

Plan de Gestión de Datos

INFORMACION SOBRE EL PROYECTO

1. – Título del Proyecto

- Título del Proyecto (en castellano)

“Estudio y diseño de nuevos soportes y catalizadores composite en reacciones de hidrogenación selectiva de interés industrial” [85520240100125LI]

- Título del Proyecto (en ingles)

THE STUDY AND DESIGN OF NEW COMPOSITE SUPPORTS AND CATALYSTS FOR THE SELECTIVE HYDROGENATION REACTIONS OF INTEREST TO THE INDUSTRY

-Descripción del Proyecto (en castellano) Resumen

El presente proyecto tiene como objetivo mejorar y ampliar los usos de la tecnología de preparación de soportes Composite, Patentada por el grupo de investigación. Se propone continuar con el desarrollo de los soportes Composites y modificar la síntesis de los mismos para ampliar su campo de aplicación mediante: a) variación de la naturaleza química de la fase inorgánica con la que se prepara los Composite; y b) el uso de la técnica de porosidad inducida por impresión molecular, para mejorar las propiedades de los mismos en lo relativo a área superficial y porosidad. Esto permitiría desarrollar nuevos soportes y por consiguiente se sintetizarán nuevos catalizadores Composites con propiedades únicas y se ensayaran en reacciones de hidrogenación selectiva con interés industrial, permitiendo producir productos de elevado valor agregado para la industria de Especialidades, Química Fina, Petroquímica, purificación de corrientes industriales, síntesis de productos o intermediarios. Además, se busca que los procesos a desarrollar sean de bajo impacto ambiental, que los catalizadores preparados tengan buena actividad y selectividad. La fase activa sobre los soportes Composites serán las partículas metálicas (catálisis heterogénea tradicional) o compuestos metálicos complejos anclados sobre la fase inorgánica y/o orgánica de los soportes Composites. Las reacciones test serán: a) hidrogenación exocíclica de estireno (purificación corrientes de PyGas), b) purificación de alquenos terminales (para fabricar polímeros), c) hidrogenación estereo-selectiva de 3-hexino o 4-octino (alquinos no terminales), y d) hidrogenación de benceno a ciclohexeno en fase orgánica. Se pretende: a) optimizar el funcionamiento de los catalizadores en cada una de las cuatro reacciones test estudiadas, b) sintetizar catalizadores Composites con diferente naturaleza química de la fase inorgánica, c) Desarrollar una nueva tecnología sintetizando catalizadores Composites con porosidad inducida por impresión molecular como variación a la tecnología actualmente existente. Se persigue obtener catalizadores económicos, con mayor vida útil, elevada actividad, selectividad, estabilidad y resistencia a determinados venenos, de alta resistencia mecánica que puedan ser usados en sistemas industriales continuos. Para los catalizadores que resulten más activos se harán estudios de reusabilidad y regeneración una vez agotados y/o recuperación del metal por vía química.

-Descripción del Proyecto (en ingles) Resumen

The aim of this project is to advance and extend the use of the patented composite support technology developed by the research group and create novel supports and, consequently, innovative composite catalysts with unique properties. The focus is on further developing composite supports and refining their synthesis to expand their applications. This will be achieved by: a) modifying the chemical nature of the inorganic phase used in the composites;



and b) utilizing molecular imprinting to enhance their surface area and porosity.

These catalysts will be tested in selective hydrogenation reactions of industrial importance to produce high-value-added products for various applications such as specialty chemicals, fine chemicals, petrochemicals, industrial stream purification, and the synthesis of products or intermediates.

The processes will prioritize minimal environmental impact, and the catalysts should exhibit good activity and selectivity. The active phase of the composite supports will include metallic particles (for traditional heterogeneous catalysis) or complex metal compounds anchored to the inorganic and/or organic phases of the composites.

Test reactions include: a) exocyclic hydrogenation of styrene (for PyGas stream purification), b) purification of terminal alkenes (for polymer production), c) stereo-selective hydrogenation of 3-hexyne or 4-octyne (non-terminal alkynes), and d) hydrogenation of benzene to cyclohexene in an organic phase.

