

XXV  
JORNADAS DE

# JÓVENES INVESTIGADORES AUGM - UNI

INVESTIGACIÓN  
SIN FRONTERAS  
PARA LA INTEGRACIÓN  
CIENTÍFICA Y CULTURAL



18-19-20 OCTUBRE - 2017



Asociación de Universidades  
GRUPO MONTEVIDEO



UNIVERSIDAD  
NACIONAL DE ITAPÚA

**XXV JORNADAS DE JÓVENES  
INVESTIGADORES  
AUGM**

***“Investigación sin fronteras para una  
integración científica y cultural”  
Tomo II***

**FICHA TÉCNICA****ISBN:** 978-99967-884-0-6**DATOS GENERALES****TÍTULO:** XXV Jornadas de Jóvenes Investigadores**SUBTÍTULO:** Jornadas de Jóvenes Investigadores AUGM - UNI 2017**AÑO DE EDICIÓN:** 2017**MES DE PUBLICACION:** OCTUBRE**NÚMERO DE PÁGINAS:** 792

Todos los resúmenes de este libro fueron reproducidos de copias enviadas por los autores. El contenido de los mismos es de exclusiva responsabilidad de sus autores. El Comité organizador de las XXV Jornadas de Jóvenes Investigadores de la Asociación de Universidades del Grupo Montevideo no se responsabiliza por los contenidos publicados en este libro. Toda cita o reproducción parcial de la información contenida en el presente volumen solamente pueden realizarse con la expresa mención de la fuente

## **ASOCIACION DE UNIVERSIDADES GRUPO MONTEVIDEO (AUGM)**

### **UNIVERSIDADES MIEMBROS**

#### **ARGENTINA**

Universidad de Buenos Aires (UBA)  
Universidad Nacional de Córdoba (UNC)  
Universidad Nacional de Cuyo (UNCuyo)  
Universidad Nacional de Entre Ríos (UNER)  
Universidad Nacional del Litoral (UNL)  
Universidad Nacional de La Plata (UNLP)  
Universidad Nacional de Mar del Plata (UNMdP)  
Universidad Nacional del Nordeste (UNNE)  
Universidad Nacional de Rosario (UNR)  
Universidad Nacional del Sur (UNS)  
Universidad Nacional de San Luis (UNSL)  
Universidad Nacional de Tucumán (UNT)

#### **BOLIVIA**

Universidad Mayor de San Andrés (UMSA)  
Universidad Mayor, Real y Pontificia de San Francisco Xavier de Chuquisaca  
(UMRPSFXCH)

#### **BRASIL**

Universidade Federal do Rio Grande (FURG)  
Universidade Federal de Goiás (UFG)  
Universidade Federal de Minas Gerais (UFMG)  
Universidade Federal do Paraná (UFPR)  
Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS)  
Universidade Federal do Rio de Janeiro (UFRJ)  
Universidade Federal de Santa Catarina (UFSC)  
Universidade Federal de São Carlos (UFSCar)  
Universidade Federal de Santa Maria (UFSM)  
Universidade Estadual Paulista (UNESP)  
Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP)  
Universidade de São Paulo (USP)

#### **CHILE**

Universidad de Chile (UChile)  
Universidad de Playa Ancha (UPLA)  
Universidad de Santiago de Chile (USACH)  
Universidad de Valparaíso (UV)

#### **PARAGUAY**

Universidad Nacional de Asunción (UNA)  
Universidad Nacional del Este (UNE)  
Universidad Nacional de Itapúa (UNI)

**URUGUAY**  
Universidad de la República (UDELAR)  
AUTORIDADES DE LA AUGM 2016 – 2017

**PRESIDENTE DE LA AUGM**

Dr. Waldo Albarracín Sánchez  
Rector de la Universidad Mayor de San Andrés, Bolivia

**VICEPRESIDENTE DE LA AUGM**

Ing. Gerónimo Laviosa González  
Rector de la Universidad Nacional del Este, Paraguay

