

## Proyectos INTEQUI

### PIP 00628 (CONICET)

#### “Química y aplicaciones de los productos naturales de plantas”

Director: Dr. Carlos E. Tonn

#### Resumen

El Proyecto se centra en el aislamiento de metabolitos secundarios, su determinación estructural, su transformación química o enzimática y el estudio de sus potenciales aplicaciones en los campos de la química, bioquímica, farmacología y entomología. Las transformaciones químicas se alcanzarán por la metodología clásica y, en algunos casos, mediante bioconversiones regio y esterocontroladas mediadas enzimas fúngicas y vegetales. Asimismo se contempla la síntesis de análogos de metabolitos secundarios bioactivos. La hipótesis de trabajo se basa en los abundantes antecedentes etnofarmacológicos que sitúan a las plantas y/o sus componentes como una primigenia alternativa para aliviar dolencias del hombre y, por otra parte, en el potencial de las mismas para elaborar metabolitos secundarios activos frente a plagas de cultivos.

Se utilizarán herramientas cromatográficas y métodos espectroscópicos (IR, UV-visible, EM, <sup>1</sup>H-RMN, <sup>13</sup>C-RMN, modalidades bidimensionales homo y heteronuclear, tales como COLOC, COSY, ROESY, HMBC, HMQC, NOESY), técnicas de derivatización, semisíntesis y síntesis, basadas en la simplificación molecular de compuestos bioactivos. En lo que hace a biotransformaciones se utilizarán como agentes biocatalíticos hongos filamentosos y levaduriformes y cultivos de células y tejidos vegetales. Los ensayos biológicos, que se desarrollan en el laboratorio, están dirigidos a determinar actividad inhibitoria de enzimas relacionadas con la síntesis de ácidos nucleicos, bioactividad frente a insectos plaga y microorganismos. Considerando la diversidad estructural de metabolitos secundarios de plantas, se espera encontrar modelos adecuados para estudios de biocatálisis que permitan seleccionar nuevos sistemas capaces de realizar reacciones con quimio, regio y estereocontrol.

#### Objetivos:

Objetivo específico Línea 1: Completar la fitoquímica de: *Phacelia artemisioides* Griseb. (quinonas e hidroquinonas preniladas, posibles agentes intercalantes de ADN); *Junellia seriphioides* (Gillies & Hook.) Moldenke (iridoides inhibidores de ADN polimerasas); *Trixis antimenorhoea* var. *discolor*, *T. cacalioides* (Kunth.) (sesquiterpenos de núcleo trixano); *Schkuhria pinnata* (Lam) Kuntze. (sesquiterpenos insecticidas); *Hyalis argentea* Hook. & Arn. var. *argentea*: diterpenos de núcleos kaureno y *ent*-kaureno. *Euphorbia dentata* Michx. (tóxica para el ganado). Estudiar los aceites esenciales de cuatro especies del género *Eupatorium*.

Objetivo específico Línea 2: Bioconvertir derivados de ácido cinámico, terpénicos y cumarinas (posibles inhibidores de ADN polimerasas, ADN topoisomerasas y transcriptasa reversa, respectivamente), esteroides y triterpenos naturales y

comerciales (hacia la búsqueda de análogos de hormonas gonadales y de muda en insectos). Desarrollar técnicas de bio-oxifuncionalización de polienos sintéticos (búsqueda de análogos de JHs) y productos naturales. Estudiar la desracemización de sec-alcoholes y la reducción de cetonas proquirales con biocatalizadores a célula entera de origen vegetal y fúngico.

Objetivo específico Línea 3: Sintetizar análogos de la genina del iridoide catalpol por síntesis esterocontrolada para evaluar su bioactividad frente a *Taq* ADN polimerasa mediante técnicas de PCR y líneas celulares de tumores sólidos. Sintetizar polienos funcionalizados en la búsqueda de análogos de hormonas juveniles de insectos.

Objetivo específico Línea 4: Preparar agentes de reducción por transferencia de hidruros que presenten enantioselección frente a cetonas proquirales utilizando como base diterpenos naturales (ácido  $\beta$ -dihidroxicatívico y solidagenona).

Objetivo específico Línea 5: Evaluar la actividad tóxica, deterrente, repelente y/o modificadora del desarrollo de insectos por metabolitos secundarios aislados en el Proyecto, moléculas de síntesis y de semisíntesis. Evaluar la actividad antimicrobiana y antiparasitaria de esas mismas moléculas. Evaluar aceites esenciales como repelentes y/o tóxico de insectos.

#### **PIP 11220090100419 (CONICET)**

**“Desarrollo de catalizadores para la producción de hidrógeno a partir de recursos renovables (etanol) y no renovables (metanol)”**

Director y Co-Directora: Dr. Luis Arrua, Dra. María Cristina Abello

#### **Proyecto 22/Q 836 (UNSL)**

**“Estudio y desarrollo de catalizadores para la obtención de hidrógeno a partir de alcoholes”**

Director: Dr. Luis Arrua

#### **PICT-2007-00040 (ANCyT)**

**“Desarrollo de catalizadores para el reformado de alcoholes” Este proyecto forma parte de un proyecto PAE: “Producción, purificación y aplicaciones del hidrógeno como combustible y vector de energía”. Código 36987.**

Investigador responsable: Dra. Maria Cristina Abello

#### **Resumen**

En los proyectos mencionados se plantea la posibilidad de obtener hidrógeno mediante reformado catalítico de alcoholes (etanol y metanol) en presencia de vapor de agua, con vistas a su aplicación posterior en celdas de combustible utilizadas como fuentes estacionarias o destinadas al uso en vehículos móviles. Para ésto resulta necesario estudiar y desarrollar catalizadores apropiados y obtener información de las

condiciones de operación más adecuadas para llevar a cabo los procesos químicos mencionados.

