

O-4

## HIDROGENACIÓN SELECTIVA DEL CROTONALDEHIDO EN FASE ACUOSA SOBRE Pt/ZnO

**J. Hidalgo-Carrillo, M.A. Aramendía, A. Marinas, J.M. Marinas, F.J. Urbano**

*Departamento de Química Orgánica, Universidad de Córdoba, Campus de Rabanales, edificio Marie Curie, E-14014, Córdoba, España*

### Introducción

La hidrogenación selectiva del grupo carbonilo en aldehídos  $\alpha,\beta$ -insaturados constituye uno de los retos de la química que aún no ha quedado satisfactoriamente resuelto. El Pt/ZnO ha mostrado ser uno de los catalizadores utilizados en hidrogenación quimiosiolectiva de compuestos carbonílicos  $\alpha,\beta$ -insaturados más selectivo ( $\approx 90\%$  alcohol insaturado) [1, 2].

Es posible que las comparaciones entre los distintos tratamientos de la reacción se vean afectadas de manera sustancial por las condiciones en las que ocurren. Con frecuencia, las interpretaciones claras de los efectos para un factor de tratamiento deben tener en cuenta los efectos de los otros factores. Para investigar más de un factor a la vez, se desarrolló un tipo especial de diseño de tratamientos, el diseño factorial.

### Parte experimental

El sólido ha sido caracterizado mediante distintas técnicas como difracción de rayos-X, espectroscopia fotoeléctrica de rayos-X (XPS), microscopia electrónica de transmisión (TEM), composición química por ICP-MS y EDX. Las reacciones de hidrogenación se realizaron a través de un diseño factorial, teniendo en cuenta la influencia de 3 factores. En nuestro caso, los factores incluidos en el diseño son la temperatura (20, 50 y 80 °C), presión inicial de hidrógeno (20, 50 y 80 psi) y disolvente (0, 30, 60 y 100 % de agua en mezclas agua/dioxano).

### Resultados y discusión

Para la interpretación de los datos del análisis multivariable se realizó un test ANOVA. Los datos estadísticamente significativos fueron determinados mediante el uso de un test-t con un 95% de intervalo de confianza. La influencia de las variables, tanto para la producción de moles de alcohol insaturado como para la conversión (Figura 1), se muestran a través un diagrama de pareto utilizando una distribución de probabilidad normal para los efectos normalizados. Se realizaron las superficies de respuesta para observar el avance de la reacción, tanto en términos de conversión como de producción de 2-butenol en mmoles (figura 2), frente a los diferentes factores de presión de hidrogeno, temperatura y disolvente.

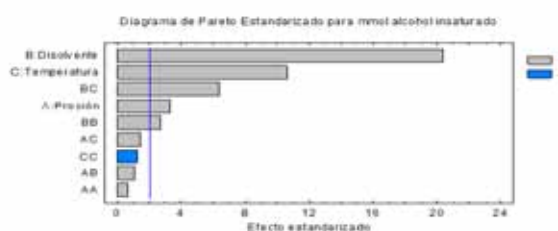


Figura 1. Diagrama de pareto para la conversión

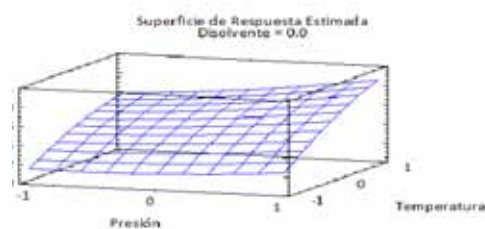


Figura 2. Superficie de respuesta para mmoles de Enol

Del estudio multivariable realizado se concluye que el factor más influyente es el disolvente y como punto óptimo cuando se realiza la reacción a 80°C, 80 psi de hidrógeno y utilizando únicamente agua como disolvente, logrando en estas condiciones de reacción un 22% de conversión y una producción de 2-butenol en 8 horas de 1.78 mmoles.

### Agradecimientos

Al MICINN (proyectos CTQ2008/01330, CTQ2010/18126), a la Consejería de Educación y Ciencia de la Junta de Andalucía (Proyectos P07-FQM-02695, P08-FQM-3931, y P09-FQM-4781) y Fondos FEDER.<sup>i</sup>