

Si G_i° se hace arbitrariamente igual a cero para todos los elementos en su estado estándar, entonces el cambio en la energía estándar de formación de Gibbs para los componentes i en los compuestos es $G_i^\circ = \Delta G_{f,i}$. Además, la fugacidad se elimina en favor del coeficiente de fugacidad mediante: $f_i = y_i \hat{\phi}_i P$. Con esto la ecuación para μ_i queda:

$$\mu_i = G_{f,i}^\circ + RT \ln \left(\frac{y_i}{\hat{\phi}_i P} \right) \quad (4.30)$$

y combinada con la ecuación 4.27 queda:

$$G_{f,i}^\circ + RT \ln \left(\frac{y_i}{\hat{\phi}_i P} \right) + \sum_k \lambda_k a_{ik} = 0 \quad (i = 1, 2, \dots, N) \quad (4.31)$$

Si el componente i es un elemento, $\Delta G_{f,i}$ es cero, con esto se tienen N ecuaciones de equilibrio (Ec. 4.31), para cada componente y w ecuaciones de balance de materia (Ec.4.22), para cada elemento; habiendo en total $N + w$ ecuaciones. Las incógnitas en estas ecuaciones son las n_i (recordando que $y_i = n_i / \sum n_i$) de las cuales existen N y las λ_k , de las que hay w , en total $N + w$ incógnitas. Por lo tanto, el número de ecuaciones es suficiente para determinar todas las incógnitas.

Además para los gases reales, cada $\hat{\phi}_i$ es función de y_i , por lo cual para determinar las cantidades hay que utilizar un proceso iterativo, para lo cual se inicia el cálculo igualando cada $\hat{\phi}_i$ a la unidad. La solución de las ecuaciones proporciona un conjunto preliminar de y_i , que con frecuencia resulta adecuado para bajas presiones o temperaturas elevadas. Si eso no es satisfactorio, se emplea una ecuación de estado junto con los valores de y_i

calculados, obteniéndose un nuevo conjunto más correcto de ϕ_i , para emplearse en la ec.4.31.

A continuación se determina un nuevo conjunto de y_i . El proceso se repite hasta que las iteraciones sucesivas no produzcan un cambio significativo en y_i . En el proceso que se acaba de describir, la clave es determinar cual de las reacciones químicas que se manejan nunca entra directamente en alguna de las ecuaciones. Los cálculos anteriores se llevaron a cabo por el paquete ASPEN PLUS™.

4.4 AIRE TEÓRICO Y AIRE EN EXCESO

Las reacciones de combustión se llevan a cabo invariablemente con mas aire del que se necesita, para suministrar oxígeno en proporción estequiométrica al combustible. Los siguientes términos se utilizan comúnmente para describir las proporciones de combustible y aire que se alimentan al reactor.

Oxígeno teórico. Son los moles o la velocidad de flujo molar de O_2 que se necesitan para efectuar la combustión completa del combustible en el reactor, suponiendo que todo el carbono del combustible se oxida para formar CO_2 y todo el hidrógeno se oxida para formar agua.

Aire teórico: es la cantidad de aire que contiene el oxígeno teórico.

Aire en exceso: Es la cantidad en exceso de aire que se alimenta el reactor con respecto al aire teórico.

$$\text{Porcentaje}_{\text{aire}_{\text{exceso}}} = \frac{(\text{moles}_{\text{aire}})_{\text{alimentado}} - (\text{moles}_{\text{aire}})_{\text{teórico}}}{(\text{moles}_{\text{aire}})_{\text{teórico}}} \times 100\% \quad (4.32)$$

CAPÍTULO 5

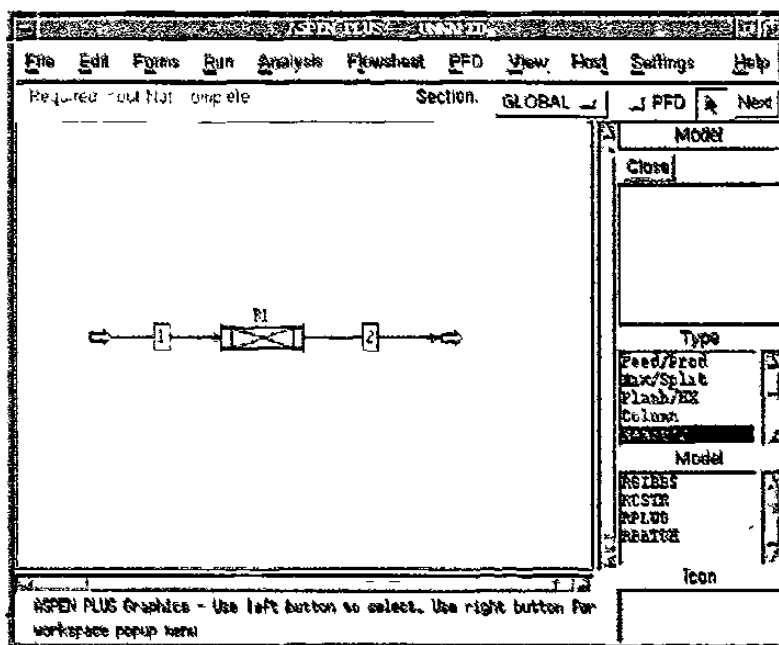
ASPEN PLUS™

El ASPEN PLUS™⁽⁵⁰⁾ es un programa computacional comercial que permite calcular las principales reacciones que pueden suscitarse en un sistema dado. Permite crear un modelo del proceso empezando con el diagrama de flujo, especificando los elementos y/o compuestos químicos y las condiciones de operación.

En el proceso de simulación el ASPEN PLUS™ efectúa todos los cálculos necesarios y predice los productos formados.

5.1 DIAGRAMA DE FLUJO

Muestra los elementos o componentes que entran al sistema. Se puede tener una o más entradas a la primera unidad de operación del sistema (ejemplo: un intercambiador de calor, compresor, reactor, etc.), dependiendo de los componentes que son introducidos y continúa ilustrando todas las unidades operativas intermedias y su interconexión.



5.1 Ejemplo de diagrama de flujo en ASPEN PLUS™, las flechas representan los componentes alimentados [1] y los productos [2], respectivamente, R1 es un reactor tipo tapón.

5.2 COMPONENTES QUÍMICOS

Se deben especificar todos los componentes químicos del sistema desde los reactantes, productos y su estructura molecular.

5.2.1 REACTANTES

Se deben especificar los componentes de la materia prima que se utiliza en el proceso real y sus concentraciones.

5.2.2 PRODUCTOS

Aquí se ingresa la lista de productos esperados en el equilibrio, y se designa en que fase o combinación de fases pueden estar. Si esta lista no es ingresada y no se especifican las fases, la lista de productos considera todos los compuestos en la simulación. En dicha lista de productos, se necesita ingresar la energía libre

de Gibbs de formación, entalpía de formación y la capacidad calorífica de dicho producto. Se puede especificar la lista de productos posibles y el flujo.

5.2.3 ESTRUCTURAS MOLECULARES

Hay dos formas de ingresar las estructuras de las moléculas al ASPEN PLUS™, una de ellas requiere que se especifique los grupos funcionales (método específico de grupos funcionales) de que consta la molécula o se especifique la estructura molecular, es decir describiendo la conectividad de cada átomo en el compuesto.

En el caso de describir la conectividad de cada átomo en el compuesto ASPEN PLUS™ automáticamente genera los grupos funcionales requeridos. En el caso del método específico de grupos funcionales, se especifican los grupos funcionales y el número de veces que esta cada grupo en el compuesto.

5.3 CONDICIONES DE OPERACIÓN

Todas las unidades de operación en el modelo del proceso son manejadas bajo condiciones de operación particulares (ejemplo: temperatura, presión), los cuales deben medirse en el proceso real.

Posteriormente se efectúa la corrida de simulación y se obtienen los resultados, ver Figura 5.2.

Display	GENSTREAMS	1	2
Units	From	B1	B1
Format	GEN_E	To	B1
	Phase	VAPOR	VAPOR
Temperature	K	1100.0	1100.0
Pressure	ATM	6.00	6.00
Vapor Frac		1.000	1.000
Mole Flow	KGOL/HR	593.996	1218.630
Base Flow	KG/HR	20868.219	20868.219
Volume Flow	L/HR	174442.141	306144.344
Enthalpy	MMBTU/HR	-4.465	66.973
Mole Flow	KGOL/HR		
ETHA		593.996	159.362
H2			524.634
ETHY			524.634

Figura 5.2 Ejemplo de una corrida de otro proceso en el cual se alimenta etano y se produce etileno e hidrógeno.

5.4 RIGIBBS

Es un modelo de reactor que puede calcular:

- I. El equilibrio químico en una sola fase (vapor o líquido)
- II. La fase de equilibrio (vapor o líquido) sin las reacciones químicas.
- III. Fases o equilibrio químico con fases sólidas.
- IV. Equilibrio químico y fases simultáneamente.
- V. Calcula el equilibrio por minimización de la energía libre de Gibbs con separación de fases.
- VI. No es necesario especificar la reacción estequiométricamente.
- VII. También se puede utilizar cuando el sistema no reacciona completamente hasta el equilibrio.
- VIII. Restringir el equilibrio y especificar la extensión de la reacción, la temperatura aproximada al equilibrio, la cantidad o la fracción de un componente que no reacciona.
- IX. Puede calcular el equilibrio químico entre componentes sólidos y las fases fluidas. El modelo detecta si el sólido está presente en el equilibrio, y si es así,

calcula la cantidad. Cada componente sólido es tratado como una fase sólida pura.

- X. Se puede restringir el equilibrio ingresando ya sea, el flujo de un componente en la alimentación que no reacciona o la fracción de componente alimentado que no reacciona.

5.5 OTRAS FUNCIONES DEL ASPEN PLUS™

Además ASPEN PLUS™⁽⁵⁰⁾, puede calcular muchos otros parámetros requeridos, incluyendo todos los componentes puros.

- I. Estimación de propiedades.
- II. Propiedades de los datos: esto nos permite ingresar los datos experimentales que dependen de la temperatura, tales como la presión o el coeficiente infinito de actividad de dilución.
- III. Comparar propiedades estimadas: esta opción nos permite generar un reporte en el cual se comparan los valores estimados con los datos experimentales.
- IV. Resultados de las propiedades estimadas: en esta opción se examinan los resultados estimados.

Antes de estimar los parámetros y propiedades, se deben ingresar las temperaturas de evaporación y fusión, entalpía de formación y evaporación, capacidad calorífica (ecuación y coeficientes o en su caso los valores a diferentes temperaturas) y el peso molecular de los componentes, algunos datos anteriormente mencionados pueden ser estimados por ASPEN PLUS™, sin embargo es recomendado que se introduzcan los valores.

Además se pueden ingresar todos los datos experimentales que estén disponibles para minimizar la propagación de errores.

CAPÍTULO 6

EXPERIMENTACIÓN

En procesos comunes de sinterización en la producción de acero, se han realizado algunos estudios termodinámicos a cerca de la formación de dioxinas^{29,34,36]}. Sin embargo, las propiedades termodinámicas utilizadas^[37,38] no han sido adecuadas, según se ha determinado en estudios más recientes^[32]. En este trabajo se utilizaron las propiedades termodinámicas obtenidas por el método de diferencias (entalpía de formación) utilizado por O.V.Dorofeeva^[44] a una tecnología nueva.

Los estudios que se han realizado han sido en camas de sinter móviles y no fijas como en el caso del presente estudio. El proceso HY-RECOVERY, es un proceso nuevo, recientemente patentado^[43], y contiene los elementos (C, Cl, O H) para la formación de las dioxinas. Por lo cual se buscará la simulación para determinar si se cumplen las condiciones termodinámicas para la formación de las dioxinas en el proceso de sinterización, utilizando el paquete termodinámico ASPEN PLUS™.

Para obtener datos del proceso se tomaron muestras de la materia alimentada al reactor de sinterizado, para analizar la composición de los

materiales, además del cloro, carbono y precursores de dioxinas tales como bencenos, clorobencenos, fenoles y clorofenoles. Lo anterior con el objetivo de alimentar la información sobre los compuestos que existen en la materia prima y minimizar el error en la etapa de la simulación a través de RGIBBS (minimización de la energía libre de Gibbs).

Posteriormente se alimentaron las propiedades termodinámicas obtenidas por medio del método de diferencias⁽⁴⁴⁾ para posteriormente, realizar las simulaciones con ayuda del paquete ASPEN PLUSTM y el análisis de resultados.

6.1 PROCEDIMIENTO PARA HACER EL MUESTREO DE MATERIA PRIMA

El muestreo se realizó considerando los Métodos Estándar Internacional ISO 3081 y 3082 Segunda Edición, lo anterior para la escama de molino, micropellets, finos de sinter y cal. Además, para el coque se utilizó el Método Estándar ASTM D-346-78, Método estándar de colección y preparación de muestras de coque para análisis de laboratorio. Posteriormente, se tomaron las muestras que serían analizadas por cromatografía de gases con detector de masas.

6.2 PRUEBAS REALIZADAS EN PLANTA PILOTO

El objetivo de las pruebas en planta piloto, además de analizar los materiales, es obtener los perfiles de temperatura que se presentan en diversas partes del reactor de sinterizado al llevarse a cabo el proceso.

Primeramente se realizó la toma de muestras de los materiales antes de ser mezclados, ver Figura 6.1, tales como el polvo de horno eléctrico de arco, finos de coque, etc. Lo anterior con el fin de determinar la influencia de los diferentes materiales.

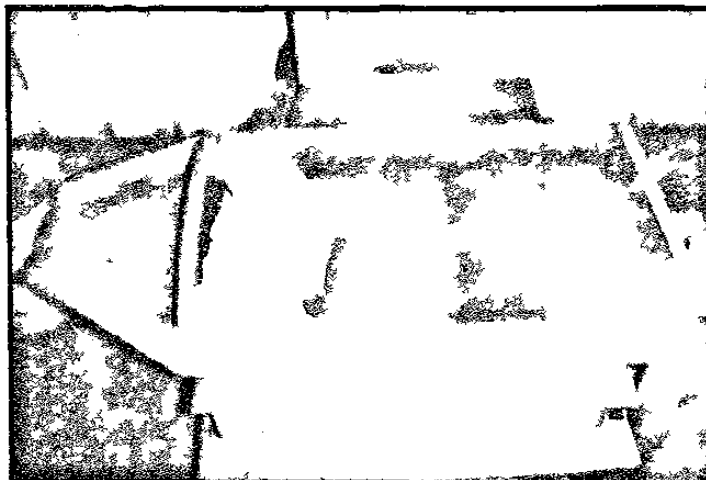


Figura 6.1 Materia prima alimentada (con permiso de HYLSA.S.A. de C.V.)

Posteriormente se analizaron las materias primas por cromatografía de gases con detector de masas, Figura 6.2.

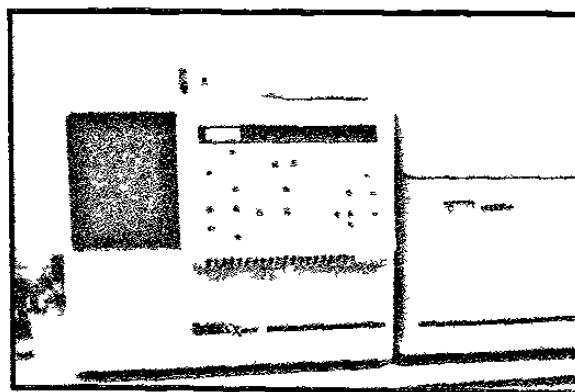


Figura 6.2 Cromatografo modelo Varian Saturn 3400 cx, con detector de masas, el cual tiene una resolución de 5 partes por millón (ppm).

La siguiente etapa fue la elaboración de la mezcla. Esto se llevó a cabo utilizando un mezclador tipo chileno por un periodo de aproximadamente 10 minutos, ver Figura 6.3.



Figura 6.3. Mezclador (con permiso de HYLSA, S.A. de C.V.)

Una vez obtenida la mezcla homogénea, se procede al proceso de sinterización en un reactor construido para este efecto en los Laboratorios experimentales de la empresa HYLSA, S.A. de C.V. División Tecnología. El reactor es una escala a nivel planta piloto de lo que es el reactor a nivel planta productiva. Este reactor esta en vías de ser patentado. Una fotografía de este reactor aparece en la Figura 6.4.



Figura 6.4 Reactor utilizado para la sinterización de las mezclas. (con permiso de HYLSA, S.A. de C.V.)

La preparación de la carga se inicia con una cama de sinter anteriormente producido, tal y como vemos en la Figura 6.5, esto con el fin de proteger las barras de acero al carbono del reactor, Figura 6.6.



Figura 6.5 Alimentación de la cama de sinterizado para protección de las barras de acero al carbono del reactor (con permiso de HYL S.A. de C.V.)

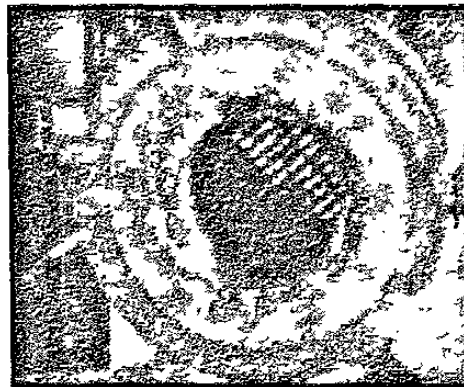


Figura 6.6 Reactor de sinterizado. Al fondo se aprecian las barras de soporte de la cama (con permiso de HYL S.A. de C.V.)

Posteriormente se alimenta la mezcla que contiene mineral, escama de molino, finos de sinter, cal viva, coque fino y agua, siendo llenado 40 cm de altura del recipiente, tal como se muestra en la Figura 6.7.



Figura 6.7 Alimentación de la mezcla conteniendo mineral, escama de molino, finos de sinter, cal viva, coque fino y agua. (con permiso de HYLSA.S.A. de C.V.)

Posteriormente se alimenta coque formando una capa de 2 cm de altura, tal como se muestra en la Figura 6.8.



Figura 6.8 Alimentación de la capa de coque (con permiso de HYLSA.S.A. de C.V.)

Finalmente, la carga dentro del reactor queda formada por capas tal como se muestra esquemáticamente en la Figura 6.9.

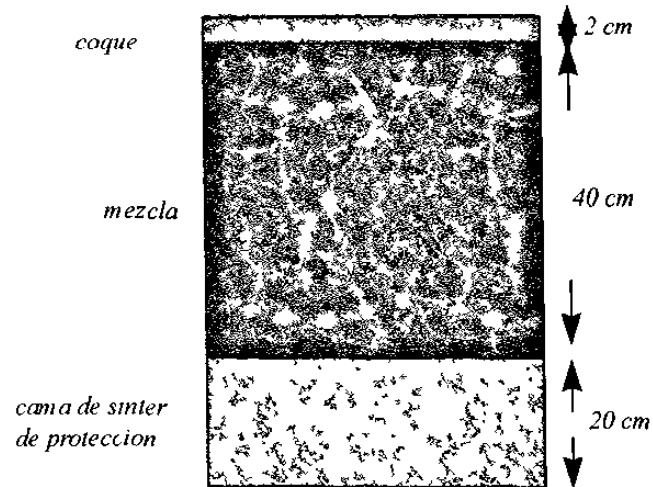


Figura 6.9 Esquema de cama de sinterizado.

Posteriormente se coloca el reactor sobre la caja de viento y se colocan los termopares necesarios, Figura 6.10. Posteriormente se posiciona el quemador y se aplica gas natural y aire, Figura 6.11, y se empieza a elevar la temperatura al irse quemando el coque colocado en la parte superior. El quemador se deja encendido hasta que el termopar No.1 indica una temperatura de 950°C, después se quita y se enciende el compresor, Figura 6.12, el cual succiona los gases calientes haciendo que estos pasen a través de la mezcla y la cama de sinter anteriormente producido, lo cual ocasiona que estas capas se precalienten.

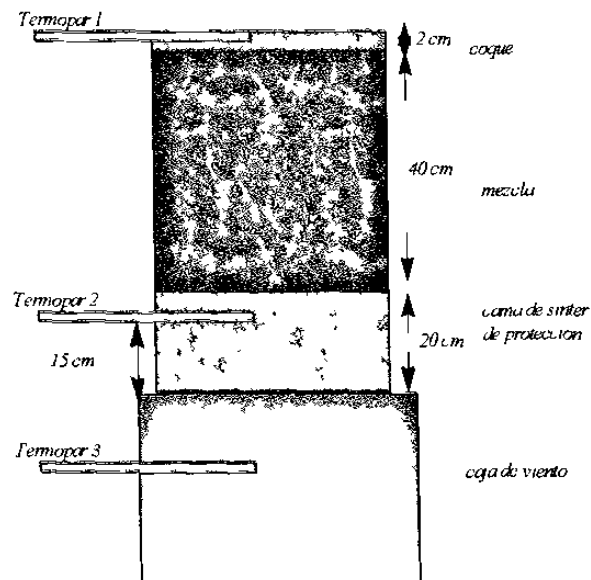


Figura 6.10 Esquema de colocación de los termopares.



Figura 6.11 Inicio de quema y termopar No.1. (con permiso de HYLSA.S.A. de C.V.)

Se mide la temperatura utilizando un equipo interactivo desarrollado en la FIME con termopares tipo K, a lo largo del proceso, Figura 6.12.

Terminado el proceso, se deja que el producto sinterizado se enfríe dentro del reactor hasta los 200°C, posteriormente se extrae, Figura 6.13. Después se coloca en un recipiente, tal como se muestra en la Figura 6.14. De dicho sinter producido también se tomaron muestras para su posterior análisis. Estas pruebas se llevaron a cabo tres veces, esto con el fin de tomar los perfiles de temperaturas.

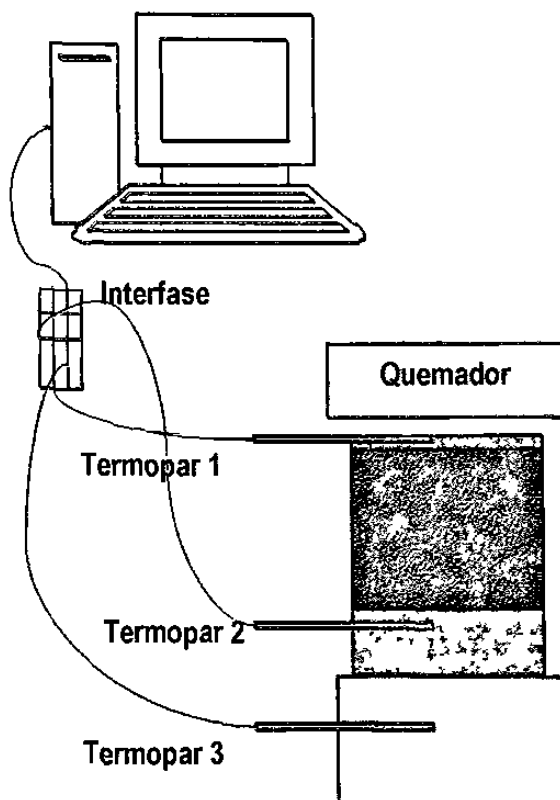


Figura 6.12 Diagrama de equipo utilizado en planta piloto, para la realización de las pruebas, para la obtención de perfiles de temperatura. (con permiso de HYLSA, S.A. de C.V.)

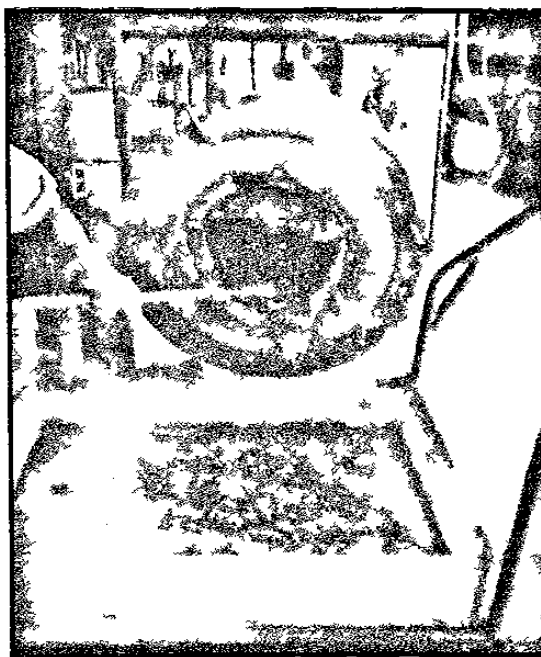
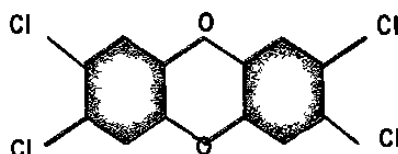


Figura 6.13 Extracción de sinter producido (con permiso de HYLSA.S.A. de C.V.)

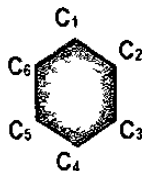
2,3,7,8 TCDD, 1,2,3,7,8 PCDD, 1,2,3,4,7,8 HxCDD, 1,2,3,6,7,8 HxCDD,
 1,2,3,7,8,9 HxCDD, 1,2,3,4,6,7,8 HpCDD, 1-4,6,9 OCDD, 2,3,7,8 TCDF,
 1,2,3,7,8 PCDF, 2,3,4,7,8 PCDF, 1,2,3,4,7,8 HxCDF, 1,2,3,6,7,8 HxCDF,
 1,2,3,7,8,9 HxCDF, 2,3,4,6,7,8 HxCDF, 1,2,3,4,6,7,8 HpCDF, 1,2,3,4,7,8,9
 HpCDF, 1-4,6,9 OCDF

6.3.2 DESCRIPCIÓN DE LA ESTRUCTURA DE LAS MOLÉCULAS DE DIOXINAS (PCDD/Fs) EN ASPEN PLUS™

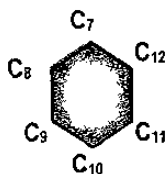
Para dar de alta las estructuras de las dioxinas se describió la conectividad de cada átomo en el compuesto y posteriormente ASPEN PLUS™, genera automáticamente los grupos funcionales requeridos. Por ejemplo: 2,3,7,8 TCDD



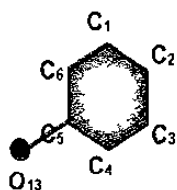
Primera se declaró la conectividad de los átomos de carbono en los anillos bencénicos y el tipo de enlace, en este caso doble: C₁ a C₆.



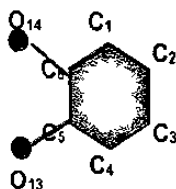
y de C₇ a C₁₂ también enlace doble;



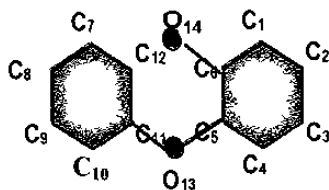
Posteriormente se declaró la unión entre los carbonos y el oxígeno, es decir, un enlace simple del C₅ al O₁₃:



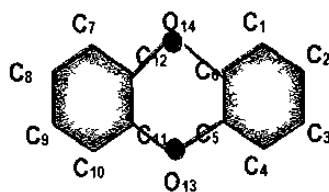
Y del C₆ al O₁₄:



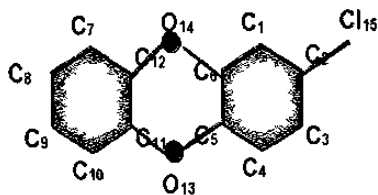
Además de la conectividad de esos átomos de oxígeno y el otro anillo bencénico, es decir, la unión a través de un enlace simple del O₁₃ y el C₁₁:



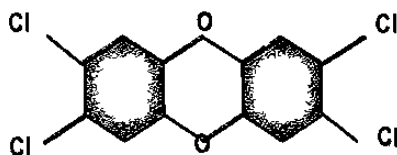
Y del O₁₄ y el carbono 12 (C₁₂):



La conectividad entre los átomos de carbono y cloro, es decir, un enlace simple entre el C₂ y el Cl₁₅:



Así mismo se declaró el enlace simple de los demás átomos de cloro y los átomos de carbono que conforman los anillos bencénicos, es decir, C₃ enlace simple con Cl₁₆; del C₉ y Cl₁₇; además del enlace simple del C₈ y el Cl₁₈; definiendo así completamente la estructura del 2,3,7,8 TCDD. De manera similar se realizó para los demás PCDD/Fs analizados en el presente trabajo.



6.3.3 INFORMACIÓN CALCULADA CON AYUDA DE ASPEN PLUS™ PARA GASES REALES

Posteriormente se calcularon los demás datos necesarios tales como el factor acéntrico, la temperatura y presión crítica, el factor de compresibilidad, a través de los métodos mencionados en el Capítulo 4 con ayuda de ASPEN PLUS™. Los valores obtenidos se muestran en el Anexo C.

Se alimentó al ASPEN PLUS™, la entalpía de formación, la entropía, y la capacidad calorífica a diferentes temperaturas obtenidos por Dorofeeva⁽⁴⁴⁾, ver Anexo A, el peso molecular, la entalpía de evaporación, la temperatura de evaporación y de fusión⁽⁴⁶⁾, ver Anexo B.

6.3.4 DIAGRAMA DE FLUJO DEL PROCESO

Después se creó el diagrama de flujo del proceso en ASPEN PLUS™ que se está analizando, siendo este el que se muestra en la Figura 6.15, donde, B4 es un mezclador en el cual se introduce agua y aire seco con el fin de saturar el aire, el cual entra en el sistema al encender el compresor. El bloque ABANICO es utilizado para especificar el flujo de aire saturado que entra en el reactor de sinterización. CL2 GAS es utilizado para especificar la cantidad en kmol que se tiene en el sistema (a 70°C y 1 atmósfera de presión). COQUE para determinar la cantidad en kmol de carbono e hidrógeno en el sistema (a 70°C y 1 atmósfera de presión).

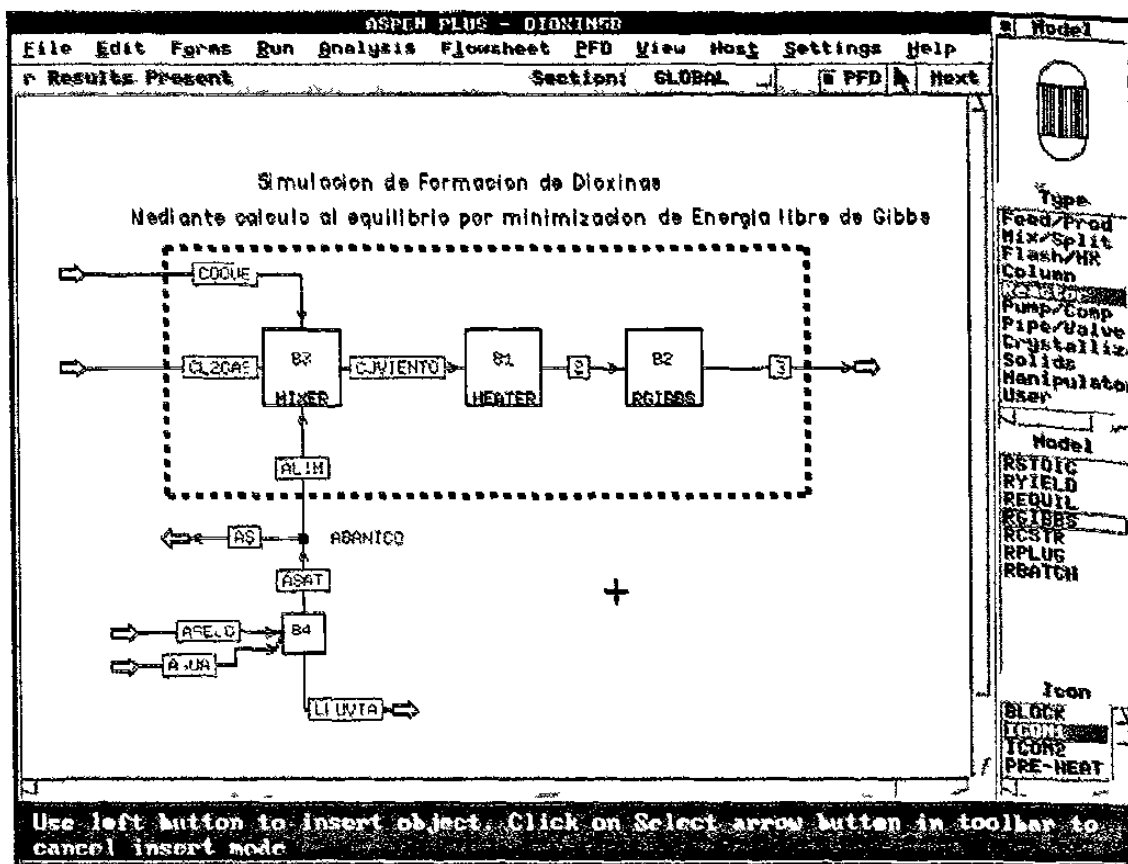


Figura 6.15. Diagrama de flujo del reactor de sinterización, para la simulación de formación de PCDD/Fs por medio del método de minimización de la energía libre de Gibbs.

El bloque B1 HEATER es utilizado para calentar el sistema hasta una temperatura de 250 °C y el bloque B2 RIGBBS es utilizado para llevar al equilibrio la simulación de formación de dioxinas utilizando el método de minimización de energía libre de Gibbs a varias temperaturas. El bloque B3 mixer es el mezclador de lo alimentado en el sistema (C, Cl, O, H). Posteriormente se realizó un análisis de sensibilidad obteniéndose la gráfica mostrada en la Figura 6.16, para el 2,3,7,8 TCDD para diferentes flujos de aire saturado.

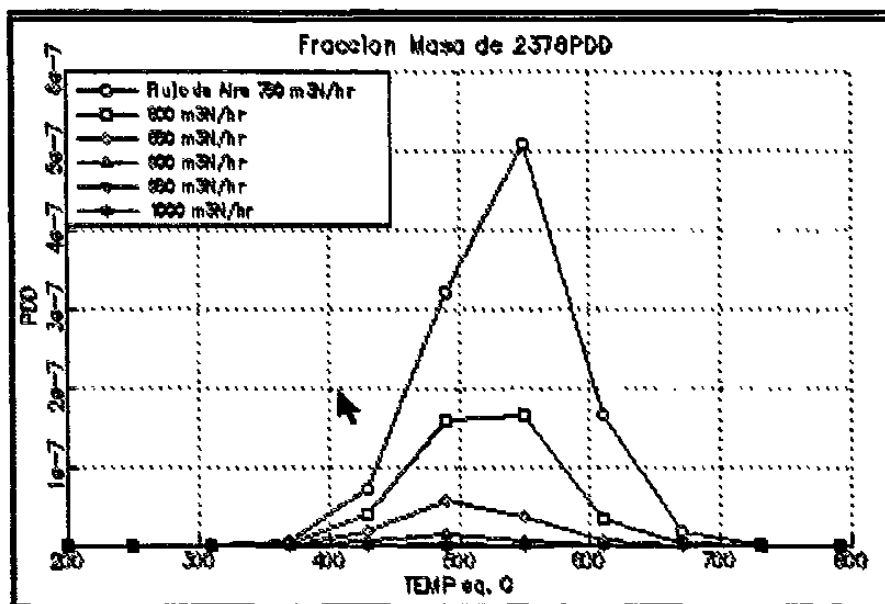


Figura 6.16 Resultado de la simulación en ASPEN PLUS™ de la formación del 2,3,7,8 TCDD a diferentes flujos de aire saturado (600, 650, 800, 850 y 1000 Nm³/hr. de aire saturado).

Pero en ASPEN PLUS™ se tiene un límite de 1 e-8 en la escala de las gráficas por lo cual se optó en hacer las mismas en el paquete Excel, el cual es más óptimo para manejar escalas menores.

6.4 OBTENCIÓN DE LA CANTIDAD EN KMOL DE LOS ELEMENTOS DEL SISTEMA ANALIZADO (C, H, O, Cl), DE LA CANTIDAD DE MATERIA UTILIZADA EN EL PROCESO A ESCALA INDUSTRIAL

Primeramente se consideró la información proporcionada por el Laboratorio químico de la empresa a cerca de los porcentajes en peso de los compuestos que normalmente se analizan en planta, además del aceite quemado (el cual se

considera como 1% del peso de la escama de molino), porcentaje en peso del cloro, humedad, e información ya establecida acerca de los porcentajes en peso de los elementos que componen el agua, y el aire, Tabla 6.1.

Tabla 6.1 Porcentaje en peso de los diferentes compuestos analizados.

%PESO	Pre- mezcla	Escama	Finos de sinter -1/4"	Coque	Cal	Aceite quemado	Sinter cama	Agua	Aire
C	1.980	0.100	1.070	87.270	2.800	84.600	0.020		
S	0.600	0.040	0.191	0.929	0.001	0.635	0.045		
cenizas				8.360					
Humedad (H ₂ O)				0.500					
Cl	2.380	0.018	0.340				0.054		
H						13.600		11.111	
FeO	2.910	59.810	20.780				9.660		
Fe ₂ O ₃	33.500	38.540	51.030		0.140		62.960		
SiO ₂	3.250	0.230	2.750	2.930	0.830		1.780		
Al ₂ O ₃	0.900		1.050	1.690	0.150		0.550		
MgO	3.250	0.025	2.100	0.120	1.624		1.600		
MnO	2.850	1.040	1.870				1.810		
CaO	4.830		5.350	1.025	69.590		5.480		
NiO		0.018	0.066				0.800		
Cr ₂ O ₃	0.227	0.091	0.140				0.159		
PbO	2.510		0.430				0.387		
CuO	0.243	0.134	0.150				0.179		
Na ₂ O	2.950	0.055	0.367				0.300		
K ₂ O	1.000		0.019				0.040		
ZnO	36.940	0.153	15.400						
V ₂ O ₅			0.010						
TiO ₂			0.060						
CdO	0.058						0.002		
P	0.004	0.102					0.004		
PxC					28.630				
N						0.052			76.800
O						1.013		88.889	
O ₂									23.200

Para el caso del aceite quemado se tomaron tres muestras y se analizaron, los elementos C, S, H, N y O, Tabla 6.2.

Tabla 6.2. Porcentajes en peso de los elementos detectados en las muestras de aceite quemado.

ACEITE QUEMADO				
%PESO	1	2	3	PROM.
C	84.500	84.600	84.700	84.600
S	0.646	0.640	0.618	0.635
H	13.400	13.700	13.700	13.600
N	0.055	0.051	0.050	0.052
O	1.290	0.910	0.840	1.013

Como ya se había mencionado, solamente se considerara el sistema C, Cl, H, O, por lo cual los demás compuestos (Ejemplo: SiO_2 , Al_2O_3 , FeO , Fe_2O_3 , etc.) se consideran en este trabajo como materia inerte en la simulación de la formación de PCDD/Fs.

Ya con la información disponible, se procedió a multiplicar la cantidad de materia prima (kg) utilizada en el proceso a escala industrial (ver Tabla 6.3) por cada uno de los elementos que se detectaron (C, Cl, O, H), esto con el fin de determinar la cantidad en kg de ese elemento presente en la materia utilizada en el proceso, además de considerarse, el sinter utilizado (400 kg) como cama para protección de las barras de acero al carbono del reactor de sinterización, ver Tabla 6.4.