Se pueden distinguir dos líneas de trabajo, diferenciadas por la materia prima que es usada para la obtención de hidrógeno, lo cual requiere de catalizadores con propiedades claramente diferentes para cada caso. Las líneas planteadas son:

- Desarrollo de catalizadores para la obtención de hidrógeno a partir de bioetanol
- Desarrollo de catalizadores para la obtención de hidrógeno a partir de metanol.

#### Objetivos

- a) Desarrollar catalizadores activos, selectivos y estables para llevar a cabo las reacciones de reformado de etanol y metanol tendientes a producir hidrógeno.
- b) Profundizar el conocimiento de sistemas catalíticos de distinta complejidad química que resulten más eficientes en términos de resistencia a la formación de carbón y al sinterizado.
- c) Estudiar las condiciones de operación más convenientes para maximizar la obtención de  $H_2$ , minimizando la relación  $CO/CO_2$  y la deposición de carbón.
- d) Realizar ensayos de reformado en condiciones próximas a las que se usarían en aplicaciones reales.
- e) Determinar las propiedades texturales y físico-químicas de los diferentes sistemas catalíticos empleados y su relación con la actividad catalítica.
- f) Estudiar los fenómenos de activación-desactivación-regeneración asociados a las reacciones bajo estudio.
- g) Propender a la formación de recursos humanos tanto en el aspecto científico-académico como en el aspecto ético-social tendiendo a alcanzar un elevado grado de compromiso con el logro de los objetivos enunciados.

#### U.N.S.L.

##### **“Estudio de reacciones catalíticas heterogéneas y de productos naturales”.**

Director: Dra. Marta Ponzi

#### Resumen

En este proyecto se estudian catalizadores usados para isomerizar y/o hidratar de terpenos, para obtener productos de mayor valor agregado, tales como canfeno, limoneno, aldehído canfolenico, alfa terpineol, transcarveol y otros alcoholes, todos ellos usados en la industria perfumística y de sabores o como intermedios químicos para la obtención de otros productos de mayor valor agregado. También se estudian catalizadores para la combustión de material particulado que se produce por la combustión de diesel y para la oxidación de naftaleno ya que este se lo encuentra adherido al material particulado

Para ello se preparan catalizadores para cada proceso, se los caracteriza físico-químicamente y se mide su actividad catalítica.

Los sistemas catalíticos con resultados alentadores sobre las bases de actividad, se someten a estudios: de desactivación para conocer su estabilidad y de variables de operación para lograr la mayor selectividad en el producto deseado .

En el marco de este proyecto se estudian aceites esenciales y extractos obtenidos desde plantas aromáticas, que se cultivan en nuestra provincia y zonas aledañas, para estudiar su aplicación como biocidas.

#### Objetivos generales

Estudiar reacciones catalíticas donde intervengan terpenos con el fin de obtener productos de mayor valor agregado. Formular catalizadores ácidos menos contaminantes para el medio ambiente que los que actualmente se usan en los procesos industriales y que resulten activos, selectivos y estables.

Formular catalizadores útiles para la reacción de combustión de material particulado y de hidrocarburos poli aromáticos que sean activos a las temperaturas de salida de los gases del caño de escape de los vehículos. Estudiar el efecto de los gases de escape sobre el comportamiento catalítico y la vida útil del catalizador en la reacción de combustión.

Caracterizar los catalizadores formulados y relacionar sus propiedades con su comportamiento.

Adquirir destrezas en el empleo de metodologías en las técnicas de de determinación de actividad antimicrobiana en forma cualitativa y en la determinación de actividad antioxidante de aceites esenciales y extractos vegetales.

Estudiar la actividad antimicrobiana y antioxidante de los aceites esenciales y extractos vegetales como agentes preservantes en modelos de alimentos.

Contribuir a la formación de profesionales tanto en el ámbito científico como académico, logrando el más alto nivel académico, que le permita desarrollar un espíritu crítico dentro del campo de la investigación contribuyendo al avance en el conocimiento.

### **PROICO 2-0001 (UNSL)**

#### **“Síntesis, caracterización y evaluación de catalizadores soportados sobre monolitos ceámicos y metálicos”**

Director: Dr. Luis E. Cadús

#### Resumen y objetivos

La estructura del presente proyecto permite abordar la problemática ambiental desde la catálisis por medio de la utilización de reactores estructurados para la disposición y/o síntesis in situ de catalizadores. Para su desarrollo es necesario profundizar tanto en el campo de los reactores monolíticos como en el de la catálisis. El carácter medio ambiental de las reacciones seleccionadas va desde la descontaminación de efluentes gaseosos, combustión de Compuestos Orgánicos Volátiles, la combustión en condiciones de mayor aprovechamiento energético de GLP minimizando la emisión de contaminantes, hasta el aprovechamiento de la Glicerina proveniente de la producción de biodiesel para la obtención de hidrógeno. El uso de reactores estructurados está tanto asociado a su utilización en condiciones ventajosas de proceso como a la

posibilidad de la combinación de reacciones para el mejor aprovechamiento energético.