**SECRETARIO EJECUTIVO DE LA AUGM**

Prof. Dr. Álvaro Maglia

**RESPONSABLES DE PROGRAMAS Y PROYECTOS - AUGM**

Lic. Fernando Sosa  
Juan Manuel Sotelo  
Lic. Laura Adinolfi

**COMUNICACIÓN**

Edward Braidá

**INFORMÁTICA**

Andrés Ramos

**ADMINISTRACIÓN**

Arch. Cecilia Gobbi

Gabriela Sopeña

Pablo Rovira

## **CONSEJO DE RECTORES**

### **ARGENTINA**

**Rector Dr. Alberto Edgardo Barbieri**  
Universidad de Buenos Aires

**Rector Dr. Hugo Juri**  
Universidad Nacional de Córdoba

**Rector Ing. Agr. Daniel Ricardo Pizzi**  
Universidad Nacional de Cuyo

**Rector Ing. Jorge Gerard**  
Universidad Nacional de Entre Ríos

**Rector en funciones Arq. Miguel Alfredo Irigoyen**  
Universidad Nacional del Litoral

**Presidente Lic. Raúl Perdomo**  
Universidad Nacional de La Plata

**Rector Lic. Francisco Antonio Morea**  
Universidad Nacional de Mar del Plata

**Rectora Prof. María Delfina Veiravé**  
Universidad Nacional del Nordeste

**Rector Arq. Héctor Floriani**  
Universidad Nacional de Rosario

**Rector Dr. Ricardo Sabattini**  
Universidad Nacional del Sur

**Rector Dr. Félix Nieto**  
Universidad Nacional de San Luis

**Rectora Dra. Alicia Bardón**  
Universidad Nacional de Tucumán

### **BOLIVIA**

**Rector Dr. Waldo Albarracín Sánchez**  
Universidad Mayor de San Andrés

**Rector Ing. Eduardo Rivero Zurita**  
Universidad San Francisco Xavier de Chuquisaca

### **BRASIL**

**Rectora Dr<sup>a</sup> Cleuza Maria Sobral Dias**  
Universidade Federal do Rio Grande

**Rector Dr. Orlando Afonso Valle do Amaral**  
Universidade Federal de Goiás

**Rector Prof. Jaime Arturo Ramírez**  
Universidade Federal de Minas Gerais

**Rector Prof. Ricardo Marcelo Fonseca**  
Universidade Federal do Paraná

**Rector Prof. Rui Oppermann**  
Universidade Federal do Rio Grande do Sul

**Rector Prof. Roberto Leher**  
Universidade Federal do Rio de Janeiro

**Rectora Prof. Alacoque Lorenzini Erdmann**  
Universidade Federal do Santa Catarina

**Rectora Dr<sup>a</sup> Wanda Aparecida Machado Hoffmann**  
Universidade Federal de São Carlos

**Rector Prof. Paulo AfonsoBurmam**  
Universidade Federal de Santa Maria

**Rector Prof. Sandro R. Valentini**  
Universidade Estadual Paulista

**Rector Prof. Marcelo Knobel**  
Universidade Estadual de Campinas

**Rector Prof. Marco Antonio Zago**  
Universidade de São Paulo

#### CHILE

**Rector Prof. Ennio Vivaldi Véjar**  
Universidad de Chile

**Rector Dr. Patricio Sanhueza Vivanco**  
Universidad de Playa Ancha

**Rector Ing. Juan Manuel Zolezzi Cid**  
Universidad de Santiago de Chile

**Rector Aldo Valle Acevedo**  
Universidad de Valparaíso

#### PARAGUAY

**Rector Prof. Mst. Abel Bernal Castillo**  
Universidad Nacional de Asunción

**Rector Ing. Gerónimo Laviosa González**  
Universidad Nacional del Este

**Rector Prof. Ing. Hildegardo González Irala**  
Universidad Nacional de Itapúa

#### URUGUAY

**Rector Dr. Roberto Markarian**  
Universidad de la República

