

Modelado de la polimerización aniónica de isopreno en un reactor industrial

Luis Antonio Rodríguez Guadarrama* y Juan Manuel Padrón Domínguez
Dynasol Elastómeros S.A. de C.V.
Carretera Tampico-Mante Km. 28.5
Altamira, Tamaulipas, México 89600
Tel. 01(833)-229-0300 Ext. 2477, Fax 01(833)-229-0380
Email*: lrodriguez@dynasol.com.mx

Resumen

En el presente trabajo se presenta un estudio teórico-experimental de la polimerización de isopreno en ciclohexano utilizando como iniciador n-butil litio. Una expresión cinética que describe la polimerización de isopreno en solvente ciclohexano e iniciador n-butil litio fue obtenida experimentalmente. El modelado de la polimerización de isopreno en condiciones no isotérmicas se realizó resolviendo simultáneamente las ecuaciones de balance de materia y energía. Las predicciones generadas a partir de dicho modelo fueron comparadas con datos experimentales obtenidos para una serie de polimerizaciones llevadas a cabo de manera no isotérmica en reactores de banco. Se encontró que el modelo propuesto permite predecir adecuadamente los perfiles de conversión, temperatura y presión observados en reactores de banco. Finalmente, el modelo fue utilizado para predecir los perfiles de temperatura, presión y conversión que se observarían en reactores de planta para diferentes condiciones de operación.

Introducción

Los modelos matemáticos y su importancia en la ingeniería son puntos de constante debate, especialmente cuando los modelos son empleados en la industria. La importancia de los modelos matemáticos casi siempre son mal interpretados; como consecuencia les echamos la culpa a los modelos, en lugar de culpar nuestra falta de entendimiento del proceso así como también nuestro rechazo a experimentar con un proceso en una forma sistemática y clara. Los modelos matemáticos son útiles por la siguientes razones:

- a) Los modelos mejoran nuestra comprensión de un proceso. Debido a que funcionan como fuentes de conocimiento de un proceso, y nos revelan las interacciones entre variables que pueden existir en un proceso.
- b) Los modelos son útiles para el diseño de procesos, estimación de parámetros, análisis de sensibilidad, y simulación de procesos.
- c) Los modelos son útiles para la optimización de procesos, especialmente cuando se trabaja con problemas no lineales tales como reactores por lotes, semi-lotes y continuos operando en condiciones no isotérmicas.
- d) Los modelos son útiles para tomar decisiones acerca de temas referentes a la seguridad. Son muy útiles para extrapolar a diferentes condiciones de operación y anticipar los peores escenarios.
- e) Finalmente, ya que un modelo contiene conocimiento de un proceso estos son extremadamente útiles para la educación y entrenamiento del personal nuevo que trabaja directamente con el proceso.

En reportes anteriores¹ se propuso un modelo simplificado para la polimerización aniónica de butadieno en ciclohexano. La velocidad de propagación, R_p , para la polimerización de isopreno está definida por:

$$R_p = k_p [nBuLi]_0^{1/n} [Is], \quad \text{con} \quad k_p = A_0 \exp(-E / R\tau). \quad (1)$$

Los parámetros fueron obtenidos utilizando concentraciones de n-BuLi y temperaturas de polimerización del orden de las utilizadas a nivel industrial. Debido a que buena parte de los productos comerciales del tipo SIS tiene un contenido de estireno en el rango de 10-25 % en peso. Es importante conocer la velocidad a la cual polimeriza el isopreno en condiciones no-isotérmicas. Para de esta forma optimizar las recetas de producción de los SIS a nivel comercial. El objetivo del presente trabajo es obtener los parámetros cinético para la polimerización de isopreno; para después utilizar la expresión cinética junto con la ecuación de balance de energía para predecir los perfiles de temperatura, presión y conversión en un reactor comercial.

Conclusiones

Se determinó el factor de equivalencia hidrodinámico para el poliisopreno en THF a 40 °C, el valor obtenido fue de 1.52. Del estudio cinético se obtuvo una expresión para determinar la velocidad de la polimerización del isopreno iniciada con n-BuLi en solvente ciclohexano. La expresión cinética fue utilizada junto con la ecuación de balance de energía para predecir los perfiles de temperatura y conversión en un reactor por lotes operando en condiciones no-isotérmicas. El modelo fue validado con éxito en polimerizaciones no isotérmicas de isopreno, las polimerizaciones fueron llevada a cabo en reactores de banco. Una vez que fue validado el modelo no-isotérmico se utilizó para predecir los perfiles de temperatura, conversión y presión para polimerizaciones llevadas a cabo en reactores industriales.

Bibliografía

- ¹Rodríguez Guadarrama, L.A., y Montalvo, A., *Informe Interno Dynasol 2001-04*.
- ²Chang C.C., Halasa, A.F., y Miller, J.W., *J. Appl. Polym. Sci.*, 1993, **47**, 1589.
- ³Hsieh, H.L., y Quirk, R. P., *Anionic Polymerization: Principles and Practical Applications*, Marcel Dekker, New York, 1996.
- ⁴Hsu W.L., Halasa, A.F., y Wetli, T.T., *Rubber Chem. Technol.*, 1998, **71**, 62.
- ⁵Hsieh, H.L., *J. Polym. Sci. A*, 1965, **3**, 153.
- ⁶Rodríguez Guadarrama, L.A., Hernandez, M.E., Montalvo, A., *Informe Interno Dynasol 2000-05*.
- ⁷Huglin, M.B., en *Polymer Handbook*, 2 ed., Ed. John Wiley & Sons, 1975, pp. IV-267.
- ⁸David, D.J., y Misra, A., *Relating Materials Properties to Structure*, Technomic Publishing Inc., 1999, pp. 251-254.
- ⁹Dean, J.A., *Lange's Handbook of Chemistry*, McGraw-Hill, New York, 1973.