

Plan de Gestión de Datos

INFORMACION SOBRE EL PROYECTO	
1. – Título del Proyecto	
- Título del Proyecto (en castellano)	
Valorización de glicerol mediante reacciones catalizadas por sólidos y/o enzimas	
- Título del Proyecto (en inglés)	
Glycerol valorization through reactions catalyzed by solids and/or enzymes	
-Descripción del Proyecto (en castellano) Resumen	
<p>El objetivo principal de este proyecto es la valorización de glicerol mediante su transformación en productos valiosos empleando catálisis heterogénea y enzimática. Concretamente se propone estudiar la conversión de este polirol a través de varias rutas:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1) Formación selectiva de 1,3 propanodiol a partir de una solución acuosa de glicerol empleando catalizadores mono y bimetálicos soportados que favorezcan selectivamente la ruptura de enlaces C-O preservando la cadena carbonada y evitando reacciones indeseables. 2) Convertir selectivamente glicerol en alcohol alílico en una reacción en fase líquida, evaluando la viabilidad técnica del proceso empleando óxidos metálicos, evaluar el efecto de la temperatura y la cantidad del co-reactivo (alcohol donante de hidrógeno) adicionado para obtener las condiciones óptimas de reacción, incluyendo relación de reactivos, velocidad de agitación y masa de catalizador. 3) Mejorar los procesos comerciales actuales de síntesis ácido láctico mediante el desarrollo de nuevos procesos alternativos no agresivos para el medio ambiente. Se busca obtener selectivamente ácido láctico a partir de hidroxicetonas como la dihidroxiacetona y la hidroxiacetona o acetol (HA), en presencia de agua empleando catálisis ácido-básica heterogénea. Para ello, es imprescindible alcanzar el conocimiento de la química superficial involucrada e identificar las especies superficiales que promueven selectivamente las reacciones consecutivas de isomerización, retroaldolización y deshidratación de las hidroxiacetonas. 4) Desarrollar un proceso catalítico en fase líquida discontinuo o semicontinuo para la producción de solketal evaluando una serie de catalizadores sólidos seleccionados y determinar la influencia de las condiciones de operación (temperatura, presión, relación de reactivos, entre otras) sobre la actividad catalítica, el rendimiento a solketal, la estabilidad y recuperación del catalizador. Se plantea emplear procesos catalíticos heterogéneos, sin uso de solventes, con el propósito de eliminar las etapas de separación y purificación de los productos y así tener un proceso químico más verde. 	

5) Producción de furanonas mediante reacciones de condensación y ciclización. En una primera etapa dos moléculas altamente funcionalizadas, hidroxiacetona y metilglioxal forman un producto aldol mediante una condensación aldólica; esta etapa puede realizarse empleando catálisis enzimática o catálisis heterogénea. La segunda etapa, que involucra la ciclización y deshidratación del producto aldol intermediario para formar la furanona sustituida que se llevará a cabo modificando el pH del medio o bien en presencia de catalizadores inorgánicos. Ambas etapas se estudiarán primero por separado, optimizando en cada caso las condiciones de reacción para favorecer la obtención selectiva del producto deseado.

Luego de seleccionar los catalizadores más promisorios para cada ruta de reacción propuesta y las condiciones óptimas de reacción, se profundizará el estudio del mecanismo de reacción involucrado así como la desactivación de los catalizadores y su potencial reusabilidad, de manera de lograr desarrollar catalizadores activos, selectivos y estables.

-Descripción del Proyecto (en inglés) Resumen

The aim of this project is the valorization of glycerol through its transformation into valuable products using heterogeneous and enzymatic catalysis. Specifically, it is proposed to study the conversion of this polyol through several routes:

1) Selective formation of 1,3 propanediol from an aqueous glycerol solution using supported mono- and bimetallic catalysts that selectively favor the breaking of C-O bonds, preserving the carbon chain and avoiding undesirable reactions.

2) Selectively convert glycerol into allyl alcohol in a liquid phase reaction, evaluating the technical feasibility of the process using metal oxides, studying the effect of temperature and the amount of co-reagent (hydrogen donor alcohol) added in order to obtain optimal conditions of reaction, including ratio of reactants, stirring speed and mass of catalyst.

3) Improve the current commercial lactic acid synthesis processes by developing new alternative processes that are not aggressive to the environment. The aim is to selectively obtain lactic acid from hydroxyketones such as dihydroxyacetone and hydroxyacetone or acetol, in the presence of water using heterogeneous acid-base catalysis. Thus, it is essential to achieve knowledge of the surface chemistry involved and identify the surface species that selectively promote the consecutive reactions of isomerization, retro-aldolization and dehydration of hydroxyacetones.

