

**Título de la Tesis: “Diseño molecular y otras estrategias para la selección de solventes y co-solventes en procesos de separación”**

**Doctorado en Ingeniería Química**

**Autor: Scilipoti, José Antonio**

**Director: Dr. Esteban Brignole**

**Resumen**

La selección de solventes para procesos de separación resulta desde hace mucho tiempo un problema de gran relevancia para las industrias química, petroquímica, farmacéutica, alimenticia, etc., y ha dado origen a áreas de investigación y desarrollo, como la del Diseño Molecular de Solventes.

Una familia de problemas de separación de gran interés está vinculada a la separación de productos derivados de la hidrólisis de biomasa lignocelulósica debido a que una gran cantidad de estos compuestos resultan inhibidores de la actividad de enzimas y microorganismos involucrados en el proceso de fermentación alcohólica. En general, la extracción con solventes de estos compuestos es una alternativa factible para el proceso de detoxificación. En particular, el problema de extracción líquido-líquido posee características especiales debido a que en este caso el producto de interés es el refinado (caldo de fermentación) y no el extracto. El extracto obtenido es una mezcla de compuestos parafínicos, heterocíclicos y aromáticos que provienen fundamentalmente de la degradación de la lignina y de la hemicelulosa. En consecuencia la selección de solventes es complicada por el gran número y variedad de los compuestos que deben ser recuperados y por la necesidad de una eficiente recuperación del solvente tanto del extracto como del refinado. Por otra parte el solvente seleccionado debe ser compatible con las restricciones ambientales actuales.

En esta tesis se enfrenta el problema de búsqueda y selección de solventes para el proceso de detoxificación en biorrefinerías estudiando la combinación de un enfoque de diseño molecular asistido por computadoras, basado en el análisis de estructuras moleculares y de las interacciones entre grupos, con una sistematización de la evolución del comportamiento de fases de series de compuestos con miembros de distintas familias moleculares.

Debido a la presencia de la gran cantidad de compuestos asociativos contenidos en la mezcla proveniente del hidrolizado de material lignocelulósico, se desarrolló una plataforma computacional para la estimación de propiedades de mezcla, acoplada al algoritmo de síntesis de estructuras moleculares, basada en el modelo termodinámico A-UNIFAC.

**Título de la Tesis: “Diseño molecular y otras estrategias para la selección de solventes y co-solventes en procesos de separación”**

**Doctorado en Ingeniería Química**

**Autor: Scilipoti, José Antonio**

**Director: Dr. Esteban Brignole**

Considerando la gran variedad de compuestos aromáticos inhibidores de la fermentación, se extendieron las reglas de combinación y de factibilidad en la síntesis de estructuras moleculares ramificadas a la familia de compuestos aromáticos.

Además, en esta tesis se amplió el rango de condiciones a cubrir por los modelos a contribución grupal utilizados y se mejoró la capacidad predictiva de propiedades físicas de compuestos puros. Finalmente, desarrolló una nueva metodología de diseño y selección de solventes para llevar a cabo síntesis orgánicas.

**Título de la Tesis: “Diseño molecular y otras estrategias para la selección de solventes y co-solventes en procesos de separación”**

**Doctorado en Ingeniería Química**

**Autor: Scilipoti, José Antonio**

**Director: Dr. Esteban Brignole**

**Abstract**

Solvent selection for separation processes has been from a long time a problem of great relevance for chemical, petrochemical, pharmaceutical, food industry, etc., and it has given rise to research and development like Molecular Design of Solvent.

A very important family of separation problems is linked to the separation of biomass products derived because a large amount of these compounds are enzymes and microorganisms activity inhibitors involved in the fermentation processes. Generally, extraction with solvents of these compounds is a feasible alternative for the detoxification process. In particular, the liquid-liquid extraction problem has special features because in this case the interest product is the refined (fermentation broth) and not the extract. The extract obtained is a mixture of paraffinic, heterocyclic and aromatic compounds originating from the degradation of lignin and hemicellulose. Consequently the selection of solvents is complicated by the large number and variety of compounds to be recovered and by the need of an efficient solvent recovery from both extract and refining. In addition, the selected solvent must be compatible with current environmental restrictions.

This thesis addresses the problem of solvents selection for the detoxification process in biorefineries studying the combination of a computer-aided molecular design approach, based on the analysis of molecular structures and interactions between groups, with a systematization of the evolution of the phase behavior of compounds series with members of different molecular families.

Due to the large amount of associative compounds in the hydrolysate, a computational platform was developed for estimating properties of mixture, coupled to molecular structures synthesis algorithm, based on the A-UNIFAC thermodynamic model.

Considering the large variety of aromatics inhibitors, the combination and feasibility rules in the synthesis of branched molecular structures were extended to the family of aromatic compounds.

Furthermore, in this thesis the range of conditions to cover by the group contribution models used was extended and the predictive ability of physical properties of pure

**Título de la Tesis: “Diseño molecular y otras estrategias para la selección de solventes y co-solventes en procesos de separación”**

**Doctorado en Ingeniería Química**

**Autor: Scilipoti, José Antonio**

**Director: Dr. Esteban Brignole**

compounds was improved. Finally, we developed a new methodology of molecular design and selection of solvents to carry out organic synthesis.

**Título de la Tesis: “Diseño molecular y otras estrategias para la selección de solventes y co-solventes en procesos de separación”**

**Doctorado en Ingeniería Química**

**Autor: Scilipoti, José Antonio**

**Director: Dr. Esteban Brignole**