

Título de la Tesis: "Espectroscopía electrónica de catalizadores metálicos soportados estudio teórico de los corrimientos en energía de las transiciones electrónicas"

Magister en Ingeniería Química

Autor: Castellani, Norberto Jorge

Director: Dr. Dominique Leroy

Resumen

La búsqueda de nuevos catalizadores que permiten lograr una mayor eficiencia y un aumento de la selectividad así como el mejoramiento de los existentes, requieren estudios fundamentales de los mecanismos involucrados. En esta tarea de naturaleza interdisciplinaria, convergen los esfuerzos, por un lado de los químicos catalíticos y de los ingenieros químicos y por otro lado de los físicos de superficie.

La mayoría de los catalizadores metálicos utilizados en los procesos industriales no están en estado masivo sino altamente dispersos y estabilizados sobre soportes de gran área específica. Desde un punto de vista general, el sistema catalítico es, en realidad, un sistema en tres fases (metal, soporte y gas) entre las cuales pueden existir interacciones. La determinación de un mecanismo de reacción requiere el estudio a nivel microscópico del sistema y en particular, de las superficies de la fase metálica ya que ellas participan de manera determinante en el proceso catalítico.

El verdadero progreso en el conocimiento de los procesos involucrados en la catálisis se logró a partir de los años sesenta cuando la investigación experimental se benefició con los aportes de las técnicas de alto vacío. En las cuales, el elevado grado de limpieza hace que casi no existan moléculas adsorbidas sobre los átomos metálicos superficiales. Los mismos pueden entonces ser excitados ya que son accesibles a un bombardeo con partículas (fotones, electrones, e iones) de energía y dirección bien determinadas. Como respuesta la superficie se desexcita emitiendo las mismas u otras partículas, cuyo análisis en energía y dirección revela información sobre el estado físico-químico de los átomos metálicos superficiales. En particular, las modificaciones de la estructura elec-

Título de la Tesis: "Espectroscopía electrónica de catalizadores metálicos soportados estudio teórico de los corrimientos en energía de las transiciones electrónicas"

Magister en Ingeniería Química

Autor: Castellani, Norberto Jorge

Director: Dr. Dominique Leroy

trónica ocasionadas por diferentes tamaños del cristal metálico, diferente soporte o distintos tratamientos óxido-reductores, se reflejan en cambios de la energía cinética de los electrones emitidos durante la desexcitación. El nivel de la información obtenida explica naturalmente el éxito que han tenido estas nuevas técnicas en el área de catálisis heterogénea.

El presente trabajo está dedicado al análisis teórico de los corrimientos en energía, en espectroscopía electrónica, de catalizadores metálicos soportados. Antes de desarrollar el tema, se describe el planteo del problema que nos interesa.