



CARACTERIZACIÓN Y OPTIMIZACIÓN DE CATALIZADORES ANCLADOS EN SÍLICE

La **sílice** es el soporte más común en la **catálisis heterogénea** y debido a su naturaleza amorfa muy pocos grupos teóricos han desarrollado modelos suficientemente realistas para la caracterización de catalizadores.

¿Para quién?

Empresas Químicas
Empresas Farmacéuticas

¿Para qué?

- Determinar la **naturaleza de las especies activas**, incluida su estructura electrónica.
- Explorar el **mecanismo de reacción** completo incluyendo los caminos de desactivación más relevantes.
- Determinar factores clave para el **control de la actividad** del catalizador y proponer normas básicas para el desarrollo de más catalizadores.
- Estudiar **cationes metálicos anclados** y **complejos de metales de transición en superficies** y su **reactividad** así como determinar tanto el **análisis molecular** local y las **contribuciones** de rango largo.
- Analizar la **alteración de la actividad catalítica** en presencia de cationes metálicos anclados y ligados.

Descripción de la tecnología

- Se ha desarrollado una estrategia de modelado utilizando cálculos DFT aplicable a cualquier sistema relacionado con contenido de sílice como soporte.
- Este modelo ya ha sido aplicado a metástasis de olefinas y a la división de N₂
- Se han llevado a cabo simulaciones suficientemente precisas de IR de estado sólido y de RMN (las estructuras obtenidas son más fiables que las distancias M-L obtenidas por EXASF).

