

JOURNAL OF ENERGY, ENGINEERING  
OPTIMIZATION AND SUSTAINABILITY

# 2026

ENERGÍA Y SUSTENTABILIDAD



Vol. 10 Núm. 2 (2026)

Reserva de Derechos al Uso Exclusivo

No. 04-2026-050410175100-102. ISSN: 2448-8186



## DIRECTORIO

**L.D. GUILLERMO NARVÁEZ OSORIO**

Rector

**DR. WILFRIDO MIGUEL CONTRERAS SÁNCHEZ**  
Secretario de Investigación, Posgrado y Vinculación

**DR. LUIS MANUEL HERNÁNDEZ GOVEA**  
Secretario de Servicios Académicos

**LIC. ALEJANDRINO BASTAR CORDERO**  
Encargado del Despacho de la Secretaría de  
Servicios Administrativos

Esta revista está citada en:

Sistema Regional de Información en Línea para Revistas Científicas de América Latina y el Caribe, España y Portugal LATINDEX. <http://www.1atindex.unam.mx/> JOURNAL OF ENERGY, ENGINEERING OPTIMIZATION AND SUSTAINABILITY, Vol 10, No. 2, Año 2026, es una publicación continúa editada por la Universidad Juárez Autónoma de Tabasco, Av. Universidad S/N, Zona de la Cultura, Col. Magisterial, C.P. 86040, Villahermosa, Tabasco, México. Tel. (+52) (933) 358 1500 Ext. 5040, <https://revistajeeos.ujat.mx/JEEOS/es/>, Email: [jeeos@ujat.mx](mailto:jeeos@ujat.mx). Indizada en LATINDEX. Editora responsable: Laura Lorena Díaz Flores. Reserva de derechos al uso exclusivo No. 04-2026-050410175100-102, ISSN: 2448-8186, ambos otorgados por el Instituto Nacional del Derecho de Autor. Responsable de la última actualización de este número: Pauly González Mayo, Universidad Juárez Autónoma de Tabasco, Av. Universidad S/N, Zona de la Cultura, Col. Magisterial, Centro, Tabasco. C.P. 86040. Fecha de última actualización, 31 de agosto 2026.

This work is licensed under a Creative Commons Attribution- NonCommercialShareAlike 4.0 International License.

Dra. Laura Lorena Díaz Flores  
**EDITORA EN JEFE**

M.A. Pauly González Mayo  
**GESTORÍA Y ASISTENCIA EDITORIAL**

MIS Dalia Exaltación Medina Mandujano  
MAEE. Mary Cruz Valenzuela Jiménez  
**ASISTENTE DE DISEÑO Y ESTILO**

Dra. Sulma Guadalupe Gómez Jiménez  
Dra. Margarita del Carmen Noguera Miceli  
**ASISTENCIA EN TRADUCCIÓN Y MAQUETADO**

### **EDITORES ASOCIADOS INVITADOS**

Dr. Darío Colorado Garrido. **Universidad Veracruzana**  
Dra. Linda Viviana García Quiñonez. **Universidad Veracruzana**  
Dr. Cristian Gómez. **Universidad Veracruzana**  
Dra. Deysi Carmina Peña Ortiz. **Universidad Veracruzana**  
Dr. Roberto Agustín Conde Gutiérrez. **Universidad Veracruzana**  
Dr. Gerardo Alcalá Perea. **Universidad Veracruzana**  
Dra. Zaira Ruth Zuviría López. **Universidad Autónoma de Guadalajara**  
Dra. Karen Rodríguez Rosales. **Universidad Autónoma de Querétaro**  
Dra. Laura López Díaz. **Universidad Juárez Autónoma de Tabasco**  
Dr. Erik Ramírez Morales. **Universidad Juárez Autónoma de Tabasco**

## COMITÉ EDITORIAL

Dr. Bassam Ali, **Facultad de Ingeniería, Universidad Autónoma de Yucatán**

Dr. Fabricio Nápoles Rivera, **Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo**

Dr. Francisco López Villareal, **Instituto Tecnológico de Villahermosa.**

Dr. Fernando Israel Gómez Castro, **Universidad de Guanajuato**

Dr. Juan Serrano Arellano, **Instituto Tecnológico de Pachuca**

Dra. Isabel María Valdivia Fernández, **Universidad de la Habana- Facultad de Geografía**

Dra. Ivett Zavala Guillén, **Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada, Baja California**

Dr. Luis Alfonso García Cerda, **Centro de Investigación de Química Aplicada**

Dra. Nancy del Pilar Medina Herrera, **Universidad Autónoma de Nuevo León**

Dra. Ma. Guadalupe Garnica Romo, **Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo.**

Dra. María Guadalupe Alpuche Cruz, **Universidad de Sonora**

Dr. Pedro Cruz Alcantar, **Universidad Autónoma de San Luís Potosí**

Dr. Salvador Tututi Ávila, **Universidad Autónoma de Nuevo León**

Dra. Santa del Carmen Herrera Sánchez, **Universidad Autónoma del Carmen**

## Índice Vol. 10 Núm. 2 (2026)

### Carta editorial

Zuviría-López Z.R.

- |                                                                                                                                                                                                                               |               |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------|
| <b>Integración de calor en la purificación de ciclohexano grado textil utilizando etilenglicol como solvente</b>                                                                                                              | <b>1-16</b>   |
| Cruz-Valdez J.A. <sup>1*</sup> , Álvarez-Alor B. <sup>2</sup> , Montalvo-Salinas D. <sup>3</sup> , Garzón-Pérez A.S. <sup>4</sup> , Alvarado-Méndez P.E. <sup>5</sup>                                                         |               |
| <b>Fotosíntesis artificial efecto sinérgico de <math>\text{Ti}^{3+}</math>, <math>\text{Co}^{2+}</math>, <math>\text{Co}^{3+}</math> en los mecanismos de activación, acoplamiento c-c hacia la producción de isopropanol</b> | <b>17-30</b>  |
| Pérez- de la Cruz A.Y. <sup>1</sup> , Montalvo-Salinas D. <sup>2*</sup> , Cruz-Valdez J.A. <sup>1</sup> , Pérez- Francisco J.M. <sup>1</sup> , Jiménez- Castillo U. <sup>1</sup> , Álvarez-Alor B. <sup>3</sup>               |               |
| <b>Predicción de la potencia en una turbina vestas v52 mediante regresión polinomial y una red neuronal</b>                                                                                                                   | <b>31-46</b>  |
| Olan-Barroso A.A. <sup>1*</sup> , Alaffita-Hernández F.A. <sup>2</sup> , Escobedo-Trujillo B.A. <sup>1</sup> , Colorado-Garrido D. <sup>2</sup>                                                                               |               |
| <b>Estrategias de ingeniería de software verde para aplicaciones energéticamente eficientes</b>                                                                                                                               | <b>47-54</b>  |
| Morales-Reyes E. <sup>1*</sup> , Pacheco-Reyes J.N. <sup>1</sup> , Vázquez-Hernández R. <sup>1</sup> , Gilbón-Aburto A. <sup>1</sup> , Gómez-Manuel E. <sup>1</sup>                                                           |               |
| <b>Estudio teórico y experimental de la eficiencia térmica de un colector cilindro parabólico en Coatzacoalcos, México</b>                                                                                                    | <b>55-70</b>  |
| Rodríguez-Flores E. <sup>1</sup> , González-Martínez M.I. <sup>2</sup> , Fuentes-Orozco S. <sup>2</sup> , Garrido-Meléndez J. <sup>3</sup> , Márquez-Nolasco A. <sup>4</sup> , Conde-Gutiérrez R.A. <sup>4*</sup>             |               |
| <b>Determinación de la acumulación de metales en <i>eichhornia crassipes</i> para valorización de biomasa</b>                                                                                                                 | <b>71-80</b>  |
| Benítez-Martínez X. S. <sup>1</sup> , Domínguez-Villate W. A. <sup>1</sup> , Núñez-Correa S. <sup>1</sup> , Morales-Salas L. <sup>2,3*</sup>                                                                                  |               |
| <b>Restricciones de sostenibilidad y riesgo de cola en portafolios accionarios de México</b>                                                                                                                                  | <b>81-96</b>  |
| Villada-Medina H.D. <sup>1*</sup> , Rendón-García J.F. <sup>1</sup> , Alcalá-Perea G. <sup>2</sup>                                                                                                                            |               |
| <b>Análisis en lazo cerrado de un convertidor elevador en cascada con reducción del rizo de corriente de entrada para aplicaciones con celda de combustible de hidrógeno</b>                                                  | <b>97-114</b> |
| Hidalgo-Leal H.D. <sup>1</sup> , Cruz-Gutiérrez F. <sup>1*</sup> , May-Burgos L.D. <sup>1</sup> , Sarao-Cruz L.D.J. <sup>1</sup> , Pérez-Aguilar A. <sup>1</sup>                                                              |               |

