



Plan de Gestión de Datos

INFORMACIÓN SOBRE EL PROYECTO

1. – Datos del Proyecto

- Título del Proyecto (en castellano)

Procesos catalíticos heterogéneos que emplean hidrogenación e hidrogenólisis para la obtención de productos químicos valiosos y biocombustibles

- Título del Proyecto (en inglés)

Heterogeneous catalytic processes based on hydrogenation and hydrogenolysis for obtaining valuable chemicals and biofuels

- Descripción del Proyecto (en castellano) Resumen

En este proyecto el grupo de trabajo se propone desarrollar procesos catalíticos en fase líquida que empleen H_2 para obtener productos químicos valiosos, tanto en el campo de la química fina como en el de los biocombustibles. La metodología experimental integra la preparación, caracterización y ensayo de los catalizadores en las siguientes reacciones de interés:

1) Síntesis de aminas insaturadas a partir de nitrilos insaturados e H_2 .

El desafío científico consiste en: a) hidrogenar selectivamente el grupo nitrilo ($C\equiv N$) a amina (NH_2) en presencia de un enlace olefínico ($C=C$); b) evitar la condensación de las aminas primarias para formar aminas secundarias y terciarias. Se estudiará la influencia de la sustitución y la posición del doble enlace $C=C$ en los nitrilos insaturados sobre la selectividad del catalizador hacia las aminas primarias insaturadas, sustancias de alto valor en química fina.

2) Obtención de 2,5-dimetilfurano a partir de 5-hidroximetilfurfural e H_2 .

Aquí el foco de la temática se centra en la búsqueda de alternativas energéticas renovables para el sector transporte, mediante la producción de biocombustibles a partir de materias primas derivadas de biomasa. Una molécula plataforma para la obtención de biocombustibles es el 5-hidroximetilfurfural (HMF), obtenido a partir de hexosas y pentosas provenientes de la hidrólisis de biomasa lignocelulósica. Se estudiará la hidrogenación e hidrogenólisis del HFM para obtener 2,5-dimetilfurano (DMF), el cual se considera un promisorio biocombustible líquido con características de densidad energética, número de octanos y emisiones similares a la gasolina.

3) Producción de valerato de pentilo a partir de gama-valerolactona, pentanol e H_2 .

En este caso, la molécula plataforma derivada de biomasa es la gama-valerolactona (GVL), la cual puede ser convertida sobre sistemas catalíticos bifuncionales metal/ácido en presencia de pentanol y por la acción reductora del H_2 en valerato de pentilo (PV). Este éster muestra una mejor volatilidad que los FAMES y presenta algunas ventajas en lo que respecta a lubricidad y propiedades de flujo a baja temperatura, pudiéndose mezclar con un corte diesel tradicional hasta una proporción del 20% en PV sin modificar la eficiencia del motor ni las emisiones. La producción de PV desde GVL, pentanol e H_2 requiere desarrollar un sistema catalítico bifuncional, que promueva la hidrogenación del intermediario 2-pentenoato de pentilo a PV, sin catalizar otras reacciones indeseables.

- Descripción del Proyecto (en inglés) Resumen

In this project, the development of liquid phase catalytic processes based on the use of H_2 to obtain valuable chemicals, both in the field of fine chemistry and in that of biofuels, will be studied. The experimental methodology comprises the preparation, characterization and testing of solid catalysts in the following reactions of interest:

1) Synthesis of unsaturated amines from unsaturated nitriles and H_2 .

Unsaturated amines are valuable intermediates in fine chemistry. The scientific challenge consists of: a) selectively hydrogenating the nitrile ($C\equiv N$) group to amine (NH_2) in the presence of an olefinic bond ($C=C$); b) avoiding condensation of primary amines to form secondary and tertiary amines. The influence of the substitution and the position of the double bond $C=C$ in unsaturated nitriles on the selectivity of the catalyst towards unsaturated primary amines will be studied.



2) Production of 2,5-dimethylfuran from 5-hydroxymethylfurfural and H₂.
Here, the study is focused on the search of renewable energy alternatives for the transport sector through the production of biofuels from biomass-derived raw materials. In this sense, 5-hydroxymethylfurfural (HMF), obtained from hexoses and pentoses coming from the hydrolysis of lignocellulosic biomass, has been identified as a relevant platform molecule for producing biofuels. The hydrogenation and subsequent hydrogenolysis of HFM will be studied to obtain 2,5-dimethylfuran (DMF), which is considered a promising liquid biofuel with gasoline-like characteristics such as energy density, octane number and emissions.

3) Production of pentyl valerate from gamma-valerolactone, pentanol and H₂.
In this case, the biomass-derived platform molecule is the gamma-valerolactone (GVL), which can be converted over bifunctional metal/acid catalysts, in the presence of pentanol, and by the reducing action of H₂ into pentyl valerate (PV). This ester shows a better volatility than FAMEs and has some advantages in terms of lubricity and low temperature flow properties, being able to be blended with traditional diesel up to a proportion of 20% in PV without modifying the efficiency or emissions of the engine. The PV production from GVL, pentanol and H₂ requires developing a bifunctional catalytic system, which promotes hydrogenation of the intermediate pentyl 2-pentenoate to PV, without catalyzing other undesirable reactions.

