

UNIVERSITAT ROVIRA I VIRGILI
DISEÑO DE CATALIZADORES PARA UNA OBTENCIÓN LIMPIA DE 2-FENILETANOL
Olga Bergadà Miró
ISBN:978-84-691-0355-5 /DL:T.2186-2007



Universitat Rovira i Virgili

Facultat de Química
Departament de Química Física i Inorgànica

Diseño de catalizadores para una obtención limpia de 2-feniletanol

Memòria de Tesi Doctoral

Olga Bergadà Miró

Tarragona, Juliol 2007

UNIVERSITAT ROVIRA I VIRGILI
DISEÑO DE CATALIZADORES PARA UNA OBTENCIÓN LIMPIA DE 2-FENILETANOL
Olga Bergadà Miró
ISBN:978-84-691-0355-5 /DL:T.2186-2007



La Dra. Pilar Salagre Carnero i la Dra. Yolanda Cesteros Fernández, professores titulars del Departament de Química Física i Inorgànica de la Universitat Rovira i Virgili,

CERTIFIQUEN:

Que la memòria de tesi doctoral “Diseño de catalizadores para una obtención limpia de 2-feniletanol”, que presenta la Sra. Olga Bergadà Miró per a optar al grau de Doctor per la Universitat Rovira i Virgili, ha estat realitzada sota la nostra direcció al Departament de Química Física i Inorgànica de la Universitat Rovira i Virgili.

Tarragona, 27 d'abril de 2007

Dra. Pilar Salagre Carnero

Dra. Yolanda Cesteros Fernández

UNIVERSITAT ROVIRA I VIRGILI
DISEÑO DE CATALIZADORES PARA UNA OBTENCIÓN LIMPIA DE 2-FENILETANOL
Olga Bergadà Miró
ISBN:978-84-691-0355-5 /DL:T.2186-2007

Aquest és el meu espai per dedicar unes paraules d'agraïment als qui m'han fet costat en una etapa molt positiva per a mi, plena de petits moments de diversió, d'emoció, de treball i alguns que altres nervis que, en conjunt, m'han enseyat molt tan a nivell professional com personal.

Voldria mostrar el més sincer agraïment a les meves directores de tesi, la Dra. Pilar Salagre i la Dra. Yolanda Cesteros, per l'oportunitat que em van donar i per la seva excepcional direcció.

Voldria agrair al Dr. Francisco Medina i al Dr. Jesús E. Sueiras la seva aportació professional en la meva formació.

Al grup de Catàlisi Homogènia per transmetre'm els seus coneixements durant els meus anys de tesi.

Agraïr als meus companys de seminari el suport mostrat i els moments que hem compartit. Molts d'ells ja són doctors, d'altres ho serán en breu i n'hi ha que acaben de començar. Marc, Isabel, Isa, Cris, Raquel, Xavi, Rosa, Marta, Ana, Ali, Clara, Yvette, Eva, Aitor, Bianca, Eduardo, Cyril, Jesús, Vanesa, Verónica, Martha, Carolina i Angelica, moltes gràcies. I dedicar un especial agraïment a la resta de companys de Catàlisi Heterogènia: Sònia, Clara, Chimentao, Ilham, Noe, Iuliana, Anton, Marco i Sandra, amb qui he compartit estones de laboratori i una bona amistat.

Voldria donar les gràcies a la M^a José, per tota l'ajuda rebuda durant aquest temps, i a tot el Servei de Recursos Científics i Tècnics de la Universitat Rovira i Virgili.

Gràcies a tots els meus companys/es de la Selva que m'heu animat a fer realitat aquest projecte.

De ben segur que em deixo d'anomenar algú. Durant aquest temps he fet amistats que d'alguna manera o d'una altre han posat el seu granet d'arena en el meu treball i dels que, potser, en aquest moment no me'n recordo. Accepteu les meves disculpes.

Les últimes paraules d'agraïment les dedico a la meva família: papa, mama, Pere i àvia, moltes gràcies pel vostre recolzament que ha fet possible el dia a dia.

A tu Antonio, totes les paraules que em vénen al cap són poques per agrair-te tot el suport que m'has donat. Tan sols et puc recordar que: "*La gota de l'aigua no desgasta la pedra per la seva força sinó per la seva constància*".

UNIVERSITAT ROVIRA I VIRGILI
DISEÑO DE CATALIZADORES PARA UNA OBTENCIÓN LIMPIA DE 2-FENILETANOL
Olga Bergadà Miró
ISBN:978-84-691-0355-5 /DL:T.2186-2007

ÍNDICE

| | <u>Pág.</u> |
|---|-------------|
| 1. Introducción | <u>Pág.</u> |
| 1.1 Producción industrial de 2-feniletanol | 3 |
| 1.2 La catálisis como alternativa para la obtención de 2-feniletanol | 8 |
| 1.2.1 Catálisis homogénea | 8 |
| 1.2.2 Catálisis heterogénea | 10 |
| 2. Objetivos | 21 |
| 3. Parte experimental | |
| 3.1 Catalizadores estudiados | 25 |
| 3.1.1 Sistemas catalíticos de Ni y Ni-MgO | 25 |
| 3.1.2 Sistemas catalíticos basados en compuestos tipo hidrotalcita | 27 |
| 3.1.3 Sistemas catalíticos de Ni-Mordenita | 28 |
| 3.2 Técnicas de caracterización | 31 |
| 3.2.1 Fisisorción de nitrógeno. | 31 |
| 3.2.2 Difracción de Rayos X (XRD) | 33 |
| 3.2.3 Espectroscopía FT-IR | 35 |
| 3.2.4 Desorción a temperatura programada (TPD) | 36 |
| 3.2.5 Espectroscopía de Absorción Atómica (AAS) | 38 |
| 3.2.6 Reducción a Temperatura Programada (TPR) | 39 |
| 3.2.7 Quimisorción de Hidrógeno. Determinación de áreas metálicas | 40 |
| 3.2.8 Microscopía electrónica de barrido (SEM) | 41 |
| 3.2.5 Microanálisis de Rayos X | 42 |
| 3.2.10 Microscopía electrónica de transmisión (TEM) | 43 |
| 3.2.11 Análisis termogravimétrico (TGA) | 43 |
| 3.2.12 Reacciones modelo para estudios de acidez | 44 |

Pág.

| | |
|--|-----------|
| 3.3 Montaje del sistema de reacción e identificación analítica para la reacción de hidrogenación de óxido de estireno | 47 |
|--|-----------|

4. Resultados y discusión

| | |
|---|------------|
| 4.1 Sistemas catalíticos de Ni y Ni-MgO | 51 |
| 4.1.1 Introducción | 51 |
| 4.1.2 Parte experimental | 53 |
| 4.1.3 Discusión de resultados | 56 |
| 4.1.4 Conclusiones | 73 |
| 4.2 Sistemas catalíticos basados en compuestos tipo hidrotalcita | 75 |
| 4.2.1 Introducción | 75 |
| 4.2.2 Parte experimental | 78 |
| 4.2.3 Discusión de resultados | 80 |
| 4.2.4 Conclusiones | 107 |
| 4.3 Sistemas catalíticos de Ni-Mordenita | 109 |
| 4.3.1 Introducción | 109 |
| 4.3.2 Parte experimental | 112 |
| 4.3.3 Discusión de resultados | 116 |
| 4.3.4 Conclusiones | 135 |
| 5. Conclusiones | 139 |
| 6. Referencias bibliográficas | 144 |