Lo soporta el conocimiento adquirido en el grupo sobre la utilización de soportes estructurados tanto para la deposición de fases catalíticamente activas como la síntesis *in situ* de estas fases. Respecto de la síntesis de catalizadores, se hace especial hincapié en: a) perfeccionamiento de catalizadores desarrollados por el grupo; b) aprovechamiento de los conocimientos en la síntesis de catalizadores de óxidos mixtos, perovskitas, para el diseño de catalizadores.

**(UNSL)**

**“Estudio de las reacciones heterogéneas y su aplicación en el beneficio de minerales, la recuperación de metales y la síntesis de nanoaleaciones y zeolitas”**

Directora: Dra. María del Carmen Ruiz Salado

Resumen:

El proyecto está orientado al estudio de las reacciones heterogéneas tanto en sus aspectos básicos, como en sus aplicaciones al beneficio de minerales, y a la metalurgia extractiva y de las aleaciones. Está constituido por tres líneas de investigación:

Línea 1) Recuperación de metales de minerales y de desechos industriales, por las vías pirometalúrgica e hidrometalúrgica.

Línea 2) Síntesis a bajas temperaturas de aleaciones nano-estructuradas Cobre-Níquel mediante un proceso químico. Caracterización, estudio cinético-químico y estructural.

Línea 3) Síntesis de zeolitas y estudio físico-químico de zeolitas intercambiadas.

En la Línea 1 se propone el estudio de los siguientes temas:

1.1) Extracción líquido-líquido de Nb y Ta de soluciones provenientes de la lixiviación a presión en medio ácido de minerales de la Provincia de San Luis.

1.2) Ensayos preliminares de recuperación de Li a partir de minerales de la Provincia de San Luis, mediante la lixiviación a presión en medio ácido.

1.3) Recuperación de Au de minerales mediante el proceso de cloración usando cloro como agente clorante.

1.4) Estudio cinético-químico de las reacciones involucradas en la cloración de GaAs e InAs, usando gas cloro.

1.5) Blanqueado de talcos y arcillas mediante la desferrificación con gas cloro.

En la Línea 2 se investigarán los aspectos siguientes:

2.1) Síntesis de los óxidos de Ni y Cu usando diferentes metodologías.

2.2) Estudio cinético-químico de la reducción con gas hidrógeno de la mezcla de óxidos.

2.3) Caracterización fisicoquímica de las aleaciones obtenidas.

En la Línea 3 se abordarán los siguientes temas:

- 3.1) *Síntesis hidrotérmica de zeolitas sódicas. Caracterización física y química.*  
3.2) *Estudio físico-químico de zeolitas intercambiadas. Determinación de la capacidad y velocidad de intercambio por diferentes metodologías. Aplicaciones.*

Objetivos:

1. Desarrollar metodologías adecuadas que puedan ser aplicadas en el aprovechamiento de recursos naturales no renovables y en la obtención de nuevos materiales.
2. Transferir los resultados al sector científico mediante publicaciones y comunicaciones en congresos específicos sobre los temas del trabajo; y al sector industrial, que pudiere interesarse en su aplicación, a través de patentes, informes y acciones concertadas.
3. Contribuir a la formación de Recursos Humanos en el área de las Reacciones Heterogéneas, aplicadas a la Metalurgia Extractiva, a la Nanotecnología y a la Síntesis de Nuevos Materiales, a través de las siguientes acciones:
  - a) Desarrollar Tesis Doctorales y de Grado y dictar Cursos de especialización sobre los temas investigados.
  - b) Lograr el aprendizaje de las diversas metodologías y técnicas experimentales relacionadas con los tópicos del proyecto.
  - c) Asistir a Cursos de postgrado relacionados con la temática específica bajo investigación.
  - d) Desarrollar aptitudes para la búsqueda bibliográfica inherente al tema de trabajo, su estudio, sistematización, clasificación e interpretación.

**Proyecto 22/Q-805 (7301 FQByF) - UNSL**

**“Química y Aplicaciones de los Productos Naturales de Plantas”**

Director: Dr. Carlos E. Tonn

Resumen

El Proyecto investiga la Química de los Productos Naturales de plantas que crecen principalmente en la región de Cuyo. Se centra en el aislamiento de metabolitos secundarios, su determinación estructural y potenciales aplicaciones en los campos de la química, bioquímica, farmacología y entomología. Se utilizan herramientas cromatográficas y métodos espectroscópicos (IR, UV-visible, EM,  $^1\text{H}$ -RMN,  $^{13}\text{C}$ -RMN, modalidades bidimensionales homo y heteronuclear, tales como COLOC, COSY, ROESY, HMBC, HMQC, NOESY), derivatización y semisíntesis. Integran el Proyecto cinco Líneas de Investigación que se abocan a: 1) Estudio Fitoquímico de especies de interés por su contenido en moléculas potencialmente bioactivas; 2) Aplicación de técnicas basadas en bioconversiones para la obtención de derivados de metabolitos secundarios bioactivos con regio y estereocontrol; 3) Síntesis y semisíntesis de análogos de metabolitos secundarios bioactivos. Búsqueda de citotóxicos e inhibidores de ADN polimerasas y topoisomerasas 4) Estudio de la variación estacional de aceites

esenciales de interés aplicativo y 5) Evaluación de la bioactividad de metabolitos secundarios de plantas, derivados de síntesis y de aceites esenciales como biopesticidas.

Objetivos:

LÍNEA 1: Estudio Fitoquímico de especies de interés por su contenido en moléculas potencialmente bioactivas.

