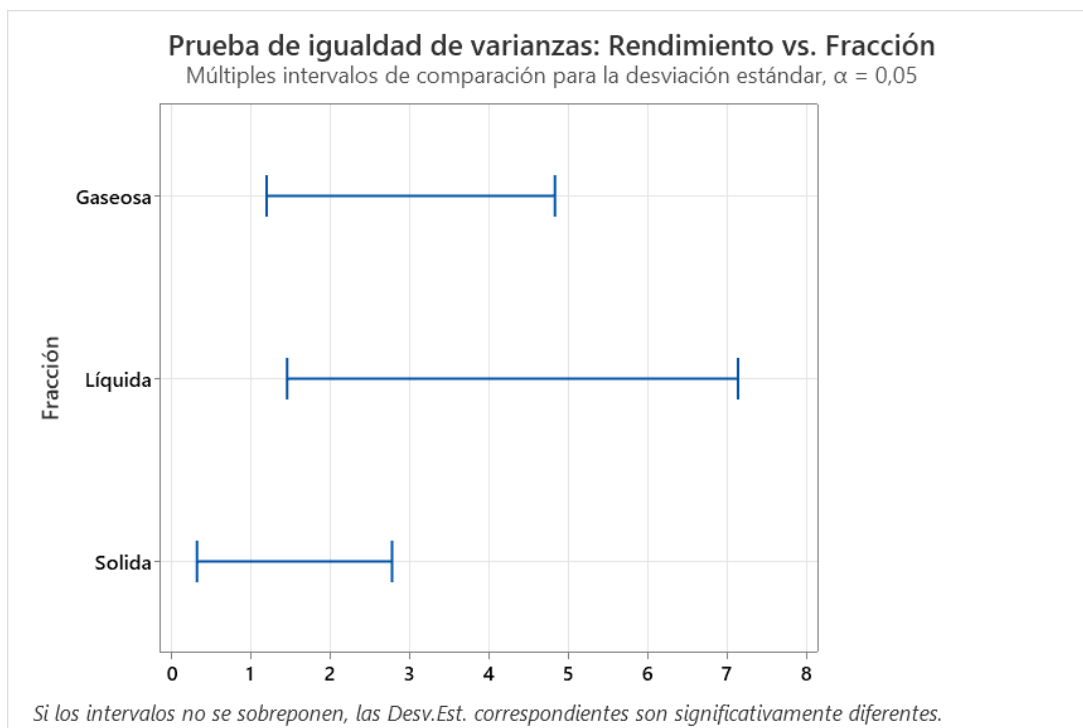


Ilustración 4-6: Comparación de desviaciones estándar de los productos pirolíticos

Realizado por: Orozco Edgar, 2023

4.1.4. Determinación de propiedades fisicoquímicas de la fracción líquida

4.1.4.1. Determinación de la densidad

La determinación de la densidad se llevó a cabo mediante el enfriamiento de la fracción líquida a la temperatura de 60 °F. Para obtener los datos necesarios, se utilizó un picnómetro y la utilización de la Ecuación 3-1, como se indica a continuación:

$$\rho_{\text{densidad}} = \frac{w_2 - w_1}{v}$$

$$\rho_{\text{densidad}} = \frac{33,4039 \text{ g} - 24,0689 \text{ g}}{10,167 \text{ mL}}$$

$$\rho_{\text{densidad}} = 0,91817 \text{ g/ml}$$

La densidad de la fracción líquida obtenida, 0,91817 g/ml, indica que es una sustancia menos densa que el agua, además se pudo apreciar una disminución periódica de esta medida según aumenta la temperatura.

4.1.4.2. Densidad relativa

La densidad relativa o gravedad específica fue determinada a la temperatura de 60 °F, usando el dato de densidad de referencia del agua a 60 °F de 0,999012 g/mL, según lo reportado por la norma ASTM D1217 (2003). El cálculo se realizó con la Ecuación 3-2.

$$\begin{aligned}\rho_{\text{relativa}} &= \frac{\text{densidad}(\rho)}{\rho_{\text{Referencia H}_2\text{O}}} \\ \rho_{\text{relativa}} &= \frac{0,91817 \text{ g/mL}}{0,999012 \text{ g/mL}} \\ \rho_{\text{relativa}} &= 0,91908\end{aligned}$$

La densidad relativa de la fracción líquida es de 0,91908, según Wauquier (2004, p.94) la importancia de esta medida se relaciona directamente con la determinación de la densidad API y otras características de mezclas de hidrocarburos.

4.1.4.3. Densidad API

La densidad API de la fracción líquida fue determinada mediante la norma ASTM D1298 a una temperatura de 64 °F, por lo que se corrigió a la temperatura estándar de 60°F mediante uso de tablas de corrección presentadas en el ANEXO B.

$$\text{Densidad API a } 64^\circ\text{F} = 23,2$$

Para obtener los datos precisos de corrección, se usó interpolación lineal con los datos disponibles en las tablas de corrección.

$$\begin{aligned}y &= y_0 + \left(\frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0}\right)(x - x_0) \\ y &= 22,8 + \left(\frac{23,8 - 22,8}{24 - 23}\right)(23,2 - 23) \\ y &= 23 \\ \text{Densidad API a } 60^\circ\text{F} &= 23\end{aligned}$$

La fracción líquida, al tener una densidad de 23 API puede clasificarse dentro de la categoría de crudos medios (Tabla 4-6), este tipo de crudos son característicos por tener propiedades moderadas, lo cual refuerza el análisis de su densidad relativa.

Tabla 4-6: Categorías de hidrocarburos en base a su densidad API

Densidad API	Categoría
30-50	Crudos ligeros
20-30	Crudos medios
10-20	Crudos pesados
<10	Crudos superpesados

Fuente: (Wauquier, 2004, p.314)

Realizado por: Orozco, Edgar, 2023

4.1.4.4. Viscosidad cinemática

La viscosidad cinemática se determinó a 40 °C en base a la norma ASTM D1298. Se obtuvo un tiempo promedio del flujo de la muestra de 13,37s mediante un viscosímetro capilar con un factor de viscosidad de 0,1015 mm²/s², posteriormente se realizó el cálculo con la Ecuación 3-3.

$$v = C_{\text{viscosímetro}} * t_{\text{promedio}}$$

$$v = 0,1015 \frac{\text{mm}^2}{\text{s}^2} \times 13,37\text{s}$$

$$v = 1,357 \frac{\text{mm}^2}{\text{s}} = 1,357 \text{ cSt}$$

Una comparación con los requerimientos de combustibles diésel comercializados en Ecuador, indica que la fracción líquida tiene una viscosidad cinemática (1,357 cSt) que cumple con la categoría de Diesel 1 (Tabla 4-7), este es un tipo de combustible constituido por fracciones intermedias de petróleo y es usado comúnmente en aparatos de combustión externa como calderas, incineradores y hornos industriales (INEM, 2021,p.2).

Tabla 4-7: Requerimientos de viscosidad cinemática para combustibles diésel

Categoría	Viscosidad Cinemática 40 °C en cSt	
	Mín	Max
Diesel 1	1,3	3
Diesel 2	2	5
Diesel Premium	2	5

Fuente:(INEM, 2021,p.3)

Realizado por: Orozco, Edgar, 2023

4.1.4.5. Índice de refracción

Se determinó del índice de refracción utilizando un refractómetro modelo KEM RA-620. La medición se realizó a una temperatura de 21 °C obteniendo un valor de 1,54066, y posteriormente se corrigió la lectura a una temperatura de referencia a 20 °C mediante la Ecuación 3-4.

$$\begin{aligned}n_{D20} &= n_{Dt} + (0,00045)(t - 20^{\circ}\text{C}) \\n_{D20} &= 1,54066 + (0,00045)(21 - 20^{\circ}\text{C}) \\n_{D20} &= 1,54111\end{aligned}$$

En muchos casos los resultados de índice de refracción son usados para identificar diferencias en la calidad de los productos, de manera más efectiva que otros métodos, además a través de análisis de diversos hidrocarburos, se ha establecido correlaciones para la determinación de porcentajes de carbonos aromáticos, parafínicos y nafténicos (Wauquier, 2004,p.42).

4.1.4.6. Punto de inflamación

La determinación del punto de inflamación o *flash point* se llevó a cabo utilizando un equipo manual de copa cerrada Pensky-Martens, siguiendo los procedimientos establecidos en la norma ASTM D93. Se verificó que el punto de inflamación no fuera a temperatura ambiente (21°C) y, posteriormente, se realizó la prueba que resultó en un punto de inflamabilidad de 25°C. Se realizó la corrección del resultado a la presión estándar de 760 mmHg, mediante la Ecuación 3-5, considerando la presión barométrica del ambiente de 542 mmHg.

$$\begin{aligned}\text{Punto de inflamación corregido} &= C + 0,0033(760 - P) \\ \text{Punto de inflamación corregido} &= 25 + 0,033(760 - 542) \\ \text{Punto de inflamación corregido} &= 32,19^{\circ}\text{C}\end{aligned}$$

El punto de inflamación es una propiedad importante para productos petrolíferos como el gasóleo o diésel, ya que proporciona información relevante sobre su seguridad en el transporte y almacenamiento. Al tener un punto de inflamación más bajo que los requerimientos de los combustibles diésel comerciales (Tabla 4-8), se indica que la fracción líquida analizada contiene más compuestos ligeros, lo que la hace más volátil. Esta característica se relaciona con la presencia de componentes que tienen una tendencia a evaporarse más fácilmente, lo que puede tener implicaciones en su manipulación y uso (Wauquier, 2004,pp 247-248).

Tabla 4-8: Comparación de puntos de inflamación con combustibles diésel

	Fracción líquida	Diesel 1	Diesel 2	Diesel premium
Punto de inflamación (°C)	32,19	40	51	51

Fuente:(INEM, 2021,p.3)

Realizado por: Orozco, Edgar, 2023

4.1.4.7. Curva de destilación ASTM

La destilación atmosférica se llevó a cabo siguiendo la norma ASTM D86, registrando las temperaturas con su respectivo porcentaje de volumen destilado. Con el fin de estandarizar las mediciones a 760 mmHg, se realizó una corrección a cada temperatura registrada, considerando una presión del ambiente de 546 mmHg. Las temperaturas corregidas se determinaron mediante las ecuaciones y se muestran en la Tabla 4-9.

A continuación, se presenta como ejemplo de cálculo para la determinación de temperaturas corregidas , la temperatura corregida al 0% de recuperación. Este punto indica la temperatura en que se destila la primera gota de la fracción líquida.

$$\Delta T = 0,00012 * (760 - P) * (273 + T_r)$$

$$\Delta T = 0,00012 * (760 - 546) * (273 + 121,6)$$

$$\Delta T = 10,1$$

$$T_{\text{corregida}} = \Delta T + T_{\text{registrada}}$$

$$T_{\text{corregida}} = 10,1 + 121,6 = 131,7 \text{ } ^\circ\text{C}$$

Tabla 4-9: Resultados de destilación ASTM D86 de la fracción líquida de pirólisis

Porcentaje de recuperación (%V)	Temperatura registrada (°C)	Diferencia de temperaturas (ΔT)	Temperaturas corregidas (°C)
0	121,6	10,1	131,7
5	129,0	10,3	139,3
10	130,0	10,3	140,3
20	131,8	10,4	142,2
30	132,1	10,4	142,5
40	135,1	10,5	145,6
50	137,4	10,5	147,9
60	143,1	10,7	153,8
70	269,2	13,9	283,1
80	302,5	14,8	317,3
90	309,8	15,0	324,8

Realizado por: Orozco Edgar, 2023

Con el fin de comparar las características de la fracción líquida de pirólisis de poliestireno como combustible, se realizó la destilación atmosférica de los combustibles comerciales, Extra (gasolina) y diésel, las muestras de estos combustibles fueron obtenidas aleatoriamente en la ciudad de Riobamba.