The study aims to: a) optimize catalyst performance in each test reaction, b) synthesize composite catalysts with different chemical natures of the inorganic phase, and c) develop new technology by creating composite catalysts with porosity induced by molecular imprinting. The goal is to produce cost-effective catalysts with extended lifespan, high activity, selectivity, stability, and resistance to poisons, suitable for continuous industrial systems. For the most effective catalysts, reusability and regeneration studies will be conducted, including metal recovery by chemical methods.

-Palabras Clave descriptivas del Proyecto (en castellano)

Hidrogenación Selectiva,
Catalizadores Composites
Porosidad Inducida

- Palabras Clave descriptivas del Proyecto (en ingles)

Selective Hydrogenation
Composites Catalysts
Induced Porosity

2 – Datos del Director/ar del Proyecto

- Nombre y Apellido

Carlos Román Vera

- Unidad Académica

Facultad de Ingeniería Química

- Teléfono oficial de contacto

0342-4511370 interno: 6102

-Teléfono movil de contacto

0342-5026480

-E-mail del Director/a del Proyecto

cvera@fiq.unl.edu.ar

DATOS RESULTANTES DE LA EJECUCIÓN DEL PROYECTO

-Describa la toma de muestras / datos a realizar

ACT1 - Revisión bibliográfica: La actualización bibliográfica sobre toda información referente a catalizadores y métodos para reacciones de hidrogenación regio y estereo selectiva será constante. Se realizará una exhaustiva búsqueda sobre todas las posibles aplicaciones comerciales de la tecnología en desarrollo.

ACT2- Selección y adquisición de precursores metálicos, soportes y sustratos: Se realizará un intensivo estudio sobre los posibles precursores metálicos de las fases activas, y de diferentes soportes a usar para preparar los catalizadores. Por otro lado, se seleccionarán los sustratos y solventes a utilizar en los test catalíticos. Definidos los materiales se realizará la adquisición de todos ellos.

ACT3- Elaboración de Catalizadores y Soportes "Tipo A" para la preparación de catalizadores egg-shell en Laboratorios 9 y 10 de INCAPE: Se pretende elaborar soporte Composites para la preparación de catalizadores mono y bimetálicos con estructura egg-shell. La técnica de preparación fue desarrollada y patentada por el grupo de trabajo. La fase inorgánica puede estar compuesta por partículas de Al_2O_3 , $CaCO_3$, SiO_2 , ZnO o TiO_2 y monómeros de funcionalidad 2 (dos) como fase orgánico-polimérica. En base a la experiencia del grupo, los monómeros que se emplearán serán: Bis-fenol-A bis(glicidil de metacrilato) [BisGMA], trietilenglicol dimetacrilato [TEGDMA], y dimetacrilato de uretano [UDMA] para preparar diferentes soportes. En la elaboración de soportes para ser usados en la preparación de catalizadores egg-shell, lo más adecuado es utilizar un iniciador de polimerización por temperatura el cual por disponibilidad de información técnica y posibilidad de adquirirlo, se adoptó el peróxido de benzoilo [BPO]. A partir de la combinación de los distintos compuestos de la fase orgánica como de la utilización de partículas inorgánicas de distintas características químicas se pretende obtener soportes con distinto grado de interacción de la fase metálica a depositar que afectará la relación $M^{(d+)}/M^0$ de esta manera se obtendrán distintos soportes y catalizadores Composites.

Con la finalidad de poder comparar resultados en simultáneo se prepararán catalizadores usando como soportes materiales tales como Al_2O_3 , $CaCO_3$, SiO_2 y carbón activado.

Los catalizadores mono metálicos egg-shell se prepararán por impregnación de metales siguiendo la técnica de humedad incipiente. Durante esta etapa se tendrá en cuenta: *solubilidad de la sal precursora del metal; *estabilidad de las soluciones; *condiciones de impregnación (temperatura, humedad del soporte, etc.); *posibles venenos para el catalizador (por ej. SO_4^{2-}) y constituyentes de sales precursoras que pueden ser removidos por medio de procesos de lavados o calcinación (Cl^- , Na^+ , NO_3^- , etc).

