

Vol. 105 N°1

ISSN 2545-8655

**ANALES DE LA
ASOCIACIÓN QUÍMICA
ARGENTINA**

Enero-Junio 2018



Anales de la Asociación Química Argentina

Editada desde 1913

Editora en Jefe

Dra. Susana Larrondo

Co-Editora

Dra. Noemí E. Walsoe de Reca

Comité Editorial

Dra. Alicia Fernández Cirelli

Dra. Alicia B. Pomilio

Dr. Angel Alonso

Dr. Alberto L. Capparelli

Dr. Eduardo A. Castro

Dra. Norma B. D'Accorso

Dr. Arturo Vitale

Comité Académico Asesor

Dra. Marta Litter (CNEA) – Dr. Gustavo Romanelli (CINDECA) – Dra. Alicia Penissi (IHEM)

Dr. Carlos O. Della Védova (CEQUINOR) – Dr. Roberto J. J. Williams (INTEMA)

Dra. Rosa Erra-Balsells (CIHIDECAR) – Prof. Rolando A. Spanevello (IQUIR)

Dra. Aida Ben Altabef (INQUINOA) – Dr. Jose Luis Crudo (CNEA)

Comité Científico Internacional

Prof. Sylvio Canuto (Brazil) - Prof. Juan M. Diez Tascón (Spain)

Prof. José Elguero (Spain) Prof. Ivan Gutman (Serbia) - Prof. Arsenio Muñoz de la Peña (Spain)

Prof. Emeritus Francisco Tomás Vert (Spain)

Asistente Editorial

Lic. Cristina E. Corbellani

e-mail: anales.aqa@gmail.com

Registro de Propiedad Intelectual N° 164.756

Asociación Química Argentina

Sánchez de Bustamante 1749, 1425 Buenos Aires, Argentina

TE/FAX: 54-11-4822-4886

<http://www.aqa.org.ar>

Contenido

Vol. 105 N°1, Enero-Junio de 2018

Editorial.....	pp. <i>i</i>
Trabajos Regulares	
Desestabilización De Emulsiones Petróleo/Agua Mediante La Aplicación Del Biopolimero Quitosano..... <i>John F. Pérez-Calderón, María V. Santos, Noemí E. Zaritzky</i>	pp. 1-13
Formulaciones Poliuretánicas Utilizadas Como Inhibición Y Propulsante Compuesto En Vectores: Caracterización Y Modificación De La Cinética De Curado (“Pot-Life”) Por Distintas Cargas..... <i>Pablo Ross, Javier A. Bocchio, Guillermo Sevilla, Javier C. Quagliano</i>	pp. 14-23
Theoretical Modelling Of Chiral Modifier/Substrate Interaction For Enantioselective Hydrogenation Of P-Isobutylacetophenone..... <i>Francisco Recupero, Mónica L. Casella, José F. Ruggera</i>	pp. 24-32
Grain Boundaries In Doped-Ceria Nanofilms Used As Electrolytes For It-Soft Fuel Cells..... <i>Mario F. Bianchetti, Mojca Otonicar, Noemí E. Walsøe de Reca</i>	pp. 33-40
Structural And Spectroscopic Behavior Of Double Metal Oxalates From The First Transition Metal Series..... <i>María C. D’Antonio, María M. Torres, Daniel Palacios, Ana C. González-Baró, Vicente L. Barone, Enrique J. Baran</i>	pp.41-48
Saponinas Y Octil β -D-Glucopiranosido: Tensioactivos Amigables Con El Ambiente Como Alternativa De Coadyuvantes En Formulaciones De Glifosato..... <i>Romina C. Pessagno, Carlos A. Ojeda, Camila Pedraza, Mariano J.L., Castro Alicia Fernández Cirelli</i>	pp. 49-56
Liquid-Phase Oxidation of Glycerol over a Pt/C Catalyst: Optimization of the Reaction Conditions..... <i>María L. Faroppa, Joaquín O. Alcorta, Hernán P. Bideberripe, Guillermo J. Siri, Mónica L. Casella</i>	pp. 57-68

EDITORIAL

Estimados lectores:

les presentamos el primer número del año 2018 de Anales de la Asociación Química Argentina.