## Integración de calor en la purificación de ciclohexano grado textil utilizando etilenglicol como solvente

### Heat integration in the textile grade cyclohexane purification using ethylene glycol as a solvent

Cruz-Valdez J.A.<sup>1\*</sup>, Álvarez-Alor B.<sup>2</sup>, Montalvo-Salinas D.<sup>3</sup>, Garzón-Pérez A.S.<sup>4</sup>, Alvarado-Méndez P.E.<sup>5</sup>

<sup>1,2,3,4,5</sup>Tecnológico Nacional de México/Instituto Tecnológico Superior de Coatzacoalcos, División de Ingeniería Química, Carretera Antigua Minatitlán-Coatzacoalcos Km. 16.5, 96536, Coatzacoalcos, Ver., México.

\*jcruzv@itesco.edu.mx

#### Artículo Científico

Publicado: 31 agosto 2026

## RESUMEN

El ciclohexano (CHX) es la principal materia prima para la producción de Nylon-6 y Nylon-66, dos de las fibras sintéticas más importantes para la elaboración de textiles. Entre el 80-85 % de la producción mundial de CHX se obtiene a través de la hidrogenación catalítica de benceno (BEN). Sin embargo, debido a similitudes en sus estructuras químicas y temperaturas de ebullición, a 77 °C y 1 atm la mezcla CHX-BEN forma un azeótropo con una composición del 55 mol% BEN; imposibilitando su purificación por destilación convencional. Como consecuencia, la destilación extractiva (ED) surge como una alternativa de purificación. Debido a su alta polaridad, baja toxicidad, y bajo costo, el etilenglicol (EG) fue seleccionado como solvente en la simulación del proceso de ED en Aspen Plus V14®. El uso de EG resultó adecuado para la obtención de CHX y BEN con purezas del 99.90 mol%, respectivamente. Donde, en comparación con el uso de sulfolano (SF) como solvente, nuestro proceso de ED utilizando EG representa un ahorro energético del 11.30 %. Con el objetivo de reducir el consumo energético y las emisiones de CO<sub>2</sub>, un proceso de destilación extractiva con integración de calor (EDHI) fue propuesto; donde, en comparación con el proceso convencional de ED utilizando EG, una integración de calor minimiza en un 24.37 % las emisiones de CO<sub>2</sub>. Nuestros resultados demuestran que, el uso de EG como solvente en un proceso de EDHI favorece a la obtención de CHX grado textil de forma económica y sustentable.

**Palabras clave:** etilenglicol, destilación extractiva, ciclohexano, integración de calor, ahorro energético.

## ABSTRACT

Cyclohexane (CHX) is the main raw material for the production of Nylon-6 and Nylon-66, two of the most important synthetic fibers for the manufacture of textiles. Between 80-85 % of the world's CHX production is obtained through the catalytic hydrogenation of benzene (BEN). However, due to similarities in their chemical structures and boiling points, at 77 °C and 1 atm the CHX-BEN mixture forms an azeotrope with a composition of 55 mol% BEN; making it impossible to purify by conventional distillation. As a result, extractive distillation (ED) emerges as a purification

alternative. Due to its high polarity, low toxicity, and low cost, ethylene glycol (EG) was selected as the solvent in the ED process simulation on Aspen Plus V14®. The use of EG proved suitable for obtaining CHX and BEN with purities of 99.90 mol%, respectively. Where, compared to the use of sulfolane (SF) as a solvent, our ED process using EG represents an energy saving of 11.30 %. Our results demonstrate the high effectiveness of EG as a solvent in the purification of the CHX-BEN mixture. With the objective of reducing energy consumption and CO<sub>2</sub> emissions, an extractive distillation process with heat integration (EDHI) is proposed; where, compared to the conventional ED process using EG, heat integration minimizes CO<sub>2</sub> emissions by 24.37%. Our results demonstrate that the use of EG as a solvent in an EDHI process favor the economical and sustainable production of textile-grade CHX.

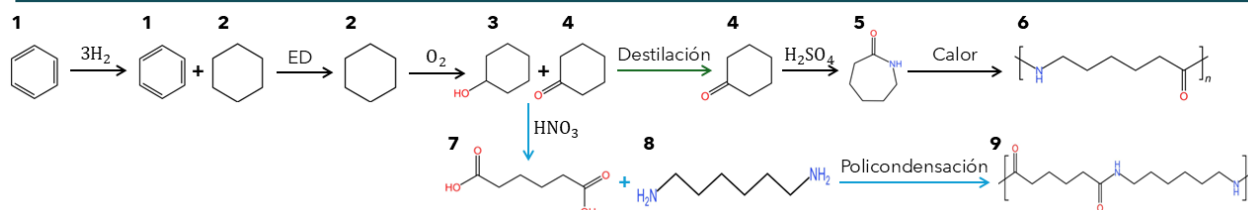
**Keywords:** ethylene glycol, extractive distillation, cyclohexane, heat integration, energy saving.

## INTRODUCCIÓN

El Nylon es la primera fibra sintética creada por el ser humano, siendo descubierta en 1935 por el químico estadounidense Wallace Hume Carothers, cuando este se encontraba trabajando para el gigante multinacional Du Pont de Nemours. El Nylon es clasificado de acuerdo con sus estructuras químicas y diversas aplicaciones, siendo los más utilizados el Nylon-6 y el Nylon-66. El Nylon-6 se utiliza con frecuencia para la elaboración de textiles, y el Nylon-66 para la fabricación de neumáticos. Ambos tipos de Nylon tienen una característica en común, su origen proviene de los hidrocarburos cíclicos.

El ciclohexano (CHX) es la principal materia prima para la producción de Nylon-6 y Nylon-66 [1]; del cual, se estima que entre el 80-85 % de la producción global de CHX se obtiene por hidrogenación catalítica de benceno (BEN) [2]. Aproximadamente, el 54 % de la producción total anual de CHX es utilizado para la síntesis de ácido adípico [3], el 39 % es ocupado para la síntesis de  $\epsilon$ -caprolactama [3]; mientras que, el 7 % restante es empleado para la elaboración de solventes, insecticidas y plastificantes [3]. Globalmente, la capacidad total anual de producción de CHX es de aproximadamente 1800 millones de galones [5]; de los cuales, Estados Unidos representa 600 millones [3].

En la **Figura 1**, con flechas en color negro, se muestra el proceso de obtención de Nylon-6. En este caso, el CHX (2) obtenido a partir de la hidrogenación total de BEN (1) debe ser purificado; dado que, el CHX grado textil debe tener una pureza  $\geq 99.9$  mol%. Posteriormente, el CHX es oxigenado, produciendo una mezcla de ciclohexanol (3) y ciclohexanona (4); donde, la ciclohexanona es purificada mediante un proceso de destilación y, al reaccionar con ácido sulfúrico (H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>) favorece a la obtención de  $\epsilon$ -caprolactama (5) [4]. Finalmente, una reacción térmica permite la obtención Nylon-6 (6). Por otra parte, con flechas en color azul, se muestra el proceso para la obtención de Nylon-66 (9); donde, partiendo de la mezcla ciclohexanol-ciclohexanona, al ocurrir una reacción de oxidación en presencia de ácido nítrico (HNO<sub>3</sub>) se obtiene ácido adípico (7) [5]. Posteriormente, el ácido adípico reacciona con 1,6-diaminohexano (8) en agua y, vía reacción de policondensación se obtiene el Nylon-66.