**DELEGADOS ASESORES  
ARGENTINA**

Lic. Iván Bigas  
Universidad de Buenos Aires

Ing. Agr. Carlos Barioglio  
Universidad Nacional de Córdoba

Dra. Jimena Estrella Orrego  
Universidad Nacional de Cuyo

Med. Vet. Marcelo Tobin  
Universidad Nacional de Entre Ríos

Ing. Julio Theiler  
Universidad Nacional del Litoral

Lic. Francisco Javier Díaz  
Universidad Nacional de La Plata

Ing. Raúl Horacio Conde  
Universidad Nacional de Mar del Plata

Arq. Gustavo Tripaldi  
Universidad Nacional del Nordeste

Lic. María Cecilia Candusso  
Universidad Nacional de Rosario

Trad. Laura A. Benedetti  
Universidad Nacional del Sur

CPN Víctor Aníbal Moriñigo  
Universidad Nacional de San Luis

Dra. María Cristina Apella  
Universidad Nacional de Tucumán

**BOLIVIA**

Prof. Nelly Balda  
Universidad Mayor de San Andrés

Lic. Rodney Rada Puña  
Universidad Mayor, Real y Pontificia de San Francisco Xavier de Chuquisaca

**BRASIL**

Profa. Dra. Ofir Bergemann de Aguiar  
Universidade Federal de Goiás

Prof. Fábio Alves da Silva Júnior  
Universidade Federal de Minas Gerais

**Prof. Dr. André Duarte**  
Universidade Federal do Paraná

Prof. NicolasMaillard  
Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Prof. VitorAlevato do Amaral  
Universidade Federal do Rio de Janeiro

Prof. Lincoln Fernandes  
Universidade Federal do Santa Catarina

MSc. Ma. Estela Antonioli Pisani Canevarolo  
Universidade Federal de São Carlos

Prof. César Augusto Guimarães Finger  
Universidade Federal de Santa Maria

Prof. José Celso Freire Júnior  
Universidade Estadual Paulista

Profa. Dr. Elena Brugioni  
Universidade Estadual de Campinas

Prof. Dr. Claudio Possani.  
Universidade de São Paulo

#### CHILE

Prof. Eduardo Vera S.  
Universidad de Chile

Profa. Cecilia Arriagada  
Universidad de Playa Ancha

Carol Johnson  
Universidad de Santiago de Chile

Alejandro Rodríguez Musso  
Universidad de Valparaíso

#### PARAGUAY

Prof. Dr. José Manuel Silvero Arévalos  
Universidad Nacional de Asunción

Lic. Rolando Segovia Pérez  
Universidad Nacional del Este

Prof. Dra. Lucila Bogado de Scheid  
Universidad Nacional de Itapúa

#### URUGUAY

Dr. Hugo Calabria  
Universidad de la República

## **AUTORIDADES DE LA UNIVERSIDAD NACIONAL DE ITAPÚA**

**Rector:** Prof. Ing. Hildegardo González Irala

**Vicerectora:** Prof. Dra. Yilda Agüero de Talavera

### ***COMISIÓN ORGANIZADORA***

**Delegada Asesora de AUGM por la Universidad Nacional de Itapúa -**

#### **Coordinación General**

Prof. Dra. Lucila Bogado de Scheid

#### ***Miembros***

Dra. Susana Fedoruk  
Dra. Nelly Monges de Insfrán  
Arq. Edith Páez de Moreno  
Dra. Perla Sosa de Wood  
Dr. Cristian Balcázar Bogado  
Univ. Teresita Regis Acosta  
Arq. Miryan Morinigo Schapovaloff  
Lic. Carolina Balcázar  
Univ. Pamela García Benítez  
Lic. Pablo Villalba  
Mg. Sintia Ortiz García  
Mg. Edil Páez Pacheco