Precursores metálicos a emplear: $PdCl_2$, $RuCl_3$, $ZnCl_2$, $CuCl_2$ además de complejos sintetizados por el grupo tetraamminapaladio(II) $[Pd(NH_3)_4]^{2+}$,

tetraamminadiaquacobre(II) $[\text{Cu}(\text{NH}_3)_4(\text{OH}_2)_2]^{2+}$, tetraamminacinc(II) $[\text{Zn}(\text{NH}_3)_4]^{2+}$, entre otras. Una vez impregnados los soportes con las soluciones de precursores, los catalizadores son secados durante 24 h, calcinados (cuando corresponda) y, previo a las evaluaciones catalíticas, reducidos a la temperatura más adecuada para cada metal y soporte. De esta manera se obtendrán diferentes catalizadores metálicos.

Los catalizadores bimetálicos egg-shell se prepararán siguiendo la técnica de humedad incipiente por impregnaciones sucesivas de soluciones de las sales precursoras, o por co-impregnación de ambas soluciones, teniendo en cuenta las mismas recomendaciones mencionadas. Luego de esto se procederá a secar el catalizador durante 24 h, calcinar (cuando corresponda) y previo a las evaluaciones catalíticas se reducirán a la temperatura de reducción más adecuada, obteniéndose así diferentes catalizadores bimetálicos. Se prepararán catalizadores bimetálicos por ejemplo PdZn, y RuZn.

ACT4: Elaboración de catalizadores Tipo B Composites con Porosidad Inducida (Impresión Molecular) en Laboratorios 9 y 10 de INCAPE:

Para la obtención de los soportes Composites se parte de la preparación de una mezcla de monómeros con iniciadores radicalarios de polimerización por y luego es puesto en contacto íntimo con un material particulado de naturaleza inorgánica. Luego mediante el método más adecuado (extrusión, compresión, pelletización, etc) se le confiere la forma física que se desea que posea el catalizador en su estado final, paso seguido, el material es sometido a calentamiento donde el iniciador de polimerización se activa y genera mediante mecanismos de polimerización radicalaria la polimerización de los enlaces vinílicos C=C presentes en los monómeros constituyéndose así la matriz polimérica del material. Con el método de obtención explicado se obtienen soportes sin porosidad interior y son ideales para la elaboración de catalizadores egg-shell. Para la elaboración de los Composites con Porosidad inducida se procede a agregar durante la preparación de la mezcla de monómeros, solventes o compuestos de bajo punto de ebullición que luego durante el procedimiento de polimerización activado por calor o por luz ultravioleta-azul, la temperatura alcanzada en el material generará que los solventes se evaporen, los cuales en su salida del material generarán oclusiones, incrementando la porosidad interior de los Soportes y catalizadores permitiendo el ingreso de las soluciones metálicas de impregnación y de los reactivos en las reacciones. Como solvente de evaporación se emplearán: metanol, diclorometano, etanol y acetona. Para permitir la liberación proveniente de la evaporación de los solventes, se puede llegar a necesitar un sistema de polimerización radicalario de mayor control, es por esto que en vez de utilizar peróxido de benzoilo se decide emplear un sistema de iniciación radicalario activado por lámparas de luz azul, como ser el sistema Camporquinone (CQ) y Etil 4-(dimetilamino)benzoato (EDB) o Camporquinone (CQ) y 2-(Dimetilamino)etil metacrilato (DEM).

En esta serie se priorizará la preparación de catalizadores monometálicos y bimetálicos a base de Ru debido a que resulta ser el mejor metal para la hidrogenación selectiva de

benceno a ciclohexeno. Para la deposición del Ru en los soportes se empleará la técnica de humedad incipiente a partir de soluciones de RuCl_3 mientras que para la preparación de catalizadores bimetálicos se emplearán los métodos de impregnación sucesiva y co-impregnación de las distintas soluciones metálicas. Luego de la impregnación de los metales en el soporte estos se procederán a secar durante 24 h, calcinar (cuando corresponda) y previo a las evaluaciones catalíticas se reducirán a la temperatura de reducción más adecuada, obteniéndose así diferentes catalizadores bimetálicos. En esta serie se pretende elaborar principalmente catalizadores bimetálicos de RuZn. También se realizarán este tipo de síntesis para reacciones de alquinos empleando CaCO_3 como fase inorgánica de los composites, en este caso el metal base de los catalizadores será el Pd y el Cu.