**Figura 1.** Ruta cinética tradicional para la producción de Nylon-6 (6) y Nylon-66 (9) utilizando ciclohexano (2) como materia prima.

Debido a que el equilibrio químico de la reacción de hidrogenación catalítica de BEN se encuentra limitado, no todo el BEN logra ser convertido en CHX [1]; por lo tanto, a la salida del reactor existe una mezcla CHX-BEN. A causa de sus estructuras químicas similares, y una diferencia de  $0.65\text{ }^{\circ}\text{C}$  en sus temperaturas de ebullición [6], a  $1\text{ atm}$  y  $77\text{ }^{\circ}\text{C}$  la mezcla CHX-BEN forma un azeótropo homogéneo con una composición del  $55\text{ mol}\%$  BEN [6]. Por lo tanto, su separación por destilación binaria convencional de la mezcla CHX-BZ es imposible.

Existen dos técnicas importantes para la purificación de la mezcla CHX-BEN dependiendo del contenido de BEN en esta; la extracción líquido-líquido (LLE) se utiliza para concentraciones entre  $20\text{--}25\text{ wt}\%$ , y la destilación extractiva (ED) para niveles entre  $65\text{--}90\text{ wt}\%$  [6]. La ED es una de las metodologías más utilizadas para la separación de mezclas azeotrópicas [6]. Esta técnica consiste en añadir un solvente a la mezcla problema, modificando el coeficiente de actividad del componente clave ligero, aumentando la volatilidad relativa del sistema [6].

Li et al. [7] utilizaron sulfolano (SF) como solvente en procesos de ED para la purificación de una mezcla equimolar de  $100\text{ kmol/h}$  de CHX-BEN, obteniendo purezas del  $99.9\text{ mol}\%$  para ambos componentes. Zhang et al. [8] realizaron un proceso híbrido de LLE-ED utilizando como solvente al líquido dicatiónico ( $65\text{ mol}\%$   $[C_5(MIM)_2][NTf_2]_2$  +  $35\text{ mol}\%$   $H_2O$ ), para la purificación de una mezcla equimolar de  $100\text{ kmol/h}$  de CHX-BEN, obteniendo CHX y BEN con purezas del  $99.9$  y  $99.6\text{ mol}\%$ , respectivamente.

La correcta selección del solvente, también conocido como agente de separación másico, es desafiante; dado que, este debe ser económico, biodegradable, no-inflamable, no-tóxico, no-volátil y de una elevada polaridad [6]. No obstante, a pesar de que el SF es el solvente orgánico más utilizado para la desaromatización de hidrocarburos, es un compuesto altamente tóxico, inflamable, puede corroer equipos [9], y su presencia contamina cuerpos de agua [9]. Así mismo, los líquidos iónicos (ILs) son altamente viscosos y densos [10], su naturaleza higroscópica puede causar corrosión [10], y su producción es costosa [10]. De acuerdo con la literatura [6], el etilenglicol (EG), utilizado como anticongelante para automóviles, es un líquido incoloro, económico, altamente disponible en el mercado, y con poca toxicidad [6]; por lo tanto, es presentado como solvente en una comparación directa con el uso de SF en la desaromatización del CHX.

Por otra parte, los procesos de destilación representan un elevado consumo energético en las industrias. Por lo tanto, con el objetivo de maximizar la eficiencia termodinámica, y minimizar el consumo energético, económico y de emisiones de  $CO_2$  en los procesos de ED, el diseño de

procesos de destilación extractiva con integración de calor (EDHI) ha ganado importancia en los últimos años [7,8]. Hoy en día, no se ha reportado el uso de procesos de EDHI utilizando EG para la desaromatización de CHX.

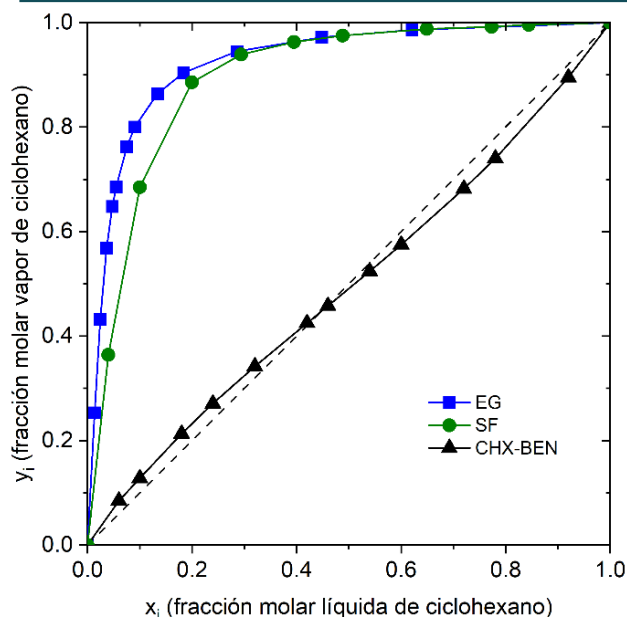
Debido a todo lo anteriormente mencionado, el objetivo de este trabajo es utilizar al EG como solvente en la simulación del proceso de ED, en Aspen Plus V14®, para la obtención de CHX y BEN con purezas  $\geq 99.90$  mol%, respectivamente, y logrando una recuperación de solvente  $\geq 99.99$  mol%. Primeramente, un análisis de los diagramas pseudobinarios del equilibrio líquido vapor (VLE), así como la estimación de las volatilidades relativas, permitirán establecer la viabilidad del EG como agente de separación másico respecto del uso de SF. Posteriormente, un algoritmo de optimización iterativo es utilizado para la selección de las variables de diseño del proceso convencional de ED. Finalmente, con el objetivo de reducir las emisiones de CO<sub>2</sub>, el consumo energético y económico en el proceso de ED utilizando EG, un proceso de EDHI es propuesto.

## METODOLOGÍA

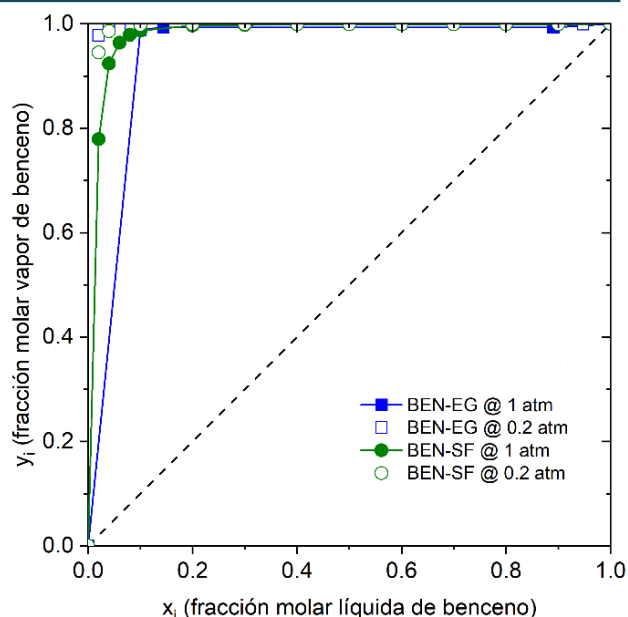
**Equilibrio líquido-vapor (VLE).** De acuerdo con la literatura, el modelo termodinámico NRTL ha sido ampliamente utilizado en la simulación de los sistemas CHX + BEN + solvente [1,6-8]. En este caso, los parámetros de interacción binarios NRTL de los sistemas CHX + BEN + {EG/SF} fueron estimados en Aspen Plus V14®.