#### ***Colaboradores***

Dra. Estelvina Rodriguez  
Univ. Adrián Daniel Halaburda Ojeda  
Univ. Deysi Analía Cardozo Maidana  
Univ. Juan Britos  
Ing.Com. María Elena Martínez  
Dr. Osvaldo Moreira  
Dra. Vanesa Arévalos  
Ing.Com. David Martínez  
Mg. Susana Dmitruk  
Ing. Andrea Romero  
Ing.Com. Gladys Romero Encina  
Lic. Sandra Benítez  
Roly Ayala  
Univ. Andrea Ganchozo Llano  
Lic. Viviana Aldana  
Lic. Liliana Casas

#### **COMITÉ EDITORIAL**

Prof. Dra. Lucila Bogado De Scheid  
Prof. Dra. Susana Fedoruk  
Prof. Dr. Cristian Balcázar Bogado  
Lic. Ingrid Paredes

## PROLOGO

En las últimas décadas, brindar condiciones óptimas para afrontar las expectativas de una juventud ávida de conocimiento y de una sociedad cada vez más demandante y globalizada, se ha convertido en la prioridad de la gestión de las instituciones de educación superior.

La universidad es el espacio propicio para que los jóvenes desarrollen competencias y habilidades investigativas que los lleven a satisfacer el deseo por la adquisición de nuevos saberes.

Las Jornadas de Jóvenes Investigadores de la Asociación de Universidades del Grupo Montevideo AUGM, constituyen una brillante oportunidad para que jóvenes investigadores miembros de reconocidas universidades públicas de la región del Cono Sur de América den a conocer el resultado del esfuerzo de meses y años de trabajo en los cuales se han concebido y desarrollado investigaciones que abarcan una amplia diversidad de áreas del conocimiento.

Para la Universidad Nacional de Itapúa, representó un gran desafío y una enorme responsabilidad constituirse en el escenario físico y organizar estas jornadas de presentación de la gran producción científica de más de 600 jóvenes de las Universidades del Grupo Universitario. Las investigaciones realizadas y los conocimientos generados no deben permanecer ocultos sino que debe trascender a la sociedad y en lo posible hasta para otras generaciones; en las páginas de este libro se incorporan los resúmenes de los trabajos seleccionados por un calificado comité de evaluadores que a la luz de criterios establecidos han superado las diferentes etapas de evaluación llegando así hasta las instancias finales.

Tal como lo expresa el lema de las XXV Jornadas, este es un espacio válido para la concreción de la investigación sin fronteras para la integración científica y cultural.

**Prof. Ing. Hildegardo González Irala**  
Rector  
Universidad Nacional de Itapúa

## **Estudio Comparativo de la Distribución Densidad Electrónica en Complejos Adsorbidos sobre cavidades de Zeolitas Ácidas de Diferente Topología. Relación con el Efecto de Confinamiento.**

Romero Ojeda, Gonzalo; Cabral, Néstor; Zalazar, María Fernanda; Peruchena, Nélica  
gonzalomero37@gmail.com; mfbalazar@conicet.gov.ar

Facultad de Ciencias Exactas y Naturales y Agrimensura Universidad Nacional del Nordeste

### **Resumen**

Se ha aludido que la adsorción de ácido acético es un paso clave en las reacciones de esterificación catalizadas por sólidos y debería estar involucrada en el paso determinante de la velocidad. Por otro lado, el efecto de confinamiento en zeolitas es una característica que juega un rol clave en las reacciones catalíticas que ocurren dentro de la red del catalizador. El objetivo de este trabajo fue estudiar comparativamente, y desde el punto de vista de la distribución electrónica, diferentes modos de adsorción de ácido acético sobre las diferentes cavidades de las zeolitas H-ZSM-5, H-Beta y H-Y y así discriminar el efecto de confinamiento y su rol sobre la actividad catalítica. La estructura de los catalizadores se representó con un modelo de agregado 46T (donde T representa átomos tetraédricos de Si y Al) para H-ZSM-5, 52T para H-Beta y 84T para HY. Las optimizaciones y análisis de frecuencias vibracionales de las especies involucradas se realizaron a nivel M06-2X/6-31G(d) con el programa Gaussian09. Las densidades electrónicas se obtuvieron a nivel M06-2X/6-31++G(d,p) y los cálculos se realizaron con el programa AIMAll. Los resultados han revelado que el modo de adsorción predominante involucra que el ácido se adsorba molecularmente sobre el sitio ácido, donde tanto el grupo carbonilo como hidroxilo del ácido acético, interaccionan con los sitios ácido y básico del catalizador. La adsorción del ácido en cavidades más pequeñas permite un mejor ajuste y así una adsorción más fuerte en el sitio activo, la mayor contribución de las interacciones débiles entre zeolita y adsorbato favorece de manera significativa al efecto de confinamiento y la estabilidad. Para zeolitas de cavidades de gran tamaño el efecto de confinamiento no es importante y toda la energía de adsorción se relaciona con la interacción en el sitio activo.