ACT5 – Evaluación catalítica en la estabilización por hidrogenación selectiva de enlaces vinílicos de cortes provenientes de PyGas y/o pirolisis de plásticos en Labs 9 y 10 INCAPE:

Se tomará como reacción prueba la hidrogenación selectiva de estireno, una mezcla de compuestos normalmente presentes en la corriente de PyGas (mezclas de por ej. ciclopentano, metilpentano, n-hexano, ciclohexano, n-octano, xilenos, estireno, dicitlopentadieno) y también cortes reales de gasolina de pirólisis, a proveer por la empresa Pampa Energía SA o Y-TEC. En todos los casos se usará como solvente representativo de estas naftas el tolueno. Además, se usará la hidrogenación de isopreno isoamileno como representativa de hidrogenación de dieno conjugado. Esta reacción nos indica si la actividad en hidrogenación no es demasiada y no se pasa directamente a parafina estando sobre el sitio metálico. La reacción se llevará a cabo en reactores trifásicos del tipo batch (tanque agitado con catalizador en suspensión y en canastas reactor Berty. Se compararán los resultados obtenidos con catalizadores preparados en laboratorio y con otros catalizadores industriales comerciales disponibles (e.g. LD265, Engelhard). Por las características de la reacción se emplearán catalizadores con distribución egg-shell de monometálicos y bimetálicos de Pd (Pd/BTCa, Pd/BTCa-PI, Pd-Ni/BTCa, Pd-Ni/BTCa-PI). La reacción en fase líquida se realizará en un reactor marca Parr tanque agitado de acero inoxidable, cuyas paredes se hallan cubiertas por una camisa de PTFE para evitar el posible efecto las paredes metálicas del reactor. El reactor tiene una capacidad de 350 mL y puede funcionar en forma slurry o Berty. Se trabajará en condiciones en que no haya problemas difusivos. Se trabajará en rangos de 10 a 50 Bar y temperaturas entre 343 K y 423 K. Para los sistemas catalíticos más activos y selectivos se evaluará el comportamiento frente a agentes envenenantes que puedan estar presentes en las corrientes de alimentación, tales como compuestos de azufre y/o agua. En condiciones industriales el contenido de este tipo de compuestos puede variar dependiendo de cuál sea la procedencia de la materia prima. Para evaluar la resistencia a agentes envenenantes, se harán corridas incorporando al reactivo pequeñas cantidades similares a las encontradas en condiciones reales (concentraciones

en 50 a 300 ppm) de compuestos sulfurados (como tiofeno, tiofano) y agua

ACT6: Purificación de corrientes de 1-olefinas: Hidrogenación selectiva de alquinos terminales en Labs 9 y 10 INCAPE:

6.1 Estudio de hidrogenación de 1-olefinas en fase líquida modo batch

Los alquenos u olefinas son compuestos de gran importancia, fundamentalmente para la síntesis de polímeros. La hidrogenación de impurezas (alquinos) es importante para definir la calidad de los productos finales. Como reacción sonda se usarán mezclas de alquinos y alquenos de composición similar a las corrientes industriales. En un principio se evaluará la actividad y selectividad de los catalizadores egg-shell metálicos y bimetálicos sobre la hidrogenación de mezclas en fase líquida de por ej: 1-pentino/1-penteno, o 1-heptino/1-hepteno en reactores semicontinuos. Una vez optimizada la preparación de los catalizadores Tipo A y B, se implementará un sistema continuo en fase líquida para la optimización del proceso industrial de purificación de la corriente C₂-C₆ de 1-olefinas con el fin de hidrogenar selectivamente las impurezas de alquinos presentes en las mismas.

A modo de ilustración se evaluarán catalizadores metálicos de Pd y Cu y bimetálicos de PdCu. La reacción se llevará a cabo en fase líquida, en reactores tanques agitados de acero inoxidable semicontinuos y cuyas paredes se hallan cubiertas por una camisa de polytetrafluoroethylene (PTFE) para evitar el posible efecto de los iones provenientes de las paredes del mismo. Se trabajará a moderadas condiciones de presión y temperatura: próximas a 1 Bar y menores a 313 K, en condiciones en que no haya problemas difusivos. Como solventes se usará por ej. Tolueno, n-heptano, etanol, etc. Reactivos y productos se analizarán por cromatografía gaseosa usando un detector FID y una columna capilar GS-GASPRO 113-4362 (de 60 m). Se usará el catalizador comercial de Lindlar como referencia. En esta reacción se pretende además comprobar la incidencia de la fase inorgánica de los catalizadores Composites, se espera una mejora cuando la fase inorgánica sea CaCO₃ la cual es la base de los catalizadores Lindlar.

