

XXII CONGRESO ARGENTINO DE FISICOQUÍMICA Y QUÍMICA INORGÁNICA LA PLATA 2021

ESTUDIO PREDICTIVO-EXPERIMENTAL DEL COEFICIENTE DE PARTICIÓN DE TRAZADORES QUÍMICOS

L. Fernández y C. Funes, Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional del Comahue, Buenos Aires 1400. (8300) Neuquén, Argentina.

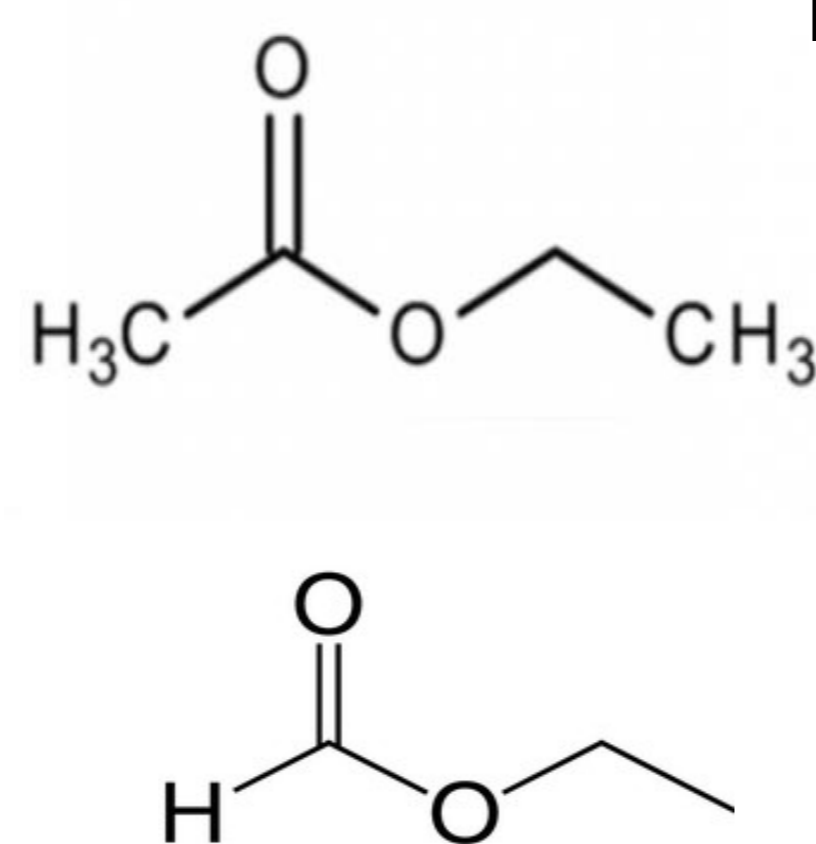
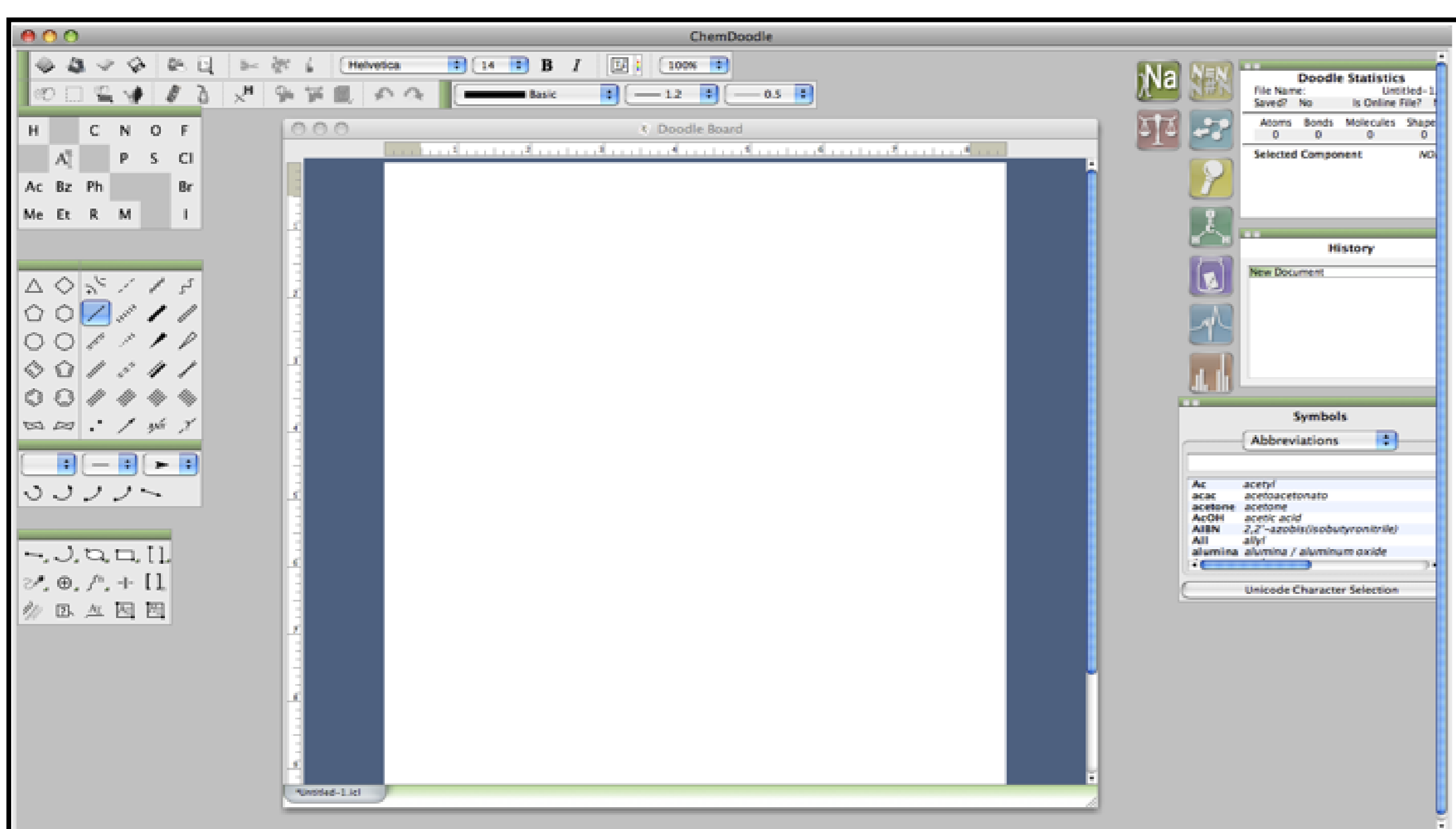
P.N. Esteves, IITCI, Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional del Comahue, CONICET, Buenos Aires 1400. (8300) Neuquén, Argentina.