Este nuevo número contiene las contribuciones de importantes investigadores en áreas de la química, aplicados a temas de gran interés en disciplinas muy diferentes tales como industria del petróleo, generación de energía y catálisis.

Estamos seguros que encontraran este material atractivo y útil.

Agradecemos a todos los autores por los trabajos que enviaron para dar forma a este número.

Dear readers:

we present the first issue of the year 2018 of Anales de la Asociación Química Argentina.

This new issue has the contributions of important researchers in Chemistry related to fields of great interest such as, among others, petroleum industry, power generation and catalysis.

We believe that you will find this material attractive and useful.

We thank all the authors for their contributions to this issue.

Dra. Susana Larrondo

Editora en Jefe



DESESTABILIZACIÓN DE EMULSIONES PETRÓLEO/AGUA MEDIANTE LA APLICACIÓN DEL BIOPOLIMERO QUITOSANO

John F. Pérez-Calderón¹, María V. Santos^{1,2}, Noemí E. Zaritzky^{1,2*}

¹Centro de Investigación y Desarrollo en Criotecnología de Alimentos, CONICET, CIC-PBA, Facultad de Ciencias Exactas UNLP, Argentina

²Depto. de Ingeniería Química- Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de La Plata, Argentina.

* Corresponding autor: zaritzkynoemi@gmail.com

Recibido 24 de febrero de 2017; aprobado en versión final el 17 de agosto de 2017

Resumen

La industria petrolera genera grandes cantidades de efluentes emulsionados; el uso de biopolímeros que puedan desestabilizar estas emulsiones y clarificar el agua para su posterior volcado resulta una alternativa tecnológica importante. Quitosano (QS) es un polisacárido lineal que se obtiene de desechos sólidos de la industria pesquera. Es un biopolímero no-tóxico, biodegradable y presenta grupos amino libres que le confieren un carácter de poli-electrolito catiónico natural, ideal para generar la floculación/coagulación en emulsiones estables. Los objetivos de este trabajo son: (a) estudiar la acción del QS para la clarificación de efluentes emulsionados; (b) analizar en un sistema modelo de efluente con petróleo, agua y un tensioactivo aniónico biodegradable (dodecil sulfato de sodio, SDS), la turbidez residual (%TR) de la fase acuosa en función de la dosis de QS; (c) describir el fenómeno de la desestabilización de emulsiones utilizando distintas técnicas como: mediciones de %TR, demanda química de oxígeno, mediciones ópticas (Turbiscan) y potencial zeta; (d) aplicar la metodología de superficie de respuesta (MSR) para predecir el punto óptimo de clarificado a partir de la dosis de QS y concentración de SDS. Las emulsiones estables se prepararon con petróleo crudo y SDS; la MSR se aplicó utilizando un modelo central compuesto. Se midió el %TR variando la concentración de SDS (rango inferior a la concentración micelar crítica, 2,09-4,9 mM) y dosis de QS (0,247-1,429 g/L). Los resultados obtenidos indican que el QS es un potente agente desestabilizador de acción rápida (< 3hrs) y una opción sustentable para el tratamiento de efluentes.

Abstract

A large amount of oily wastewater is generated by the petroleum industry, therefore the use of biopolymers that can destabilize emulsions, producing clarification of the water is an interesting technological alternative. Chitosan (CH) is a linear polysaccharide obtained from the solid waste of the

fishing industry. CH is a biodegradable, non-toxic biopolymer; it has free amino groups forming a polycationic polymer that allows the coagulation/flocculation phenomena to occur. The objectives of this work were: (a) to study the CH for the clarification of emulsified waste-water; (b) to analyze the simultaneous effect of the addition of CH and a biodegradable anionic surfactant (dodecyl sodium sulfate, SDS), on the residual turbidity (%RT) of the aqueous phase; (c) to describe the destabilization of the emulsions using different techniques: %RT, chemical oxygen demand, optical measurements (Turbiscan) and zeta potential; (d) to optimize CH doses and SDS concentrations in order to minimize residual turbidity by applying surface response methodology (SRM). Stable oil/water emulsions (model system) were prepared with crude oil and SDS; SRM was applied using a central composite design. Clarification of the emulsions was measured by determining the %RT and volumetric fraction of the clarified fluid varying the SDS dose (range below critical micelle concentration, 2,09-4,9 mM), and CH dose (0,247-1,429 g/L). The electrical charges of the system during flocculation/coagulation were monitored using zeta potential measurements. Optimal destabilization conditions were determined by applying mathematical procedures. Results obtained indicate that CH is a rapid-acting destabilizing agent (< 3hr) and a sustainable alternative for wastewater treatment.