4) Develop a discontinuous or semi-continuous liquid phase catalytic process for the production of solketal by evaluating a series of selected solid catalysts and determining the influence of operating conditions (temperature, pressure, reactants ratio, among others) on the catalytic activity, solketal yield, stability and recovery of the catalyst. It is proposed to use heterogeneous catalytic processes, without the use of solvents, with the purpose of eliminating the separation and purification stages of the products and thus having a greener chemical process.

5) Production of furanones through condensation and cyclization reactions. In a first step, two highly functionalized molecules, hydroxyacetone and methylglyoxal, form an aldol

product through an aldol condensation (this step can be carried out using enzymatic catalysis or heterogeneous catalysis). The second step, which involves the cyclization and dehydration of the intermediate aldol product to form the substituted furanone, will be carried out by modifying the pH of the medium or in the presence of inorganic catalysts. Both stages will first be studied separately, optimizing the reaction conditions in each case to favor the selective obtaining of the desired product.

After selecting the most promising catalysts for each proposed reaction route and the optimal reaction conditions, the study of the reaction mechanism involved will be deepened, as well as the deactivation of the catalysts and their potential reusability, in order to develop active, selective catalysts. and stable.

-Palabras Clave descriptivas del Proyecto (en castellano)

GLICEROL
CATALIZADORES SÓLIDOS
ENZIMA ALDOLASA

- Palabras Clave descriptivas del Proyecto (en ingles)

GLYCEROL
SOLID CATALYSTS
ALDOLASE ENZYME

2 – Datos del Director/ar del Proyecto

- Nombre y Apellido: María Eugenia Sad

- Unidad Académica: INCAPE –UNL- CONICET

- Teléfono oficial de contacto: + 54 342-4511546

-Teléfono movil de contacto: + 54 3496-419191

-E-mail del Director/a del Proyecto: mesad@fiq.unl.edu.ar

DATOS RESULTANTES DE LA EJECUCIÓN DEL PROYECTO

-Describa la toma de muestras / datos a realizar

Los datos resultantes de la ejecución del proyecto involucran mediciones experimentales realizadas en los laboratorios de INCAPE.

Se obtendrán datos a partir de experiencias catalíticas realizadas en diferentes tipos de reactores disponibles en nuestros laboratorios tales como reactores continuos de lecho fijo para aquellas reacciones que se llevarán a cabo en fase gas como en reactores semicontinuos o discontinuos capaces de operar a presión atmosférica o a mayores presiones cuando las reacciones deban ser conducidas en fase líquida. Además, también se obtendrán datos de ser necesario empleando un equipo de reacción que permite trabaja en fase líquida de manera continua.

Las muestras líquidas o gaseosas colectadas a la salida del reactor serán analizadas por cromatografía gaseosa (GC) o cromatografía líquida de alta performance (HPLC) utilizando diferentes columnas cromatográficas y condiciones experimentales. Cabe remarcar que el grupo de trabajo cuenta con el equipamiento propio necesario tanto para la realización de las reacciones como para la identificación y cuantificación de los productos formados.

Adicionalmente se obtendrán resultados a partir de datos experimentales relacionados con la caracterización de los catalizadores propuestos en este proyecto. Algunas de estas técnicas de caracterización se encuentran disponibles en los laboratorios del grupo GICIC-INCAPE-CCT Santa Fe tales como desorción a temperatura programada de amoníaco pre-adsorbido a 100 °C (DTP-NH₃) y de dióxido de carbono a temperatura ambiente (DTP-CO₂) (para determinar la densidad y fuerza relativa de los sitios ácidos y básicos presentes en el sólido a analizar), reducción a temperatura programada (RTP) (para identificar las especies oxidadas obtenidas en las etapas de descomposición térmica o calcinación y su reducibilidad), adsorción de gases, oxidación a temperatura programada (OTP) (para identificar y cuantificar los residuos carbonosos depositados sobre los catalizadores luego de reacción), UV-Vis, etc. Se tiene acceso dentro de INCAPE a mediciones mediante plasma acoplado inductivamente (ICP) y FRX que se emplearán para determinar la carga metálica de las muestras.

Otras técnicas de caracterización de sólidos, a las cuales el grupo también tiene acceso, pueden realizarse con equipos comunes de INCAPE ubicados en el Edificio Gollán, FIQ-UNL. Allí se dispone del equipamiento necesario para realizar diferentes caracterizaciones como ser: difracción de rayos X (para la identificación de las fases cristalinas y determinación del grado de cristalinidad), espectroscopia infrarroja (FTIR) de piridina (para determinar la naturaleza, fuerza y densidad de los sitios ácidos presentes), FTIR de CO₂ (para caracterizar las propiedades básicas) o FTIR de CO (para estudiar los sitios metálicos superficiales), espectroscopia DRIFT para estudiar in-situ la interacción de diferentes moléculas, reactivos, productos o solventes, con la superficie de las muestras sólidas), termogravimetría (TGA) y calorimetría de barrido diferencial (DSC) (para determinar la temperatura a la que ocurre la descomposición del precursor sobre el soporte, identificación de especies formadas en la preparación, estado de oxidación, etc.), espectroscopia fotoelectrónica de rayos X (XPS) (para determinar el estado de oxidación de los elementos metálicos y no metálicos en la superficie del sólido y su interacción con el soporte), entre otros.