Las destilaciones se realizaron con el mismo procedimiento en base a la norma ASTM D86 y las temperaturas fueron estandarizadas a 760 mmHg, considerando la presión del ambiente de 546 mmHg. En la Tabla 4-10 se muestra la destilación atmosférica de la gasolina Extra.

Tabla 4-10: Resultados de destilación ASTM D86 de la gasolina Extra

Porcentaje de recuperación (%V)	Temperatura registrada (°C)	Diferencia de temperaturas (ΔT)	Temperaturas corregidas (°C)
0	35,2	7,9	43,1
5	47,5	8,2	55,7
10	53,4	8,4	61,8
20	64,35	8,7	73,0
30	73,6	8,9	82,5
40	84,7	9,2	93,9
50	98,3	9,5	107,8
60	111,7	9,9	121,6
70	125,5	10,2	135,7
80	138,5	10,6	149,1
90	156,6	11,0	167,6

Realizado por: Orozco Edgar, 2023

En la Tabla 4-11 se presenta los datos de la destilación atmosférica del combustible diésel con sus respectivas temperaturas corregidas.

Tabla 4-11: Resultados de destilación ASTM D86 del combustible diésel

Porcentaje de recuperación (%V)	Temperatura registrada (°C)	Diferencia de temperaturas (ΔT)	Temperaturas corregidas (°C)
0	106,1	9,7	115,8
5	174,4	11,5	185,9
10	192,5	12,0	204,5
20	216,4	12,6	229,0
30	233,3	13,0	246,3
40	249,7	13,4	263,1
50	259,6	13,7	273,3
60	270,3	14,0	284,3
70	287,1	14,4	301,5
80	294,5	14,6	309,1
90	303,34	14,8	318,1

Realizado por: Orozco Edgar, 2023

En la Ilustración 4-7 se presentan las curvas de destilación de la fracción líquida de pirólisis, así como las de los combustibles de gasolina y diésel. Estas curvas de destilación son representaciones gráficas que muestran las diferencias en los rangos de ebullición de los distintos compuestos presentes en cada muestra analizada.

En el análisis de las curvas, se puede apreciar notables diferencias en los puntos de ebullición de los compuestos entre la fracción líquida de pirólisis y la gasolina, indicando que la fracción líquida de pirólisis contiene compuestos más pesados que tienden a ebullicir a temperaturas más elevadas en comparación con la gasolina, que está compuesta principalmente por hidrocarburos más livianos. Por otro lado, al observar la curva de destilación del diésel, se nota que presenta temperaturas de ebullición inicial y final similares, lo que indica que sus hidrocarburos más livianos y pesados presentes en ambos tienden a ser similares. Sin embargo, sus temperaturas intermedias no siguen una relación aparente y muestran una distribución más dispersa.

De la comparación, se evidencia que las curvas de destilación reflejan características distintivas de cada tipo de combustible debido a la diferencias en su composición química, la fracción líquida de pirólisis muestra tener diversos tipos de hidrocarburos, formando una mezcla compleja.

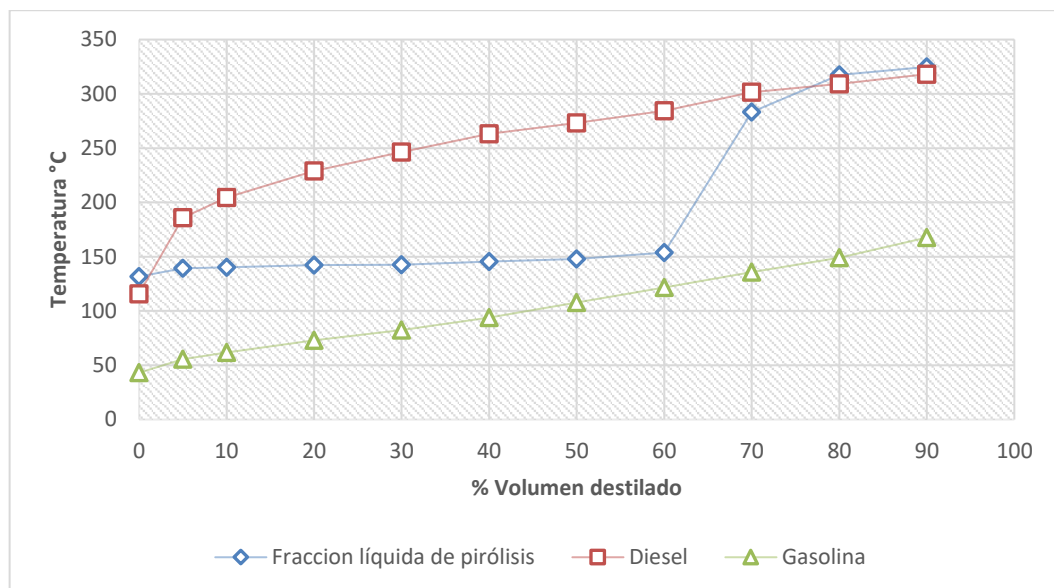


Ilustración 4-7: Curvas de destilación de la fracción líquida y combustibles comerciales

Realizado por: Orozco Edgar, 2023

La destilación es un proceso de separación de los diferentes componentes del petróleo crudo en función de sus puntos de ebullición. Los productos petroleros se separan en diferentes fracciones a lo largo de una curva de destilación. En la Ilustración 4-8, se presenta una comparación

simplificada de la curva de destilación de la fracción líquida de pirólisis, con intervalos aproximados de ebullición de varios productos petroleros según Vargas y Olaya, (2012, p.20).

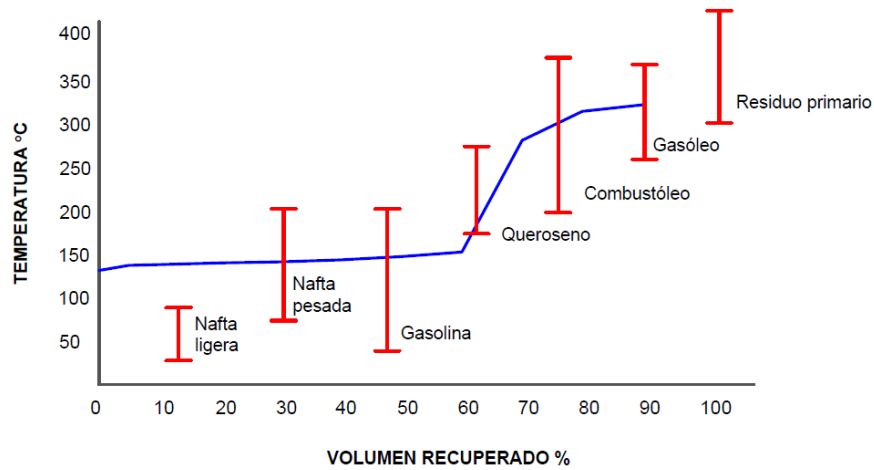


Ilustración 4-8: Comparación de la curva de destilación con intervalos de ebullición de productos petrolíferos

Realizado por: Orozco Edgar, 2023

En la curva de destilación, se puede observar que el comienzo de la destilación se da a los 137,1°C y mostrando un comportamiento semilineal en las temperaturas de ebullición en los intervalos de nafta pesada y la gasolina. Sin embargo, a medida que se destila aproximadamente el 60% del volumen total, se produce aumento en la temperatura de ebullición, llevándola a entrar en los intervalos de ebullición de productos como el queroseno, el combustóleo y el gasóleo. Este aumento súbito de temperatura se debe a la naturaleza multicomponente de la fracción líquida. Se evidenció dicha característica al separar los productos destilados en rangos de 200 °C y 300 °C, como se indica en la Ilustración 4-9.

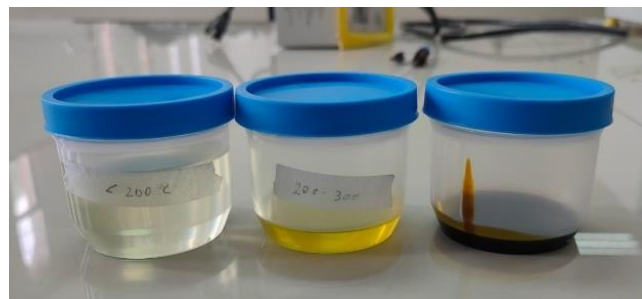


Ilustración 4-9: Separación de componentes de la fracción líquida

Realizado por: Orozco Edgar, 2023

4.1.4.8. Índice de cetano calculado

El índice de cetano calculado se determinó en base a la norma ASTM D4737 ,usando los resultados obtenidos de la densidad y la curva de destilación ASTM D86 de la fracción líquida en la Ecuación 3-7 como se detalla a continuación:

$$\begin{aligned}T_{10N} &= 135,1 - 215 = -79,9 \\DN &= 0,918 - 0,85 = 0,068 \\B &= [e^{(-3,5)(0,068)}] - 1 = -0,212 \\T_{50N} &= 145,4 - 260 = -114,6 \\T_{90N} &= 145,4 - 310 = 13,8 \\CCI &= 45,2 + (0,08992)(-79,9) + [0,131 + (0,901)(-0,212)][-114,6] + [0,0523 - (0,420) \\&(-0,212)][13,8] + [0,00049][(-79,9)^2 - (13,8)^2] + (107)(-0,212) + (60)(-0,212)^2 \\CCI &= 29,94\end{aligned}$$

Al igual que el índice de octano indica la calidad de la gasolina en los motores de combustión, el índice de cetano muestra la calidad de los gasóleos o diésel para su uso en motores, y afecta aspectos como el arranque en frío, el ruido y las emisiones de contaminantes (Wauquier, 2004, p. 176).

El índice de cetano obtenido para la fracción líquida (29,94) indica una calidad relativamente baja para su uso en motores diésel. Al compararlo con otros combustibles diésel comerciales que tienen un requerimiento mínimo del índice de cetano de 45 según la norma INEN 1489 (2021, p.3), se sugiere que la calidad de la fracción líquida como combustible para motores diésel es inferior y necesita mejoras.

4.1.4.9. Punto de anilina

La determinación del punto de anilina se realizó mediante un sistema de laboratorio acoplado al método A de la norma ASTM D611, siguiendo los procedimientos establecidos. En la Ilustración 4-10 se puede observar cómo la fracción líquida es completamente miscible con la anilina a temperatura ambiente (21°C). Este comportamiento sugiere que el punto de anilina es inferior a la temperatura ambiente.