**Palabras Claves:** Zeolitas, Catálisis Heterogénea, Efecto de Confinamiento, Densidad Electrónica

### **Introducción**

El efecto de confinamiento (conjunto de efectos provocados por las interacciones entre las paredes de las zeolitas y las moléculas huésped; y que dependen del volumen y forma de las cavidades del sólido) en zeolitas es una característica que juega un rol clave en las reacciones catalíticas que ocurren dentro de la red del catalizador. Por otra parte, se ha aludido que la adsorción de ácido acético es un paso clave en las reacciones de esterificación catalizadas por sólidos ácidos -de interés en química fina y en la industria de Biocombustibles- y debería estar involucrada en el paso determinante de la velocidad (Bedard et al, 2012). En un trabajo previo analizamos las especies más estables en relación con la adsorción de ácido acético en la superficie de la zeolita H-ZSM-5, determinando las características principales de los modelos de adsorción propuestos (parámetros geométricos, frecuencias vibracionales y estimación de la energía involucrada en el proceso y caracterización de interacciones). En otro trabajo estudiamos la adsorción de ácido acético en H-Beta (Gomes et al, 2017). Sin embargo falta estudiar la relación del efecto de confinamiento con la estructura de diferentes zeolitas.

## Objetivos

Estudiar comparativamente y desde el punto de vista de la distribución electrónica, diferentes modos de adsorción de ácido acético sobre las diferentes cavidades de las zeolitas H-ZSM-5 (canales rectos y en zigzag, diámetro de poro  $\varnothing$  de 0,51 nm a 0,56 nm), H-Beta (canales rectos perpendiculares,  $\varnothing$  de 0,55 a 0,67 nm) y H-Y (poro grande, cavidades de 0,74 nm x 0,74 nm) como modelos de reacción del primer paso de esterificación de ácidos carboxílicos en zeolitas. Con este análisis comparativo -desde el punto de vista de la distribución electrónica- de los resultados derivados de tres zeolitas de diferente topología se pretende discriminar el efecto de confinamiento y su rol sobre la actividad catalítica.

## Materiales y Métodos

La estructura de los catalizadores se representó con un modelo de agregado 46T (donde T representa átomos tetraédricos de Si y Al) para H-ZSM-5 (de composición total  $H_{49}O_{68}Si_{45}Al$ ), 52T para H-Beta (de composición total  $H_{63}O_{73}Si_{51}Al$ ) y 84T para HY (de composición total  $H_{73}O_{132}Si_{83}Al$ ). Las optimizaciones y análisis de frecuencias vibracionales de las especies involucradas se realizaron a nivel M06-2X/6-31G(d) con el programa Gaussian09(Frischet al, 2009), donde se relajaron las moléculas orgánicas y el sistema 3T, mientras que el resto del sistema se mantuvo fijo. El análisis topológico de la densidad electrónica se realizó en el contexto de la Teoría Cuántica de Átomos en Moléculas, QTAIM(Bader, 1990). Las densidades electrónicas se obtuvieron a nivel M06-2X/6-31++G(d,p) y los cálculos se realizaron con el programa AIMAll(Keith, 2013).