- Palabras Claves descriptivas del Proyecto (en castellano)

HIDROGENACIÓN/HIDROGENÓLISIS
PRODUCTOS VALIOSOS
CATÁLISIS HETEROGÉNEA

- Palabras Claves descriptivas del Proyecto (en inglés)

HYDROGENATION/HYDROGENOLYSIS
VALUABLE CHEMICALS
HETEROGENEOUS CATALYSIS

2 – Datos del Director/ar del Proyecto

- Nombre y Apellido

Nicolás Maximiliano Bertero

- Unidad Académica

Facultad de Ingeniería Química – Universidad Nacional del Litoral

- Teléfono oficial de contacto

+ 549342-4511546 int 6022

-Teléfono móvil de contacto

+549342-154789544

-E-mail del Director/a del Proyecto

nbertero@fiq.unl.edu.ar

DATOS RESULTANTES DE LA EJECUCIÓN DEL PROYECTO

-Describe la toma de muestras / datos a realizar

Los datos a tomarse a partir de medidas experimentales en laboratorio son resultados de caracterización de los catalizadores obtenibles con alguna técnica instrumental o de laboratorio y resultados de actividad catalítica determinados a partir del análisis cuantitativo de muestras de reacción extraídas de los reactores que operan en fase líquida y donde se llevarán a cabo las reacciones de interés. Estas muestras líquidas serán analizadas por cromatografía gaseosa (GC) utilizando diferentes columnas cromatográficas y condiciones experimentales. En el caso de las técnicas de caracterización, algunas de ellas se encuentran disponibles en los laboratorios del grupo GICIC-INCAPE-CCT Santa Fe como ser: 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 (para determinar la capacidad de quimisorción y la dispersión de la fase metálica), oxidación superficial por descomposición de N₂O (para determinar la dispersión metálica de catalizadores de Cu), oxidación a temperatura programada (OTP) (para identificar y cuantificar los residuos carbonosos depositados sobre los catalizadores luego de una reacción), desorción a temperatura programada de amoníaco preadsorbido 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).
Otras técnicas de caracterización de sólidos, a las cuales el grupo también tiene acceso, están disponibles en el



CENACA-FIQ-UNL como ser: difracción de rayos X (para la identificación de las fases policristalinas obtenidas y estimar el tamaño medio de cristalitas y determinación el grado de cristalinidad), 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.), espectroscopía 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), espectroscopía infrarroja (FTIR) de piridina y CO₂ adsorbidos (para determinar el tipo de acidez, Lewis y Brönsted, o tipo de sitios básicos en la superficie de la muestra, las concentraciones relativas de los sitios ácidos de Lewis respecto de los sitios ácidos de Brönsted y la fuerza relativa de los mismos y además se puede estudiar in-situ la interacción de diferentes moléculas, reactivos, productos o solventes, con la superficie de las muestras sólidas).

También en el SECEGRIN-CCT Santa Fe hay disponibles varias técnicas de caracterización, a las cuales el grupo de trabajo del proyecto tiene acceso, entre las cuales se cuenta: espectroscopía de absorción atómica (EAA) (para la determinación del contenido metálico final del catalizador), plasma acoplado inductivamente (ICP) (también se utilizará para determinar la carga metálica de las muestras), Adsorción física de N₂ a -196 °C (para determinar la superficie específica (S_g), el volumen de poros (VP) y la distribución de tamaño de poro (DTP) de sólidos).

Por otro lado, las muestras de reacción durante los experimentos de actividad catalítica serán extraídas de los reactores de acero inoxidable que el grupo GICIC posee en el laboratorio de alta presión en el Edificio Petunchi del INCAPE-CCT-Santa Fe. Estos reactores son de uso exclusivo del grupo GICIC, contándose con uno de 100 ml de capacidad otro de 600 ml. Ambos reactores están equipados con hornos calefactores, controladores de temperatura, manómetros para medir la presión y un sistema de agitación mecánico por turbina acoplado magnéticamente.

– 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
X	SI. Elija una de las opciones:
	a) Se encuentra en evaluación de protección por medio de patentes
	b) No se inició el proceso de evaluación de patentabilidad, pero podría ser protegible (X)
	c) Existe un contrato con un tercero que impide la divulgación
	d) Otro. Justifique.
– Período de Confidencialidad: Es el período durante el cual los datos no deberían ser publicados, contado a partir del momento de la toma de los mismos. El período 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:

Santa Fe, 23/04/20



INSTRUCTIVO PARA COMPLETAR EL PLAN DE GESTIÓN (PGD)

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 – Datos del Proyecto

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 Claves descriptivas del Proyecto (en castellano): Deberá ingresar tres palabras claves descriptivas del Proyecto, en castellano.

Palabras Claves descriptivas del Proyecto (en inglés): Deberá ingresar tres palabras claves 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 Unidad Académica 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 Santa Fe: + 54 9 342 4999-9999).

Teléfono móvil de contacto: Número de teléfono móvil del director/ar del Proyecto, donde pueda ser contactado, incluyendo número de área/país.

E-mail del Director/a del Proyecto: Correo electrónico de contacto del Director/a del Proyecto.

DATOS RESULTANTES DE LA EJECUCIÓN DEL PROYECTO

Describe la toma de muestras/datos a realizar: Información descriptiva sobre la toma de muestras que resultarán en datos/conjuntos de datos. La descripción deberá



incluir información de contexto (lugar de toma de 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 sólo 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.

Deberá indicar los años que considera necesario prorrogar el período de confidencialidad y explicar los motivos.