



UNIVERSIDAD
NACIONAL
DE LA PLATA



VI Jornadas en Ciencias Aplicadas "Dr. Jorge J. Ronco"

ESTUDIO DEL EQUILIBRIO QUÍMICO DE LA REACCIÓN DE CETALIZACIÓN DE GLICEROL CON ACETONA EN FASE LÍQUIDA

Federico M. Perez, Francisco Pompeo, Nora N. Nichio

*CINDECA, Facultad de Ciencias Exactas y Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de La Plata -
CONICET – CICPBA, 47 n° 257, 1900, La Plata, Argentina.
federico.perez@ing.unlp.edu.ar*

Palabras claves: BIOMASA, GLICEROL, SOLKETAL, EQUILIBRIO, CETALIZACIÓN

RESUMEN

La síntesis de solketal es una de las rutas innovadoras de valorización de glicerol, y la simulación de la reacción requiere del conocimiento de las propiedades termodinámicas de los compuestos involucrados. No obstante, algunas de ellas aún no se encuentran disponibles en la literatura ni en los programas comerciales de simulación. Además, el estudio del equilibrio termodinámico fue llevado a cabo, hasta el momento, por pocos autores de forma experimental, lo que puede conducir a errores causados, por ejemplo, por limitaciones a la transferencia de materia o por la desactivación de los catalizadores.

En el presente trabajo se empleó el método predictivo por contribución de grupos de Růžička-Domalski para obtener las expresiones del calor específico en función de la temperatura de todos los compuestos involucrados en la reacción de síntesis de solketal. Para calcular la entalpía y entropía de formación, se empleó el método de Domalski-Hearing y, posteriormente, se obtuvo la expresión para la entalpía de reacción en función de la temperatura. Finalmente, empleando la ecuación de Van't Hoff, se determinó la expresión



UNIVERSIDAD
NACIONAL
DE LA PLATA



VI Jornadas en Ciencias Aplicadas “Dr. Jorge J. Ronco”

para la constante de equilibrio en función de la temperatura. Conocida esta expresión, se calculó la composición del sistema en el equilibrio a diferentes presiones, temperaturas, relación molar acetona/glicerol y contenidos iniciales de agua. Debido a la no idealidad de la fase líquida, se introdujeron en los cálculos los coeficientes de actividad, los cuales fueron determinados por el método UNIFAC. Los valores teóricos de conversión obtenidos fueron comparados con los valores reportados experimentalmente en la literatura.