

Simulación de un proceso de producción de isopropanol con separación azeotrópica asistida por DIPE

Simulation of an isopropanol production process with DIPE-assisted azeotropic separation

Tanya Alexandra Carchi Tandazo ^{1,*}, Allison Lisbeth Orellana Carreño ², Nixon Joel Rogel Merchan ³, Emily Noemi Sánchez Coronel ⁴ y Marcia Estefania Saraguro Pazhar ⁵

¹ Universidad Técnica de Machala, Ecuador, Machala; <https://orcid.org/0000-0001-6310-4446>

² Universidad Técnica de Machala, Ecuador, Machala; <https://orcid.org/0009-0009-1700-8651>; aorellana15@utmachala.edu.ec

³ Universidad Técnica de Machala, Ecuador, Machala; <https://orcid.org/0009-0006-1596-4277>; nrogel3@utmachala.edu.ec

⁴ Universidad Técnica de Machala, Ecuador, Machala; <https://orcid.org/0009-0001-2174-8267>; esanchez11@utmachala.edu.ec

⁵ Universidad Técnica de Machala, Ecuador, Machala; <https://orcid.org/0009-0009-3281-2330>; msaraguro3@utmachala.edu.ec

Cita: Carchi Tandazo, T. A., Orellana Carreño, A. L., Rogel Merchan, N. J., Sánchez Coronel, E. N., & Saraguro Pazhar, M. E. (2026). Simulación de un proceso de producción de isopropanol con separación azeotrópica asistida por DIPE. *Horizon Nexus Journal*, 4(1), 46-63. <https://doi.org/10.70881/hnj/v4/n1/97>

Recibido: 15/12/2025

Revisado: 19/01/2026

Aceptado: 21/01/2026

Publicado: 23/01/2026



Copyright: © 2026 por los autores. Este artículo es un artículo de acceso abierto distribuido bajo los términos y condiciones de la [Licencia Creative Commons Atribución-NoComercial 4.0 Internacional](https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/). (CC BY-NC).

(<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

* Correspondencia: tacarchi@utmachala.edu.ec

 <https://doi.org/10.70881/hnj/v4/n1/97>

Resumen: Este estudio tuvo como objetivo simular un proceso de producción de isopropanol (IPA) de alta pureza utilizando separación azeotrópica asistida por diisopropil éter (DIPE), el cual es generado in situ. El principal desafío fue superar la limitación del azeótropo binario IPA-Agua, que se forma con una composición máxima de 87,7% de IPA en peso. La simulación se realizó en el software COCO SIMULATOR implementando un reactor de conversión fija con conversiones de 0.75 para la producción de IPA y 0.08 para la formación de DIPE. Se utilizó un modelado riguroso de la destilación de dos columnas chemsep con un modelo termodinámico UNIQUAC, seleccionado para sistemas no ideales. Los resultados confirman que el proceso superó exitosamente la barrera azeotrópica. La corriente de producto final purificado (Corriente IPA) alcanzó una pureza de 0.999999 en fracción másica de isopropanol. Se concluye que esta estrategia de intensificación de procesos, al integrar la generación del agente de arrastre y la separación, es técnicamente viable y eficiente para obtener IPA de grado comercial.

Palabras clave: isopropanol; destilación azeotrópica; DIPE; COCO Simulator

Abstract: This study aimed to simulate a high-purity isopropanol (IPA) production process using azeotropic separation assisted by diisopropyl ether (DIPE), which is generated in situ. The main challenge was to overcome the limitation of the IPA-Water binary azeotrope, which forms at a maximum composition of 87.7% IPA by weight. The simulation was performed in the COCO SIMULATOR software, implementing a fixed conversion reactor with conversions of 0.75 for IPA production and 0.08 for DIPE formation. A rigorous distillation modeling of two ChemSep columns was utilized, employing the UNIQUAC thermodynamic model, selected for non-ideal systems. The results confirm that the process successfully surpassed the

azeotropic barrier. The final purified product stream (Stream IPA) reached a purity of 0.999999 in mass fraction of isopropanol. It is concluded that this process intensification strategy, by integrating the generation of the entrainer and the separation, is technically viable and efficient for obtaining commercial-grade IPA.

Keywords: isopropanol; azeotropic distillation; DIPE; COCO Simulator

1. Introducción

El isopropanol es un compuesto químico orgánico que ha obtenido una gran relevancia ya que es utilizado comúnmente como disolvente y desinfectante, este compuesto también es conocido como alcohol isopropílico, dimetil carbonil o 2-propanol. Este líquido es transparente e incoloro, tiene un olor parecido al del alcohol común - etanol, pero con una evaporación más rápida (Kato et al., 2024). Reconocido como un excelente disolvente e intermediario orgánico, el isopropanol (IPA) posee una amplia gama de usos (Dehmani et al., 2025). Es fundamental en los sectores químico y farmacéutico, y también se incorpora comúnmente en la fabricación de productos de limpieza debido a que su poder esterilizante es similar al del etanol (Geng et al., 2022).

Desde el punto de vista industrial el isopropanol se utiliza para la producción de acetona mediante procesos de deshidrogenación catalítica (Niu & Rangaiah, 2016). Asimismo, es utilizado en la producción de peróxido de hidrógeno, como agente anticongelante en la gasolina y como solvente extractor en el proceso de concentración de proteína de pescado (Chua et al., 2017). Estas aplicaciones, sumadas a sus propiedades desinfectantes, desengrasantes y aclarantes, justifican su uso en productos de cuidado personal y en aplicaciones médicas (Kato et al., 2024).

El propileno o propeno es un hidrocarburo perteneciente a los alquenos, es incoloro e inodoro (Caicedo et al., 2017). Este es utilizado para la obtención de fibras sintéticas para fabricar telas; así mismo es empleado en la medicina para la fabricación de jeringas, envases estériles, etc (Blanco & Catarí, 2023). Por su parte, el propano, un alcano gaseoso obtenido del petróleo o del gas natural, es empleado principalmente como combustible doméstico e industrial, así como en aplicaciones petroquímicas, automotrices y como refrigerante o propelente en aerosoles (Maldonado, 2012).