Tabla 6.3. Material utilizado en la corrida normal del proceso a escala industrial

MEZCLA A UTILIZAR POR QUEMA (kg)		
MATERIAL	PESO (kg)	%
Premezcla	942.900	27.104
Escama de molino	1,255.23	36.082
Finos de sinter	987.45	28.384
Cal viva -1/8	111.30	3.199
Finos de coque -1/8	91.08	2.618
Agua	90.90	2.613
Total	3,478.85	100.000

Tabla 6.4. Cálculo de masa (kg) de los elementos a considerar (C, Cl, H, O) de la materia utilizada, en corrida normal a escala industrial, considerando un 1% de aceite quemado en la escama de molino

	corrida normal								
	pre-mecla	escama	finos de sinter -1/4"	coque	cal	aceite quemado	cama de sinter	agua	aire
kg	942.900	1255.230	987.450	91.080	111.300	12.552	400.000	90.90	5925.792
C	18.669	1.255	10.566	79.486	3.116	10.619	0.080	0.000	0.000
Cl	22.441	0.226	3.357	0.000	0.000	0.000	0.216	0.000	0.000
H	0.000	0.000	0.000	0.051	0.000	1.707	0.000	10.100	0.000
O	0.000	0.000	0.000	0.405	0.000	0.127	0.000	80.798	2749.56
O ₂	0.000	0.000	0.000	0.202	0.000	0.063	0.000	40.399	1374.78

Después los valores mostrados en la tabla 6.4, se dividieron entre los pesos moleculares correspondientes del carbono, cloro, hidrógeno y oxígeno, respectivamente, Tabla 6.5.

Tabla 6.5. Cálculo de número de kmoles de los elementos a considerar (C, Cl, H, O) de la materia utilizada, en corrida normal a escala industrial, considerando un 1% de aceite quemado en la escama de molino.

	Pre-mecla	Escama	Finos de sinter -1/4"	Coque	Cal	Aceite quemado	Cama de sinter	Agua	Aire
C	1.554	0.105	0.880	6.618	0.259	0.884	0.007	0.000	0.000
Cl	0.633	0.006	0.095	0.000	0.000	0.000	0.006	0.000	0.000
H	0.000	0.000	0.000	0.050	0.000	1.694	0.000	10.020	0.000
O	0.000	0.000	0.000	0.025	0.000	0.008	0.000	5.050	171.85
O ₂	0.000	0.000	0.000	0.013	0.000	0.004	0.000	2.525	85.92

Obteniéndose los resultados mostrados en la Tabla 6.6, los cuales fueron alimentados al ASPEN PLUS™ para posteriormente efectuar la simulación de la formación de las dioxinas.

Tabla 6.6. Cantidad en kmol obtenidas de los análisis de materia prima, considerando las cantidades de materia prima utilizados en el proceso a escala industrial.

	COMPONENTES
C	10.307
Cl	0.740
H	11.764
O	176.938
O ₂	88.469

Para la obtención de la cantidad en masa en kg de agua agregada a la mezcla se efectuó lo siguiente:

Con el dato de la cantidad de agua en volumen alimentada a la mezcla se hicieron los siguientes cálculos:

Se obtuvo la densidad del agua⁽⁴⁶⁾ a condiciones normales, es decir, 25°C y 1 atmósfera de presión.

$\rho_{\text{agua}} = 0.998 \text{ gr/cm}^3$, la cual se multiplicó para obtener la masa en gr. de agua, para posteriormente convertirlos a kilogramos.

$91,080 = 91,080 \text{ cm}^3$, obteniendo un valor 90.90 kg de agua.

El cálculo del oxígeno proveniente del aire y que se considera en este trabajo se realizó de la siguiente manera:

Cuando se realizaron las pruebas se tomó el tiempo que permaneció encendido el compresor y el flujo de aire (proporcionado por la empresa, $6,600 \text{ Nm}^3/\text{hr}$. de aire en el proceso a escala industrial), el tiempo en promedio fue de 0.694 hrs.

Se obtuvo de la literatura⁽⁴⁸⁾, tanto la densidad del aire a 25°C y 760 mm Hg. (1.293 gr./l) y el porcentaje en peso del oxígeno en el aire (23.2%).

Posteriormente se obtuvo la cantidad de aire en kg

$$6,600 \text{ Nm}^3/\text{hr} (0.694 \text{ hr}) = 4,583.33 \text{ Nm}^3$$

$\rho_{\text{aire}} = m_{\text{aire}}/V_{\text{aire}}$, despejando se obtuvo la m_{aire}

$m_{\text{aire}} = 5,925,791 \text{ gr. ó } 5,925.791 \text{ kg}$, el cual se utilizó para obtener el número de kmoles de oxígeno que interviene en el sistema analizado (C, Cl, H, O)

6.5 SIMULACIONES EFECTUADAS EN EL PROGRAMA ASPEN PLUS™

Para la primera simulación de formación de PCDD/Fs se alimentaron los valores mencionados en la tabla 6.6, es decir, en el bloque de COQUE, mostrado en la Figura 6.15. Se alimentaron 10.307 kmol de carbono y 5.882 kmol de H₂, en el bloque Cl2 GAS. Además de 0.37 kmol de Cl₂ (gas) y en el bloque ABANICO se especificó que el flujo de aire es 6,600 Nm³/hr. Obteniéndose los resultados mostrados en el Capítulo 7.

Debido a los resultados de la simulación anterior fue necesario hacer otras simulaciones variando el contenido de cloro de 0.35 a 1.4 kmol/hr. de gas cloro, esto con el fin de determinar si al tener una mayor cantidad de cloro es factible la formación de dioxinas al tener el flujo de aire de 6,600 Nm³/hr., obteniéndose los resultados que serán mostrados en el Capítulo 7.

Debido al resultado de las anteriores simulaciones se determinó variar el flujo de aire, para lo cual se eligieron los flujos de 950, 1050, 1150, 1250 y 1350 Nm³/hr. de aire (esto debido a que se hicieron varias simulaciones en las que se fue disminuyendo el flujo de aire hasta detectar en niveles apreciables la formación de dioxinas).

Además de variar la cantidad de cloro de 0.35 a 1.40 kmol/hr de Cl_2 , para lo cual se eligió el flujo de aire de 1,350 Nm^3/hr ., manteniendo el contenido en mol-kg (kmol) de los demás elementos igual, es decir, 10.307 mol-kg de carbono, 5.882 mol-kg de H_2 . Teniendo lo mostrado en la Tabla 6.7.

Tabla 6.7 Cantidad en kmol obtenidas de los análisis de materia prima, considerando las cantidades de materia prima utilizados en el proceso a escala industrial con un flujo de aire de 1,350 Nm^3/hr .

	COMPONENTES
	# TOTAL DE MOL-kg (kmol)
C	10.307
Cl	0.740
H	11.764
O	40.235
O_2	20.118

Los resultados de las simulaciones se muestran en el siguiente capítulo.

CAPÍTULO 7

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En este capítulo se presentan los resultados obtenidos en el presente trabajo.

En primer lugar se muestran los resultados de los análisis de los compuestos semivolátiles, según el método 8270 de la Agencia de Protección Ambiental (EPA por sus siglas en inglés). Además de los análisis de la materia prima por espectrometría por infrarrojo, por dicha técnica solamente se analizaron los finos de sinter y el polvo de horno eléctrico de arco. Además de reportarse los perfiles de temperatura y la localización de los termopares en la cama de sinter. Finalmente se muestran los resultados obtenidos de las simulaciones en el paquete ASPEN PLUS™.

7.1 RESULTADOS DE LOS ANÁLISIS POR CROMATOGRAFÍA DE GASES CON DETECTOR DE MASAS

Respecto al análisis de compuestos volátiles en la materia utilizada por Cromatografía de gases con detector de masas, no fue posible su detección, ver Figura 7.1. Por lo cual, es evidente la necesidad de disponer de equipo con un poder de resolución mayor. El Cromatógrafo utilizado es modelo Varian Saturn 3400 cx (CG/ DM), con un poder de resolución de 40 partes por billón (ppb), los

compuestos analizados por esta técnica se muestran en la Tabla 7.1, los cuales se analizaron por el método de análisis de compuestos semivolátiles EPA 8270.

Figura 7.1. Cromatograma en el cual no se observa ningún compuesto buscado (Tabla 7.1), solamente se encuentra ruido y la línea base.

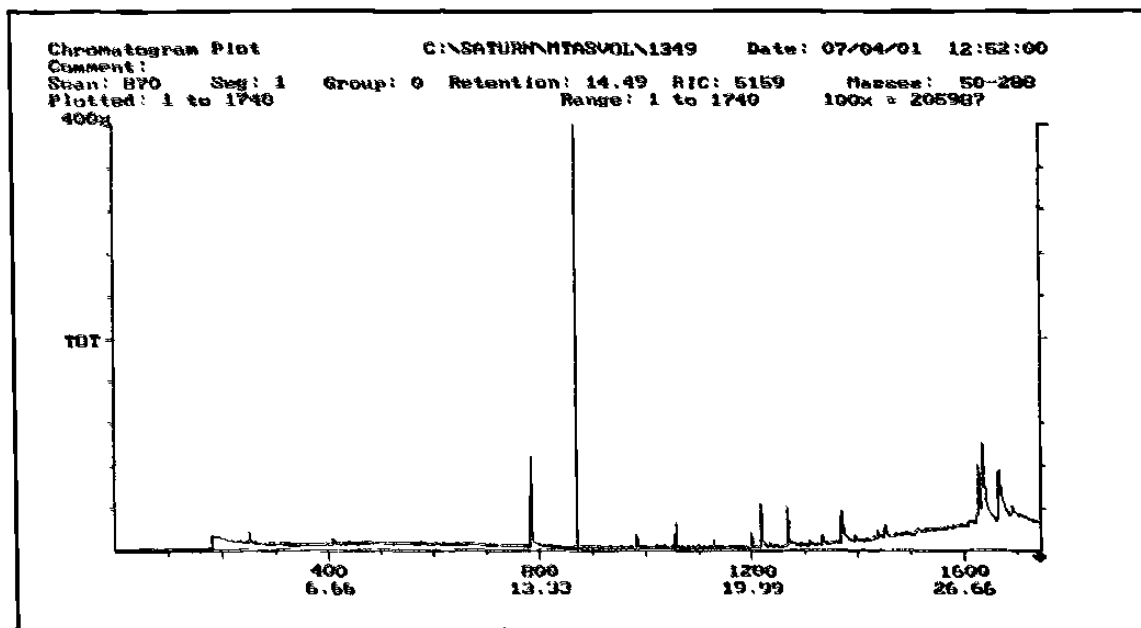


Tabla 7.1 Algunos de los compuestos analizados en las materias primas utilizadas en el proceso HY-RECOVERY por cromatografía de gases con detector de masas.

Compuesto	Valor obtenido (mg/kg)
o-cresol	menor a 5
m-cresol	menor a 5
p-cresol	menor a 5
pentaclorofenol	menor a 5
2,3,4,6 tetraclorofenol	menor a 5
2,4,6 triclorofenol	menor a 5
fenol	menor a 5
hexaclorobenceno	menor a 5
p-diclorobenceno	menor a 5

Posteriormente con ayuda del equipo FTIR de 16 barridos, se realizó un análisis de espectrometría por infrarrojo a los finos de sinter y el polvo de horno eléctrico

de arco para detectar grupos funcionales que indicarán la presencia de algún precursor de dioxina, ver Figura 7.2, y 7.3.

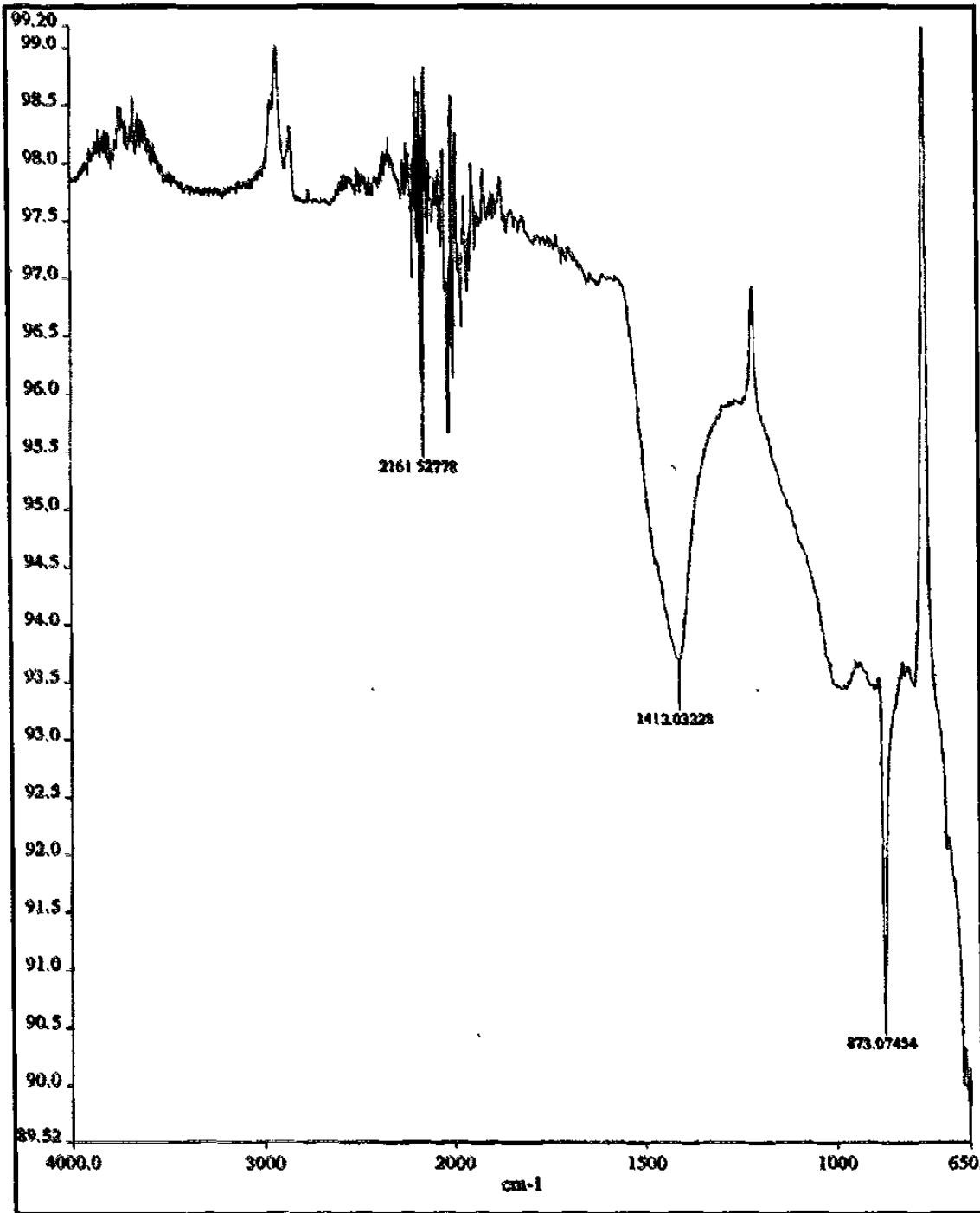


Figura 7.2 Espectro Infrarrojo de los finos de sinter, en el cual no se detectan indicios de la presencia de precursores de dioxinas.

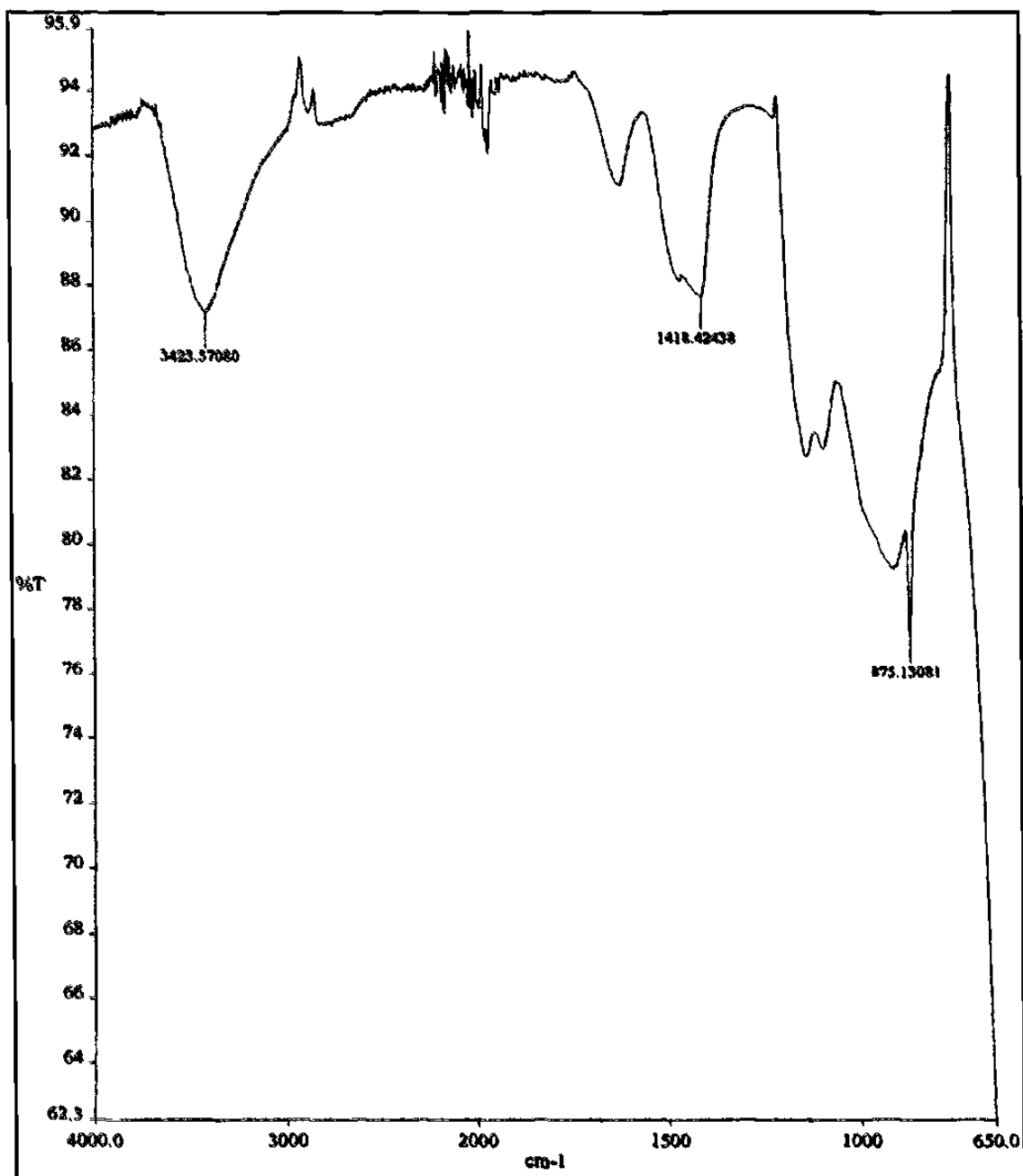


Figura 7.3 Espectro infrarrojo de polvo de horno eléctrico de arco en el cual no se detectaron indicios de precursores de dioxinas.

Debido a que no fue posible detectar algún indicio que indicara la presencia de precursores de dioxinas, no fue posible alimentar información de compuestos formados durante el proceso, para minimizar el error al momento de hacer la simulación de la formación de las dioxinas (PCDD/Fs) en ASPEN PLUS™. Lo cual, dificulta la formación de los compuestos tipo dioxina (PCDD/Fs) analizados, ya

que la molécula tiene que formarse a partir de los elementos que lo forman (C, Cl, O, H), es decir, los átomos de carbono tienen que unirse para formar los anillos bencénicos, unirse a átomos de cloro (clorarse), para posteriormente unirse a uno o dos átomos de oxígeno (oxidarse), siendo necesaria una mayor cantidad de energía para efectuar dichas reacciones, a que si se parte de algún compuesto precursor, tal como los clorofenoles, clorobenzenos, benzenos, fenoles, PCBs, en los cuales solamente es necesario que se lleve a cabo alguna reacción, ya sea la de oxidación, como el caso de los clorobenzenos y de los PCBs (Bifenilos policlorados), ó en el caso de los benzenos, las reacciones de cloración y oxidación.

7.2 PERFIL DE TEMPERATURA DEL PROCESO (PRUEBAS REALIZADAS EN PLANTA PILOTO)

Como ya se había mencionado anteriormente, se realizaron tres pruebas para la toma de perfiles de temperatura (Figuras 7.4 a 7.9) con la finalidad de determinar el rango de temperatura que hay en la cama de sinter. En la Figura 7.4 el termopar 1 (localizado en la cama según la Figura 7.5) cuando alcanza una temperatura de aproximadamente 950°C se quita de su posición, colocándose posteriormente el quemador encima de la cama a sinterizar. Por lo cual, la curva de enfriamiento de dicho termopar, no es significativa. En la misma Figura 7.4, el termopar 2, se tiene que el tipo de termopar utilizado es K, el cual funde a 1,270°C aproximadamente, por lo cual, la curva de calentamiento y enfriamiento registrados después de alcanzar dicha temperatura no es correcta, ya que el termopar ya se había fundido. Además, la temperatura se incrementa rápidamente (en algunos segundos) de temperatura ambiente a temperaturas altas (1,270°C), lo cual, en el caso de formarse algún compuesto tipo dioxina, se obtendría rápidamente su descomposición, ya que se ha reportado su descomposición a temperaturas de aproximadamente 1,000°C⁽⁵¹⁾, pudiéndose formar nuevamente durante el enfriamiento.

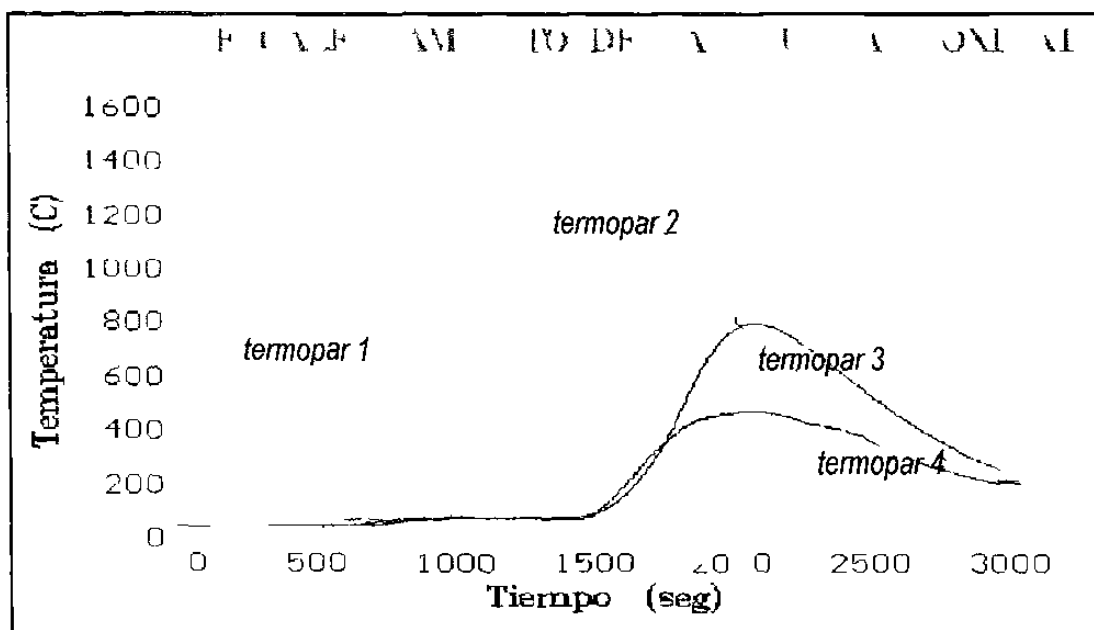


Figura 7.4. Perfil de temperatura de la primera prueba en planta piloto. Los termopares fueron colocados según se muestra en la Figura 7.5.

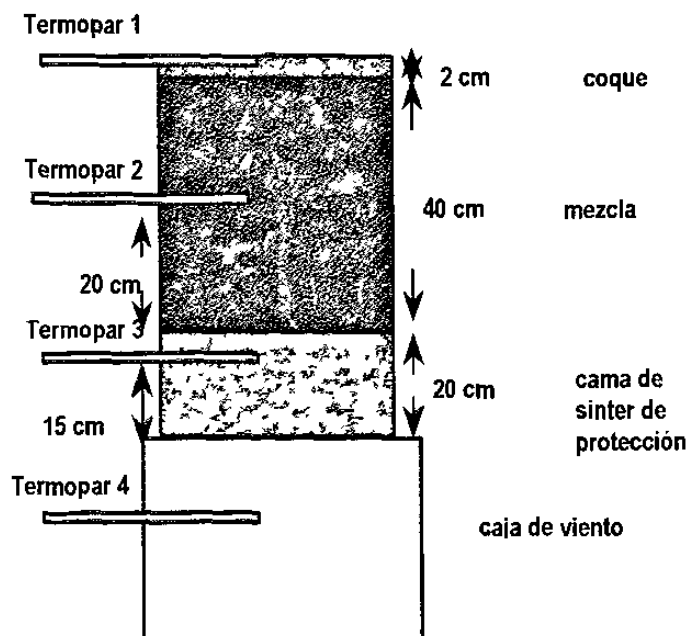


Figura 7.5. Esquema de la localización de los termopares tipo K, durante la realización de la primer prueba en la planta piloto.

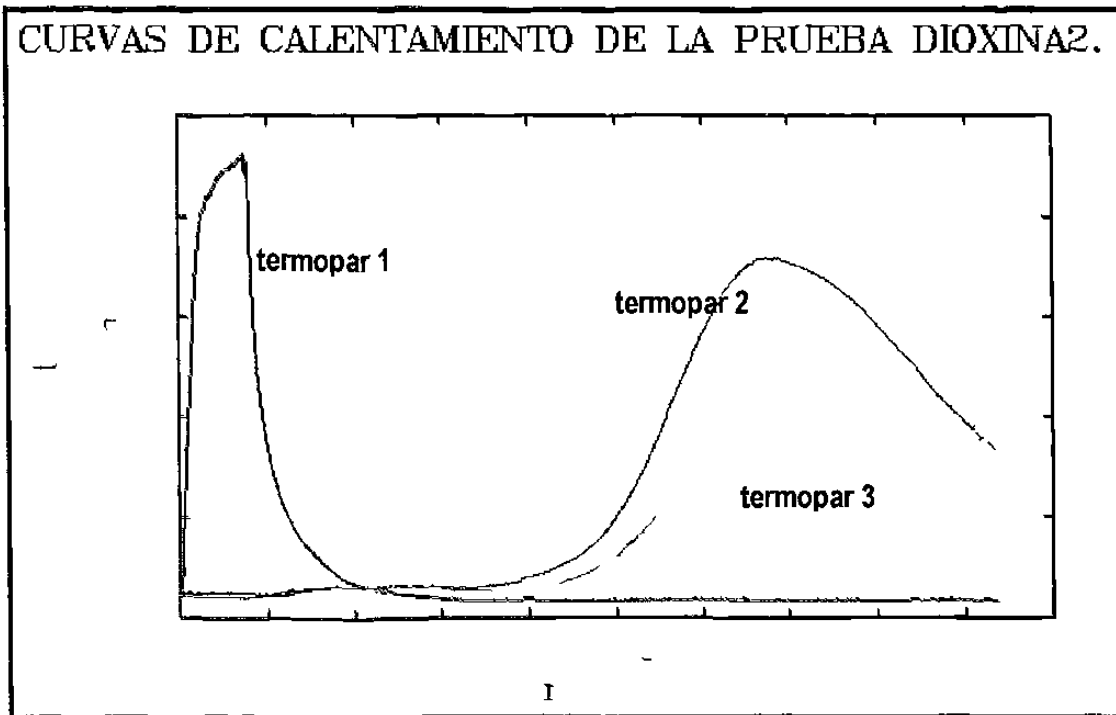


Figura 7.6 Perfil de temperatura de la segunda prueba. Los termopares fueron colocados según se muestra en la Figura 7.7.

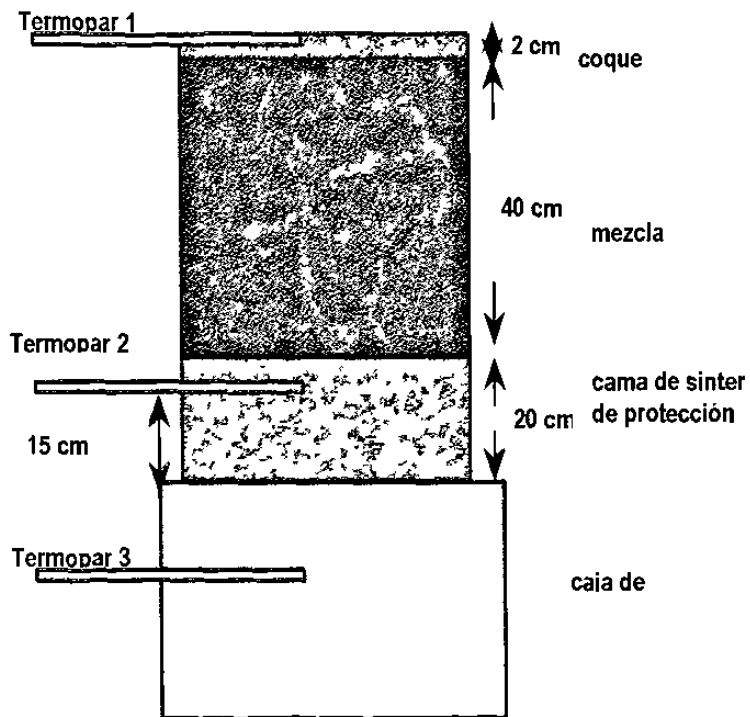


Figura 7.7. Esquema de la localización de los termopares tipo K, durante la realización de la segunda prueba en la planta piloto.

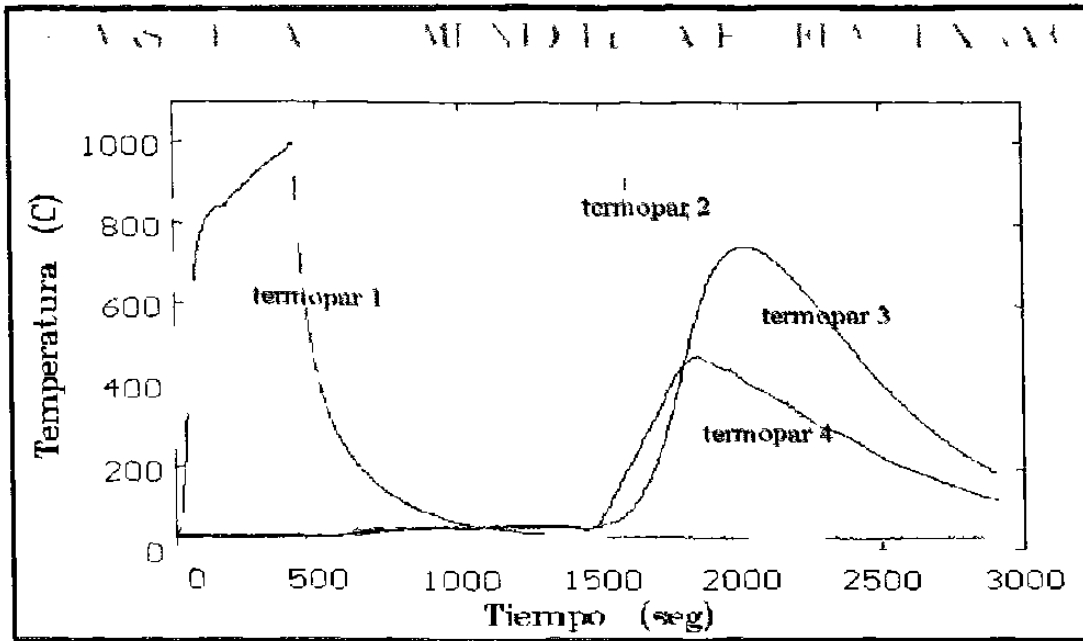


Figura 7.8. Perfil de temperatura de la tercer prueba. Los termopares fueron colocados según se muestra en la Figura 7.9.

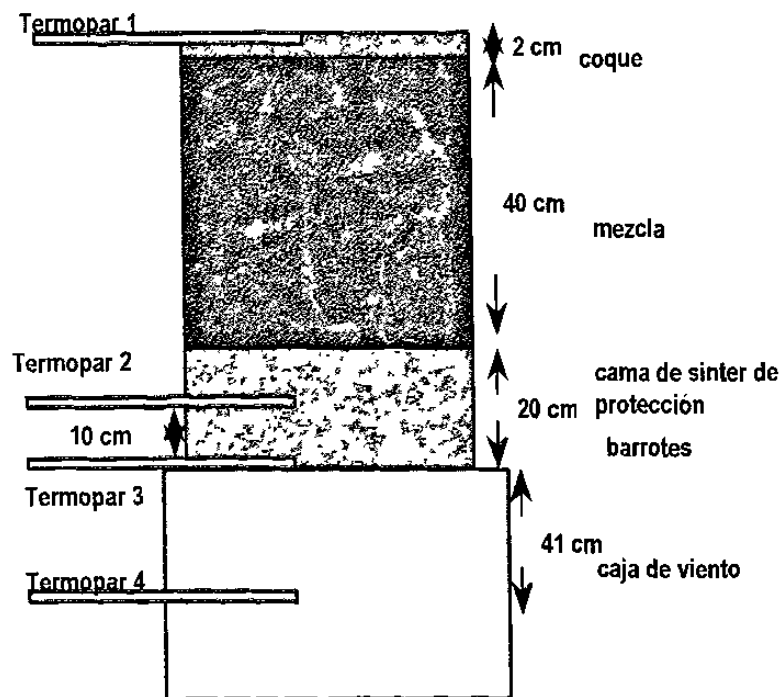


Figura 7.9. Esquema de la localización de los termopares tipo K, durante la realización de la tercer prueba en la planta piloto.

En la Figura 7.10 se muestra una comparación de los perfiles de temperatura de las tres pruebas realizadas, los cuales son muy semejantes.

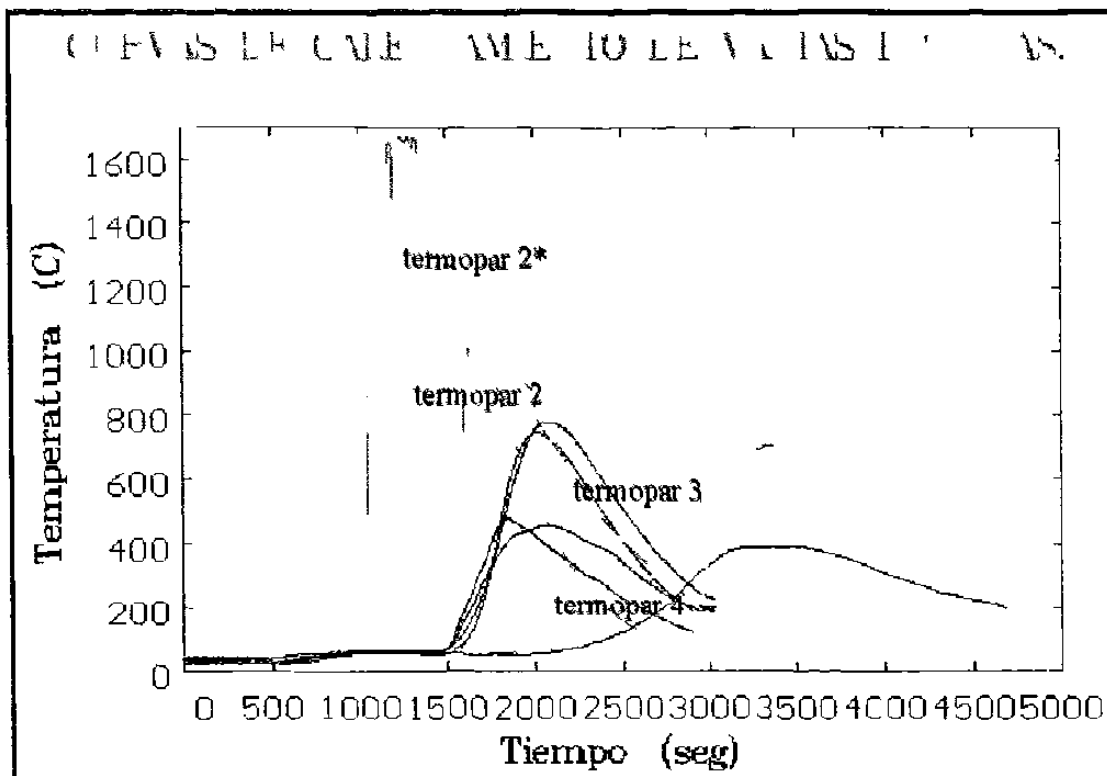


Figura 7.10. Perfil de temperatura de las tres pruebas, donde el termopar 2* es el colocado a mitad de la cama a sinterizar (Figura 7.5).

Por otro lado, también se midió el perfil de presión y temperatura, mostrado en la Figura 7.11.

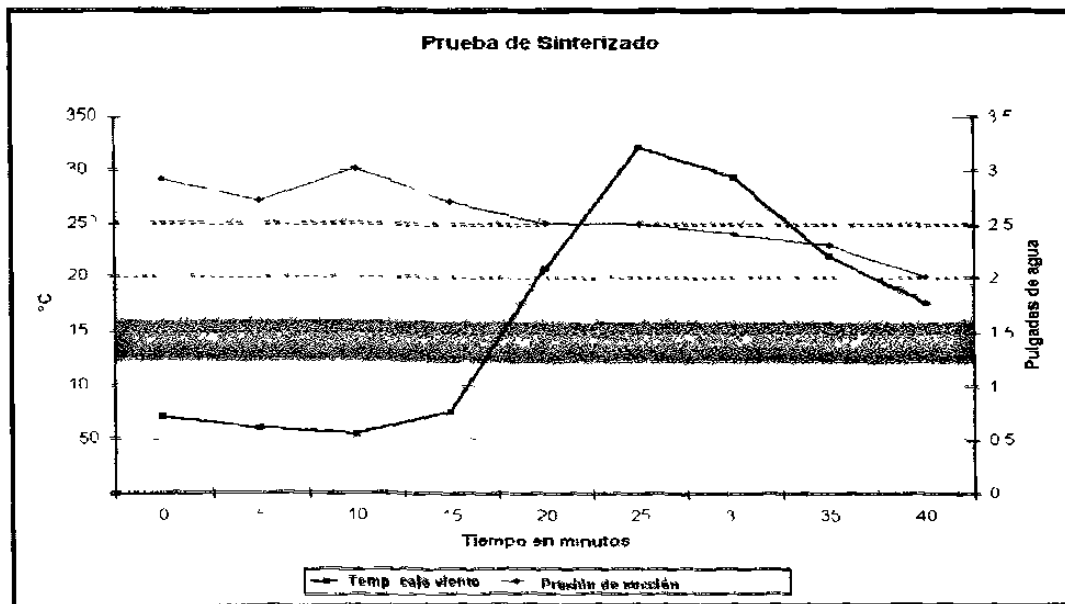


Figura 7.11 Perfil de presión y temperatura medidos en la caja de viento del equipo utilizado en planta piloto.

Como se observa en las Figuras anteriores, existe una variación muy grande de la temperatura en las diferentes zonas del reactor de sinterizado, sobre todo al inicio del proceso. La temperatura tiende a estabilizarse después de 30 minutos.