Palabras Clave: *Chitosano, emulsiones petróleo-en-agua, desestabilización de emulsiones, optimización del proceso.*

Keywords: *Chitosan, oil-in-water emulsion, emulsion destabilization, process optimization.*



**FORMULACIONES POLIURETÁNICAS UTILIZADAS COMO
INHIBICIÓN Y PROPULSANTE COMPUESTO EN VECTORES:
CARACTERIZACIÓN Y MODIFICACIÓN DE LA CINÉTICA DE
CURADO (“POT-LIFE”) POR DISTINTAS CARGAS**

Pablo Ross^{1,2}, Javier A. Bocchio^{1,2}, Guillermo Sevilla¹ y Javier C. Quagliano^{1,2*}

¹ Escuela Superior Técnica (EST), Facultad de Ingeniería del Ejército, Un. Nac. de la Defensa, CABA.

² Dto. de Química Aplicada, Instituto de Investigaciones Científicas y Técnicas para la Defensa (CITEDEF) Villa Martelli, Buenos Aires.

*Autor Corresponsal: jquagliano@citedef.gob.ar

Recibido el 1° de marzo de 2017; Aprobado en versión final el 18 de agosto de 2017

Resumen: Se caracterizaron dos formulaciones poliuretánicas en cuanto a sus propiedades térmicas, mecánicas y de adhesión. Estas son utilizadas como propulsante cuando la carga es una sal oxidante y como inhibición cuando la carga es un óxido mineral. Tanto la composición del propulsante como la de la inhibición están basadas en una matriz de polímero, polibutadieno hidroxiterminal (PBHT), curado con un isocianato (generalmente tolueno diisocianato, TDI o isoforona diisocianato, IPDI). Se determinó que la fractura es adhesiva respecto del sustrato propulsante. Se estudió el efecto de distintas cargas minerales sobre la cinética de curado de la inhibición. Con Negro de Humo se encontró que el tiempo de curado (“potlife”) disminuyó, mientras que con Litopón se mantuvo constante el “potlife” respecto de la inhibición base (con TiO₂). Otros aditivos como tris-(2-metil aziridinil)-óxido de fosfina (MAPO) y una arcilla modificada pueden ser utilizados para controlar el tiempo de curado.

Abstract: Polyurethane formulations were characterized in terms of its thermal, mechanical and adhesion properties. These formulations are used as propellants when the filler is an oxidant salt and as liner when the filler is a mineral oxide. Both the propellant composition and inhibition composition are based on a polymer matrix (hydroxyl-terminated polybutadiene, HTPB) cured with an isocyanate (generally toluene diisocyanate, TDI or isophorone diisocyanate, IPDI). The fracture was determined to be adhesive relative to the propellant substrate. The effect of different mineral fillers on the curing kinetics of liner was also studied. With Carbon Black as filler, pot life was reduced, while with Lithopone there was no difference respect to liner with TiO₂. Other additives such as bonding agent tris-2-methyl aziridinyl phosphine oxide (MAPO) and nanoclay can be utilized to control time for curing.

Palabras Clave: Adhesión, inhibición, propulsante, PBHT, cargas minerales

Keywords: Adhesion, liner, propellant, HTPB, mineral fillers



Anales de la
Asociación
Química Argentina

THEORETICAL MODELLING OF CHIRAL MODIFIER/SUBSTRATE INTERACTION FOR ENANTIOSELECTIVE HYDROGENATION OF p-ISOBUTYLACETOPHENONE

Francisco Recupero¹, Mónica L. Casella¹, José F. Ruggera^{1,*}

¹ Centro de Investigación y Desarrollo en Ciencias Aplicadas "Dr. Jorge J. Ronco" (CINDECA) (UNLP, CONICET), Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata, 47 N° 257, (1900) La Plata, Argentina.

