

DISEÑO COMPUTACIONAL DE AGENTES EXTRACTORES PARA LA SEPARACIÓN DE COMPUESTOS INHIBIDORES EN LA FERMENTACIÓN ALCOHOLICA

Juan Carlos Serrato, Luis Caicedo, Jonatan Gómez, Oficina 320, Edificio 453, Ciudad Universitaria, Cra 30 N 45-03, Bogotá, Colombia, 057-1-3165617, serratojc@yahoo.com.

Palabras clave: extracción, diseño computacional, inhibidores.

Introducción. La producción biotecnológica de productos como el etanol se encuentra inhibida por diferentes compuestos como los ácidos láctico y acético. Estos limitan la recirculación de las vinazas, que ha resultado ser una forma bastante exitosa para mejorar la economía del proceso productivo, así como para disminuir los impactos ambientales del mismo.

La extracción líquido-líquido es una técnica que permite la separación de estos compuestos, de una forma práctica, de bajo costo y con una alta eficiencia.

Sin embargo, uno de los problemas claves en el estudio de esta operación, que aún no tiene una solución apropiada, es la selección de los agentes de extracción, ya que éstos deben cumplir varias condiciones para que sean adecuados desde el punto de vista técnico y económico. Las principales condiciones son: bajo costo, elevada capacidad de extracción, alta selectividad y baja toxicidad. Desafortunadamente, los agentes de extracción que se han empleado presentan niveles de toxicidad y capacidades de extracción poco satisfactorias, así como un costo elevado, lo que restringe su utilización a escala industrial. Por ello es necesario encontrar herramientas que ayuden a seleccionar agentes extractores que cumplan las condiciones mencionadas, para que el proceso tenga la mayor factibilidad posible.

Metodología. Para la solución de la problemática esbozada anteriormente, se decidió emplear la metodología de diseño molecular asistido por computador (CAMD). Esta técnica se puede entender como un proceso de optimización que busca la mejor combinación de grupos, es decir la mejor molécula, que pueda cumplir algún objetivo en un proceso dado, incluyendo algunas restricciones que pueden ser físicas, de factibilidad, de proceso, entre otras.

Para esta optimización se empleó un nuevo algoritmo genético adaptativo que no presenta algunas limitaciones encontradas en trabajos previos como la necesidad de fijar manualmente parámetros, entre otras

El programa necesita la estimación de propiedades como los coeficientes de actividad, para lo cual se empleó el modelo Unifac Dortmund, para la estimación del punto de ebullición, el punto de fusión, y la energía libre de Gibbs de formación se usó el método de contribución de grupos de Constantinou y Gani, y para la densidad se utilizó la última versión del método GCVOL.

Resultados y discusión. A continuación se muestran las moléculas encontradas como las mejores opciones para ser utilizadas como agentes extractores en las aplicaciones mencionadas anteriormente.

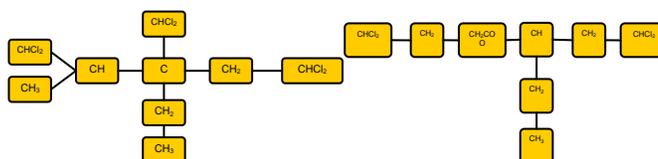


Fig. 1. Mejores moléculas diseñadas para la extracción de ácido acético.



Fig. 2. Mejores moléculas diseñadas para la extracción de ácido láctico.

Las moléculas diseñadas para ácido acético contienen principalmente grupos clorados y ésteres, aunque también se encuentran los grupos éter, aldehído, ácido y amida. Todos ellos grupos reportados por Cusack (1) como favorables para la extracción, y que ya han sido reportados por Harper (2) y Wang y Achenie (3).

En el caso del ácido láctico no existen resultados comparables en la literatura, pero se resalta la presencia de los grupos aldehído y los clorados y en menor medida los grupos ácido, éter, éster, alcohol y amida.

Conclusiones. Es posible emplear la metodología de diseño computacional para encontrar moléculas aplicables en la separación de compuestos inhibidores de la fermentación alcohólica.

Agradecimiento. Los autores agradecen la financiación brindada por la Universidad Nacional de Colombia.

Bibliografía.

1. Cusack, R.W. Karr, A., (1991). A fresh look at liquid-liquid extraction. Part 3. Extractor design and specification. *Chem. Eng.*: p. 112-119.
2. Harper, P.M., et al.. (1999). Computer-aided molecular design with combined molecular modeling and group contribution. *Fluid Phase Equilibria*. vol (158-160) p. 337-347.
3. Wang, Y. Achenie, L.E.K. (2002). A hybrid global optimization approach for solvent design. *Comp. and Chem. Eng.* Vol (26) p. 1415-1425