

## **Encuentro de estudiantes de doctorado**

### **Presentación Oral Raquel Martínez Franco**

TÍTULO: Nuevos agentes directores de estructura para la síntesis de zeolitas con aplicación en catálisis

#### **OBJETIVOS:**

Los materiales zeolíticos presentan un gran interés en diversas aplicaciones industriales tales como separación/adsorción de gases, intercambio iónico y, fundamentalmente, catálisis. Las zeolitas son estructuras cristalinas definidas por canales/cavidades regulares (3-12 Å), cuyo tamaño y composición química definirán el tipo de aplicación de las mismas.

En la síntesis de las zeolitas influyen un gran número de variables, destacando la naturaleza química de los elementos de la red cristalina, la presencia de cationes inorgánicos, y/o la naturaleza del agente director de estructura orgánico (ADEO). De todas las variables anteriormente citadas, la elección de la molécula orgánica que se utilizará como ADEO será fundamental para el diseño de la estructura porosa.

En la presente tesis doctoral, se propone el uso de nuevos ADEOs que permitan dirigir la formación de nuevas estructuras zeolíticas con distinta topología de red con aplicación en distintos procesos químicos de interés industrial.

Por un lado, uno de los grandes objetivos en la síntesis de nuevos materiales zeolíticos es la preparación de zeolitas con grandes canales de poro y/o grandes cavidades. Estos materiales tendrían interés en procesos químicos que requieran procesar grandes moléculas (refino y/o petroquímica). Así pues, se propone el uso de moléculas orgánicas aromáticas sencillas como ADEO, que sean capaces de autoensamblarse en agrupaciones más voluminosas, y por tanto, generar grandes poros/cavidades en la zeolita sintetizada.

Por otro lado, se propone la preparación directa en una sola etapa de zeolitas con centros metálicos empleando complejos organometálicos como ADEO. Esta metodología, permitirá disminuir el número de etapas de síntesis, y por tanto reducir costes en su preparación, y también posicionar selectivamente los centros activos metálicos para su uso directo en procesos químicos de interés industrial (p.e. eliminación de NO<sub>x</sub>).

#### **METODOLOGÍA A UTILIZAR:**

La metodología general de trabajo, incluye la síntesis y caracterización de nuevas zeolitas, así como el estudio de las aplicaciones catalíticas adecuadas para estos materiales. Para ello se tendrá en cuenta la composición química, el tipo de reactivos, el tiempo y la temperatura de síntesis. Todos los materiales se caracterizarán por difracción de rayos-X para determinar su estructura, por adsorción de N<sub>2</sub> y Ar para determinar sus características porosas, por microscopía electrónica para conocer el tamaño y forma de los cristales, y por resonancia magnética nuclear para saber la coordinación de los diferentes heteroátomos. Finalmente, se estudiará la actividad catalítica y selectividad en los procesos químicos más adecuados para cada catalizador.

## **RESULTADOS PREVISTOS**

Se espera sintetizar nuevas estructuras zeolíticas u optimizar el método de preparación de algunas ya conocidas, con el fin de reducir considerablemente los costes de su preparación, e incrementar a su vez las posibilidades de su posible aplicación industrial. Entre los procesos industriales que se pretenden estudiar con los nuevos catalizadores sintetizados en el presente proyecto, destacan procesos relacionados con el refino/petroquímica, metanol-a-olefinas, o la reducción selectiva de NOx, entre otros.

Se prevé la divulgación de los resultados obtenidos en revistas de alto impacto, así como en diversos congresos internacionales a través de comunicaciones orales y/o posters. Además, si alguno de los resultados fuera de gran interés, se protegerá la propiedad intelectual mediante patentes internacionales.



INSTITUTO DE  
TECNOLOGÍA  
QUÍMICA

## Nuevos agentes directores de estructura para la síntesis de zeolitas con aplicación en catálisis

Raquel Martínez Franco

Programa de doctorado: En Química Sostenible

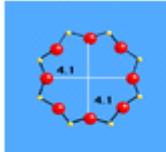


### LINEAS DE INVESTIGACIÓN

Numero de miembros de sus canales/poros:

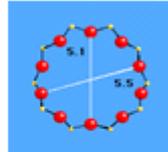
**Pequeño**

8T ( $\cong 4\text{\AA}$ )



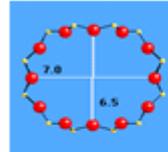
**Medio**

10T ( $\cong 5.5\text{\AA}$ )



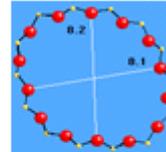
**Grande**

12T ( $\cong 6.5\text{\AA}$ )



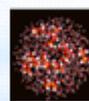
**Extra-Grande**

>12T ( $>7\text{\AA}$ )

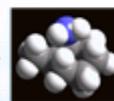


**Grandes Cavidades**

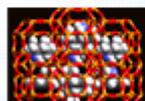
- ADE aromático
- "Interacciones  $\pi-\pi$ "



Heteroátomos,  $\text{H}_2\text{O}$



ADE

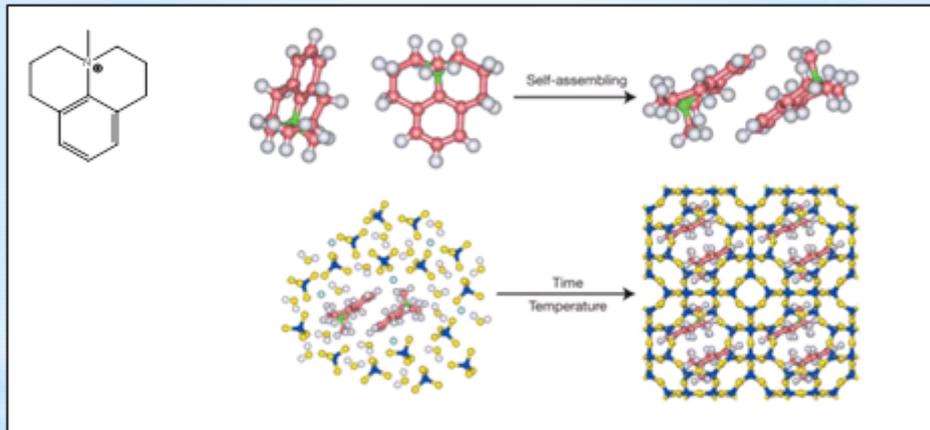


Zeolita

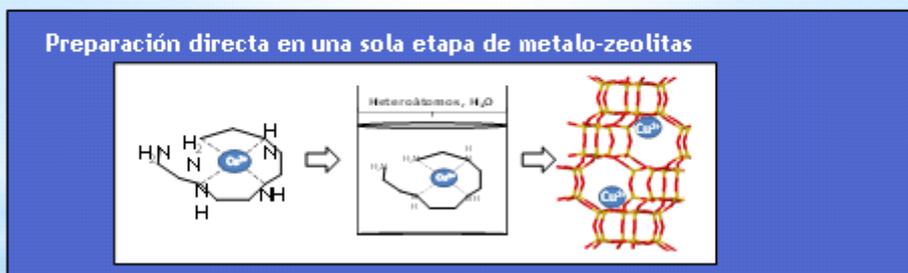
**Grandes Cavidades**

- ADE organometálicos
- ADE bajo coste

## Zeolitas de tamaño de poro pequeño con grandes cavidades



## Zeolitas con centros metálicos empleando complejos organometálicos



## Aplicaciones Industriales

