



**Congreso Argentino de Fisicoquímica y  
Química Inorgánica - La Plata 2021**

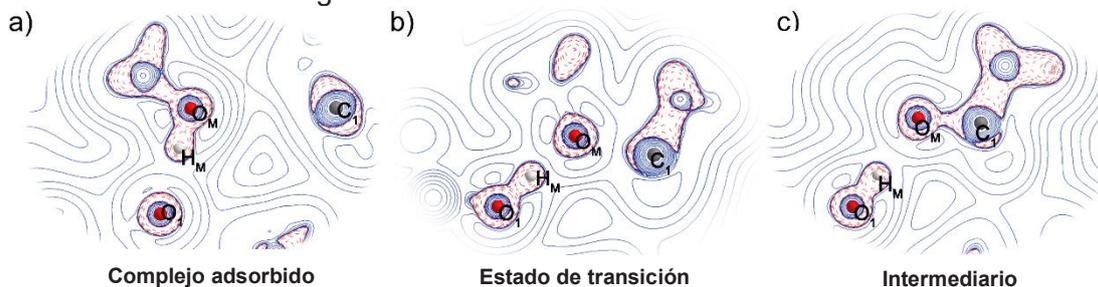
XXII CONGRESO ARGENTINO DE FISICOQUÍMICA Y QUÍMICA INORGÁNICA  
LA PLATA 2021

 ANÁLISIS DEL LAPLACIANO DE LA DENSIDAD ELECTRÓNICA  $[-\nabla^2\rho(r)]$  PARA  
EL ESTUDIO DE LA REACCIÓN DE ACETATO DE ETILO Y METANOL SOBRE EL  
CATALIZADOR  $[CTA^+]$ -Si-MCM-41

 Alegre, Clara Iris Aymar<sup>1</sup>, Zalazar, María Fernanda<sup>1</sup> y Peruchena, Nélica María<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Laboratorio de Estructura Molecular y Propiedades (LEMyP), Instituto de Química Básica y Aplicada del Nordeste Argentino, IQUIBA-NEA, CONICET-UNNE, Avenida Libertad 5460, (3400) Corrientes, Argentina.  
mfzalazar@conicet.gov.ar (M. F. Zalazar)

En este trabajo estudiamos el papel de las interacciones asociadas con el mecanismo de la reacción de acetato de etilo (AcEt) y metanol sobre la superficie del catalizador  $[CTA^+]$ -Si-MCM-41. Estudios previos demostraron que la reacción ocurre en la boca del poro. Por lo que se postuló un mecanismo de sitio dual en el que ambos reactivos se adsorben sobre la superficie del catalizador de manera concertada.<sup>1</sup> El estudio se basa en la Teoría de Átomos y Moléculas (QTAIM), enfocado en el análisis del Laplaciano de distribución de la densidad electrónica.<sup>2</sup> Se analizaron regiones que involucran a los enlaces principales asociados a la reacción. En el complejo adsorbido, se observa que la interacción  $O_1 \cdots H_M$  entre catalizador y metanol, se encuentra en una zona de disminución de densidad electrónica  $[\nabla^2\rho(r) > 0]$ , sin embargo, en el estado de transición y el intermediario se aprecia una acumulación de densidad electrónica. Por otro lado, la interacción  $O_M \cdots C_1$  (enlace entre metanol y AcEt) se encuentra en una zona de disminución de densidad electrónica tanto para el complejo adsorbido como el estado de transición, mientras que en el intermediario se encuentra en una zona de acumulación de la densidad electrónica mostrando características de un enlace covalente de capa cerrada. En conclusión, nuestro análisis permite apreciar visualmente el cambio de carácter del Laplaciano  $[-\nabla^2\rho(r)]$  que implica una reorganización de la densidad electrónica hacia la formación y ruptura de los enlaces, así como el rol del catalizador en esta reorganización.



**Fig. 1:** Mapas de isocontorno de los valores negativos del Laplaciano  $[-\nabla^2\rho(r)]$  en el plano que contiene los átomos  $O_1$ ,  $O_M$  y  $C_1$  involucrados en la reacción para las especies: a) Complejo adsorbido, b) Estado de transición c) Intermediario de reacción.

### Referencias

- 1) Alegre, C. I. A.; Bulhões Cazula, B.; Alves, H. J.; Zalazar, M. F.; Peruchena, N. M.; *Top Catal*, **2019**, 62, 941–955.
- 2) Bader, R. F. W. "Atoms in Molecules. A Quantum Theory"; Oxford Science Publications. London, 1990