El frente de temperatura de sinterizado avanza desde las capas superiores hacia las capas inferiores, dependiendo de la succión del aire.

7.3 RESULTADOS DE LA PARTE DE SIMULACIÓN DE FORMACIÓN DE DIOXINAS (PCDD/Fs) EN ASPEN PLUS™.

En los primeros resultados obtenidos de la simulación de la formación de las dioxinas (PCDD/Fs) en el paquete termodinámico ASPEN PLUS™, no se observó la factibilidad termodinámica para la formación de dioxinas en la etapa de sinterización del proceso HY-RECOVERY, bajo las consideraciones de este estudio, utilizando el método de minimización de la energía libre de Gibbs, además de la restricción de materia, por medio del método de multiplicadores indeterminados de Lagrange. Por lo cual se varió el flujo de gas cloro de 0.35 a 1.4 kmol/hr., esto con el fin de determinar el efecto de aumentar la cantidad de cloro bajo las condiciones de operación de la planta industrial (6,600 Nm³/hr. de aire), lo cual equivale a tener materia prima mayormente contaminada con cloro, no teniéndose la factibilidad termodinámica de formación de PCDD/Fs, tal como se muestra en las Figura 7.12. La descripción de la clave utilizada para las dioxinas (PCDD/Fs) se muestra en la Tabla 7.2.

Siendo determinado que bajo el aspecto termodinámico el aumento de la concentración de cloro en el sistema analizado, considerando las cantidades determinadas de la materia prima utilizada, no es un factor determinante en el aumento de la factibilidad termodinámica para la formación de dioxinas (PCDD/Fs).

Por lo cual se hizo evidente la necesidad de variar otros elementos del sistema. Siendo primeramente disminuido el flujo de aire y posteriormente (otra vez) el flujo de cloro en el sistema, siendo estos elegidos ya que son los elementos más importantes, que en determinado momento pudiesen variar al llevarse a cabo diferentes corridas en la planta industrial con diferentes flujos de aire y/o utilizando cargas contaminadas con diversos contaminantes, tales como pinturas, plásticos.

Tabla 7.2. Descripción de clave utilizada para dioxinas (PCDD/Fs).

COMPUESTO	CLAVE
2,3,7,8-TCDD	PCD1
1,2,3,7,8 Penta-CDD	PCD2
1,2,3,6,7,8-Hexa-CDD	PCD3
1,2,3,7,8,9 Hexa-CDD	PCD4
1,2,3,4,7,8 Hexa-CDD	PCD5
1,2,3,4,6,7,8 Hepta-CDD	PCD6
1,2,3,4,6,7,8,9-OCDD	PCD7
2,3,7,8 TCDF	PCF1
1,2,3,7,8- Penta-CDF	PCF2
2,3,4,7,8- Penta-CDF	PCF3
1,2,3,6,7,8-Hexa-CDF	PCF4
1,2,3,7,8,9- Hexa-CDF	PCF5
1,2,3,4,7,8- Hexa-CDF	PCF6
2,3,4,6,7,8- Hexa-CDF	PCF7
1,2,3,4,6,7,8- Hepta-CDF	PCF8
1,2,3,4,7,8,9- Hepta-CDF	PCF9
1,2,3,4,6,7,8,9-OCDF	PCF10

Comparación de PCDD/Fs a 1.40 Kmol/hr de Cloro gas
6.600 Nm³/hr de aire

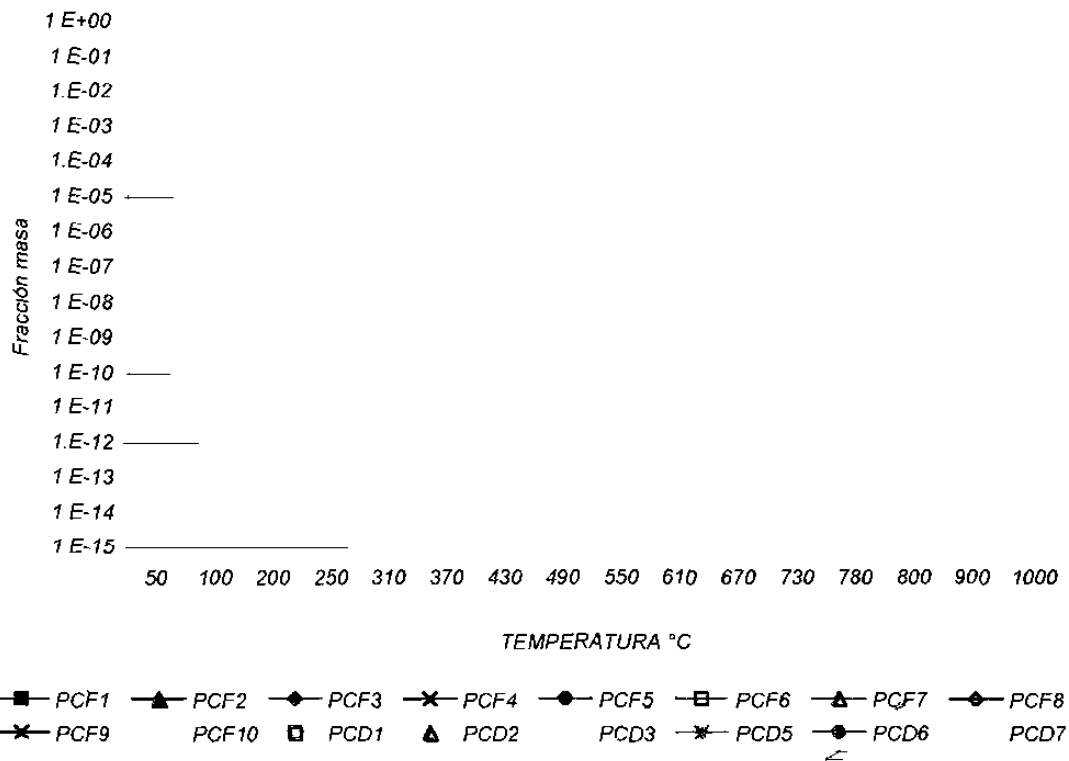


Figura 7.12 Ejemplo del resultado de la simulación de la formación de dioxinas con las condiciones (flujo de aire, 6600 Nm³/hr de aire) que se tienen en la planta a escala industrial, pero teniendo un flujo de gas cloro (Cl₂) de 1.40 kmol/hr.

7.3.1 EFECTO DE LOS DIFERENTES FLUJOS DE AIRE

Con los resultados previos obtenidos, se decidió disminuir el flujo de aire que se introduce al sistema (manteniendo igual la cantidad de los demás elementos) hasta detectar la formación de dioxinas, eligiéndose el rango de 950 a 1350 Nm³/hr.

Obteniéndose que al disminuir el flujo de aire presente en el sistema (O₂) la factibilidad de formar las dioxinas(PCDD/Fs) aumenta, debido a que son productos de combustión incompleta, por lo cual, al disminuir el flujo de aire no hay el oxígeno suficiente para que se efectúe la combustión completamente

aumentando la factibilidad termodinámica de formación de estos compuestos, lo cual se muestra en las Figuras 7.13 y 7.14 para los PCDFs, 7.15 y 7.16 para los PCDDs (ver el resto de dioxinas analizadas en el ANEXO D).

Además al aumentar el flujo de aire el rango de temperaturas en el cual hay factibilidad termodinámica de la formación de dioxinas disminuye. Es decir, este tipo de compuestos se descompone a más baja temperatura conforme aumenta el flujo de aire. Siendo evidente la formación de otro tipo de compuestos característicos de una combustión efectuada bajo condiciones más adecuadas, tal es el caso del CO_2 (Figura 7.23).

Teniéndose un caso especial en los compuestos octa clorados(Figuras 7.17 y 7.18 para los OCDFs y OCDDs respectivamente) a temperaturas menores de 370°C (aproximadamente), Figuras 7.19 y 7.20 a 250°C , Figuras 7.21 y 7.22 a 370°C , ya que la factibilidad termodinámica de formación de estos aumenta conforme aumenta el flujo de aire, debido a que este tipo de compuestos, cuando aumenta el flujo de aire la combustión se efectúa mejor y hay un aumento en la formación de CO_2 , Figura 7.23, tendiendo el cloro disponible a formar parte de compuestos más clorados (OCDD/Fs). Además que dichos compuestos octa clorados son los que bajo esas restricciones de materia son los que minimizan más la energía libre de Gibbs Total (G^t), bajo las condiciones de temperatura y presión (1 atmósfera) especificadas. Para que esto ocurra es necesario que se tenga la energía necesaria para formar dichos compuestos (energía de formación) considerando también la entropía, lo cual proviene de la definición de la energía libre de Gibbs, donde $\Delta G = \Delta H - T\Delta S$.

Ya que a temperatura de 800°C , Figuras 7.24 y 7.25, ya no se tiene dicho efecto en los compuestos octa clorados, es decir, conforme aumenta el flujo de aire se descomponen dichos compuestos, ya que se tiene la energía necesaria para descomponerlos, favoreciendo la formación de otros compuestos, tal es el caso del CO_2 , Figura 7.23.

Además de comprobarse la mayor factibilidad termodinámica de formación de los PCDFs a los PCDDs, anteriormente reportado por Zaytsev⁽²³⁾ et. al 1998 y Thompson⁽²⁵⁾ et. al 1994, Kasay⁽⁵⁾ et. al 2001, Buekens⁽²⁹⁾, et. al 2001, Figuras 7.26 y 7.27 a 950 y 1,350 Nm³/hr. de aire respectivamente.

Con lo anterior, es evidente que el proceso HY-RECOVERY a escala industrial opera bajo condiciones de exceso de aire, lo cual favorece que no se observe factibilidad termodinámica para la formación de dioxinas (PCDD/Fs), según las consideraciones efectuadas en el presente trabajo. Por lo cual, se determinó el exceso de aire. Siendo éste de aproximadamente 98%, los cálculos se muestran en el Anexo E.

COMPARACIÓN DE 2,3,7,8 TCDF A DIFERENTES FLUJOS DE AIRE

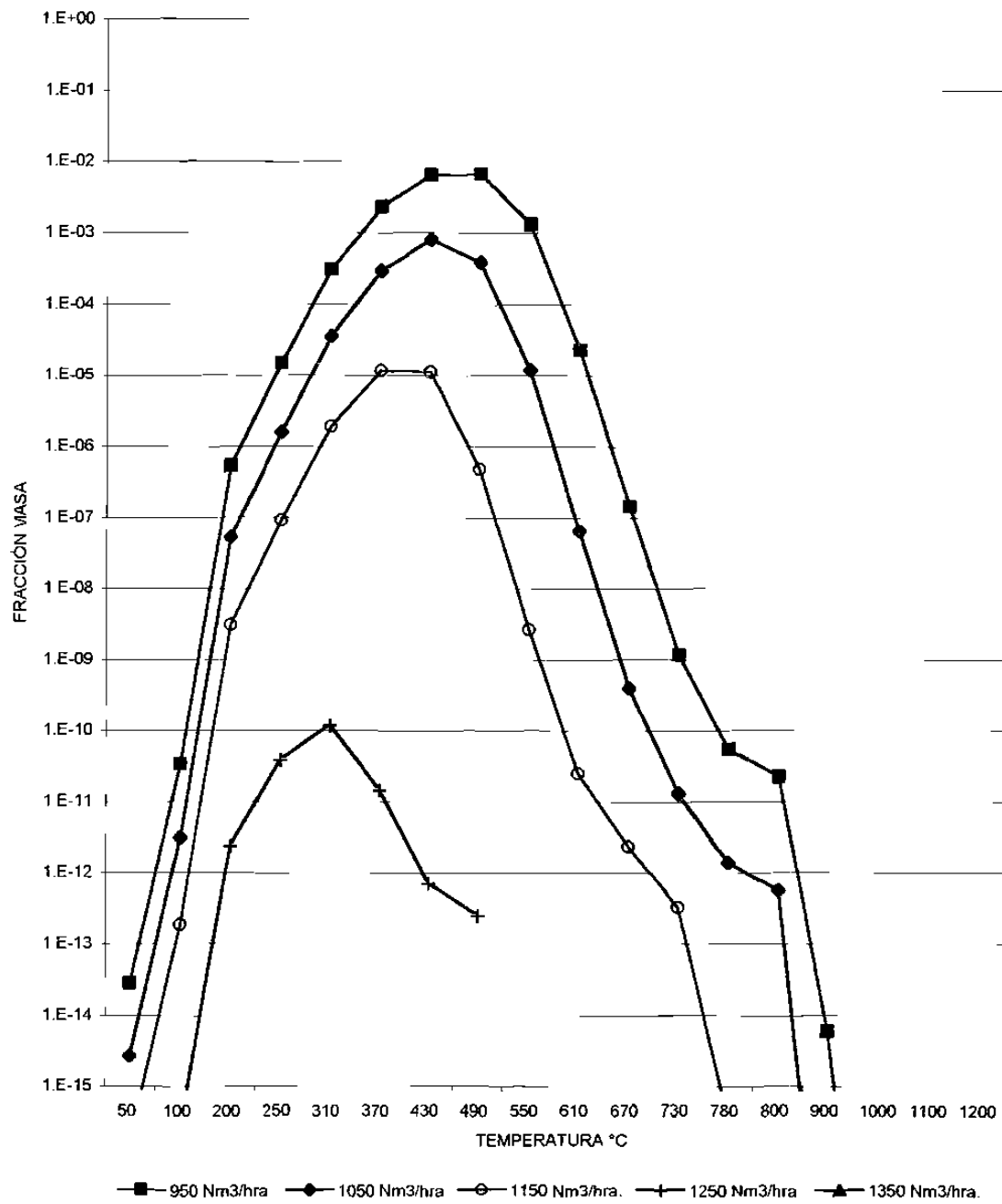


Figura 7.13 Resultados de la simulación de la formación del 2,3,7,8 TCDF disminuyendo el flujo de aire introducido al sistema de 950 a 1,350 Nm³/hr.

COMPARACIÓN DE 2,3,4,7,8 PCDF A DIFERENTES FLUJOS DE AIRE

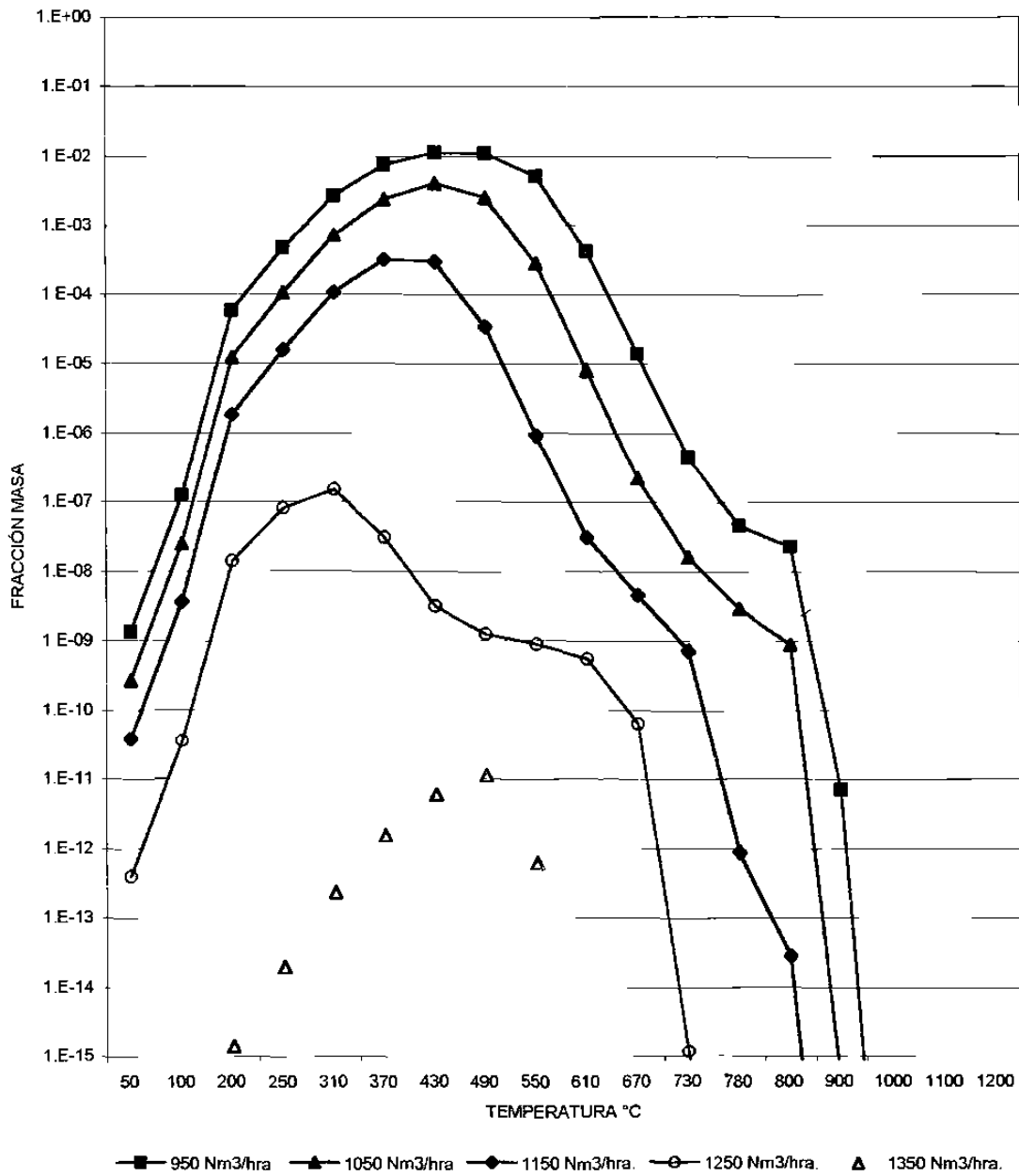


Figura 7.14 Resultados de la simulación de la formación del 1,2,3,7,8 PCDF, disminuyendo el flujo de aire introducido al sistema de 950 a 1,350 Nm³/hr.

COMPARACIÓN DE 2,3,7,8 TCDD A DIFERENTES FLUJOS DE AIRE

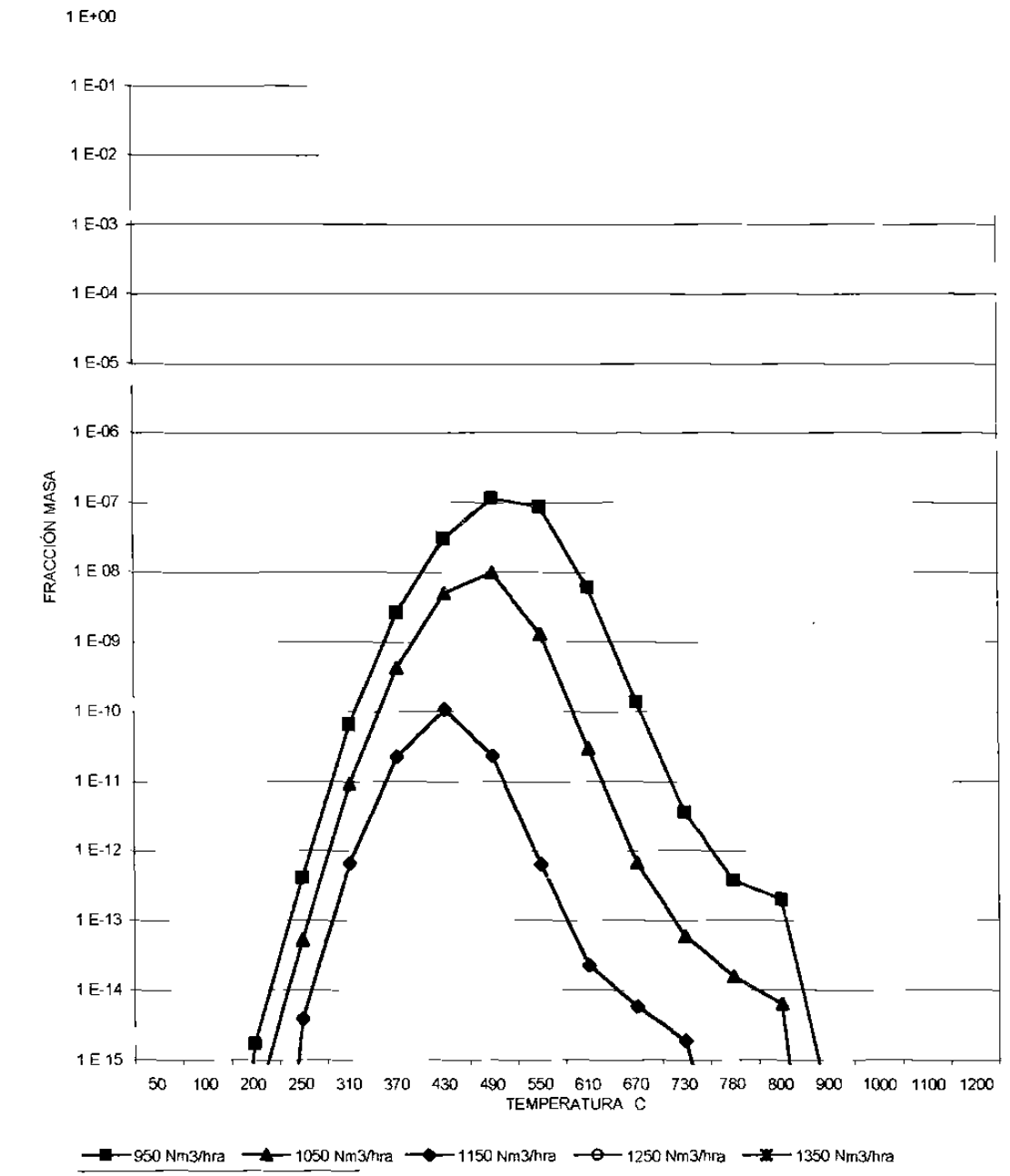


Figura 7.15 Resultados de la simulación de la formación del 2,3,7,8 TCDD disminuyendo el flujo de aire introducido al sistema de 950 a 1,350 Nm³/hr.

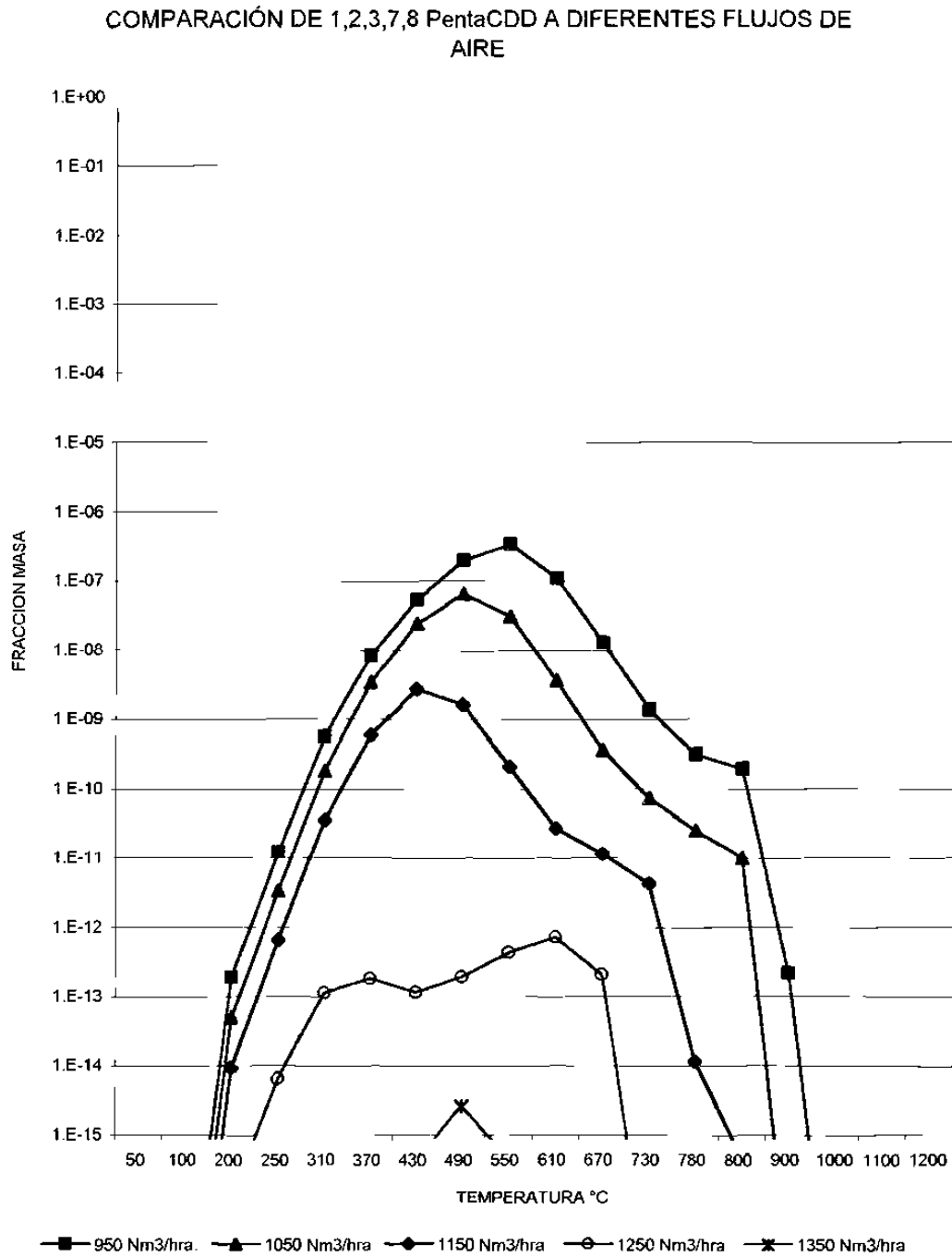


Figura 7.16 Resultados de la simulación de la formación del 1,2,3,7,8 PCDD, disminuyendo el flujo de aire introducido al sistema de 950 a 1,350 Nm³/hr.

COMPARACIÓN DE OCDF A DIFERENTES FLUJOS DE AIRE

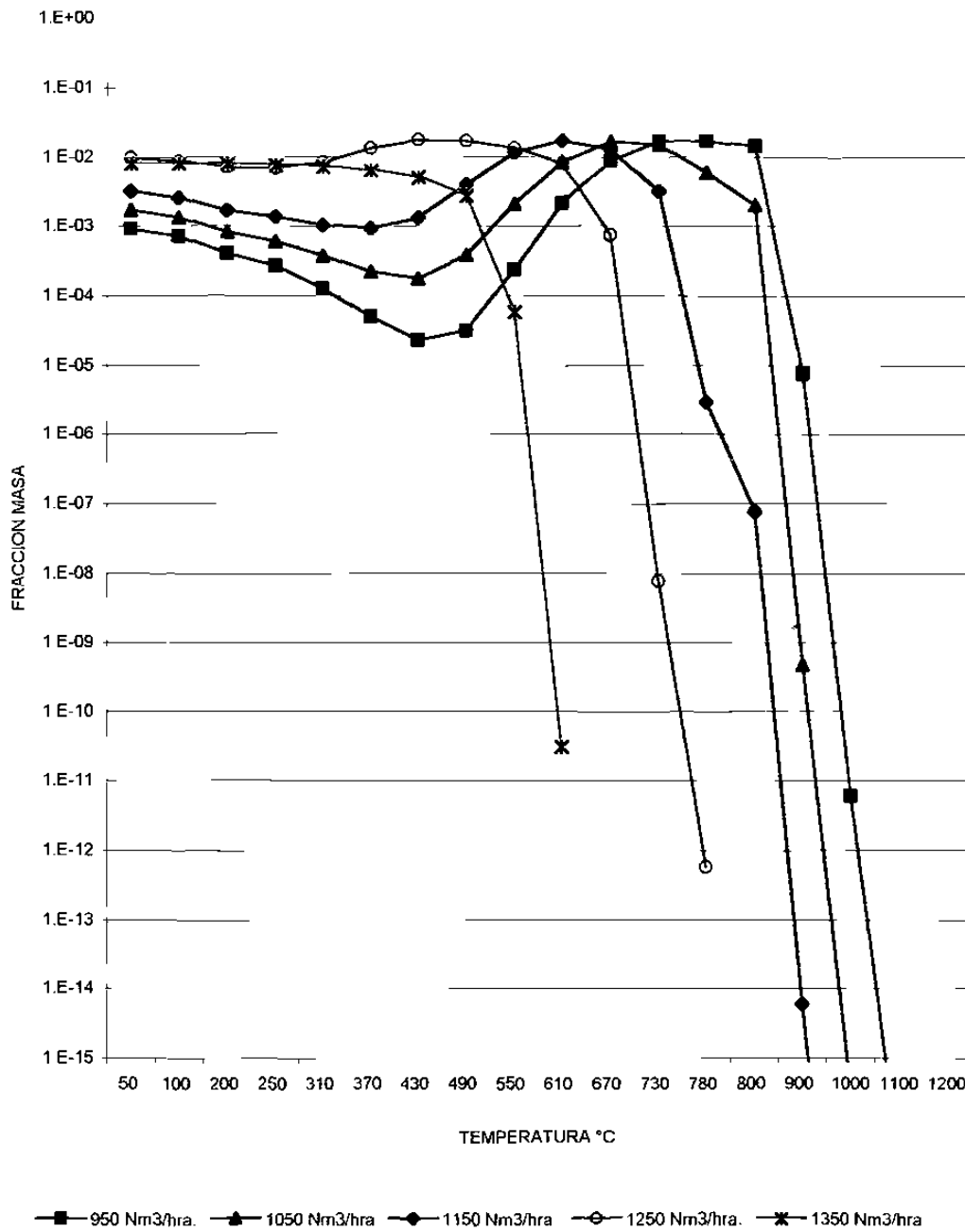


Figura 7.17 Resultados de la simulación de la formación del 1, 2, 3, 4, 6, 7, 8, 9 OCDF teniendo un flujo de aire introducido al sistema de 950 a 1,350 Nm³/hr.

COMPARACIÓN DE OCDD A DIFERENTES FLUJOS DE AIRE

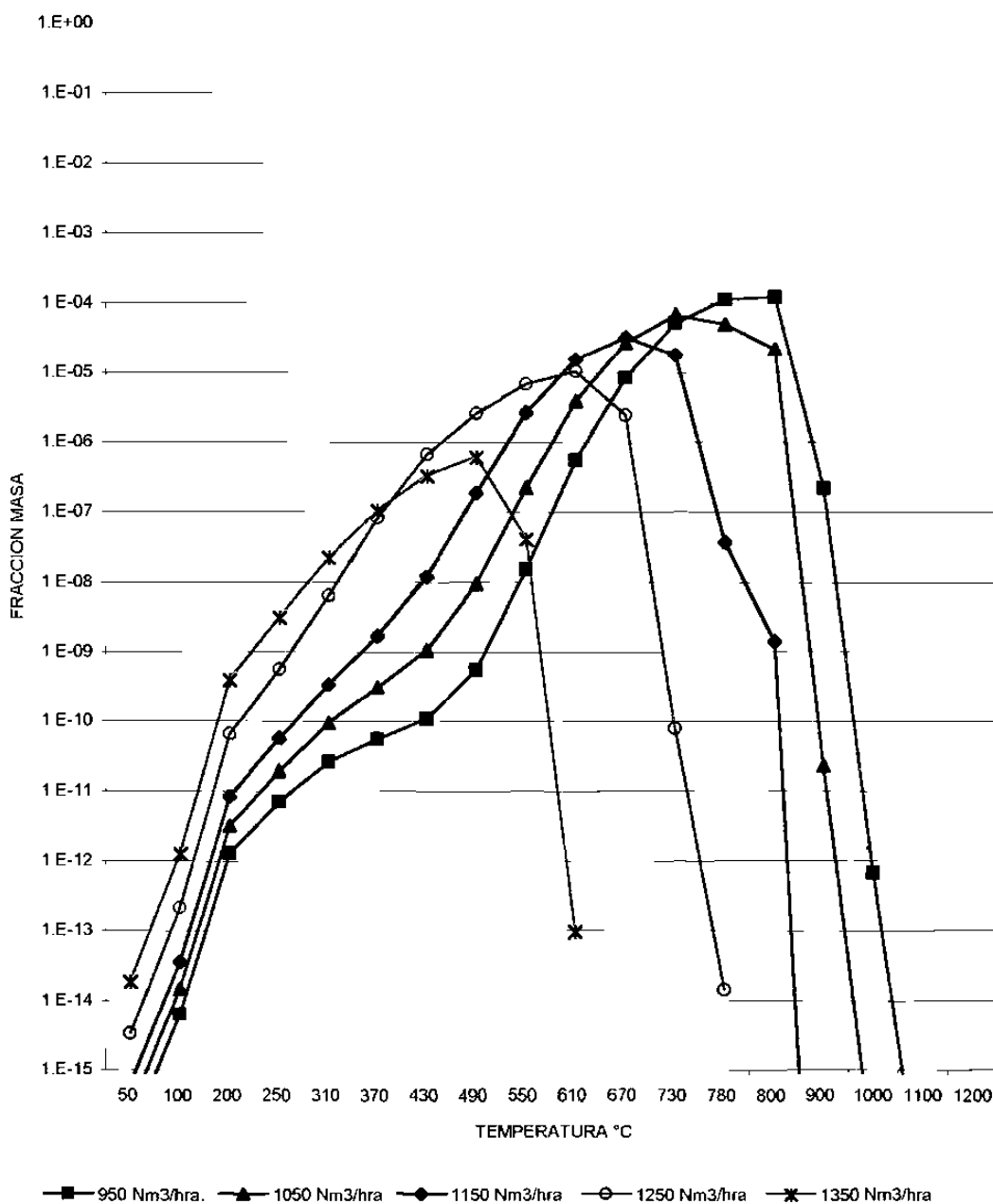


Figura 7.18 Resultados de la simulación de la formación del 1,2,3,4,6,7,8,9 OCDD teniendo un flujo de aire introducido al sistema de 950 a 1,350 Nm³/hr.

COMPARACIÓN DE PCDFs a 250°C Y DIFERENTES FLUJOS DE AIRE

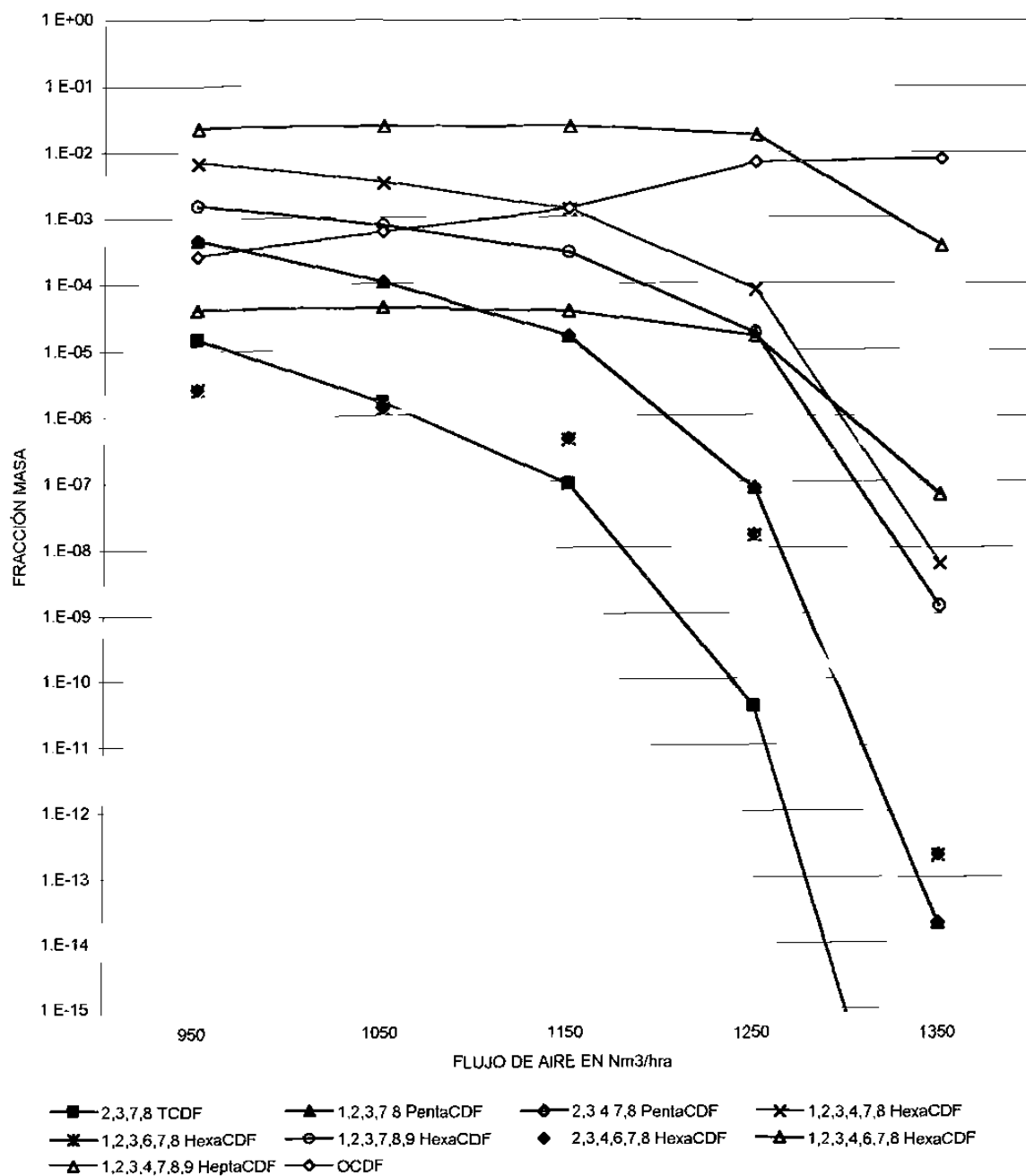


Figura 7.19 Resultados de la simulación de la formación de los PCDFs a 250 C, teniendo un flujo de aire introducido al sistema de 950 a 1,350 Nm³/hr.