## Resultados y Discusión

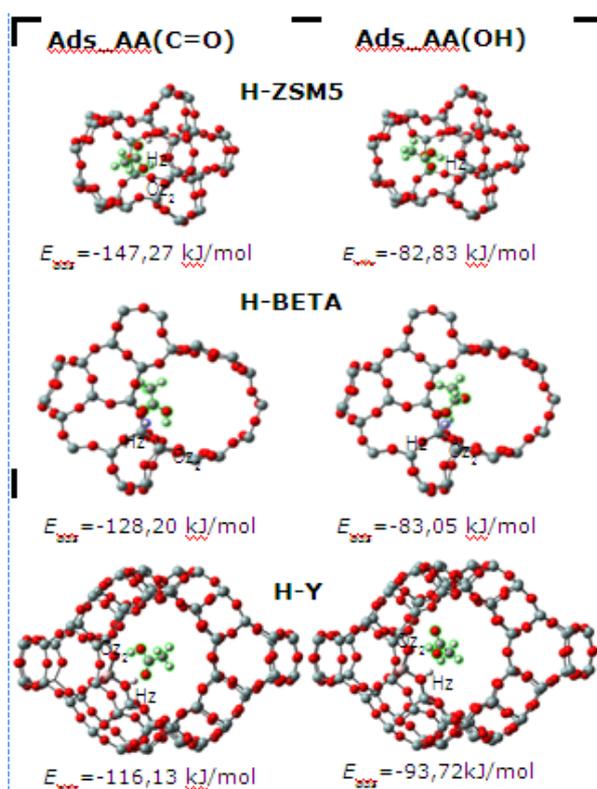
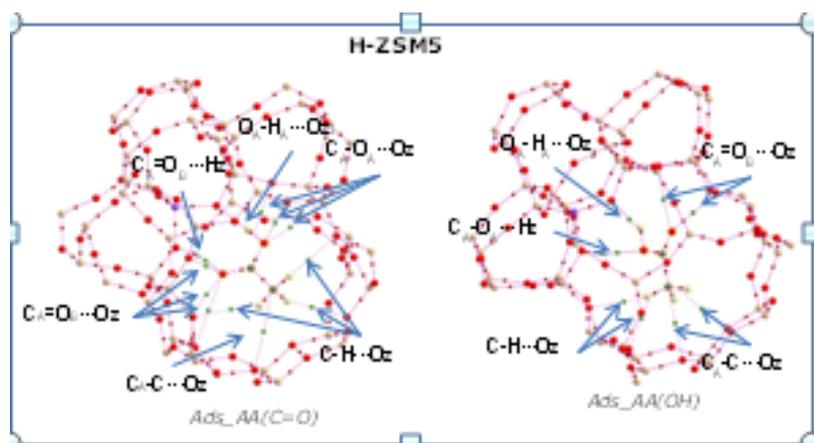


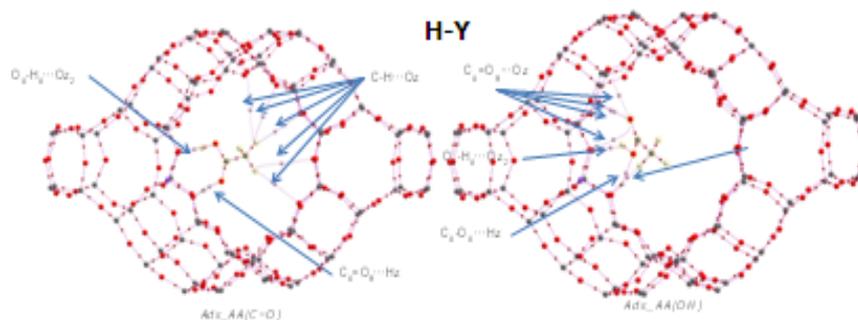
FIGURA 1. Estructuras más estables encontradas para la adsorción de ácido acético en el sitio ácido de Brønsted a través del grupo carbonílico

En la Figura 1 se muestran las estructuras más estables encontradas para la adsorción de ácido acético en H-ZSM-5, H-BETA y H-Y. Se informan también sus respectivas energías de adsorción calculadas a nivel M06-2X/6-31G(D) en kJ/mol. Los cálculos teóricos revelan que el modo de adsorción predominante involucra que el ácido se adsorba molecularmente sobre el sitio ácido por el grupo carbonilo Ads\_AA(C=O) donde las energías de adsorción son -147,3 kJ/mol, -128,2 kJ/mol y -116,13 kJ/mol en H-ZSM-5, H-Beta y H-Y, respectivamente.

