

# ÍNDICE

<b>1. INTRODUCCIÓN</b>	<b>15</b>
1.1 INTRODUCCIÓN GENERAL	17
1.1.1 Química Sostenible	17
1.1.2 Catálisis	22
1.1.2.1 Zeolitas	25
1.1.2.2 Materiales mesoporosos: MCM-41	40
1.1.2.3 Materiales MOF	42
1.1.2.4 Resinas	46
1.1.3 Biomasa y biorrefinerías	48
<b>2. OBJETIVOS</b>	<b>57</b>
<b>3. FRAGANCIAS</b>	<b>63</b>
3.1 INTRODUCCIÓN	65
3.1.1 Química Fina y la industria de fragancias	65
3.1.2 Catalizadores en la industria de Química Fina	70
3.1.3 Terpenos como materia prima: $\beta$ -pineno (1)	73
3.1.4 Obtención y reordenamiento del epóxido de $\beta$ -pineno (2)	77
3.1.5 Obtención de mirtanal (3)	81
3.1.6 Posibles estructuras y características de materiales que pueden emplearse como catalizadores sólidos para la reacción de isomerización del epóxido de $\beta$ -pineno en mirtanal (3)	87
3.1.6.1 Zeolitas	88
3.1.6.2 Materiales MOF	91
3.2 RESULTADOS EXPERIMENTALES	95
3.2.1 Preparación del epóxido de $\beta$ -pineno (2) a partir de $\beta$ -pineno (1)	95
3.2.2 Transformación del epóxido de $\beta$ -pineno (2) en mirtanal (3) en reactores de tanque agitado	97
3.2.2.1 Estudio de la actividad catalítica de diferentes materiales para el reordenamiento del epóxido de $\beta$ -pineno (2) y optimización de las condiciones de reacción	97
3.2.2.2 Selección del catalizador para la transformación del epóxido de $\beta$ -pineno (2) en mirtanal (3) en reactores de tanque agitado	106

3.2.2.3	<i>Estudio de la estabilidad y posibilidad de reuso de Zr-Beta en la transformación del epóxido de <math>\beta</math>-pineno (2) en mirtanal en reactores de tanque agitado</i>	118
3.2.2.4	<i>Transformación del epóxido de <math>\beta</math>-pineno (2) en mirtanal (3) en un reactor de lecho fijo con flujo continuo</i>	123
3.2.2.5	<i>Aislamiento y purificación por destilación de mirtanal (3) resultante de la reacción de transposición del epóxido de <math>\beta</math>-pineno (2)</i>	129
3.3	CONCLUSIONES	129
3.4	PROCEDIMIENTOS EXPERIMENTALES	132
3.4.1	Reactivos de partida y catalizadores empleados	132
3.4.2	Técnicas de caracterización y análisis de los compuestos obtenidos	133
3.4.3	Preparación del epóxido de $\beta$ -pineno (2)	134
3.4.4	Reacción de isomerización del epóxido de $\beta$ -pineno (2) para obtener mirtanal (3)	137
4.	BIOCOMBUSTIBLES	143
4.1.	INTRODUCCIÓN	145
4.1.1	Combustibles fósiles	145
4.1.2	Biocombustibles	151
4.1.3	Procesos de obtención de biocombustible líquido a partir de biomasa	165
4.1.3.1	<i>Obtención de combustible líquido a partir de disoluciones acuosas de azúcares y alcoholes</i>	165
4.1.3.2	<i>Obtención de combustible líquido a partir de ácido levulínico: Ruta C<sub>9</sub></i>	171
4.1.3.3	<i>Obtención de queroseno a partir de ácido levulínico vía <math>\gamma</math>-valerolactona (GVL): Ruta C<sub>4</sub></i>	174
4.1.3.4	<i>Obtención de combustible líquido tipo éster a partir de ácido valérico</i>	176
4.1.3.5	<i>Síntesis de polifurilalcanos</i>	177
4.1.4	Furfural como molécula plataforma para obtener biocombustibles a partir de biomasa	181
4.1.5	Obtención de 5-metilfurfural (9) como molécula plataforma para obtener biocombustibles a partir de biomasa	188
4.1.6	Uso y adaptación de compuestos furánicos para obtener biocombustibles	190

