

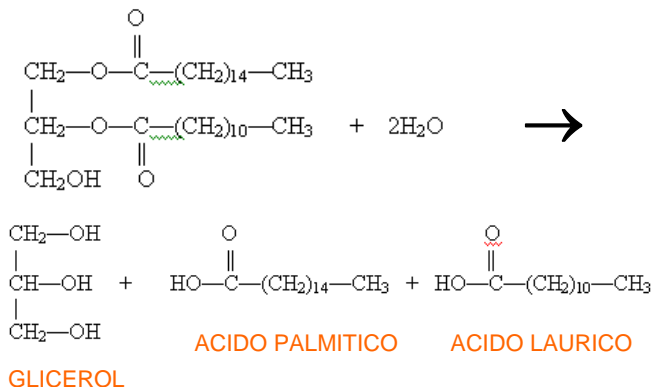
# SIMULACION COMPUTACIONAL DE LA HIDROLISIS DEL LAURIL PALMITATO DE GLICERILO

Cristian Padilla, Escuela de Educación Media N° 7 Juan B Justo de José C. Paz  
 Docente: Damián Scherlis, Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física

## Introducción y objetivos

El lauril palmitato de glicerilo es un lipido que se degrada para proveer energia al organismo. Nuestro objetivo es utilizar metodos de quimica computacional para calcular la energia de reactivos y productos en el proceso de hidrolisis de este lipido, y obtener la energia de reaccion correspondiente.

### LAURIL PALMITATO DE GLICERILO



## Metodología

Se utilizaron los siguientes programas bajo el sistema operativo Linux:

**MOLDEN**

DEFINICION Y VISUALIZACION DE LA ESTRUCTURA DE LA MOLECULA



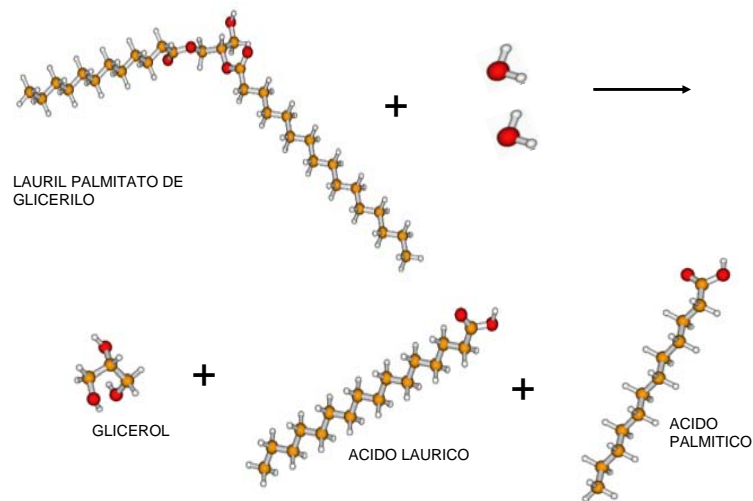
**GAUSSIAN 03**

OPTIMIZA LAS GEOMETRIAS Y CALCULA LAS ENERGIAS

Utilizamos el metodo AM1, y el modelo PCM (*Polarized Continuum Model*) para los calculos en solvente

## Resultados

Geometrias optimizadas de reactivos y productos



Energia de reactivos y productos y energia de reaccion

	H <sub>2</sub> O	L. P. de glicerilo	Glicerol	Acido Laurico	Acido Palmítico	E. reaccion (Kcal/mol)
VACIO	-0.094429	-0.636155	-0.258222	-0.272437	-0.316206	<b>-13.7</b>
AGUA	-0.097618	-0.605797	-0.262555	-0.263100	-0.302838	<b>-17.4</b>
Energia solvatacion	-2.0	19.0	-2.7	5.6	8.4	<b>-3.7</b>

## Conclusiones

- Las energías de los productos es menor que la de los reactivos: la reacción libera energía.
- La reacción es más exotérmica en agua que en vacío.
- Las moléculas menos polares no se disuelven en agua: cuanto menos polar, mas positiva la energia de solvatacion.