

# Diseño y síntesis de catalizadores de reacción para procesos gas/sólidos. Aplicación a la obtención de moléculas de interés farmacológico



Por Dr. Germán Lener (Tesis). Director: Dr. Raúl Carbonio. Codirectora: Dra. Laura Moyano

Gran parte de la ciencia de materiales ha estado dedicada al estudio de materiales que aumenten la eficiencia energética, ya sea por almacenamiento, producción y/o ahorro de energía. En esta última propiedad se basa gran parte de la ciencia de catalizadores. Un catalizador es una sustancia que permite la obtención de una reacción química con condiciones energéticas más suaves que en ausencia del mismo. La presencia de catalizadores permite que se lleven a cabo diferentes procesos tales como producción de combustibles, textil, metalurgia, producción de fármacos, etc. Hoy por hoy, más del 90 % de los procesos habituales en industria utilizan catalizadores. Una de las grandes aristas de procesos industriales a gran escala es la generación de fármacos utilizados en salud. Esto requiere de reacciones químicas principalmente en el área de la química orgánica para formar estructuras de interés, entre ellas las azepinonas utilizadas en ansiolíticos, para lo cual se utilizan diferentes catalizadores de reacción.

El desarrollo de esta tesis doctoral estuvo dedicado al estudio sistemático por métodos experimentales y teóricos para el diseño de catalizadores que disminuyan los requerimientos energéticos para la obtención de estructuras con propiedades ansiolíticas (dibenzoazepinonas) a través de una reacción del tipo gas/sólido, en donde el gas es la molécula a transformar (fenacilbenzotriazol) y el sólido el catalizador que permite la conversión. Se diseñó una familia de catalizadores en donde se modificó la naturaleza química del catalizador de manera de encontrar las mejores condiciones de reacción.

Mediante el uso de los catalizadores sintetizados se logró aumentar el rendimiento de la reacción de 25 a 85 % y la temperatura disminuyó de 550 a 400 °C respecto del sistema no catalizado lo que indica que las condiciones energéticas fueron minimizadas y el rendimiento fue sustancialmente incrementado. La reacción de conversión fue dependiente de la naturaleza química del catalizador obteniéndose los mejores resultados cuando se usaron  $\text{BaWO}_4$  y  $\text{BiVO}_4$  como catalizadores de reacción. Por otra parte, las técnicas de modelado computacional permitieron un estudio más profundo de los eventos que ocurren a nivel atómico cuando interaccionan la sustancia a reaccionar con la superficie del catalizador pudiéndose observar la formación y rupturas de enlaces en la interfase entre la molécula orgánica y el catalizador.

De esta manera, la investigación interdisciplinaria entre la fisicoquímica de materiales, la química orgánica y la química computacional permitió el estudio de diferentes aristas que componen la ciencia de materiales aplicada a materiales catalíticos.