COMPARACIÓN DE PCDDs A 250°C Y DIFERENTES FLUJOS DE AIRE

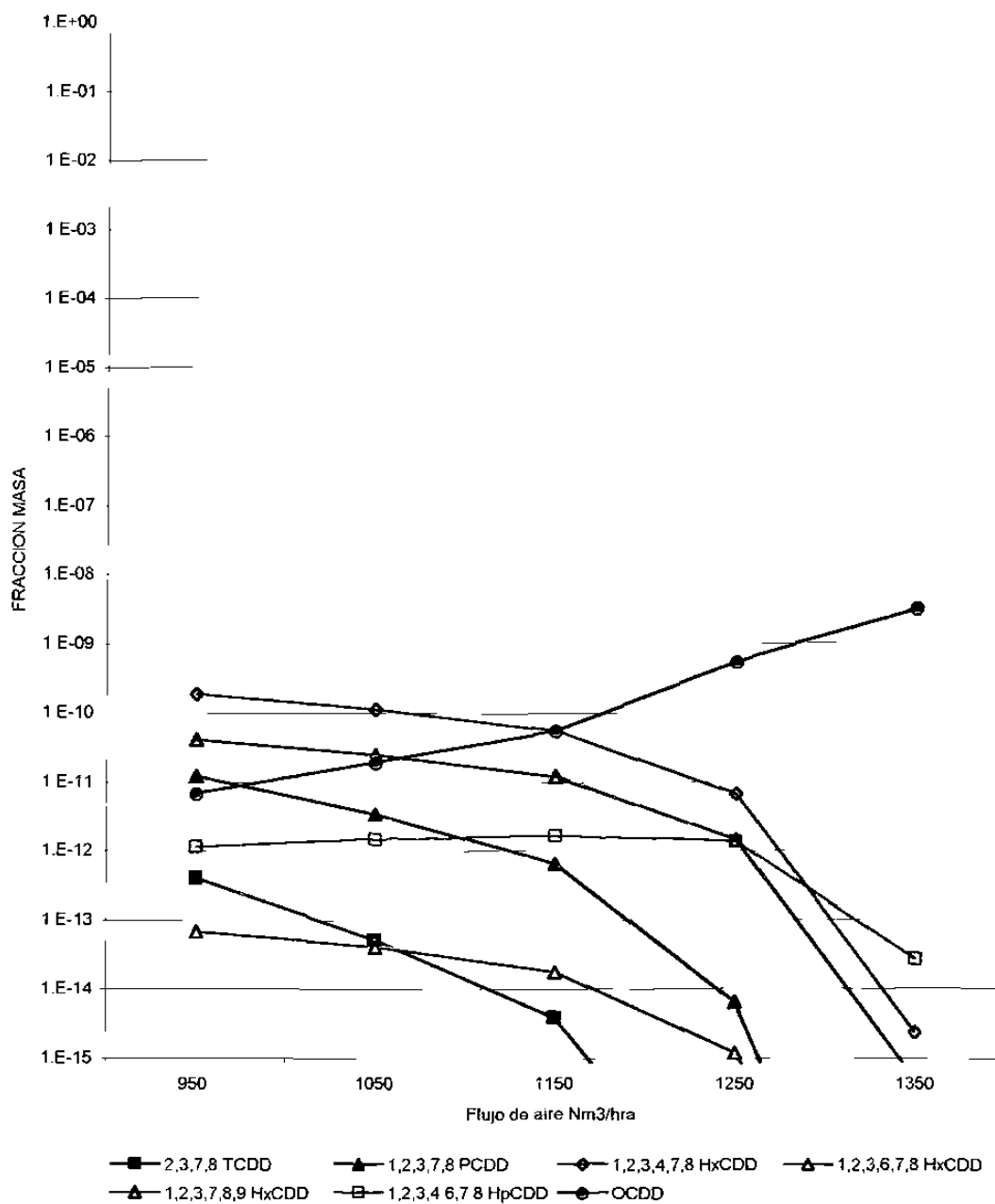


Figura 7.20 Resultados de la simulación de la formación de los PCDDs a 250 C, teniendo un flujo de aire introducido al sistema de 950 a 1,350 Nm³/hr.

COMPARACIÓN DE PCDDs A 370°C Y DIFERENTES FLUJOS DE AIRE

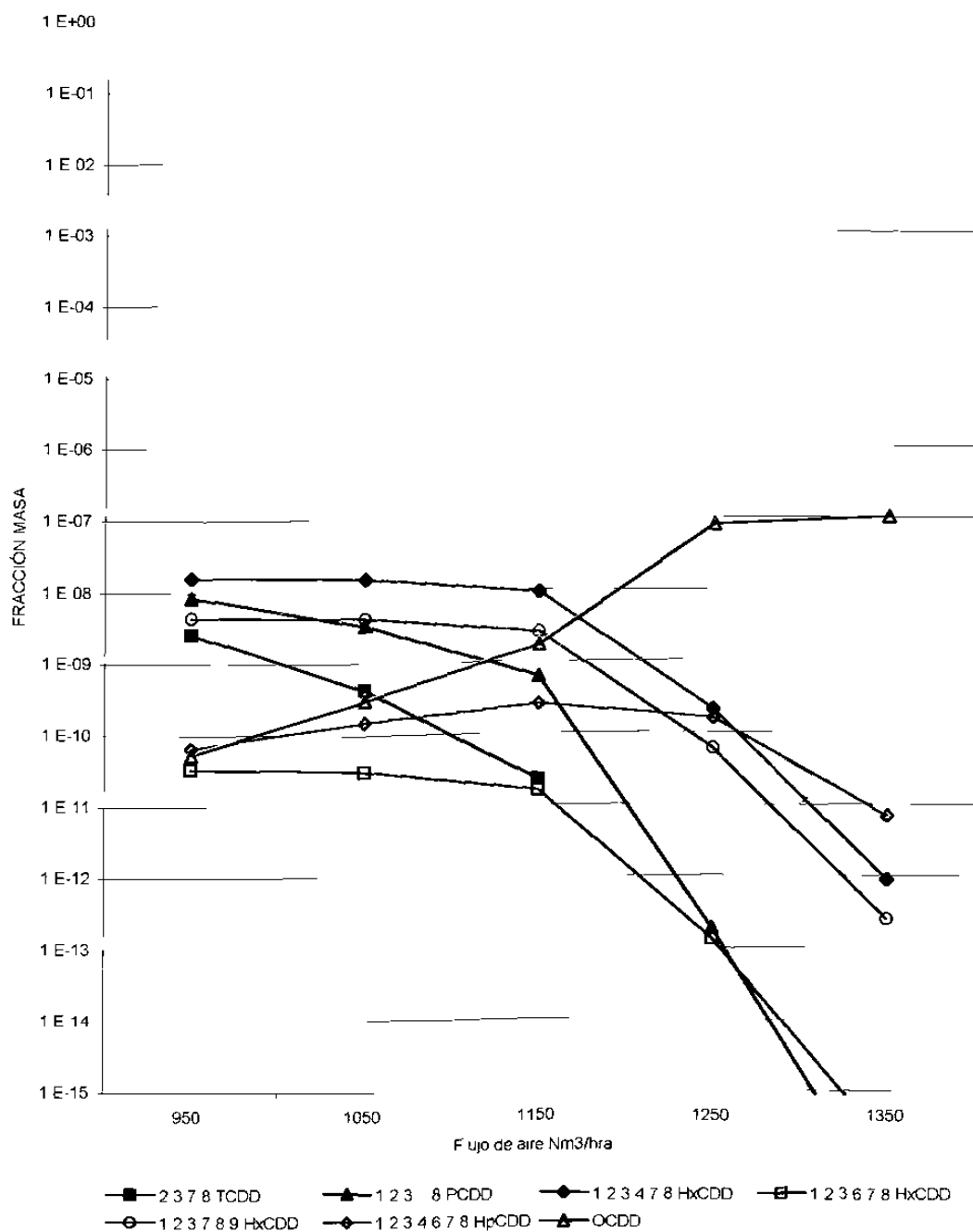


Figura 7.21 Resultados de la simulación de la formación de los PCDDs a 370 C, teniendo un flujo de aire introducido al sistema de 950 a 1,350 Nm³/hr.

COMPARACIÓN DE PCDFs A 370°C Y DIFERENTES FLUJOS DE AIRE

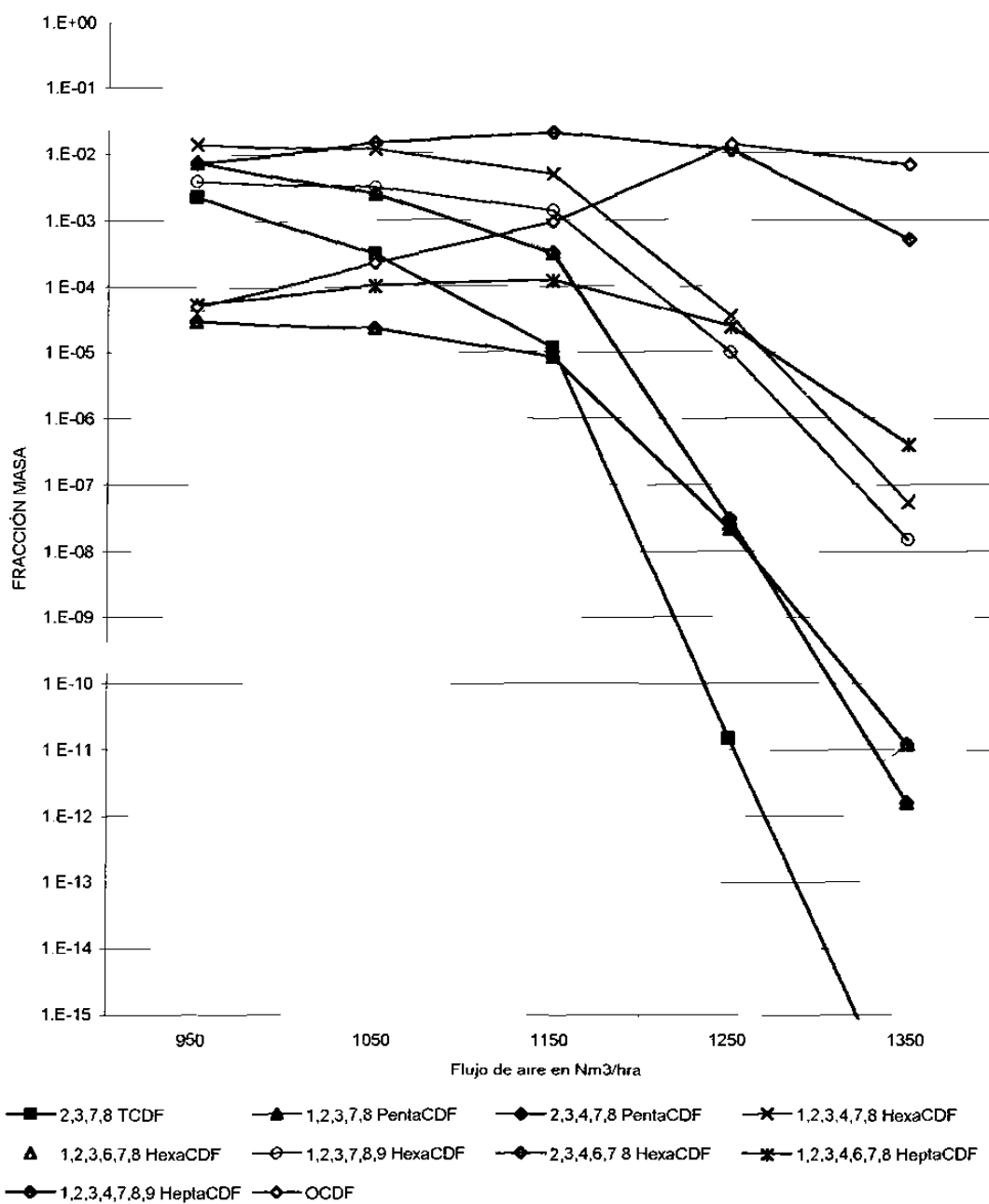


Figura 7.22 Resultados de la simulación de la formación de los PCDFs a 370 C, teniendo un flujo de aire introducido al sistema de 950 a 1,350 Nm³/hr.

COMPARACIÓN DE LA FORMACIÓN DE CO vs. CO₂
A 370°C Y DIFERENTES FLUJOS DE AIRE

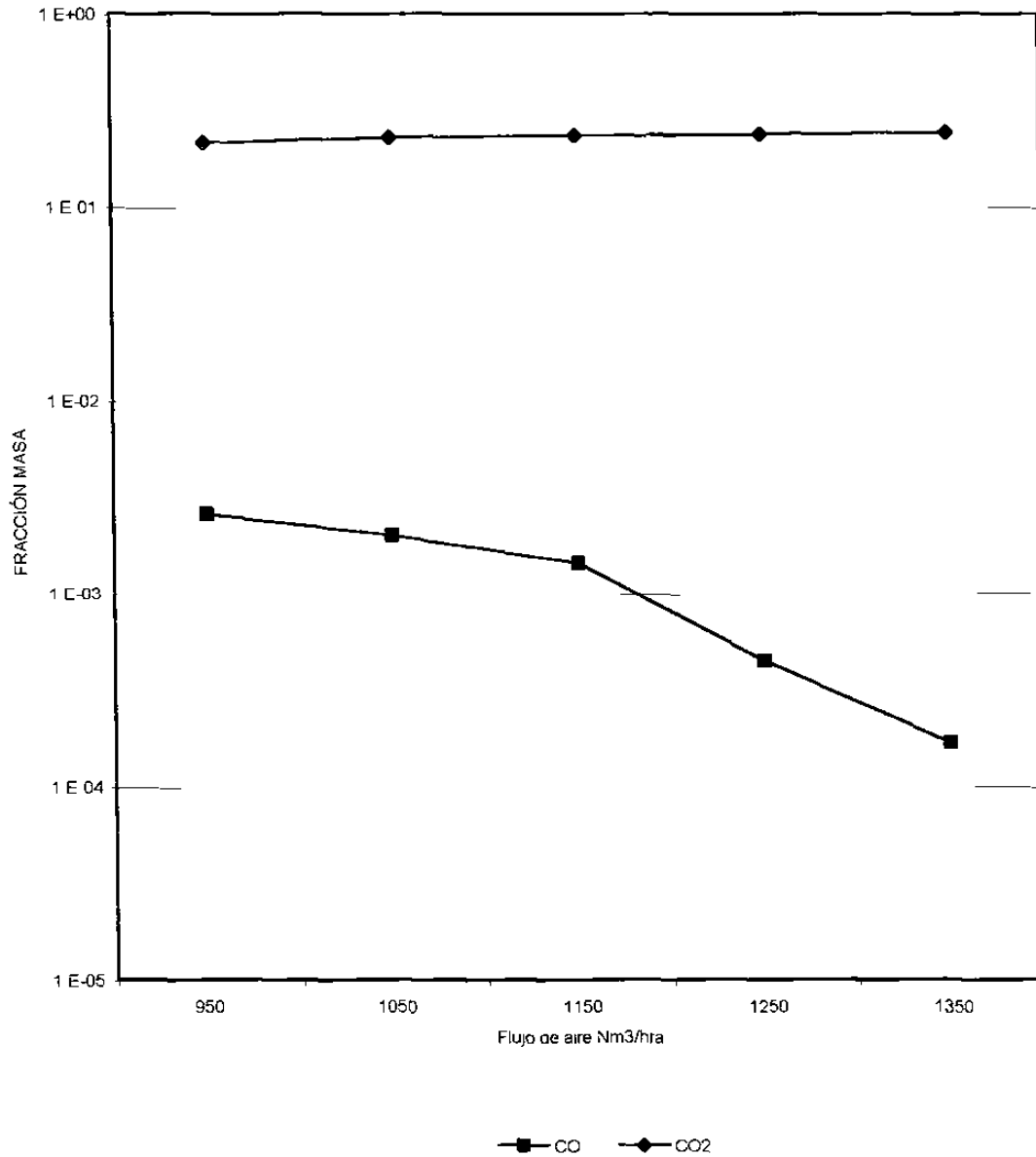


Figura 7.23 Resultados de la simulación de la formación de CO y CO₂ a 370 C, teniendo flujo de aire introducido al sistema de 950 a 1,350 Nm³/hr.

COMPARACION DE PCDFs A 800°C Y DIFERENTES FLUJOS DE AIRE

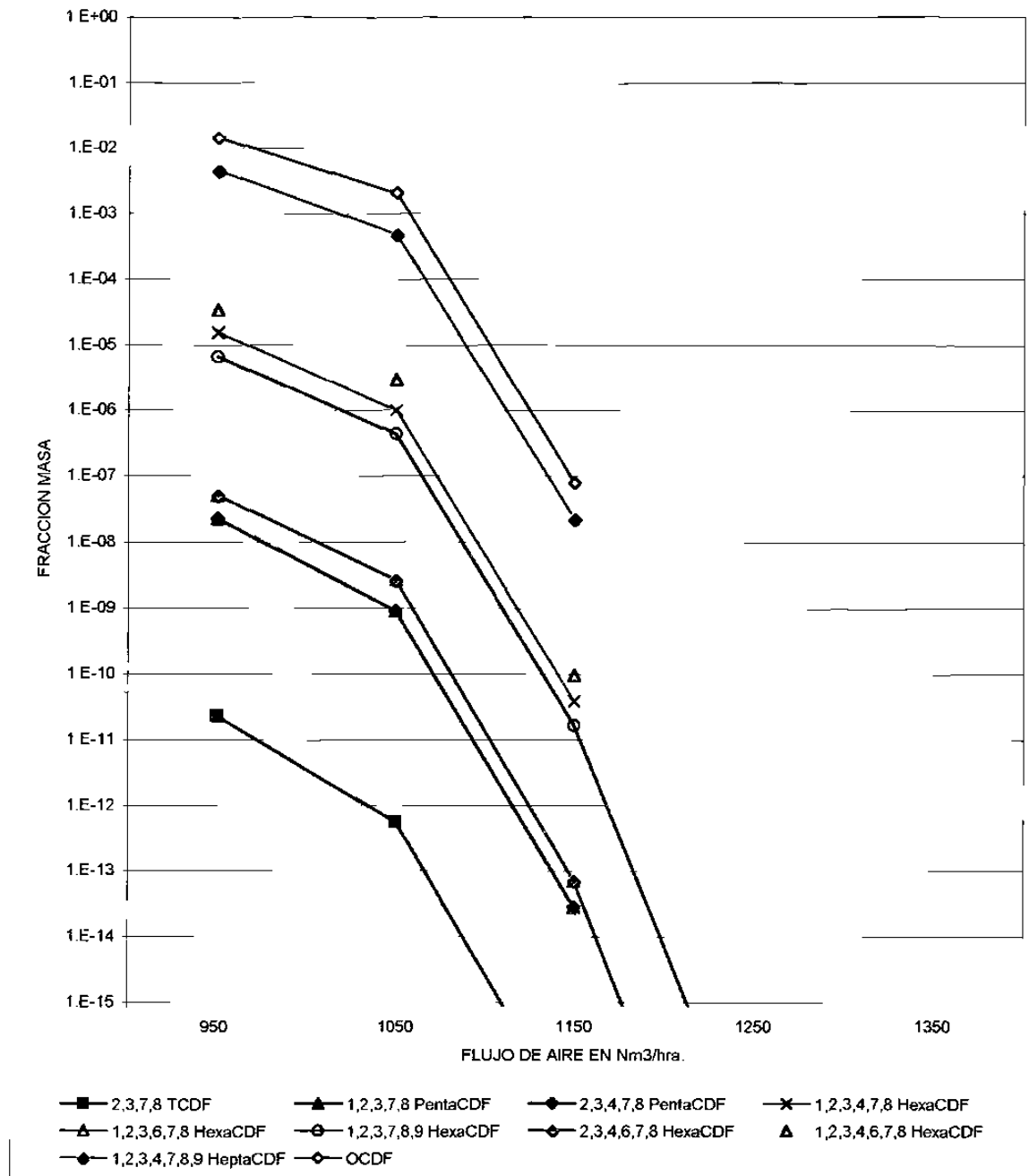


Figura 7.24 Resultados de la simulación de la formación de los PCDFs a 800 C, teniendo un flujo de aire introducido al sistema de 950 a 1,350 Nm³/hr.

COMPARACIÓN DE PCDDs A 800°C Y DIFERENTES FLUJOS DE AIRE

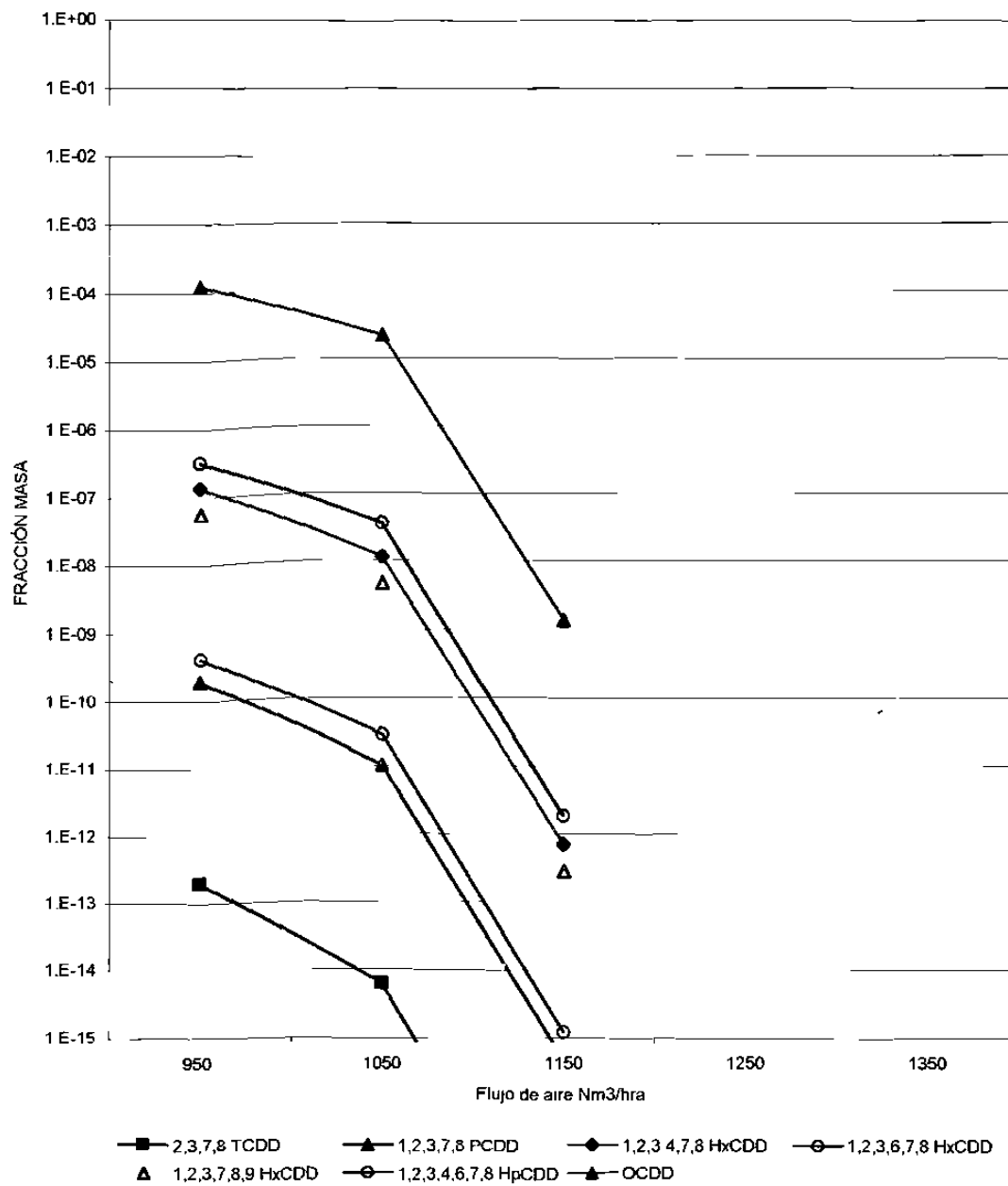


Figura 7.25 Resultados de la simulación de la formación de los PCDDs a 800 C, teniendo un flujo de aire introducido al sistema de 950 a 1,350 Nm³/hr.

COMPARACIÓN DE PCDF(10) vs. PCDD(7) A 950 Nm³/hra. DE AIRE
CON LA MISMA CANTIDAD DE C, CI, H DETERMINADOS EN
MATERIALES

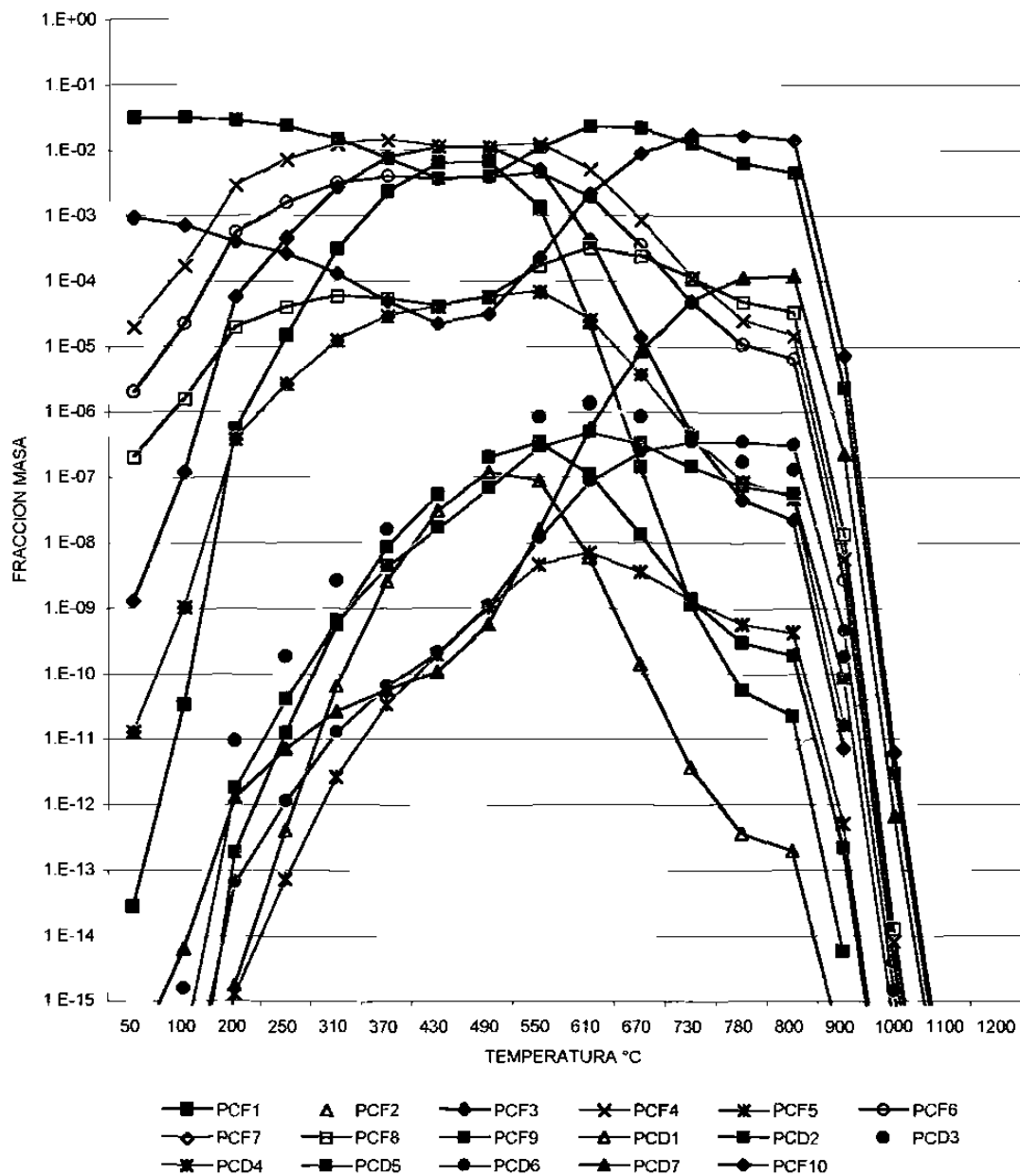


Figura 7.26 Resultados de la simulación de la formación de los PCDD/Fs (17 compuestos analizados) teniendo un flujo de aire introducido al sistema de 950 Nm³/hr.

COMPARACIÓN DE PCDF(10) vs. PCDD(7) A 1350 Nm³/hra. DE AIRE
CON LA MISMA CANTIDAD DE C, Cl, H DETERMINADOS EN MATERIALES

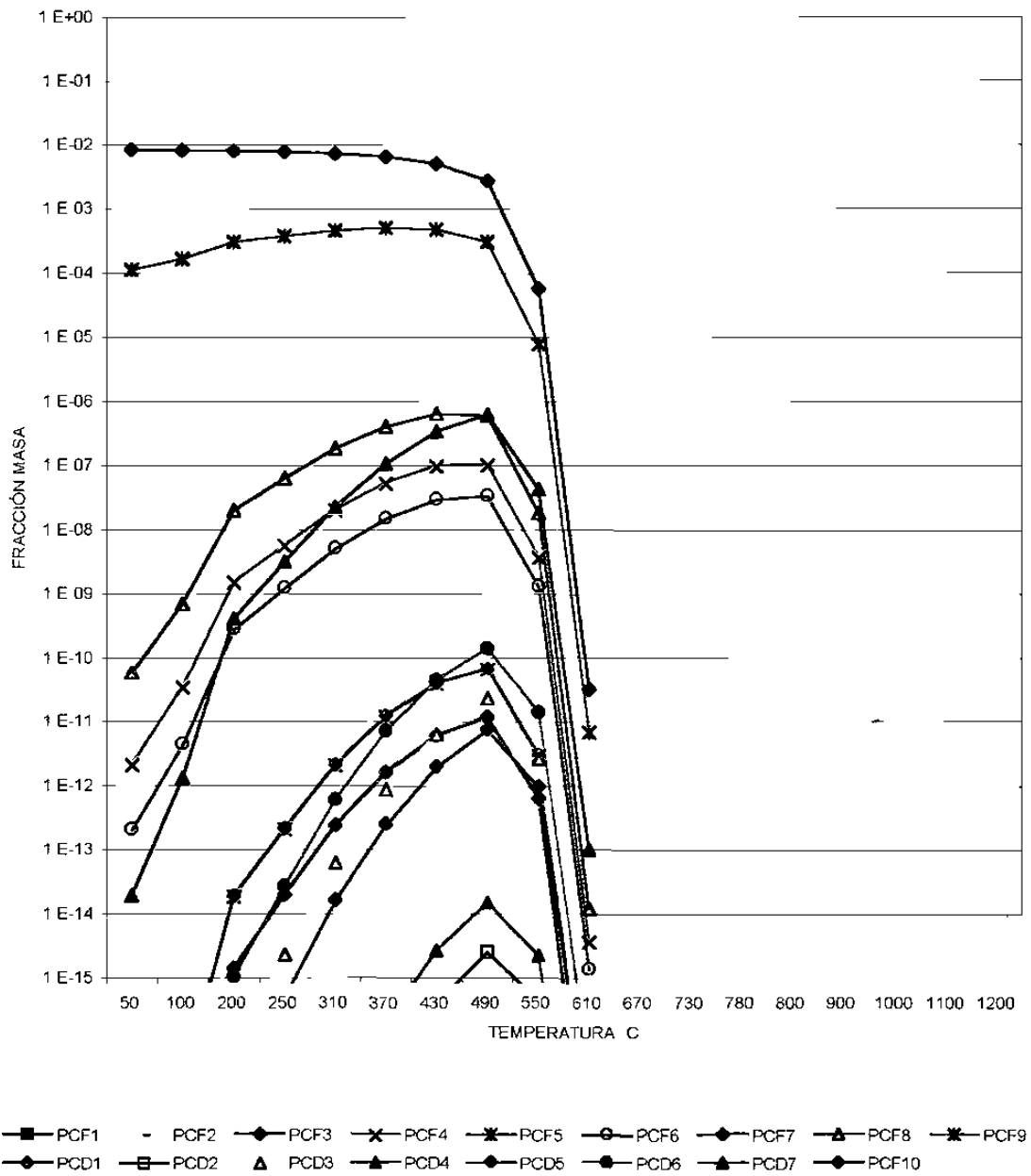


Figura 7.27 Resultados de la simulación de la formación de los PCDD/Fs (17 compuestos analizados) teniendo un flujo de aire introducido al sistema de 1,350 Nm³/hr.

7.3.2 EFECTO DE LA VARIACIÓN DE LA CANTIDAD EN KMOL DE CLORO

Con el fin de modelar el efecto del cloro (E. Kasay⁽²⁸⁾, en el año 2001), se utilizaron cantidades variables del mismo para observar su efecto en la factibilidad de formación de dioxinas.

Para lo cual se eligió arbitrariamente el flujo de aire de 1,350 Nm³/hr, manteniendo igual el contenido de carbono, e hidrógeno determinados en los materiales. Obteniéndose que en los congéneres menos clorados, su factibilidad termodinámica de formación disminuye al aumentar el contenido de cloro a temperaturas de 250°C (Figuras 7.28 y 7.29) y 370°C (Figuras 7.30 y 7.31), debido a que se tiene el cloro disponible pero no la energía suficiente para aumentar su formación conforme aumenta el cloro, siendo evidente la mayor influencia de la temperatura en la factibilidad de formación de las dioxinas, que la concentración del cloro disponible.

Teniéndose un caso especial en los compuestos octa clorados (OCDDs y OCDFs), ya que su factibilidad termodinámica de formación aumenta conforme aumenta el flujo de cloro debido a que en este tipo de compuestos, cuando aumenta el flujo de cloro hay más cloro disponible para formar este tipo de compuestos. Además de que dichos compuestos son los que minimizan más la energía libre de Gibbs total, bajo las condiciones de temperatura y a una atmósfera de presión, considerando el balance de materia, a través del método de multiplicadores indeterminados de Lagrange, mencionados en el Capítulo 4, sección 4.3.4.

Ya que a temperaturas mayores (550 y 610°C), no sucede, es decir, conforme aumenta el flujo de gas cloro alimentado aumenta la factibilidad de formación de las dioxinas, Figuras 7.32 y 7.33 a 550°C, 7.34 y 7.35 a 610°C.

COMPARACIÓN DE PCDFs A 250°C Y DIFERENTE kmol/hra
DE GAS CLORO

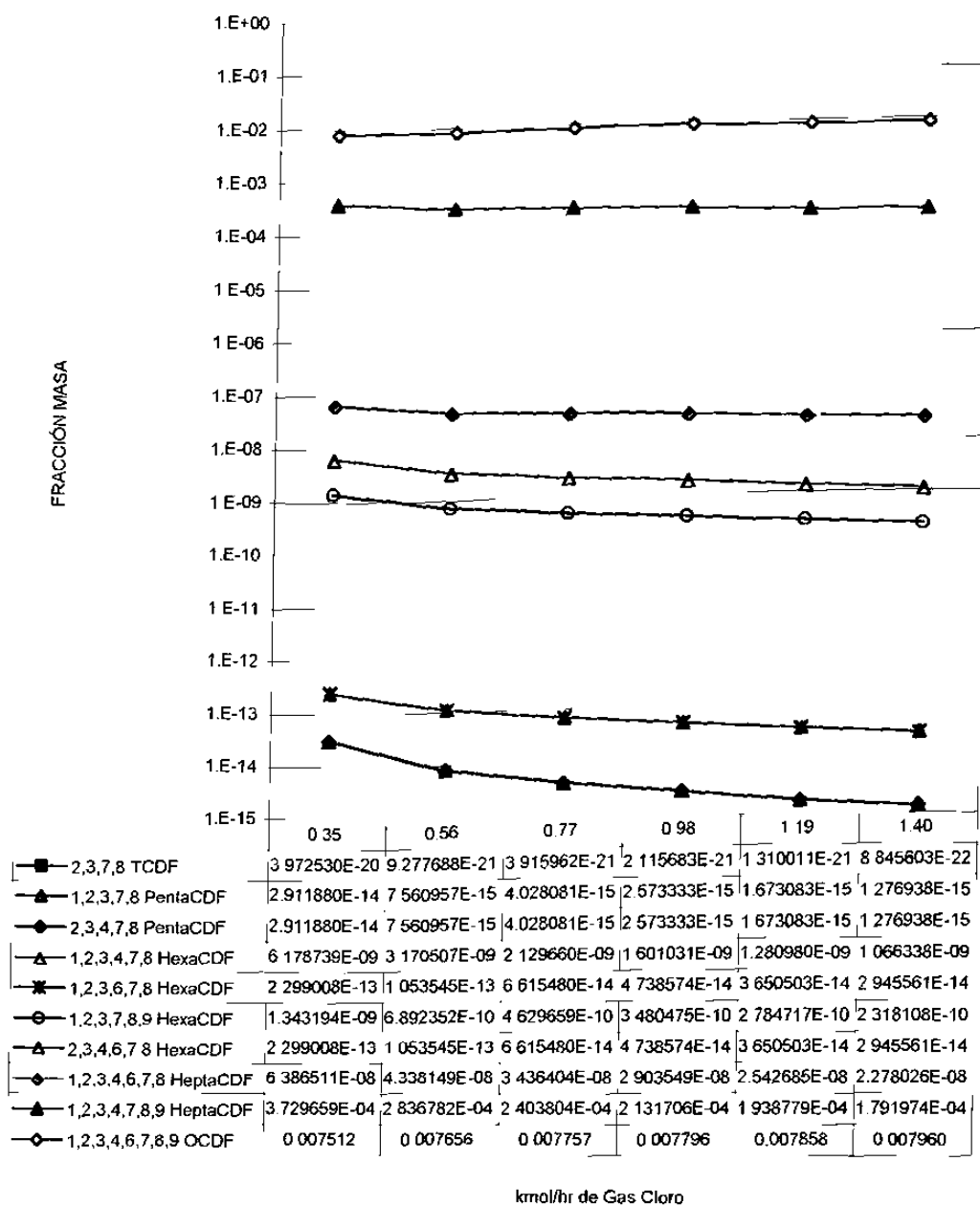


Figura 7.28 Resultados de la simulación de la formación de los PCDFs a 250 C, variando el flujo de gas cloro (Cl_2) introducido al sistema de 0.35 a 1.40 kmol/hr.

COMPARACIÓN DE PCDDs A 250°C Y DIFERENTES kmol/hr
DE GAS CLORO

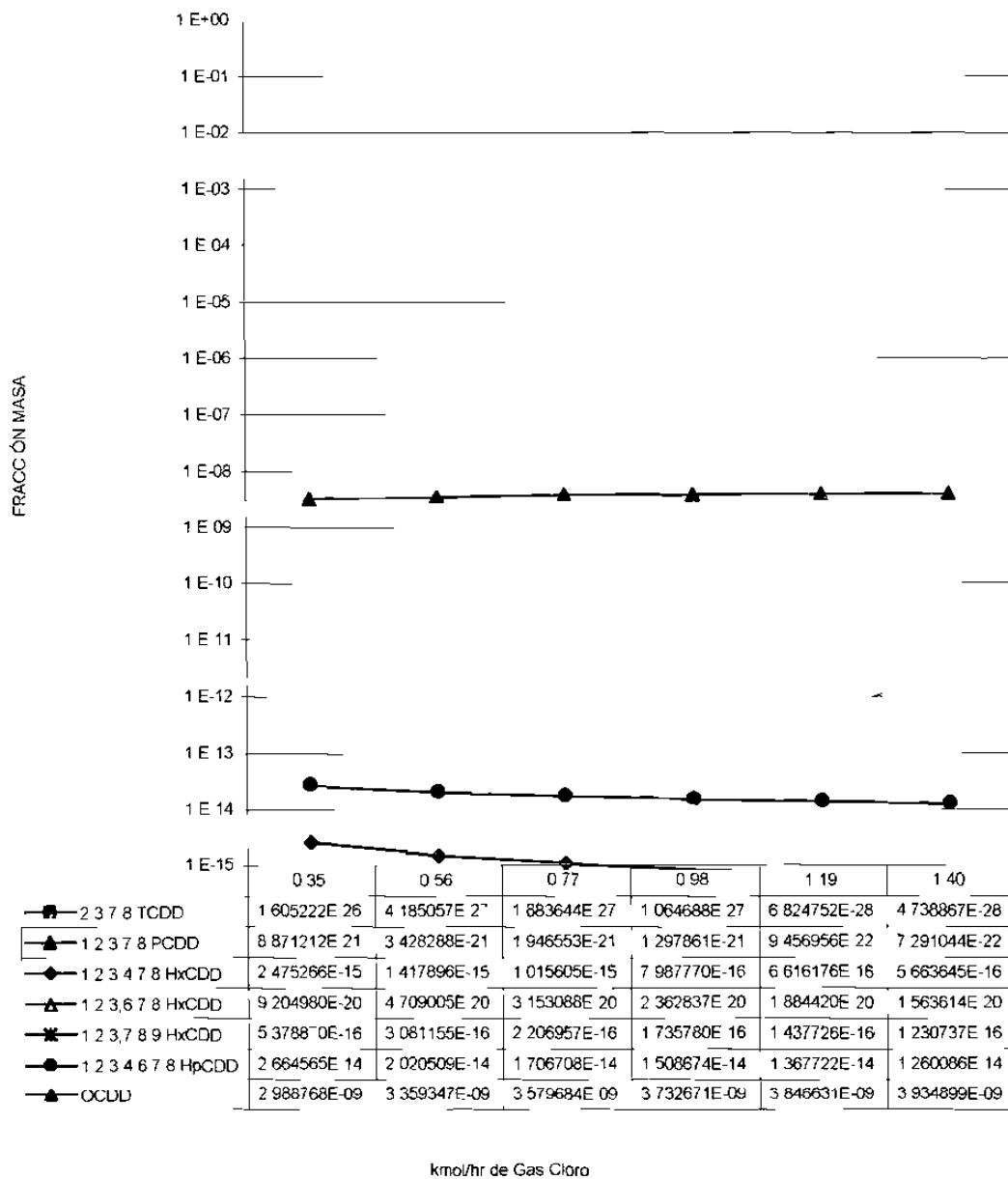


Figura 7.29 Resultados de la simulación de la formación de los PCDDs a 250 C, variando el flujo de gas cloro (Cl_2) introducido al sistema de 0.35 a 1.40 kmol/hr.