En la Figura 2 se muestran los grafos moleculares correspondientes a las estructuras en estudio. En la misma se resalta la molécula orgánica involucrada y los puntos críticos de enlace (PCE) de interés. En la tabla 1 se muestran las interacciones adsorbato-catalizador y su relación con la adsorción en el sitio activo y el efecto de confinamiento en términos de la Densidad Electrónica. Para estos complejos adsorbidos más estables, el proceso de adsorción involucra dos interacciones principales que involucran tanto el grupo carbonilo como hidroxilo del ácido acético. Una de ellas corresponde a la interacción del oxígeno del grupo carbonilo con el sitio ácido de Brønsted ( $C_A=O_B \cdots H_Z$ ). A su vez la molécula de ácido acético se dispone dentro de la cavidad del catalizador de manera que su grupo alcohol interacciona con el oxígeno adyacente (sitio básico de la zeolita,  $O_{Z2}$ ) mediante un puente de hidrógeno ( $O_A-H_A \cdots O_{Z2}$ ). Estas dos interacciones vinculadas al *proceso de adsorción* representan el 98,3%, el 98,9% y el 65,3%, para los complejos H-BETA, H-Y, H-ZSM-5 respectivamente, del total de densidad electrónica por lo cual su contribución a la energía de adsorción es importante. En los complejos  $Ads\_AA(OH)$  solo el grupo hidroxilo está involucrado en la adsorción sobre el sitio activo, es decir que es el mismo oxhidrilo del AA el que interacciona con el sitio ácido de Brønsted ( $C_A-O_A \cdots H_Z$ ) y por otro con el sitio básico de la zeolita ( $O_A-H_A \cdots O_{Z2}$ ).



En los complejos  $Ads\_AA(OH)$  solo el grupo hidroxilo está involucrado en la adsorción sobre el sitio activo, es decir que es el mismo oxhidrilo del AA el que interacciona con el sitio ácido de Brønsted ( $C_A-O_A \cdots H_Z$ ) y por otro con el sitio básico de la zeolita ( $O_A-H_A \cdots O_{Z2}$ ).



**FIGURA 2.** Grafo molecular de la densidad electrónica  $\rho(r)$  para los distintos complejos  $[Ads\_AA(C=O)]$  y  $[Ads\_AA(OH)]$ . Para mayor claridad, se han omitido los átomos de H terminales del agregado zeolítico.

		H-ZSM5			H-BETA			H-Y			
		n	$\Sigma\rho(r)$	%	n	$\Sigma\rho(r)$	%	n	$\Sigma\rho(r)$	%	
<b>Ads_AA(C=O)</b>	adsorción	C <sub>A</sub> =O <sub>B</sub> ···Hz	1	0,0828	46,1	1	0,1243	70,6	1	0,0934	69,1
		O <sub>A</sub> -H <sub>A</sub> ···Oz <sub>2</sub>	1	0,0344	19,2	1	0,0469	26,7	1	0,0403	29,8
	confinamiento	C-H···Oz	3	0,0150	8,3	3	0,0042	2,4	5	0,0014	1,0
		C <sub>A</sub> -O <sub>A</sub> ···Oz	3	0,0257	14,3	-	-	-	-	-	-
		C <sub>A</sub> =O <sub>B</sub> ···Oz	3	0,0195	10,9	-	-	-	-	-	-
		C <sub>A</sub> -C···Oz	1	0,0021	1,2	-	-	-	-	-	-
<b>Ads_AA(OH)</b>	adsorción	C <sub>A</sub> -O <sub>A</sub> ···Hz	1	0,0484	39,3	1	0,0560	54,9	1	0,0316	28,8
		O <sub>A</sub> -H <sub>A</sub> ···Oz <sub>2</sub>	1	0,0342	27,8	1	0,0232	22,8	1	0,0285	26,0
	confinamiento	C-H···Oz	2	0,0142	11,5	1	0,0105	10,3	1	0,0115	10,5
		C <sub>A</sub> =O <sub>B</sub> ···Oz	2	0,0150	12,2	2	0,0001	0,1	4	0,0381	34,7
		C <sub>A</sub> -C···Oz	2	0,0112	9,1	2	0,0121	11,8	-	-	-