Los resultados de las evaluaciones catalíticas se usarán para mejorar el diseño de los catalizadores y optimizar las condiciones de operación del proceso.

En esta reacción se empleará como técnica complementaria DRIFTS-FTIR tratando de correlacionar los resultados obtenidos en las experiencias batch con los fenómenos y especies intermediarias de transición durante la reacción en la superficie de los catalizadores.

6.2 Estudio DRIFTS-FTIR de hidrogenación de 1-olefinas de corrientes de 1-olefinas: Hidrogenación selectiva de alquinos terminales en Lab 9 de INCAPE

Adsorción-Desorción de 1-Pentino: DRIFT In-Situ

El análisis de espectroscopia infrarroja con reflectancia difusa (DRIFT) in-situ se

realizará en un equipo FTIR Shimadzu Affinity-1S, acoplado con una celda térmica DRIFT con espejo de ZnSe. Para cada análisis se utilizará ~ 30 mg de sólido, conformado por una mezcla catalizador/KBr (50/50). Las muestras serán reducidas in-situ a distintas temperaturas por 30 min en flujo de H₂, para llevar a cabo la adsorción con las mismas condiciones de reacción, posteriormente se someterán a vacío durante 30 min y se enfriará a la temperatura deseada. Previo a la adsorción del alquino se realizará el background de las muestras. Los experimentos de adsorción se realizarán, pasando 8 mL/min de N₂ o Ar a través del saturador con 1-pentino puro a 303 K y 1atm, lo equivalente a una fracción molar de 0,015 de alquino en fase gas. Se tomarán espectros cada 2 min durante 30 min en modo transmitancia con resolución de 4cm⁻¹ y 64 scans. Los espectros se procesarán mediante el método Kubelka-Munk. Para la desorción, se cierra el paso de alquino a la cámara DRIFTS y se deja el flujo de gas inerte, inicial para observar, la fortaleza de las especies adsorbidas en los catalizadores. Se tomarán espectros cada 2 min durante 30 min en modo transmitancia con resolución de 4cm⁻¹ y 64 scan.

Hidrogenación de 1-Pentino: DRIFT-In Situ-Operando

El análisis de espectroscopia infrarroja con reflectancia difusa (DRIFT) in-situ se realizará en un equipo FTIR Shimadzu Affinity-1S, acoplado con una celda térmica DRIFT con espejo de ZnSe. Para cada análisis se utilizará ~ 30 mg de sólido, conformado por una mezcla catalizador/KBr (50/50). Las muestras serán reducidas in-situ a distintas temperaturas por 30 min en flujo de H₂, para llevar a cabo la adsorción con las mismas condiciones de reacción, posteriormente se someterán a vacío durante 30 min y se enfriará a la temperatura deseada. Previo a la adsorción del alquino se realizará el background de las muestras. Los experimentos de hidrogenación se llevarán a cabo, pasando 6 mL/min de H₂ a través del saturador con 200µL de 1-pentino puro a 303 K y 1atm. Se tomarán espectros cada 2 min durante 30 min en modo transmitancia con resolución de 4cm⁻¹ y 64 scans. Los espectros serán procesados mediante el método Kubelka-Munk.

DRIFT de Piridina

Se incorporará al equipo de trabajo, la técnica de determinación de acidez superficial mediante la adsorción de una molécula sonda (en este caso Piridina) de los catalizadores. Para ello se empleará la celda o cámara DRIFT acoplada a FTIR con el sistema de alto vacío. Con esta técnica es posible distinguir entre la acidez de Bronsted y de Lewis en la superficie del sólido con alguna característica ácida. Para llevar a cabo esta experiencia se utilizarán 25 mg de cada muestra pura y se calentarán hasta 400 °C en flujo de N₂ o Ar por 30 min. Luego se someterá a vacío durante 30 min, para eliminar el agua residual. La celda se enfriará a una temperatura deseada y se hace registro del background. Posteriormente se introduce la piridina en flujo de gas inerte a durante 30 min. Todas las medidas se realizaron a esta temperatura para eliminar la piridina fisisorbida. A continuación, la muestra se calienta durante 30 min y se somete a vacío para eliminar restos de piridina y agua, luego se enfrió a la temperatura fijada se toma el

espectro final.

