

Título de la Tesis: "Control de trans-isómeros en la hidrogenación de aceite de girasol"

Doctorado en Ingeniería Química

Autor: Fernández, María Belén

Directores: Dr. Guillermo Crapiste - Dr. Daniel Damiani

## Resumen

En esta tesis se presentan resultados vinculados al estudio de la reacción de hidrogenación convencional de aceite de girasol con el objetivo de reconsiderar este proceso en base a los requerimientos actuales, la obtención de mínimos niveles de isómeros *trans*.

La hidrogenación de aceites es una reacción catalítica que involucra varias etapas químicas simultáneas y consecutivas, así como fenómenos de transferencia de los reactivos y productos hacia y desde la superficie del catalizador. En un principio se empleó un catalizador comercial de Ni en el reactor operando en las condiciones de presión y temperatura normalmente utilizadas en la industria, con el fin de obtener una base para los estudios posteriores, en los que se emplearan nuevas formulaciones de catalizadores. La aplicación de un diseño experimental permitió evaluar el efecto de distintas variables operativas en un estudio preliminar, minimizando la cantidad de ensayos necesarios. Además, se llevó a cabo un estudio detallado sobre las posibles resistencias a la transferencia de masa involucradas en la reacción y su efecto en la selectividad de los catalizadores.

Posteriormente se prepararon catalizadores de paladio con el objeto de evaluar la influencia del soporte, tamaño de partícula de catalizador, dispersión metálica y agregado de un segundo metal (Mo, V o Pb) sobre la actividad y selectividad de estos catalizadores.

Por último se estudió el proceso de hidrogenación de aceites sobre cuatro catalizadores Pd soportados, mediante el estudio de la cinética de la reacción superficial y las limitaciones a la transferencia de masa de reactivos y productos. Se utilizaron diferentes modelos de adsorción para el planteo de la cinética de la reacción. El ajuste del modelo matemático a los datos experimentales permitió obtener los parámetros de adsorción y los parámetros cinéticos de las reacciones de hidrogenación e isomerización.

Título de la Tesis: "Control de trans-isómeros en la hidrogenación de aceite de girasol"

Doctorado en Ingeniería Química

Autor: Fernández, María Belén

Directores: Dr. Guillermo Crapiste - Dr. Daniel Damiani

### Abstract

This thesis presents results regarding the study of the sunflower oil conventional hydrogenation aiming to revisit this process according to the present requirements: obtaining minimum levels of *trans* fatty acids.

The hydrogenation of oils is a catalytic reaction that involves several simultaneous and consecutive steps, transport phenomena of the reactants and products from and to the catalyst surface. At first, a commercial Ni catalyst was employed in a reactor operating at industrial pressure and temperature conditions, in order to obtain a support for the subsequent tests, in which new formulations of catalysts would be employed. The application of an experimental design allowed us to evaluate the effect of different operative variables as a preliminary study, minimizing the amount of experiences. A detailed study on the mass resistances involved in the reaction and its influence on the selectivity was also carried out.

Then, palladium catalysts were prepared and characterized in order to investigate the influence of the support, size of the catalyst particle, metallic dispersion and modification with a second metal (Mo, V or Pb) on the activity and selectivity of these catalysts.

The sunflower oil hydrogenation over four supported palladium catalysts was explored by studying the surface kinetics mass transfer limitations of the products and reactants. Different adsorption models were analyzed with the aim of obtaining a mathematical model that represents appropriately the reaction kinetics. Fitting the model to the experimental data allowed us to obtain adsorption parameters, and hydrogenation and isomerization reaction kinetics parameters.