

# La catàlisi heterogènia i la química computacional



La catàlisi heterogènia és la principal via per a la síntesi de productes químics en la indústria. El seu pes en l'economia mundial és tan important que fins i tot s'ha arribat a considerar que la quantitat de persones que la Terra pot mantenir depèn de la quantitat de fertilitzant que podem sintetitzar i que, finalment, depèn de la nostra habilitat per produir amoníac. Tradicionalment, la indústria química ha sintetitzat molts candidats per a una determinada transformació química, fent una mena de cribratge (*high-throughput screening*) als laboratoris. Aquest tipus d'assaig-error s'ha traduït en molt coneixement empíric de les transformacions químiques i dels processos associats, però no és el procediment més adequat ja que alenteix el procés de cerca de nous catalitzadors, consumeix recursos humans i materials i no és ni econòmicament ni ecològicament sostenible. El grup de la Dra. Núria López, de l'Institut Català d'Investigació Química (ICIQ), realitza estudis computacionals de reactivitat química per aconseguir catalitzadors més actius, selectius i estables.

Tot i que els principis de la Química Teòrica i Computacional semblen prou llunyans a aquests aspectes més pràctics de la indústria química, recentment diversos grups arreu del món han demostrat que aquestes diferències poden ser més aparents que reals. Així, des de la introducció massiva de la supercomputació ha estat possible indagar en els aspectes més íntims de les reaccions químiques. S'han

## Amb la supercomputació ha estat possible indagar en els aspectes més íntims de les reaccions químiques

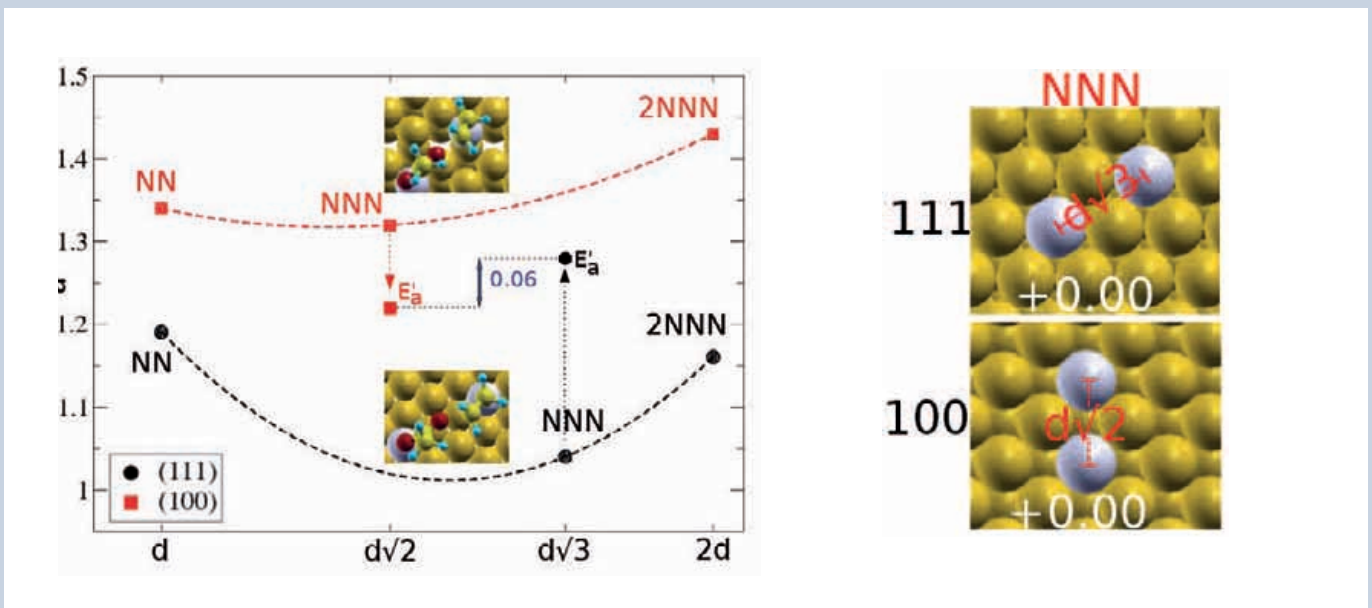
pogut determinar camins de reaccions simples primer, i més complexes, després, i determinar quins són els paràmetres de control més efectius i més interessants.

Darrerament, aquest grup de l'ICIQ s'ha dedicat a l'estudi d'aliatges d'or. Com explica Núria López, "l'or ha captivat la hu-

manitat des de l'inici dels temps a conseqüència de les seves propietats. En particular, l'estabilitat, ja que sembla que no reacciona amb cap de les substàncies amb què es tracta de manera habitual. Tanmateix, s'ha trobat que la seva noblesa depèn fortament de la grandària de les partícules de catalitzador que es preparen. Tot i que aquesta nova química s'ha desenvolupat des dels anys 80, això ha obert un nou camí que fins aleshores semblava completament tancat. A més de presentar-se com a nanoestructura, l'or té la capacitat de formar aliatges amb altres materials, particularment amb el pal·ladi (Pd)". Recentment, experiments del grup del Prof. D. Wayne Goodman, de la Texas A&M University, van demostrar que les aleacions de PdAu posseïen unes capacitats excel·lents per a la síntesi d'un dels intermedis sintètics més versàtils, l'acetat de vinil.