El diisopropil éter (DIPE) es un subproducto de la producción de isopropanol (IPA) ambos componentes presentan un alto valor añadido, especialmente en la industria de disolventes. Es decir, la separación resulta de gran interés desde el punto de vista económico. Esta separación requiere un método no convencional, ya que presenta la formación de un azeótropo con un punto de ebullición mínimo (Silva et al., 2022).

En el contexto de los procesos de separación, la destilación constituye una de las operaciones unitarias más utilizadas en la industria química para la purificación de mezclas líquidas, basada en las diferencias de volatilidad entre sus componentes (Altay et al., 2025). La destilación simple es un proceso físico en el cual la mezcla se calienta hasta vaporizar preferentemente el componente más volátil, cuyo vapor es posteriormente condensado y recolectado en fase líquida. Esta técnica es efectiva cuando los componentes presentan diferencias en sus puntos de ebullición de al menos 10 °C (Saha & Bhattacharjee, 2019). Su fundamento teórico se basa en el equilibrio líquido-vapor y en la relación entre la presión de vapor y la composición de la mezcla

descrita por la ley de Raoult, lo que favorece la transferencia del componente más volátil hacia la fase vapor (Cesar & Sebastián, 2019).

No obstante, la destilación convencional presenta limitaciones importantes cuando se trata de separar mezclas altamente no ideales que forman azeótropos, es decir, sistemas que hierven a temperatura constante y cuya composición en las fases líquida y vapor es prácticamente idéntica. En estos casos, la destilación simple no permite incrementar la pureza del componente de interés, lo que hace necesaria la aplicación de técnicas de separación avanzadas, como la destilación azeotrópica (Cui et al., 2019).

La destilación azeotrópica consiste en la adición de un agente de arrastre que modifica el equilibrio vapor-líquido del sistema, permitiendo el rompimiento del azeótropo y facilitando la separación de los componentes. Un caso representativo es la mezcla isopropanol-agua, la cual forma un azeótropo a aproximadamente 80,4 °C con una concentración cercana al 87,7 % en peso de isopropanol, lo que justifica el uso de destilación azeotrópica en procesos industriales para alcanzar mayores niveles de pureza (Castillo Cevallos, 2023; Zhao et al., 2017).

En este contexto, la simulación de procesos mediante el uso de COCO Simulator constituye una herramienta fundamental en el análisis y diseño del proceso de producción de isopropanol con separación azeotrópica asistida por DIPE, ya que permite reproducir de forma confiable el comportamiento termodinámico y operativo del sistema sin incurrir en elevados costos experimentales (Tangsathitkulchai et al., 2019). A través de la simulación, es posible evaluar el equilibrio vapor-líquido del sistema agua-isopropanol-DIPE, analizar la formación de azeótropos, optimizar las condiciones de operación de las columnas de destilación y estimar parámetros clave como pureza del producto, consumo energético y recuperación del entrainer. Además, COCO Simulator facilita la comparación de distintos esquemas de separación y la validación de modelos termodinámicos apropiados, aportando una base técnica sólida para la toma de decisiones en el diseño y escalamiento del proceso, así como para la mejora de su eficiencia y sostenibilidad industrial (De Sousa et al., 2025).

En base a lo anterior mencionado, el objetivo de la presente investigación es evaluar el desempeño de la destilación simple y la destilación azeotrópica asistida por diisopropil éter (DIPE) en la separación y purificación de isopropanol, mediante la simulación del equilibrio vapor-líquido y el análisis de parámetros operativos clave, con el fin de optimizar la eficiencia del proceso y su viabilidad industrial.

2. Materiales y Métodos

Para la simulación del proceso de producción de isopropanol se tomó como referencia el estudio desarrollado por (Xu et al., 2002) con algunas modificaciones. La modelación se llevó a cabo utilizando el entorno de simulación de procesos químicos COCO Simulator (CAPE-Open to CAPE-Open), versión 3.4, un software gratuito y de código abierto que implementa el estándar CAPE-Open permitiendo la integración de reactores, destiladores, bombas, válvulas, entre otras herramientas útiles para la interoperabilidad entre diferentes herramientas de modelado y ofreciendo robustez en el cálculo de operaciones unitarias complejas.

El sistema termodinámico se configuró considerando las fuertes desviaciones de la idealidad presentes en la mezcla de IPA, agua y DIPE. Se seleccionó el método Gamma-Phi para el cálculo de los valores K, combinando coeficientes de actividad para la fase líquida; para la columna de destilación simple se hizo uso de UNIFAC, así como lo indica en la Figura 1 y para la destilación azeotrópica se utilizó UNIQUAC, como está indicada en la Figura 2.

En la Tabla 1 se describe los equipos utilizados para la simulación del proceso de producción de isopropanol (IPA). Así mismo se detallarán los parámetros de ingreso de los alimentos uno en la Tabla 2 y el alimento dos en la Tabla 3.

Tabla 1. Equipos utilizados en la simulación

Equipos	Cantidades
Heater cooler/Calentador y enfriador	7
Pump/Bomba	4
Mixer /Mezclador	1
Splitter	1
Fixed Conversion Reactor/Reactor de conversión fija	1
Separator flash/Separador flash	1

Para la destilación simple, la ecuación de estado (EOS) se seleccionó Peng-Robinson, mientras que el modelo predijo la presión de vapor que fue Antonie. El modelo permitió predecir el comportamiento entrópico fue None, así como lo indica la Figura 1. En la tabla 4 se puede observar los parámetros a utilizar para esta destilación. Mientras que para la destilación azeotrópica para la ecuación de estado (EOS) fue Soave-RK, de la misma manera el modelo predijo la presión de vapor que fue Antonie. El modelo permitió predecir el comportamiento entrópico fue Excess, así como está indicado en la Figura 2. En la Tabla 5 se puede observar los parámetros a utilizar en esta destilación azeotrópica.