Ilustración 4-10: Análisis del punto de anilina

Realizado por: Orozco Edgar, 2023

El comportamiento higroscópico de la anilina dificulta el enfriamiento de la muestra para el análisis experimental, por lo cual se requiere estimar el punto de anilina mediante correlaciones con el índice de cetano según Wauquier, (2004,p. 218) que se indica con la siguiente ecuación:

$$\text{Punto de anilina} = \text{CCI} + 15,5$$

Ecuación 4-1: Correlación del punto de anilina

Donde:

Punto de anilina: temperatura en °C

CCI: índice de cetano calculado

A continuación, se muestra el cálculo del punto de anilina mediante la Ecuación 4-1 y el valor del índice de cetano calculado de 29,94.

$$\text{Punto de anilina} = 29,94 - 15,5$$

$$\text{Punto de anilina} = 14,44 \text{ °C}$$

Según Wauquier (2004, p.281) mientras más bajo sea el punto de anilina, más compuestos aromáticos presenta la mezcla de hidrocarburos. El resultado obtenido (14,44 °C), refuerza la afirmación de presencia de compuestos aromáticos en la fracción líquida de pirólisis, debido a la

fuerte afinidad de la anilina con la muestra al formar una mezcla homogénea, comportamiento observado de forma experimental.

4.1.4.10. Análisis de propiedades fisicoquímicas de la fracción líquida de pirólisis

Los resultados obtenidos de las propiedades fisicoquímicas de la fracción líquida de pirólisis (Tabla 4-12), proporcionan información relevante sobre su composición y características. La densidad relativa de 0,91908 y API de 23 indican que la muestra puede clasificarse como un crudo medio, caracterizado por tener propiedades moderadas. Además, la viscosidad cinemática de 1,357 cSt y el índice de cetano calculado de 29,94 sugieren que la fracción líquida tiende a tener un comportamiento cercano al gasóleo o diésel, sin embargo, se requiere de mejoras en estas propiedades para cumplir con los requerimientos de este tipo de combustible.

Por otro lado, el punto de inflamación de 32,19 °C a más de evaluar la seguridad en el manejo y almacenamiento del líquido, indica la presencia de compuestos volátiles que mediante la curva de destilación se observó la presencia de diferentes hidrocarburos, formando una mezcla compleja, entre los cuales por medio del punto de anilina de 14,44 °C indica la presencia de compuestos aromáticos.

Tabla 4-12: Propiedades de la fracción líquida de pirólisis

Propiedad	Unidad	Fracción líquida	Norma
Densidad a 60 °F	g/ml	0,91817	ASTM D1217
Densidad relativa	-	0,91908	ASTM D1217
Densidad API	°API	23	ASTM D1298
Viscosidad Cinemática a 40 °C	cSt	1,357	ASTM D445
Índice de refracción	-	1,5411	ASTM D1218
Punto de inflamación a 760 mmHg	°C	32,19	ASTM D93
Destilación al 10%	°C	140,30	ASTM D86
Destilación al 50%	°C	147,90	ASTM D86
Destilación al 90%	°C	324,80	ASTM D86
Índice de cetano calculado	-	29,94	ASTM D4737
Punto de anilina	°C	14,44	Wauquier, (2004,p. 281)

Realizado por: Orozco Edgar, 2023

4.1.5. *Parámetros termodinámicos críticos y peso molecular*

Los parámetros termodinámicos críticos se determinaron utilizando el método propuesto por Bahadori et al. (2016, pp.2-6). Este método se basa en el análisis de los datos de curva de destilación y densidad relativa.

El método empleado requirió determinar el punto de ebullición promedio molar (MABP), cuyo valor fue obtenido con las gráficas de corrección según Jones y Pujadó, (2006,p. 29), usando el punto de ebullición promedio volumétrico y la pendiente de destilación que fueron calculados como se detallan a continuación:

$$VABP = \frac{T_{10} + T_{30} + T_{50} + T_{70} + T_{90}}{5}$$

Ecuación 4-2: Cálculo del VABP

Donde:

VABP: Volumetric Average Boiling Point, en °F

T₁₀: Temperatura corregida al 10% destilado, en °F

T₃₀: Temperatura corregida al 30% destilado, en °F

T₅₀: Temperatura corregida al 50% destilado, en °F

T₇₀: Temperatura corregida al 70% destilado, en °F

T₉₀: Temperatura corregida al 90% destilado, en °F

$$VABP = \frac{284,54 + 288,50 + 298,22 + 541,58 + 616,64}{5}$$

$$VABP = 405,90 \text{ °F}$$

A continuación, se determina el valor de la pendiente de destilación mediante la Ecuación 4-3, cuyo valor es imprescindible para la utilización de las tablas de correlación del MABP.

$$P_{\text{destilación}} = \frac{(T_{90} - T_{10})}{80}$$

Ecuación 4-3: Cálculo de

P_{destilación}

Donde:

P_{destilación}: pendiente de destilacion ASTM, en °F/%

T₁₀: Temperatura corregida al 10% destilado, en °F

T₉₀: Temperatura corregida al 90% destilado, en °F

$$P = \frac{616,64 - 541,58}{80}$$

$$P = 4,15 \text{ °F/\%}$$

El factor de corrección para el VABP fue determinado a 405,90 °F y 4,15 °F/% con el diagrama de corrección de Jones y Pujadó (2006,p. 29), disponible en el ANEXO C. El valor de MABP se obtuvo al añadir algebraicamente el factor de corrección al VABP y expresado en grados Kelvin, como se indica a continuación:

$$\text{MABP} = \text{VABP} + f_{\text{corrección}}$$

Ecuación 4-4: Cálculo del
MABP

Donde:

MABP: molal average boiling point, en °F

VABP: volumetric average boiling point, en °F

$f_{\text{corrección}}$: factor de corrección del VABP, en °F

$$\text{MABP} = 405,90 - 52$$

$$\text{MABP} = 353,90 \text{ °F} = 451,98 \text{ K}$$

A continuación, se indica el cálculo del factor de correlación con la Ecuación 3-9 y los valores de densidad específica a 60 °F y MABP expresado en kelvin de la fracción líquida de pirólisis.

$$X = SG_{60} * \text{MABP}$$

$$X = 0,91908 * 451,98$$

$$X = 451,98$$

Como ejemplo de cálculo se determinó el peso molecular, usando los coeficientes a,b,c,d para este parámetro y el factor de correlación X en la Ecuación 3-10.

$$Y = a + (b * X) + (c * X^2) + (d * X^3)$$

$$Y = 63,81617892759220 - 0,2095157494730(451,98) + 0,0013325646670(451,98)^2 - 0,0000003565738(451,98)^3$$

$$Y = 181,17 \text{ g/mol}$$

Para el cálculo del factor acéntrico, presión , temperatura y volumen críticos se usó el mismo procedimiento con sus respectivos coeficientes, los resultados se muestran en la Tabla 4-13.

Tabla 4-13: Parámetros termodinámicos críticos

Peso molecular (g/mol)	Presión Crítica (kPa)	Temperatura Crítica (K)	Volumen Crítico (m³/kgmol)	Factor acéntrico
181,174	2031,89	695,38	1,03	0,51

Realizado por: Orozco Edgar, 2023

Las propiedades obtenidas brindan información sobre el comportamiento de la fracción líquida en condiciones extremas y nos permiten comprender mejor las moléculas que la componen. En particular, el peso molecular (181,174 g/mol) influye en otras propiedades como la solubilidad en agua, cuya relación es inversamente proporcional, es decir la solubilidad disminuye cuando el peso molecular aumenta, tal como menciona Wauquier (2004, p. 166). Además, se ha observado que los productos petrolíferos con mayor presencia de compuestos aromáticos tienden a tener pesos moleculares más bajos en comparación con aquellos derivados que contienen hidrocarburos parafínicos, los cuales tienen pesos moleculares en el rango medio de 600 a 800 g/mol (Wauquier, 2004, p. 283).

Por otra parte, las propiedades críticas de temperatura crítica (695,38 K) indica que este compuesto puede existir como líquido a temperaturas relativamente altas con una presión de 2031,89 kPa y volumen crítico de 1,03 m³/kgmol. Estas propiedades, junto con el factor acéntrico de 0,51 muestran el comportamiento termodinámico del fluido. Según Coleman (2021, pp. 44-47) estas propiedades son necesarias en el análisis de ecuaciones de presión de vapor y ecuaciones de estado, que son componentes esenciales en la aplicación de modelos computacionales, estos modelos son de gran utilidad en el diseño de columnas de destilación, un proceso industrial que puede conllevar elevados costos. Por lo tanto, la determinación de estas propiedades es de gran beneficio en la industria del gas y petróleo.

4.1.6. Resultados de análisis GC-MS

Del análisis de la fracción líquida con la técnica de cromatografía de gases acoplada a espectrometría se obtuvo el cromatograma presentado en la Ilustración 4-11, se puede apreciar la detección de diversos compuestos representados en formas de picos que relacionando el tiempo de retención desde que se inyectó la muestra hasta que se mide la respuesta del detector expresado en abundancia.

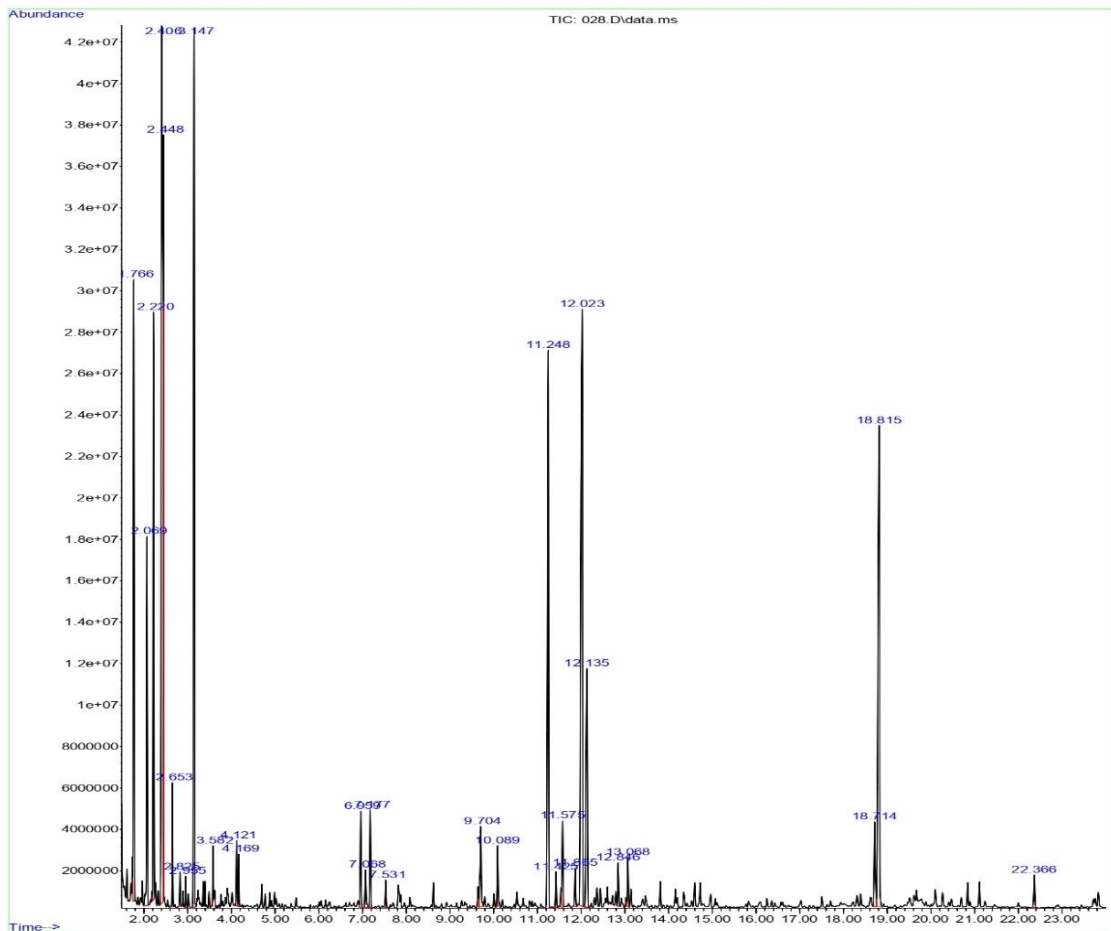


Ilustración 4-11: Cromatograma de la fracción líquida

Realizado por: Orozco Edgar, 2023

En la Tabla 4-14 se proporciona la información detallada del análisis GC-MS teniendo la detección de 29 moléculas identificadas con sus tiempos de retención característicos, además, se dispone de la probabilidad asociada a la identificación de cada molécula, la cual brinda una medida de la confianza en la precisión de los resultados y finalmente se muestran los porcentajes relativos de cada molécula respecto al área bajo la curva del cromatograma.