Director de Línea: Dr. Pedro Clemente Rossomando

### **Objetivo específico**

Abordar el estudio fitoquímico de las especies abajo detalladas en la búsqueda de moléculas de interés por su potencial bioactividad como citotóxicos inhibidores de enzimas relacionadas con los ácidos nucleicos, búsqueda de biopesticidas, antiinflamatorios

LÍNEA 2: Aplicación de técnicas basadas en bioconversiones para la obtención de derivados de metabolitos secundarios bioactivos con regio y esterocontrol.

Directora de Línea: Dra. Marcela Kurina Sanz

### **Objetivos específicos**

Utilizar la metodología de biotransformación como una herramienta para la transformación de productos naturales o de síntesis orientada hacia la búsqueda de reacciones con quimio, regio y estereocontrol. Identificar metabolitos secundarios de plantas de la región de Cuyo para ser usados como potenciales materiales de partida para la preparación de reactivos y auxiliares quirales no racémicos aplicables a metodologías en los campos de la síntesis asimétrica y de la química fina.

LÍNEA 3: Síntesis y semisíntesis de análogos de metabolitos secundarios bioactivos. Búsqueda de citotóxicos e inhibidores de ADN polimerasas y topoisomerasas.

Director de Línea: Dr. Carlos E. Tonn

Objetivos específicos:

Realizar transformaciones químicas sobre metabolitos secundarios del grupo de los iridoides y síntesis de "novo", teniendo en cuenta el concepto de simplificación molecular, de la aglicona de estos. Establecer una familia inteligente de compuestos que permita evaluar relaciones de estructura-actividad. Investigar la actividad inhibitoria de un grupo de iridoides, triterpenos y alcaloides frente a Taq ADN polimerasas, topoisomerasa I humana, ADN (intercalantes) y cultivo de células tumorales. Determinar el mecanismo de acción implicado. Obtener derivados de oxidación regioselectiva de xanthatina. Se trabajará en la síntesis de polienos sintéticos a su evaluación frente a insectos.

LÍNEA 4: Estudio de la variación estacional de aceites esenciales de potencial interés aplicativo.

Director de Línea: Dr. José Roberto Saad

Objetivos específicos: Estudiar la composición química de aceites esenciales de las especies *Baccharis artemisioides* H. et A. y *Flourensia oolepis* Blake, para realizar un análisis completo que pueda correlacionar la composición del aceite esencial con la época y lugar de recolección.

Un segundo objetivo es el estudio de cuatro especies del género *Eupatorium* que son *E. buniifolium* Kunth., *E. arnottii* Baker, *E. inulifolium* Kunth y *E. viscidum* H. et A.

Línea 5: Evaluación de la bioactividad de metabolitos secundarios de plantas, derivados de síntesis y de aceites esenciales como biopesticidas, antimicrobianos y aleloquímicos.

Director de Línea: Dra. Marta Edit Sosa.

### **Objetivos específicos:**

Investigar la bioactividad de extractos de plantas de interés, de sus metabolitos secundarios y/o aceites esenciales frente a insectos como antialimentarios, repelentes, atractores y modificadores del desarrollo. Evaluar las mismas propiedades sobre análogos sintéticos de iridiodes y polienos sintéticos. Analizar las propiedades aleloquímicas de metabolitos secundarios. Analizar sus propiedades antimicrobianas frente a bacterias y hongos.

### **(UNSL)**

#### **“Membranas: Procesos y Aplicaciones en Biotecnología”**

Director: Dr. Antonio Pérez Padilla

#### Resumen

La temática propuesta en este proyecto, comprende el estudio de la aplicación de la tecnología de membranas a procesos separativos de importancia industrial en el campo de la biotecnología, alimentos y medioambiental. Se intenta, como se viene haciendo en las etapas anteriores de este proyecto, innovar en las operaciones de concentración y purificación complementando técnicas convencionales o establecer nuevos protocolos utilizando estas técnicas con membranas que han tenido y tienen un gran impacto en los procesos de desarrollo científico y productivo. Es importante señalar que en la actualidad la utilización de membranas está incorporada en los procesos separativos de metabolitos en cultivos celulares (enzimas, antibióticos, anticuerpos monoclonales, vacunas, etc.). También se pretende continuar con el estudio de una de las principales debilidades de esta tecnología, como es el fenómeno de ensuciamiento de las membranas, fundamentalmente en el procesamiento de bioproductos. Este aspecto se trata de resolver mediante la aplicación de campos eléctricos que permiten la recuperación casi instantánea del flujo de perneado, aumentando drásticamente el rendimiento de la operación. Esta tecnología emergente, según puede observarse en la bibliografía disponible, tiene en etapa de investigación y desarrollo nuevas aplicaciones y nuevas técnicas separativas con el empleo de membranas tales como Nanofiltración, Pervaporación, Destilación con membranas, etc.

Objetivos:

1. Los estudios que se realizan están orientados a la aplicación de tecnologías de membranas en procesos de interés biotecnológico y medioambiental.
2. Desarrollar metodologías adecuadas que puedan ser aplicadas para la innovación tecnológica en el campo industrial.
3. Transferir los resultados al sector científico mediante publicaciones y participación en congresos específicos en el tema de trabajo, y al sector productivo que pudiese interesarse en su aplicación, a través de informes y acciones concertadas.
4. Contribuir a la formación de Recursos Humanos en el área de tecnología de membranas aplicadas a la industria alimentaria, biotecnológica y a la protección del medio ambiente a través de las siguientes acciones:
  - a) Desarrollar Tesis Doctorales, de Grado, y dictar Cursos de formación sobre los temas investigados.
  - b) Fortalecer los recursos técnicos y prácticos de la Carrera de Ingeniería en Alimentos de reciente creación, al igual que a la resto de las carreras que se dictan en nuestra Facultad.