ACT7: Hidrogenación Regio y Estereoselectiva de Alquinos No Terminales a (Z)-alquenos en Labs 9 y 10 INCAPE:

Un aspecto muy importante es la estereoselectividad. De hecho, la hidrogenación parcial de alquinos no terminales y selectiva al isómero (Z) conducida sobre catalizadores heterogéneos es uno de los métodos más importantes para la síntesis de (Z)-olefinas o de compuestos biológicamente activos que son utilizadas en Química Fina, Industrias de Alimentos y Farmacéutica, entre otras. Se ha encontrado para catalizadores monometálicos, bimetálicos y usando complejos de metales de transición anclados sobre alúmina o carbón activado, que las condiciones que favorecen la formación del (Z)-isómero son bajas P (<2 Bar) y T (<323 K).

Reacción Test: Hidrogenación selectiva 3-hexino y 4-octino usando como tolueno (solvente), reactor tipo tanque agitado discontinuo de acero inoxidable recubierto su interior con PTFE y equipado con agitador y acoplamiento magnético. Condiciones: Volumen 75 mL, T=273-323 K, PH₂=1.5 bar, 750 rpm, relación molar sustrato:Metal=1100. Reactivo y productos de reacción fueron analizados por cromatografía de gases utilizando un detector de Ionización de Llama (FID) y una columna capilar GS-GAS PRO (60 m long, 0.32 mm ID). Para este sustrato se evaluarán los soportes Composite sintetizados dado que el soporte puede también ayudar a la estereoselectividad, por ej: Pd/BTAI-Mg, Pd/BTCa, Cu/BTAI-Mg, Cu/BTCa, Zn/BTAI-Mg, Zn/BTCa, entre los mencionados, y bimetálicos correspondientes.

ACT8: Hidrogenación selectiva de Benceno a Ciclohexeno en los Labs 9 y 10 INCAPE:

La reacción se llevará a cabo en fase líquida, en reactores tanques agitados de acero inoxidable semicontinuos y cuyas paredes se hallan cubiertas por una camisa de PTFE para evitar el posible efecto de los iones provenientes de las paredes del mismo.

8.1. Proceso con agua: Se realizarán las experiencias empleando catalizadores de Ru soportados sobre soportes comerciales, Composite egg-shell y Composites con porosidad inducida, se realizarán las experiencias de hidrogenación selectiva de benceno a ciclohexeno utilizando las condiciones del proceso industrial Asahi las cuales son en cuatro fases (acuosa, orgánica, sólido-catalizador y gas) utilizando como promotor ZnSO₄.7H₂O para comparar los resultados con los obtenidos en las siguientes etapas. Las condiciones de proceso se encontrarán entre 373 K y 443 K y presiones de hidrogeno entre 10 a 50 bar, con relaciones H₂O/C₆H₆ (v/v) = 1/1 a 4/1.

8.2. Proceso sin agua: Llevar a cabo la misma reacción con catalizadores monometálicos de Ru en fase orgánica, sin agregado de agua para determinar las condiciones operacionales óptimas. En estas reacciones podrá emplear como solvente

metanol, butanol, alcohol isoamílico y heptano o en ausencia de solventes.

8.3. Proceso Empleando catalizadores bimetálicos de Ru: Realizar en las condiciones anteriores (procesos con y sin agua) las experiencias catalíticas empleando los catalizadores bimetálicos preparados con soportes comerciales, Composite egg-shell y Composites con porosidad inducida. Se ensayarán catalizadores bimetálicos principalmente de RuZn

Los ensayos se irán complementando para entender mejor el funcionamiento del sistema e ir sacando conclusiones y mejorando el sistema. Los catalizadores bimetálicos pueden ser replanteados en función de los resultados alcanzados con los catalizadores monometálicos. Principalmente se comparará la actividad, selectividad y rendimiento, obtenidos en las distintas etapas. Para todas las experiencias, las conversiones y selectividad se terminarán por Cromatografía Gaseosa usando una columna capilar GS-GAS PRO (60 m long, 0.32 mm ID).