Introducción

A medida que aumenta la complejidad y tamaño de una molécula se incrementa la dificultad para obtener datos experimentales de las propiedades fisicoquímicas, para lo cual se desarrollan los métodos de estimación. En este trabajo se determinó el coeficiente de partición octanol/agua (K_{ow}) de 6 (seis) trazadores químicos mediante la aplicación de dos software comerciales, EPI y Chemdoodle, los cuales pueden representar el comportamiento de las distintas fases en solución. Estos simuladores nos permiten predecir valores de K_{ow} de sustancias químicas comunes en el sistema n-octanol/agua, comparar con los datos experimentales y armar una base de datos sobre los K de los trazadores químicos adecuados para la industria petrolera y su campo de aplicación.

La obtención de valores necesarios para conocer las propiedades fisicoquímicas que permiten evaluar un compuesto, ha sido una labor costosa debido a los recursos. Para solucionar estos problemas hace más de 200 años se emplean métodos de contribución de grupos para la determinación de propiedades tales como el Coeficiente de Partición (K). Los trazadores evaluados fueron dos alcoholes, 2-fluorobencil alcohol (2-FBOH) y 3,4-difluorobencil alcohol (3,4-FBOH), 2 cetonas, metil etil cetona (MEO) y metil isobutil cetona (MIO) y 2 ésteres, formiato de etilo (FEt) y acetato de etilo (AEt), en el sistema octanol-agua destilada.

El software Chemdoodle posee un funcionamiento similar a EPI, se ingresa el CAS, Smiles, Nomenclatura por IUPAC o simplemente dibujando el compuesto y el software realiza los restantes cálculos. Esta creado como una biblioteca virtual de distintos componentes químicos.



Ambos software han sido de gran ayuda para la determinación de K_{ow} y de utilidad en la industria petrolera, como base de datos para determinar si el trazador es afín al agua o al petróleo y su posterior evolución para un ensayo en campo. Todos los datos obtenidos fueron comparados con datos experimentales en laboratorio.