#### **COFECYT ANPCyT. Código14681.**

**“Control de *Varroa destructor*, un parásito de la abeja melífera mediante aceites esenciales provenientes de especies vegetales cosechadas en la provincia de San Luis y zonas de influencia”.**

Responsable: Dra. Marta Ponzi

El objetivo del proyecto es obtener productos acaricidas a base de aceites esenciales o componentes de los aceites esenciales, extraídos de plantas silvestres y/o cultivadas de la Región Central para ser utilizados como herramientas de control dentro de un Programa de Manejo Integrado de los distintos problemas sanitarios de la colmena de abejas.

Objetivos Secundarios:

- Extraer aceites esenciales de material vegetal bien identificado y seleccionado en base a sus potenciales efectos acaricidas.
- Analizar la composición de cada aceite esencial obtenido y detectar componentes con efectos acaricidas.
- Determinar toxicidad de los distintos aceites esenciales sobre ácaros, cría de abejas y abejas adultas.
- Determinar efectos repelentes o atrayentes de los distintos aceites esenciales sobre *Varroa destructor*.
- Evaluar distintos tipos de sustratos para la aplicación a campo de los aceites esenciales seleccionados: microencapsulado, adsorción sobre sólidos de bajo costo como por ejemplo obtenidos de material de desecho de cáscara de maní o carozos de duraznos, en arcillas naturales o vehiculizantes (vaselina etc).
- Evaluar la o las formulaciones que resultaron alentadoras en el nivel de laboratorio a escala de campo, ensayando distintos métodos de introducción del aceite en la colmena.

**PICT ANPCyT. Código 38095**

**"Catalizadores de oro soportados sobre óxidos de transición para la combustión de partículas de carbón."**

Investigador Responsable: Dra. Marta Ponzi

**OBJETIVOS GENERALES E IMPACTO**

*Objetivos Generales e impacto: Identificar el problema general en estudio, contextualizar el problema a nivel local, identificar que parte del problema se intenta abordar y contribuir con la investigación.*

En algunos procesos donde la combustión de hidrocarburos o coque es incompleta (motores diesel, procesamiento de coque) se generan partículas de carbón. Cuando el tamaño de las partículas es muy pequeño, éstas contaminan el aire y son riesgosas para la salud fundamentalmente generando enfermedades en las vías respiratorias.

Este es un problema que se presenta en todos los centros urbanos donde se emplean vehículos con motores diesel y es particularmente significativo en nuestro país porque no existe legislación exigente, vinculada con los niveles de partículas de carbón permitidos en el aire. Otro problema destacado es el que se encuentra en la ciudad de Ensenada Provincia de Buenos Aires, donde periódicamente se manifiestan los habitantes de esa ciudad por la contaminación con partículas de carbón provenientes de una empresa de esa localidad

Una de las tecnologías disponibles para controlar las partículas de carbón que se emiten a la atmósfera son filtros de captura que se colocan en los caños de escape o chimeneas, donde se lleva a cabo la combustión completa por medio de catalizadores que se impregnan en los filtros.

El objetivo de este proyecto es la formulación de catalizadores para la eliminación de partículas de carbón con buena actividad dentro del rango de temperatura observado en los chimeneas y caños de escape (200-400°) y estables en las condiciones reales (óxidos de nitrógeno, óxidos de azufre y vapor de agua).

En trabajos anteriores hemos formulado catalizadores conteniendo  $XNO_3$  (X: Li, Na, K y o Cs) y óxidos de metales de transición (Cu y Co). Seleccionando el catión apropiado hemos logrado aumentar la estabilidad térmica del catalizador. El objetivo de esta etapa es lograr catalizadores estables en corrientes que contienen  $NO_x$ ,  $SO_2$  y vapor de agua, por ese motivo se recurre a la adición de metales preciosos que catalizan la reacción entre  $SO_2$ ,  $NO_x$ , vapor de agua y carbón, eliminando el problema de desactivación por la presencia de  $SO_2$  que se observa en los catalizadores con metales de transición.

El logro de los objetivos junto con una reglamentación por parte de la autoridad competente sobre los niveles de partículas de carbón permitidos, semejante a los especificados en países desarrollados, tendría un impacto positivo en el orden social y económico.

Las emisiones de partículas de carbón son nocivas para la calidad del aire y en consecuencia para la salud de los seres vivos, la eliminación de este contaminante tendría un impacto favorable sobre la salud de la población.