Tabla 2. Parámetros del alimento 1

Parámetros	Cantidad	Unidad
Presión	1.05	bar
Temperatura	-46.7	°C
Fracción másica de Propileno	0.95	
Fracción másica de Propano	0.05	
Fracción másica de Agua	0	
Fracción másica de Isopropanol	0	
Fracción másica de Diisopropyl ether	0	
Caudal	4.6862383	Kg/s

Tabla 3. Parámetros del alimento 2

Parámetros	Cantidad	Unidad
Presión	1	bar
Temperatura	30	°C
Fracción másica de Propileno	0	
Fracción másica de Propano	0	
Fracción másica de Agua	1	
Fracción másica de Isopropanol	0	
Fracción másica de Diisopropyl ether	0	
Caudal	1,9016129	Kg/s

Figura 1. Propiedades termodinámicas en columna de destilación simple

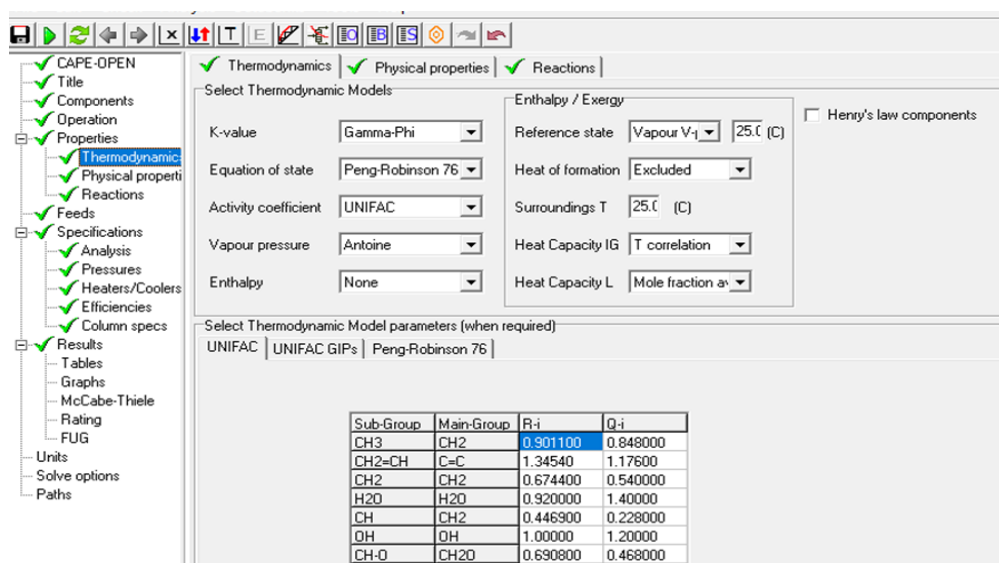


Tabla 4. Parámetros en la destilación simple

Parámetros	Cantidad	Unidad
Presión del condensador	101325	N/m2
Presión máxima	101325	N/m2
Fracción molar del isopropanol	0.999900	NA
Relación de flujo	5	NA
Número de etapas	25	platos
Etapas de alimentación	12	plato

Figura 2. Propiedades termodinámicas en columna de destilación azeotrópica

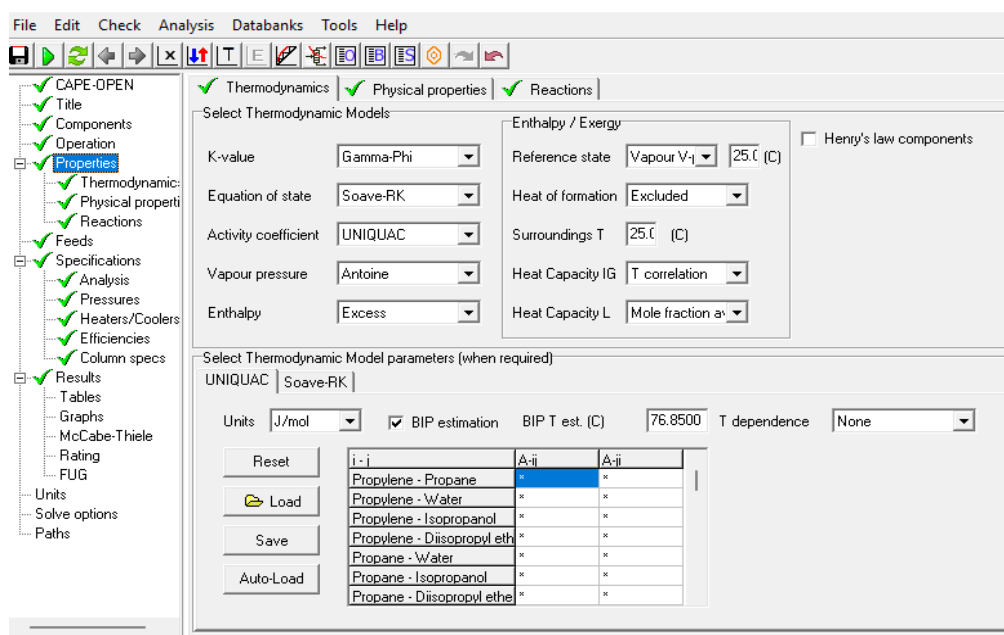
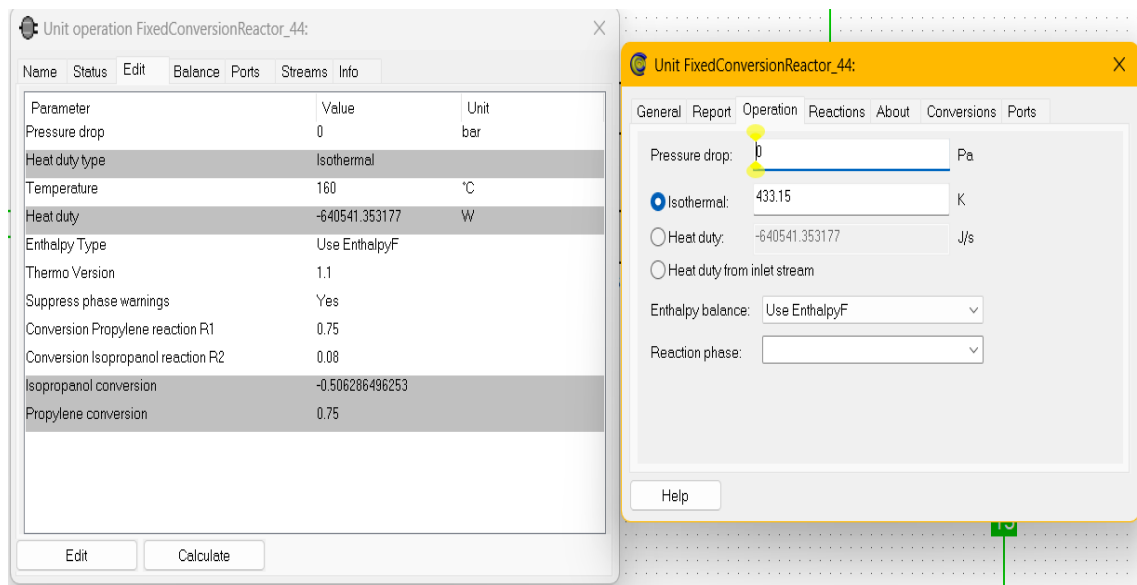