*jfruggera@quimica.unlp.edu.ar

Recibido el 1° de marzo de 2017; aprobado en forma final el 14 de noviembre de 2017

Resumen

Se estudió a nivel DFT la interacción entre el modificador quiral y el sustrato para la reacción de hidrogenación enantioselectiva del tipo de Orito. Se realizó el modelado molecular a nivel DFT para estudiar la interacción entre el (R)-(-)-1-aminoindano y (S)-(+)-1-aminoindano como modificadores quirales y la p-isobutilacetofenona (intermediario en la síntesis del ibuprofeno). A partir de los cálculos teóricos e implementando un análisis de interacciones no covalentes, se demostró que la interacción responsable de la formación del complejo entre el modificador quiral y el sustrato es un enlace tipo puente de hidrógeno. Teniendo en cuenta las energías libres para la formación de cada complejo se calculó de forma teórica los excesos enantioméricos utilizando cada modificador quiral, encontrándose un exceso de alrededor del 30% del enantiómero R del producto cuando se utiliza el (R)-(-)-1-aminoindano, mientras que el exceso sería 30% pero para el enantiómero S del producto cuando se utiliza como modificador el (S)-(+)-1-aminoindano.

Abstract

DFT level calculations were carried out to study the interaction between chiral modifier and substrate for Orito type enantioselective hydrogenation. Molecular modelling on a DFT level was developed to study the interaction between (R)-(-)-1-aminoindane and (S)-(+)-1-aminoindane as chiral modifiers and p-isobutylacetophenone (intermediary the synthesis of Ibuprofen). Judging from theoretical calculations and implementing a non-covalent interaction analysis, it was shown that the interaction responsible for the formation of a complex between chiral modifier and substrate is a hydrogen bond. Taking into account the free energies of formation for each complex, a theoretical calculation was performed for the enantiomeric excess obtained from either chiral modifier, finding an excess of about 30% of the R enantiomer product when using (R)-(-)-1-aminoindane, while the excess would be of 30% for the S enantiomer product if the modifier is (S)-(+)-1-aminoindane.

Palabras Clave: Modelado molecular, DFT, enantioselectividad, hidrogenación

Keywords: Molecular DFT, enantioselectivity, hydrogenation



GRAIN BOUNDARIES IN DOPED-CERIA NANOFILMS USED AS ELECTROLYTES FOR IT-SOFC FUEL CELLS

Mario F. Bianchetti^a, Mojca Otonicar^b and Noemí E. Walsøe de Reca^{a,*}

^a DEINSO- CITEDEF, UNIDEF (MINDEF-CONICET) Juan Bautista de La Salle 4397, Villa Martelli (B1603ALO) Buenos Aires, Argentina

^b Advanced Materials Dment., Jožef Stefan Institute, Ljubljana, Slovenia

* Autor Corresponsal: walsoe@citedef.gob.ar

Recibido el 1° de marzo de 2017; aprobado en forma final el 5 de marzo de 2018

Resumen

Las cerámicas de ceria (CeO_2), dopadas con Y_2O_3 (CYO) o con samaria Sm_2O_3 (CSO) son consideradas como materiales promisorios para electrolitos sólidos de celdas de combustible de tipo SOFC- Solid Oxide Fuel Cells, debido a su alta conductividad por iones oxígeno. Los requerimientos necesarios para electrolitos de las pilas de combustible son: estabilidad química, alta conductividad, condiciones adecuadas de sinterizado, alta densidad y ausencia de porosidad abierta. En este trabajo, se utilizó CeO_2 dopada con 10% molar de samaria, material ya estudiada en algunos aspectos por los autores, tratándose térmicamente por “fast-firing” durante un corto tiempo (3 min) a 850°C y a 1450°C para producir el sinterizado del material. En el DEINSO-CITEDEF se realiza una planificación completa de los efectos del “fast-firing” para comprender el comportamiento de estas cerámicas, estudiando: el crecimiento de grano; velocidad de sinterizado, cambios en las características de los bordes de grano, tamaño de cristalitas, densidad de poros, densificación e interacción de defectos. En este trabajo, se consideran especialmente, los efectos del “fast-firing” respecto de la estructura de los bordes de grano para contribuir a lograr electrolitos sólidos que exhiban mayor estabilidad y mejor calidad. La caracterización de las cerámicas fue realizada por técnicas de adsorción BET, DRX, SEM and HRTEM.