## PICT 2006-1478 (ANPCyT)

### **“Síntesis, caracterización y evaluación de catalizadores masivos y soportados sobre monolitos metálicos y cerámicos: Combustión de COVs”**

Director: Dr. Luis E. Cadús

#### Resumen

El propósito de este proyecto es estudiar la eliminación de Compuestos Orgánicos Volátiles (COVs) de las emisiones de industrias que utilizan solventes por medio de oxidación catalítica. Los promisorios resultados obtenidos con catalizadores propios (Perovskitas y óxidos mixtos) nos inducen a continuar su desarrollo en las condiciones de aplicación. Los objetivos son: i) Estudiar la deposición de catalizadores de formulación optimizada sobre monolitos cerámicos y metálicos y evaluar la potencialidad de su aplicación industrial, ya que los COVs seleccionados para estudiar en este proyecto son los solventes principales en los efluentes gaseosos de la industria de la imprenta y pinturas y posibles constituyentes de las emisiones de automóviles que potencialmente usen etanol como combustible, ii) Estudiar nuevas formulaciones de óxidos tipo perovskita  $ABO_3$ , iii) Optimizar la síntesis de catalizadores basados en óxido de manganeso Mn-Me-O variando la naturaleza de Me, la relación Mn/Me, el método de preparación, etc. y estudiando el efecto promotor de metales nobles, iv) Acompañar el desarrollo del sector industrial alentando el uso de tecnologías limpias que reduzcan la contaminación ambiental. El personal especializado estará capacitado para evaluar mediciones de contaminación y asesorar empresas y organismos públicos a la hora de actualizar la legislación

#### Objetivos Generales

Este proyecto tiene por objetivo contribuir a la protección del medio ambiente mediante la eliminación vía catalítica, o al menos la disminución, de los contaminantes denominados Compuestos Orgánicos Volátiles (COV's) presentes en los efluentes de algunos sectores industriales clave.

Formalmente, se denominan Compuestos Orgánicos Volátiles (COVs) a los compuestos de naturaleza orgánica que tienen en condiciones normales una presión de vapor superior a 0,1 torr, siendo estos compuestos los principales componentes de los disolventes que se utilizan habitualmente en las industrias en las que se manejan pinturas, barnices, adhesivos, limpieza, desengrasado, etc.. A estos compuestos se les considera responsables no solo de olores desagradables en vertidos industriales o urbanos, sino también de diferentes fenómenos que dañan al medio ambiente. Así, está demostrado que las emisiones de COV's a la atmósfera contribuyen a la formación de "smog" fotoquímico (productor de ozono) que produce daños en plantas y animales, e irritación ocular y problemas respiratorios en los humanos. En algunas personas, la exposición a los COV's puede también contribuir al aumento del riesgo de desarrollar cáncer. Por otro lado, algunos COV's como los clorofluorocarbones (CFC's) contribuyen a la destrucción de la capa de ozono estratosférico y otros como el

metano absorben cantidades significantes de energía solar contribuyendo al efecto invernadero y por tanto al recalentamiento del planeta. Por todo ello existe actualmente una clara tendencia hacia la reducción de las emisiones de COV's a la atmósfera. Así, muchos países están cambiando su legislación sobre emisiones de COV's y los demás están también estudiando estos cambios para evaluar cuando podrán también implementarlos. En la Argentina hay un gran número de empresas que utilizan COV's en sus procesos. Cuando la concentración en COV's en los efluentes es muy elevada, su eliminación es realizada económicamente por procesos de combustión o de separación física seguida de incineración. Esta vía de destrucción térmica implica grandes consumos de energía los cuales se vuelven más elevados en la medida que la concentración de solventes disminuye. Para bajas concentraciones de COV's se impone la oxidación catalítica. El papel del catalizador es aumentar la velocidad de reacción y permitir operar a temperaturas mucho más bajas. No obstante la selección de la temperatura es un compromiso entre la protección del catalizador y el límite de producción de NO<sub>x</sub> y la posibilidad de recuperar energía. Un problema adicional en la selección de la tecnología de eliminación son los patrones temporales de emisión, los cuales son determinantes en el balance energético de la operación utilizada. El objetivo esperado es convertir los COV's en CO<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>O por medio del uso de una tecnología capaz de combinar descontaminación ambiental con recuperación de energía.

### (ANPCyT)

#### **“Estudio de reacciones heterogéneas de aplicación en la recuperación de metales, el beneficio de minerales y la obtención de nanoaleaciones”**

Directora: María del Carmen Ruiz Salado

#### Resumen

El proyecto está orientado al estudio de las reacciones heterogéneas tanto en sus aspectos básicos, como en sus aplicaciones al beneficio de minerales, y a la metalurgia extractiva y de las aleaciones. Está constituido por tres líneas de investigación:

Línea 1) Recuperación de metales de minerales y de desechos industriales, por la vía pirometalúrgica de cloración.

Línea 2) Síntesis a bajas temperaturas de aleaciones nano-estructuradas Cobre-Níquel mediante un proceso químico. Caracterización, estudio cinético-químico y estructural.

Línea 3) Estudio físico-químico de zeolitas intercambiadas.

En la Línea 1 se propone el estudio de los siguientes temas:

1.1) Recuperación de Au de minerales mediante el proceso de cloración usando cloro como agente clorante;

1.2) Estudio cinético-químico de las reacciones involucradas en la cloración de GaAs e InAs, usando gas cloro;

1.3) Blanqueado de arcillas y talcos mediante la desferrificación con gas cloro.

En la Línea 2 se investigarán los aspectos siguientes:

2.1) Síntesis de los óxidos de Ni y Cu usando diferentes metodologías que permitan la obtención de nanoestructuras;

2.2) Estudio cinético-químico de la reducción con gas hidrógeno de la mezcla de óxidos;

2.3) Caracterización fisicoquímica de las aleaciones obtenidas.

En la Línea 3 se iniciará un estudio de caracterización fisico-química de zeolitas intercambiadas con diferentes cationes (Ca, Ni, Cu, Cr), mediante el uso de distintas técnicas físicas y químicas de análisis.