COMPARACIÓN DE PCDFs A 370°C Y DIFERENTE kmol/hr DE GAS CLORO

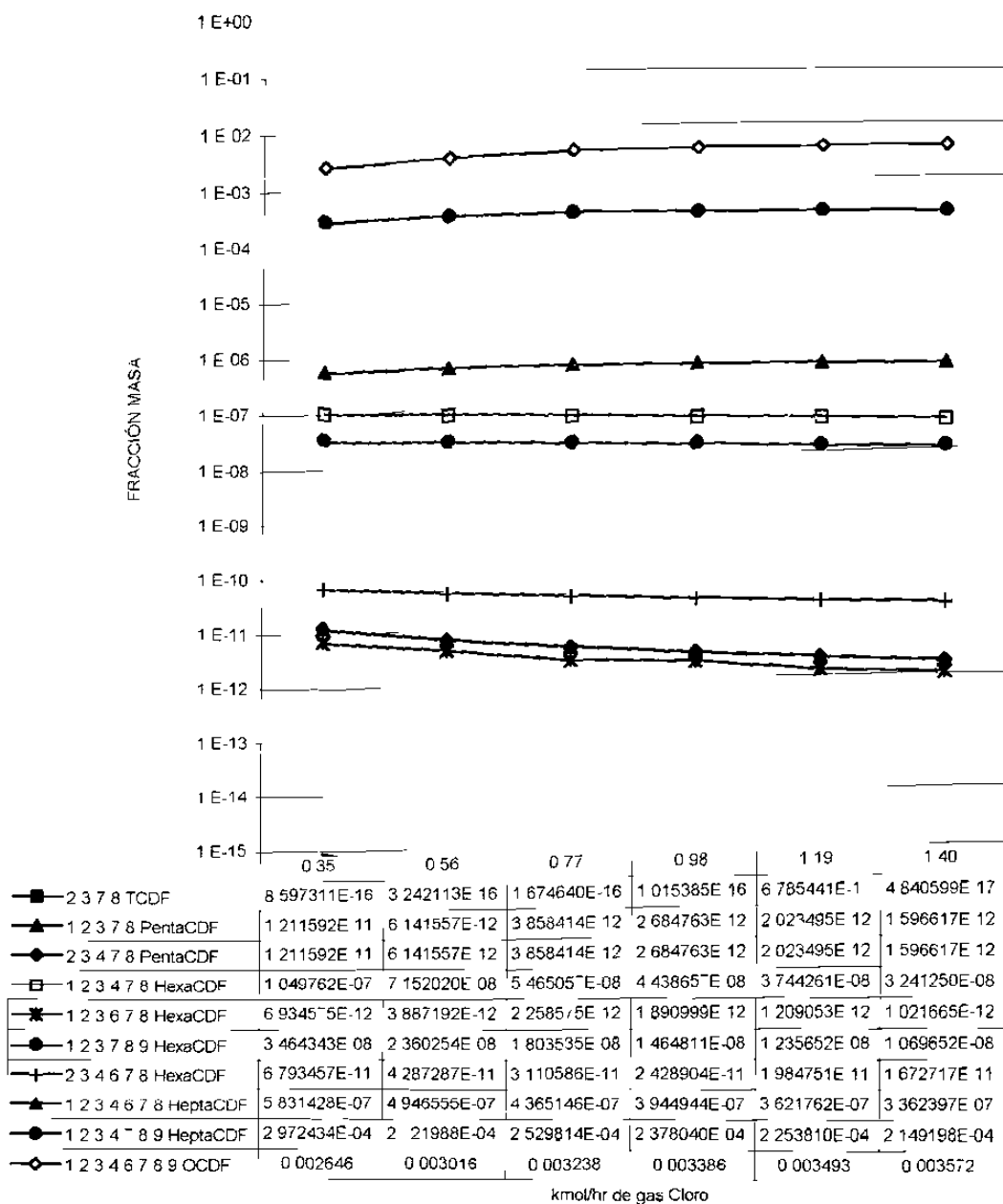


Figura 7.30 Resultados de la simulación de la formación de los PCDFs a 370 C, variando el flujo de gas cloro (Cl_2) introducido al sistema de 0.35 a 1.40 kmol/hr.

COMPARACIÓN DE PCDDs A 370°C Y DIFERENTES kmol/hr DE GAS CLORO

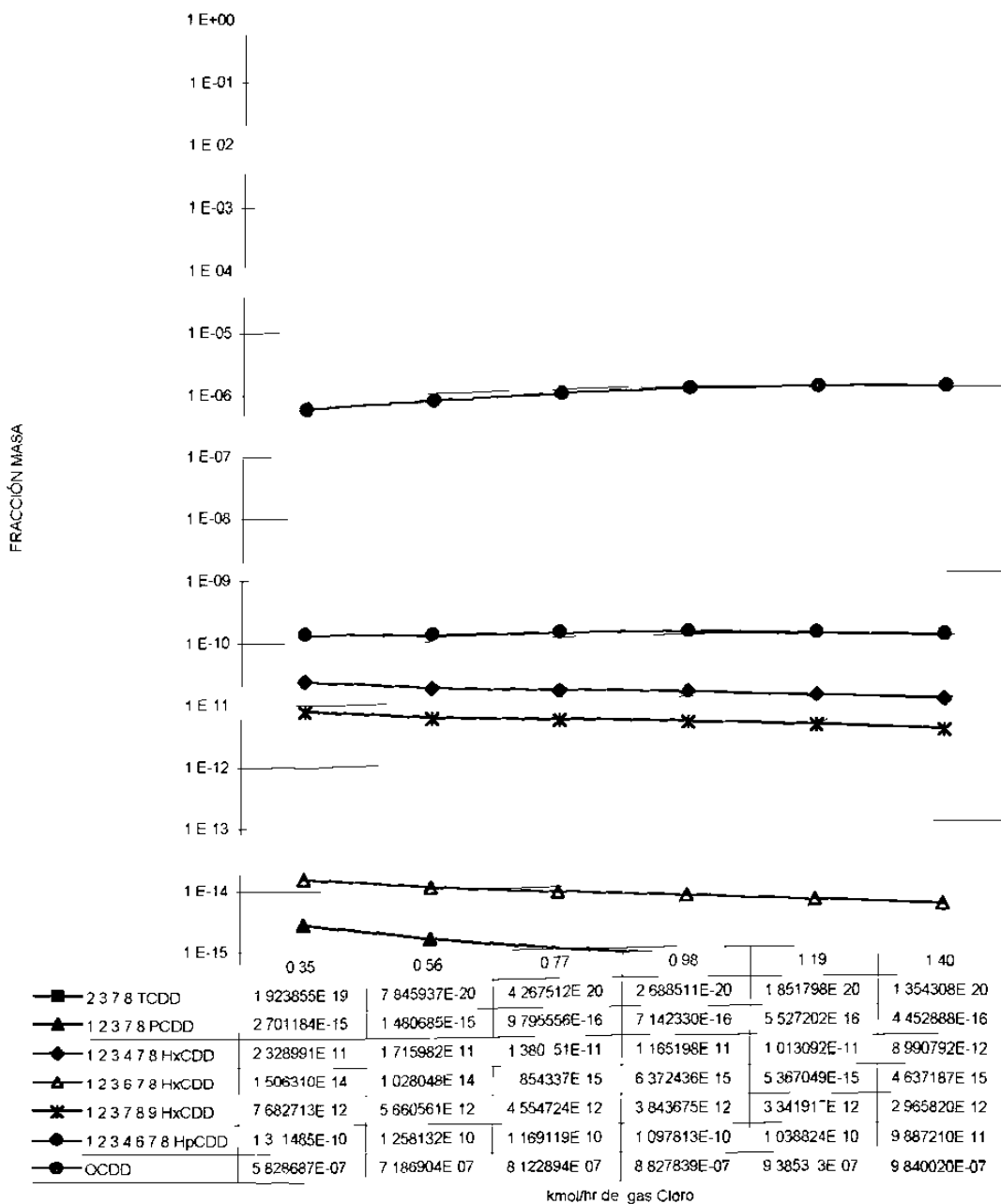


Figura 7.31 Resultados de la simulación de la formación de los PCDDs a 370 C, variando el flujo de gas cloro (Cl₂) introducido al sistema de 0.35 a 1.40 kmol/hr.

COMPARACIÓN DE PCDFs A 550°C Y DIFERENTE FLUJO DE GAS CLORO

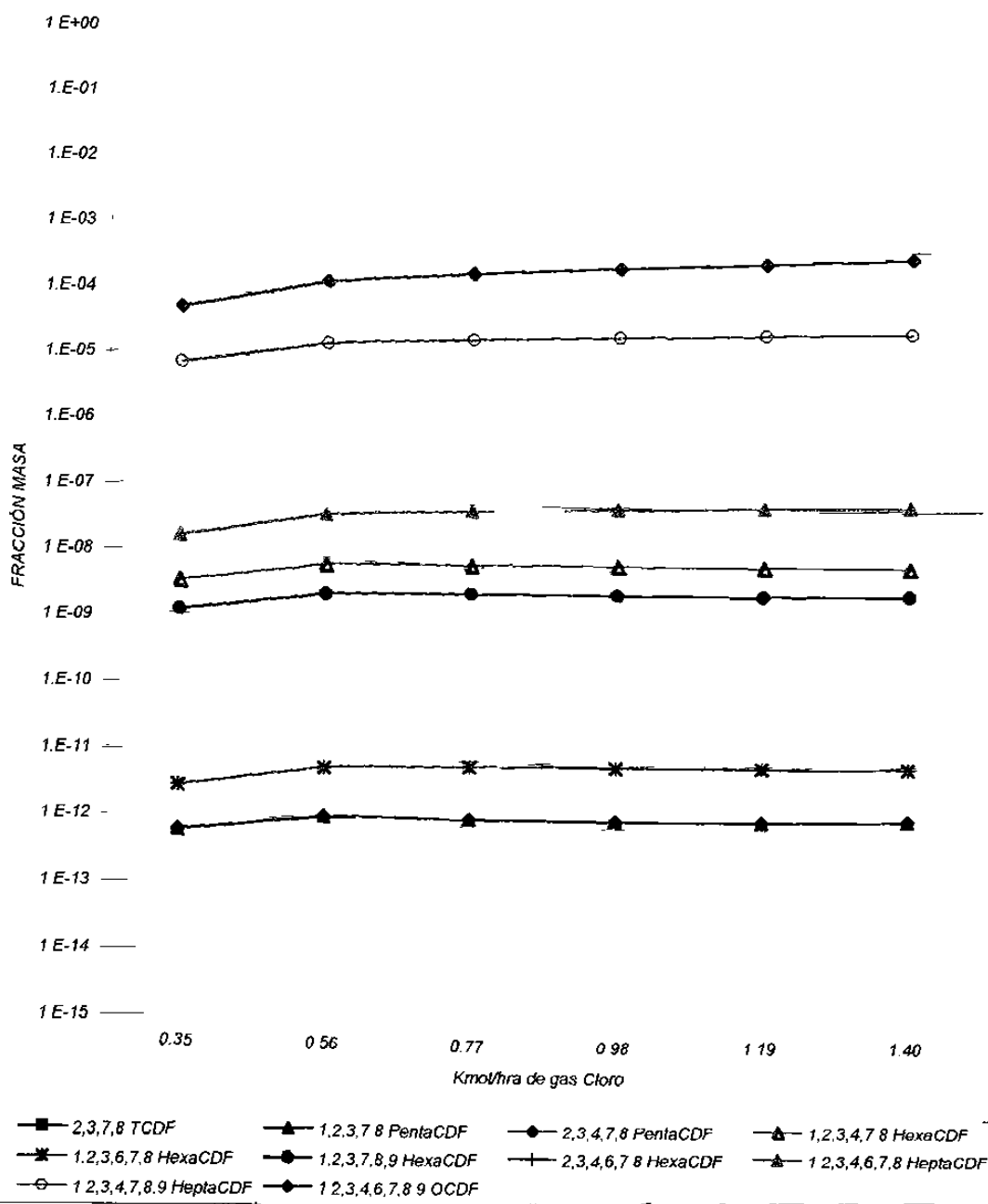


Figura 7.32 Resultados de la simulación de la formación de los PCDFs a 550 C, variando el flujo de gas cloro (Cl_2) introducido al sistema de 0.35 a 1.40 kmol/hr.

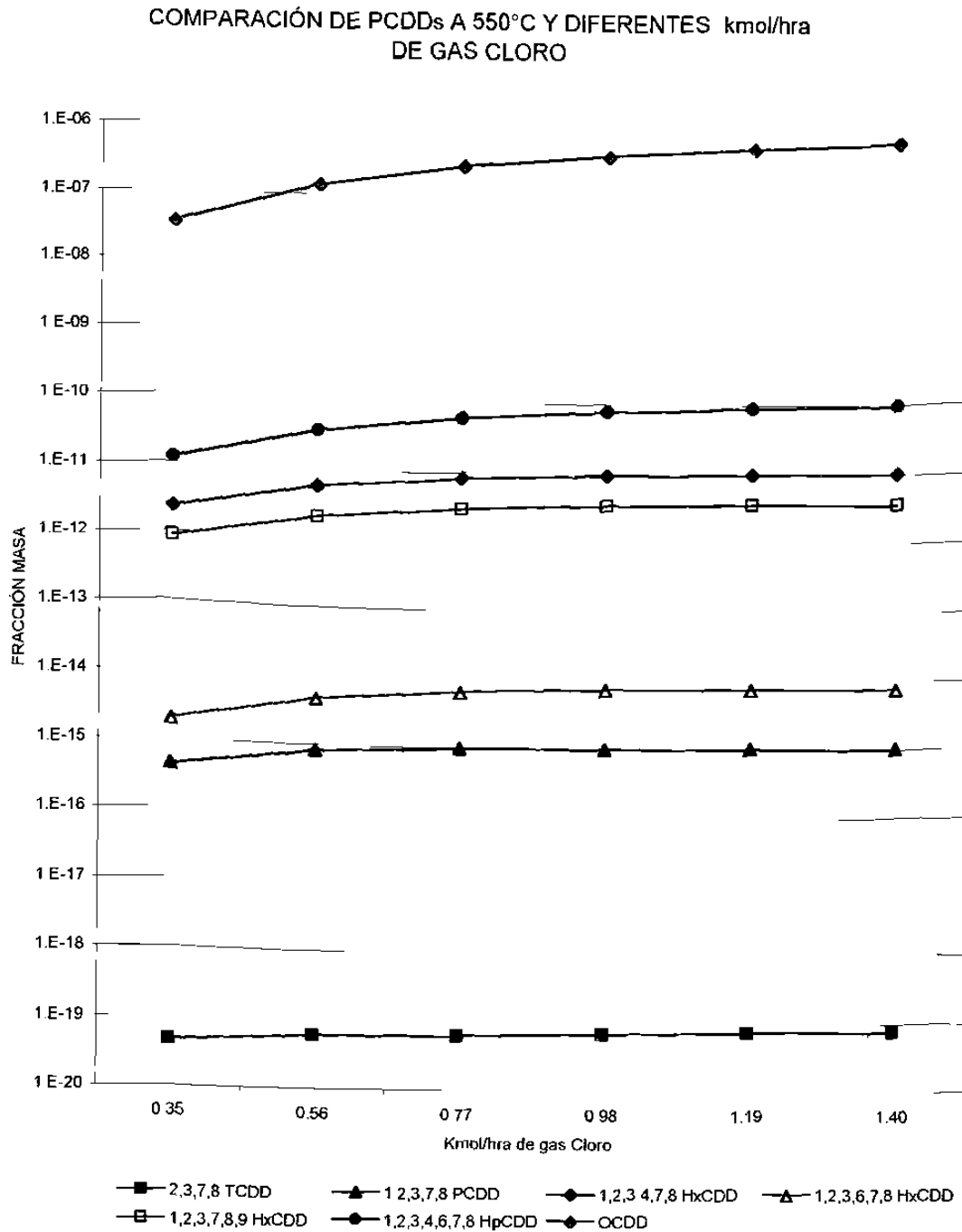


Figura 7.33 Resultados de la simulación de la formación de los PCDDs a 550 C, variando el flujo de gas cloro (Cl_2) introducido al sistema de 0.35 a 1.40 kmol/hr.

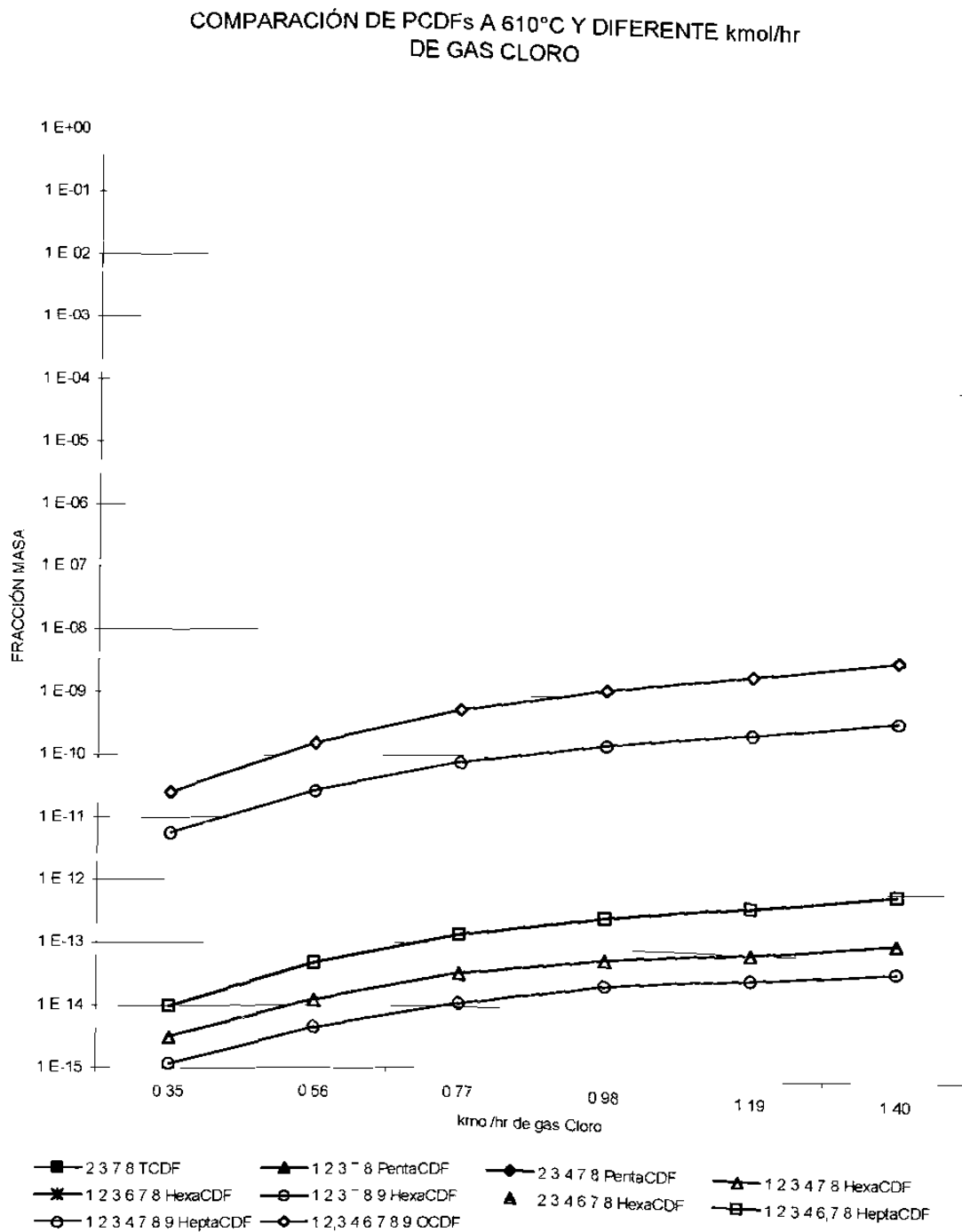


Figura 7.34 Resultados de la simulación de la formación de los PCDFs a 610 C, variando el flujo de gas cloro (Cl_2) introducido al sistema de 0.35 a 1.40 kmol/hr .

COMPARACIÓN DE PCDDs A 610°C Y DIFERENTES kmol/hr
DE GAS CLORO

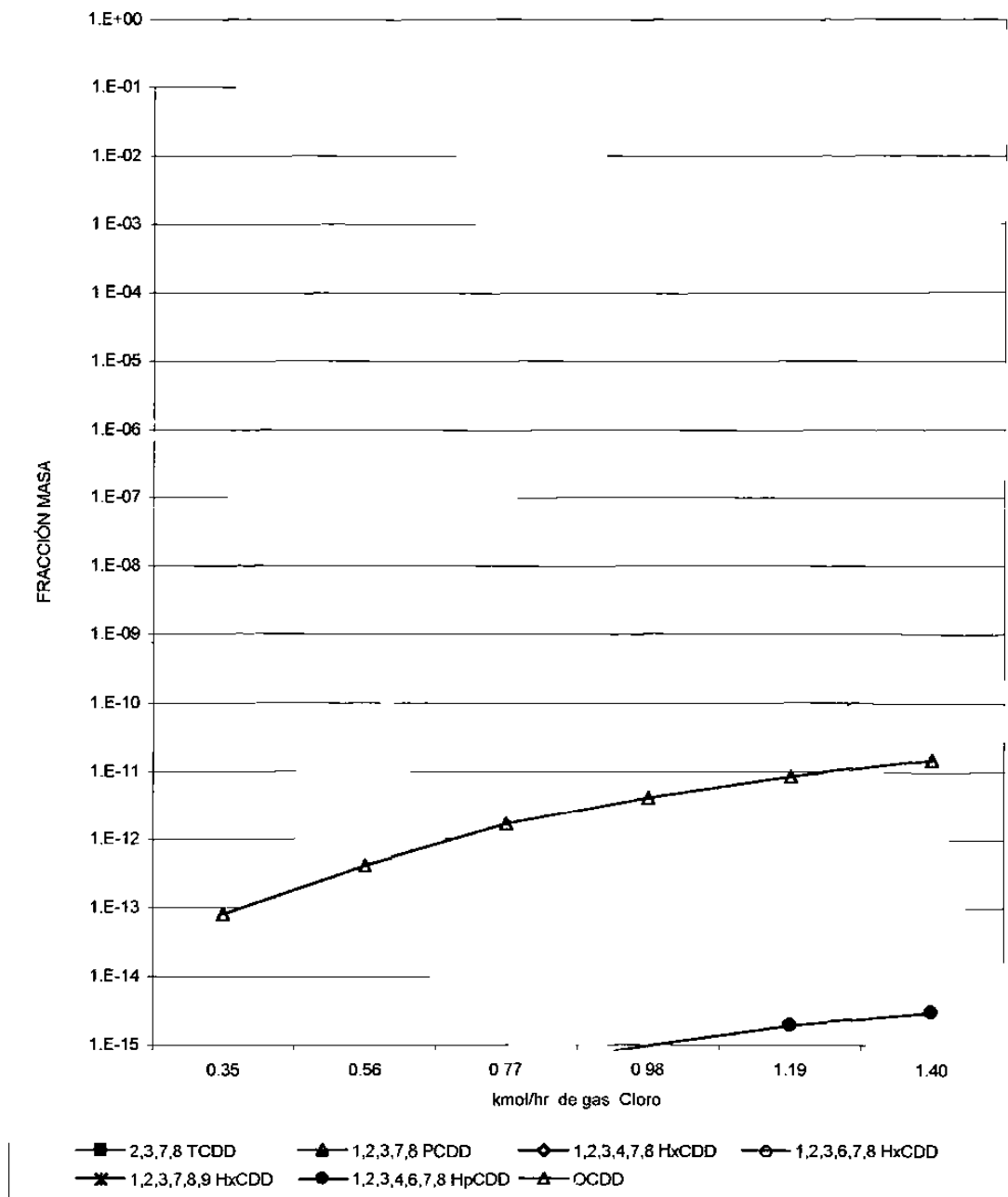


Figura 7.35 Resultados de la simulación de la formación de los PCDDs a 610 C, variando el flujo de gas cloro (Cl_2) introducido al sistema de 0.35 a 1.40 kmol/hr.

CAPITULO 8

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

8.1 CONCLUSIONES

- Se determina la dificultad de detección de los precursores de las dioxinas en las materias primas, siendo evidente la necesidad de disponer de equipos con un mayor poder de resolución.
- La alimentación y las condiciones de operación son de principal importancia para la reducción de las dioxinas, lo cual ya había sido mencionado por Buekens⁽²⁹⁾ en el año 2001. En nuestro caso el flujo de aire utilizado en la planta industrial es mucho muy grande (6,600 Nm³/hr.), lo cual evita la formación de dioxinas (PCDD/Fs), siendo esto solo factible si se disminuye el flujo de aire (aproximadamente 1,350 Nm³/hr), por lo cual se debe evitar canalizaciones del aire en el proceso, es decir, áreas en las cuales haya una deficiencia de aire. Según las consideraciones del presente trabajo.
- Se determina que las propiedades termodinámicas utilizadas son adecuadas debido a que se comprueba la mayor factibilidad termodinámica de formación de los PCDFs a los PCDDs, reportado por

Thompson⁽²⁵⁾ en 1994, Spencer⁽²²⁾ en 1997, Zaytsev⁽²³⁾ en 1998 y Kasay⁽⁵⁾ en el año 2001.

- Se determinó el efecto de aumentar la concentración de cloro, en el sistema, dándonos un panorama más específico con respecto a las consecuencias (según las consideraciones de este trabajo) de aumentar la cantidad de chatarra contaminada con plásticos, pinturas, etc., siendo esto a temperaturas mayores de 550°C.
- Se determinó el efecto de aumentar o disminuir el flujo de aire, ya que teniendo más aire y por lo tanto oxígeno disponible la combustión se puede llevar a cabo bajo mejores condiciones, siendo posible que incluso no haya factibilidad termodinámica de formación de estos compuestos tóxicos (PCDD/Fs), teniendo en cuenta las consideraciones del presente trabajo.
- Se desarrolló una metodología para la simulación de formación de dioxinas (PCDD/Fs) aplicable a procesos reales.

8.2 RECOMENDACIONES

Las siguientes recomendaciones son de gran importancia para ampliar el conocimiento sobre el comportamiento de las dioxinas.

- En el presente trabajo se analizaron dioxinas en fase gas, es conveniente incluir el análisis de dioxinas adsorbidas (fase condensada) en partículas finas sólidas.
- También se sugiere ampliar el número de compuestos analizados.

El proceso de sinterizado en el HY-RECOVERY es complejo, debido a que se tiene que el campo del oxígeno, la distribución del aire y el flujo a través de la

línea de sinterizado no está definido. Además de que el frente de sinterizado (calentamiento) gradualmente se mueve hacia abajo, provocando que haya una variabilidad en la porosidad y composición (el coque es consumido, la cal se transforma en óxidos complejos, la hematita es parcialmente reducida, sales y metales pesados son volatizados).

- Se recomienda hacer un análisis de proceso, (teniendo ya las propiedades alimentadas en fase condensada) considerando varios reactores, es decir, considerar que la cama a sinterizar se divide en capas, teniendo que las concentraciones obtenidas en gas de la capa anterior sean consideradas en la siguiente capa. Teniéndose que hacer consideraciones acerca del flujo de aire en dicha capa conforme se efectúa las reacciones y el cambio en la porosidad.
- Hacer un estudio acerca de la evolución de la porosidad con la temperatura y las características de la materia prima utilizada en el proceso, lo cual ayudara a tener una mejor base sobre las consideraciones en el flujo de aire del punto anterior.
- Hacer mediciones directas de dioxinas (PCDD/Fs), considerando los puntos anteriores, lo cual nos ayudará a determinar si se cumplen además de las condiciones termodinámicas (en caso de que esto suceda), el tiempo de reacción para su formación.
- Determinar la cinética de formación de estos compuestos en dicho proceso, lo cual permitirá predecir su formación bajo las condiciones del proceso, evitando la necesidad de hacer más mediciones y además de hacerse las modificaciones necesarias (aumentar el flujo de aire, temperatura o disminuir el contenido de chatarra contaminada con pinturas, plásticos con el fin de disminuir la cantidad de cloro presente), para evitar la formación de dichos compuestos.

BIBLIOGRAFÍA

- [1].- EPA Dioxin Reassessment, Health Assessment, Volume III, Sources
<http://www.cas.com/dioxh94.htm>
- [2].- Baker, John I. and Hites R. A. Is the Combustion the Major Source of Polychlorinated Dibenzo-p-dioxins and Dibenzofurans to the Environment? A Mass Balance Investigation. *Environmental Science & Technology*, **34** [14], pp. 2879-2885 (2000).
- [3].- Quaß, Ulrich, Emissions of dioxins and furans from metallurgical processes: Iron ore Sintering and Secondary Zinc Production. Información Internet.
- [4].- The Lovar Foundation for the protection of the environment, "Dioxin", Iron and steel production, p.68-69, 73-76, 1998.
- [5].- Kasay, E. Aono E.; Tomita, Yukio; Takasay, Makoto; Shiraishi, N.; Kitano, S. Macroscopic Behaviors of Dioxins in the Iron Ore Sintering Plants, *ISIJ International*, **41** [1], p.86-92 (2001),
- [6].- Buekens, A.; Stieglitz, L.; Hell, K.; Huang, H. Dioxins from thermal and metallurgical processes: recent studies for the iron and steel industry, *Chemosphere*, **42**, pp.729-735(2001),
- [7].- HYLSA, S.A. de C.V. Reporte interno.
Comunicación privada a la FIME-UANL Agosto 2000.
- [8].- Vernon J. F.; Janice K; Huwe, R.G.; Zaylskie. Chlorinated Dibenzo-p-dioxin and Dibenzofuran Concentrations in Beef Animals from Feeding Study. *J. Agric. Food Chem.* **48**, p.6163-6173(2000),
- [9].- Quaß, M. U. Emissions of dioxins and furans from metallurgical processes: Iron Ore Sintering and Secondary Zinc Production. Información Internet.
- [10].- Donald E.; Tillitt, R. W.; Gale, Jhon C.; Meadows, S.J.; Bursian, R. J. Aulerich. Dietary Exposure of Mink to Carp from Saginaw Bay. 3.Characterization of Dietary Exposure to Planar Halogenated Hydrocarbons, Dioxin Equivalents, and Biomagnification. *Environmental Science & Technology*, **30**[1] p.283-291,(1996).
- [11].- Thornton, Joe. Conseguir la dioxina cero. Una estrategia de emergencia para la eliminación de dioxina, 1994.

- [12].- Kishimoto, A.; Oka, T.; Yoshida, K.; Nakanishi, J. Cost Effectiveness of Reducing Dioxin Emissions from Municipal Solid Waste Incinerators in Japan. *Environmental Science & Technology*, **35** [14], p. 2861-2866(2001).
- [13].- Lino, F.; Tsuchiya, K.; Imagawa, T.; Gullett, B.K. An Isomer Prediction Model for PCNs, PCDD/Fs, and PCBs from Municipal Waste Incinerators. *Environmental Science & Technology*, **35** [15], p. 3175-3181 (2001).
- [14].- Milligan, Michael S.; Altwicker, E.R. Chlorophenol Reactions on Fly Ash.1. Adsorption/Desorption Equilibria and Conversion to Polychlorinated Dibenzop-dioxins. *Environmental Science & Technology*, **30** [1], p. 225-229(1996).
- [15].- Cains, P.W.; McCausland, L.J.; Fernandes, A.R.; Dyke, P. Polychlorinated Dibenzop-dioxins and Dibenzofurans Formation in Incineration: Effects of Fly Ash and Carbon Source. *Environmental Science & Technology*, **31**[3], p. 776-786(1997).
- [16].- Brzuzny, Louis P.; Hites, Ronald A. Global Mass Balance for Polychlorinated Dibenzop-dioxins and Dibenzofurans. *Environmental Science & Technology*, **30**[6], p.1797-1804(1996).
- [17].- Agencia de Protección Ambiental de los Estados Unidos
http://www.cas.com/epa/exposure/part1_v1.htm
- [18].- Lee, Robert G.M; Jones, Kevin C. Gas-Particle Partitioning of Atmospheric PCDD/Fs: Measurements and Observations on Modelling. *Environmental Science & Technology*, **33**[20], p.3596-3604(1999).
- [19].- Spencer, P. J. and Neuschütz, D. Thermodynamic Conditions for the Formation of Dioxin. *Chem. Eng. Technol*, **15**, p.119-123 (1992).
- [20].- Shaub, W.M. Procedure for estimating the heats of formation of aromatic compounds: chlorinated benzenes, phenols and dioxins. *Thermochem. Acta*, **55** , p.59-73(1982).
- [21].- Saito, N.; Fuwa, A. Prediction for thermodynamics function of dioxins for gas phase using semi-empirical molecular orbital method with PM3 hamiltonian, *Chemosphere*, **40**, p.131-145(2000).
- [22].- Eriksson, G.; Spencer, P.; Neuschütz, D. Comparison of thermochemically calculated and measured dioxin contents in the off-gas of a sinter plant.

- Electrochemical Society Proceedings, 97[39], p.278-287(1997).
- [23].- Zaytsev, A. K; Leontiev, Leopold I.; Yusfin, Yulian S.; Belov, Gleb V.; Iorish, Vladimir S. On Principles of Thermodynamic Modelling of Dioxins Formation and Behaviour in Thermal Processes. *Organohalogen Compounds*, 36, p. 197-200(1998).
- [24].- Gurvich, L.; Vertz, V.; Iorish, Vladimir S. Thermodynamic Properties of Individual Substances. Fourth Edition in 5 volumes, Chemosphere Pub Co. NY,L, vol. 1 in 2 parts,1989.
- [25].- Thompson, D. Thermodynamic Considerations in Dibenzodioxin and Dibenzofuran Formation: Concentrations of Chlorinated Dioxins and Furans in Model Fuel rich Combustion Gases. *Chemosphere*, 29 [12], p.2583-2595(1994).
- [26].- Benson,S.W. Thermochemical Kinetics, second Ed. Wiley, New York, 1976.
- [27].- Shaub, Walter M. Procedure for estimating the heats of formation of aromatic compounds: chlorinated benzenes, phenols and dioxins. *Thermochimica Acta* 55 pp.59-73(1982)
- [28].- Kasay, E.; Hosotani, Y.; Kawaguchi, T.; Nushiro K. and Aono, T. Effect of Additives on the Dioxins Emissions in the Iron Ore Sintering Process. *ISIJ International*, 41[1], p.93-97(2001).
- [29].- Buekens, A.; Stieglitz, L.; Hell, K.; Huang, H.; Segers, P. Dioxins from thermal and metallurgical processes: recent studies for the iron and steel industry. *Chemosphere*, 42, p.729-735(2001).
- [30].- Pirard, C; Xhrouet, C. and Pauw, Edwin. De Novo Synthesis of Polychlorinated Dibenzo-p-dioxins and Dibenzofurans on Fly Ash from Sintering Process. *Environmental Science & Technology*. 35 [8], p.1615-1623(2001).
- [31].- HYLSA. Comunicación privada. Pablo Arreola Noviembre 1999.
- [32].- Tysklind, M.; Söderström, R. C.; Hågerstedt ,L-E.; Burström, E. PCDD and PCDF emissions from scrap metal melting processes at a steel mill. *Chemosphere* 19(1-6), p.705-710 (1989).
- [33].- Umweltbundesamt. Determination of requirements to limit emissions of dioxins and furans. Report from the Working Group of the Subcommittee

- Air/Technology of the Federal Government/federal States Emission Control Committee, Berlin, Germany (1996).
- [34].- The Lovar Foundation for the protection of the environment. Dioxin, Iron and steel production, 1998.
- [35].- Journal of Chromatography, 389 p.127-137,1987.
- [36].- Skoog, Douglas A.; West, Donald M. Análisis instrumental. Segunda Edición, Mc Graw Hill, 1989.
- [37].- Okamoto, Y. and Tomonari, M. Formation Pathways from 2,4,5-Trichlorophenol (TCP) to Polychlorinated Dibenzop-dioxins (PCDDs):An ab Initio Study. J.Phys.Chem.,103, pp.7686-7691. (1999).
- [38].- Froese. K.L and Hutzinger, Otto. Polychlorinated Benzene, phenol, Dibenzop-dioxin and Dibenzofuran in heterogeneous Combustion Reactions of Acetylene. Environmental Science & Technology, 30 [3], p 998-1008 (1996).
- [39].- Agencia de Protección Ambiental de los Estados Unidos (USEPA). Información Internet (Volumen 2, Capítulo 3)
- [40].- Addink, R.; Govers, Harrie A.J. and Olie, Kees. Isomer Distributions of Polychlorinated Dibenzop-dioxins and Dibenzofurans formed during De Novo Synthesis on Incinerator Fly Ash. Environmental Science & Technology. 32 [13], p.1888-1893 (1986).
- [41].- Cains, P.W.; Mccausland, Linda J.; Fernandes, A.R. and Dicke, P. Polychlorinated Dibenzop-dioxins and Dibenzofurans formation in Incineration: Effects of Fly ash and carbon Source. Environmental Science & Technology. 31[3], p.776-786 (1997).
- [42].- Takasuga, T.; Makino, T.; Tsubota, K. and Takeda, Nobuo. Formation of Dioxins (PCDD/Fs) on fly ash as a catalyst and relation of chlorine sources. Organohalogen Compounds. 36, p. 321-324 (1998).
- [43].- HYLSA, S.A. de C.V. Comunicación privada. Dr. Carlos Javier Lizcano Zulaica, Noviembre 2000.
- [44].- Dorofeeva, Olga V.; Iorish, Vladimir S. and Moiseeva, Natalia F. Thermodynamic Properties of Dibenzop-dioxin, Dibenzofuran and their Polychlorinated Derivatives in the Gaseous Phase. 1. Thermodynamic

- Properties of Gaseous Compounds. *J. Chemical Engineering Data*, 44, pp.516-523(1999).
- [45].- Maron, Samuel H. y Prutton, Carl F. *Fundamentos de Fisicoquímica*, LIMUSA, 1980.
- [46].- Berchtold, F. Rordorf, Prediction of vapour pressures, boiling points and enthalpies of fusion for twenty-nine halogenated Dibenzo-p-dioxins and fifty dibenzofurans by a vapour pressure correlation method, *Chemosphere*, 18, pp.783-788(1989).
- [47].- Reid, Robert C.; Prausnitz, John M.; Sherwood, Thomas K. *The properties of gases and liquids*, Third Edition, Mc Graw Hill, 1977.
- [48].- Hougen, O. A.; Watson, K.M.; Ragatz. R.A. *Principios de Procesos Químicos*. Editorial Reverte, Primera Edición, 1980.
- [49].- Smith, J.M.; Van Ness, H.C.; *Introducción a la Termodinámica en Ingeniería Química*, Cuarta Edición, Mc Graw Hill, 1989
- [50].- ASPEN PLUS™ 9.3-1, 1998; Programa Termodinámico, Compañía ASPEN.
- [51].- Rordorf, B.F.; Thermodynamic and thermal properties of polychlorinated compounds: the pressures and flow tube kinetics of ten dibenzo-para-dioxines. *Chemosphere*, 14, pp.885-892(1985).
- [52].- The 17th Regulation for Implementation of the Federal Emission Protection Law (17.BImSchV)., Anhang BGBl, I.S. 2545,2832, Vol.23.11.1990.

