

## Agregados atómicos de cobre como catalizadores para reacciones orgánicas de interés

Doctorando: Miguel Ángel Rivero Crespo

Directores: Avelino Corma Canós y Antonio Leyva Pérez

### Introducción

La nanotecnología es una materia multidisciplinar emergente en la investigación durante los últimos 20 años. Las dimensiones de la nanotecnología incluyen aquello entre 0,1 y 100 nanómetros ( $1\text{nm} = 10^{-9}\text{ m}$ ). Los nanomateriales en la química se emplean fundamentalmente en catálisis, fotocatalisis, y como sensores.

La aplicación de nanomateriales (clusters y nanopartículas) en catálisis se lleva desarrollando desde hace pocos años pero el interés por este tema ha aumentado exponencialmente. El cambio de propiedades que experimentan los materiales al reducir su tamaño hasta el orden de los nanómetros es debido al confinamiento cuántico, y su dependencia con el tamaño da una enorme versatilidad y ha permitido desarrollar una nueva química antes desconocida.

La aplicación de nanomateriales de cobre a la catálisis es muy interesante debido a sus buenas propiedades catalíticas y su bajo precio respecto a otros metales nobles.

### Objetivos

- Preparación y estudio de “clusters” moleculares de cobre como catalizadores en reacciones orgánicas, principalmente activación de enlaces múltiples, carbono-heteroátomo, carbono-hidrógeno y reacciones redox.
- Estudio de la influencia del tamaño de partícula y estado de oxidación en su actividad como catalizador y selectividad al producto deseado.
- Estudio de la reactividad de las nanopartículas y “clusters” soportados sobre sólidos e influencia del soporte.
- Estudio de las especies activas en reacciones químicas catalizadas por sales y complejos que se evolucionan durante la reacción.

- Búsqueda de generalidades en las propiedades catalíticas de “clusters” de cobre y oro.

### Metodología.

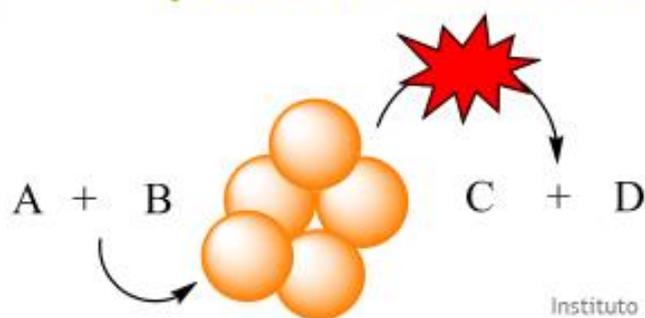
El estudio seguirá el siguiente orden:

- Preparación de “clusters” y nanopartículas de cobre en disolución, de tamaño y forma controlada.
- Soportado en materiales con propiedades conocidas que impartan nuevas propiedades catalíticas al conjunto.
- Caracterización completa de los materiales de cobre mediante las técnicas adecuadas, para conocer su tamaño, forma y carga eléctrica.
- Estudio de la actividad catalítica de los diferentes materiales de cobre para las diversas reacciones de interés. Incluirá estudios cinéticos, mecanísticos y reutilización.
- Comparación de reactividad de clusters de cobre y de oro de forma experimental y mediante cálculos teóricos.
- Generación de conocimiento. Una vez estudiado en profundidad el sistema catalítico de cobre se procederá a evaluar su impacto industrial y científico.

### Resultados previstos y utilidades

La sociedad del bienestar se sustenta, en buena parte, en la catálisis química. Más del 80% de procesos químicos industriales son catalizados, incluyendo la gran mayoría de refino del petróleo, formación de plásticos, química fina, etc. La utilidad de la investigación con “clusters” y nanopartículas de cobre es básica y aplicada. En primer lugar, la catálisis con “clusters” y nanopartículas de cobre está muy poco estudiada y por desarrollar, por lo que los descubrimientos que aquí se hagan crearán nuevos caminos de investigación. Además, cualquier proceso químico catalizado por metales preciosos que sean sustituidos por cobre es, en principio, considerable por la industria química, por lo cual los estudios derivados de este proyecto pueden tener una aplicación industrial directa.

