

SÍNTESIS DE NUEVOS MATERIALES MICROPOROSOS BASADOS EN EL USO DE ESPONJAS DE PROTONES COMO AGENTES DIRECTORES DE ESTRUCTURA (ADES)

OBJETIVOS

Las zeolitas presentan una estructura cristalina con un sistema de poros regulares de dimensiones moleculares y son los catalizadores más utilizados en la industria. En este sentido se demanda la síntesis de nuevos materiales microporosos zeolíticos con topologías de red y composiciones químicas novedosas, ya que una nueva estructura podría incrementar la selectividad hacia el producto deseado en un determinado proceso químico industrial. Las moléculas orgánicas (normalmente cationes amonio) utilizadas como agentes directores de estructura (ADEs) de dichos materiales zeolíticos son las que definen sus poros y/o cavidades.

En el presente proyecto se propone por primera vez una familia de moléculas orgánicas novedosas conocidas como “esponjas de protones” que muestran las propiedades idóneas requeridas para su uso como ADEs (elevada basicidad, tamaño y solubilidad). Estas propiedades junto a la posibilidad de diseñar distintas “esponjas de protones” (con diferente tamaño, geometría, hidrofobicidad, etc.) permitiría introducir nuevo conocimiento en el campo de la síntesis de zeolitas y obtener nuevas estructuras zeolíticas (zeolitas de poro grande o con grandes cavidades) para su aplicación como catalizadores en diversos procesos químicos de relevancia industrial.

METODOLOGÍA DE LA INVESTIGACIÓN

La metodología general incluye:

- ❖ Síntesis orgánica de los agentes directores de estructura orgánicos siguiendo los procedimientos de síntesis orgánica requeridos y utilizando los métodos de caracterización y/o purificación adecuados.
- ❖ Síntesis y caracterización de los materiales microporosos. La síntesis se realiza utilizando metodologías de “Alta-Capacidad” o “High-Throughput” disponibles en el Instituto de Tecnología Química (ITQ). Esta plataforma “High-Throughput”, que

combina la síntesis, caracterización y tratamiento de datos avanzados, permite incrementar la velocidad de descubrimiento de nuevos materiales microporosos y/o la optimización de las propiedades de estructuras microporosas conocidas. La caracterización de todos los materiales sólidos preparados incluye: difracción de rayos-X en polvo (PXRD) para conocer su estructura cristalina, adsorción de nitrógeno y argón para determinar sus características texturales, microscopía de transmisión electrónica (TEM) o microscopía electrónica de barrido (SEM) para conocer el tamaño y forma de los cristales, resonancia magnética nuclear (RMN) para determinar los entornos químico y el estudio de las muestras mediante análisis químico y elemental que permite determinar su composición química.

- ❖ Estudio de la actividad catalítica y selectividad hacia los productos deseados de los materiales microporosos sintetizados en distintos procesos químicos de interés industrial.

RESULTADOS PREVISTOS

Este proyecto trata de mostrar un nuevo concepto en la síntesis de materiales microporosos haciendo uso de “esponjas de protones” como ADEs por primera vez. Se prevé que estos compuestos orgánicos puedan dirigir la síntesis de materiales zeolíticos con novedosas estructuras porosas, que permitan mejorar la producción de los productos deseados en diversos procesos químicos de interés industrial.

Se pretende publicar los resultados conseguidos en revistas de alto impacto, y en el caso de obtener resultados altamente interesantes, proteger la propiedad intelectual de los resultados mediante patentes internacionales. Así mismo, se prevé presentar los resultados obtenidos en congresos nacionales e internacionales.

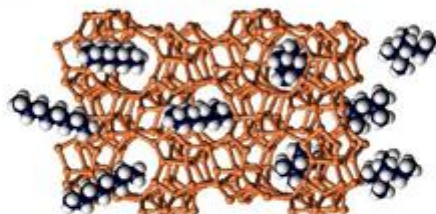
SÍNTESIS DE NUEVOS MATERIALES MICROPOROSOS BASADOS EN EL USO DE ESPONJAS DE PROTONES COMO AGENTES DIRECTORES DE ESTRUCTURA (ADES)

Nuria Martín García
Doctorado en Química Sostenible



SÍNTESIS DE NUEVAS ZEOLITAS CON POROS/CAVIDADES GRANDES

- **Objetivo principal:** Síntesis de nuevas zeolitas estables con poros grandes, particularmente **extra-grandes** ($>10\text{Å}$), y/o **cavidades grandes**.

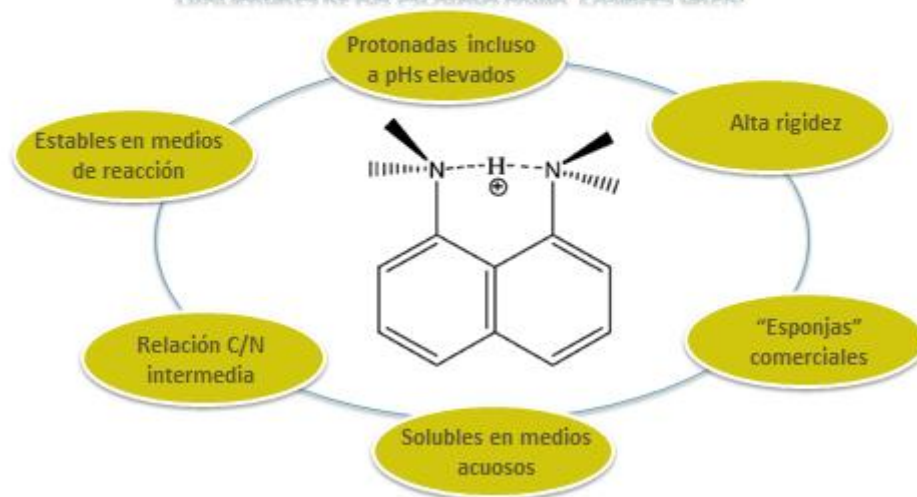


- **Requerimientos de los ADEO para este tipo de estructuras:**
 - Estable en el medio de síntesis
 - Moléculas orgánicas voluminosas (rigidez)
 - Soluble en medio acuoso ($C/N < 15$)
 - Sencillas/económicas de preparar en la medida de lo posible

Se propone el uso por primera vez de "esponjas de protones" aromáticas o cíclicas como ADEO para la síntesis de zeolitas .

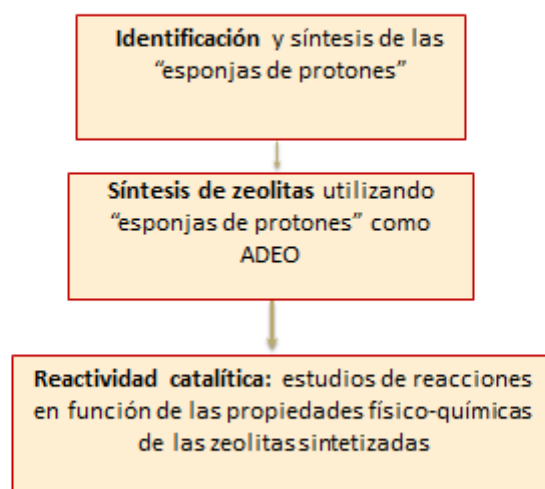
SÍNTESIS DE NUEVAS ZEOLITAS CON POROS/CAVIDADES GRANDES

PROPIEDADES DE LAS ESPONJAS COMO POSIBLES ADEO:



4

METODOLOGÍA



RESULTADOS PREVISTOS

