

Premio a las Mejores Tesis en Ciencias Químicas "Rafael Illescas Frisbie" 2019 en Licenciatura: IQ. Luis Fernando Vázquez Fuentes



IQ. Luis Fernando Vázquez Fuentes.

El ganador del Premio a las Mejores Tesis de Licenciatura en Ciencias Químicas en 2019 fue el IQ. Luis Fernando Vázquez Fuentes egresado de la Universidad del Istmo (UNISTMO), campus Tehuantepec, Oaxaca. Su trabajo de tesis para obtener el grado de licenciatura fue asesorado por el Dr. Jesús Hernández Ventura de la Universidad del Istmo y el Dr. José Antonio Toledo del Instituto Mexicano del Petróleo.

En la tesis titulada "Estudio preliminar de la reacción de hidrodeseoxigenación de vainillina sobre óxidos mixtos Ni-Al₂O₃ derivados de un material tipo hidrotalcita" se evaluó esta reacción de la vainillina como molécula modelo de la despolimerización de la lignina, utilizando un catalizador de óxidos mixtos de NiO-Al₂O₃ derivado de un material hidróxido doble laminar (Ni₆Al₂(OH)₁₆CO₃·4H₂O).

Para la evaluación catalítica se empleó un reactor por lotes de 300 mL. Se realizaron evaluaciones a diferentes condiciones de operación. Primero se mantuvo la presión de hidrógeno fija a 12 kg/cm² y se varió la temperatura en un intervalo de 140 a 320 °C. Posteriormente se fijó la temperatura a 260 °C y se varió la presión de hidrógeno de 6 a 40 kg/cm². Se determinaron las constantes de velocidad, a partir de un esquema de reacción planteado válido para el intervalo de temperaturas evaluadas.

En el intervalo de 140 a 260 °C se observó la eliminación total del grupo carbonilo y la eliminación parcial del grupo metoxilo, obteniendo como subproductos principales al "2-metoxi-4-metilciclohexano-1-ol" y "2-metoxiciclohexano-1-ol" en las evaluaciones de 140 a 220 °C, mientras que a 260 °C los subproductos principales fueron el "4-metilciclohexano-1-ol" y el "ciclohexanol". La desoxigenación aumentó de 35% de HDO (140 °C) a 65% de HDO (260 °C).

Para las evaluaciones de 280 a 320 °C, se observó la eliminación de los tres grupos oxigenados, es decir, se alcanzó una desoxigenación total (HDO de 100%), obteniendo como subproductos principales al "metilciclohexano" y "ciclohexano". A 320 °C se obtuvo una fracción (14%) de aromáticos completamente desoxigenados como el benceno y tolueno. Al aumentar la presión de hidrógeno, la cantidad de productos cíclicos oxigenados aumentó, debido a que la energía de enlace entre el metoxilo unido a un aromático requiere mayor energía para su disociación (Ar-OR; 442 kJ/mol) que un grupo metoxilo unido a un nafteno (R-OR; 339 kJ/mol).

Del ajuste de la concentración de oxígeno a cada tiempo de reacción se obtuvo que, para el intervalo de temperatura de 140 a 220 °C, la eliminación del grupo carbonilo sigue una reacción de pseudo-segundo orden, con una energía de activación de 13.11 kJ/mol. Por otra parte, la eliminación del grupo metoxilo sigue una reacción de pseudo orden cero, con una energía de activación de 14.10 kJ/mol.

Además, para el intervalo de 260 a 320 °C, la eliminación de los tres grupos oxigenados sigue una reacción de pseudo-primer orden, con una energía de activación de 94.21 kJ/mol. La eliminación del grupo carbonilo sucede por dos vías de reacción; la primera por la descabonilación directa y la segunda por la hidrogenación del doble enlace del oxígeno y el carbono. La eliminación de los grupos metoxilo e hidroxilo sucede después de la hidrogenación del anillo aromático.

Trabajos derivados del trabajo de tesis:

Abstract, #19008, "Selective Vanillin Deoxygenation on NiAl Mixed Oxides", for presentation as a poster at the 2019 North American Catalysis Society Meeting in Chicago, IL. (aceptado). Congreso suspendido por Covid-19.

Vázquez-Fuentes, L.F., Cortés-Jacome, M.A., López-Salinas, E. et al. Selective Vanillin Hydrodeoxygenation on Synthetic Takovite Derived NiAlO_x Mixed Oxide. *Top Catal* 63, 428–436 (2020). <https://doi.org/10.1007/s11244-020-01261-8>.

Luis F. Vázquez Fuentes, J. G. Hernández Cortez, M. A. Cortés-Jacome, E. López-Salinas, J. Sánchez Valente, José A. Toledo Antonio. Selective Vanillin Deoxygenation on NiAl Mixed Oxides Presentación Oral. VII Congreso Internacional y XVI Congreso Mexicano de Catálisis CMC 2019. Del 10 al 15 de noviembre del 2019, Villahermosa, Tab.