



## **XXVII Comunicaciones Científicas y Tecnológicas**

Orden Poster: CE-026 (ID: 2296)

**Autor: ROMERO OJEDA, GONZALO DAVID**

**Título: ADSORCIÓN DE ÁCIDO LEVULÍNICO Y METANOL EN ZEOLITAS ÁCIDAS DE DIFERENTES TOPOLOGÍA**

Director: Peruchena, Nelida Maria

Co-Director: Zalazar, María Fernanda

Palabras clave: zeolitas ácidas, esterificación, conversión de biomasa, catálisis heterogénea, DFT

Área de Beca: Cs. Naturales Y Exactas

Tipo Beca: Cofinanciadas Doctorales

Periodo: 01/04/2019 al 31/03/2024

Lugar de trabajo: Iquiba Nea - Inst. De Química Básica Y Aplicada Del Nordeste Argentino

Proyecto: (18V002) Modelado de reacciones catalíticas sobre materiales micro-mesoporosos en procesos químicos relevantes de interés industrial.

### **Resumen:**

Entre varias rutas de síntesis química de base biológica, la esterificación del ácido levulínico a ésteres de levulinato presenta un particular interés. Por otro lado, la aplicación de catalizadores sólidos ácidos como las zeolitas ácidas, resulta interesante ya que debido a la presencia de microporos que poseen, presentan una elevada complejidad asociada al efecto de confinamiento. Estudios experimentales encontraron que la actividad de la zeolita parece estar relacionada más con su estructura que con su acidez total. El objetivo de este trabajo fue estudiar la adsorción de ácido levulínico y metanol en zeolitas ácidas de diferente topología y determinar cómo influye la estructura de estos catalizadores en la energía de adsorción y en la actividad catalítica. Las estructuras de los catalizadores se representaron con un modelo de agregado 46T para H-ZSM-5, 52T para H-Beta, 84T para H-Y y de 112T para HMOR. Las optimizaciones geométricas se llevaron a cabo utilizando el método ONIOM en dos capas a un nivel de cálculo M06-2X-/6-31g(d):PM6. El orden de estabilidad de los complejos coadsorbidos fue H-Beta>H-Y>H-ZSM-5>H-MOR siguiendo la misma tendencia encontrada experimentalmente para la actividad catalítica. El motivo por el que para H-Beta la conversión sea más favorable podría explicarse por el hecho de que independientemente de la manera en la que se aproxime el alcohol, los complejos coadsorbidos obtenidos en esta zeolita presentan mayor estabilidad favoreciendo así la continuidad de la reacción esperada.