

Título de la Tesis: “Preparación, caracterización y evaluación de catalizadores basados en metallocenos soportados para la polimerización de propileno”

Doctorado en Química

Autor: Branda, María Marta

Directores: Dr. Daniel E. Damiani - Dra. María L. Ferreira

Resumen

En este trabajo se ha desarrollado la descripción de la estructura superficial de las sílices amorfas (SiO_2) realizando un estudio de su deshidratación. El mismo se encaró desde un punto de vista microscópico, por medio de métodos semiempíricos de orbital molecular, y desde un punto de vista estadístico, a través de una simulación de Monte Carlo. El modelamiento permite una descripción completa de la composición superficial de las diferentes especies hidroxilo presentes durante el tratamiento térmico. Las reacciones de condensación ocasionan una perturbación de la estructura que afecta hasta unas 15 unidades estructurales de la sílice en la vecindad de los pares de hidroxilos reaccionantes.