Abstract

Ceria (CeO_2) ceramics as doped with Y_2O_3 (CYO) or with Sm_2O_3 (CSO) are considered promising materials as electrolytes for SOFCs Solid Oxide Fuel Cells due to their high conductivity by oxygen ions. The necessary requirements for fuel cells electrolytes are chemical stability, high conductivity, convenient sintering conditions, high density and absence of open porosity. In this work, the already studied materials in some aspects by the authors: doped CeO_2 with molar 10% samaria, was thermally treated by fast-firing for a short time (3 min) at 850°C and at 1450°C to produce the material sintering. A complete planning of the fast-firing effects to understand these ceramics defects behavior is performed at DEINSO-CITEDEF, studying: the grain growth, sintering velocity, changes in the grain boundaries, crystallites size measurements, pores density, densification and defects interaction. In this work, the fast-firing effect on grain boundaries structure is considered. This study also contributes to synthesize solid electrolytes with higher chemical stability and improved quality. The ceramics characterization was performed by BET adsorption techniques, XRD, SEM and HRTEM.

Palabras clave: ceria dopada con samaria, sinterizado, “fast-firing”, bordes de grano asimétricos y simétricos.

Key-words: samaria doped ceria, sintering, “fast-firing”, asymmetric and symmetric grain boundaries.



STRUCTURAL AND SPECTROSCOPIC BEHAVIOR OF DOUBLE METAL OXALATES FROM THE FIRST TRANSITION METAL SERIES

María C. D'Antonio^{1,2}, María M. Torres^{1,2}, Daniel Palacios^{1,2},
Ana C. González-Baró³, Vicente L. Barone³ and Enrique J. Baran^{3,*}

¹ Dto. de Cs. Exactas y Naturales, Un. Nac. de la Patagonia Austral, 9400-Río Gallegos, Argentina.

² Dto. de Cs. Básicas, UTN-Facultad Regional Santa Cruz, 9400-Río Gallegos, Argentina.

³ Centro de Química Inorgánica (CEQUINOR, CONICET/UNLP), Fa. de Cs. Exactas, UNLP, 1900-La Plata, Argentina.

* Autor Corresponsal: baran@quimica.unlp.edu.ar

Recibido el 23 de setiembre de 2017; aceptado en forma final el 16 de marzo de 2018

Resumen

Se preparó y caracterizó una serie de oxalatos dobles de estequiometría $MM'(C_2O_4)_2 \cdot 4H_2O$ (con $MM' = MnCo, MnNi, MnZn, CoNi, CoCu, CoZn, NiCu, NiZn$ y $CuZn$). Su comportamiento estructural fue investigado por medio de difracción de rayos X en polvos, mostrando una fuerte analogía estructural con la fase ortorrómbica, llamada forma- β , de los oxalatos complejos simples de composición $MC_2O_4 \cdot 2H_2O$. El comportamiento espectroscópico vibracional de estos oxalatos dobles fue investigado por espectroscopía de infrarrojo y Raman. Los resultados obtenidos confirmaron claramente las fuertes analogías estructurales existentes entre las series de complejos $MM'(C_2O_4)_2 \cdot 4H_2O$, β - $MC_2O_4 \cdot 2H_2O$ y α - $MC_2O_4 \cdot 2H_2O$.

Abstract

A series of double metal oxalates of stoichiometry $MM'(C_2O_4)_2 \cdot 4H_2O$ (with $MM' = MnCo, MnNi, MnZn, CoNi, CoCu, CoZn, NiCu, NiZn$ and $CuZn$) have been prepared and characterized. Their structural behavior was investigated by means of X-ray powder diffractometry, showing a strong structural analogy to the orthorhombic, so-called β -modification, of the related simple oxalate complexes of composition $MC_2O_4 \cdot 2H_2O$. The vibrational spectroscopic behavior of the double metal oxalates was investigated by infrared and Raman spectroscopy. The results clearly confirmed the close structural analogies between the $MM'(C_2O_4)_2 \cdot 4H_2O$, β - $MC_2O_4 \cdot 2H_2O$ and α - $MC_2O_4 \cdot 2H_2O$ series of complexes.