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla	Descripción	Página
2.1	Factores de toxicidad equivalente para las dioxinas, según USEPA	10
4.1	Incrementos Δ para anillos, para determinar T_c y presión P_c .	34
6.1	Porcentaje en peso de los diferentes compuestos analizados.	62
6.2	Porcentajes en peso de los elementos detectados en las muestras de aceite quemado.	63
6.3.	Material utilizado en la corrida normal del proceso a escala industrial	63
6.4	Cálculo de masa (kg) de los elementos a considerar (C, Cl, H, O) de la materia utilizada, en corrida normal a escala industrial, considerando un 1% de aceite quemado en la escama de molino	64
6.5	Cálculo del número de kmol de los elementos a considerar (C, Cl, H, O) de la materia utilizada, en corrida normal a escala industrial, considerando un 1% de aceite quemado en la escama de molino	64
6.6	Cantidad en kmol obtenidas de los análisis de materia prima, considerando las cantidades de materia prima utilizados en el proceso a escala industrial	65
6.7	Cantidad en kmol obtenidas de los análisis de materia prima, considerando las cantidades de materia prima utilizados en el proceso a escala industrial con un flujo de aire de 1,350 Nm ³ /hr	67
7.1	Algunos de los compuestos analizados en las materias utilizadas en el proceso HY-RECOVERY (micropelet, escama	69

de molino, etc.) por Cromatografía de gases con detector de masas.

- 7.2. Descripción de clave utilizada para dioxinas (PCDD/Fs). 78

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura	Descripción	Página
2.1	Presencia de dioxinas en materias primas y después del proceso de transformación	14
2.2	Formación de dioxinas a partir de precursores clorados	15
2.3	Formación de Dioxinas y/o precursores a partir de orgánicos y donadores de cloro	16
2.4	Formación de dioxinas por "de novo síntesis"	17
3.1	Colección de finos de mineral, polvo de HEA, escama de molino) y polvo de decapado.	19
3.2	Obtención de la mezcla de polvos de horno eléctrico, escama de molino, polvo de decapado, y finos de mineral de hierro	20
3.3	Diagrama de una planta de sinterizado para el proceso HY-RECOVERY	22
3.4	Reducción del sinter y remoción de metales pesados (Zn, Pb, Ca)	23
3.5	Esquema de proceso de Aceración en Horno Eléctrico de Arco	24
3.6	Proceso de colada continua	25
4.1	Energía total de Gibbs en relación con la coordenada de reacción	31
5.1	Ejemplo de diagrama e flujo en ASPEN PLUS™	43
5.2	Ejemplo de una corrida de otro proceso en el cual se alimenta etano y se produce etileno e hidrógeno.	45
6.1	Materia prima alimentada	49
6.2	Cromatógrafo modelo Varian Saturn 3400 cx	49
6.3.	Mezclador	50
6. 4	Reactor utilizado para la sinterización de las mezclas	50

6.5	Alimentación de la cama de sinterizado para protección de las barras de acero al carbono del reactor	51
6.6	Reactor de sinterizado, en el que se muestran las barras de acero al carbono.	51
6.7	Alimentación de la mezcla conteniendo micropellet, escama de laminación, finos de sinter, cal viva, coque fino y agua	52
6.8	Alimentación de la capa de coque	52
6.9	Esquema de cama de sinterizado	53
6.10	Esquema de colocación de los termopares	53
6.11	Inicio de quema y termopar No.1	54
6.12	Diagrama del equipo en planta piloto, para la realización de las pruebas para obtención de perfiles de temperaturas	55
6.13	Extracción de sinter producido	55
6.14	Sinter producido	56
6.15	Diagrama de flujo del reactor de sinterización	60
6.16	Ejemplo del resultado de la simulación en ASPEN PLUS™ de la formación del 2,3,7,8 TCDD a diferentes flujos de aire saturado(600, 650, 800, 850 y 1000 Nm ³ /hr)	61
7.1	Cromatograma en el cual no se observa ningún compuesto analizado (Tabla 7.1)	69
7.2	Espectro Infrarrojo de los finos de sinter.	70
7.3	Espectro Infrarrojo de polvo de horno eléctrico de arco	71
7.4	Perfil de temperatura de la primer prueba	73
7.5	Esquema de la localización de los termopares tipo K, durante la realización de la primer prueba en la planta piloto	73
7.6	Perfil de temperatura de la segunda prueba	74
7.7	Esquema de la localización de los termopares tipo K, durante la realización de la segunda prueba en la planta piloto	74
7.8	Perfil de temperatura de la tercer prueba	75
7.9	Esquema de la localización de los termopares tipo K, durante la realización de la tercer prueba en la planta piloto	75

7.10	Perfil de temperatura de las tres pruebas	76
7.11	Perfil de presión y temperatura medidos en la caja de viento del equipo utilizado en planta piloto	76
7.12	Ejemplo del resultado de la simulación de la formación de dioxinas con las condiciones (flujo de aire, 6600 Nm ³ /hr de aire) que se tienen en la planta a escala industrial.	79
7.13	Resultados de la simulación de la formación del 2,3,7,8 TCDF disminuyendo el flujo de aire introducido al sistema de 950 a 1,350 Nm ³ /hr.	82
7.14	Resultados de la simulación de la formación del 1,2,3,7,8 PCDF, disminuyendo el flujo de aire introducido al sistema de 950 a 1,350 Nm ³ /hr.	83
7.15	Resultados de la simulación de la formación del 2,3,7,8 TCDD disminuyendo el flujo de aire introducido al sistema de 950 a 1,350 Nm ³ /hr.	84
7.16	Resultados de la simulación de la formación del 1,2,3,7,8 PCDD, disminuyendo el flujo de aire introducido al sistema de 950 a 1,350 Nm ³ /hr.	85
7.17	Resultados de la simulación de la formación del 1,2,3,4,6,7,8,9 OCDF teniendo un flujo de aire introducido al sistema de 950 a 1,350 Nm ³ /hr	86
7.18	Resultados de la simulación de la formación del 1,2,3,4,6,7,8,9 OCDD teniendo un flujo de aire introducido al sistema de 950 a 1,350 Nm ³ /hr.	87
7.19	Resultados de la simulación de la formación de los PCDFs a 250°C, teniendo un flujo de aire introducido al sistema de 950 a 1,350 Nm ³ /hr..	88
7.20	Resultados de la simulación de la formación de los PCDDs a 250°C, teniendo un flujo de aire introducido al sistema de 950 a 1,350 Nm ³ /hr.	89
7.21	Resultados de la simulación de la formación de los PCDDs a	90

- 370°C, teniendo un flujo de aire introducido al sistema de 950 a 1,350 Nm³/hr.
- 7.22 Resultados de la simulación de la formación de los PCDFs a 370°C, teniendo un flujo de aire introducido al sistema de 950 a 1,350 Nm³/hr. 91
- 7.23 Resultados de la simulación de la formación de CO y CO₂ a 370°C, teniendo flujo de aire introducido al sistema de 950 a 1,350 Nm³/hr. 92
- 7.24 Resultados de la simulación de la formación de los PCDFs a 800°C, teniendo un flujo de aire introducido al sistema de 950 a 1,350 Nm³/hr. 93
- 7.25 Resultados de la simulación de la formación de los PCDDs a 800°C, teniendo un flujo de aire introducido al sistema de 950 a 1,350 Nm³/hr. 94
- 7.26 Resultados de la simulación de la formación de los PCDD/Fs (17 compuestos analizados) teniendo un flujo de aire introducido al sistema de 950 Nm³/hr. 95
- 7.27 Resultados de la simulación de la formación de los PCDD/Fs (17 compuestos analizados) teniendo un flujo de aire introducido al sistema de 1,350 Nm³/hr. 96
- 7.28 Resultados de la simulación de la formación de los PCDFs a 250°C, variando el flujo de gas cloro (Cl₂) introducido al sistema de 0.35 a 1.40 kmol//hr. 98
- 7.29 Resultados de la simulación de la formación de los PCDDs a 250°C, variando el flujo de gas cloro (Cl₂) introducido al sistema de 0.35 a 1.40 kmol/hr. 99
- 7.30 Resultados de la simulación de la formación de los PCDFs a 370°C, variando el flujo de gas cloro (Cl₂) introducido al sistema de 0.35 a 1.40 kmol/hr. 100
- 7.31 Resultados de la simulación de la formación de los PCDDs a 370°C, variando el flujo de gas cloro (Cl₂) introducido al

- sistema de 0.35 a 1.40 kmol/hr.
- 7.32 Resultados de la simulación de la formación de los PCDFs a 550°C, variando el flujo de gas cloro (Cl_2) introducido al sistema de 0.35 a 1.40 kmol/hr. 102
- 7.33 Resultados de la simulación de la formación de los PCDDs a 550°C, variando el flujo de gas cloro (Cl_2) introducido al sistema de 0.35 a 1.40 kmol/hr. 103
- 7.34 Resultados de la simulación de la formación de los PCDFs a 610°C, variando el flujo de gas cloro (Cl_2) introducido al sistema de 0.35 a 1.40 kmol/hr. 104
- 7.35 Resultados de la simulación de la formación de los PCDDs a 610°C, variando el flujo de gas cloro (Cl_2) introducido al sistema de 0.35 a 1.40 kmol/hr. 105

ANEXO A

Propiedades termodinámicas para dioxinas
(PCDDs y PCDFs) determinadas por el método
de diferencias por Olga V.Dorofeeva

ANEXO A

Propiedades termodinámicas para PCDDs determinadas por el método de diferencias por Olga V. Dorofeyva⁽⁴⁴⁾.

SUSTITUYENTE	SUSTANCIA	Dhf (298)(kJ/mol)	S (298)(J ^o K/mol)	Cp - J ^o K mol											
				298.15 K	300 K	400 K	500 K	600 K	800 K	1000 K	1200 K	1400 K	1500 K		
-	DD	-59.2	407.38	180.044	181.185	239.06	287.106	325.389	380.39	417.066	442.65	461.051	468.326		
1	MCDD	89.8	436.715	195.434	196.571	253.763	300.698	337.819	390.643	425.437	449.475	466.645	473.406		
2	MCDD	-89.8	436.715	195.434	196.571	253.763	300.698	337.819	390.643	425.437	449.475	466.645	473.406		
1.2	DCDD	-111.6	464.72	210.9319	212.0628	268.49234	314.29907	350.27181	400.92244	433.78559	456.28196	472.22456	478.47302		
1.3	DCDD	116.1	466.037627	210.99536	212.12509	268.52826	314.31798	350.26463	400.90404	433.81335	456.30396	472.24197	478.48869		
1.4	DCDD	119.3	466.55427	211.57825	212.70564	268.96888	314.64128	350.50702	401.05288	433.91417	456.3767	472.29705	478.53716		
1.6	DCDD	120.4	466.05	210.824	211.957	268.466	314.29	350.249	400.896	433.808	456.3	472.239	478.486		
1.7	DCDD	120.4	466.05	210.824	211.957	268.466	314.29	350.249	400.896	433.808	456.3	472.239	478.486		
1.8	DCDD	-120.4	466.05	210.824	211.957	268.466	314.29	350.249	400.896	433.808	456.3	472.239	478.486		
1.9	DCDD	120.4	466.05	210.824	211.957	268.466	314.29	350.249	400.896	433.808	456.3	472.239	478.486		
2.3	DCDD	111.6	464.72	210.9319	212.0628	268.49234	314.29907	350.27181	400.92244	433.78559	456.28196	472.22456	478.47302		
2.7	DCDD	120.4	466.05	210.824	211.957	268.466	314.29	350.249	400.896	433.808	456.3	472.239	478.486		
2.8	DCDD	-120.4	466.05	210.824	211.957	268.466	314.29	350.249	400.896	433.808	456.3	472.239	478.486		
1.2.3	Tr CDD	-138	492.9012	226.72984	227.85035	283.36321	327.94027	362.67978	411.11769	442.14639	463.09678	477.80944	483.54465		
1.2.4	Tr CDD	149.9	494.3775	227.13463	228.25352	283.67751	328.1856	362.87478	411.24782	442.23847	463.16495	477.86154	483.59089		
1.2.6	Tr CDD	142.2	496.715	226.1061	227.23719	283.14266	327.87293	362.65619	411.12256	442.20141	463.14304	477.84744	483.57898		
1.2.7	Tr CDD	-142.2	496.715	226.1061	227.23719	283.14266	327.87293	362.65619	411.12256	442.20141	463.14304	477.84744	483.57898		
1.2.8	Tr CDD	-142.2	496.715	226.1061	227.23719	283.14266	327.87293	362.65619	411.12256	442.20141	463.14304	477.84744	483.57898		
1.2.9	Tr CDD	142.2	496.715	226.1061	227.23719	283.14266	327.87293	362.65619	411.12256	442.20141	463.14304	477.84744	483.57898		
1.3.6	Tr CDD	146.7	495.372627	226.38536	227.51109	283.23126	327.90998	362.69463	411.15704	442.18435	463.12896	477.83597	483.56869		
1.3.7	Tr CDD	146.7	495.372627	226.38536	227.51109	283.23126	327.90998	362.69463	411.15704	442.18435	463.12896	477.83597	483.56869		

Continuación...

SUSTITUYENTE	SUSTANCIA	DHf (298 kJ/mol)	S (298 J/K mol)	Cp=J/K mol											
				298 15 °K	300 °K	400 °K	500 K	600 K	800 °K	1000 K	1200 °K	1400°K	1500 °K		
1.3.8	Tri-CDD	-146.7	495.372627	226.385336	227.51109	283.23126	327.90998	362.69463	411.15704	442.18435	463.12896	477.83597	483.56869		
1.3.9	Tri-CDD	146.7	495.372627	226.385336	227.51109	283.23126	327.90998	362.69463	411.15704	442.18435	463.12896	477.83597	483.56869		
1.4.6	Tri-CDD	149.9	495.88927	226.96825	228.09164	283.67188	328.23328	362.93702	411.30588	442.28517	463.2017	477.89105	483.61718		
1.4.7	Tri-CDD	-149.9	495.88927	226.96825	228.09164	283.67188	328.23328	362.93702	411.30588	442.28517	463.2017	477.89105	483.61718		
1.7.8	Tri-CDD	-142.2	494.055	226.3219	227.44881	283.19534	327.89107	362.70181	411.17544	442.15659	463.10696	477.81856	483.55302		
2.3.7	Tri-CDD	142.2	494.055	226.3219	227.44881	283.19534	327.89107	362.70181	411.17544	442.15659	463.10696	477.81856	483.55302		
1.2.3.4	TCDD	167.2	521.2862	243.0044	244.1108	298.54553	341.80868	375.2804	421.44869	450.56028	469.94831	483.42127	488.63985		
1.2.3.7	TCDD	168.6	522.2362	242.11984	243.23635	298.06621	341.53227	375.10978	421.37069	450.51739	469.92178	483.40344	488.62465		
1.3.6.8	TCDD	181.6	524.72	241.604	242.729	297.872	341.474	375.109	421.402	450.55	469.95	483.427	488.646		
1.3.7.8	TCDD	177.1	523.402373	241.54054	242.66672	297.83608	341.45509	375.11618	421.4204	450.52224	469.928	483.40959	488.63033		
2.3.7.8	TCDD	181.6	524.72	241.604	242.729	297.872	341.474	375.09	42.402	450.55	469.95	483.427	488.646		
1.2.3.6	TCDD	168.6	522.2362	242.11984	243.23635	298.06621	341.53227	375.10978	421.37069	450.51739	469.92178	483.40344	488.62465		
1.2.3.8	TCDD	-168.6	522.2362	242.11984	243.23635	298.06621	341.53227	375.10978	421.37069	450.51739	469.92178	483.40344	488.62465		
1.2.3.9	TCDD	-168.6	522.2362	242.11984	243.23635	298.06621	341.53227	375.10978	421.37069	450.51739	469.92178	483.40344	488.62465		
1.2.4.6	TCDD	-180.5	523.7125	242.52463	243.63952	298.38051	341.7776	375.30478	421.50082	450.60947	469.98995	483.45554	488.67089		
1.2.4.7	TCDD	-180.5	523.7125	242.52463	243.63952	298.38051	341.7776	375.30478	421.50082	450.60947	469.98995	483.45554	488.67089		
1.2.4.8	TCDD	180.5	523.7125	242.52463	243.63952	298.38051	341.7776	375.30478	421.50082	450.60947	469.98995	483.45554	488.67089		
1.2.4.9	TCDD	-180.5	523.7125	242.52463	243.63952	298.38051	341.7776	375.30478	421.50082	450.60947	469.98995	483.45554	488.67089		
1.2.6.7	TCDD	-181.6	524.72	241.604	242.729	297.872	341.474	375.109	421.402	450.55	469.95	483.427	488.646		
1.2.6.8	TCDD	-186.1	526.037627	241.66746	242.79128	297.90792	341.49291	375.10182	421.3836	450.57776	469.972	483.44441	488.66167		
1.2.6.9	TCDD	-189.3	526.554271	242.26035	243.37183	298.34854	341.81621	375.34421	421.53244	450.67858	470.04474	483.49949	488.71016		
1.2.7.8	TCDD	81.6	524.72	241.604	242.729	297.872	341.474	375.109	421.402	450.55	469.95	483.427	488.646		

Continuación....

SUSTITUYENTE	SUSTANCIA	DHf (298)(kJ/mol)	S (298)(J/K mol)	Cp=J°K mol										
				298.15 K	300 °K	400 °K	500 K	600 K	800 K	1000 K	1200 °K	1400 K	1500 °K	
1.2.7.9	ICDD	186.1	525.037627	241.66746	242.79128	297.90792	341.49291	375.10182	421.3836	450.57776	469.972	483.4441	488.66167	
1.2.8.9	ICDD	-181.6	524.72	241.504	242.729	297.872	341.474	375.109	421.402	450.55	469.95	483.427	488.646	
1.3.6.9	ICDD	-184.8	525.236643	242.18689	243.30955	298.31262	341.79731	375.35139	421.55084	450.65082	470.02274	483.48208	488.69449	
1.3.7.9	ICDD	-181.6	524.72	241.504	242.729	297.872	341.474	375.109	421.402	450.55	469.95	483.427	488.646	
1.4.6.9	ICDD	-81.6	524.72	241.504	242.729	297.872	341.474	375.109	421.402	450.55	469.95	483.427	488.646	
1.4.7.8	ICDD	-173.9	522.88573	240.95765	242.08617	297.39546	341.13179	374.87379	421.27156	450.42142	469.85526	483.35451	488.58184	
1.2.3.4.6	Penta-CDD	-197.8	550.6212	258.3944	259.4968	313.24853	355.40068	387.7104	431.70169	458.93128	476.77331	489.01527	493.71985	
1.2.3.4.7	Penta-CDD	-197.8	550.6212	258.3944	259.4968	313.24853	355.40068	387.7104	431.70169	458.93128	476.77331	489.01527	493.71985	
1.2.3.6.7	Penta-CDD	216.4	555.2088	256.58606	257.71346	312.40713	355.0168	387.56103	431.71275	458.9312	476.78518	489.03012	493.73437	
1.2.3.6.8	Penta-CDD	-220.9	556.526427	256.64952	257.77574	312.44305	355.03571	387.55385	431.69435	458.95896	476.80718	489.04753	493.75004	
2.3.6.9	Penta-CDD	-224.1	557.04301	257.23241	258.35629	312.88367	355.35901	387.79624	431.84319	459.05978	476.87992	489.10261	493.79853	
1.2.3.8	Penta-CDD	216.4	555.2.88	256.58606	257.71346	312.40713	355.0.68	387.56103	431.71275	458.9312	476.78518	489.03012	493.734.7	
1.2.3.7.9	Penta-CDD	-220.9	556.526427	256.64952	257.77574	312.44305	355.03571	387.55385	431.69435	458.95896	476.80718	489.04753	493.75004	
1.2.3.8.9	Penta-CDD	216.4	555.2088	256.58606	257.71346	312.40713	355.0168	387.56103	431.71275	458.9312	476.78518	489.03012	493.73437	
1.2.4.6.7	Penta-CDD	204.5	553.7325	256.18127	257.31029	312.09283	354.77147	387.36603	431.58262	458.83912	476.71701	488.97802	493.68813	
1.2.4.6.8	Penta-CDD	-209	555.050127	256.24473	257.37257	312.12875	354.79038	387.35885	431.56421	458.86688	476.73901	488.99543	493.70379	
1.2.4.6.9	Penta-CDD	2.2.2	555.56677	256.82762	257.95312	312.56937	355.11368	387.60124	431.7.306	458.9677	476.81175	489.05051	493.75229	
1.2.4.7.8	Penta-CDD	204.5	553.7325	256.18127	257.31029	312.09283	354.77147	387.36603	431.58262	458.83912	476.71701	488.97802	493.68813	
1.2.4.7.9	Penta-CDD	209	555.050127	256.24473	257.37257	312.12875	354.79038	387.35885	431.56421	458.86688	476.73901	488.99543	493.70379	
2.4.8.9	Penta-CDD	-204.5	553.7325	256.18127	257.31029	312.09283	354.77147	387.36603	431.58262	458.83912	476.71701	488.97802	493.68813	
1.2.3.4.6.7	Hexa-CDD	248.4	585.4938	271.0915	272.22501	326.63081	368.33239	399.82041	441.88775	467.25931	483.56365	494.60629	498.79917	
1.2.3.4.6.8	Hexa-CDD	252.9	586.811427	271.15496	272.28729	326.66673	368.3513	399.81323	441.86934	467.28707	483.60565	494.6237	498.81483	

Continuación....

SUSTITUYENTE	SUSTANCIA	DHf (298)kJ/mol	S (298)J/K mol	Cp=J/K mol											
				298.15 K	300 °K	400 K	500 °K	600 K	800 K	1000 °K	1200 K	1400 K	1500 °K		
1 2,3,4,6,9	Hexa CDD	-256.1	587.32807	271.73785	272.86784	327.10735	368.6746	400.05562	442.01819	467.3879	483.67839	494.67678	498.86333		
2 3,4,7,8	Hexa CDD	248.4	585.4938	271.0915	272.22501	326.63081	368.33239	399.82.41	441.88775	467.2593	483.58365	494.60629	498.79917		
2 3,6,7,8	Hexa CDD	242.8	583.39	272.384	273.5.1	327.278	368.658	399.969	441.908	467.292	483.6	494.6.5	498.806		
1 2,3,6,8,9	Hexa CDD	254.7	584.8663	272.78879	273.90417	327.5923	368.90333	400.164	442.03813	467.38408	483.66817	494.6671	498.85224		
1 2 3 7 8 9	Hexa CD	242.8	583.39	272.384	273.501	327.278	368.658	399.969	441.908	467.292	483.6	494.615	498.806		
1 2 4,6,7,9	Hexa CDD	242.8	583.39	272.384	273.501	327.278	368.658	399.969	441.908	467.292	483.6	494.615	498.806		
1 2 4 6,7,9	Hexa-CDD	242.8	583.39	272.384	273.501	327.278	368.658	399.969	441.908	467.292	483.6	494.615	498.806		
2 4,6,8,9	Hexa-CDD	242.8	583.39	272.384	273.501	327.278	368.658	399.969	441.908	467.292	483.6	494.615	498.806		
2 3 4 6 7 8	Hepta C. D	274.8	613.675	286.88944	288.01255	34.50168	381.97359	4.222838	452.083	475.620	2.49039847	500.191.7	503.87.8		
1 2 3,4,6,7,9	Hepta-CDD	286.7	615.1513	287.29423	288.41572	341.81598	382.21892	412.42338	452.21313	475.71219	490.46664	500.24327	503.91704		
2 4 6 9	O DD	3.4	642.6	303.64	304.273	3.6684	395.842	424.829	462.414	484.34	497.25	5.8.3	508.966		

Propiedades termodinámicas para PCDFs determinadas por el método de diferencias por Olga V. Dorofeeva⁽⁴⁴⁾

SUSTITUYENTE	SUSTANCIA	DHF (298)kJ/mol	S (298)J/K mol	Cp = J°K mol											
				298.15 °K	300 °K	400 °K	500 °K	600 °K	800 °K	1000 °K	1200 °K	1400°K	1500 °K		
-	DF	55.297	381.6006	163.6501	164.751	220.833	267.5475	304.7959	358.3659	394.1728	419.2091	437.249	444.3891		
1	MCDF	24.697	410.9356	179.0401	180.137	235.536	281.1395	317.2259	368.6189	402.5438	426.0341	442.843	449.4691		
2	MCDF	24.697	410.9356	179.0401	180.137	235.536	281.1395	317.2259	368.6189	402.5438	426.0341	442.843	449.4691		
3	MCDF	24.697	410.9356	179.0401	180.137	235.536	281.1395	317.2259	368.6189	402.5438	426.0341	442.843	449.4691		
4	MCDF	24.697	410.9356	179.0401	180.137	235.536	281.1395	317.2259	368.6189	402.5438	426.0341	442.843	449.4691		
1.2	DCDF	2.897	438.9406	194.538	195.62881	250.26534	294.74057	329.67871	378.89834	410.89239	432.84106	448.42256	454.53612		
1.3	DCDF	-1.603	440.258227	194.60146	195.69109	250.30126	294.75948	329.67153	378.87994	410.92015	432.86306	448.43997	454.55179		
1.4	DCDF	4.803	440.77487	195.18435	196.27164	250.74188	295.08278	329.91392	379.02878	411.02097	432.9358	448.49505	454.60028		
1.6	DCDF	-5.903	440.2706	194.4301	195.523	250.239	294.7315	329.6559	378.8719	410.9148	432.8591	448.437	454.5491		
1.7	DCDF	5.903	440.2706	194.4301	195.523	250.239	294.7315	329.6559	378.8719	410.9148	432.8591	448.437	454.5491		
1.8	DCDF	-5.903	440.2706	194.4301	195.523	250.239	294.7315	329.6559	378.8719	410.9148	432.8591	448.437	454.5491		
1.9	DCDF	-5.903	440.2706	194.4301	195.523	250.239	294.7315	329.6559	378.8719	410.9148	432.8591	448.437	454.5491		
2.3	DCDF	2.897	438.9406	194.538	195.62881	250.26534	294.74057	329.67871	378.89834	410.89239	432.84106	448.42256	454.53612		
2.4	DCDF	1.603	440.258227	194.60146	195.69109	250.30126	294.75948	329.67153	378.87994	410.92015	432.86306	448.43997	454.55179		
2.6	DCDF	-5.903	440.2706	194.4301	195.523	250.239	294.7315	329.6559	378.8719	410.9148	432.8591	448.437	454.5491		
2.7	DCDF	-5.903	440.2706	194.4301	195.523	250.239	294.7315	329.6559	378.8719	410.9148	432.8591	448.437	454.5491		
2.8	DCDF	-5.903	440.2706	194.4301	195.523	250.239	294.7315	329.6559	378.8719	410.9148	432.8591	448.437	454.5491		
3.4	DCDF	2.897	438.9406	194.538	195.62881	250.26534	294.74057	329.67871	378.89834	410.89239	432.84106	448.42256	454.53612		
3.6	DCDF	-5.903	440.2706	194.4301	195.523	250.239	294.7315	329.6559	378.8719	410.9148	432.8591	448.437	454.5491		
3.7	DCDF	-5.903	440.2706	194.4301	195.523	250.239	294.7315	329.6559	378.8719	410.9148	432.8591	448.437	454.5491		
4.6	DCDF	5.903	440.2706	194.4301	195.523	250.239	294.7315	329.6559	378.8719	410.9148	432.8591	448.437	454.5491		
1.2.3	TriCDF	23.503	467.1218	210.33594	211.41635	265.13621	308.38177	342.08668	389.09359	419.25319	439.65588	454.00744	459.60775		

Continuación...

SUSTITUYENTE	SUSTANCIA	DHF [298]kJ/mol]	S [298]J/K mol]	Cp=J/K mol										
				298 15 K	300 °K	400 °K	500 °K	600 K	800 K	1000 °K	1200 K	1400°K	1500 K	
1.2.4	Tri-CDF	-35.403	468.5981	210.74073	211.81952	265.45051	308.6271	342.28168	389.22372	419.34527	439.72405	454.05954	459.65399	
1.2.6	Tri-CDF	-27.703	468.2756	209.928	211.01481	264.96834	308.33257	342.10871	389.15134	419.26339	439.66606	454.01656	459.61612	
1.2.7	Tri-CDF	27.703	468.2756	209.928	211.01481	264.96834	308.33257	342.10871	389.15134	419.26339	439.66606	454.01656	459.61612	
1.2.8	Tri-CDF	27.703	468.2756	209.928	211.01481	264.96834	308.33257	342.10871	389.15134	419.26339	439.66606	454.01656	459.61612	
1.2.9	Tri-CDF	27.703	468.2756	209.928	211.01481	264.96834	308.33257	342.10871	389.15134	419.26339	439.66606	454.01656	459.61612	
1.3.4	Tri-CDF	35.403	468.5981	210.74073	211.81952	265.45051	308.6271	342.28168	389.22372	419.34527	439.72405	454.05954	459.65399	
1.3.6	Tri-CDF	-32.203	469.593227	209.99146	211.07709	265.00426	308.35148	342.10153	389.13294	419.29115	439.68806	454.03397	459.63179	
1.3.7	Tri-CDF	-32.203	469.593227	209.99146	211.07709	265.00426	308.35148	342.10153	389.13294	419.29115	439.68806	454.03397	459.63179	
1.3.8	Tri-CDF	32.203	469.593227	209.99146	211.07709	265.00426	308.35148	342.10153	389.13294	419.29115	439.68806	454.03397	459.63179	
1.3.9	Tri-CDF	32.203	469.593227	209.99146	211.07709	265.00426	308.35148	342.10153	389.13294	419.29115	439.68806	454.03397	459.63179	
1.4.6	Tri-CDF	35.403	470.10987	210.57435	211.65764	265.44488	308.67478	342.34392	389.28178	419.39197	439.7608	454.08905	459.68028	
1.4.7	Tri-CDF	35.403	470.10987	210.57435	211.65764	265.44488	308.67478	342.34392	389.28178	419.39197	439.7608	454.08905	459.68028	
1.4.8	Tri-CDF	35.403	470.10987	210.57435	211.65764	265.44488	308.67478	342.34392	389.28178	419.39197	439.7608	454.08905	459.68028	
1.4.9	Tri-CDF	-35.403	470.10987	210.57435	211.65764	265.44488	308.67478	342.34392	389.28178	419.39197	439.7608	454.08905	459.68028	
1.6.7	Tri-CDF	-27.703	468.2756	209.928	211.01481	264.96834	308.33257	342.10871	389.15134	419.26339	439.66606	454.01656	459.61612	
1.6.8	Tri-CDF	-32.203	469.593227	209.99146	211.07709	265.00426	308.35148	342.10153	389.13294	419.29115	439.68806	454.03397	459.63179	
1.7.8	Tri-CDF	-23.503	467.1218	210.33594	211.41635	265.13621	308.38177	342.08668	389.09359	419.25319	439.65588	454.00744	459.60775	
2.3.6	Tri-CDF	-27.703	468.2756	209.928	211.01481	264.96834	308.33257	342.10871	389.15134	419.26339	439.66606	454.01656	459.61612	
2.3.7	Tri-CDF	-27.703	468.2756	209.928	211.01481	264.96834	308.33257	342.10871	389.15134	419.26339	439.66606	454.01656	459.61612	
2.3.8	Tri-CDF	-27.703	468.2756	209.928	211.01481	264.96834	308.33257	342.10871	389.15134	419.26339	439.66606	454.01656	459.61612	
2.4.6	Tri-CDF	-32.203	469.593227	209.99146	211.07709	265.00426	308.35148	342.10153	389.13294	419.29115	439.68806	454.03397	459.63179	

Continuación...

SUSTITUYENTE	SUSTANCIA	DHF (298)(kJ/mol)	S (298)(J/K mol)	Cp=J/K mol											
				298.15 °K	300 °K	400 °K	500 °K	600 °K	800 °K	1000 °K	1200 °K	1400 °K	1500 °K		
2.4.7	Ti-CDF	-32.203	469.593227	209.99146	211.07709	265.00426	308.35148	342.10153	389.13294	419.29115	439.68806	454.03397	459.63179		
2.4.8	Ti-CDF	-32.203	469.593227	209.99146	211.07709	265.00426	308.35148	342.10153	389.13294	419.29115	439.68806	454.03397	459.63179		
2.6.7	Ti-CDF	27.703	468.2756	209.928	211.01481	264.96834	308.33257	342.10871	389.15134	419.26339	439.66606	454.01656	459.61612		
3.4.6	Ti-CDF	-27.703	468.2756	209.928	211.01481	264.96834	308.33257	342.10871	389.15134	419.26339	439.66606	454.01656	459.61612		
3.4.7	Ti-CDF	-27.703	468.2756	209.928	211.01481	264.96834	308.33257	342.10871	389.15134	419.26339	439.66606	454.01656	459.61612		
1.2.3.4	TCDF	-52.703	495.5068	226.6105	227.6768	280.31853	322.25018	354.6873	399.42459	427.66708	446.50741	459.61927	464.70295		
1.2.3.6	TCDF	-54.103	496.4568	225.72594	226.80235	279.83921	321.97377	354.51668	399.34659	427.62419	446.48088	459.60144	464.68775		
1.2.3.7	TCDF	-54.103	496.4568	225.72594	226.80235	279.83921	321.97377	354.51668	399.34659	427.62419	446.48088	459.60144	464.68775		
1.2.3.8	TCDF	-54.103	496.4568	225.72594	226.80235	279.83921	321.97377	354.51668	399.34659	427.62419	446.48088	459.60144	464.68775		
1.2.3.9	TCDF	-54.103	496.4568	225.72594	226.80235	279.83921	321.97377	354.51668	399.34659	427.62419	446.48088	459.60144	464.68775		
1.2.4.6	TCDF	-66.003	497.9331	226.13073	227.20552	280.15351	322.2191	354.71168	399.47672	427.71627	446.54905	459.65354	464.73399		
1.2.4.7	TCDF	-66.003	497.9331	226.13073	227.20552	280.15351	322.2191	354.71168	399.47672	427.71627	446.54905	459.65354	464.73399		
1.2.4.8	TCDF	-66.003	497.9331	226.13073	227.20552	280.15351	322.2191	354.71168	399.47672	427.71627	446.54905	459.65354	464.73399		
1.2.4.9	TCDF	-66.003	497.9331	226.13073	227.20552	280.15351	322.2191	354.71168	399.47672	427.71627	446.54905	459.65354	464.73399		
1.2.6.7	TCDF	67.103	498.9406	225.2101	226.295	279.645	321.9155	354.5159	399.3779	427.6568	446.5091	459.625	464.7091		
1.2.6.8	TCDF	71.603	500.258227	225.27356	226.35728	279.68092	321.93441	354.50872	399.3595	427.68456	446.5311	459.64241	464.72477		
1.2.6.9	TCDF	-74.803	500.77487	225.85645	226.93783	280.12154	322.25771	354.75111	399.50834	427.78538	446.60384	459.69749	464.77326		
1.2.7.8	TCDF	-67.103	498.9406	225.2101	226.295	279.645	321.9155	354.5159	399.3779	427.6568	446.5091	459.625	464.7091		
1.2.7.9	TCDF	71.603	500.258227	225.27356	226.35728	279.68092	321.93441	354.50872	399.3595	427.68456	446.5311	459.64241	464.72477		
1.2.8.9	TCDF	-67.103	498.9406	225.2101	226.295	279.645	321.9155	354.5159	399.3779	427.6568	446.5091	459.625	464.7091		
1.3.4.6	TCDF	-66.003	497.9331	226.13073	227.20552	280.15351	322.2191	354.71168	399.47672	427.71627	446.54905	459.65354	464.73399		
1.3.4.7	TCDF	66.003	497.9331	226.13073	227.20552	280.15351	322.2191	354.71168	399.47672	427.71627	446.54905	459.65354	464.73399		

Continuación...