Tabla 4-14: Resultados de análisis GC-MS

N°	Tr (min)	Molécula identificada	Probabilidad (%)	Porcentaje relativo (%)
1	1,766	Toluene	66,7	6,896
2	2,069	2,4-Dimethyl-1-heptene	66,5	3,917
3	2,22	Benzene, 1,3-dimethyl-	38,1	6,839
4	2,406	Cyclopropylphenylmethane	38,3	17,845
5	2,448	Styrene	46,2	3,636
6	2,653	Benzene, (1-methylethyl)-	54,1	1,053
7	2,825	Benzene, 2-propenyl-	38,5	0,298
8	2,955	Benzaldehyde	82,4	0,308
9	3,147	α -Methylstyrene	35,8	10,591
10	3,582	Benzene, 2-propenyl-	20,3	0,456
11	4,121	1-Octanol, 3,7-dimethyl-	4,24	0,649
12	4,169	1-Octanol, 3,7-dimethyl-	4,35	0,508
13	6,959	2-Isopropyl-5-methyl-1-heptanol	5,94	1,138
14	7,068	2-Isopropyl-5-methyl-1-heptanol	6,53	0,544
15	7,177	1-Nonene, 4,6,8-trimethyl-	4,63	1,112
16	7,531	2-Isopropyl-5-methyl-1-heptanol	10,2	0,313
17	9,704	Bibenzyl	82,2	1,337
18	10,089	Benzene, 1,1'-(1-methyl-1,2-ethanediyl)bis-	65,9	0,709
19	11,248	Benzene, 1,1'-(1,3-propanediyl)bis-	96,2	9,19
20	11,425	1,2-Diphenylcyclopropane	46,7	0,441
21	11,575	Benzene, 1,1'-(1-methyl-1,3-propanediyl)bis-	23,4	1,08
22	11,865	(E)-Stilbene	29,6	0,5
23	12,023	Cyclopropylphenylmethane	21,2	13,369
24	12,135	Phenanthrene, 9,10-dihydro-1-methyl-	26,32	4,674
25	12,846	Benzene, 1,1'-(3-methyl-1-propene-1,3-diyl)bis-	14,7	0,529
26	13,068	Benzene, 1,1'-(1,5-hexadiene-1,6-diyl)bis-	19,4	0,621
27	18,714	Benzene, 1,1'-(1,3-propanediyl)bis-	52,1	1,436
28	18,815	alpha-phenyl-alpha-tropylacetaldehyde tosylhidrazo	16,4	9,536
29	22,366	1,4-Bis[4-(phenylethynyl)benzylideneamino]benzen	42,9	0,478

Realizado por: Orozco Edgar, 2023

4.1.6.1. Estructura química y clasificación de las moléculas identificadas

Las moléculas identificadas se clasificaron según sus estructuras químicas, observado que la mayoría de los compuestos son aromáticos, debido a la presencia de uno o varios anillos bencénicos en las moléculas analizadas. Debido a esta prevalencia de compuestos aromáticos, se

enfoca en primer lugar la clasificación de los hidrocarburos con esta característica. En total, se identificaron 17 hidrocarburos aromáticos, los cuales se representan en la Ilustración 4-12.

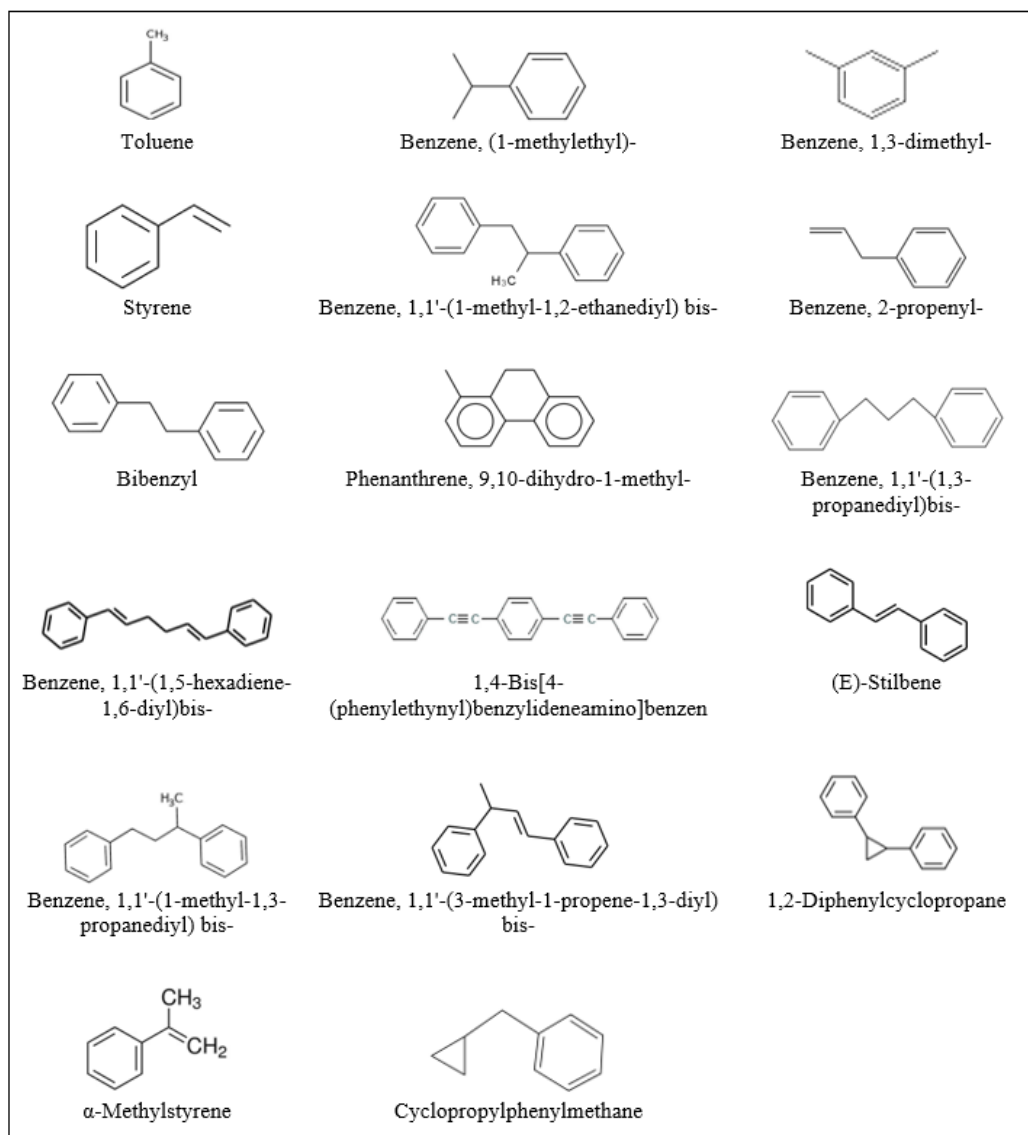


Ilustración 4-12: Compuestos aromáticos encontrados mediante GC-MS

Realizado por: Orozco Edgar, 2023

Por otra parte, en la ilustración 4-13 se clasifican los demás compuestos identificados en el análisis GC-MS. Se encontraron 2 hidrocarburos alifáticos insaturados, comúnmente conocidos como alquenos, estos compuestos se caracterizan por tener enlaces dobles en su estructura. Además, se identificaron compuestos orgánicos que contienen átomos diferentes de hidrógeno y oxígeno. En total, se encontraron 3 compuestos oxigenados en la muestra analizada. También se identificó un compuesto hetero atómico, el cual contiene átomos de nitrógeno y azufre en su molécula.

Hidrocarburos alifáticos insaturados, olefinas o alquenos		
1-Nonene, 4,6,8-trimethyl-	2,4-Dimethyl-1-heptene	
Compuestos oxigenados		
2-Isopropyl-5-methyl-1-heptanol	1-Octanol, 3,7-dimethyl-	Benzaldehyde
Compuestos orgánicos hetero atómicos		
alpha-phenyl-alpha-troprylacetaldehyde tosylhydrazone		

Ilustración 4-13: Clasificación de compuestos distintos a los aromáticos

Realizado por: Orozco Edgar, 2023

En la Ilustración 4-14 se resume el número de compuestos químicos identificados en cada familia, mostrando una notable superioridad de compuestos aromáticos, mientras que no se observa la presencia de compuestos nafténicos y parafínicos que son hidrocarburos cíclicos saturados, ni compuestos parafínicos, que son hidrocarburos alifáticos saturados.

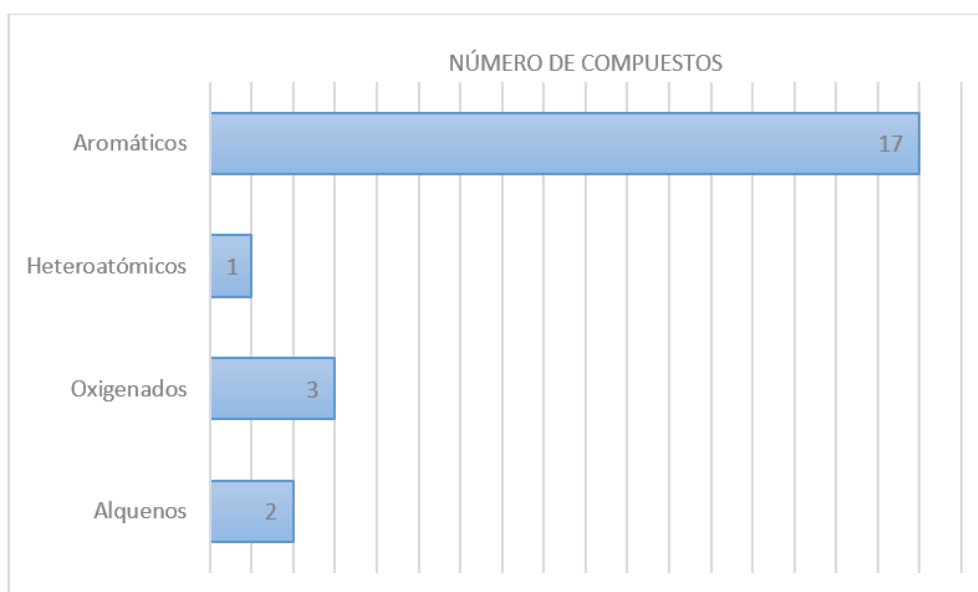


Ilustración 4-14: Cantidad de compuestos clasificados por familia

Realizado por: Orozco Edgar, 2023

4.1.6.2. Cantidad de compuestos presentes en la fracción líquida

En la Ilustración 4-15 se puede apreciar los porcentajes relativos de los compuestos identificados en la muestra, se destaca la una mayor abundancia de compuestos aromáticos, entre los que se incluyen el ciclopropil fenil metano, tolueno , metilestireno, entre otros. De manera notable el ciclopropil fenil metano es el compuesto prevalente en la fracción líquida analizada. Es importante mencionar que este compuesto se presenta en el cromatograma en dos picos con distintos tiempos de retención , lo que sugiere la existencia de compuestos con pesos moleculares semejantes o isómeros que el detector no es capaz de diferenciar.

