



UNIVERSIDAD DE CONCEPCIÓN
FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS



APLICACIÓN DE ECUACIONES DE ESTADO PARA LA
DETERMINACIÓN DE SOLUBILIDAD DE MOLÉCULAS DE
INTERÉS FARMACOLÓGICO

Memoria de Título para optar al Título Profesional de Químico y al Grado
Académico de Licenciado en Química

Carlos Alberto Morales Díaz
Mayo 2018

Profesor Director

Dr. Andrés Mejía Matallana
Departamento de Ingeniería Química
Facultad de Ingeniería

Profesor Co-Director

Dr. José Matías Garrido Acuña
Departamento de Ingeniería Química
Facultad de Ingeniería

Resumen

Las vitaminas y sus derivados forman una amplia gama de compuestos químicos trascendentes tanto por su rol biológico como por sus aplicaciones en áreas tan diversas como el sector agrícola, alimentario, y medicinal. Dada la sensibilidad de las áreas de aplicación de estos compuestos, se debe garantizar que el proceso purificación de estas sustancias no altere su identidad química ni tampoco queden cantidades residuales de solvente potencialmente nocivo. En tal sentido, la aplicación de dióxido de carbono supercrítico emerge como una alternativa atractiva a los solventes convencionales debido a que es inocuo, a su baja temperatura crítica que evita la descomposición de solutos termolábiles, su alto poder solvente debido a las densidades tipo líquido, baja viscosidad y alta difusividad, entre otras características.

En este trabajo de memoria de título, se estudió la solubilidad de la vitamina K₃ y cinco derivados en dióxido de carbono supercrítico mediante el uso de ecuaciones de estado. En primer lugar se usó la ecuación de estado cúbica Peng-Robinson, muy utilizada en termodinámica aplicada por su simplicidad y poder predictivo y, por otra parte, una ecuación de estado molecular basada en la teoría estadística del fluido asociado (SAFT), que posee un sólido respaldo teórico y cuyos parámetros moleculares poseen una interpretación física. En base a ello, se estudió la capacidad predictiva de las ecuaciones de estado y además la posibilidad de relacionar el impacto de los parámetros moleculares en el comportamiento de la solubilidad de los sistemas de interés. Todo lo anterior, requiere disponer de propiedades termofísicas que son indispensables en el modelado de solubilidades mediante de ecuaciones de estado y que por lo general no se encuentran reportadas en la literatura. Es por ello que también se propusieron diversas metodologías de contribución de grupos para estimar los valores de aquellas propiedades en que la información experimental es inexistente o poco precisa.

Las principales conclusiones de este trabajo son:

- La ecuación de estado SAFT es superior en la predicción de solubilidades de derivados de vitamina K₃, comparada con la ecuación de estado Peng-Robinson.
- Para un grupo de tres derivados de vitamina K₃, se determinó que existe una relación entre la solubilidad y los parámetros moleculares SAFT.
- En ausencia de información experimental, las metodologías de contribución de grupos utilizadas en este trabajo constituyen un camino apropiado para la obtención de propiedades termofísicas necesarias para el modelado de solubilidad.