Tabla 5. Parámetros de la columna de destilación azeotrópica

Parámetros	Cantidad	Unidad
Presión del condensador	2.00000	bar
Presión máxima	2.00000	bar
Recuperación de isopropanol	0.99900	
Caudal de reflujo	8.00000	kmol/s
Caída de presión	0.00200	bar
Número de etapas	25	
Plato de alimentación	12	

A continuación, en la Figura 3 se indican y detallan las condiciones con la que trabaja el reactor de conversión fija, así mismo, en la tabla 6 se indican los parámetros de dicho reactor.

Figura 3. Parámetros de operación del reactor de conversión en el simulador COCO SIMULATOR**Tabla 6.** Parámetros del reactor de conversión fija

Parámetros	Cantidad	Unidad
Presión de entrada al reactor	20.135	bar
Temperatura de entrada al reactor	31.1	°C
Especificaciones de operación del reactor		
Parámetros	Cantidad	Unidad
Temperatura	160	°C
CH₃CH = CH₂ + H₂O ⇌ (CH₃)₂CHOH Propileno + agua → isopropanol (IPA)		R1
Conversión del propileno reacción (R1)	0.75	
2(CH₃)₂CHOH ⇌ H₂O + [(CH₃)₂CH]₂O 2 IPA → agua + DIPE (éter diisopropílico)		R2
Conversión del isopropanol reacción (R2)	0.08	
Constantes de equilibrio para R1	0.00132	(m ³ /mol)
Constantes de equilibrio para R2	75500	(m ³ /mol)

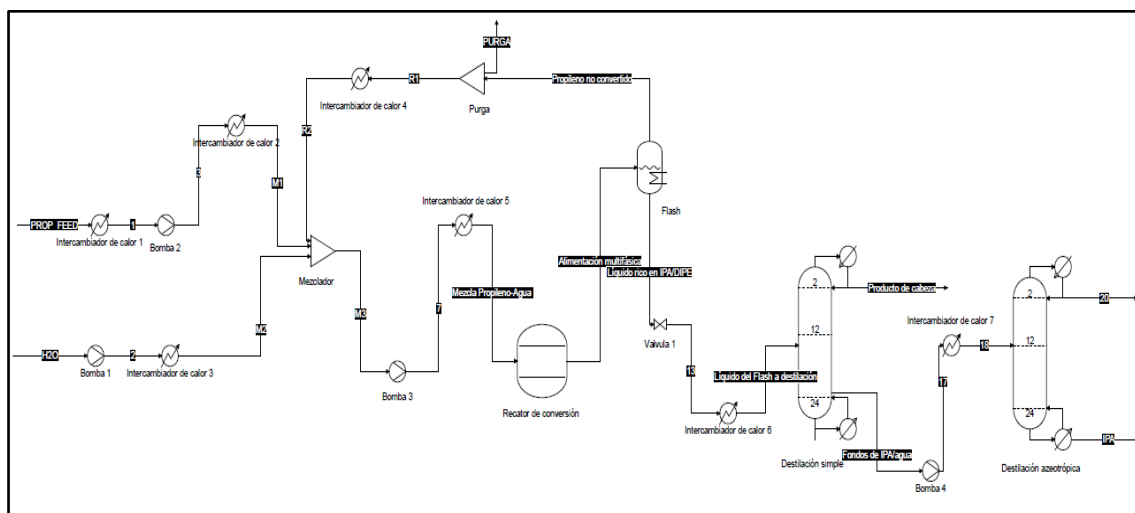
Las constantes de equilibrio para las reacciones de hidratación de propileno a isopropanol (IPA) y de deshidratación de IPA a diisopropil éter (DIPE) se calcularon utilizando datos termodinámicos estándar del NIST Chemistry WebBook. En la tabla 7, se muestran las condiciones de operación usadas en la columna separadora flash.

Tabla 7. Parámetros de la columna Flash

Parámetros	Cantidad	Unidad
Presión de entrada a la columna	20.135	bar
Temperatura de entrada a la columna	160	°C
Temperatura de operación de la columna	160	°C
Presión de operación de la columna	20.135	bar

3. Resultados

La simulación completa del proceso de producción de isopropanol con separación azeotrópica asistida por DIPE en el Simulador de código abierto COCO SIMULATOR, se presenta en la Figura 4.

Figura 4. Simulación del proceso de obtención de IPA

La corriente de alimentación a la columna de destilación simple, denominada "Líquido del Flash a destilación", presenta una composición rica en IPA (82.7% en masa) y contiene una cantidad significativa de DIPE (10.5% en masa) que fue generado *in situ* en el reactor. Esta columna, operando a una presión de 7 bar y una temperatura de fondo de 383.15 K, realiza una separación preliminar clave. Dado que su función principal es retirar la mayor parte de los componentes volátiles ligeros (propileno y propano) y una porción del DIPE, concentrando el IPA en la corriente de fondos.

Los resultados indican que la columna logra una eficiencia de separación notable. La corriente de fondos ("Fondos de IPA/agua"), con un flujo de 8413.19 kg/h, alcanza una pureza de IPA del 99.997% en masa, reduciendo el contenido de DIPE a niveles traza (2.7E-11 % en masa) y dejando un contenido de agua residual de aproximadamente 300 ppm.