Objetivos:

*Línea 1*

Estos objetivos están relacionados, por un lado con la obtención de información cinética, de mecanismos de reacción y acerca de las condiciones óptimas de extracción de los metales de interés para los sistemas 1.1) a 1.3).

El estudio proyectado en el apartado 1.1), tiene por finalidad desarrollar una metodología alternativa no contaminante, para la recuperación de Au de depósitos aluvionales, o minerales de baja ley, mediante un proceso pirometalúrgico usando gas cloro como agente clorante.

Las tareas programadas en la sublínea 1.2) están orientadas a continuar y finalizar el tema de trabajo de tesis doctoral del becario Fernando Túnez en el tema "Estudio cinético-químico de las reacciones involucradas en la cloración de GaAs e InAs, usando gas cloro".

El desarrollo del ítem 1.3,) referido al "Blanqueado de arcillas y talcos mediante la desferrificación con gas cloro", permitirá avanzar en el trabajo de tesis doctoral del becario de nivel inicial solicitado al FONCyT. Las actividades programadas permitirán obtener la información fisico-química necesaria para la aplicación de los resultados al beneficio de estos minerales.

*Línea 2*

Los objetivos de esta línea de trabajo están orientados a la obtención de información experimental que permita establecer la factibilidad de disponer de una nueva metodología para la formación de la aleación Monel a bajas temperaturas, y establecer la cinética y el mecanismo de la reacción de reducción de la mezcla de óxidos con gas hidrógeno. Ellos se lograrán a partir del desarrollo de las sublíneas 2.1) a 2.3).

En el apartado 2.1) se propone la síntesis de ambos óxidos mediante el uso de complejantes tales como el ácido cítrico y la comparación de los resultados con los obtenidos por otras metodologías. Ello tiene la finalidad de establecer que metodología permite obtener la mayor dispersión de un óxido en otro, la cual será determinante en la obtención de la aleación deseada y el control de la nanoestructura.

El apartado 2.2) está orientado al estudio cinético-químico de las reacciones involucradas en el proceso de reducción de la mezcla de óxidos de cobre y níquel, con la finalidad de dilucidar el mecanismo de reacción que da lugar a la formación de la aleación "Monel" por esta vía.

La sublínea 2.3) tiene por objeto lograr la caracterización de la aleación obtenida mediante la reducción de la mezcla de óxidos, tanto en su composición, como en su morfología y características cristalográficas, con la finalidad de establecer las condiciones de trabajo adecuadas.

#### *Línea 3*

Esta Línea está orientada a la obtención y caracterización física y química de zeolitas intercambiadas con distintos cationes, dado que la capacidad de intercambio de las zeolitas, una de las propiedades esenciales de estos materiales, permite modificar considerablemente sus propiedades y ajustar las zeolitas a los usos más diversos. El objetivo de este estudio radica en disponer de información que pueda ser aplicada al uso de las zeolitas en diversas áreas, particularmente en el control de la contaminación ambiental y en el beneficio de minerales.

### **PICT - Categoría I - Tipo B: Jóvenes (ANPCyT)**

#### **"Combustión catalítica de glicerina con catalizadores óxidos tipo perovskitas"**

Responsable: Dra. Bibiana Barbero

#### Resumen

El proceso más utilizado para la obtención de biodiesel es la transesterificación de aceites vegetales. Como subproducto de este proceso se obtiene glicerina en una cantidad aproximada al 10% en peso del biodiesel producido. Si bien la glicerina tiene cientos de aplicaciones, la creciente demanda mundial de biodiesel conduce a la generación de un gran excedente de glicerina lo cual llega a ser un problema a resolver. Por eso, el objetivo general de este proyecto es contribuir en la búsqueda de nuevas aplicaciones al mencionado subproducto. El aprovechamiento como combustible para generar energía es muy atractivo ya que mejoraría el balance térmico del proceso y disminuiría el costo de producción del biodiesel haciéndolo aún más competitivo. Con este objetivo, se propone estudiar la combustión catalítica de la glicerina usando óxidos tipo perovskitas como catalizadores. La función del catalizador es permitir que la reacción ocurra selectivamente hacia productos de oxidación total y a temperaturas más bajas que la combustión directa evitando así la formación de gases nocivos (acroleína, óxidos de nitrógeno, etc.).

#### Objetivo General

El objetivo general de este proyecto es contribuir en la búsqueda de aplicaciones de la glicerina generada como subproducto del proceso de producción de biodiesel estudiando la posibilidad de utilizarla como una fuente de energía limpia y económica.

El proceso más utilizado para la producción de biodiesel a partir de grasas y aceites es la transesterificación. En este proceso, los aceites vegetales y un alcohol de cadena corta (metanol o etanol, principalmente) en presencia de un catalizador básico se convierten en ésteres alquílicos y glicerina. En términos generales, de 100 kg de aceite vegetal combinados con 10 kg de alcohol se obtienen 100 kg de biodiesel y 10 kg de glicerina.

En Argentina, por ley 26093, se prevé utilizar 5% de biodiesel dentro del gasoil consumido a partir del año 2010. Actualmente se comercializan 12.000 millones de litros de gasoil. De mantenerse este consumo, la cantidad de biodiesel necesaria para satisfacer el mercado interno generaría más de 50.000 toneladas de glicerina por año. Si además se tiene en cuenta la capacidad del país para producir oleaginosas (principal materia prima del biodiesel) esta cantidad podría cuatriplicarse por las oportunidades de exportación.

