

Becario: Emiliano Diez Tortorella

Director: Dra. Sandra Simonetti

Tema: Modelado de catalizadores Ni-Pt para la hidrogenación industrial de aceites comestibles

Informe Final

Exposición sintética de la labor desarrollada

Nuestra finalidad es la aplicación de métodos computacionales a sistemas complejos de interés catalítico que incorporan materiales metálicos utilizados para la industria alimenticia, poniendo especial énfasis en el comportamiento de las interacciones adsorbato-adsorbente. El cálculo computacional nos permite interpretar a nivel molecular los pasos controlantes de la adsorción y reactividad química, siendo su aplicación a procesos de interés tecnológico, un área demandante por quienes desarrollan materiales complejos como catalizadores y adsorbentes. Este campo de investigación posee especial significancia en el estudio posterior de las reacciones de hidrogenación en la fabricación de aceites comestibles.

Durante el desarrollo del plan de trabajo, se alcanzaron los objetivos específicos propuestos, los cuales pueden resumirse en los siguientes puntos:

- Se establecieron las características estructurales del proceso de adsorción del ácido insaturado *cis*-3-hexenoico sobre un catalizador bimetálico níquel-platino.
- Se funcionalizó luego la superficie con paladio para estudiar los cambios en las propiedades catalíticas.
- Se planteó el modelo para el sistema estudiado y se realizaron los cálculos computacionales.
- Se optimizó a la molécula junto a la superficie para obtener la energía mínima total y así poder establecer la geometría de adsorción del ácido sobre el catalizador estudiado.
- Se estudió la rotura de enlaces, en la molécula y el catalizador, producida en el proceso de adsorción.
- Se realizaron estudios de la estructura electrónica y el enlace químico entre las especies involucradas en el proceso de adsorción molécula-superficie.
- Se realizó la comparación de su actividad catalítica con el catalizador monometálico de níquel (estudiado en un trabajo previo).
- Se pudieron establecer las conclusiones finales sobre el sistema estudiado.

- Se redactó un trabajo científico que fue enviado a la revista Catalysis Letters (con referato). Recientemente fue aceptado para su publicación.
- Salió publicado un trabajo, realizado previamente, en la revista Applied Surface Science (con referato).
- Se enviaron cuatro trabajos a congresos internacionales (con referato) para su publicación en actas.

Contribuciones científicas del período

Trabajos científicos publicados en Revistas Internacionales

- . **Characterization of the PtNi(111) surface and their influence on the selectivity of C=C and COOH bonds: a DFT study**
S. Simonetti, E. Diez Tortorella, G. Brizuela, A. Juan
Applied Surface Science 353 (2015) 1164–116.
- . **Selectivity of Pd-funcionalized PtNi(111) surface: cis-3-hexenoic acid adsorption**
S. Simonetti, E. Diez Tortorella, G. Brizuela, A. Juan
Catalysis Letters (aceptado).

Trabajo publicado completo en acta de Congreso Internacional

- . **PtNi(111) catalyst: DFT study of unsaturated organic acid conversion to alcohol**
E. Diez Tortorella, S. Ulacco, S. Simonetti
2nd World Congress and Expo on Nanotechnology and Materiales, Dubai, UAE, 04-06 de Abril de 2016.

Trabajos publicados/a publicar como resúmenes en actas de Congresos Internacionales

- . **Selectivity of C=C and COOH bonds on PtNi(111) surface: computational study**
E. Diez Tortorella, S. Ulacco, G. Brizuela, A. Juan, S. Simonetti
2nd Edition Smart Materials & Surfaces Conference - SMS KOREA 2016, Incheon, Corea del Sur, 23-25 de Marzo de 2016.
- . **Novel PtNi(111) catalyst: DFT study of C₅H₉COOH adsorption**
E. Diez Tortorella, S. Ulacco, S. Simonetti
7th Annual Congress on Materials Research and Technology, Berlin, Alemania, 20-22 de Febrero de 2017 (aceptado).
- . **DFT study of PtNi(111) surface**
S. Ulacco, E. Diez Tortorella, A. Juan, G. Brizuela, S. Simonetti
VIII Congreso Nacional en Ciencia e Ingeniería en Materiales, Cuernavaca, Mexico, 8-10 de marzo de 2017 (enviado).