La alta presión de operación de esta etapa (7 bar) eleva la temperatura de ebullición de la mezcla logrando facilitar la condensación de los componentes más pesados (IPA y agua) y permitiendo una eficaz separación de los volátiles, los cuales son dirigidos a la

corriente de cabeza. El punto de rocío de esta corriente líquida es de 355.219 K, que es prácticamente idéntico a su temperatura (355.218 K), confirmando que se trata de un líquido saturado.

La corriente de fondos de la destilación simple se dirige a la columna de destilación azeotrópica, la cual opera a una presión cercana a la atmosférica (1.01325 bar), esta etapa es necesaria para romper el azeótropo residual agua-IPA y alcanzar la pureza especificada del producto final. Debido que el mecanismo de separación se basa en la presencia de DIPE, el cual forma azeótropos de baja temperatura de ebullición con el agua (azeótropo binario a 335,35 K) y con la mezcla IPA-agua (azeótropo ternario a 334,75 K (ver TABLA 8).

El comportamiento termodinámico del sistema agua–isopropanol–diisopropil éter está fuertemente influenciado por la formación de azeótropos binarios y ternarios, los cuales determinan las condiciones de operación y la viabilidad de la separación azeotrópica. En particular, la presencia de DIPE genera azeótropos de menor temperatura de ebullición en comparación con el azeótropo binario agua–IPA, lo que modifica la volatilidad relativa de los componentes y permite la ruptura de la barrera azeotrópica impuesta por la destilación convencional (Xu et al., 2002).

Tabla 8. Azeótropos del sistema agua–IPA–DIPE

Compuesto o azeótropo	Temperatura de ebullición del azeótropo (K)	Agua, % en peso	IPA, % en peso	DIPE, % en peso
Propeno	225.43	–	–	–
Agua	373.13	–	–	–
IPA	355.65	–	–	–
DIPE	342.15	–	–	–
Agua + IPA	353.45	12.6	83.7	0
IPA + DIPE	339.35	0	16.3	83.7
Agua + DIPE	335.35	4.5	0	95.5
Agua + IPA + DIPE	334.75	4.7	7.3	88.0

Nota. Adaptado de “Design of a Process for Production of Isopropyl Alcohol by Hydration of Propylene in a Catalytic Distillation Column”, por Y. Xu, K. T. Chuang y A. R. Sanger,

2002, *Transactions of the Institution of Chemical Engineers*, 80(A), 686–694. <https://doi.org/10.1205/026387602760312908>

Por otra parte, la corriente de cabeza de la columna azeotrópica (20) presenta un punto de rocío de 372.409 K a 2 bar, consistente con una composición de 97.19% IPA y 2.81% agua. Este valor elevado se debe a que el agua, al comportarse como componente menos volátil en la mezcla, controla el punto de rocío. La corriente de fondos (IPA) alcanza una pureza del 99.9999% en masa (1 ppm de agua) con un punto de rocío de 374.129 K, próximo a su temperatura de 374.128 K, indicando que es un líquido saturado de alta pureza.

Para validar el comportamiento termodinámico del proceso, las temperaturas clave de las corrientes fueron comparadas con los datos de los azeótropos del sistema agua-IPA-DIPE reportados en la literatura (ver TABLA 1), la corriente de fondos de la columna azeotrópica se obtuvo a 355,218 dicho valor se aproxima al punto de ebullición del IPA puro (355.65 K a 1 atm). La variación de 0.43 K es atribuible a la presencia de trazas de agua (≈ 300 ppm) en el producto, lo cual es consistente con los modelos de equilibrio líquido-vapor para mezclas diluidas.

La Tabla 9 resume los principales resultados termodinámicos y composicionales de las corrientes clave del proceso simulado de producción de isopropanol. Se observa que la columna de destilación simple cumple eficazmente su función de separación preliminar, concentrando el isopropanol en los fondos con una pureza del 99,997 % en masa, mientras que la corriente de cabeza presenta una composición intermedia característica de un sistema influenciado por azeótropos binarios.

Posteriormente, la columna de destilación azeotrópica permite superar la limitación impuesta por el azeótropo agua-IPA, alcanzando en la corriente de fondos una pureza de isopropanol del 99,9999 % en masa, lo que confirma la efectividad del DIPE como agente entrainer. Asimismo, los valores de temperatura y punto de rocío prácticamente coincidentes en las corrientes de alta pureza indican la obtención de líquidos saturados, evidenciando un comportamiento termodinámico coherente con los equilibrios vapor-líquido esperados y validando la estabilidad y consistencia del modelo de simulación.

Tabla 9. Datos de simulación del proceso de producción de IPA

Corriente / Azeótropo	Presión (bar)	Temperatura (K)	Punto de Rocío (K)	Composición Principal (% masa)	Observaciones
1. Líquido del Flash a destilación	7.0	383.15	408.88	IPA: 82.7%, DIPE: 10.5%, Agua: 2.7%	Líquido subenfriado a alta presión
2. Fondos de IPA/agua (Simple)	1.013	355.218	355.219	IPA: 99.997%, Agua: 0.03%	Prácticamente IPA puro
3. Producto de cabeza (Simple)	1.013	274.538 (líq. subenf.)	349.296 (vapor)	IPA: 72.3%, DIPE: 16.9%, Agua: 4.1%	Punto de rocío entre azeótropos binarios

4. IPA (Fondos Azeotrópica)	2.046	374.128	374.129	IPA: 99.9999%, Agua: 0.001%	IPA puro a P elevada
5. Corriente 20 (Cabeza Azeotrópica)	2.0	372.025	372.409	IPA: 97.19%, Agua: 2.81%	Punto de rocío controlado por agua residual

La Tabla 10 presenta la evolución de las condiciones operativas, caudales y composiciones másicas de las principales corrientes del sistema de producción de isopropanol a lo largo del proceso simulado. Los resultados evidencian una transformación progresiva de la alimentación rica en propileno y propano hacia una corriente final altamente purificada de isopropanol, lo que confirma la eficiencia global del esquema propuesto. En el reactor de conversión fija (R2), una fracción significativa del propileno es transformada en isopropanol, generándose simultáneamente diisopropil éter (DIPE) como subproducto, el cual desempeña un papel clave en las etapas posteriores de separación. La corriente proveniente del separador flash y alimentada a la destilación simple presenta ya una composición elevada de IPA ($\approx 82,7$ % en masa), lo que permite una concentración efectiva del producto en los fondos de esta columna, donde se alcanza una pureza cercana al 99,9 % en masa. Posteriormente, la destilación azeotrópica elimina las trazas residuales de agua, permitiendo obtener una corriente final de IPA con una fracción másica superior al 99,999 %, mientras que el DIPE se recupera mayoritariamente en la corriente de cabeza, facilitando su reciclaje dentro del proceso. La distribución de caudales y composiciones confirma que la integración del reactor con las columnas de destilación logra una separación selectiva y eficiente, coherente con el comportamiento termodinámico esperado para sistemas azeotrópicos multicomponentes.

