

Resumen

En esta tesis se realiza un estudio de acidez de zeolita LTA con la relación Si/Al 5 y 40 utilizando la técnica de dispersión inelástica de neutrones (INS) en combinación con otras técnicas como la modelización computacional y la espectroscopía de resonancia magnética nuclear (RMN).

Las zeolitas son aluminosilicatos altamente cristalinos que forman parte de un grupo importante de los materiales funcionales. Las zeolitas son extremadamente útiles como catalizadores para muchas reacciones importantes con moléculas orgánicas. Las más importantes son craqueo, isomerización y síntesis de hidrocarburos.

Las propiedades catalíticas de una zeolita dependen principalmente de su acidez y ésta depende de tres factores: el número total de los sitios ácidos, sus fuerzas individuales y su localización individual, estando estos tres factores relacionados. Los parámetros geométricos definidos por localización de los sitios ácidos (es decir, la longitud y los ángulos de enlaces entre los átomos alrededor del sitio ácido) contribuyen de una manera importante a la fuerza ácida.

En la literatura hay muchos trabajos de estudios de acidez en zeolita utilizando la espectrometría infrarroja (IR), sin embargo, con esta técnica es imposible medir las vibraciones de flexión (bending modes, $200\text{-}1200\text{ cm}^{-1}$), las bandas más sensibles al entorno local de los centros ácidos, ya que estas bandas se superponen con las bandas de vibración de la red de zeolite ($300\text{-}1800\text{ cm}^{-1}$).

En esta tesis se realiza un estudio de acidez utilizando la técnica de INS, que nos permite medir principalmente los modos de vibración de los átomos de H y también nos permite medir todas las bandas de vibración (incluido el bending).

Este estudio muestra que la combinación de la alta calidad de las muestras y la sensibilidad del instrumento utilizado permite detectar con alta precisión los sitios ácidos y obtener la información sobre su posición que a su vez nos permite obtener la posición de los átomos de Al. Con el fin de interpretar los espectros INS se ha realizado un estudio computacional (cálculos ab-initio) con el objetivo de comparar los espectros calculados con los resultados experimentales y definir el modelo que reproduce la posición mas probable de los centros ácidos en la muestra.