# Agregados atómicos de cobre como catalizadores para reacciones orgánicas de interés



Miguel Ángel Rivero Crespo

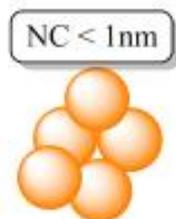
Doctorado en Química Sostenible

Instituto de Tecnología Química (UPV-CSIC)

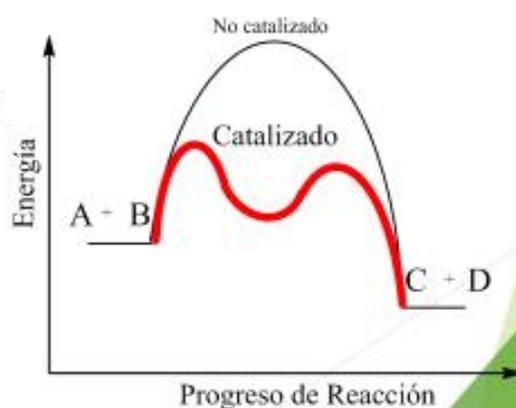
Directores: Avelino Corma Canós y Antonio Leyva Pérez

## Introducción

- ▶ Nanomateriales
  - ▶ Clústeres
  - ▶ Nanopartículas



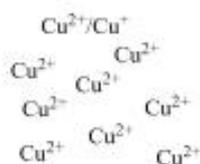
- ▶ Catálisis
  - ▶ Disminución de la energía de activación
  - ▶ Aumento de velocidad de reacción



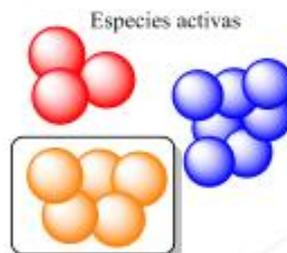
## Objetivos

- ▶ Empleo de NPs y NCs de Cu como catalizadores
  - ▶ Reacciones de interés industrial
  - ▶ Síntesis orgánica, ciencia básica
  - ▶ Estudio de mecanismos de reacción
- ▶ Estudio de especies activas
  - ▶ Reacciones conocidas
  - ▶ Reacciones catalizadas por otros metales
  - ▶ Nuevas reacciones

Sales y complejos de Cu

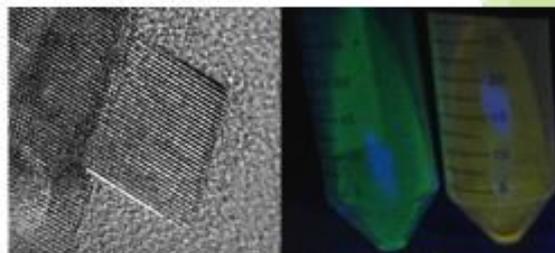


Reactivos



## Metodología

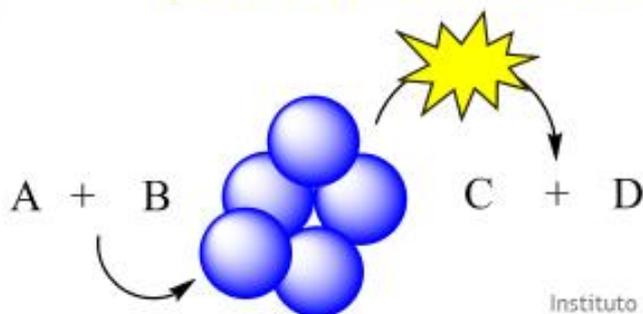
- ▶ Síntesis de NCs y NPs
  - ▶ En disolución
    - ▶ Métodos químicos
    - ▶ Métodos electroquímicos
  - ▶ Soportados
    - ▶ Cambio de reactividad, mecanismos cooperativos
- ▶ Caracterización de especies activas
  - ▶ TEM, Fluorescencia, ESI-MS, etc.
- ▶ Estudio de la actividad catalítica
  - ▶ Estudios cinéticos, mecanísticos y reuso
- ▶ Comparación de nanomateriales de Cu y Au



## Resultados previstos y utilidades

- ▶ Mejora de reacciones químicas conocidas
  - ▶ Menor cantidad de catalizador
  - ▶ Condiciones más suaves
  - ▶ Sustitución de metales nobles (Au, Pd, Pt, etc.)
- ▶ Preparación de catalizadores más activos y selectivos
- ▶ Generación de conocimiento sobre mecanismos de reacción de nanomateriales

## Agregados atómicos de cobre como catalizadores para reacciones orgánicas de interés



Miguel Ángel Rivero Crespo

Doctorado en Química Sostenible

Instituto de Tecnología Química (UPV-CSIC)

Directores: Avelino Corma Canós y Antonio Leyva Pérez