Tabla 10. Composición de corrientes en el sistema de producción de IPA

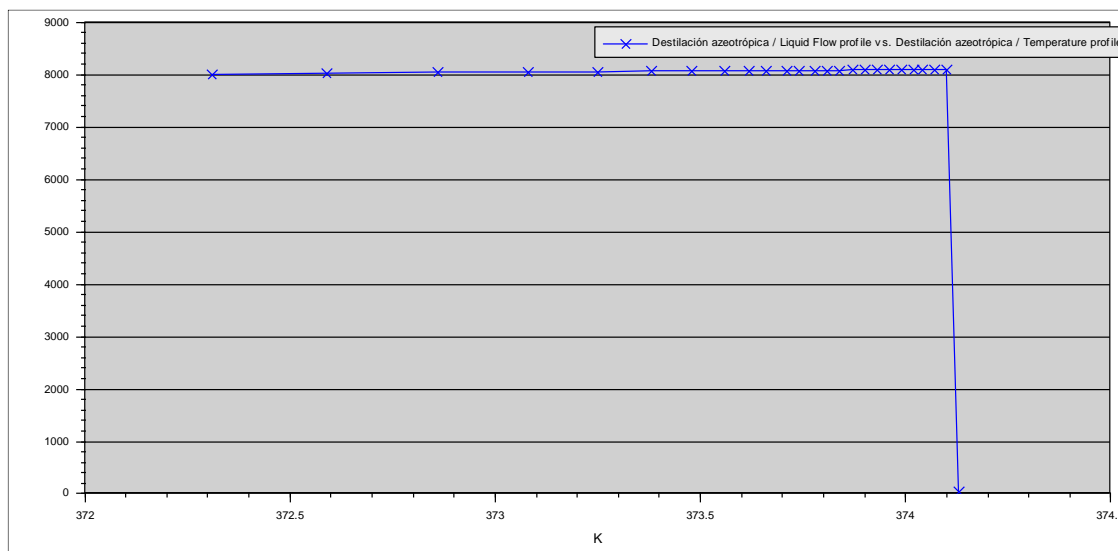
Corriente	PROP_F EED	H2O	R2	Líquido del Flash a destilación	Fondos de IPA/Agua	Producto de cabeza	IPA	20	Unidad
Presión	1.05	1	20.135	7	1.01325	1.01325	2.046	2	bar
Temperatura	228.45	303.15	298.05	383.15	355.218	274.537	374.128	372.025	K
Caudal másico	16870.5	6845.81	6831.47	22362.4	8413.45	13498.8	8404.79	8.85638	kg/h
Fracción másica de Propileno	0.95	0	0.0725467	0.014332	0	0.0215338	0	0	—
Fracción másica de Propano	0.05	0	0.156119	0.0286888	0	0.0453194	0	0	—
Fracción másica de Agua	0	1	0.0280012	0.0257811	2.99801e-05	0.0412811	1.07629e-06	0.0280937	—

Fracción másica de Isopropanol	0	0	0.573806	0.827176	0.99897	0.722354	0.999999	0.971908	—
Fracción másica de Éter diisopropílico (DIPE)	0	0	0.171416	0.105362	2.71559e-11	0.188912	0	2.63973e-08	—
Flujo de Propileno	16028.9	0	4810.91	300.371	0	300.371	0	0	kg/h
Flujo de Propano	843.523	0	10353	632.159	0	632.159	0	0	kg/h
Flujo de Agua	0	6845.81	1725.02	678.080	0.252236	576.828	0.00040598	0.24319	kg/h
Flujo de Isopropanol	0	0	38058.4	18487.6	8413.19	10084.8	8404.78	8.41319	kg/h
Flujo de Éter diisopropílico (DIPE)	0	0	11387.4	2356.14	0	2356.14	0	2.28506e-07	kg/h

La Figura 5 muestra el comportamiento del flujo líquido descendente dentro de la columna de destilación azeotrópica y su relación con la temperatura de operación por etapas. En prácticamente toda la columna, el flujo líquido se mantiene constante, con un valor cercano a las 8000 mol/s, lo que nos indica una operación estable y, sin variaciones significativas en las zonas de rectificación y agotamiento. Este comportamiento homogéneo es característico de los sistemas azeotrópicos, donde la presencia del azeótropo IPA-agua y el DIPE generado in situ produce composiciones líquidas relativamente uniformes entre las etapas.