La **Figura 2** muestra el impacto del EG y del SF en el diagrama pseudobinario del VLE de la mezcla CHX-BZ a 1 atm utilizando Aspen Plus Properties V14®. En este caso, se observa que el EG y el SF tienen la capacidad de romper el punto azeotrópico, aumentando la volatilidad relativa del CHX, y facilitando a su obtención como producto de destilado con elevadas purezas. Debido a la elevada polaridad del EG, así como a la presencia de electrones  $\pi$  en las moléculas de BEN, las cuales le confieren una mayor polaridad al BEN en comparación con el CHX [6], la miscibilidad del BEN en el EG es elevada, facilitando a la extracción del BEN y fácil evaporación del CHX. Como consecuencia, cuando utilizamos EG como solvente, la columna extractiva tendrá una menor cantidad de etapas en comparación con el uso de SF.

La **Figura 3** representa el efecto de la presión en el VLE del sistema BEN + {EG/SF}; donde, a 0.2 atm la volatilidad relativa del BEN es superior que a 1 atm. De acuerdo con la literatura, a presiones inferiores a 1 atm, la volatilidad relativa aumenta, debido a la disminución en las temperaturas de ebullición [11]. Adicionalmente, la volatilidad relativa del BEN es ligeramente más grande en presencia del SF, en comparación con el EG; esto se debe a que, la solubilidad del BEN es mucho mayor en el EG que en el SF [6], por lo tanto, es más fácil destilar al BEN del SF. Como consecuencia, la columna de recuperación del solvente será mucho más pequeña cuando utilizamos SF.



**Figura 2.** Efecto del EG y del SF en el VLE del sistema CHX-BEN a 1 atm.



**Figura 3.** Efecto de la presión en el VLE de los sistemas BEN-EG y BEN-SF.

**Volatilidad relativa.** El solvente tiene como objetivo modificar el coeficiente de actividad del componente clave ligero, CHX, incrementando su volatilidad y facilitando su separación [11]. La Ecuación (1) es utilizada para estimar la volatilidad relativa de un sistema. Donde, los subíndices *i* y *j* representan al CHX y al BEN, respectivamente; mientras que, *x* y *y* representan las fracciones molares de los componentes en las fases líquidas y de vapor, respectivamente [6,11].

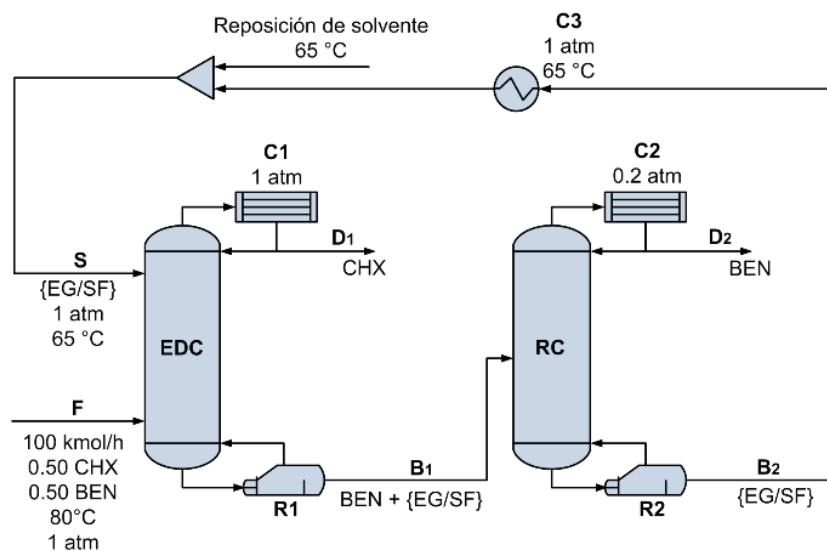
$$\alpha_{ij} = \frac{y_i/x_i}{y_j/x_j} \quad (1)$$

La **Tabla 1** muestra las volatilidades relativas de los sistemas CHX + BEN + {EG/SF} a 1 atm y diferentes relaciones solventes/mezcla azeotrópica (S/F). En Aspen Plus V14® se simuló el efecto del solvente en un separador flash. Los resultados confirman que el uso de EG y SF aumenta la volatilidad relativa del CHX. Así mismo, a relaciones S/F  $\geq 2$ , el SF presenta un ligero aumento en la volatilidad, en comparación con el EG. Esto se debe a que, el CHX tiende a incrementar ligeramente su miscibilidad en presencia de altas concentraciones de EG, caso contrario con el SF. Sin embargo, altas relaciones S/F provocan un elevado consumo de energía en los rehervidores, y por ende, los costos operativos y de capital de inversión incrementan. Debido a esto, se concluye que relaciones S/F  $\leq 2$  resultan adecuadas para el diseño del proceso de ED.

**Tabla 1.** Efecto de la relación S/F en la volatilidad relativa ( $\alpha_{ij}$ ) del sistema CHX-BEN a 1 atm.

| S/F | EG            | SF            |
|-----|---------------|---------------|
|     | $\alpha_{ij}$ | $\alpha_{ij}$ |
| 1   | 3.88          | 3.53          |
| 1.5 | 5.42          | 5.35          |
| 2   | 7.13          | 7.46          |
| 2.5 | 9.04          | 9.82          |

**Diseño del proceso de destilación extractiva (ED).** La Figura 4 muestra el esquema del proceso convencional de ED para la purificación de la mezcla CHX-BEN utilizando EG y SF como solventes. Las simulaciones del proceso de ED fueron desarrolladas en Aspen Plus V14® utilizando el módulo RadFrac y el modelo termodinámico NRTL [6]. Donde, un flujo de 100 kmol/h a 80 °C y 1.0 atm, con composiciones equimolares de CHX y BEN ( $F$ ), es alimentado en la sección media ( $N_F$ ) de la columna de destilación extractiva (EDC) [6]. La presión de operación de la EDC es 1 atm. El flujo de EG y SF, como agentes de separación másicos ( $S$ ) es introducido a 1 atm y 65 °C entre las etapas 2 y 6 ( $N_S$ ) de la EDC, esto con el objetivo de asegurar su presencia en la fase líquida a lo largo de toda la columna [6], promoviendo a la extracción de BEN en el fondo, mientras el CHX es obtenido con purezas  $\geq 99.90$  mol% como producto de destilado en  $D_1$ . La mezcla BEN+{EG/SF} obtenida como producto de fondo de la EDC ( $B_1$ ), es alimentada en la sección media ( $N_{B1}$ ) de la columna de recuperación (RC).



**Figura 4.** Esquema del proceso convencional de ED para la purificación de la mezcla CHX-BEN.

De acuerdo con los resultados de la Figura 3, la volatilidad relativa del BEN respecto del EG y SF, incrementa cuando la presión decrece a 0.2 atm. Por otra parte, debido a que el EG y el SF tienen temperaturas de ebullición elevadas, operar la RC a 1 atm puede resultar en un aumento sustancial en las cargas de calor en el rehovidor R2 [11]; mientras que, a 0.2 atm el consumo de energía disminuye, minimizando el uso de vapor de vapor de calefacción, y por ende, los costos de

operación del proceso [6,11]. Cruz Valdez et al. [11] demostraron que, para la desaromatización de hidrocarburos, una presión de operación  $< 0.2$  atm, ocasiona que la temperatura de operación del condensador C2 sea  $< 35$  °C, requiriendo un elevado consumo de refrigerante. Adicionalmente, operar la RC a presión de vacío reduce la temperatura de operación del rehervidor R2, previniendo la descomposición térmica de los solventes [6,11]. Por lo tanto, la RC opera a 0.2 atm. Así mismo, la obtención de BEN con purezas  $\geq 99.90$  mol% como producto de destilado en  $D_2$  facilita a la recuperación de EG y SF con purezas  $\geq 99.99$  mol% en  $B_2$ .