También se tiene acceso a técnicas de caracterización disponibles en el SECEGRIN-CCT Santa Fe, entre las cuales se cuenta: espectroscopia de absorción atómica (EAA) (para la determinación de la composición química del catalizador), Adsorción física de N₂ a -196 °C (para determinar la superficie específica (S_g), el volumen de poros (V_p) y la distribución de tamaño de poro (DTP) de sólidos), microfotografías SEM y TEM.

– Datos: ¿Existe alguna razón por la cual los datos declarados no deban ser puestos a disposición de la comunidad / ser de acceso público? (marque X)	
	NO
	SI. Elija una de las opciones:
	se encuentra en evaluación de protección por medio de patentes no se inició el proceso de evaluación de patentabilidad, pero podría ser protegible X existe un contrato con un tercero que impide la divulgación Otro. Justifique.
– Período de Confidencialidad: Es el periodo durante el cual los datos no deberían ser publicados, contado a partir del momento de la toma de los mismos. El periodo máximo para la no publicación es de 5 (CINCO) años posteriores a su obtención. Luego de este periodo, los datos estarán disponibles para la comunidad / serán de acceso público. Si Ud. considera que este tiempo es insuficiente, y necesita prorrogar el período de confidencialidad, indique sus motivos y la cantidad de años adicionales que considera necesarios. Marque su opción con “X”.	
	1 (UN) año
	2 (DOS) años
	3 (TRES) años
	4 (CUATRO) año
X	5 (CINCO) años
	Otro.
	Motivos:

INSTRUCTIVO PARA LLENADO DEL PLAN DE GESTIÓN DE DATOS

El PGD no es un documento definitivo, sino que se desarrollará a lo largo del ciclo de vida del proyecto.

INFORMACIÓN SOBRE EL PROYECTO

1- Título del Proyecto (en castellano): Deberá ingresar el título completo del proyecto (en castellano), indicando además el código asignado por la SCAyT.

- Título del Proyecto (en inglés): Deberá ingresar el título completo del proyecto en inglés.
- Descripción del Proyecto (en castellano): Deberá ingresar la descripción del Proyecto en castellano.
- Descripción del Proyecto (en inglés): Deberá ingresar la descripción del Proyecto en inglés.
- Palabras Clave descriptivas del Proyecto (en castellano): Deberá ingresar tres palabras clave descriptivas del Proyecto, en castellano.
- Palabras Clave descriptivas del Proyecto (en inglés): Deberá ingresar tres palabras clave descriptivas del Proyecto, en inglés.

2- Datos del Director/a del Proyecto

- Nombre y Apellido del Titular del Proyecto: Nombre completo y apellido del Titular del Proyecto.
- Unidad Académica: Nombre de la UA a la que pertenece el /la directora/a del Proyecto.
- Teléfono oficial de contacto: Número de teléfono de la oficina / laboratorio / Institución del Director/a del Proyecto, donde pueda ser contactado, incluyendo número de área / país (ej: Para la Santa Fe: + 54 9 342 4999-9999).
- Teléfono móvil de contacto: Número de t
- E-mail del Director/a del Proyecto: Correo electrónico de contacto del Director/a del Proyecto.



DATOS RESULTANTES DE LA EJECUCIÓN DEL PROYECTO

- Describa la toma de muestras / datos a realizar: Información descriptiva sobre la toma de muestras que resultaran en datos / conjuntos de datos. La descripción deberá incluir información de contexto (lugar de toman los datos; instrumentos etc).

Datos: ¿Existe alguna razón por la cual los datos declarados no deban ser puestos a disposición de la comunidad / ser de acceso público? Deberá marcar con una “X” la opción correcta. En caso de responder afirmativamente, deberá justificar debidamente, comprendiendo que solo en casos de extrema excepcionalidad esta restricción de acceso a los datos resulta practicable / aceptable.

-Período de Confidencialidad: Es el periodo durante el cual los datos no deberían ser publicados, contado a partir del momento de la toma de los mismos. El periodo máximo para la no publicación es de 5 (CINCO) años posteriores a su obtención. Luego de este periodo, los datos estarán disponibles para la comunidad / serán de acceso público. Si Ud. considera que este tiempo es insuficiente, y necesita prorrogar el período de confidencialidad, indique sus motivos y la cantidad de años adicionales que considera necesarios.