

## Activación eficiente del MOF UiO-66: Impacto del intercambio de solvente en la hidrogenación catalítica de ácido levulínico

Savarino, Evelin L.<sup>1</sup>; Peralta, María F.<sup>1</sup>; Oliva, Marcos<sup>2</sup>; Bálsamo, Nancy F.<sup>1</sup>; Heredia, Angélica C.<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Centro de Investigación y Tecnología Química – UTN – CONICET, Córdoba, Argentina

<sup>2</sup> Instituto de Física Enrique Gaviola (IFEG UNC-CONICET)

<sup>3</sup> Dpto. de Materias Básicas, GAIA, Universidad Tecnológica Nacional (UTN – FRLR), La Rioja, Argentina.

evelinsavarino@gmail.com

Área temática: G. Aplicaciones de nanomateriales en ambiente, energía, agro, alimentos y catálisis

La valorización del ácido levulínico (LA), derivado de la biomasa lignocelulósica, hacia  $\gamma$ -valerolactona (GVL) es estratégica para la industria química sostenible. En este contexto, las redes metal-orgánicas (MOFs) como el UiO-66 representan una alternativa prometedora debido a su elevada superficie específica, estabilidad térmica y química.

Esta investigación evalúa el impacto del incremento en los ciclos de lavado con acetona (1 a 3) para desplazar la N,N-dimetilformamida (DMF) ocluida, sobre la activación del UiO-66.

La síntesis se llevó a cabo en un microondas Anton Paar Monowave 450, a 120°C por 2 h, obteniéndose los materiales denominados M2 y M2L para 1 y 3 lavados, respectivamente. Finalmente, se analizó el desempeño catalítico en la hidrogenación de LA hacia GVL, empleando isopropanol como agente donador de hidrógeno en un reactor Berghof a 170 °C y 10 bar (N<sub>2</sub>) por 3 h.

El análisis de DRX confirmó la formación exitosa de la fase cristalina tipo UiO-66, identificándose las señales características correspondientes a los planos cristalográficos (1 1 1), (2 0 0) y (6 0 0) del material. Mediante el método BET, el catalizador M2 presentó un área superficial de 897 m<sup>2</sup> · g<sup>-1</sup>, mientras que para el material M2L este valor se incrementó a 1074 m<sup>2</sup> · g<sup>-1</sup>. Esta tendencia demuestra que la intensificación de las etapas de lavado con acetona optimiza el intercambio de solvente, permitiendo una liberación más efectiva de las cavidades del MOF al remover la DMF ocluida.

Por TGA la muestra M2 registró una pérdida de masa del 21,85% atribuida a la eliminación de DMF residual (~200 °C), mientras que en M2L esta pérdida se redujo al 8,05%, confirmando la eficacia del procedimiento de lavado intensivo para la purificación del material.

Respecto a la evaluación de la actividad catalítica, el material M2L exhibió un rendimiento hacia GVL del 85,91%, lo que representa un incremento significativo frente al 77,71% obtenido por la muestra M2. Estos resultados demuestran que la optimización de la porosidad en M2L es un factor determinante en su eficiencia como catalizador.

En conclusión, los resultados confirman que la aplicación de una etapa extendida de lavados con acetona es un paso crítico en la activación del UiO-66. Este procedimiento de intercambio de solvente facilita la eliminación de la DMF, liberando efectivamente las vacantes de coordinación en los clústeres de circonio (sitios ácidos de Lewis) necesarios para llevar a cabo la hidrogenación de LA a GVL.