SUSTITUYENTE	SUSTANCIA	DHF (298)kJ/(mo)	s (298)J/(K mol)	Cp-J/K mol											
				298 15 °K	300 K	400 K	500 K	600 K	800 °K	1000 K	1200 K	1400°K	1500 °K		
1.3.4.8	ICDF	-66.003	497.9331	226.13073	227.20562	280.15351	322.2191	354.71168	399.47672	427.71627	446.54905	459.65354	464.73399		
1.3.4.9	ICDF	-66.003	497.9331	226.13073	227.20562	280.15351	322.2191	354.71168	399.47672	427.71627	446.54905	459.65354	464.73399		
1.3.6.7	ICDF	-62.603	497.622973	225.14664	226.23272	279.60908	321.89659	354.52308	399.3963	427.62904	446.4871	459.60759	464.69343		
1.3.6.8	ICDF	67.103	498.9406	225.2101	226.295	279.645	321.9155	354.5159	399.3779	427.6568	446.5091	459.625	464.7091		
1.3.6.9	ICDF	-70.303	499.457243	225.79299	226.87555	280.08562	322.23881	354.75829	399.52674	427.75762	446.58184	459.68008	464.75759		
1.3.7.8	ICDF	-62.603	497.622973	225.14664	226.23272	279.60908	321.89659	354.52308	399.3963	427.62904	446.4871	459.60759	464.69343		
1.3.7.9	ICDF	67.103	498.9406	225.2101	226.295	279.645	321.9155	354.5159	399.3779	427.6568	446.5091	459.625	464.7091		
1.4.6.7	ICDF	-59.403	497.10633	224.56375	225.65217	279.16846	321.57329	354.28069	399.24746	427.52822	446.41436	459.55251	464.64494		
1.4.6.8	ICDF	-63.903	498.423957	224.62721	225.71445	279.20438	321.59222	354.27351	399.22906	427.55598	446.43636	459.56992	464.66061		
1.4.6.9	ICDF	-67.103	498.9406	225.2101	226.295	279.645	321.9155	354.5159	399.3779	427.6568	446.5091	459.625	464.7091		
1.4.7.8	ICDF	59.403	497.10633	224.56375	225.65217	279.6846	321.57329	354.28069	399.24746	427.52822	446.41436	459.55251	464.64494		
1.6.7.8	ICDF	62.803	498.928227	225.38146	226.46309	279.70726	321.94348	354.53153	399.38594	427.66215	446.51306	459.62797	464.71179		
2.3.4.6	ICDF	-62.803	498.928227	225.38146	226.46309	279.70726	321.94348	354.53153	399.38594	427.66215	446.51306	459.62797	464.71179		
2.3.4.7	ICDF	-62.803	498.928227	225.38146	226.46309	279.70726	321.94348	354.53153	399.38594	427.66215	446.51306	459.62797	464.71179		
2.3.4.8	ICDF	-62.803	498.928227	225.38146	226.46309	279.70726	321.94348	354.53153	399.38594	427.66215	446.51306	459.62797	464.71179		
2.3.6.7	ICDF	-67.103	498.9406	225.2101	226.295	279.645	321.9155	354.5159	399.3779	427.6568	446.5091	459.625	464.7091		
2.3.6.8	ICDF	-71.603	500.258227	225.27356	226.35728	279.68092	321.93441	354.50872	399.3595	427.68456	446.5311	459.64241	464.72477		
2.3.7.8	ICDF	67.103	498.9406	225.2101	226.295	279.645	321.9155	354.5159	399.3779	427.6568	446.5091	459.625	464.7091		
2.4.6.7	ICDF	62.603	497.622973	225.14664	226.23272	279.60908	321.89659	354.52308	399.3963	427.62904	446.4871	459.60759	464.69343		
2.4.6.8	ICDF	-67.103	498.9406	225.2101	226.295	279.645	321.9155	354.5159	399.3779	427.6568	446.5091	459.625	464.7091		
3.4.6.7	ICDF	-67.103	498.9406	225.2101	226.295	279.645	321.9155	354.5159	399.3779	427.6568	446.5091	459.625	464.7091		
1.2.3.4.6	Penta CDF	-83.303	524.8418	242.0005	243.0628	295.02153	335.84218	367.1173	409.67759	436.03808	453.33241	465.21327	469.78295		

Continuación...

SUSTITUYENTE	SUSTANCIA	DHF (298)kJ/mol	S (298)J/K mol	Cp=J/K mol											
				298 15 °K	300 °K	400 °K	500 K	600 K	800 K	1000 K	1200 K	1400°K	1500 K		
1.2.3.4.7	Penta-CDF	83.303	524.8418	242.0005	243.0628	295.02153	335.84218	367.1173	409.67759	436.03808	453.33241	465.21327	469.78295		
1.2.3.4.8	Penta-CDF	-83.303	524.8418	242.0005	243.0628	295.02153	335.84218	367.1173	409.67759	436.03808	453.33241	465.21327	469.78295		
1.2.3.4.9	Penta CDF	-83.303	524.8418	242.0005	243.0628	295.02153	335.84218	367.1173	409.67759	436.03808	453.33241	465.21327	469.78295		
1.2.3.6.7	Penta CDF	-101.903	529.4294	240.19216	241.27946	294.18013	335.4583	366.96793	409.68865	436.038	453.34428	465.22812	469.79747		
1.2.3.6.8	Penta-CDF	106.403	530.747027	240.25562	241.34174	294.21605	335.47721	366.96075	409.67025	436.06576	453.36628	465.24553	469.81314		
1.2.3.6.9	Penta CDF	109.603	531.26367	240.83851	241.92229	294.65667	335.80051	367.20314	409.81909	436.16658	453.43902	465.30061	469.86163		
1.2.3.8	enta CDF	101.9.3	529.4294	240.92.6	24.27946	294.8.13	335.4583	366.96793	409.68865	436.038	453.34428	465.228.2	469.79747		
1.2.3.7.9	Penta CDF	106.403	530.747027	240.25562	241.34174	294.21605	335.47721	366.96075	409.67025	436.06576	453.36628	465.24553	469.81314		
1.2.3.8.9	Penta CDF	-101.903	529.4294	240.19216	241.27946	294.18013	335.4583	366.96793	409.68865	436.038	453.34428	465.22812	469.79747		
1.2.4.6.7	Penta-CDF	-90.003	527.9531	239.78737	240.87629	293.86583	335.21297	366.77293	409.55852	435.94592	453.27611	465.17602	469.75123		
1.2.4.6.8	Penta CDF	-94.503	529.270727	239.85083	240.93857	293.90175	335.23.88	366.76575	409.54011	435.97368	453.29811	465.19343	469.76689		
1.2.4.6.9	Penta-CDF	97.703	529.78737	240.43372	241.51912	294.34237	335.55518	367.00814	409.68896	436.0745	453.37085	465.24851	469.81539		
1.2.4.7.8	Penta-CDF	90.003	527.9531	239.78737	240.87629	293.86583	335.21297	366.77293	409.55852	435.94592	453.27611	465.17602	469.75123		
1.2.4.7.9	Penta-CDF	94.503	529.270727	239.85083	240.93857	293.90175	335.23188	366.76575	409.54011	435.97368	453.29811	465.19343	469.76689		
1.2.4.8.9	Penta-CDF	-90.003	527.9531	239.78737	240.87629	293.86583	335.21297	366.77293	409.55852	435.94592	453.27611	465.17602	469.75123		
1.2.6.7.8	Penta-CDF	-93.503	527.1218	241.00804	242.08254	294.51587	335.5567	366.92387	409.57315	436.0176	453.32392	465.20988	469.78073		
1.2.6.7.9	Penta-CDF	105.403	528.5981	241.41283	242.48571	294.83017	335.80203	367.11887	409.70328	436.10968	453.3921	465.26198	469.82697		
1.3.4.6.7	Penta-CDF	-90.003	527.9531	239.78737	240.87629	293.86583	335.21297	366.77293	409.55852	435.94592	453.27611	465.17602	469.75123		
1.3.4.6.8	Penta CDF	94.503	529.270727	239.85083	240.93857	293.90175	335.23188	366.76575	409.54011	435.97368	453.29811	465.19343	469.76689		
1.3.4.6.9	Penta-CDF	97.703	529.78737	240.43372	241.51912	294.34237	335.55518	367.00814	409.68896	436.0745	453.37085	465.24851	469.81539		
1.3.4.7.8	Penta-CDF	90.003	527.9531	239.78737	240.87629	293.86583	335.21297	366.77293	409.55852	435.94592	453.27611	465.17602	469.75123		
1.3.4.7.9	Penta CDF	-94.503	529.270727	239.85083	240.93857	293.90175	335.23188	366.76575	409.54011	435.97368	453.29811	465.19343	469.76689		

Continuación...

SUSTITUYENTE	SUSTANCIA	DHF (298)kJ/mol	S (298)J/K mol	Cp=J/K mol											
				298 15 K	300 K	400 K	500 K	600 K	800 °K	1000 K	1200 K	1400 K	1500 K		
1 3.6 7.8	Penta-CDF	-89.003	525.804173	240.94458	242.02026	294.47995	335.53779	366.93105	409.59155	435.98984	453.30192	465.19247	469.76506		
1 4.6.7.8	Penta CDF	-85.803	525.28753	240.36169	241.43971	294.03933	335.21449	366.68866	409.44271	435.88902	453.22918	465.13739	469.71657		
2 3.4.6.7	Penta-CDF	-101.903	529.4294	240.19216	241.27946	294.18013	335.4583	366.96793	409.68865	436.038	453.34428	465.22812	469.79747		
2 3.4.6.8	Penta CDF	106.403	530.747027	240.25562	241.34174	294.21605	335.47721	366.96075	409.67025	436.06576	453.36628	465.24553	469.81314		
2 3.4.7.8	Penta CDF	101.9.3	529.4294	240.19216	24.27946	294.8013	335.4583	366.96793	409.68865	436.38	453.34428	465.22812	469.79747		
1 2.3.4.6.7	Hexa-CDF	-133.903	559.7144	254.6976	255.79101	308.40381	348.77389	379.22731	419.86365	444.36611	460.14275	470.80429	474.86227		
1 2.3.4.6.8	Hexa CDF	138.403	561.032027	254.76106	255.85329	308.43973	348.7928	379.22013	419.84524	444.39387	460.16475	470.8217	474.87793		
2 3.4.6.9	Hexa CDF	141.603	561.54867	255.34395	256.43384	308.88035	349.11161	379.46252	419.99409	444.4947	460.23749	470.87678	474.92643		
3.4.7.8	Hexa CDF	33.903	559.7.44	254.6976	255.79.0	308.4038	348.7738	379.2273	419.86365	444.366	460.14275	470.80429	474.8622		
1 2.3.4.7.9	Hexa CDF	138.403	561.032027	254.76106	255.85329	308.43973	348.7928	379.22013	419.84524	444.39387	460.16475	470.8217	474.87793		
1 2.3.4.8.9	Hexa CDF	133.903	559.7144	254.6976	255.79101	308.40381	348.77389	379.22731	419.86365	444.36611	460.14275	470.80429	474.86227		
2 3.6.7.8	Hexa CDF	128.303	557.6.06	255.9901	257.067	309.05	349.0995	379.3759	419.8839	444.3988	460.59	47.813	474.869		
2 3.6.8.9	Hexa CDF	140.203	559.0869	256.39489	257.47017	309.3653	349.34483	379.5709	420.01403	444.49088	460.22727	470.8651	474.91534		
1 2.3.7.8.9	Hexa CDF	128.303	557.61.6	255.9901	257.67	309.051	349.0995	379.37.9	419.8839	444.3988	460.159	470.813	474.869		
1 2.4.6.7.8	Hexa CDF	116.403	556.1343	255.58531	256.66383	308.7367	348.85417	379.1809	419.75377	444.30672	460.09093	470.7609	474.82286		
1 2.4.6.7.9	Hexa CDF	-128.303	557.6106	255.9901	257.067	309.051	349.0995	379.3759	419.8839	444.3988	460.1591	470.813	474.8691		
1 2.4.6.8.9	Hexa CDF	128.303	557.6106	255.9901	257.067	309.051	349.0995	379.3759	419.8839	444.3988	460.1591	470.813	474.8691		
1 2.4.7.8.9	Hexa-CDF	-116.403	556.1343	255.58531	256.66383	308.7367	348.85417	379.1809	419.75377	444.30672	460.09093	470.7609	474.82286		
1 3.4.6.7.8	Hexa CDF	-116.403	556.1343	255.58531	256.66383	308.7367	348.85417	379.1809	419.75377	444.30672	460.09093	470.7609	474.82286		
1 3.4.6.7.9	Hexa CDF	128.303	557.6106	255.9901	257.067	309.051	349.0995	379.3759	419.8839	444.3988	460.1591	470.813	474.8691		
2 3.4.6.7.8	Hexa CDF	128.303	557.6.06	255.9901	257.067	309.05	349.0995	379.3759	419.8839	444.3988	460.159	470.813	474.8691		
1 2.3.4.6.8	Hept. DF	60.3	587.8956	270.49554	271.57855	23.27468	362.41509	39.63528	43.589	452.2692	466.95757	476.389.7	479.9339		

Continuación...

SUSTITUYENTE	SUSTANCIA	DH° (298)(kJ/mol)	S (298)(J°K mo)	Cp=J°K mo											
				298 15 °K	300 °K	400 K	500 °K	600 °K	800 K	1000 K	1200 K	1400°K	1500 °K		
1.2.3.4.6.7.9	Hepta CDF	-172.203	589.3719	270.90033	271.98172	323.58898	362.66042	391.83028	430.18903	452.81899	467.02574	476.44127	479.98014		
1.2.3.4.6.8.9	Hepta CDF	-172.203	589.3719	270.90033	271.98172	323.58898	362.66042	391.83028	430.18903	452.81899	467.02574	476.44127	479.98014		
2.3.4.7.8.9	Hepta CDF	16.3.3	587.8956	270.49554	271.57855	323.27468	362.41509	391.63528	430.0689	452.72692	466.95757	476.389.7	479.9339		
3.4.6.8.9	F	89.503	6.62806	286.7701	287.839	338.457	376.835	4.4.2359	440.3899	46.408	473.8.91	482.0	485.29		

Datos Termodinamicos utilizados en el presente trabajo.

ANEXO B

Peso molecular, entalpía de evaporación, temperatura de fusión y de evaporación de las dioxinas (PCDDs y PCDFs), utilizados en el presente trabajo

Peso molecular, entalpía de evaporación, temperatura de fusión y de evaporación utilizados en el presente trabajo⁽⁴⁶⁾.

Compuesto PCDD/Fs	Peso molecular	Entalpía de evaporación (kJ/mol)	Temperatura de fusión (°C)	Temperatura de evaporación (°C)
2,3,7,8TCDD	321.970	79.9	305	446.5
1,2,3,7,8PCDD	356.415	88.7	240	464.7
1,2,3,4,7,8 HxCDD	390.859	89.1	273	487.7
1,2,3,6,7,8 HxCDD	390.859	88.1	285	487.7
1,2,3,7,8,9 HxCDD	390.859	91.7	243	487.7
1,2,3,4,6,7,8 HpCDD	425.304	92.5	264	507.2
1-46-9 OCDD	459.749	86.7	330	510.0
2,3,7,8 TCDF	305.970	80.3	227	438.3
1,2,3,7,8 PCDF	340.415	83.8	225	464.7
2,3,4,7,8 PCDF	340.415	85.8	196	464.7
1,2,3,4,7,8 HxCDF	374.860	86.5	225.5	487.7
1,2,3,6,7,8 HxCDF	374.860	86.1	232	487.7
1,2,3,7,8,9 HxCDF	374.860	85.2	246	487.7
2,3,4,6,7,8 HxCDF	374.860	85.7	239	487.7
1,2,3,4,6,7,8 HpCDF	409.305	87.8	236	507.2
1,2,3,4,7,8,9 HpCDF	409.305	88.6	221	507.2
1-46-9 OCDF	443.749	90.0	258	537

ANEXO C

Valores obtenidos del factor acéntrico, la temperatura y presión crítica y el factor de compresibilidad

Valores obtenidos del factor acéntrico, la temperatura y presión crítica y el factor de compresibilidad.

Compuesto PCDD/Fs	factor acéntrico (ω)	temperatura crítica (T_c) °C	presión crítica (P_c) bar	factor de compresibilidad (Z)
2,3,7,8TCDD	.8305533080	696.8665541	29.99151764	.2586361260
1,2,3,7,8PCDD	.8887931920	709.7250031	28.35363948	.2583140220
1,2,3,4,7,8 HxCDD	.9448980500	729.3323261	26.84635762	.2555808620
1,2,3,6,7,8 HxCDD	.8411149950	741.5482761	26.51560483	.2525359730
1,2,3,7,8,9 HxCDD	.9448980500	729.3323261	26.84635762	.2555808620
1,2,3,4,6,7,8 HpCDD	.8965941780	756.1380461	25.15067706	.2505416290
1-46-9 OCDD	.9495574270	749.3579861	23.88849170	.2533147660
2,3,7,8 TCDF	.7679870580	692.9243591	29.47275526	.2504295620
1,2,3,7,8 PCDF	2.201220820	676.4078241	126.5308618	.5072493750
2,3,4,7,8 PCDF	.8266123630	716.4946631	27.87661520	.2478265550
1,2,3,4,7,8 HxCDF	.8834317450	735.7259361	26.40671133	.2457096510
1,2,3,6,7,8 HxCDF	.7804251780	748.5910761	26.08402534	.2427215810
1,2,3,7,8,9 HxCDF	.8834317450	735.7259361	26.40671133	.2457096510
2,3,4,6,7,8 HxCDF	.7804251780	748.5910761	26.08402534	.2427215810
1,2,3,4,6,7,8 HpCDF	.8365397240	762.7555761	24.75186197	.2412576860
1,2,3,4,7,8,9 HpCDF	.9379588280	750.6753361	25.05007447	.2441025380
1-46-9 OCDF	.8904798840	790.8864561	23.51920661	.2362089490

ANEXO D

Resultados obtenidos de las simulaciones en ASPEN PLUS™ con diferente flujos de aire y gas cloro

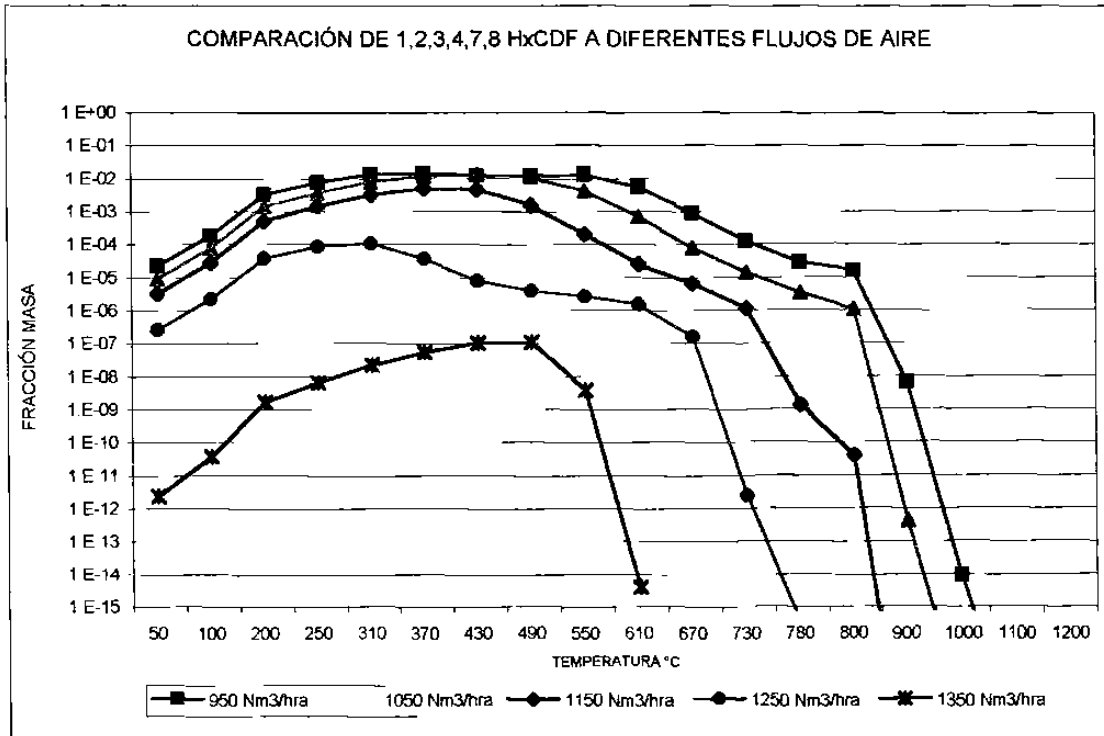


Figura 1. Resultados de la simulación del 1,2,3,4,7,8 HxCDF a diferentes temperaturas y flujo de aire.

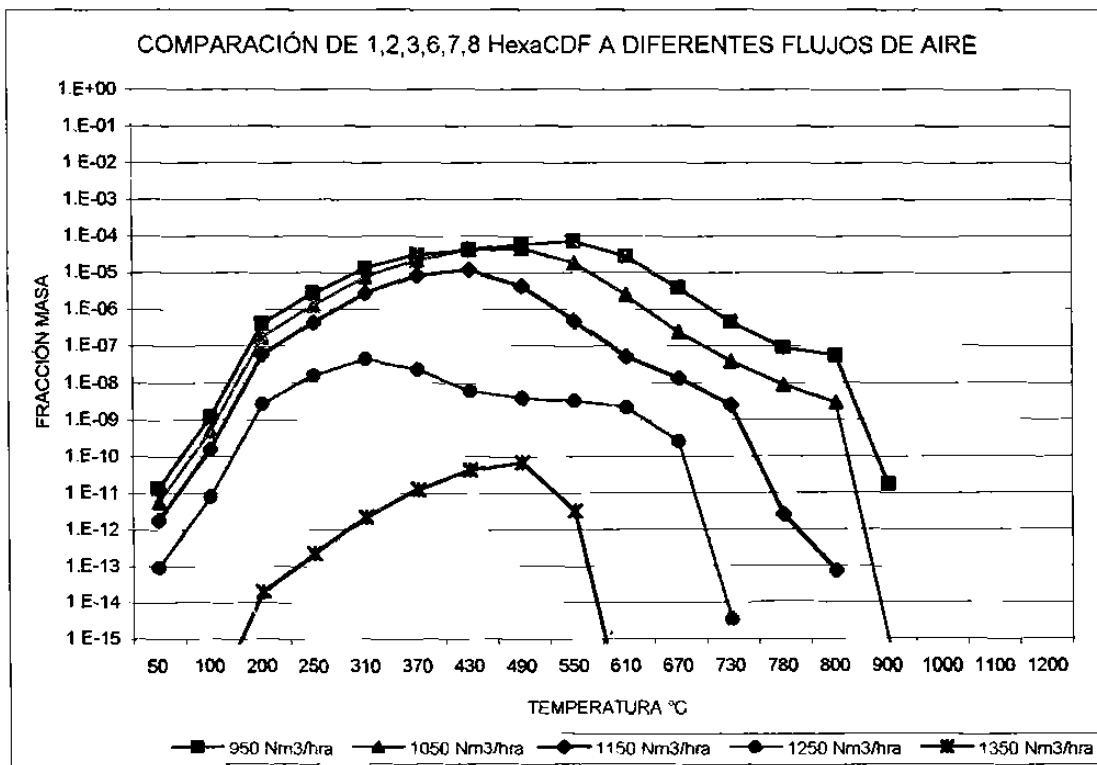


Figura 2. Resultados de la simulación del 1,2,3,6,7,8 HxCDF a diferentes temperaturas y flujo de aire.

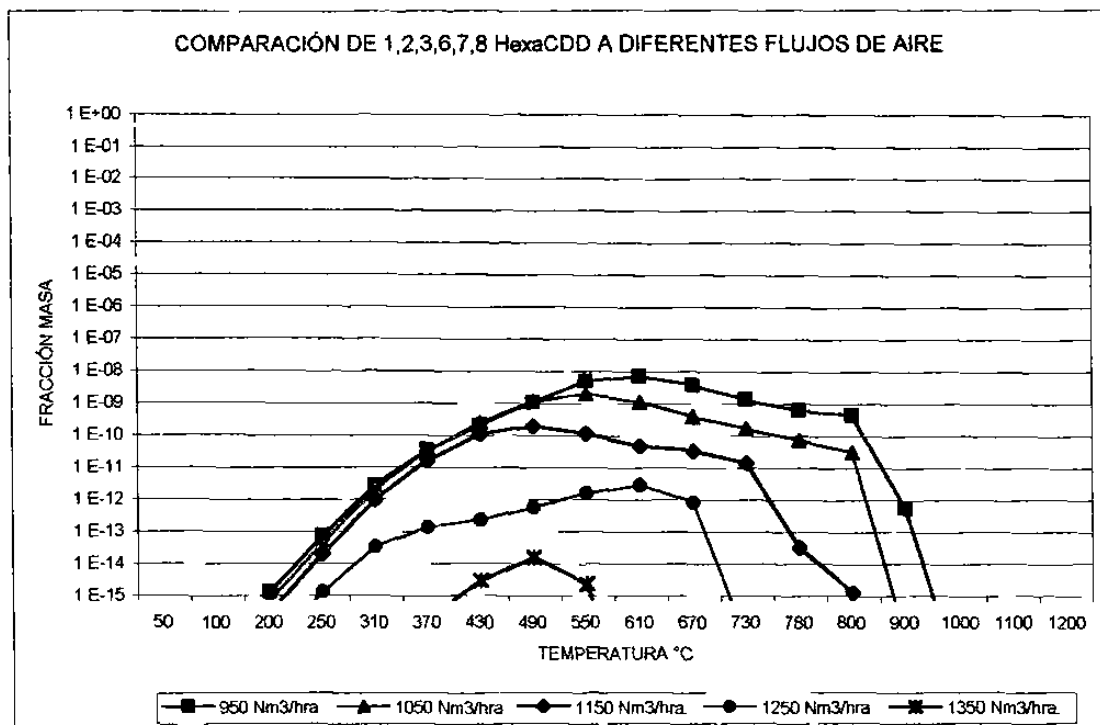


Figura 3. Resultados de la simulación del 1,2,3,6,7,8 HxCDD a diferentes temperaturas y flujo de aire.

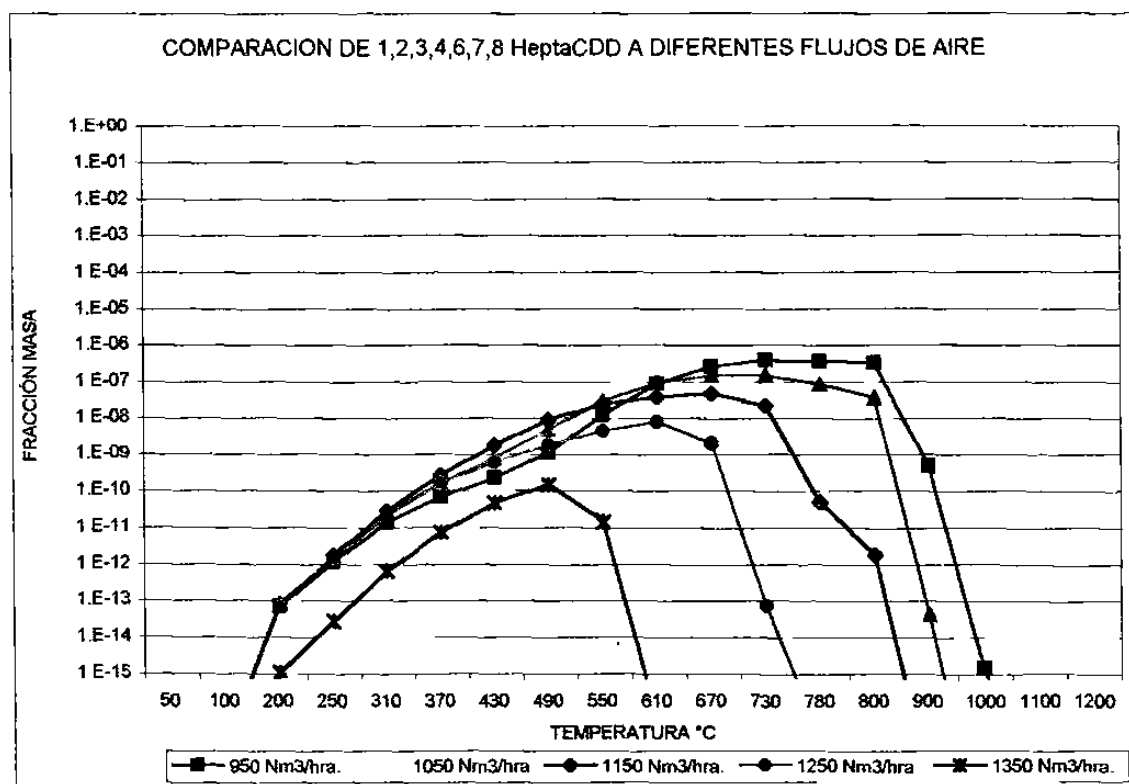


Figura 4. Resultados de la simulación del 1,2,3,4,6,7,8 HeptaCDD a diferentes temperaturas y flujo de aire.

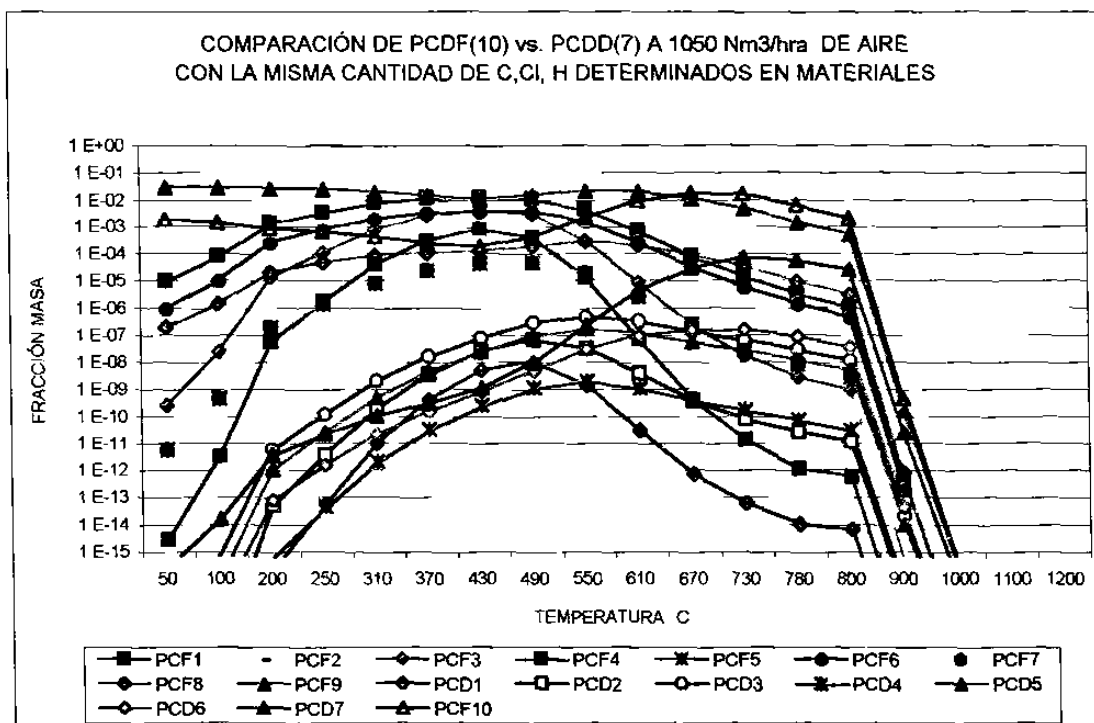


Figura 5. Resultados de la simulación de las 17 dioxinas analizadas (PCDD/Fs) a diferentes temperaturas y 1,050Nm³/hr de flujo de aire.

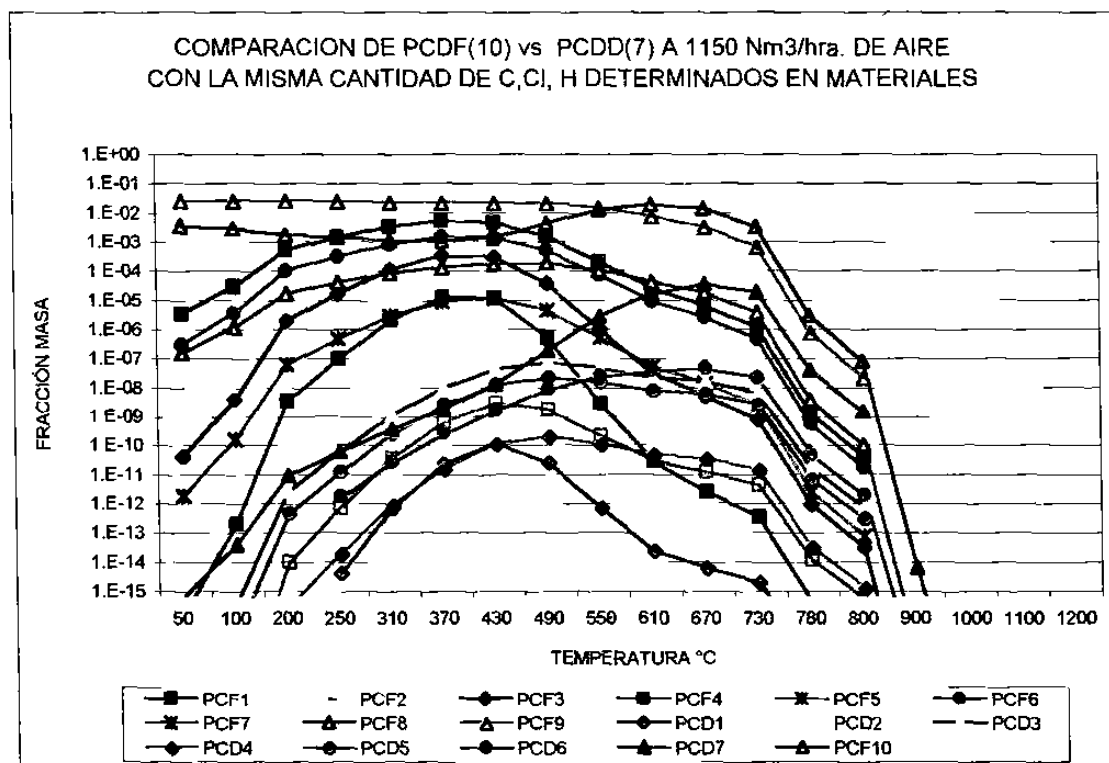


Figura 6. Resultados de la simulación de las 17 dioxinas analizadas (PCDD/Fs) a diferentes temperaturas y 1,150Nm³/hr de flujo de aire.

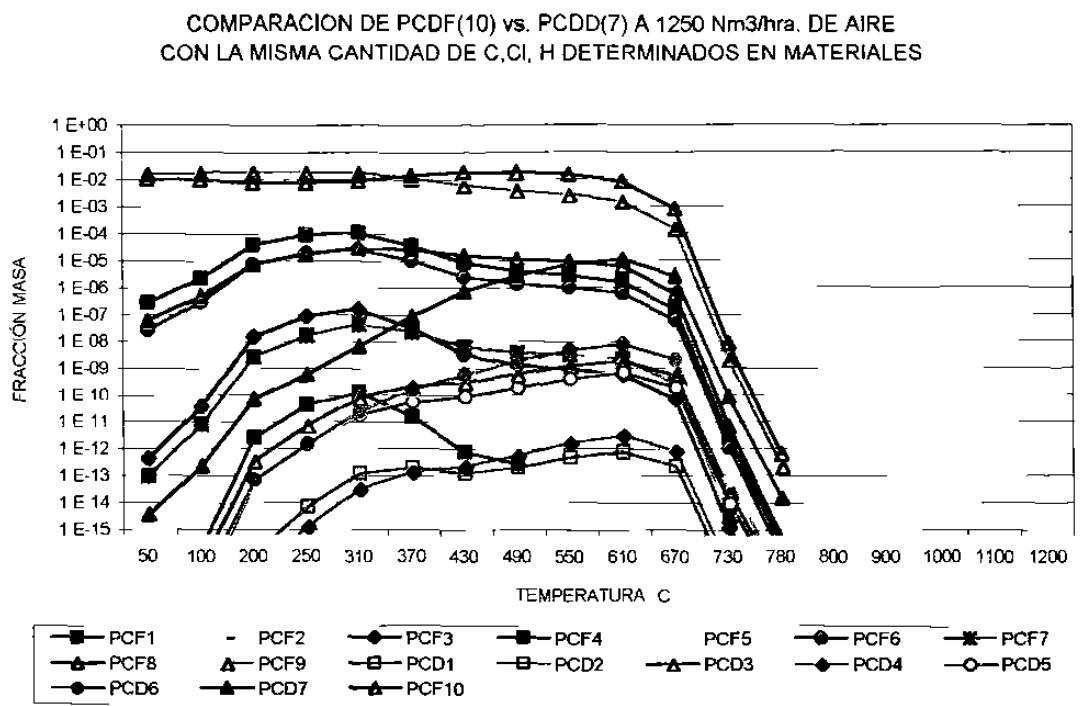


Figura 7. Resultados de la simulación de las 17 dioxinas analizadas (PCDD/Fs) a diferentes temperaturas y 1,250Nm³/hr de flujo de aire.

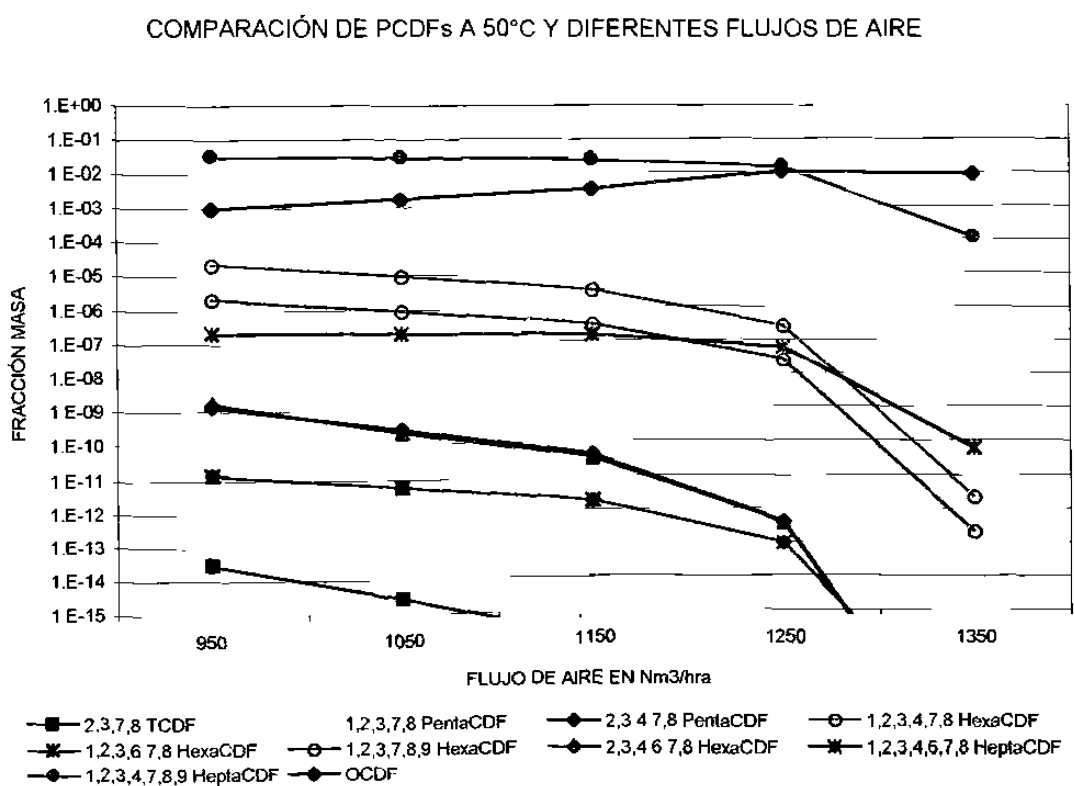


Figura 8. Resultados de la simulación de los 10 PCDFs a 50°C y diferentes flujos de aire.