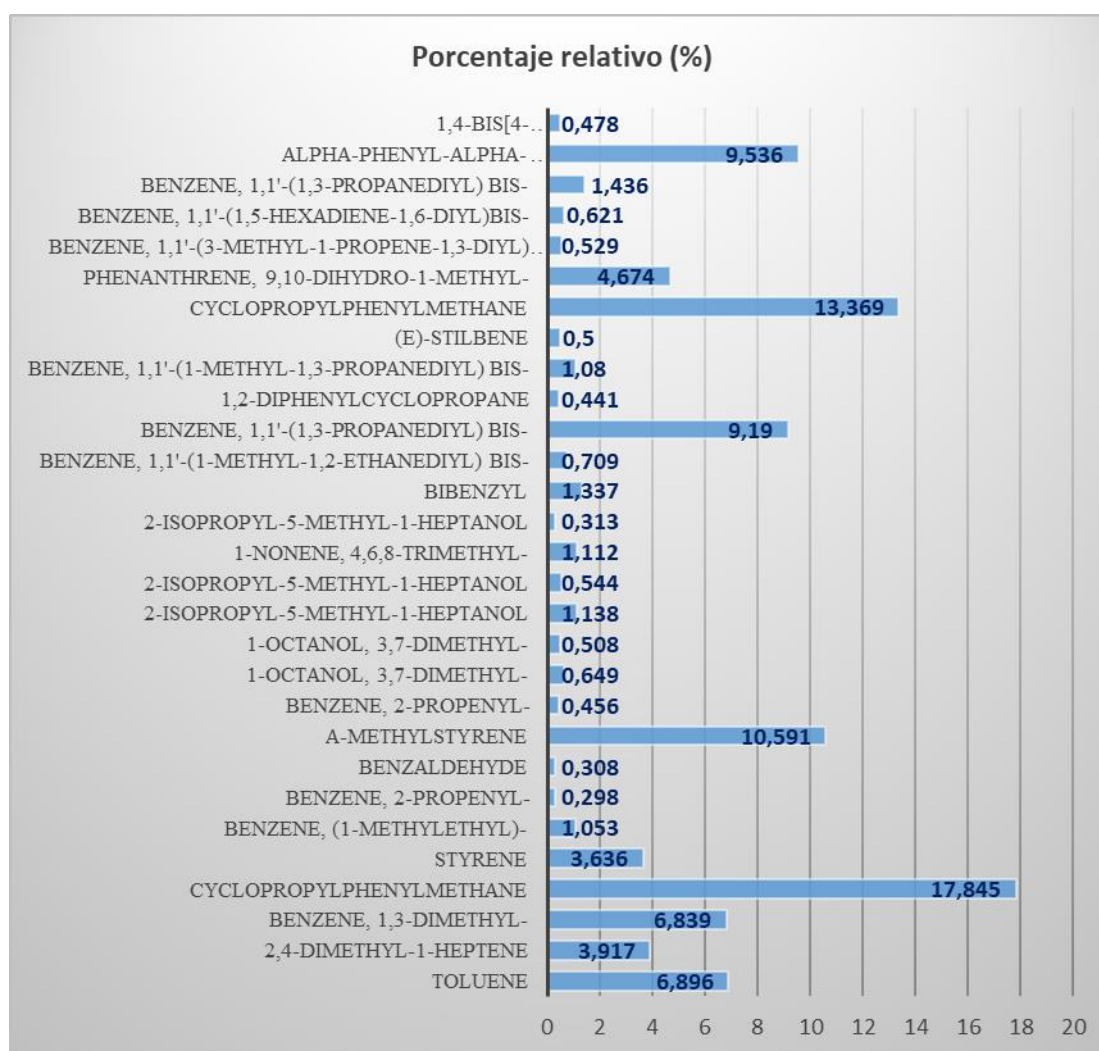


Ilustración 4-15: Porcentaje relativo de los compuestos detectados

Realizado por: Orozco Edgar, 2023

4.1.6.3. Concentración de carbonos aromáticos, nafténicos y parafínicos

La concentración de carbonos aromáticos (%Ca), nafténicos (%Cn) y parafínicos (%Cp) se determinó utilizando el método de Wuithier, aplicando las ecuaciones 3-11, 3-12 y 3-13, respectivamente. Para realizar la determinación, se utilizaron los datos de las propiedades de índice de refracción (1,5370), densidad relativa (0,9189) y punto de anilina (14,44). A continuación se detallan los cálculos correspondientes de los porcentajes de carbonos.

Porcentaje de carbonos aromáticos:

$$\begin{aligned} \%Ca &= 1039,4(n) - 470,4(d) - 0,315(PA) - 1094,3 \\ \%Ca &= 1039,4(1,5370) - 470,4(0,9189) - 0,315(14,44) - 1094,3 \\ \%Ca &= 66,52 \end{aligned}$$

Porcentaje de carbonos aromáticos:

$$\begin{aligned} \%Cn &= -1573,3(n) - 840,15(d) - 0,4619(PA) - 1662,2 \\ \%Cn &= -1573,3(1,5370) - 840,15(0,9189) - 0,4619(14,44) - 1662,2 \\ \%Cn &= 9,29 \end{aligned}$$

Porcentaje de carbonos aromáticos:

$$\begin{aligned} \%Cp &= 100 - (\%Ca + \%Cn) \\ \%Cp &= 100 - (66,52 + 9,29) \\ \%Cp &= 24,19 \end{aligned}$$

Los resultados obtenidos de la determinación de las concentraciones de carbonos aromáticos, nafténicos y parafínicos en la fracción líquida de pirólisis del poliestireno se muestran en la Ilustración 4-16. Los datos indican que la composición de la fracción líquida está dominada por carbonos aromáticos, representando aproximadamente el 66,52% del total, seguido de los carbonos nafténicos que están presentes en una concentración del 24,19% y finalmente los carbonos parafínicos en una proporción menor, alrededor del 9,29% del total.

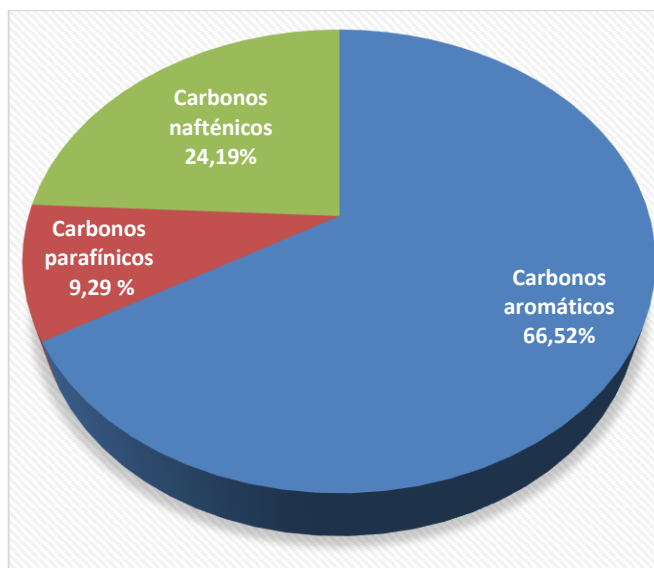


Ilustración 4-16: Concentración de carbonos presentes en la fracción líquida

Realizado por: Orozco Edgar, 2023

Los resultados obtenidos mediante el método de Wuithier indican que la fracción líquida del poliestireno es predominantemente aromática, pero también contiene carbonos nafténicos y parafínicos. Es importante señalar que este método proporciona una estimación de los tipos de carbonos presentes en las moléculas de una mezcla de hidrocarburos, pero no determina la cantidad específica de compuestos de tipo nafténico, parafínico o aromático como en el análisis GC-MS.

Para entender mejor esta situación, se tomó como ejemplo la molécula de ciclopropil fenil metano (Ilustración 4-17), encontrada en el análisis GC-MS. Si la fracción líquida estuviera compuesta únicamente por esta molécula, se podría calcular la concentración de carbonos aromáticos, nafténicos y parafínicos, siendo en este caso, 6 carbonos aromáticos, lo que representaría el 60% del total de carbonos en la molécula. Además, habría 3 carbonos nafténicos, lo que correspondería al 30%, y 1 carbono parafínico, equivalente al 10%.

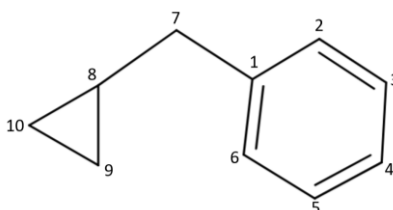


Ilustración 4-17: Ciclopropil fenil metano

Realizado por: Orozco Edgar, 2023

Sin embargo, al tratarse de una mezcla de hidrocarburos como la fracción líquida de pirólisis del poliestireno, se obtiene una variedad de compuestos con diferentes proporciones de carbonos aromáticos, nafténicos y parafínicos. Por lo tanto, el porcentaje exacto de cada tipo de carbono en la fracción líquida puede variar dependiendo de la composición específica de la mezcla.

4.2. Discusión

La presente investigación se basó en el estudio de la fracción líquida obtenida de la pirólisis de poliestireno para proporcionar información relevante sobre sus características y su composición. Los resultados de las propiedades físicoquímicas como la densidad relativa y API según Landeta (2014,p.10), sugieren que los productos líquidos de la pirólisis pueden clasificarse como un crudo medio, lo que implica que tiene propiedades moderadas. Asimismo, la viscosidad cinemática según INEM (2021,p.2) muestra que la fracción líquida tiende a tener un comportamiento similar al gasóleo o diésel.

Sin embargo en base al índice de cetano calculado indica que la fracción líquida no cumple con los requerimientos específicos de este tipo de combustible, lo que sugiere que la fracción líquida no es apta para usarse como combustible de forma directa, no obstante , esto no quita su potencial como combustible, ya que los datos de la curva de destilación muestran la presencia de compuestos con distintos cortes de destilación que según Vargas y Olaya (2012, p.20) los compuestos más ligeros de la fracción líquida poseen punto de ebullición dentro de los intervalos de productos petrolíferos como nafta pesada y gasolina.