Palabras clave: Oxalatos metálicos dobles; difracción de rayos X en polvos; características estructurales; espectros de IR y Raman; comportamiento vibracional.

Keywords: Double metal oxalates; X-ray powder diffractometry; structural characteristics; IR and Raman spectra; vibrational behavior.



SAPONINAS Y OCTIL β -D-GLUCOPIRANÓSIDO: TENSIOACTIVOS AMIGABLES CON EL AMBIENTE COMO ALTERNATIVA DE COADYUVANTES EN FORMULACIONES DE GLIFOSATO.

Romina C. Pessagno^{1,2,3*}, Carlos A. Ojeda^{1,2,3}, Camila Pedraza¹,
Mariano J.L. Castro³ y Alicia Fernández Cirelli^{1,2,3}

¹Universidad de Buenos Aires. Facultad de Ciencias Veterinarias. Cátedra Química Orgánica de Biomoléculas. Buenos Aires, Argentina.

²Universidad de Buenos Aires. Centro de Estudios Transdisciplinarios del Agua (CETA). Buenos Aires, Argentina.

³CONICET - Universidad de Buenos Aires. Instituto de Investigaciones en Producción Animal (INPA). Buenos Aires, Argentina.

*Autor Corresponsal: rpessagno@fvet.uba.ar

Recibido 25 de febrero de 2017; aprobado el 22 de junio de 2018

Resumen

Los tensioactivos habitualmente asociados al glifosato (N-[fosfonometil] glicina) son las aminas grasas etoxiladas (AGEO). El uso de estos compuestos plantea un serio problema de toxicidad para el ambiente. Las saponinas (S) son considerados "tensioactivos verdes" por ser fácilmente biodegradables y ser capaces de atravesar la cutícula de las hojas de malezas blanco. Otro tipo de tensioactivos no-iónicos obtenido de materia prima renovable son los alquilglucosidos. Dentro de este grupo se encuentra el octil β -D-glucopiranosido (OG) con excelentes propiedades interfaciales, total biodegradabilidad y una toxicidad prácticamente nula para humanos. El objetivo del presente trabajo fue analizar, a través de las propiedades interfaciales, formulaciones de glifosato con mezclas de tensioactivos amigables con el ambiente como potencial reemplazo de las AGEO. Las propiedades interfaciales evaluadas fueron: concentración micelar crítica (CMC), tensión superficial a CMC (γ CMC), $-\log$ de la concentración molar de tensioactivo requerida para disminuir la γ del solvente en 20 mN/m (pC_{20}). Además se calculó la energía libre de Gibbs de micelización y adsorción (ΔG_{mic}^0 y ΔG_{ads}^0) de los compuestos puros. La formulación de glifosato 540 g.e.a/L con S1% y OG2% presentó excelentes valores, CMC 17,3 \pm 0,5 mM, γ CMC 30,6 \pm 0,4 mM/m, pC_{20} 2,78 \pm 0,03 y un γ al %4 de 47,9 \pm 0,4 mM. Los resultados muestran que este tipo de mezclas con saponinas serían un potencial reemplazo de tensioactivos de uso actual perjudiciales para el ambiente. Se halló una formulación que combina las mejores propiedades de los tensioactivos preparados a partir de recursos naturales renovables que permite su utilización a iguales condiciones que los productos comerciales vigentes.

Abstract

The surfactants usually associated with glyphosate (N- [phosphonomethyl] glycine) are polyethoxylated tallow amine (POEA). The use of these compounds poses a serious problem of toxicity to the environment. Saponins (S) are considered "green surfactants" because they are easily biodegradable and are able to traverse the cuticle of target weed leaves. Another type of non-ionic surfactants obtained from renewable raw material are alkylglucosides. Within this group is octyl β -D-glucopyranoside (OG) with excellent interfacial properties, total biodegradability and practically null toxicity for humans. The aim of