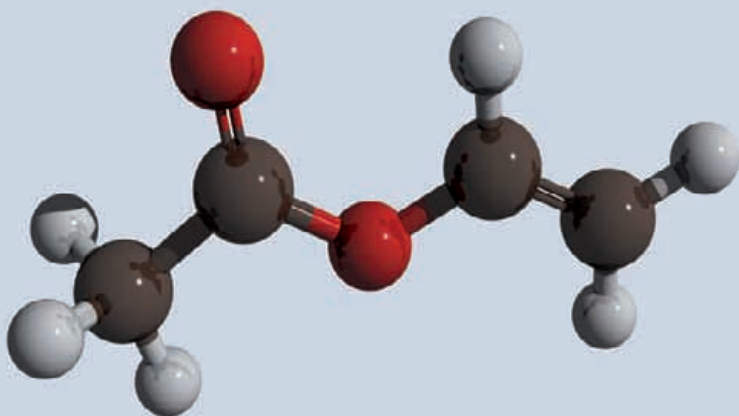
Els experiments realitzats en condicions d'ultra alt buit eren tan acurats que fins i tot proposaven que de tots els aliatges amb poc contingut de Pd existia una configuració que era molt més activa i més selectiva per a l'acoblament de l'àcid acè-

FIGURA 1. Barreres de reacció per a l'etapa limitant de la formació de l'acetat de vinil a les diferents superfícies que contenen dímers de Pd en Au.



## L'ACETAT DE VINIL

L'acetat de vinil és un líquid incolor i molt inflamable. És soluble en la majoria dels dissolvents orgànics i insoluble en l'aigua. Es polimeritza espontàniament i, per conservar-lo, s'estabilitza amb inhibidors com ara la hidroquinona i la fenilamina. Industrialment, s'obté sobretot per reacció en fase de vapor entre l'àcid acètic i l'acetilè emprant acetat de zinc com a catalitzador. També es pot obtenir a partir d'etilè i àcid acètic, per oxidació posterior en presència d'un catalitzador de pal·ladi. S'utilitza principalment com a monòmer per fabricar polímers tan emprats, com el poli-acetat de vinil, del qual deriven l'alcohol polivinílic i els acetals polivinílics, i els copolímers clorur de vinil-acetat de vinil i acetat de vinil-acrilats. Aquests productes s'utilitzen principalment en les pintures i els adhesius.



Model de la molècula d'acetat de vinil.

tic i l'etilè en presència d'oxigen. A més, aquest centre actiu era molt més productiu en una de les cares de l'aliatge (100) que no pas en la cara més comuna (111), explica López.

Dins el grup de l'ICIQ, la investigadora Mónica García Mota ha dissenyat una sèrie d'experiments computacionals per tal de distingir totes aquestes possibilitats. D'una banda, ha construït les dues cares més abundants (111) i (100). A més, ha generat diversos dímers que poden actuar com a potencials centres actius. Finalment, una vegada determinat el cost energètic de la formació dels dímers, ha calculat les propietats energètiques i termodinàmiques de l'etapa que controla la velocitat de la reacció.

"Tot i que essencialment les barreres indicaven que el mínim requeriment energètic era el que experimentalment es trobava, existia encara un petit obstacle. Les reaccions semblaven ser energèticament més econòmiques sobre la cara (111). Tanmateix, no

s'havien considerat totes les etapes prèvies del mecanisme. En incloure tots els termes de la reacció s'obtenia l'ordenament produït experimentalment i, fins i tot, es podia determinar quantitativament la diferència entre les dues cares. A més, la utilització de càlculs permetia determinar el perquè del sistema més actiu", explica Núria López. El centre actiu més favorable presenta diferents característiques que són difícils d'identificar experimentalment. Així, no s'emmetzina per un dels reactius, presenta les barreres més baixes de totes les possibles i adsorbeix de manera raonable, és a dir, ni molt fortament ni molt feblement, els reactius.

Aquests resultats, publicats a *J. Am. Chem. Soc.* el mes de novembre de 2008, demostren la possible enginyeria de centres actius i la manera com, a través de càlculs teòrics, es pot aconseguir determinar quins són els factors a millorar o eliminar si es volen aconseguir catalitzadors més actius, selectius i estables. ■

## Noves tecnologies en CATALÀ!

### Què és una bibliografia web?

Generalment, en les bibliografies consignades en llibres, articles, tesis doctorals, treballs de recerca i altres publicacions científiques es troben referenciats documents de tipologia tan diversa com ara monografies, publicacions en sèrie, documents audiovisuals, materials gràfics o recursos electrònics.

Des de fa un temps, també comença a ser habitual utilitzar la denominació **bibliografia web** per a designar la bibliografia que inclou exclusivament documents disponibles a internet. Una bibliografia web pot contenir, per exemple, referències d'articles, vídeos, fitxers de so, llocs web, pàgines web, etc.

En la normalització del terme català **bibliografia web**, conegut en anglès com a **webliography** o **webography**, s'ha tingut en compte que es tracta d'una forma descriptiva, lingüísticament adequada i transparent. A més, se'n documenten formes anàlogues en altres llengües: **bibliografía web**, en castellà, **bibliographie web** en francès i **web bibliography** en anglès (juntament amb les denominacions reduïdes esmentades anteriorment).

En relació amb aquest concepte, també cal tenir en compte el terme **bibliografia electrònica** o **bibliografia en línia** (en anglès, **electronic bibliography** o **online bibliography**), que fa referència de manera general a qualsevol tipus de bibliografia consultable per internet.

Es tracta de termes formats a partir del substantiu normatiu **bibliografia** ('conjunt d'obres relatives a una disciplina o a un tema' i 'relació d'obres que precedeix o segueix una monografia, un article, etc.'), que és la forma general que es fa servir quan no cal especificar quin tipus de documents es recullen ni la forma com es difonen.



**termcat**

centre de terminologia

www.termcat.cat