La presencia de compuestos ligeros se confirmó con la determinación del punto de anilina la cual indica la presencia de compuestos aromáticos, lo que indica una mayor volatilidad y por consiguiente un punto de inflamación inferior a combustibles como el queroseno o gasóleo. Esta última afirmación se reforzó con los resultados obtenidos a través del análisis GC-MS, evidenciando una notable predominancia de compuestos aromáticos debido a la presencia de anillos bencénicos en las moléculas analizadas, lo que se le atribuye a la existencia de monómeros de estireno en la estructura del polímero utilizado en la pirólisis, lo que es consistente con el estudio de Lu, Xiao y Chen (2021, pp.3-4).

Por otro lado, el método de Wuithier indicó que la fracción líquida está dominada por carbonos aromáticos, representando aproximadamente el 66,52% del total, seguido de los carbonos nafténicos con una concentración del 24,19%, y los carbonos parafínicos con un 9,29%. Estos resultados difieren de los obtenidos por GC-MS en donde no se encontraron compuestos

nafténicos ni parafínicos. Es importante mencionar que este método proporciona una estimación de los tipos de carbonos presentes en las moléculas de una mezcla de hidrocarburos sin determinar cantidades específicas, pero es un método muy útil para caracterizar el carácter dominante de una mezcla de hidrocarburos a partir de sus propiedades físicas generales, tal como lo menciona Wauquier (2004, pp.39-40).

Las implicaciones prácticas de estos resultados son significativas, ya que la composición de la fracción líquida tiene aplicaciones potenciales en la industria de los productos químicos y combustibles ya que según Vargas y Olaya (2012, p.19) los crudos o derivados que con base aromática tienen cualidades para la producción de gasolina de alto octanaje o disolventes orgánicos como benceno o tolueno.

Es importante considerar que sus aplicaciones industriales se limitan por la falta de estudio en sus propiedades termodinámicas críticas que según Coleman (2021, pp.44-47) estas propiedades proporcionan los componentes esenciales en la simulación procesos y el diseño de plantas industriales, lo que ayuda a evitar costos elevados en la implementación de la planta. Por esta razón, en esta investigación se determinó estas propiedades con la objetivo de brindar información valiosa a futuras investigaciones y desarrollos tecnológicos en la producción de combustibles o productos químicos a través de la pirólisis de poliestireno.

4.3. Comprobación de hipótesis

Los resultados revelan que los carbonos aromáticos representan un 66,52% de la composición de los productos líquidos de pirólisis, seguido por los carbonos nafténicos con un 24,19% y los carbonos parafínicos con un 9,29%. En complemento, del análisis de cromatografía de gases acoplado a espectrometría de masas se identificó la presencia de 17 hidrocarburos aromáticos distintos, lo que confirma un carácter dominante de tipo aromático y comprueba la hipótesis de la presente investigación, mostrando resultados que sugieren una predominancia de compuestos aromáticos en la fracción líquida, con una concentración mayoritaria en comparación con los carbonos nafténicos y parafínicos.

CAPÍTULO V

CONCLUSIONES

Se realizaron pruebas de pirólisis térmica demostrando que este proceso es efectivo para convertir el poliestireno compacto en productos líquidos, los cuales muestran una clara superioridad en la producción, con un rendimiento promedio de 68,85%, en comparación con las fracciones sólidas y gaseosas, que obtuvieron rendimientos de 11,2% y 20,12% respectivamente.

Se evaluaron las diferencias entre los rendimientos de las fracciones líquidas, gaseosas y sólidas obtenidas del proceso de pirólisis térmica mediante pruebas de igualdad de varianzas con un nivel de significancia del 5%, confirmando que, en cada prueba de pirólisis realizada, los rendimientos no presentan cambios, indicando que la variación en la cantidad de poliestireno alimentado en cada prueba no afecta la fracción de cada uno de los productos finales.

Se analizaron las propiedades físicoquímicas, proporcionando una mejor comprensión de la naturaleza de los productos líquidos obtenidos en la pirólisis del poliestireno compacto, los resultados de viscosidad de 1,357 cSt e índice de cetano de 29,34 indican que la fracción líquida es una mezcla de hidrocarburos con propiedades cercanas a los combustibles diésel. Sin embargo, su punto de anilina de 14,44 °C indica la presencia de compuestos aromáticos, lo que sugiere su potencial como materia prima o aditivo para obtener productos petrolíferos como nafta pesada, gasolina de alto octanaje y disolventes orgánicos.

Se estableció la concentración de carbonos aromáticos, nafténicos y parafínicos mediante la aplicación del método de Wuithier y las propiedades físicas de la fracción líquida. Los resultados obtenidos revelan que los carbonos aromáticos representan un 66,52% de la composición, seguidos por los carbonos nafténicos con un 24,19%, y en menor proporción, los carbonos parafínicos con un 9,29%. Estos datos resaltan un carácter dominante de tipo aromático.

RECOMENDACIONES

- Se recomienda experimentar con nuevos procesos para la degradación del poliestireno como la pirólisis catalítica a condiciones diferentes a escala de laboratorio con el fin de obtener una mayor eficiencia y producción más selectiva de la fracción líquida.
- Realizar investigaciones adicionales para caracterizar más detalladamente la composición y propiedades de la fracción líquida obtenida, mediante análisis más específicos de los compuestos aromáticos presentes, así como estudios y de las propiedades termodinámicas críticas que permitan su posible aplicación en diferentes industrias.
- Investigar la viabilidad económica y ambiental de la implementación a gran escala de la pirólisis de poliestireno compacto para obtener productos líquidos. Realizando análisis de costos, impacto ambiental y comparación con otras tecnologías de manejo de residuos plásticos, para evaluar la sostenibilidad y beneficios potenciales de esta tecnología.
- Diseñar el proceso de producción de combustibles, productos químicos o aditivos para la industria , usando como materia prima los productos pirolíticos obtenidos del poliestireno.

BIBLIOGRAFÍA

ASOCIACIÓN DE LA INDUSTRIA HIDROCARBURÍFERA DEL ECUADOR. *El petróleo en cifras 2022* [en línea]. 13. Ecuador: Globalcorp, 2023. [Consulta: 4 abril 2023]. Disponible en: <https://www.aihe.org.ec/wp-content/uploads/2023/04/CIFRAS-PETROLEO-EN-CIFRAS-2022.pdf>

ASTM. *Punto de Inflamación por el Probador de Copa Cerrada Pensky-Martens.* Annual Book of ASTM Standards [en línea], 2005. [Consulta: 4 abril 2023]. Disponible en: <https://es.scribd.com/document/384321653/PUNTO-DE-INFLAMACION-CON-EL-PROBADOR-DE-COPA-CERRADA-PENSKY-MARTENS-93-08-doc>

ASTM. *Standard Test Method for Refractive Index and Refractive Dispersion of Hydrocarbon Liquids* [en línea]. 2006. Changes, vol. 06, no. October, DOI 10.1520/D1218-12.2. [Consulta: 4 abril 2023]. Disponible en: <https://cdn.standards.iteh.ai/samples/95800/d31cc6e9b7654b639736665d07c367c9/ASTM-D1218-12-2016-.pdf>

ASTM. *Standard Practice for Density, Relative Density (Specific Gravity), or API Gravity of Crude Petroleum and Liquid Petroleum Products by Hydrometer Method.* Manual on Hydrocarbon Analysis [en línea], 2008a 6th Edition, vol. 99, no. Reapproved 2005, DOI 10.1520/mnl10866m. [Consulta: 4 abril 2023]. Disponible en: <https://www.astm.org/d1298-12br17e01.html>

ASTM. *Standard Test Method for Density and Relative Density of Liquids by Digital Density Meter.* Manual on Hydrocarbon Analysis [en línea], 2008b, 6th Edition, vol. 93, no. Reapproved, DOI 10.1520/mnl10926m. [Consulta: 4 abril 2023]. Disponible en: <https://www.astm.org/d4052-22.html>

ASTM. *Standard Test Method for Distillation of Petroleum Products.* Manual on Hydrocarbon Analysis [en línea], 2008c, 6th Edition, vol. i, DOI 10.1520/mnl10832m. [Consulta: 4 abril 2023]. Disponible en: <https://www.astm.org/d0086-23.html>

ATIENZA-MARTÍNEZ, M., FONTS, I., SALAFRANCA, J., DE LA IGLESIA, Ó. y SÁNCHEZ, J.L. “Caracterización de líquidos de pirólisis para su posterior tratamiento mediante separación o hidrotratamiento”. *Jornada de Jóvenes Investigadores del I3A* [en línea], 2017, vol.

5. [Consulta: 8 marzo 2023]. ISSN 2341-4790. Disponible en: <https://papiro.unizar.es/ojs/index.php/jji3a/article/view/1978>

BAHADORI, Alireza; et al. "Prediction of physical properties of hydrocarbon compounds using empirical correlations". *Petroleum Science and Technology* [en línea], 2016, vol.34, pp.2-6. [Consulta: 2 marzo 2023]. ISSN 1091-6466. Disponible en: <https://doi.org/10.1080/10916466.2016.1214601>

CENGEL, Y.; &, BOLES, M. *Thermodynamics: An engineering approach* [en línea]. ed. 5, McGraw-Hill, 2006. [Consulta: 27 febrero 2023]. Disponible en: <https://netedu.xauat.edu.cn/sykc/gcrlx/content/jcjs/Engineering%20Thermodynamics.pdf>

CHAO, Frank. "Método teórico para la predicción del índice de refracción en refractometría". *BCT INIMET* [en línea], 2013 (Cuba) (2), pp.2-3. [Consulta: 26 febrero 2023]. ISSN 0138-8576. Disponible en: <https://www.redalyc.org/pdf/2230/223029286002.pdf>

COLEMAN, Larry. *Distillation Science* [en línea]. California-USA: LibreTexts., 2023. [Consulta: 1 julio 2023]. Disponible en: [https://eng.libretexts.org/Bookshelves/Chemical_Engineering/Distillation_Science_\(Coleman\)](https://eng.libretexts.org/Bookshelves/Chemical_Engineering/Distillation_Science_(Coleman))

GARY, JAMES; et al. *PETROLEUM REFINING Technology and Economics* [en línea]. Boca Ratón-USA: CRC Press Taylor & Francis Group, 2007. [Consulta: 27 de febrero]. Disponible en: https://www.academia.edu/40863605/PETROLEUM_REFINING_Technology_and_Economics_Fifth_Edition

HERRERA, M. Propiedades mecánicas, térmicas y acústicas de un mortero aligerado con partículas de poliestireno expandido(EPS) de reciclaje para recubrimientos en muros y techos (Trabajo de titulación) (Maestría).[en línea] Centro de investigación Científica de Yucatán. Yucatán, México. 2015. pp.17- 19. [Consulta: 20 febrero 2023]. Disponible en: https://cicy.repositorioinstitucional.mx/jspui/bitstream/1003/413/1/PCM_M_Tesis_2015_Marco_Herrera.pdf

JONES, D.S.J. y PUJADÓ, P.R. *Handbook of petroleum processing*. S.l.: s.n. vol. 1. ISBN 9783319145297. 2006. [Consulta: 20 marzo 2023]. Disponible en: <https://books.google.com.ec/books?hl=es&lr=&id=wiNI7ZfoNZMC&oi=fnd&pg=PA1&dq=JONES,+D.S.J.+y+PUJAD%C3%93,+P.R.,+2006.+Handbook+of+petroleum+processing&ots=jV>

8u9T-w1r&sig=NenKSrq84KDtjgeE4Tme_KUK-
fI#v=onepage&q=JONES%2C%20D.S.J.%20y%20PUJAD%C3%93%2C%20P.R.%2C%2020
06.%20Handbook%20of%20petroleum%20processing&f=false

LANDETA, G. *Caracterización y evaluación de crudos pesados del oriente ecuatoriano* [en línea]. S.l.: Universidad Central del Ecuador. Quito-Ecuador. 2014. págs. 10-14. [Consulta: 20 febrero 2023]. Disponible en: <http://www.dspace.uce.edu.ec/bitstream/25000/3786/1/T-UCE-0017-86.pdf>.