**Optimización del proceso de ED.** La optimización secuencial iterativa es una metodología ampliamente utilizada en la optimización de procesos de ED y LLE-ED [6-8,11], teniendo como objetivo establecer los valores óptimos de cada variable de decisión, mientras es minimizado el consumo energético y el Costo Total Anual (TAC) [6-8,11]. Esta técnica implica la optimización de un solo factor; donde, cada variable de decisión es optimizada de manera iterativa, ajustando una variable a la vez, mientras las demás variables se mantienen constantes [6-8,11].

La **Figura 5** muestra el algoritmo de optimización iterativo utilizado en este trabajo; donde, la minimización del consumo energético en los rehervidores de las EDC ( $Q_{R1}$ ) y RC ( $Q_{R2}$ ), sirve como criterio para establecer los parámetros óptimos de las variables de decisión [6,11]. Las purezas deseadas de CHX en  $D_1$  ( $x_{D_1}^{CHX}$ ), BEN en  $D_2$  ( $x_{D_2}^{BEN}$ ), y solvente {EG/SF} en  $B_2$  ( $x_{B_2}^S$ ), definidas en las Ecuaciones (2)-(4), son establecidas como especificaciones de diseño o restricciones.

$$x_{D_1}^{CHX} \geq 99.90 \text{ mol\%} \quad (2)$$

$$x_{D_2}^{BEN} \geq 99.90 \text{ mol\%} \quad (3)$$

$$x_{B_2}^S \geq 99.99 \text{ mol\%} \quad (4)$$

Las variables de decisión seleccionadas en este trabajo son: el flujo de EG o SF ( $S$ ), la etapa de alimentación del flujo de EG o SF ( $N_S$ ), la etapa de alimentación de la mezcla CHX-BEN ( $N_F$ ), y la etapa de alimentación de la mezcla BEN-EG ( $N_{B_1}$ ). Los flujos  $D_1$  y  $D_2$  se mantuvieron constantes durante la optimización. Las relaciones de reflujo molar de la EDC ( $RR_1$ ) y de la RC ( $RR_2$ ), fueron ajustadas para mantener las concentraciones deseadas de CHX y BEN en los flujos  $D_1$  y  $D_2$ , respectivamente, utilizando la función “Design Spec/Vary” en Aspen Plus V14® [6,11]. Los límites inferiores y superiores de las variables discretas ( $N_S$ ,  $N_F$ , y  $N_{B_1}$ ) y continuas ( $S$ ,  $RR_1$ , y  $RR_2$ ) fueron definidos utilizando del módulo “Sensitivity Analysis” en Aspen Plus V14® [6,11]. Los números totales de etapas de la EDC ( $N_{TEDC}$ ) y de la RC ( $N_{TRC}$ ) fueron previamente determinados, y no fueron considerados en el análisis de sensibilidad.

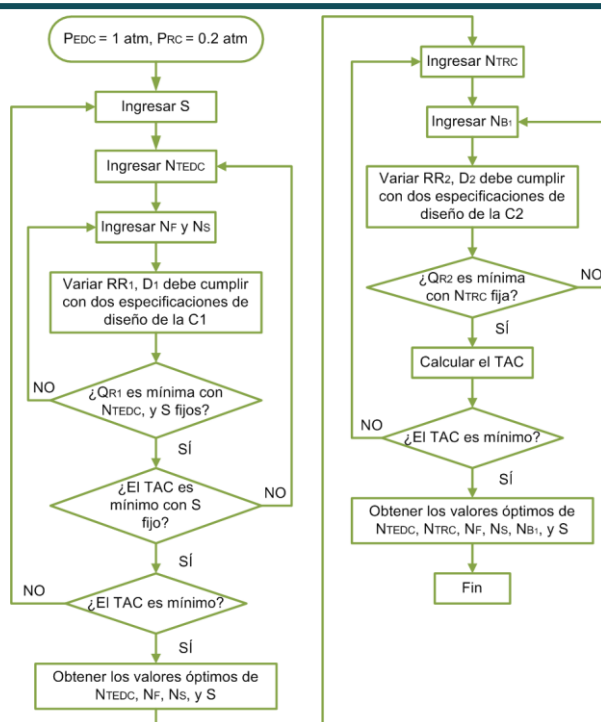


Figura 5. Algoritmo de optimización iterativo del proceso convencional de ED.

**Diseño del proceso de destilación extractiva con integración de calor (EDHI).** A causa de las elevadas temperaturas de ebullición de los solventes, la temperatura en el fondo de la RC es superior respecto de la EDC. Por lo tanto, el aprovechamiento del calor sensible del flujo  $B_2$  permite precalentar la corriente  $B_1$ ; y de esta forma, la carga de calor en el rehervidor R2 es reducida. Como consecuencia, el consumo energético, el TAC, y las emisiones de CO<sub>2</sub> son minimizadas. La Figura 6 muestra el esquema de nuestro proceso de EDHI. En este caso, el intercambiador de calor (HEX) de nuestro proceso de EDHI es diseñado con una diferencia mínima de temperaturas de 10 K entre la salida de la corriente caliente, y la entrada de la corriente fría. Adicionalmente, en esta metodología la mayoría de las variables de diseño del proceso convencional de ED se conservan [7]. El uso de esta metodología de integración de calor es más sencillo que la implementación de rehervidores laterales o técnicas de acoplamiento térmico [7,8].

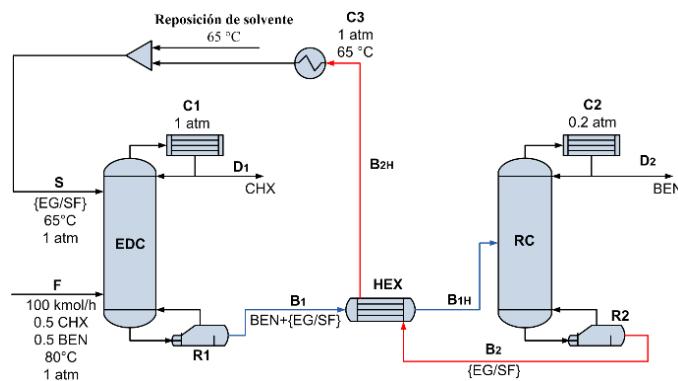


Figura 6. Esquema del proceso propuesto de EDHI para la separación de la mezcla CHX-BEN.

**Análisis económico y ambiental.** La Ecuación (5) es ampliamente utilizada para la estimación del TAC; el cual, sirve como un indicador económico que permite evaluar la viabilidad económica de procesos de ED y LLE-ED [6-8,11]. Los Costos Totales de Operación (*TOC*) conforman los costos relacionados con electricidad, vapor de calentamiento en los rehervidores, refrigerante, y agua de enfriamiento en los condensadores y enfriadores [6]. Los *TOC* son estimados considerando 8000 h de operación al año [6-8]. Por otra parte, el Capital Total de Inversión (*TCI*) comprende los costos asociados con las columnas de destilación (EDC y RC), condensadores (C1 y C2), rehervidores (R1 y R2), enfriadores (C3), e intercambiadores de calor (HEX). Componentes como tuberías, válvulas y bombas, generan un impacto económico relativamente pequeño, por lo que son excluidos del cálculo [6,11]. El periodo de retorno del *TCI* ( $\theta$ ) se establece a 3 años [6-8].

$$TAC [\$/año] = TOC + \frac{TCI}{\theta} \quad (5)$$

Las emisiones de CO<sub>2</sub> sirven como un indicador en la evaluación del impacto ambiental y sustentabilidad de un proceso [12]. Las emisiones de CO<sub>2</sub> están directamente relacionadas con el consumo de vapor de calentamiento en los rehervidores; el cual, es generado a partir de gas natural, carbón o combustibles fósiles pesados [13]. La Ecuación (6) es comúnmente utilizada para la cuantificación de emisiones de CO<sub>2</sub> [kg/h] [6]; donde,  $\alpha = 3.67$  representa la relación de masas molares de CO<sub>2</sub> a C,  $Q_{fuel}$  [kW] es la cantidad de combustible quemado, NHV es el valor de calentamiento neto, y C% es el contenido de carbono. Si se utiliza gas natural como combustible, el NHV y C% tienen valores de 51,000 kJ/kg y 0.754 kg/kg, respectivamente [6].