ACT9: Caracterización de los materiales: Evaluación de las propiedades físicas y químicas en CENACA, CCT Santa Fe, CCT Bahía Blanca, Labs 9 y 10 INCAPE, en Universidad de Alicante España: Se emplearán diversas técnicas de caracterización de materiales, entre las cuales se pueden mencionar: RTP (reducción a temperatura programada), TPO (oxidación a temperatura programada), DeTP (descomposición a temperatura programada), DTP (desorción de especies adsorbidas a temperatura programada), XRD (difracción de rayos X), SEM-EPMA (microscopía electrónica de barrido, microanálisis de rayos X con sonda de electrones), MO (Microscopía Óptica) XPS (espectroscopia fotoelectrónica de rayos X), TGA (Termogravimetría), DSC (Calorimetría diferencial de Barrido), FTIR-DRIFT (espectroscopia de infrarrojo con transformada de Fourier y reflectancia difusa), RAMAN, RMN, Quimisorción de H₂ y CO, Piridina, adsorción de N₂ a 77K, TGA e ICP, TEM, FTIR/DRIFT.

Los resultados obtenidos en esta caracterización permitirán determinar la estructura, textura y propiedades físico-químicas de los catalizadores en función de los diferentes métodos de preparación y de su composición. El objetivo es obtener los datos que permitan relacionar la actividad, selectividad y rendimiento de cada catalizador con sus propiedades electrónicas y fisicoquímicas. A partir de los resultados obtenidos en las etapas de caracterización físico-química y evaluación catalítica, se intentará explicar el comportamiento observado para los catalizadores estudiados. Este análisis permitirá optimizar parámetros de diseño del catalizador y las condiciones de operación de cada proceso.

ACT10: Reusabilidad y regeneración en los Labs 9 y 10 INCAPE:

El elevado costo de los metales de transición usados en la preparación de los distintos catalizadores, sumado a los graves problemas de contaminación ambiental que estos metales provocan, para los catalizadores que resulten más activos y selectivos, se



estudiará la posibilidad de reusarlos, y de regenerarlos una vez agotados. Para ello es importante diseñar materiales que sean altamente estables en las condiciones de reacción, y que puedan ser reutilizarlos. Una vez agotados los diversos catalizadores metálicos y bimetálicos, con el objetivo de reducir la contaminación ambiental y evitar elevadas erogaciones, se pondrán a punto métodos para recuperar el metal de transición involucrado, y de esta manera se buscará regenerar las valiosas sales de los metales de transición utilizados como precursores para la preparación de los catalizadores. Esto permitirá disminuir la contaminación ambiental que se genera por los catalizadores agotados. El desarrollo del proyecto permitirá aportar nuevos datos sobre el conocimiento básico relativo al estudio de la química coordinativa de sustancias puras y la profundización en el conocimiento de sus propiedades catalíticas.

ACT11: Interpretación de Datos, Publicación y Difusión de Resultados y Elaboración final de informe

A partir de los resultados obtenidos en las etapas de caracterización físico-química, evaluación catalítica, se intentará explicar el comportamiento observado para los catalizadores estudiados en cada una de las etapas de este Plan de Trabajo. Este análisis permitirá optimizar los parámetros de diseño del catalizador y las condiciones de operación para cada uno de los procesos estudiados. Se escribirá y defenderá la Tesis para la obtención del grado de Doctora en Ing. Qca. Sofia Delconte y Ing. Qca. Isabel Agudelo, además el Dr. Misael Cordoba completará su formación y continuarán con sus especializaciones. Se pretende escribir manuscritos para su posterior publicación en Revistas internacionales con referato, como así también se presentarán trabajos en Congresos Nacionales e Internacionales. Se elaborará un informe final a la entidad otorgante del subsidio. Si los resultados son promisorios, se iniciarán trámites de protección de la propiedad intelectual.

otorgante del subsidio. Si los resultados son promisorios, se iniciarán trámites de protección de la propiedad intelectual.

– 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)	
	SI
	SI. Elija una de las opciones:
	No se inició el proceso de evaluación de patentabilidad, pero podría ser protegible.



– **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
X	3 (TRES) años
	4 (CUATRO) año
	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.