<sup>a)</sup>Cantidad de interacciones [n], suma de la densidad electrónica en u.a., [ $\Sigma\rho(r)$ ], contribución porcentual a la densidad electrónica total de las interacciones adsorbato-catalizador (%)

Se observa que, en los tres modelos de zeolitas estudiados en sus diferentes modos de adsorción, el sustrato interactúa con otros oxígenos adyacentes del catalizador. En H-ZSM-5, al tener poros con un diámetro menor, el sustrato se acomoda dentro de la cavidad de manera que los átomos restantes del ácido acético quedan

próximos a un gran número de átomos del catalizador por el cual es el modelo con el mayor número de interacciones manifestadas, tanto en la especie más estable como en la de mayor energía. Estas interacciones involucradas con el efecto de confinamiento son importantes en ambos modelos de adsorción, sin embargo contribuyen más significativamente en la especie más estable [34,7% en Ads\_AA(C=O) vs 32,8% en Ads\_AA(OH)]. Para las zeolitas de mayor tamaño H-Beta y H-Y la contribución del efecto de confinamiento no es importante para el modo de adsorción más estable (2,4% en H-Beta vs 1% en H-Y), por lo que en estos complejos adsorbato-catalizador la fuerza ácida es la principal responsable de la estabilidad, esto se debe a que el sustrato se puede acomodar de modo de favorecer interacciones más fuertes con el sitio activo. Por otra parte, para el modo de adsorción menos estable, la contribución al confinamiento pasa a ser importante, sin embargo las energías de adsorción son elevadas. Adicionalmente, la fortaleza de la interacción relacionada con la adsorción sobre el sitio ácido de Brønsted del catalizador en Ads\_AA(C=O) para H-ZSM-5 y H-Beta es aproximadamente el doble respecto a los complejos Ads\_AA(OH), y del orden del triple en HY, dando idea de la estabilidad y su mayor aporte a la energía de adsorción [C<sub>A</sub>=O<sub>B</sub>···Hz vs C<sub>A</sub>-O<sub>A</sub>···Hz].

**Conclusiones** Los resultados muestran que la adsorción del ácido en cavidades más pequeñas permite un mejor ajuste y así una adsorción más fuerte en el sitio activo, la mayor contribución de las interacciones débiles entre zeolita y adsorbato favorece de manera significativa al efecto de confinamiento y la estabilidad. Para zeolitas de cavidades de gran tamaño el efecto de confinamiento no es importante y toda la energía de adsorción se relaciona con la interacción en el sitio activo.

## Bibliografía

- Bader, R. F. W. "Atoms in Molecules. A Quantum Theory" (1990); *Oxford Science Publications, London*.
- Bedard, J.; Chiang, H. & Bhan, A. (2012) *J. Catal.*, 290, 210.
- Frisch, M. J., et al. Gaussian 09 (2009.), revision A.01; Gaussian, Inc.: Wallingford, CT.
- Gomes, G.J.; Zalazar, M. F.; Lindino, C. A.; Scremin, F. R.; Bittencourt, P. R.; Budke Costa, M.; Peruchena, N. M. (2017) *Microporous and Mesoporous Materials*, 252, 17.
- Keith, T. A. AIMAll (2013) Overland Park KS, USA, TK Gristmill Software.
- Financiamiento** Consejo Interuniversitario Nacional (Argentina) y Secretaría General de Ciencia y Técnica de la Universidad Nacional del Nordeste.