Resultados

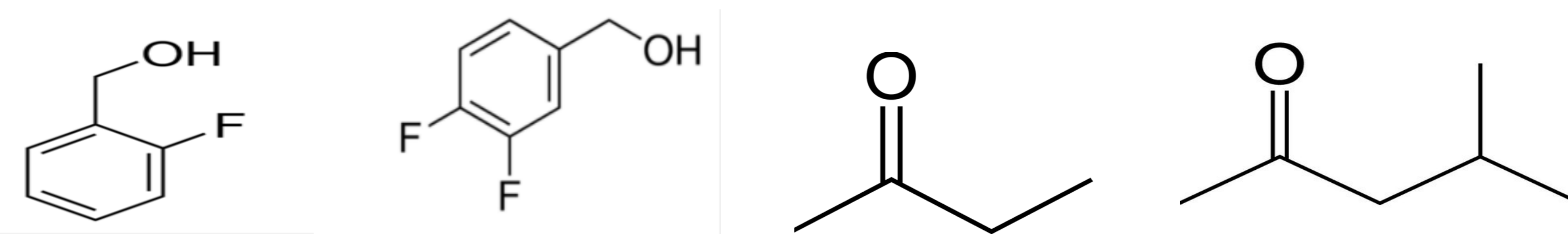
En la siguiente tabla se indican los resultados, por un lado de los valores de referencia obtenidos de experiencias y valores de bibliografía. Por otro lado, los valores obtenidos a través de los software utilizados.

Trazadores Químicos	Valores de Referencia Log(K_{ow}) a 25°C	Software	
		EPI	Chemdoodle
2-FBOH	1,1 (alcohol bencílico)	1,28-1,31	1,37
3,4-FBOH	1,1 (alcohol bencílico)	1,48	1,50
MEO	0,3	0,26-0,29	0,43
MIO	1,9	1,16-1,31	1,09
FEt	0,23	0,32	0,70
AEt	0,73	0,86	0,94

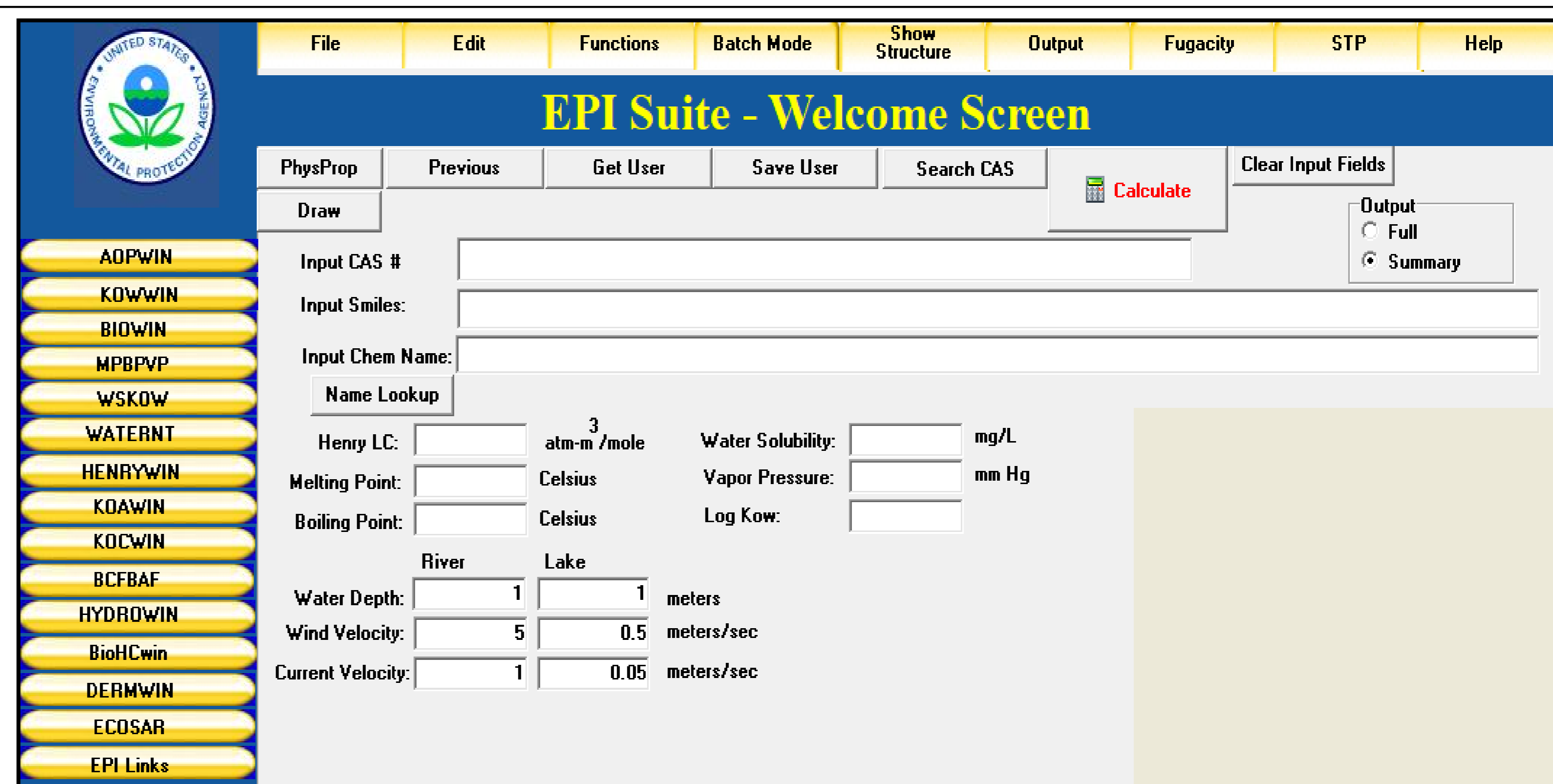
Es importante destacar que no se encontraron valores de referencia de los alcoholes estudiados en las hojas de seguridad utilizadas como fuente. Fueron determinados valores experimentales de K_{ow} a 25° C mediante el método Batch estándar los cuales están indicados como valores de referencia. Los resultados fueron, para el 2-FBOH de $\text{Log}(K_{ow})=1,11 \pm 0,14$ y para el FEt de $\text{Log}(K_{ow})=0,21 \pm 0,02$.

