

Table of contents

Ésteres Metílicos de Ácidos Grasos como Disolventes Verdes Un Análisis Comparativo de Derivados de Palma, Soja y Girasol 1. Introducción: El Paradigma de los Disolventes Verdes La ingeniería química moderna atraviesa una transición fundamental impulsada por los principios de la Química Verde. La sustitución de disolventes petroquímicos volátiles (VOCs), a menudo tóxicos e inflamables, por alternativas biobasadas es una prioridad. En este contexto, los Ésteres Metílicos de Ácidos Grasos (FAMES), comúnmente conocidos en el sector energético como biodiésel, emergen en el sector químico como disolventes de alto punto de ebullición, baja toxicidad y biodegradabilidad inherente.

Esta disertación analiza los metil ésteres derivados de tres oleaginosas principales: Palma (*Elaeis guineensis*), Soja (*Glycine max*) y Girasol (*Helianthus annuus*), evaluando su síntesis, propiedades fisicoquímicas y comportamiento termodinámico mediante parámetros de solubilidad.

2. Métodos de Síntesis y Purificación La obtención de estos disolventes se realiza principalmente mediante la transesterificación de los triglicéridos presentes en el aceite refinado.

2.1. La Reacción de Transesterificación La reacción general implica la sustitución del grupo glicerol del triglicérido por tres moléculas de metanol, produciendo glicerina como subproducto y tres moléculas de metil ésteres.

Triglicérido + 3CH₃OH Catalizador

Glicerina + 3R-COOCH₃ (FAME) Condiciones de operación: Típicamente se opera a presión atmosférica y 60°C (cerca del punto de ebullición del metanol).

Catalizadores: Se prefieren catalizadores homogéneos básicos (NaOH, KOH o metóxidos) por su cinética rápida (98% de conversión en < 1 hora). En materias primas con alta acidez, se requiere una esterificación ácida previa para evitar la saponificación.

2.2. Limpieza y Refino (Downstream Processing) Para que el FAME actúe como un disolvente de grado técnico o analítico, la purificación es crítica:

Separación de fases: Decantación gravitacional para retirar la glicerina (fase pesada).

Lavado: Uso de agua acidulada o “lavado en seco” (resinas de intercambio iónico o silicatos de magnesio) para eliminar restos de catalizador, jabones y metanol libre.

Secado: Eliminación de humedad mediante vacío y calentamiento (“flash evaporation”) para prevenir la hidrólisis del éster.

3. Composición en Ácidos Grasos: La Base Estructural Las propiedades del disolvente dependen intrínsecamente del perfil de ácidos grasos del aceite de origen.

Materia Prima Ácido Palmítico (C16:0) Ácido Oleico (C18:1) Ácido Linoleico (C18:2) Características Estructurales Palma ~44% ~39% ~10% Alto contenido saturado. Mayor punto de fluidez. Estabilidad oxidativa alta. Soja ~11% ~23% ~54% Predominio poliinsaturado. Menor viscosidad. Mayor susceptibilidad a la oxidación. Girasol ~6% 20-80%* 20-70%* *Variable según si es variedad “Alto Oleico”. Excelente fluidez en frío.

Exportar a Follas de cálculo

Nota del Ingeniero: La presencia de dobles enlaces (insaturaciones) en la soja y el girasol reduce el punto de fusión, haciendo que el disolvente sea líquido a menores temperaturas, pero aumenta la reactividad con el oxígeno (potencial polimerización).

4. Propiedades Fisicoquímicas Críticas 4.1. Densidad y Viscosidad A diferencia de los disolventes clorados densos, los FAMES tienen densidades en el rango de 0.87 - 0.89 g/cm³ a 25°C.

Viscosidad: Es un parámetro crucial. Mientras que el aceite crudo tiene viscosidades de 30-50 cSt, la transesterificación reduce este valor drásticamente a 3.5 - 4.5 cSt (a 40°C). Esto mejora la hidrodinámica y la capacidad de penetración del disolvente en matrices complejas (limpieza de piezas, formulación de tintas).