La glicerina tiene una amplia variedad de aplicaciones, tales como emulsionante, agente suavizador, plastificante, agente estabilizador y humectante para pastelería, heladería y tabaquería; en lociones corporales, enjuagues bucales e innumerables preparados farmacéuticos y cosméticos; como medio protector para congelamiento de glóbulos rojos, esperma, córneas y otros tejidos; en tintas de impresión y resinas de pinturas; mezclas anticongelantes; y como materia prima para la obtención de nitroglicerina. En los casos precedentes, la glicerina debe tener cierto grado de pureza por lo que la glicerina cruda resultante del proceso de transesterificación de aceites debe ser purificada.

Tradicionalmente, la glicerina es obtenida como subproducto en la fabricación de jabones y en la industria oleoquímica. La reciente producción como subproductos del biodiesel ha tenido un impacto significativo en el mercado. El precio de la glicerina en USA bajó de 1 US\$/lb en 1995 a menos de 0,40 US\$/lb en 2005 y en Europa, el precio bajó de casi 1500 €/ton a menos de 500 €/ton.

Considerando que el mercado de la glicerina para las aplicaciones tradicionales está saturado, el exceso de producción llega a ser un problema a resolver. Es por eso que en los últimos años se han propuesto aplicaciones alternativas como la producción de metanol, ácido succínico, propilenglicol y otros; la producción de hidrógeno a través de reformado en fase acuosa; la biodigestión anaeróbica para obtención de biogas; el quemado como combustible; etc.

El quemado de glicerina como fuente de calor es una tecnología simple que está disponible en el mercado. Para operar en forma segura, la combustión debe realizarse a temperaturas altas (superiores a 1000°C) de modo de evitar la producción de compuestos tóxicos tales como la acroleína que se forma entre 200 y 300°C. Para lograr una temperatura suficientemente alta, la glicerina debe ser quemada agregando combustible auxiliar.

**PICT 2007-352 (ANPCyT)**

**“Métodos Alternativos en la Búsqueda de Biopesticidas para una Agricultura Sustentable”**

Director: Dr. Carlos E. Tonn

Resumen

Durante las décadas de indiscriminado uso de agroquímicos sintéticos se ha logrado controlar rápida y económicamente un gran número de plagas. Sin embargo este avasallamiento del equilibrio natural ha puesto en riesgo los ecosistemas, provocando graves perjuicios para las mismas prácticas agrícolas extrapoladas al mediano y largo plazo. Con el desarrollo de la agricultura sustentable y la concientización sobre la protección medioambiental se ha incrementado el interés de productores agropecuarios e industriales por los bioplaguicidas. Este proyecto está orientado hacia la detección y potenciación de estructuras bioactivas frente a insectos y hongos plaga y a estudiar sus mecanismos de acción y detoxificación. Las moléculas líderes serán seleccionadas por su selectividad y su seguridad para con los ecosistemas. Se plantea la utilización de métodos químicos amigables con el medio ambiente, y de técnicas biocatalíticas para la preparación de los derivados. En una primera etapa se tiene la esperanza de poder transferir algunos resultados a pequeños productores de la región, mediante el desarrollo de un preparado aplicable a la agricultura orgánica, basado en el conocimiento que el grupo tiene en las propiedades de algunos aceites esenciales de plantas nativas.

Objetivos:

Línea 1: Sintetizar moléculas poliinsaturadas con funcionalización butenólido sustituido, para su evaluación frente a insectos plaga como modificadores del desarrollo y comportamiento.

Línea 2: Evaluar la bioactividad (antialimentaria, efectos tóxicos/nutricionales y modificadores del comportamiento) de formulados basados en aceites esenciales de plantas de sobre insectos de interés en agrobiología y en vectores de enfermedades que afectan al hombre.

Línea 3: Preparación de nuevos derivados bioactivos mediante reacciones biocatalíticas quimio, regio y estereocontroles. Estudio de la biodegradación de potenciales agroquímicos.

**PCI A/025750/09 (AECI - España)**

**“Evaluación de moléculas de origen sintético y natural como citotóxicos en la búsqueda de nuevas estructuras líderes como antitumorales”**

Responsable en Argentina: Dr. Carlos E. Tonn

Director: Catedrático Dr. Victor S. Martín (IUBO-ULL-España)

Objetivos:

El Objetivo General del Proyecto se centra en la búsqueda de nuevas moléculas bioactivas. Se incluyen en el mismo cuatro Objetivos Particulares bien definidos:

- a) Síntesis estereoselectiva de aminoalcoholes, análogos de ceramidas y esfingolípidos;
- b) Transformaciones químicas sobre moléculas del grupo de los iridoides;
- c) Obtención de nuevos derivados sintéticos de *ent*-kaurenos y labdanos;

d) Evaluación de la bioactividad frente a un panel de líneas celulares de tumores sólidos humanos, utilizando las disponibilidades que en esta disciplina tiene el IUBO. Este ítem se complementará con ensayos a nivel enzimático que se realizarán en los laboratorios de la UNSL, que dispone de instrumental recientemente adquirido.

De esta forma se complementan las actividades sustentadas en la fortaleza del IUBO, para diseñar procesos de síntesis y estudios de antitumorales *in vitro*, y en la capacidad del grupo argentino para extraer, dilucidar la estructura y realizar transformaciones químicas, sobre metabolitos secundarios obtenidos de especies autóctonas de la región Centro-Oeste de Argentina, una zona semiárida que presenta una flora particularmente rica en este tipo de metabolitos.