

Diseño de nanoestructuras catalíticas ZnO–ZrO₂: correlación estructura–función mediante técnicas avanzadas para la valorización selectiva de biomasa

Federico A. Piovano¹; Facundo C. Herrera²

¹ Instituto de Investigaciones en Catálisis y Petroquímica (INCAPE, CONICET - FIQ, UNL) Santiago del Estero 2829, Santa Fe, CP3000

² Gerencia Centro Investigación Laboratorio de Haces de Neutrones GCILAHN-CNEA

fherrera@unsam.edu.ar

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

La transición hacia procesos sostenibles basados en biomasa requiere el desarrollo de catalizadores capaces de transformar selectivamente azúcares derivados de hemicelulosa en productos de alto valor agregado [1]. En particular, la producción de ácido láctico y glicólico a partir de xilosa representa una alternativa renovable para la industria química, con aplicaciones en bioplásticos, solventes y materiales biodegradables [2]. Sin embargo, esta conversión involucra una red compleja de reacciones paralelas (isomerización, ruptura C–C, deshidratación) que compiten con la formación de subproductos como furfural y huminas, lo que exige un control preciso de las propiedades ácido–base del catalizador [3].

En este trabajo se desarrollaron óxidos mixtos ZnO–ZrO₂ mesoporosos mediante síntesis sol-gel vía EISA, logrando materiales con alta área superficial (>130 m²/g) y elevada dispersión de Zn. La caracterización fisicoquímica (adsorción de N₂, STEM-EDS, SAXS, WAXS y titulación potenciométrica) mostró que composiciones intermedias (~33% mol Zn) optimizan el balance ácido–base (BS/AS ≈ 2) y la generación de sitios bifuncionales. En ensayos catalíticos en fase acuosa (170 °C, 60 min), estos materiales alcanzan conversiones cercanas al 100% y rendimientos de hasta ~50% hacia ácido láctico y glicólico, evidenciando una clara correlación entre estructura y desempeño.

Para profundizar en el origen de esta actividad, se implementa un enfoque de caracterización avanzada basado en técnicas sincrotrón XANES/EXAFS en los bordes K de Zn y Zr, y XRD, incluyendo estudios in situ durante la transición gel–óxido hasta 450 °C. Estas herramientas permiten obtener descriptores locales clave (estado de oxidación, número de coordinación, distancias interatómicas y desorden), imposibles de acceder mediante técnicas convencionales. En particular, la identificación de enlaces Zn–O–Zr y el seguimiento de la evolución estructural permiten distinguir entre incorporación en red y segregación de ZnO, definiendo umbrales críticos (~25–33% mol Zn).

Los resultados muestran que la máxima actividad catalítica se alcanza cuando el Zn permanece altamente disperso y estructuralmente en el límite de segregación, favoreciendo la generación de sitios ácidos débiles y estables. Este trabajo establece criterios racionales de diseño para nanocatalizadores basados en óxidos mixtos, integrando síntesis controlada y caracterización avanzada para optimizar procesos de valorización de biomasa.

REFERENCIAS

1. M. Dusselier, M. Mascal, B. Sels, *Topics in Current Chemistry*, 353 (2014) 1-40
2. F. Piovano, S. Aspromonte, A. Boix, *Microporous and Mesoporous Materials* 368 (2024) 113029
3. F. Piovano, L. Gómez, L. Retamar, A. Boix, S. Aspromonte, *J. Environ. Chem. Eng.* 13 (2025) 120423