El metil éster de palma, al ser más saturado, tiende a ser ligeramente más viscoso y puede presentar problemas de flujo a temperaturas inferiores a 15°C (alto Cloud Point).

4.2. Tensión Superficial y Humectabilidad Los metil ésteres exhiben tensiones superficiales moderadas (~28-32 mN/m). Esto es superior a los hidrocarburos alifáticos (como el hexano ~18 mN/m) pero inferior al agua (72 mN/m). Esto les confiere una excelente capacidad de humectación sobre superficies metálicas y poliméricas, facilitando procesos de limpieza y decapado.

5. Termodinámica de Soluciones: Parámetros de Hansen y Miscibilidad Para predecir qué pueden disolver estos ésteres (polímeros, resinas, contaminantes), utilizamos los Parámetros de Solubilidad de Hansen (HSP), descomponiendo la energía de cohesión en tres componentes: δ (dispersión), p (polaridad) y h (puentes de hidrógeno).

Valores típicos estimados para FAMES (unidades en MPa^{1/2}):

- δ (Dispersión): ~15.8 - 16.5 (Afinidad con cadenas hidrocarbonadas).
- p (Polaridad): ~2.5 - 3.0 (Debido al grupo éster carbonilo).
- h (Puentes de H): ~4.5 - 6.0 (Interacciones moderadas).

Miscibilidad:

Solubles en: Hidrocarburos (hexano, tolueno), disolventes clorados, éteres y alcoholes de cadena larga.

Insolubles en: Agua (altamente hidrofóbicos).

Comportamiento: Se sitúan en la región “límitrofe” del espacio de Hansen, actuando como excelentes “co-solventes” o disolventes de cola (tail solvents) para resinas alquídicas, poliestireno y PVC plastificado.

6. Utilidades y Aplicaciones Industriales Gracias a su alto punto de inflamación ($>130^{\circ}\text{C}$) y baja presión de vapor, estos disolventes se clasifican como no-VOC (o VOC exentos en algunas regulaciones), lo que los hace ideales para espacios confinados.

Limpieza Industrial y Desengrase:

Sustitutos directos del white spirit o queroseno.

El metil éster de Soja es muy utilizado en la eliminación de asfalto y betunes gracias a su estructura insaturada que interactúa bien con hidrocarburos pesados.

Agroquímicos:

Actúan como portadores (carriers) en concentrados emulsionables para pesticidas y herbicidas, mejorando la penetración en la hoja (efecto adyuvante) y reduciendo la deriva por evaporación.

Tintas y Recubrimientos:

El metil éster de Girasol se valora en tintas de impresión offset por su baja viscosidad y buena solvencia de resinas, permitiendo una limpieza eficiente de rodillos sin dañar el caucho.

Recuperación de Polímeros:

Su capacidad para hinchar ciertos polímeros permite su uso en reciclaje químico o limpieza de moldes de inyección.

7. Conclusión Los disolventes basados en ésteres metílicos de palma, soja y girasol representan una convergencia exitosa entre la química agrícola y la ingeniería de procesos. Mientras que el éster de palma ofrece una robustez oxidativa ideal para procesos a temperatura elevada, los ésteres de soja y girasol destacan en aplicaciones a temperatura ambiente donde la viscosidad y la solvencia de resinas son prioritarias.

Su modelado termodinámico (mediante UNIFAC o Hansen) confirma su rol como sustitutos viables de disolventes petroquímicos aromáticos y alifáticos, ofreciendo un perfil de seguridad superior y una huella de carbono reducida.

¿Te gustaría profundizar en el cálculo? Como siguiente paso, puedo proporcionarte:

Un script de Python que utilice la teoría de contribución de grupos (tipo Joback o UNIFAC) para estimar las propiedades (viscosidad, densidad) de una mezcla específica de ésteres.

Una tabla comparativa detallada de los Parámetros de Hansen de estos aceites frente a disolventes tradicionales como el Xileno o el D-limoneno.

¿Cuál te resulta más útil para tu investigación?