$$CO_2[kg/h] = \left(\frac{Q_{fuel}}{NHV}\right) \left(\frac{C\%}{100}\right) \alpha \quad (6)$$

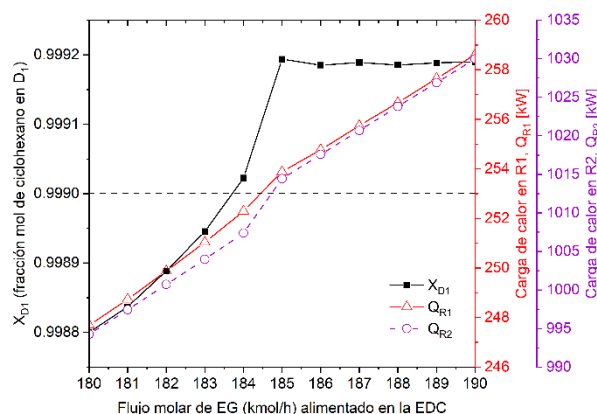
La Ecuación (7) permite calcular  $Q_{fuel}$ , siendo  $Q_{proc}$  [kW] la carga térmica total del proceso, y  $\lambda_{proc}$  [kJ/kg] y  $h_{proc}$  [kJ/kg] son el calor latente y la entalpía del vapor de calentamiento, respectivamente; adicionalmente,  $T_0$ ,  $T_F$ , y  $T_{stack}$  son las temperaturas de referencia, flama y stack, respectivamente [6,11].

$$Q_{fuel} = \left(\frac{Q_{proc}}{\lambda_{proc}}\right) (h_{proc} - 419) \left(\frac{T_F - T_0}{T_F - T_{stack}}\right) \quad (7)$$

## RESULTADOS

En la **Figura 7** se ilustra el efecto del flujo de EG en la obtención de CHX como producto de destilado en la EDC. Un flujo de EG  $\geq 184$  kmol/h favorece a la obtención de CHX con purzas  $\geq 99.90$  mol%. Sin embargo, esto provoca un aumento en el consumo energético de los rehervidores R1 y R2; dado que, una mayor cantidad de solvente debe ser calentada para lograr la separación correcta de CHX y BEN en  $D_1$  y  $D_2$ , respectivamente. Adicionalmente, el comportamiento de las purzas de CHX concuerda con lo descrito en el cálculo de las volatilidades relativas; donde, a relaciones S/F cercanas a 2 una parte del CHX tiende a miscibilizar con el EG. Por otra parte, un flujo de EG  $< 184$  kmol/h fomenta al aumento de  $RR_1$  y  $RR_2$ , debido a que no se cumple con las

concentraciones deseadas de CHX, y BEN en la EDC y en la RC, respectivamente; como consecuencia, existe un aumento en las cargas de calor de R1 y R2. Por lo tanto, un flujo de 184 kmol/h de EG resulta apropiado.



**Figura 7.** Efecto del flujo de EG en la pureza de CHX y consumo energético en R1 y R2.

La **Tabla 2** muestra una comparación de los resultados de las variables de diseño de los procesos de ED utilizando EG y SF. Donde, el uso de EG, en comparación con el SF, promueve a que la EDC tenga menos etapas de separación; sin embargo, en presencia de SF la RC es más pequeña, concordando con las conclusiones de los diagramas pseudobinarios y binarios del VLE descritos en la sección anterior. Adicionalmente, en ambos casos se logra la obtención de CHX y BEN con purezas del 99.90 mol%, cumpliendo con los estándares necesarios para la producción de CHX grado textil [1,3].

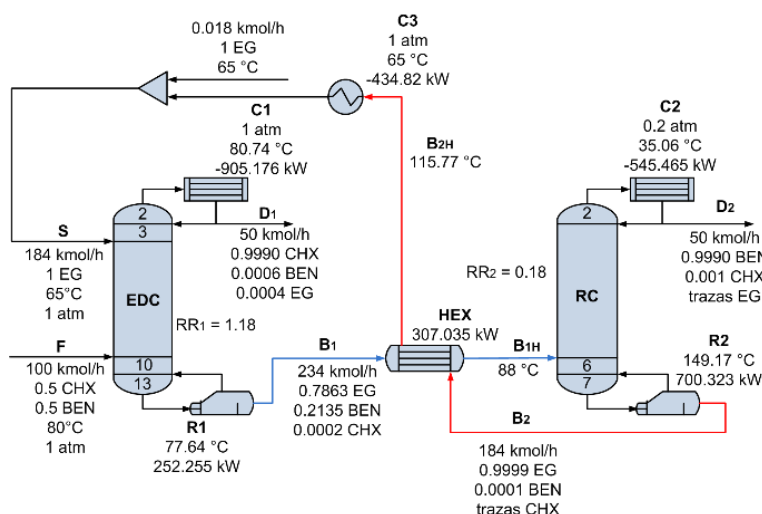
Debido a la naturaleza tóxica y altamente cancerígena del BEN, y con el objetivo de evitar la contaminación del solvente antes de ser recirculado a la EDC, este debe contener como máximo impurezas de BEN  $\leq 300$  ppm [14]. En este contexto, se logra una recuperación de solvente con purezas del 99.99 mol%, existiendo la presencia de 12.60 ppm y 123.80 ppm de BEN cuando se utiliza SF y EG, respectivamente. En ambos casos, se cumple con los límites permitidos de impurezas de BEN. Estas impurezas ocasionan una reposición de solvente fresco de 0.003 kmol/h de SF, y 0.018 kmol/h de EG. Si bien, la reposición de solvente es mínima, se necesita ligeramente una mayor cantidad de EG que de SF, esto debido a la alta capacidad de miscibilidad del BEN con el EG, descrita anteriormente.

Los objetivos principales del diseño de procesos de EDHI es reducir el TAC a partir de la minimización en las cargas de calor en los rehervidores, y por ende, un decrecimiento en los costos de vapor de calentamiento suministrados, y en las emisiones de CO<sub>2</sub>. En este caso, a pesar de que la temperatura de ebullición del EG a 0.2 atm es de 149.74 °C, el uso de vapor de presión media es utilizado como fuente de calentamiento en el R2 de la RC. Adicionalmente, el uso de un flujo elevado de EG como solvente en la EDC, así como la baja temperatura de alimentación del flujo  $B_1$  en la RC, causan un elevado consumo de energía en R2. La baja temperatura del flujo de fondo  $B_1$  es una característica de las EDC, como consecuencia de la temperatura de ebullición del CHX.

**Tabla 2.** Comparación de los procesos de ED en la desaromatización de CHX utilizando EG y SF.

| Parámetros |                | Solventes |          |
|------------|----------------|-----------|----------|
|            |                | EG        | SF       |
| EDC        | $N_{TEDC}$     | 14        | 15       |
|            | $S$ [kmol/h]   | 184       | 166      |
|            | $N_S$          | 3         | 3        |
|            | $N_F$          | 10        | 10       |
|            | $RR_1$         | 1.18      | 0.61     |
|            | $x_{D1}^{CHX}$ | 0.9990    | 0.9990   |
|            | $Q_{C1}$ [kW]  | -905.141  | -668.481 |
|            | $Q_{R1}$ [kW]  | 252.952   | 385.495  |
| RC         | $N_{TRC}$      | 8         | 6        |
|            | $N_{B1}$       | 6         | 3        |
|            | $RR_2$         | 0.18      | 0.15     |
|            | $x_{D2}^{BEN}$ | 0.9990    | 0.9990   |
|            | $x_{B2}^S$     | 0.9999    | 0.9999   |
|            | $Q_{C2}$ [kW]  | -545.487  | -539.628 |
|            | $Q_{R2}$ [kW]  | 1011.31   | 1462.17  |
|            | $Q_{C3}$ [kW]  | -746.662  | -1572.6  |