LÓPEZ, José; et al. "Análisis de la contaminación ambiental por plásticos en la ciudad de Riobamba". *Polo del Conocimiento* [en línea], 2020, (Ecuador) 5(12), pp. 4-10. [Consulta: 20 noviembre 2022]. ISSN 2550-682X. Disponible en: <https://dialnet.unirioja.es/descarga/articulo/8042547.pdf>

LU, Chao; et al. "Simple pyrolysis of polystyrene into valuable chemicals". *E-Polymers* [en línea], 2021, vol. 21, pp.3-4, [Consulta: 24 febrero 2023]. ISSN 16187229. Disponible en: <https://doi.org/10.1515/epoly-2021-0037>

MAAFA, Ibrahim. "Pyrolysis of polystyrene waste: a review". *Polymers* [en línea], 2021, vol. 13, pp.3-4, [Consulta: 21 febrero 2023]. ISSN 20734360. Disponible en: <https://doi.org/10.3390/polym13020225>

MAGER, Jeanne; et al. *Enciclopedia de salud y seguridad en el trabajo* [en línea]. Vol 4, 2001. [Consulta: 27 febrero 2023]. Disponible en: <https://www.insst.es/documents/94886/162038/6.%20Hidrocarburos%20arom%C3%A1ticos%20-%20Hidrocarburos%20arom%C3%A1ticos%20halogenados%20-%20Hidrocarburos%20poliarom%C3%A1ticos%20-%20Isocianatos%20-%20Cetonas.pdf/0090024c-13c4-4f4b-9344-edf0a88a865f?version=1.0&t=1526457379704&download=true>

MCKEEN, Laurence W. "2 Styrenic Plastics". *The Effect of Creep and Other Time Related Factors on Plastics and Elastomers* [en línea], 2015, pp.43-95. [Consulta: 20 febrero 2023]. ISSN 9780323353137. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/B978-0-323-35313-7.00002-X>

NTE INEM 1489. *Productos derivados de petróleo.diésel.requisitos* [en línea], 2021. [Consulta: 20 abril 2023]. Disponible en: <https://www.studocu.com/ec/document/instituto-de-altos-estudios-nacionales/economia-campesina-y-nuevas-formas-de-produccion-no-capitalista/n-te-inen-1489->

8-sobre-hidrocarburos/23228301

NTE INEN 2321. *Productos derivados del petróleo determinación del punto de anilina y punto de anilina mixto* [en línea], 2013. [Consulta: 20 abril 2023]. Disponible en: <https://es.scribd.com/document/527574123/2321-1>

OCDE. La contaminación por plástico crece sin cesar, en tanto que la gestión de residuos y el reciclaje se quedan cortos, dice la OCDE [blog]. 22 febrero,2022. [Consulta: 20 noviembre 2022]. Disponible en: <https://www.oecd.org/espanol/noticias/perspectivas-globales-del-plastico.htm>

PEÑA, W. Análisis de ciclo de vida de a pirólisis como alternativa de gestión de residuos de llantas usadas: una revisión bibliográfica (Trabajo de titulación) (Maestría).[en línea] Universidad Libre. Colombia. 2019. pp.13-14 [Consulta: 20 febrero 2023]. Disponible en: <https://repository.unilibre.edu.co/bitstream/handle/10901/19029/Trabajo%20de%20Grado%20-%20Especializaci%c3%b3n%20en%20Gerencia%20Ambiental.pdf?sequence=1&isAllowed=y>

PROAÑO, Oswaldo; & CRESPO, Sara. "Obtención de combustibles a partir de residuos plásticos". *Revista Politécnica* [en línea], 2009, (Ecuador) 30(1), pp.137-144. [Consulta: 22 noviembre 2023]. ISSN 1390-0129. Disponible en: <https://bibdigital.epn.edu.ec/bitstream/15000/5522/1/Oswaldo-Proa%C3%B1o.pdf>

REJAS, Luis; et al. "Generación de combustibles Líquidos a partir de residuos plásticos". *Revista Ciencia, Tecnología e Innovación* [en línea], 2015, vol. 10, pp.3-4, [Consulta: 24 febrero 2023]. ISSN 2225-8787. Disponible en: http://www.scielo.org.bo/pdf/rcti/v10n11/v10n11_a05.pdf

SECRETARÍA DE ENERGÍA. *Conceptos sobre Hidrocarburos* [en línea]. República de Argentina, 2003. [Consulta: 25 febrero 2023]. Disponible en: https://www.energia.gob.ar/contenidos/archivos/Reorganizacion/contenidos_didacticos/publicaciones/hidrocarburos.pdf

STAŠ, Martin; et al. "Overview of analytical methods used for chemical characterization of pyrolysis bio-oil". *Energy and Fuels* [en línea], 2014, vol. 28, pp.2-4, [Consulta: 24 febrero 2023]. ISSN 08870624. Disponible en: <https://doi.org/10.1021/ef402047y>

TRIPATHI, Manoj; et al. "Effect of process parameters on production of biochar from biomass

waste through pyrolysis: a review". *Renewable and Sustainable Energy Reviews* [en línea], 2016, vol. 55, pp.5-6. [Consulta: 21 febrero 2023]. ISSN 18790690. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.rser.2015.10.122>

UBALDO, A. Polimerización in situ de poliestireno de alto impacto en presencia de nanopartículas de sílice y micropartículas de Mg(OH)₂ y su influencia sobre la cinética de polimerización, la morfología de las fase elastomérica y la retardancia a la flama en los nanocompuestos finales (Trabajo de titulación) (Maestría).[en línea] Centro de investigación en Química Aplicada. Coahuila, México. 2017. pp. 4-6. [Consulta: 20 febrero 2023]. Disponible en: <https://ciqa.repositorioinstitucional.mx/jspui/bitstream/1025/434/1/Tesis%20MTP%20Andres%20Ubaldo%20Alarcon%20Dic%2019%202017.pdf>

VARGAS, S. y OLAYA, J. *Elaboración de curvas de destilación de hidrocarburos líquidos pertenecientes a la sub-cuenca Neiva:método ASTM D86-04* [en línea]. S.l.: Universidad Surcolombiana. 2012. [Consulta: 22 noviembre 2023]. Disponible en: <https://repositoriousco.co/bitstream/123456789/2285/1/TH IP 0200.pdf>

VIÑAS, M. Biorremediación de suelos contaminados por hidrocarburos: caracterización microbiológica, química y ecotoxicológica (Trabajo de titulación) (Doctoral). [en línea] Universitat de Barcelona, Facultat de Biologia, Departamento de Microbiologia. Barcelona, España. 2005. pp.12-13. [Consulta: 28 febrero 2023]. Disponible en: <https://www.tesisenred.net/handle/10803/2396>

WAUQUIER, J. *El Refino del Petróleo* [en línea]. S.l.: s.n. ISBN 9786074813906. 2004. [Consulta: 20 febrero 2023]. Disponible en: https://www.academia.edu/34866261/El_Refino_Del_Petroleo_Vol_1_Wauquier

YOUNG, Robert; & LOVELL, Peter. *Introduction to Polymers* [en línea]. Boca Raton-USA: CRC Press Taylor & Francis Group, 2011. [Consulta: 20 febrero 2023]. Disponible en: https://books.google.com.gi/books?id=ImQg2MK8NtkC&printsec=copyright&source=gbs_pub_info_r#v=onepage&q&f=falso



ANEXOS

ANEXO A: REGISTROS DE TEMPERATURAS EN LAS PRUEBAS DE PIRÓLISIS

Tiempo de residencia (min)	Temperatura del reactor (°C)			Tiempo de residencia (min)	Temperatura del reactor (°C)		
	Prueba 1	Prueba 2	Prueba 3		Prueba 1	Prueba 2	Prueba 3
0	14,8	13,8	14,4	63	375,5	425,3	452,4
3	16,5	13,9	15,4	66	375,6	432,6	463,6
6	17,4	14,6	16,2	69	371,3	421	448
9	21,7	16,4	19,3	72	414,5	395,3	405,8
12	21,7	19,8	20,9	75	419,2	373,4	398,3
15	29,6	29,3	29,5	78	421,2	386,1	405,2
18	39,6	37,7	38,8	81	425,3	389,6	409
21	55,3	54,9	55,2	84	408	393	401,2
24	76,4	75,7	76,1	87	397,2	399,4	400,7
27	102,4	98,6	100,7	90	422,9	397,5	411,3
30	133,2	132,8	133,1	93	422,1	401,5	412,7
33	167,9	166,8	167,5	96	421,9	388,7	406,8
36	197,6	194,5	196,2	99	427,8	411,4	420,3
39	205,3	228,9	241,8	102	448,4	411,5	431,6
42	208	268,7	301,7	105	444,7	420	433,4
45	219,7	304,3	350,2	108	431,2	420	426,1
48	258,8	323,8	359,1	111	414,2	408,5	411,6
51	299,9	348,6	375,1	114	390,5	409,2	419,4
54	378,9	374,6	377	117	412,3	401,5	407,4
57	413,3	394,6	404,8	120	422,3	412,4	417,8
60	383,3	416,9	435,2	123	436,1	420,9	429,2