4.2. RESULTADOS EXPERIMENTALES	193
4.2.1 Diseño y descripción del "Proceso Sylvan"	193
4.2.1.1 Etapa de hidroxialquilación/alquilación de 2-metilfurano (8) con compuestos carbonílicos	198
4.2.1.2 Etapa de hidrodeshidrogenación del precursor difuránico	199
4.2.2 Síntesis del precursor furánico	200
4.2.2.1 Reacción de hidroxialquilación/alquilación de Sylvan (8) con butanal (6a)	201
4.2.2.2 Reacción de hidroxialquilación/alquilación de Sylvan (8) y 4-oxopentanal (11) (reacción de trimerización de Sylvan)	234
4.2.2.3 Reacción de hidroxialquilación/alquilación de Sylvan (8) y 5-metilfurfural (9)	254
4.2.2.4 Reacción de hidroxialquilación/alquilación de Sylvan (8) con aldehídos alifáticos	259
4.2.2.5 Reacción de hidroxialquilación/alquilación de Sylvan (8) con cetonas	263
4.2.2.6 Discusión de resultados	279
4.2.3 Reacción de hidrodeshidrogenación del precursor furánico	284
4.2.3.1 Hidrodeshidrogenación de 1,1-bis(5-metil-2-furanyl)butano (10a)	286
4.2.3.2 Hidrodeshidrogenación de 5,5-bis(5-metil-2-furanyl)-2-pentanona (12)	293
4.2.3.3 Hidrodeshidrogenación de diferentes precursores de diesel	301
4.2.3.4 Mecanismo de hidrodeshidrogenación	310
4.2.3.5 Propiedades del diesel obtenido en el "Proceso Sylvan"	327
4.2.3.6 Integración del "Proceso Sylvan" en una biorrefinería	331
4.3. CONCLUSIONES	334
4.4. PROCEDIMIENTOS EXPERIMENTALES	339
4.4.1 Reactivos de partida y catalizadores empleados	339
4.4.2 Técnicas de caracterización y análisis de los compuestos obtenidos	340
4.4.3 Reacción de hidroxialquilación/alquilación	342
4.4.3.1 Reacción de hidroxialquilación/alquilación de Sylvan (8) con butanal (6a)	342
4.4.3.2 Reacción de hidroxialquilación/alquilación de Sylvan (8) con 4-oxopentanal (11) (reacción de trimerización de Sylvan)	347

4.4.3.3	<i>Reacción de hidroxialquilación/alquilación de Sylvan (8) con 5-metilfurfural (9)</i>	354
4.4.3.4	<i>Reacción de hidroxialquilación/alquilación de Sylvan (8) con aldehídos alifáticos</i>	356
4.4.3.5	<i>Reacción de hidroxialquilación/alquilación de Sylvan (8) con cetonas</i>	364
4.4.4	Reacción de hidrodeshidrogenación del precursor furánico	375
4.4.4.1	<i>Procedimiento general para la preparación de los catalizadores empleados en la reacción de hidrodeshidrogenación</i>	375
4.4.4.2	<i>Puesta a punto y procedimiento del reactor de lecho fijo de flujo continuo para la etapa de hidrodeshidrogenación</i>	376
4.4.4.3	<i>Procedimiento general para el estudio de la reacción de hidrodeshidrogenación de 1,1-bis(5-metil-2-furanil)butano (10a)</i>	383
4.4.4.4	<i>Procedimiento general para el estudio de la reacción de hidrodeshidrogenación de 5,5'-bis(5-metil-2-furanil)-2-pentanona (12)</i>	384
4.4.4.5	<i>Procedimiento general para el estudio de la reacción de hidrodeshidrogenación de diferentes precursores de diesel</i>	385
4.4.4.6	<i>Mecanismo de hidrodeshidrogenación</i>	386
<b>5.</b>	<b>BIBLIOGRAFÍA</b>	393
<b>6.</b>	<b>ANEXOS</b>	403
	Anexo I. Numeración y nomenclatura de los compuestos	403
	Anexo II. Índice de Tablas	411
	Anexo III. Índice de Esquemas	416
	Anexo IV. Índice de Figuras	423
	Anexo V. Índice de abreviaturas y acrónimos	435
<b>7.</b>	<b>RESUMEN, RESUM, ABSTRACT</b>	439
<b>8.</b>	<b>PUBLICACIONES Y PATENTES</b>	443

