

## ÍNDICE

### **I. INTRODUCCIÓN**

1.1 Petroquímica.....	7
1.1.1 Fracción BTX.....	9
1.2 Reconversión de los TMB.....	11
1.3 Xilenos: Usos, producción y coste.....	12
1.4 Zeolitas.....	14
1.4.1 Composición química.....	15
1.4.2 Síntesis de Zeolitas.....	15
1.4.3 Centros ácidos.....	16
1.4.4 Tamaños de poro.....	18
1.4.5 Tipos de zeolitas.....	18
1.5 Las zeolitas multi-poro y la reacción de transalquilación.....	21
1.6 La reacción de transalquilación de tolueno con TMB.....	23
1.6.1 Mecanismo del ion carbonio.....	24
1.6.2 Mecanismo del Difenilmetano (DPM).....	24
1.6.3 Discusión del mecanismo.....	26
1.7 Tráfico molecular.....	33
1.8 Objetivos.....	36

### **II. METODOLOGÍA**

2.1 Potenciales.....	37
2.1.1 Potenciales para los hidrocarburos: intra- & inter-atómicos.....	40
2.1.1.1 Potencial TraPpe.....	41
2.1.1.2 Potencial Oie&Kiselev.....	42
2.1.1.3 Potencial OPLS.....	45
2.1.1.4 Potencial de Theodorou.....	46
2.1.1.5 Potenciales para los estados de transición.....	47
2.1.2 Potenciales para silicatos.....	47
2.1.2.1 BKS.....	47
2.1.2.2 Nicholas.....	48
2.1.2.3 SLC.....	49
2.1.3 Potenciales para aluminio-silicatos.....	51
2.1.3.1 SLC.....	51
2.1.3.2 Sas.....	54
2.2 Optimización Geométrica (mopac & gulp).....	55
2.3 La Dinámica molecular.....	56
2.3.1 El algoritmo de verlet.....	57
2.3.1.1 Leapfrog Verlet.....	57
2.3.1.2 Velocity Verlet.....	58
2.3.2 Termostatos.....	59
2.3.2.1 Nosé-Hoover.....	59
2.3.2.2 Evans.....	61
2.3.2.3 Berendsen.....	62
2.3.3 Interacciones electrostáticas.: sumatorio de Ewald.....	63
2.3.4 Cálculo de los coeficientes de difusión.....	64
2.3.5 Cálculo de los diámetros de poro.....	68
2.3.6 Cálculo de las trayectorias.....	68
2.3.7 Condiciones de simulación.....	69

2.3.7.1 Equilibración.....	69
2.3.7.2 Control de las fuerzas.....	70
2.3.7.3 Control de las velocidades.....	70
2.3.7.4 Tiempo de simulación.....	70
2.3.7.5 Longitud del paso.....	71
2.3.7.6 Progresión de las temperaturas.....	72
2.3.7.7 Truncamiento del potencial.....	73
2.3.7.8 Lista de átomos vecinos.....	74
2.3.7.9 Lista de átomos excluidos.....	74

### III. RESULTADOS

3.1 Zeolitas de 10: la elección del potencial.....	77
3.1.1 Selección de zeolitas monoporos.....	77
3.1.2 Coeficientes de difusión.....	82
3.1.2.1 Zeolita ZSM-5.....	84
3.1.2.2 Zeolita SFG.....	86
3.1.2.3 Zeolita TUN.....	87
3.1.3 Conclusiones.....	87
3.2 Zeolitas de 10+12: selección de zeolitas multi-poro.....	88
3.2.1 Coeficientes de difusión, tamaños y formas de anillos.....	98
3.2.1.1 Zeolita BOG.....	98
3.2.1.2 Zeolita IWR.....	99
3.2.1.3 Zeolita MSE.....	101
3.2.1.4 Zeolita SFS.....	105
3.2.1.5 Zeolita SOF.....	108
3.2.1.6 Zeolita UWY.....	111
3.2.2 Conclusiones.....	117
3.3 La zeolita UWY.....	117
3.3.1 Distribución y número de centros ácidos.....	118
3.3.2 Precisión del potencial.....	123
3.3.3 Coeficientes de difusión.....	124
3.3.3.1 Difusión en alta concentración.....	124
Xilenos.....	124
Mezcla tolueno+TMB.....	128
3.3.3.2 Difusión en baja concentración.....	131
Difusión de los estados de transición tipo DPM.....	133
3.3.3.3 Efecto de la composición química.....	134
3.3.4 Tráfico molecular en la UWY.....	140
3.3.5 Conclusiones.....	145

### IV. CONCLUSIONES GENERALES.....147

Resumen en castellano.....150

Resum en valenciá.....152

Apéndice.....154

### PUBLICACIONES

- **Toda, J.**; Corma, A.; Abudawoud, R. H.; Elanany, M. S.; M. Al-Zahrani, I. M.; and Sastre, G.

Influence of force fields on the selective diffusion of para-xylene over ortho-xylene in 10-ring zeolites. *Molecular Simulation*, **2015**, Vol. 41, 16 – 17, 1438–1448.

- **Toda, J.**; Corma, A.; Sastre, G. Diffusion of Trimethylbenzenes and Xylenes in Zeolites with 12- and 10-Ring Channels as Catalyst for Toluene-Trimethylbenzene Transalkylation. *J. Phys. Chem. C*, **2016**, 120, 16668–16680.

- **Toda, J.**; Corma, A.; Sastre G. Diffusion of Trimethylbenzenes, Toluene and Xylenes in UWY Zeolite as Catalyst for the Transalkylation of Trimethylbenzenes with Toluene. (*pendiente de publicación: J. Phys. Chem. C.*)