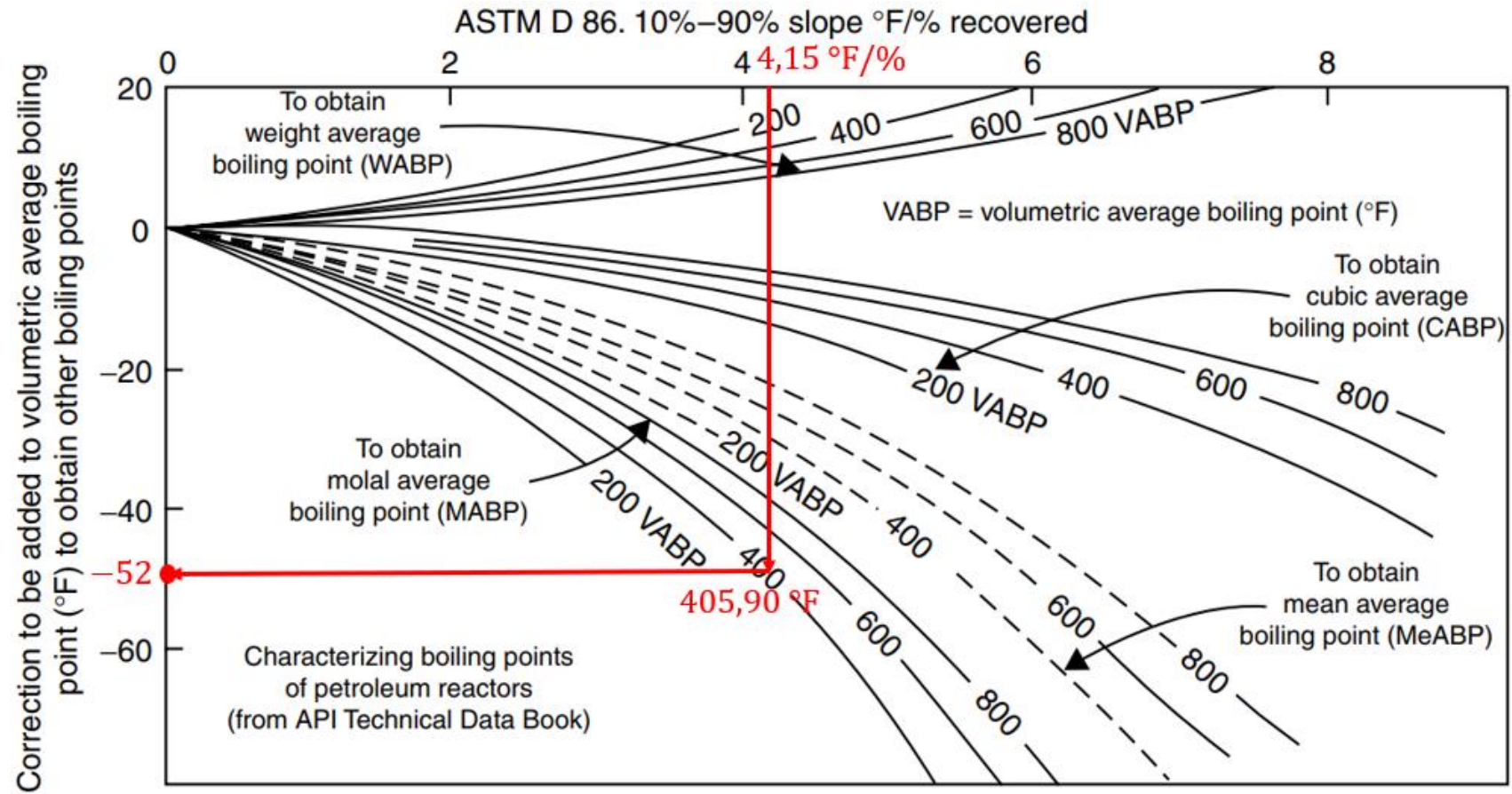
Tiempo de Residencia (min)	Temperatura del reactor (°C)			Tiempo de Residencia (min)	Temperatura del reactor (°C)		
	Prueba 1	Prueba 2	Prueba 3		Prueba 1	Prueba 2	Prueba 3
126	413,4	414,3	414,8	195	391,5	429,3	449,8
129	400,2	425,1	438,7	198	397,6	428,5	445,3
132	390,1	412,5	424,7	201	397,5	411,6	419,3
135	386,8	422,1	441,3	204	405,3	405,1	405,3
138	410,7	409,3	410,1	207	413,9	395,7	405,6
141	423,5	404,8	415	210	419,3	404,8	412,7
144	425,6	412,7	419,8	213	434,5	408,1	422,5
147	413,1	407,2	410,5	216	440,3	409,2	426,1
150	405,3	408,5	410,3	219	437,1	407,8	423,7
153	398,5	416,1	425,7	222	427,1	407,3	418,1
156	394,1	424	440,3	225	419,7	407,2	414
159	386,1	419,9	438,3	228	412,6	409,1	411,1
162	384	420,1	439,7	231	412,1	422,6	428,4
165	389,2	413,5	426,7	234	409,9	424,7	432,8
168	384,8	417,6	435,4	237	413,9	417,3	419,2
171	376,8	416,6	438,2	240	418	411	414,9
174	378,1	412,9	431,8	243	423,6	408,2	416,6
177	378,4	413,9	433,2	246	428,8	404,8	417,9
180	378,7	418,4	440	249	429,6	409,1	420,3
183	376,7	417,6	439,8	252	428,1	405,5	417,8
186	385,2	421,2	440,8	255	417,3	404,7	411,6
189	386,2	420,4	439	258	411,9	404,1	408,4
192	385,7	419,7	438,2	261	412,5	403	408,2

ANEXO B: TABLA DE CORRECCIÓN PARA DENSIDAD API A 60 °F




TABLE 2 (ASTM TABLE 5)
REDUCTION OF OBSERVED API GRAVITY TO API AT 60°F

Observed Temperature, °F.	API Gravity at Observed Temperature									
	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29
	Corresponding API Gravity at 60° F.									
50	20.6	21.6	22.6	23.6	24.6	25.6	26.6	27.6	28.6	29.7
51	20.5	21.5	22.5	23.5	24.6	25.6	26.6	27.6	28.6	29.6
52	20.5	21.5	22.5	23.5	24.5	25.5	26.5	27.5	28.5	29.5
53	20.4	21.4	22.4	23.4	24.4	25.4	26.4	27.4	28.5	29.5
54	20.3	21.4	22.4	23.4	24.4	25.4	26.4	27.4	28.4	29.4
55	20.3	21.3	22.3	23.3	24.3	25.3	26.3	27.3	28.3	29.3
56	20.2	21.2	22.2	23.2	24.2	25.2	26.3	27.3	28.3	29.3
57	20.2	21.2	22.2	23.2	24.2	25.2	26.2	27.2	28.2	29.2
58	20.1	21.1	22.1	23.1	24.1	25.1	26.1	27.1	28.1	29.1
59	20.1	21.1	22.1	23.1	24.1	25.1	26.1	27.1	28.1	29.1
60	20.0	21.0	22.0	23.0	24.0	25.0	26.0	27.0	28.0	29.0
61	20.0	21.0	21.9	22.9	23.9	24.9	25.9	26.9	27.9	28.9
62	19.9	20.9	21.9	22.9	23.9	24.9	25.9	26.9	27.9	28.9
63	19.8	20.8	21.8	22.8	23.8	24.8	25.8	26.8	27.8	28.8
64	19.8	20.8	21.8	22.8	23.8	24.8	25.8	26.7	27.7	28.7
65	19.7	20.7	21.7	22.7	23.7	24.7	25.7	26.7	27.7	28.7
66	19.7	20.7	21.6	22.6	23.6	24.6	25.6	26.6	27.6	28.6
67	19.6	20.6	21.6	22.6	23.6	24.6	25.6	26.6	27.6	28.5
68	19.5	20.5	21.5	22.5	23.5	24.5	25.5	26.5	27.5	28.5
69	19.5	20.5	21.5	22.5	23.5	24.4	25.4	26.4	27.4	28.4
70	19.4	20.4	21.4	22.4	23.4	24.4	25.4	26.4	27.4	28.3
71	19.4	20.4	21.4	22.3	23.3	24.3	25.3	26.3	27.3	28.3
72	19.3	20.3	21.3	22.3	23.3	24.3	25.3	26.2	27.2	28.2
73	19.3	20.2	21.2	22.2	23.2	24.2	25.2	26.2	27.2	28.2
74	19.2	20.2	21.2	22.2	23.2	24.1	25.1	26.1	27.1	28.1
75	19.1	20.1	21.1	22.1	23.1	24.1	25.1	26.1	27.0	28.0
76	19.1	20.1	21.1	22.0	23.0	24.0	25.0	26.0	27.0	28.0
77	19.0	20.0	21.0	22.0	23.0	24.0	24.9	25.9	26.9	27.9
78	19.0	20.0	20.9	21.9	22.9	23.9	24.9	25.9	26.9	27.8
79	18.9	19.9	20.9	21.9	22.9	23.8	24.8	25.8	26.8	27.8
80	18.9	19.8	20.8	21.8	22.8	23.8	24.8	25.7	26.7	27.7
81	18.8	19.8	20.8	21.8	22.7	23.7	24.7	25.7	26.7	27.6
82	18.8	19.7	20.7	21.7	22.7	23.7	24.6	25.6	26.6	27.6
83	18.7	19.7	20.7	21.6	22.6	23.6	24.6	25.6	26.5	27.5
84	18.6	19.6	20.6	21.6	22.6	23.5	24.5	25.5	26.5	27.5
85	18.6	19.6	20.5	21.5	22.5	23.5	24.5	25.4	26.4	27.4
86	18.5	19.5	20.5	21.5	22.4	23.4	24.4	25.4	26.4	27.3
87	18.5	19.5	20.4	21.4	22.4	23.4	24.3	25.3	26.3	27.3
88	18.4	19.4	20.4	21.3	22.3	23.3	24.3	25.3	26.2	27.2
89	18.4	19.3	20.3	21.3	22.3	23.2	24.2	25.2	26.2	27.1
90	18.3	19.3	20.3	21.2	22.2	23.2	24.2	25.1	26.1	27.1
91	18.3	19.2	20.2	21.2	22.2	23.1	24.1	25.1	26.0	27.0
92	18.2	19.2	20.1	21.1	22.1	23.1	24.0	25.0	26.0	27.0
93	18.1	19.1	20.1	21.1	22.0	23.0	24.0	25.0	25.9	26.9
94	18.1	19.1	20.0	21.0	22.0	22.9	23.9	24.9	25.9	26.8
95	18.0	19.0	20.0	20.9	21.9	22.9	23.9	24.8	25.8	26.8
96	18.0	18.9	19.9	20.9	21.9	22.8	23.8	24.8	25.7	26.7
97	17.9	18.9	19.9	20.8	21.8	22.8	23.7	24.7	25.7	26.6
98	17.9	18.8	19.8	20.8	21.7	22.7	23.7	24.7	25.6	26.6
99	17.8	18.8	19.7	20.7	21.7	22.7	23.6	24.6	25.6	26.5
100	17.8	18.7	19.7	20.7	21.6	22.6	23.6	24.5	25.5	26.5







ANEXO C: DIAGRAMA PARA DETERMINACIÓN DEL FACTOR DE CORRECCIÓN PARA EL VABP



ANEXO D: PRUEBAS DE PIRÓLISIS TÉRMICA

	
<p>a. Equipos de pirólisis</p>	<p>b. Panel de control</p>
	
<p>c. Recolección y pesaje de los productos líquidos</p>	

ANEXO E: DETERMINACIÓN DE PROPIEDADES FÍSICOQUÍMICAS

	
d. Determinación de densidad relativa	e. Determinación de densidad API
	
f. Determinación de viscosidad cinemática	g. Determinación del índice de refracción
	
h. Determinación del punto de inflamación	i. Determinación de curva de destilación ASTM



j. Determinación del punto de anilina



epoch

Dirección de Bibliotecas y
Recursos del Aprendizaje

UNIDAD DE PROCESOS TÉCNICOS Y ANÁLISIS BIBLIOGRÁFICO Y
DOCUMENTAL

REVISIÓN DE NORMAS TÉCNICAS, RESUMEN Y BIBLIOGRAFÍA

Fecha de entrega: 22 / 12 / 2023

INFORMACIÓN DEL AUTOR/A (S)
Nombres – Apellidos: Edgar Paul Orozco Toctaquiza
INFORMACIÓN INSTITUCIONAL
Facultad: Ciencias
Carrera: Ingeniería Química
Título a optar: Ingeniero Químico
f. Analista de Biblioteca responsable: Ing. Rafael Inty Salto Hidalgo

2050-DBRA-UPT-2023