Conclusiones

A partir de los resultados obtenidos se concluye que la técnica Batch a utilizar dará resultados de confianza si se realiza con todos los requisitos exigidos por la misma. Los valores experimentales obtenidos de K_{ow} de los trazadores estudiados para el sistema octanol/agua destilada fueron comparables al valor de referencia encontrado en la literatura, al igual que los valores obtenidos a partir de software predictivos. Se espera volver al laboratorio a realizar los ensayos experimentales para finalizar su estudio en un futuro cercano. Con los métodos de contribución de grupos, se pueden estimar propiedades gracias a la ayuda de los programas EPI Suite y Chemdoodle, ya que estos métodos facilitan identificar cada parte que conforma la molécula, lo que hace más confiables los resultados. La confiabilidad de los resultados, ayuda a mejorar los niveles de predicción sobre los valores de K_{ow} para cada uno de los trazadores químicos, gracias a la gran base de datos dentro de los programas EPI Suite y Chemdoodle, lo cual permite realizar una evaluación previa del trazador, para su posterior utilización en ensayos de campo bajo condiciones de reservorio.



El software EPI (Environmental protection agency) está desarrollado para el estudio toxicológico y protección del ambiente, en el cual se colocan valores de entrada como el CAS, Smiles, Nombre del Químico o propiedades y el software calcula los datos restantes. Dicho conjunto de programas se utiliza para la estimación de propiedades fisicoquímicas y destino ambiental desarrollado por la oficina de prevención de la contaminación de la agencia de protección ambiental de EEUU y tóxicos de Syracuse Research Corporation (SRC) para detectar nuevas sustancias químicas que carecen de datos experimentales basados en los cálculos. Los módulos dentro de este software EPI Suite tiene información detallada sobre como se hacen las predicciones que brindan los resultados de la evaluación de cada propiedad. Esta herramienta se utiliza con la ayuda de la base de datos suministrada por el programa de EPI Suite, en donde solo se debe introducir el nombre del compuesto a investigar y realizar la posterior búsqueda.



Las características de EPI Suite están vinculadas a la base de datos PHYSPROP mantenida por la Corporación de Investigación de Syracuse, que contiene datos de medición en más de 40.000 productos químicos. La estructura química se puede introducir utilizando tres medios. Con el número de registro del CAS.EPI Suite, la cual hace referencia al número estándar a nivel mundial asignado a cada uno de los compuestos. Esta división de American Chemical Society, está autorizada a nivel mundial, a encontrar, recopilar y organizar toda la información sobre sustancias químicas de forma pública. Y la notación Smiles o Sistema de entrada molecular de línea simplificado, es una especificación en forma de notación lineal que ayuda a describir la estructura de las moléculas químicas.