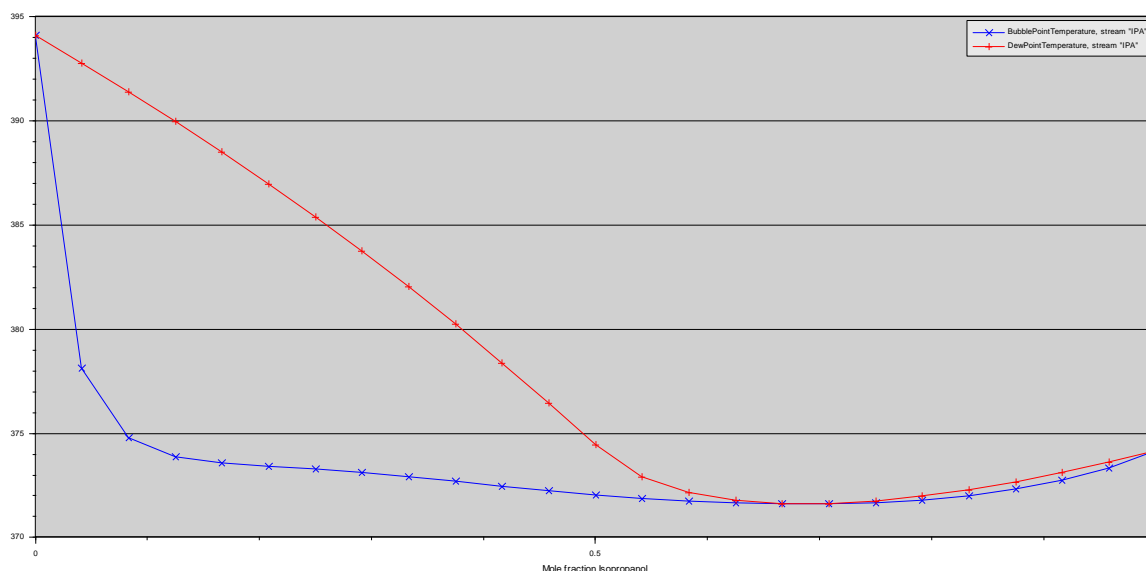
La temperatura del sistema se mantiene dentro de un rango muy estrecho, entre 372 K y 374 K (ver TABLA 1), lo que confirma que la columna opera en condiciones típicas de una separación azeotrópica, donde los equilibrios líquido-vapor varían poco entre etapas, este perfil prácticamente plano de temperatura refuerza la estabilidad del proceso y la presencia del azeótropo IPA-agua-DIPE.

Figura 5. Correlación temperatura-flujo líquido en la columna azeotrópica del proceso de IPA



La Figura 6, del sistema isopropanol-agua muestra las curvas de punto de burbuja y punto de rocío en función de la fracción molar de IPA. Ambas curvas convergen alrededor de $x \approx 0.7$ de IPA y $T \approx 373$ K, indicando la presencia de un azeótropo mínimo, este comportamiento confirma que en una columna de destilación convencional no es posible obtener isopropanol con purezas superiores al valor azeotrópico, ya que el vapor y el líquido presentan la misma composición en dicho punto. A bajas fracciones de IPA, la diferencia entre las curvas se incrementa debido a la mayor volatilidad del IPA frente al agua, mientras que en la zona azeotrópica ambas curvas se acercan significativamente. Esta representación termodinámica justifica el empleo de DIPE como entrainer en la destilación azeotrópica del proceso, ya que permite modificar el equilibrio líquido-vapor y romper la limitación impuesta por el azeótropo binario.

Figura 6. Diagrama VLE del Sistema isopropanol–agua: Punto azeotrópico y limitaciones de la destilación simple



4. Discusión

Diversas estrategias han sido propuestas para superar el azeótropo isopropanol–agua, destacándose la destilación azeotrópica convencional y la destilación extractiva como las más estudiadas. En este contexto (Cho & Jeon, 2006) reportaron el uso de benceno como agente azeotrópico, logrando concentraciones de IPA superiores al 99,9 % molar a temperaturas comprendidas entre 353 y 354 K; no obstante, el empleo de solventes aromáticos presenta limitaciones relacionadas con toxicidad y consideraciones ambientales. De manera similar, la destilación extractiva utilizando DMSO ha demostrado alta eficiencia de separación, alcanzando purezas del 99,9 % molar en el producto final (Chua et al., 2017), aunque a costa de mayores requerimientos térmicos y de una configuración de proceso más compleja.

Otras alternativas tecnológicas incluyen la destilación catalítica y la destilación por cambio de presión. (Xu et al., 2002) demostró que la destilación catalítica permite integrar reacción y separación en una sola columna, obteniendo IPA con una pureza del 99,9 % molar en un rango de temperatura entre 323 y 460 K; sin embargo, este tipo de sistemas exige un control riguroso de las condiciones operativas y del desempeño del catalizador. Por su parte, la destilación por cambio de presión ha sido evaluada como una opción para la separación del azeótropo IPA–agua, aunque los resultados reportados indican concentraciones inferiores de IPA, del orden de 96,5 % molar en los fondos de la columna, lo que limita su aplicabilidad para procesos que demandan grados de pureza elevados (Núñez et al., 2023).

En comparación con los estudios previamente reportados, el proceso simulado en este trabajo, basado en la destilación azeotrópica asistida por diisopropil éter (DIPE), presentó un desempeño superior al alcanzar una pureza de IPA del 99,999 % a una temperatura de operación de 374,128 K. Estos resultados evidencian que el uso de

DIPE como agente de separación permite una ruptura eficiente del azeótropo IPA–agua bajo condiciones moderadas, sin recurrir a solventes altamente tóxicos ni a configuraciones de proceso excesivamente complejas. La alternativa propuesta se posiciona como una opción técnica y operativamente competitiva frente a las tecnologías previamente reportadas para la obtención de isopropanol de alta pureza.

5. Conclusiones

La simulación del proceso de producción de isopropanol (IPA) con separación azeotrópica asistida por diisopropil éter (DIPE) generada *in situ* se realizó exitosamente en el software COCO SIMULATOR.

El principal desafío abordado en esta simulación fue la necesidad de romper el azeótropo binario IPA-Agua, el cual se forma con una composición máxima de aproximadamente de 87% de IPA en peso. Para superar esta limitación de la destilación convencional, se propuso y modeló la generación de DIPE como subproducto en el mismo reactor de conversión.

El reactor de conversión fija fue simulado con una conversión de 0.75 para la reacción principal (Propileno = IPA) de 0.08 para la reacción de formación de DIPE (IPA = DIPE). Esta estrategia de generación *in situ* resultó ser efectiva, ya que la presencia del DIPE actúa como agente de arrastre, modificando el equilibrio líquido-vapor.

Los resultados de la simulación reafirman la validez de la estrategia de destilación azeotrópica asistida. La corriente de producto purificado final (Corriente IPA) demostró una pureza en fracción másica de isopropanol de 0.999999 (99%), este nivel de purificación supera el límite del 87% impuesto por el azeótropo binario, evidenciando que la presencia del DIPE permite la formación de un nuevo azeótropo ternario.

La rugosidad metodológica del modelo garantizó la selección del paquete termodinámico apropiado, con el uso del modelo UNIQUAC para calcular los coeficientes de actividad crucial permitiendo la predicción precisa de los equilibrios multifase en las dos columnas de destilación, las cuales fueron clave para separar, por un lado, el isopropanol de alta pureza y, por otro, recuperar el agente de arrastre (DIPE) para su reciclaje, garantizando la eficiencia económica del proceso global.