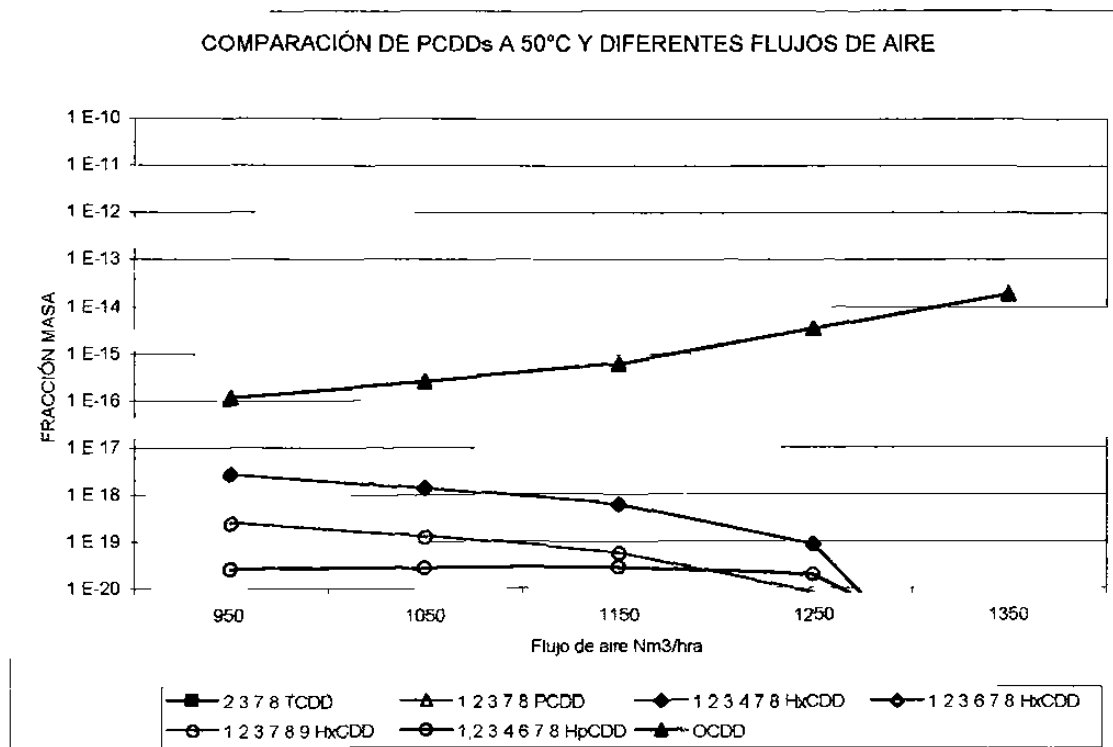


Figura 9. Resultados de la simulación de los 10 PCDDs a 50 C y diferentes flujos de aire.

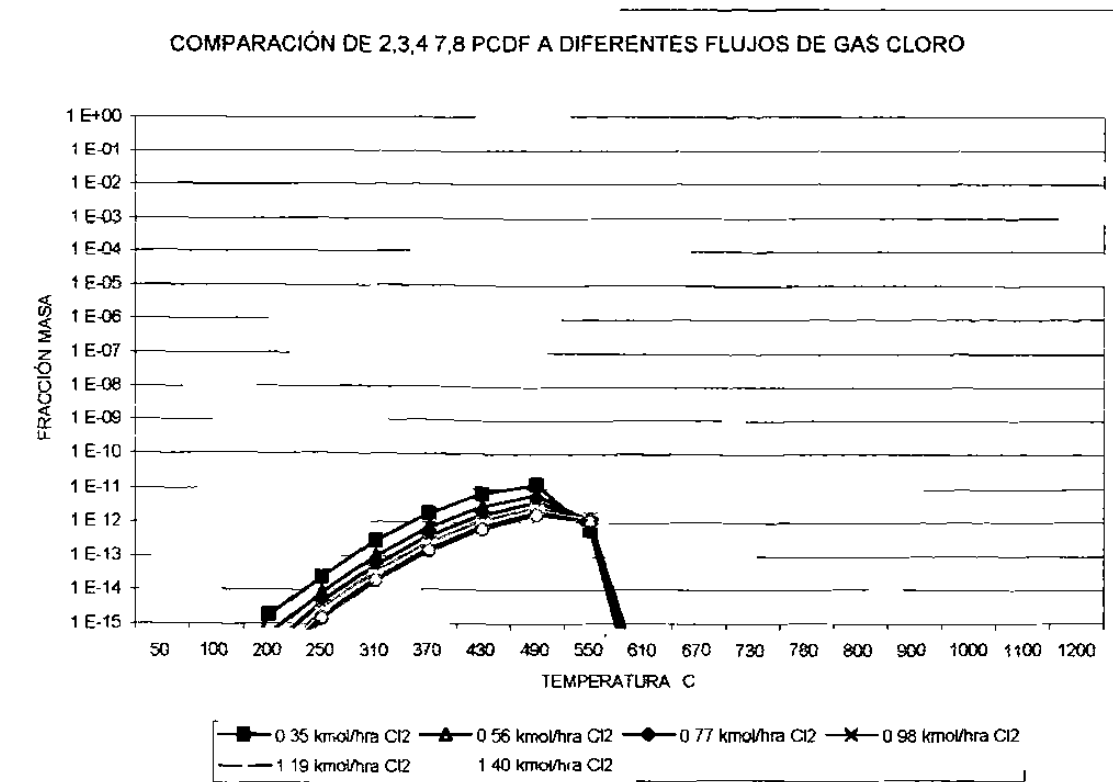


Figura 10. Resultados de la simulación del 2,3,4,7,8 PentaCDF a diferentes temperaturas y flujo de gas Cloro.

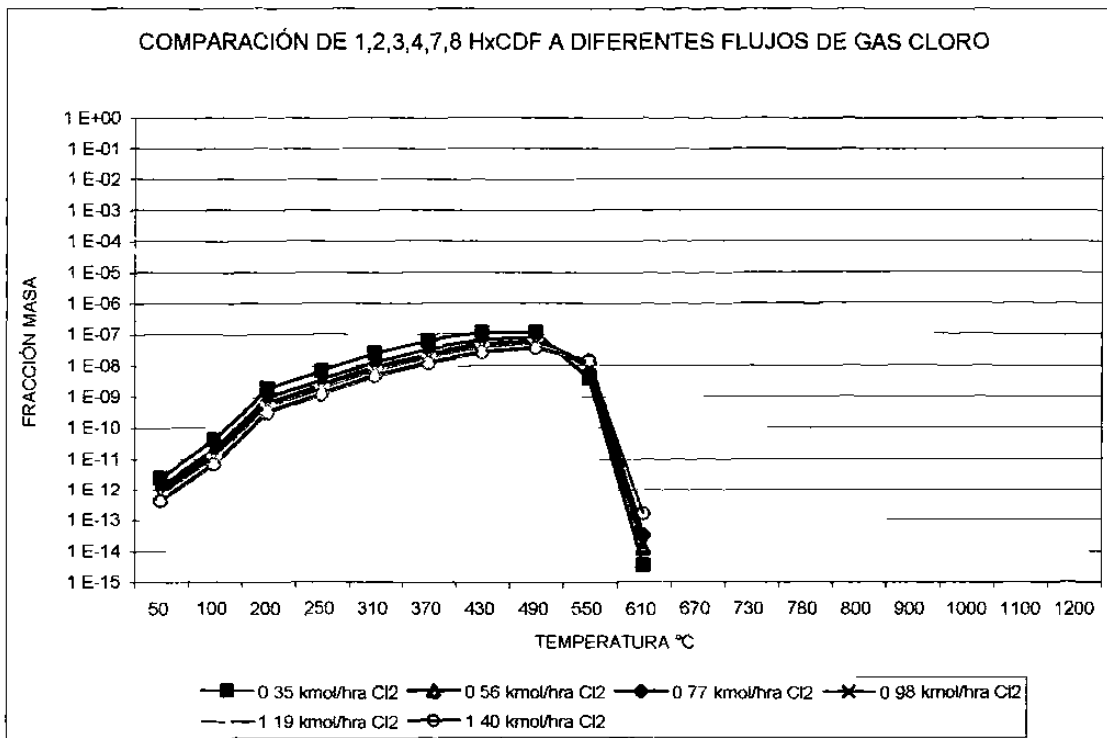


Figura 11. Resultados de la simulación del 1,2,3,4,7,8 HexaCDF a diferentes temperaturas y flujo de gas Cloro.

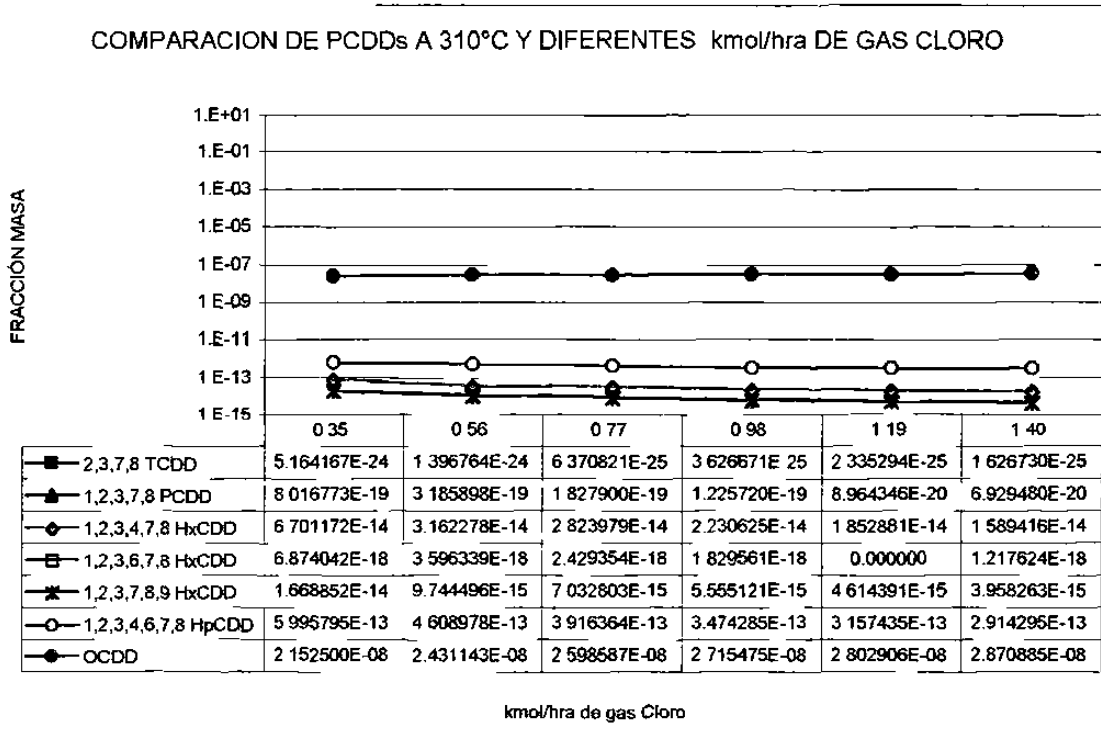


Figura 12. Resultados de la simulación de los PCDDs (7 compuestos toxicos) a 310°C y diferentes flujos de gas Cloro

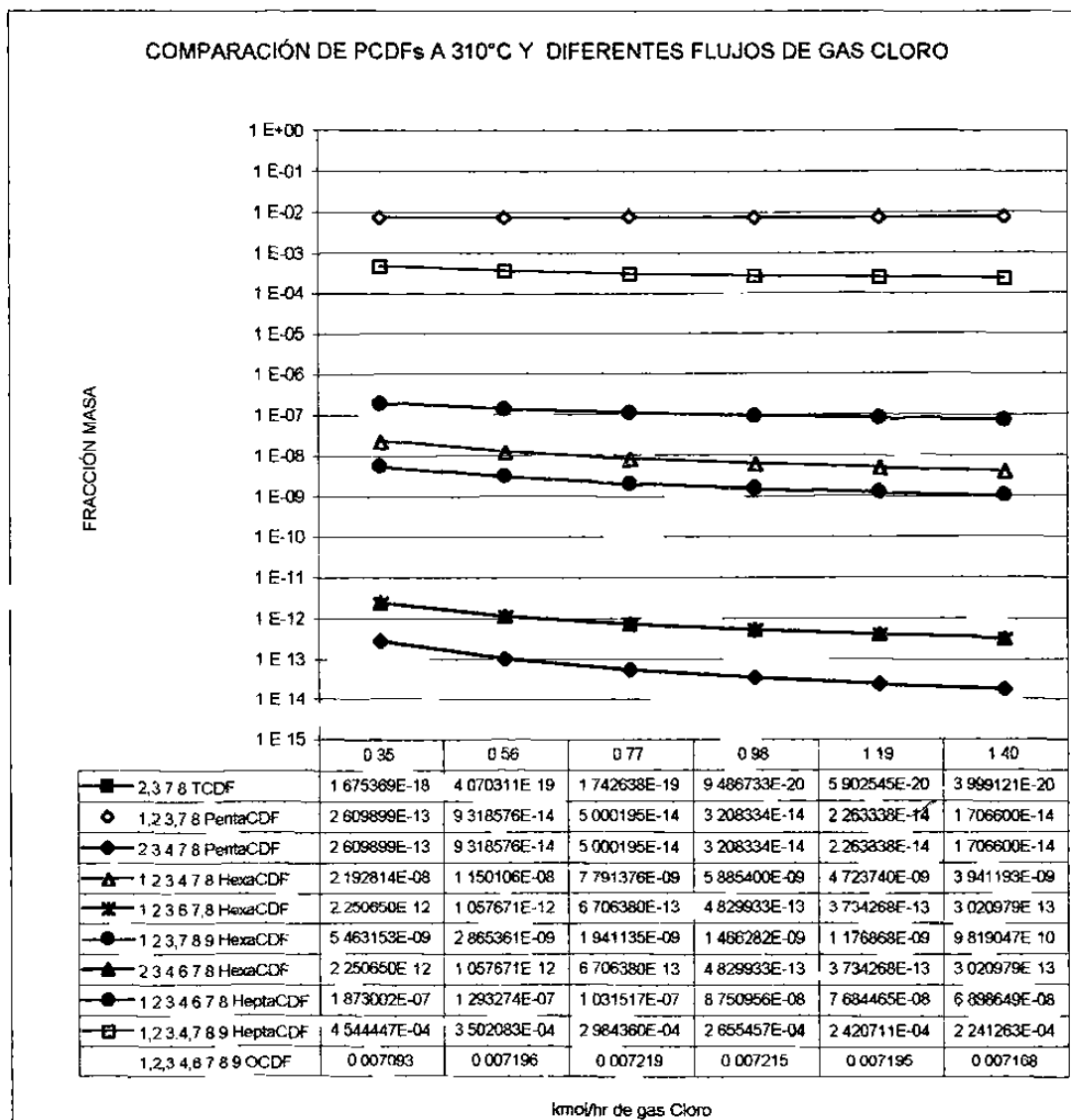


Figura 13. Resultados de la simulación de los PCDFs (10 compuestos tóxicos) a 310°C y diferentes flujos de gas Cloro.

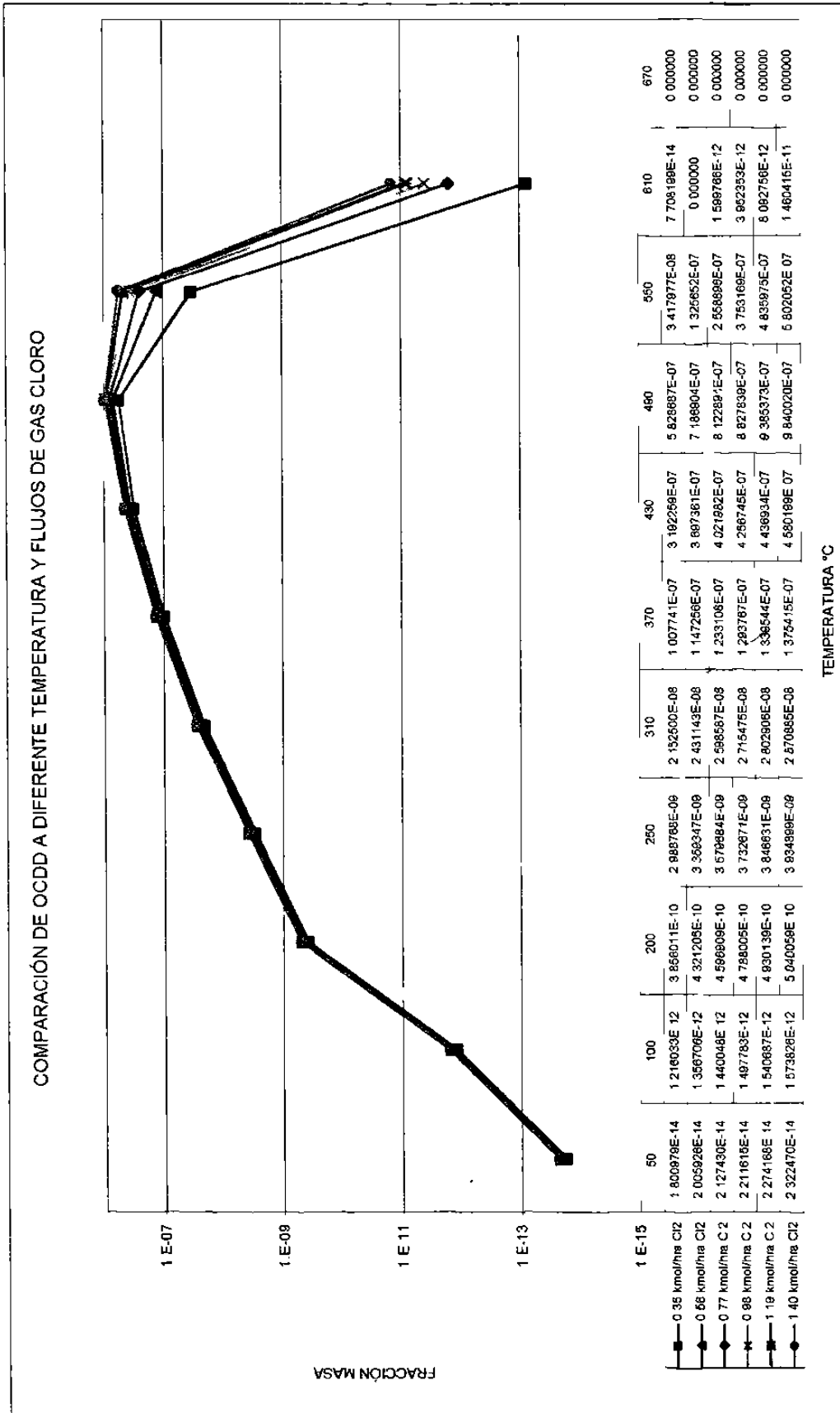


Figura 14. Resultados de la simulación de los OCDDs a diferentes temperaturas y flujos de gas Cloro.

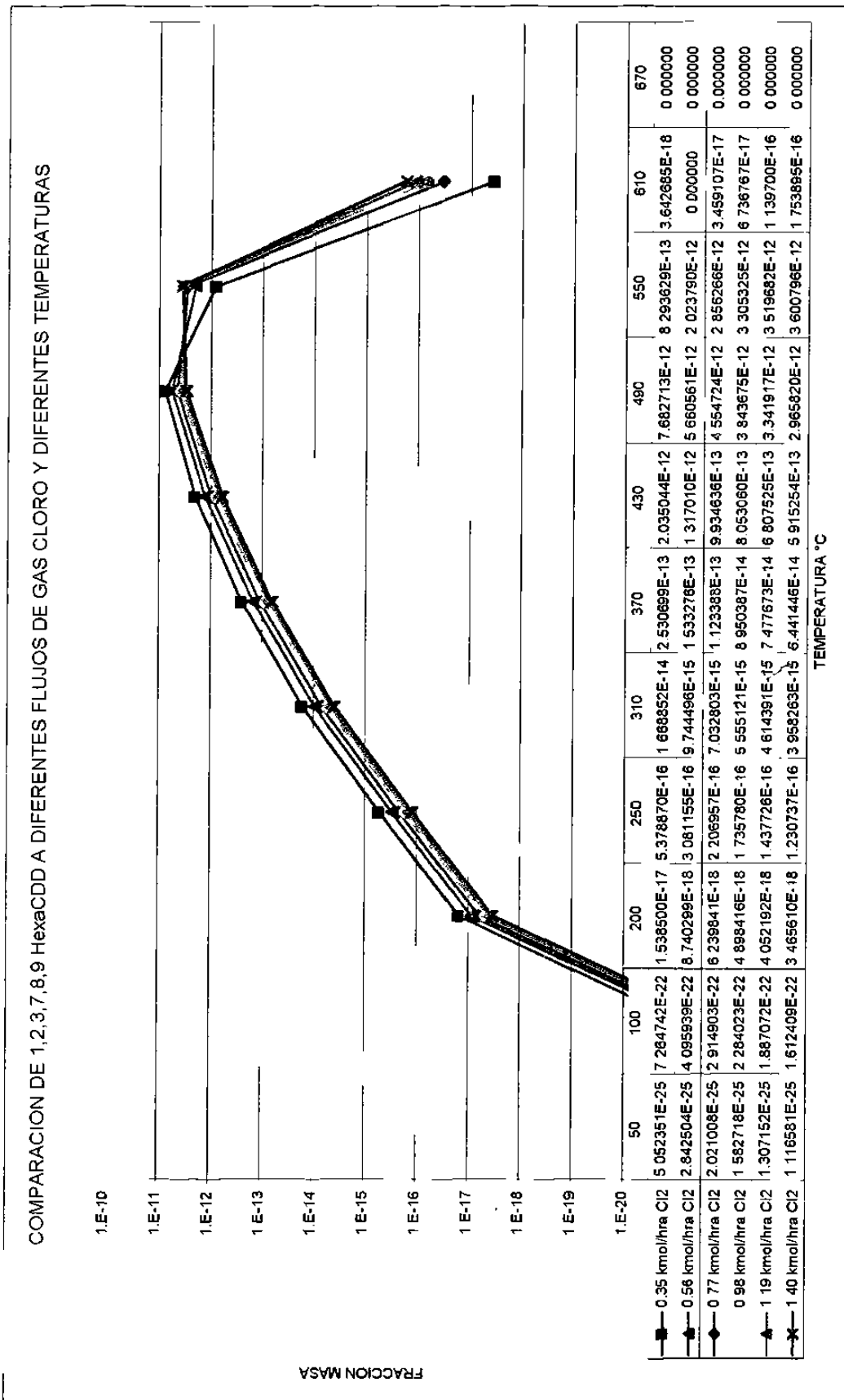


Figura 15 Resultados de la simulación de los 1,2,3,7,8,9 HexaCDD a diferentes temperaturas y flujos de gas Cloro.

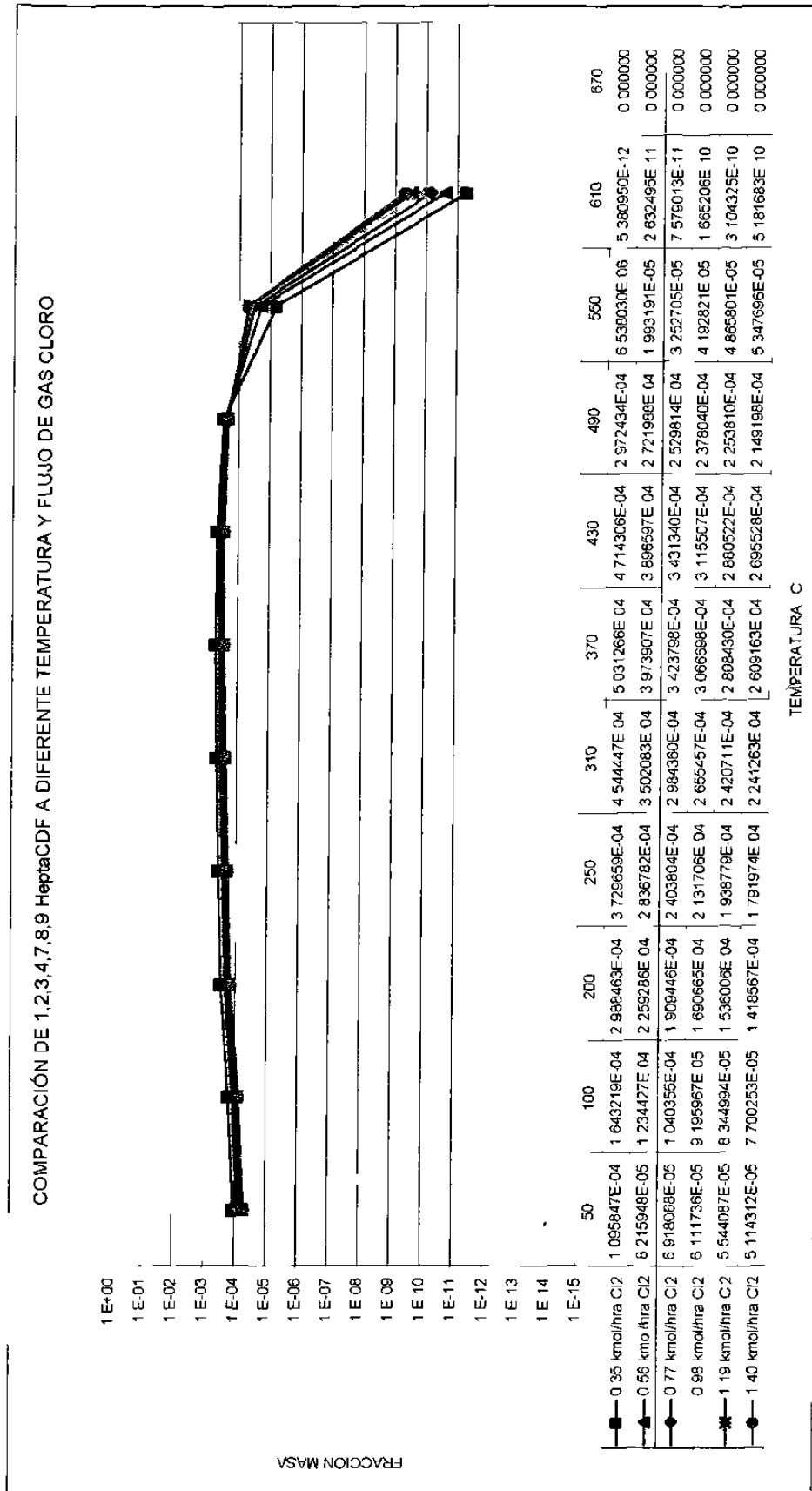


Figura 16. Resultados de la simulación de los 1,2,3,4,7,8,9 HeptaCDF a diferentes temperaturas y flujos de gas Cloro.

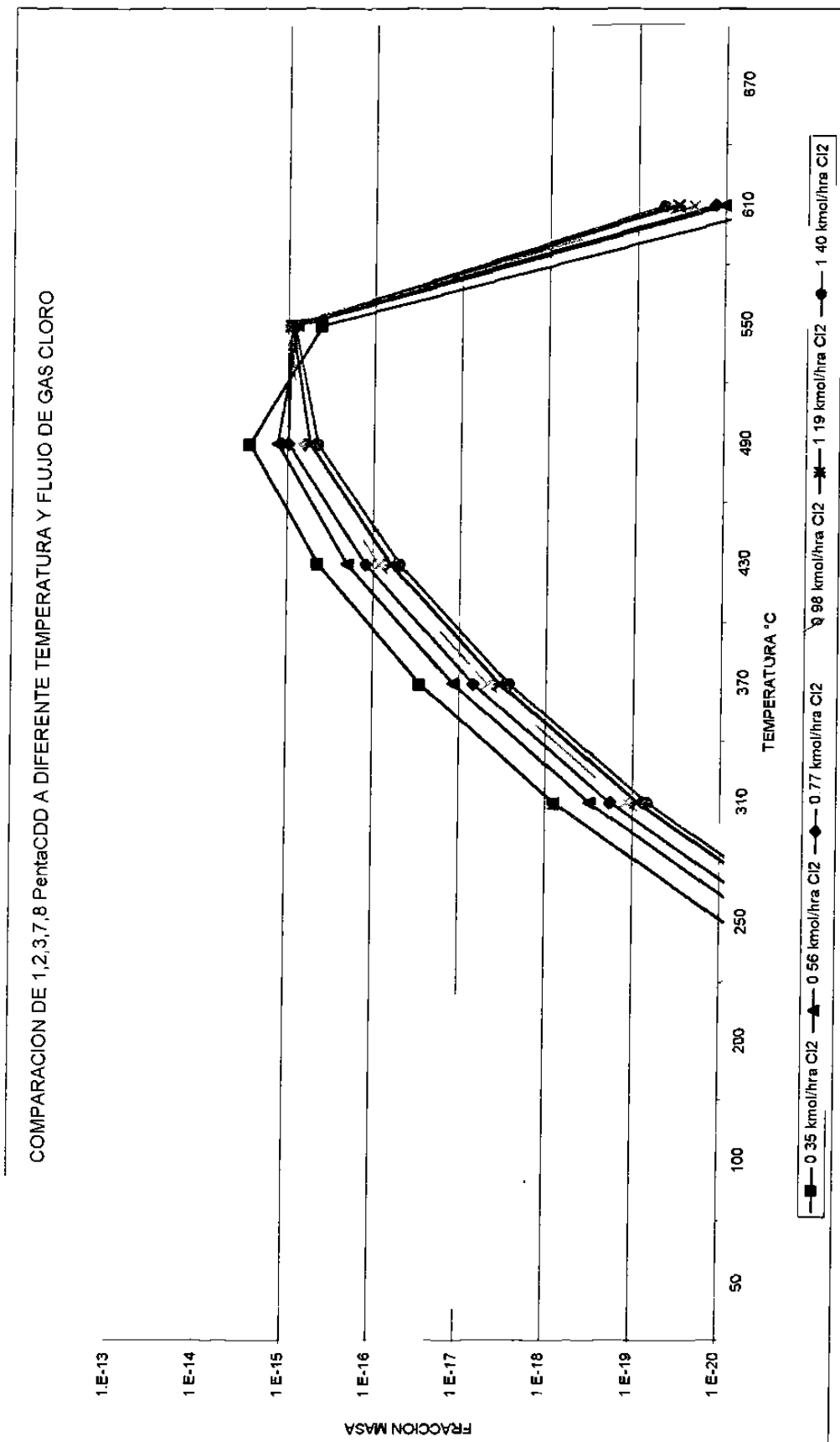


Figura 17. Resultados de la simulación de los 1,2,3,7,8 PentaCDD a diferentes temperaturas y flujos de gas Cloro.

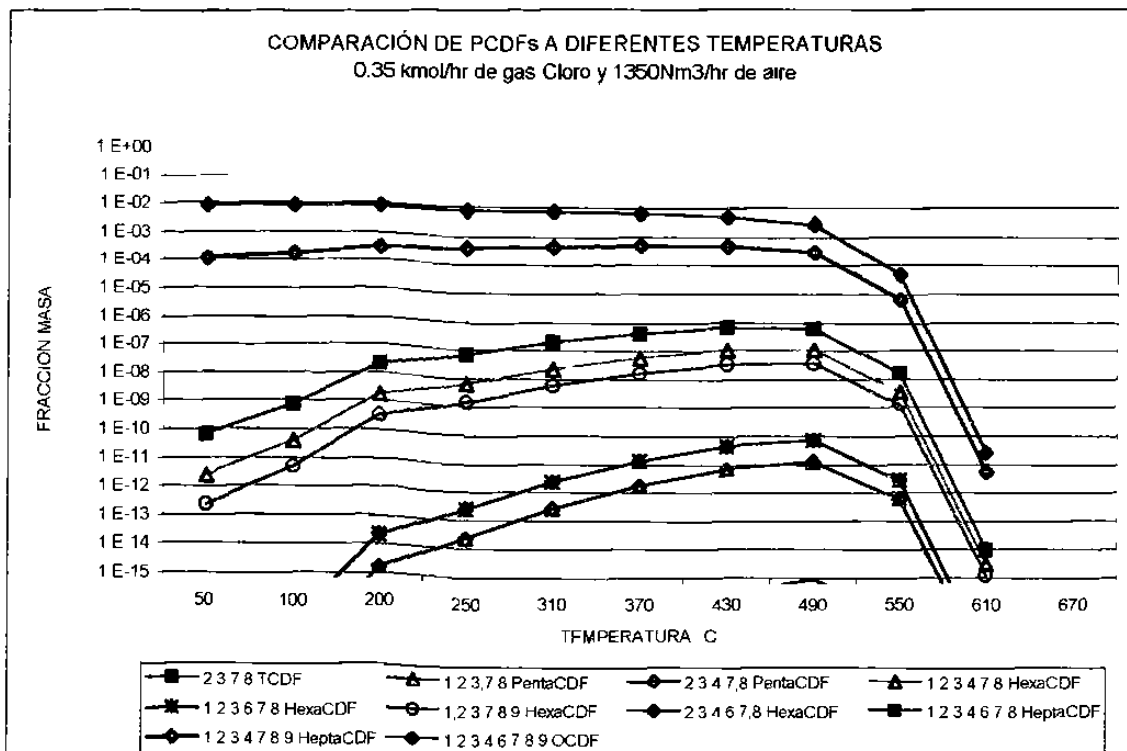


Figura 18. Resultados de la simulación de los PCDFs(10 compuestos tóxicos) a 1,350Nm³/hr de aire, 0.35 kmol/hr de gas Cloro y diferentes temperaturas.

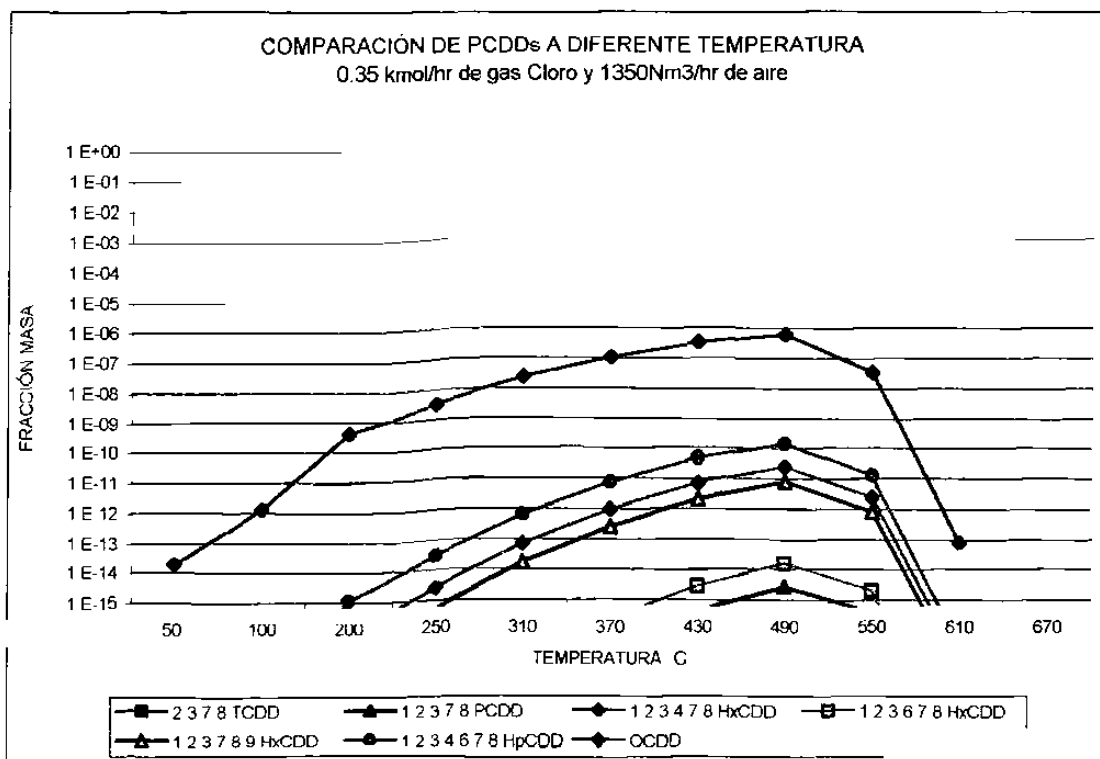


Figura 19. Resultados de la simulación de los PCDDs(7 compuestos tóxicos) a 1,350Nm³/hr de aire, 0.35 kmol/hr de gas Cloro y diferentes temperaturas.

ANEXO E

Cálculo del porcentaje en exceso de aire del sistema analizado

ANEXO E
CÁLCULO DEL PORCENTAJE EN EXCESO DE AIRE DEL SISTEMA ANALIZADO

$$10.3067704 \text{ C} + 23.528 \text{ H}_2 + 44.1415 \text{ O}_2 = 10.30677 \text{ CO}_2 + 23.528 \text{ H}_2\text{O}$$

$$\text{teórico } \text{O}_2 = 44.1415 \text{ kmol de } \text{N}_2 = 146 \quad \text{aire teórico} = 190.265262$$

$$\text{alimentado } \text{O}_2 = 88.4688$$

$$\text{aire alm. } 98.74 \text{ kmol de aire}$$

AIRE EN EXCESO = AIRE ALIM-AIRE TEORICO/AIRE TEORICO

%aire		
exceso	=	97.7418
%aire		
exceso	=	97.7418

%peso aire

N_2 76.8

O_2 23.2

$$44141.5 \text{ mol } \text{O}_2 = 210113.7 \text{ mol aire} = 210.11373 \text{ kmol aire}$$

$$\text{mol } \text{O}_2 = 4.76 \text{ mol de aire}$$

GLOSARIO

PCDDs: Dibenzodioxinas policloradas.

PCDFs: Dibenzofuranos policlorados.

PCDD/Fs: Dibenzodioxinas/furanos policloradas.

Organoclorados: Compuestos que en su estructura contienen átomos de carbono y cloro.

HEA: Horno eléctrico de arco.

ng: Nanogramos (10^{-9} gramos).

I-TEQ: Cantidad de toxicidad equivalente internacional.

TEF: Factor de toxicidad equivalente.

Nm³: Metros cúbicos normales (medidos a 25°C y 1 atmósfera de presión).

USEPA: De las siglas en inglés de Agencia de Protección Ambiental de los Estados Unidos de Norte América.

TCDD: Compuestos Di bencénicos, con dos átomos de oxígeno y cuatro átomos de cloro en su estructura.

Penta-CDD: Compuestos Di bencénicos, con dos átomos de oxígeno y cinco átomos de cloro en su estructura.

Hexa-CDF, HexaCDD: Compuestos Di bencénicos, con uno ó dos átomos de oxígeno, respectivamente y seis átomos de cloro en su estructura.

Hepta-CDF, Hepta-CDD: Compuestos Di bencénicos, con uno ó dos átomos de oxígeno, respectivamente y siete átomos de cloro en su estructura.

OCDF, OCDD: Compuestos Di bencénicos, con uno ó dos átomos de oxígeno, respectivamente y ocho átomos de cloro en su estructura.

CG/DM: Cromatografía de Gases con detector de masas.

G^{\ddagger} : Energía Libre de Gibbs Total

ε_e : Coordenada de reacción de equilibrio.

RESÚMEN AUTOBIOGRÁFICO

María de Lourdes Espino Zúñiga

Candidato para el Grado de Maestro en Ciencias de la Ingeniería Mecánica con Especialidad en Materiales.

Tesis: Estudio termodinámico de la formación de dioxinas (PCDD/Fs) en la etapa de sinterización del proceso HY-RECOVERY

María de Lourdes Espino Zúñiga nació en Monterrey, Nuevo León, México, el 10 de Septiembre de 1977. Es hija del Sr. Francisco Espino Martínez y de la Sra. Mónica Zúñiga Torres. En Agosto de 1994 inicia sus estudios de Licenciatura con apoyo de la Fundación Martínez Sada. En Septiembre de 1999 recibió el título de Ingeniero Mecánico Administrador en la Facultad de Ingeniería Mecánica y Eléctrica de la Universidad Autónoma de Nuevo León, con Mención Honorífica. En Septiembre del mismo año inició sus estudios de Postgrado, becado por el Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT), en la misma Facultad. Participó en el Diplomado sobre Impacto Ambiental organizado por FECIME, la Universidad Autónoma de Nuevo León y el Instituto Tecnológico de Educación Superior de Monterrey.

