

RESUM

La present tesi doctoral es centra en processos reactius catalitzats mitjançant zeolites per a l'obtenció i transformació d'aromàtics (fracció BTX). Estos compostos són, juntament amb les olefines lleugeres, els pilars sobre els que es basa la indústria petroquímica i de química orgànica en general, doncs són la matèria prima per a molts productes, com són monòmers de polièsters, poliamides, plàstics d'enginyeria, i productes intermedis per a la fabricació de detergents, fàrmacs, fertilitzants, i explosius.

Actualment els aromàtics i les olefines s'obtenen principalment del refinatge del petroli, del gas natural o del carbó. En les últimes dècades ha guanyat importància la transformació del gas natural a productes químics de major valor afegit, com són les olefines i els aromàtics. Açò es degut a la seua elevada relació hidrogen-carbó (H/C), a que la seua composició és independent de la font d'on provinga, i a que les reserves mundials de gas natural són superiors a les del petroli, especialment si es té en compte el gas pissarra. En la present tesi, se ha estudiat la reacció de aromatització de metà (MDA) com alternativa per a l'obtenció d'aromàtics. El catalitzador més emprat per a esta reacció és el Mo/H-ZSM-5. Per la qual cosa s'ha estudiat la influència de diversos paràmetres en l'activitat catalítica (proprietats fisicoquímiques de la zeolita de partida i mètode de incorporació del component metàl·lic) amb l'objectiu de buscar el catalitzador òptim de Mo/ZSM-5. Este estudi ha permès correlacionar els dos tipus de centres actius involucrats en esta reacció amb la conversió de metà y la formació de productes. Un del grans inconvenients que presenta esta reacció és la forta desactivació que sofreix el catalitzador, per la qual cosa s'ha realitzat un estudi de les possibilitats de regeneració d'aquest, el que ha permès dissenyar un protocol de treball útil per allargar la vida del catalitzador i ampliar les seves possibilitats d'aplicació a nivell industrial. A més a més, s'ha estudiat l'ús d'altres materials zeolítics amb estructura de porus mitjà i multiporo com possibles alternatives a la ZSM-5, i s'ha correlacionat el seu comportament catalític amb les diferents topologies.

Dins del marc de les reaccions de transformació i redistribució d'aromàtics (BTX), s'han estudiat reaccions per l'obtenció d'alquilaromàtics de gran interès per a la indústria petroquímica, com són xilè, etilbenzè, cumè, etiltoluen i cimè, mitjançant reaccions d'alquilació, desproporcionació o isomerització, on s'impliquen zeolites com catalitzadors àcids. Les zeolites principalment utilitzades en aquests processos a escala industrial són ZSM-5, MCM-22, Beta i MOR. Per tant, s'han estudiat nous materials zeolítics com a catalitzadors alternatius en estos processos, tenint en compte les dimensions moleculars dels reactants, productes i intermedis de reacció requerits, conjuntament amb les dimensions topològiques de les estructures zeolítiques. També s'han inclòs en este estudi zeolites multiporo, molt interessants per permetre controlar el tràfic molecular a través de les diferents obertures dels seus canals. En estos processos reactius, han destacat les zeolites ITQ-13, ITQ-22, ITQ-39 i ITQ-47 per presentar un bon comportament catalític, plantejant-se com a possibles alternatives als catalitzadors emprats a escala industrial.