

La industria petroquímica desempeña un papel vital en la economía global, ya que proporciona materiales esenciales para sectores como la energía, el transporte, el embalaje, los textiles y la construcción. En el centro de esta industria se encuentra la nafta, una fracción de destilación del petróleo crudo que sirve como materia prima clave para la producción de productos de alto volumen como olefinas, aromáticos y precursores de polímeros. Sin embargo, los procesos tradicionales para convertir la nafta, como el craqueo por vapor y el reformado catalítico, son energéticamente muy demandantes y perjudiciales para el medio ambiente. A medida que aumentan las presiones regulatorias y ambientales, surge una necesidad urgente de soluciones catalíticas innovadoras que puedan reducir las emisiones, mejorar la eficiencia y ofrecer una mayor flexibilidad en el uso de materias primas.

Esta tesis se centra en el desarrollo y la evaluación de tres métodos que utilizan catálisis con metales nobles soportados para transformar de manera sostenible los intermedios derivados de la nafta en productos químicos valiosos. Cada método está diseñado para un sector específico de la industria petroquímica: combustibles para aviación, materias primas para polímeros y monómeros aromáticos, mientras se avanza en los objetivos de eficiencia de proceso, circularidad y descarbonización. Se destaca el uso de sistemas catalíticos basados en paladio y rutenio, que ofrecen alternativas energéticamente eficientes y con bajas emisiones para estas transformaciones en el sector petroquímico.

El estudio comienza en el Capítulo 4, donde se investiga la mejora catalítica del aceite KA, una mezcla de ciclohexanol y ciclohexanona derivada del benceno, como una vía prometedora para la producción de combustible de aviación sostenible (SAF, por sus siglas en inglés). Utilizando un catalizador de paladio sobre carbono (Pd/C), el proceso opera bajo condiciones suaves y sin disolventes mediante un mecanismo de transferencia de hidrógeno. Este proceso de conversión genera hidrocarburos C_8 – C_{15} adecuados para aplicaciones en combustible para aviones, logrando una alta economía atómica y eliminando la necesidad de fuentes externas de hidrógeno. La investigación pone especial énfasis en la selectividad de la reacción, la minimización de subproductos y la escalabilidad de este método dentro de las infraestructuras de refinerías existentes. Además, en el Capítulo 5, el enfoque se desplaza hacia la purificación del etileno, un producto clave del craqueo por vapor, mediante la

semihidrogenación selectiva de impurezas de acetileno. Este capítulo examina el rendimiento de catalizadores bimetálicos de paladio (Pd) y paladio-oro (Pd-Au) soportados en zeolitas y marcos metal-orgánicos (MOFs). La incorporación de oro mejora la sintonía electrónica y optimiza la estructura del soporte para reducir la sobrehidrogenación a etano, al tiempo que mejora la durabilidad del catalizador. Este enfoque es crucial para las líneas de producción de polietileno, ya que incluso pequeñas cantidades de acetileno pueden desactivar los catalizadores de polimerización. Finalmente, el Capítulo 6 se dedica a la isomerización y aromatización catalítica de olefinas terminales, específicamente 1-octeno, en benceno, tolueno y xilenos (conocidos colectivamente como BTX). Estos compuestos aromáticos desempeñan un papel fundamental en la producción de PET, poliuretanos y otros materiales de alta demanda. El proceso emplea catalizadores basados en rutenio soportados en carbono y zeolitas, utilizando una secuencia en un solo reactor que integra isomerización, ciclación y deshidrogenación. Este enfoque proporciona una alternativa de baja temperatura al reformado convencional de nafta, con una mayor eficiencia energética, selectividad y modularidad del proceso. Se presta especial atención a la optimización de la estructura del catalizador para mejorar el rendimiento de compuestos monoaromáticos y reducir la formación de coque.

En conjunto, estos catalizadores innovadores demuestran cómo los sistemas dirigidos de metales nobles pueden hacer que la producción petroquímica sea más sostenible, modular y circular. Al combinar una alta selectividad con compatibilidad para materias primas renovables y las infraestructuras existentes, estos sistemas ofrecen soluciones prácticas para reducir emisiones, mejorar la eficiencia energética y mejorar el rendimiento económico. Esto posiciona a la catálisis como un elemento central en la transformación hacia un futuro industrial con bajas emisiones de carbono.