the present work was to analyze through the interfacial properties glyphosate formulations with mixtures of environmental friendly surfactants as potential replacement of AGEO. The interfacial properties evaluated were critical micellar concentration (CMC), surface tension at CMC (γ_{CMC}), $-\log$ of the molar concentration of surfactant required to decrease the γ of the solvent by 20 mN/m (pC_{20}). In addition, Gibbs free energy of micellization and adsorption (ΔG_{mic}^0 and ΔG_{ads}^0) of the pure compounds were calculated. The formulation of glyphosate 540 g.e.a/L with S1% and OG2% presented excellent values, CMC $17,3 \pm 0,5$ mM, γ_{CMC} $30,6 \pm 0,4$ mN/m, pC_{20} $2,78 \pm 0,03$ y un γ al %4 de $47,9 \pm 0,4$ mN/m. The results show that this type of formulations with saponins would be a potential replacement of current use harmful surfactants for the environment. A formulation was found that combines the best properties of surfactants prepared from renewable natural resources that allows its use under the same conditions as current commercial products.

Palabras clave: coadyuvantes, saponinas, octil-glucósido, glifosato, propiedades interfaciales.

Keywords: adjuvants, saponins, octyl-glucoside, glyphosate, interfacial properties.



Liquid-Phase Oxidation of Glycerol over a Pt/C Catalyst: Optimization of the Reaction Conditions

María L. Faroppa^{1,*}, Joaquín O. Alcorta¹, Hernán P. Bideberripe^{2,3},
Guillermo J. Siri^{2,3}, Mónica L. Casella^{1,2}

¹ CITNOBA (CONICET y Universidad Nacional del Noroeste de la Provincia de Buenos Aires, Newbery 261 (6000) Junín, Provincia de Buenos Aires, Argentina

² CINDECA (CCT La Plata-CONICET, UNLP), Universidad Nacional de La Plata, Facultad de Ciencias Exactas, 47 N°257, 1900 La Plata, Argentina

³ PIDCAT Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de La Plata, 1 y 47, 1900 La Plata, Argentina

*Corresponding autor: mlfaroppa@speedy.com.ar

Recibido el 3 de marzo de 2017; aprobado el 22 de junio de 2018

Abstract

Liquid-phase glycerol (Gly) oxidation was investigated systematically over a Pt/C catalyst. The catalyst was prepared by impregnation with a $(\text{NH}_4)_2[\text{PtCl}_4]$ solution, in order to obtain a 1 wt% Pt. The catalyst was characterized by AAS, TEM and TPR techniques. The reaction conditions were optimized by conducting experiments in the range of temperature from 40 to 60°C, Gly/Pt molar ratio between 4000 and 10000, pH between 5 and 13 and H_2O_2 concentration in order to get between 2.5 and 10 volumes of active oxygen in the reactor. The optimum reaction conditions were identified as 60°C, Gly/Pt = 4000, pH = 5, H_2O_2 concentration enough to obtain 10vol of O_2 , 100 mg catalyst and constant stirring. Under these conditions, a maximum glyceric acid (GlyA) selectivity of 57.1% was obtained at 37% Gly conversion.

Resumen

La oxidación en fase líquida de glicerol (Gly) se investigó sistemáticamente empleando un catalizador Pt/C. El catalizador se preparó por impregnación con una solución de $(\text{NH}_4)_2[\text{PtCl}_4]$, con el fin de obtener un 1% en peso de Pt. Se lo caracterizó por AAS, TEM y TPR. Las condiciones de reacción se optimizaron realizando experimentos en el intervalo de temperatura entre 40 y 60°C, relación molar Gly/Pt entre 4000 y 10000, pH entre 5 y 13 y concentración de H_2O_2 como para obtener entre 2.5 y 10 volúmenes de oxígeno activo en el reactor. Las condiciones óptimas de reacción se identificaron como 60°C, Gly/Pt = 4000, pH = 5, concentración de H_2O_2 suficiente para obtener 10vol de O_2 , 100 mg de catalizador y agitación constante. Bajo estas condiciones, se obtuvo una selectividad máxima de ácido glicérico (GlyA) del 57.1% con una conversión de Gly de 37%.

Palabras Clave: Glicerol, oxidación, Platino, Carbón, Peróxido de hidrógeno

Keywords: Glycerol, oxidation, Platinum, Carbon, Hydrogen Peroxide