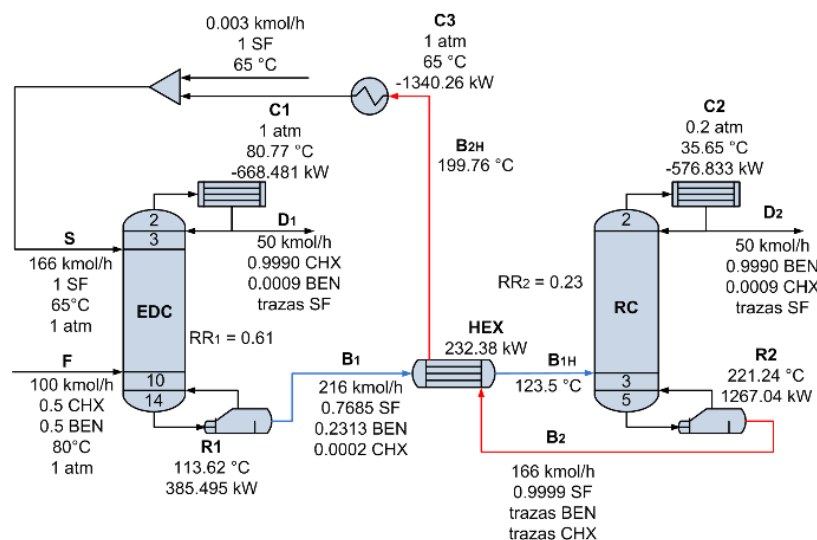
La **Figura 8** muestra los resultados del proceso de EDHI utilizando EG como solvente. En este caso, no existe modificación en las variables de diseño de la RC. En comparación con el proceso de ED, el uso de un intercambiador de calor (HEX) para la transferencia de calor sensible entre las corrientes  $B_1$  y  $B_2$ , permitió calentar al flujo  $B_1$  de 77.64 °C a 88.0 °C, favoreciendo a una disminución energética de 1011.31 kW a 700.323 kW en R2. Mientras que, la corriente  $B_2$  disminuyó su temperatura de 149.17 °C a 115.77 °C, minimizando la energía de enfriamiento de -746.662 kW a -434.82 kW en C3.



**Figura 8.** Esquema del proceso de EDHI utilizando EG como solvente.

La **Figura 9** muestra el proceso de EDHI que utiliza SF como solvente; donde, la integración de calor provoca un aumento de 113.62 °C a 123.5 °C en la temperatura del flujo  $B_1$ , permitiendo una

disminución de 1462.17 kW a 1267.04 kW en R2. Por otra parte,  $RR_2$  adquirió un valor de 0.23, con la finalidad de obtener BEN y SF con purezas del 99.90 mol% y 99.99 mol%, respectivamente; por lo tanto, existe un aumento de -539.628 kW a -576.833 kW en C2. Sin embargo, la transferencia de energía entre  $B_2$  y  $B_1$  provocó que la temperatura del flujo  $B_2$  disminuyera de 221.24 °C a 199.76 °C, minimizando de -1572.6 kW a -1340.26 kW la carga de calor en C3.

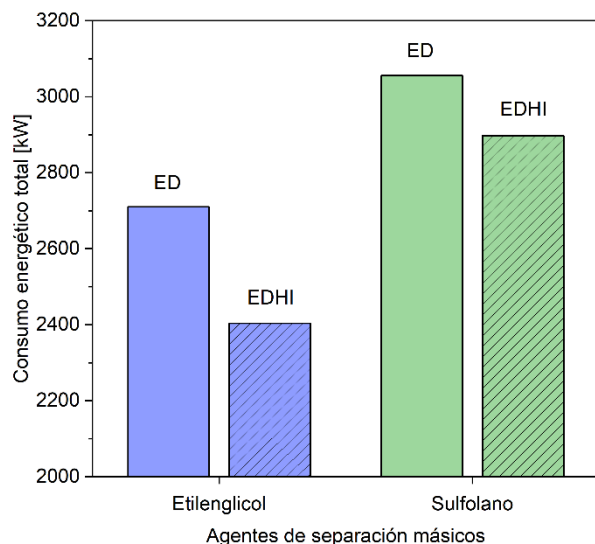


**Figura 9.** Esquema del proceso de EDHI utilizando SF como solvente.

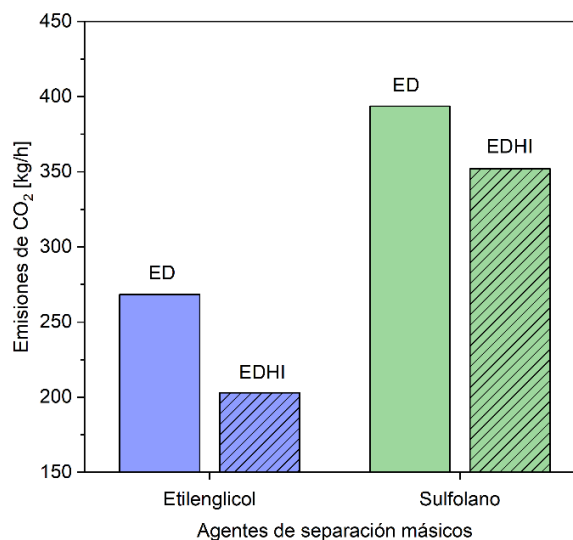
La **Figura 10** muestra una comparativa del consumo energético total de nuestros procesos de ED y EDHI; donde, el proceso de ED que utiliza EG genera un consumo energético total de 2710.30 kW, presentando un ahorro del 11.31 % en comparación con el proceso de ED que utiliza SF. Por otra parte, el proceso de EDHI que utiliza EG presenta un gasto total de energía de 2403.881 kW, mostrando un decrecimiento energético del 11.31 % y del 21.33 % respecto de los procesos de ED que usan EG y SF, respectivamente; mientras que, en comparación con el proceso de EDHI que emplea SF, existe una disminución del 17.04 %. Dichos resultados demuestran que el correcto aprovechamiento del calor sensible del flujo de solvente recuperado ayuda a minimizar el consumo de energía en el rehervidor R2.

La **Figura 11** muestra las emisiones de CO<sub>2</sub> generadas en nuestros procesos de ED y EDHI utilizando EG y SF. Donde, el uso de EG en el proceso de ED genera 268.28 kg/h de CO<sub>2</sub>, presentando una reducción del 31.83 % en comparación con el proceso de ED que usa SF. Por otra parte, el proceso de EDHI usando EG produce 202.89 kg/h, siendo una minimización del 42.35 % en comparación con el uso de SF en el proceso de EDHI. La generación de bajas cantidades de contaminantes atmosféricos al utilizar EG está directamente relacionada con el aumento de la volatilidad relativa del sistema CHX-BEN en la EDC; dado que, a mayor volatilidad, la separación es más fácil, y por ende, se necesita menos energía en el reboiler R1 para separar los componentes. Así mismo, la reducción en la temperatura de ebullición del EG debido al uso de una presión de operación de 0.2 atm en la RC, ocasionó una disminución en la energía de calentamiento en el R2. Adicionalmente, una apropiada integración de calor, calentando la corriente fría  $B_1$ , favoreció a

una reducción del 11.31 % en el consumo de energía, y una minimización del 24.37 % en emisiones de CO<sub>2</sub> respecto del uso de EG en el proceso convencional de ED.