Contribución de los autores: Conceptualización, T-A-C-T y N-J-R-M; análisis formal, A-L-O-C, N-J-R-M y E-N-S-C; investigación, T-A-C-T, A-L-O-C, N-J-R-M, E-N-S-C; recursos, E-N-S-C y M-E-S-P; redacción del borrador original, A-L-O-C y M-E-S-P, revisión y edición T-A-C-T y E-N-S-C; visualización, A-L-O-C, N-J-R-M, E-N-S-C; supervisión, T-A-C-T. Todos los autores han leído y aceptado la versión publicada del manuscrito.

Financiamiento: Esta investigación no ha recibido financiación externa

Declaración de disponibilidad de datos: Los datos están disponibles previa solicitud a los autores de correspondencia: tacarchi@utmachala.edu.ec

Conflicto de interés: Los autores declaran no tener ningún conflicto de intereses

Referencias Bibliográficas

- Altay, Ö., Aydın, Ö. K., Öner, H. B., Filiz, Ö., & Ertekin, F. K. (2025). Principles of distillation process. *Mass Transfer Operations in the Food Industry*, 45–81.
- Blanco, L., & Catarí, E. (2023). Polímero Termoplástico: Polipropileno. *Ciencia En Revolución*, 9(26), 476–509.
- Caicedo, C., Crespo-Delgado, L. M., Cruz-Rodríguez, H. de la, & Álvarez-Jaramillo, N. A. (2017). Propiedades termo-mecánicas del Polipropileno: Efectos durante el reprocesamiento. *Ingeniería, Investigación y Tecnología*, 18(3), 245–252.
- Castillo Cevallos, A. L. (2023). *Desarrollo de una RNA para la predicción de la destilación azeotrópica por oscilación de presión para la separación de isopropanol*.
- Cesar, G. V. J., & Sebastián, O. B. (2019). *Destilación simple y fraccionada: método de purificación de líquidos*. Universidad Industrial de Santander Facultad deficiencias Escuela de química
- Cho, J., & Jeon, J.-K. (2006). Optimization study on the azeotropic distillation process for isopropyl alcohol dehydration. *Korean Journal of Chemical Engineering*, 23(1), 1–7. <https://doi.org/10.1007/BF02705684>
- Chua, W. J., Rangaiah, G. P., & Hidajat, K. (2017). Design and optimization of isopropanol process based on two alternatives for reactive distillation. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, 118, 108–116.
- Cui, Y., Shi, X., Guang, C., Zhang, Z., Wang, C., & Wang, C. (2019). Comparison of pressure-swing distillation and heterogeneous azeotropic distillation for recovering benzene and isopropanol from wastewater. *Process Safety and Environmental Protection*, 122, 1–12.
- De Sousa, G. A. C., Miranda, N. T., Rezende, A. B., Nascimento, U. M., Maciel Filho, R., & Maciel, M. R. W. (2025). Simulation of Sugarcane Bagasse Pyrolysis using COCO Simulator. *Chemical Engineering Transactions*, 117, 955–960.
- Dehmani, Y., Bouzekri, O., Lamhasni, T., Aadnan, I., Abouarnadasse, S., & Lima, E. C. (2025). Catalytic oxidation of isopropanol: A critical review. *Journal of Molecular Liquids*, 426, 127331.
- Geng, X., Ding, Q., Na, J., Yan, P., Li, H., Lei, Z., Li, G., Dai, C., & Gao, X. (2022). Enhanced transesterification reactive distillation for producing isopropanol: From kinetics, pilot-scale experiments, and process design to sustainability evaluation. *Separation and Purification Technology*, 302, 122108.
- Kato, J., Matsuo, T., Takemura, K., Kato, S., Fujii, T., Wada, K., Nakamichi, Y., Watanabe, M., Aoi, Y., & Morita, T. (2024). Isopropanol production via the thermophilic bioconversion of sugars and syngas using metabolically engineered *Moorella thermoacetica*. *Biotechnology for Biofuels and Bioproducts*, 17(1), 13.
- Maldonado, A. (2012). *Aplicación de películas delgadas de SnO 2 y SnO 2: Ru como sensores de propano*. 25(2), 117–121.
- Niu, M. W., & Rangaiah, G. P. (2016). Retrofitting an isopropanol process based on reactive distillation and propylene-propane separation. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, 108, 164–173.
- Núñez, R. E. L., Zurita, C. A. C., Enríquez, V. A. N., & Benavides, M. F. Q. (2023). Simulación y Validación de un Sistema de Destilación para la Separación de Azeótropos de Diisopropiléter–Isopropanol–Agua en Procesos Mejorados para la Industria Química. *Ciencia Latina Revista Científica Multidisciplinar*, 7(4), 7093–7116.

- Saha, A., & Bhattacharjee, S. (2019). Research and review: based on distillation, distillation types and advancements: a short summary. *Journal of Advances in Pharmacy Practices*, 1(1), 8–16.
- Silva, L. M. da, Martins Júnior, M. C., & Ramos, W. B. (2022). *Optimization of the pressure swing distillation process with an intermediate stream for separation of a azeotropic mixture of Diisopropyl Ether/Isopropyl Alcohol*.
- Tangsathitkulchai, C., Punsuwan, N., & Weerachanchai, P. (2019). Simulation of batch slow pyrolysis of biomass materials using the process-flow-diagram coco simulator. *Processes*, 7(11), 775.
- Xu, Y., Chuang, K. T., & Sanger, A. R. (2002). Design of a Process for Production of Isopropyl Alcohol by Hydration of Propylene in a Catalytic Distillation Column. *Chemical Engineering Research and Design*, 80(6), 686–694. <https://doi.org/https://doi.org/10.1205/026387602760312908>
- Zhao, L., Lyu, X., Wang, W., Shan, J., & Qiu, T. (2017). Comparison of heterogeneous azeotropic distillation and extractive distillation methods for ternary azeotrope ethanol/toluene/water separation. *Computers & Chemical Engineering*, 100, 27–37.