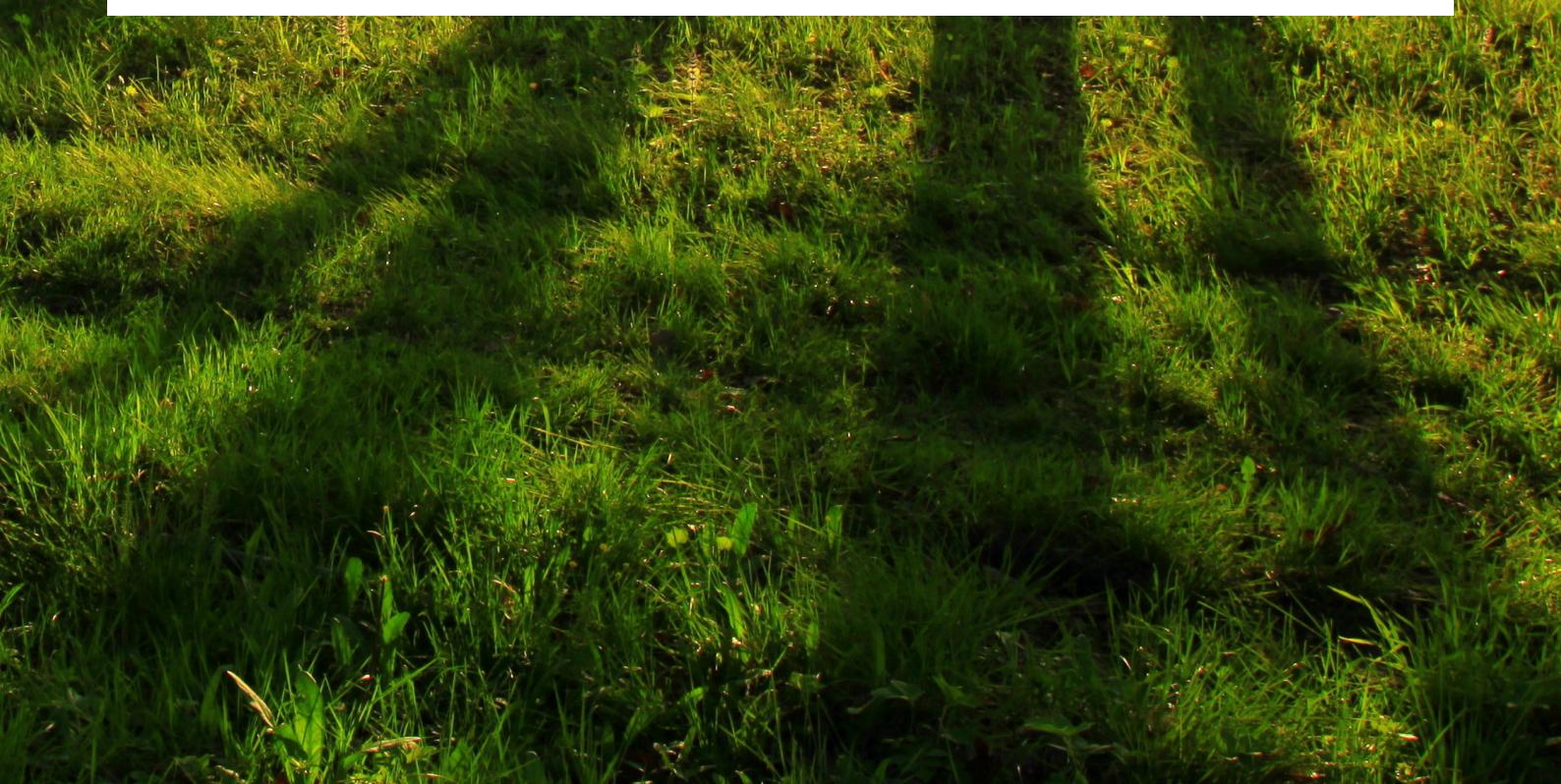


**Congreso Argentino de Fisicoquímica y
Química Inorgánica - La Plata 2021**



*En memoria del Profesor
Dr. Alejandro Jorge Arvia
14/01/1928-22/04/2021*

Comité Organizador

Presidente:

- Ing. Liliana M. Gassa

Vicepresidente:

- Dra. María Eugenia Tuceri

Secretaria:

- Dra. María Paula Badenes

Prosecretaria:

- Dra. Larisa Bracco

Tesorera:

- Dra. Carolina Vericat

Vocales:

- Dra. Carolina Lorente
- Dr. Ezequiel Wolcan
- Lic. Claudia Chacón Gil
- Lic. Valentín Villarreal
- Lic. Yoskiel Lorca
- Lic. Paolo Zucchini
- Dr. Fabricio Ragone
- Mag. Wilfred Espinosa
- Lic. Yeljair Monascal

Comité Científico

Presidente:

- Dra. Florencia Fagalde

Delegación UNS, Bahía Blanca:

- Dr. Juan Manuel Sieben
- Dra. Graciela Pilar Zanini
- Dra. Mariana Alvarez

Delegación CONEA, CAC - Buenos Aires:

- Dra. Verónica Lombardo
- Dr. Nahuel Montesinos

Delegación UNC, Córdoba:

- Dra. Belén Blanco
- Dr. Sergio Dassie
- Dr. Gustavo Pino

Delegación UNNE, Corrientes:

- Dra. María Fernanda Zalazar
- Dr. Emilio Luis Angelina (UNNE)

Delegación UNLP, La Plata:

- Dra. Andrea Lorena Picone
- Dra. Rosana Romano
- Dra. Melina Cozzarin
- Dr. Gustavo Ruiz

Delegación UNRC, Río IV:

- Dr. Walter A. Massad
- Dr. Mariano Correa
- Dr. Rodrigo Palacios

Delegación UNR, Rosario, Santa Fé:

- Dr. Sebastián Bellú
- Dr. Juan Carlos González

Delegación Santa Fé

- Dra. Claudia Neyertz

Delegación UNSL, San Luis:

- Dr. Germán Gómez
- Dra. Griselda Narda

Delegación UNSE, Santiago del Estero:

- Dra. Ana Ledesma
- Dra. Valentina Rey

Delegación Tucumán:

- Dra. Aída Ben Altabef
- Dr. Mauricio Cattaneo



UNIVERSIDAD
NACIONAL
DE LA PLATA



ASOCIACIÓN ARGENTINA DE INVESTIGACIÓN FISICOQUÍMICA

aaifQ

XXII CONGRESO ARGENTINO DE FISICOQUÍMICA Y QUÍMICA INORGÁNICA LA PLATA 2021

DIVERSIDAD CATALÍTICA EN ZEOLITAS: INFLUENCIA DEL EFECTO DE CONFINAMIENTO EN LA ADSORCIÓN DE ÁCIDO ACÉTICO Y SU RELACIÓN CON LAS CARACTERÍSTICAS TOPOLOGÍGICAS DEL CATALIZADOR

Romero Ojeda, Gonzalo D; Gomes, Glaucio; Peruchena, Nélida M. y Zalazar, María F

Laboratorio de Estructura Molecular y Propiedades (LEMyP), Instituto de Química Básica y Aplicada del Nordeste Argentino (IQUIBA-NEA, CONICET-UNNE), Av. Libertad 5460 (3400). Corrientes, Argentina. mfzalazar@conicet.gov.ar

En virtud de la presencia de microporos, las zeolitas presentan una elevada complejidad debido al efecto de confinamiento. La combinación entre el tamaño de los espacios vacíos confinados y la fuerza ácida de estos sólidos, determinan su actividad catalítica. En las reacciones de esterificación catalizadas por zeolitas se presenta la adsorción de ácidos carboxílicos como un paso relevante en el mecanismo¹. El objetivo de este trabajo es estudiar, desde el punto de vista de la distribución electrónica, el efecto de confinamiento sobre la adsorción de ácido acético (como molécula modelo de ácidos grasos libres) en las zeolitas H-ZSM-5, H-Beta, H-MOR y H-Y -considerando sus diferencias en relación a tamaño de poro, cavidad y estructura tridimensional- e inferir su contribución a la actividad catalítica. La estructura de los catalizadores se representó con un modelo de agregado 46T (T=Si,Al) para H-ZSM-5, 52T para H-Beta, 70T para H-MOR y 84T para H-Y. Los cálculos se realizaron con los programas Gaussian09 y AIMAll a nivel M06-2X/6-31++G(d,p)//M06-2X/6- 31G(d). Se hallaron las estructuras más estables para la adsorción de ácido acético sobre el sitio ácido de Brønsted de cada uno de los modelos zeolíticos (Fig. 1). Se cuantificaron y discriminaron las interacciones debidas a la adsorción y al confinamiento (Fig. 2). Los resultados revelaron para ambos modos de adsorción de ácido acético (adsorción por carbonilo e hidroxilo sobre el sitio ácido) que en zeolitas monodimensionales (H-MOR) y aquellas tridimensionales con cavidades pequeñas (H-ZSM-5) la estructura de la zeolita permite una ubicación de la molécula huésped que favorece la presencia de una mayor cantidad de interacciones débiles adsorbato-catalizador, representando el 32.3% y 34.7% respectivamente del total de la densidad electrónica, por lo que su contribución a la energía de adsorción es importante y favorecen una mayor estabilidad del complejo adsorbido en relación a los otros modelos estudiados. En conclusión, el efecto de confinamiento en zeolitas juega un rol crucial y está relacionado con la estructura mono, di y tridimensional del catalizador que permite estabilizar al ácido acético en su interior.

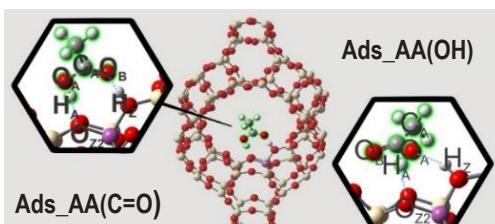


Fig. 1. Diferentes modos de adsorción de ácido acético la sobre cavidad de la zeolita H-Y (poro grande, cavidades de 0,74 nm x 0,74 nm).

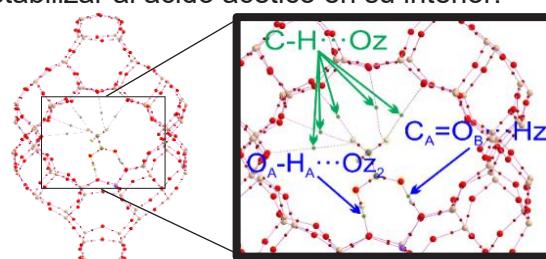


Fig. 2 Grafo molecular de la densidad electrónica $\rho(r)$ para el complejo Ads_AA($C=O$).

- Gomes, G.J.; Zalazar, M. F.; Lindino, C. A.; Scremen, F. R., Bittencourt, P. R.; Budke Costa, M.; Peruchena, N. M. *Microporous and mesoporous materials*. 2017, 252, 17-28