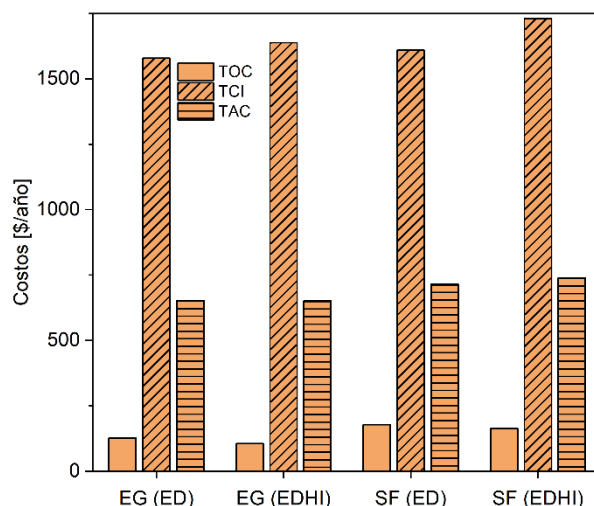


**Figura 10.** Consumo energético de los procesos de ED y EDHI.



**Figura 11.** Emisiones totales de CO<sub>2</sub> generadas en los procesos de ED y EDHI.

En la **Figura 12** se muestra una comparación del TAC de los procesos de ED y EDHI utilizando EG y SF para la purificación de la mezcla CHX-BEN. Los costos totales de operación (TOC) y costos totales de capital de inversión (TCI) de nuestro trabajo fueron determinados utilizando el módulo “Economics” en Aspen Plus V14®. Nuestro proceso de EDHI utilizando EG presentó un TAC de \$651.320x10<sup>3</sup>/año, siendo el menor de todos los procesos; mostrando ahorros del 0.25 % y 8,87 % en comparación con los procesos de ED que utilizan EG y SF solventes, respectivamente. Mientras que, existe una minimización del 11.95 % respecto del proceso de EDHI que utiliza SF. Estos resultados indican que el uso de EG en un proceso de EDHI es viable en los aspectos económicos, energéticos y ambientales.



**Figura 12.** Comparación del TOC, TCI y TAC de los procesos de ED y EDHI.

## CONCLUSIONES

En este trabajo se utilizó EG como alternativa al uso de SF, en el diseño de un proceso de ED para la separación de la mezcla azeotrópica CHX-BEN. Un análisis cualitativo y cuantitativo de los diagramas pseudobinarios y binarios del VLE, así como del cálculo de la volatilidad relativa, respectivamente; demostraron que, el EG es un solvente efectivo para romper el punto azeotrópico e incrementar la volatilidad relativa del CHX a bajas relaciones S/F, esto debido a la alta polaridad y miscibilidad que presenta el BEN en el EG. Posteriormente, el uso de un algoritmo de optimización iterativo, incorporando “Sensitivity Analysis”, permitió establecer los límites inferiores y superiores de las variables de diseño críticas. Esta metodología garantizó la obtención de CHX y BEN con purzas  $\geq 99.90$  mol%, y una recuperación de EG al 99.99 mol% con 123.80 ppm de BEN residual, cumpliendo con los estándares de impurezas establecidos. Se demostró que el uso de EG en procesos de ED permite ahorros energéticos, en el TAC, y en las emisiones de CO<sub>2</sub> del 11.31 %, 8.63 %, y 31.83 %, respectivamente, en comparación con el proceso de ED que utiliza SF. Por otra parte, con el objetivo de aprovechar el calor sensible de las corrientes calientes del proceso de ED, y minimizar las emisiones de contaminantes atmosféricos, un proceso de EDHI es propuesto, reduciendo las emisiones de CO<sub>2</sub> en un 24.37 % respecto del proceso de ED utilizando EG. De acuerdo con la literatura y los resultados mostrados en este trabajo, el uso de EG, así como el diseño de un proceso de EDHI, son opciones económicas y ambientalmente amigables para la desaromatización de CHX grado textil.

## AGRADECIMIENTOS

Los autores de este trabajo agradecen al Tecnológico Nacional de México (TecNM) y al Instituto Tecnológico Superior de Coatzacoalcos (ITESCO) por el soporte institucional proporcionado.

## REFERENCIAS

- [1] Bak, A., Kozik, V., Dybal, P., Kus, S., Swietlicka, A., & Jampilek, J. (2018). Sulfolane: magic extractor or bad actor? Pilot-scale study on solvent corrosion potential. *Sustainability*, 10, 3677. <https://doi.org/10.3390/su10103677>
- [2] Chen, Y., & Mu, T. (2021). Revisiting greenness of ionic liquids and deep eutectic solvents. *Green Chemical Engineering*, 2, 174-186. <https://doi.org/10.1016/j.gce.2021.01.004>
- [3] Contreras-Zarazúa, G., Vázquez-Castillo, J. A., Ramírez-Márquez, C., Pontis, G. A., Segovia-Hernández, J. G., & Alcántara-Ávila, J. R. (2017). Comparison of intensified reactive distillation configurations for the synthesis of diphenyl carbonate. *Energy*, 135, 637-649. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2017.06.156>

- [4] Cruz Valdez, J. A., Patiño-Herrera, R., Avilés Martínez, A., & Pérez, E. (2024). Separation of the cyclohexane-benzene mixture by the extractive distillation process using ethylene glycol as a solvent. *Chemical Engineering and Processing*, 196, 109686. <https://doi.org/10.1016/j.cep.2024.109686>
- [5] Cruz Valdez, J. A., Patiño-Herrera, R., Avilés Martínez, A., Barajas-Villarruel, L. R., & Pérez, E. (2025). Energy-economic purification of n-hexane from low benzene concentrations via extractive distillation with propylene carbonate as solvent: a comparative study with liquid–liquid extraction processes. *Separation and Purification Technology*, 36, 131348. <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2024.131348>
- [6] Faiq, N. F., Ghifari, A. N., Hafizh, D., Wafi, M. A., & Failasofi, M. N. (2025). Improving cyclohexane yield from hydrogenation benzene with a modified multistage separation design. *Journal of Chemical Engineering Research Progress*, 2(1), 1-13. <https://doi.org/10.9767/jcerp.20295>
- [7] Foppa, L., & Dupont, J. (2015). Benzene partial hydrogenation: advances and perspectives. *Chemical Society Reviews*, 44, 1886-189. <https://doi.org/10.1039/C4CS00324A>
- [8] Gawlig, C., Schindler, S., & Becker, S. (2020). One-pot conversion of cyclohexane to adipic acid using a  $\mu$ 4-oxido-copper cluster as catalyst together with hydrogen peroxide. *European Journal of Inorganic Chemistry*, 2020(3), 248-252.
- [9] Li, L., Tu, Y., Sun, L., Hou, Y., Zhu, M., Guo, L., Li, Q., & Tian, Y. (2016). Enhanced efficient extractive distillation by combining heat-integrated technology and intermediate heating. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 52(32), 8837-8847. <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.6b01152>
- [10] Liu, H., Fanf, R., Li, Z., & Li, Y. (2015). Solventless hydrogenation of benzene to cyclohexane over a heterogeneous Ru-Pt bimetallic catalyst. *Chemical Engineering Science*, 122, 350-359. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2014.09.050>
- [11] Sun, L., Wang, Q., Li, L., Zhai, J., & Liu, Y. (2014). Design and control of extractive dividing wall column for separating benzene/cyclohexane mixtures. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 53(19), 8120-8131. <https://doi.org/10.1021/ie500291a>
- [12] Yang, A., Su, Y., Chieng, I. L., Jin, S., Yan, C., Wei, S., & Shen, W. (2019). Investigation of an energy-saving double-thermally coupled extractive distillation for separating ternary system benzene/toluene/cyclohexane. *Energy*, 186, 115756. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2019.07.086>
- [13] You, X., Rodríguez-Donis, I., & Gerbaud, V. (2016). Reducing process cost and CO<sub>2</sub> emissions for extractive distillation by double-effect heat integration and mechanical heat pump. *Applied Energy*, 166, 128-140. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2016.01.028>

- [14] Zhang, W., Zhao, W., Ren, S., Hou, Y., & Wu, W. (2023). Highly efficient separation of benzene + cyclohexane mixtures by extraction combined extractive distillation using imidazolium-based dicationic ionic liquids. *Green Chemical Engineering*, 4, 312-323. <https://doi.org/10.1016/j.gce.2022.07.003>