

Resumen en Castellano

En las últimas décadas, la aprobación de nuevas leyes medioambientales ha obligado a la industria petroquímica a adaptarse mediante el uso de sustancias menos nocivas para el medio ambiente. La necesidad de reciclar sustancias que ya no están permitidas en el mercado se ha convertido en una prioridad para la industria petroquímica, siendo la reconversión de Trimetilbencenos (TMB) en p-xileno, mediante el uso de zeolitas, uno de esos procesos.

Este trabajo de investigación ha utilizado técnicas químico-computacionales para encontrar nuevas zeolitas que puedan catalizar la reacción de transalquilación de Tolueno con Trimetilbenceno para obtener p-xileno y, en el mejor de los casos, ser una alternativa a la zeolita ZSM-5, el catalizador más común para la obtención de p-xileno. A lo largo del estudio, se han analizado parámetros como el tipo de potencial inter-atómico empleado, los coeficientes de difusión y energías de interacción de diferentes compuestos orgánicos, así como el tamaño y estructura de los canales de diferentes zeolitas candidatas.

En cada uno de los capítulos de esta tesis doctoral, se ven reflejados los diferentes conceptos descritos anteriormente. El capítulo 1, permite al lector introducirse en el escenario de la industria petroquímica, conocer la estrecha relación de esta con las zeolitas y comprender el concepto del tráfico molecular.

El capítulo 2 tiene como objetivo dar a conocer las bases de la metodología empleada para la realización y obtención de los resultados, así como comprender los fundamentos de la dinámica molecular. Este capítulo prepara al lector para comprender los datos que se han obtenido más adelante.

El capítulo 3 es el más extenso y expone los resultados obtenidos en las diferentes fases de la investigación, así como el análisis de dichos resultados. Este capítulo, se puede dividir en tres partes, siendo cada una de ellas, el punto de partida para comprender la siguiente.

En una primera parte, los resultados se centran en el uso de zeolitas de poro medio y en la elección de un potencial que permita definir los sistemas zeolita+orgánico. Desde ese punto, la segunda parte de los resultados toma esa información para abarcar sistemas de zeolitas tipo multi-poro, con tamaños de poro medio y grande. Asimismo esta segunda parte se refuerza con la inclusión de más moléculas orgánicas involucradas en la reacción de transalquilación de tolueno con trimetilbenceno. Con toda esa información, se establece que la zeolita UWY es el candidato más adecuado entre las zeolitas multi-poro testeadas.

La tercera y última parte del capítulo se centra, precisamente, en la zeolita UWY y en los esfuerzos para crear un sistema más parecido a la realidad experimental, pasando de una estructura de pura sílice a una de aluminio-silicato. Por otro lado, esta última parte también aborda temas como el mecanismo de la reacción de transalquilación, los posibles estados de transición y la estabilidad de las moléculas dentro de los canales de la zeolita.

Por último, el capítulo 4 resume y expone las conclusiones generales obtenidas en esta tesis doctoral, dando una perspectiva global del trabajo realizado, el cumplimiento de los objetivos iniciales y la valoración de los resultados obtenidos.

Los resultados de este trabajo, contribuyen a reforzar el conocimiento de la difusión intra-cristalina en zeolitas,