

Título de la Tesis: "Preparación caracterización y actividad catalítica de catalizadores de Ru-Mo activos y selectivos para la obtención de compuestos oxigenados a partir de CO e H₂"

Doctorado en Química

Autor: Juan, Alfredo

Director: Dr. Daniel Damiani

Resumen

Catalizadores bimetalicos han sido utilizados desde hace decadas en procesos industriales, sin embargo el sistema Ru - Mo, investigado en esta tesis es novedoso, y si bien existe abundante información experimental sobre sus componentes, ésta los trata por separado.

Los reportes previos sobre la actividad y selectividad catalítica hacia la producción de compuestos oxigenados, en este sistema bimetalico, nos llevó a plantearnos cuáles eran las características fisicoquímicas que les conferían su comportamiento.

Otro de los interrogantes a responder es qué sentido tiene buscar catalizadores activos y selectivos en la síntesis de oxigenados. Algunas de las posibles respuestas constituyen el capítulo 1. La situación político - económica mundial de estos días agrega un nuevo impulso en la búsqueda de fuentes alternativas de energía. Es posible que el camino que elegimos no sea el más adecuado, pero creemos que es un intento que permitirá la evaluación futura de otras propuestas.

La factibilidad termodinámica, así como los mecanismos de reacción y los requerimientos técnicos de un proceso de síntesis a partir de CO + H₂, son analizados en el capítulo 2.

Título de la Tesis: "Preparación caracterización y actividad catalítica de catalizadores de Ru-Mo activos y selectivos para la obtención de compuestos oxigenados a partir de CO e H₂"

Doctorado en Química

Autor: Juan, Alfredo

Director: Dr. Daniel Damiani

Es en este último capítulo se incluye una revisión bibliográfica de catalizadores en base a Ru, a Mo y a Ru - Mo, enfocada básicamente desde su comportamiento en reacción de gas de síntesis.

El capítulo 3 contiene la descripción de los métodos experimentales utilizados, incluyendo una evaluación crítica de las técnicas de análisis y caracterización.

El estudio de los catalizadores soportados sobre SiO₂ se presenta en el capítulo 4. En este sistema varios comportamientos resultan sumamente interesantes, uno de ellos es la aparición de metanol para catalizadores de Ru puro, donde está presente cloro remanente, y el mismo oxigenado en catalizadores monometálicos de Mo.

Por otra parte, al juntar los dos metales, aparece también etanol, lo que nos podría llevar a pensar en cierta interacción Ru - Mo. Las técnicas de caracterización empleadas revelan esta interacción y posibilitan elaborar un modelo aceptable del sitio activo.

El capítulo 5 está dedicado a catalizadores soportados sobre Al₂O₃, encontrándose algunos comportamientos similares a los de SiO₂, pero influenciados básicamente por una mayor interacción de Mo con el soporte y un mayor porcentaje de cloro remanente. En ambos casos (SiO₂ y Al₂O₃) se estudia al catalizador en tres

Título de la Tesis: "Preparación caracterización y actividad catalítica de catalizadores de Ru-Mo activos y selectivos para la obtención de compuestos oxigenados a partir de CO e H₂"

Doctorado en Química

Autor: Juan, Alfredo

Director: Dr. Daniel Damiani

etapas: antes, durante y después de su participación en la reacción CO + H₂.

Los estudios teóricos desarrollados en el capítulo 6 permiten apoyar los modelos propuestos y proporciona una explicación a la selectividades obtenidas, reportadas en los capítulos 4 y 5. Los resultados del cálculo por orbitales moleculares muestran que este puede ser utilizado como una herramienta útil en la investigación de catalizadores metálicos.

El último capítulo presenta las conclusiones a que hemos arribado. Quedan abiertas sin embargo una gran variedad de propuestas para futuros trabajos.