

## MODELADO CINETICO DE LA SINTESIS DE IONONAS A PARTIR DE PSEUDOIONONA SOBRE CATALIZADORES DE ACIDO TUNGSTOFOSFORICO SOPORTADO SOBRE SILICE.

Verónica K. Díez\*, J. Isabel Di Cosimo y Carlos R. Apesteguía

Grupo de Investigación en Ciencias e Ingeniería Catalíticas (GICIC)

Instituto de Investigaciones en Catálisis y Petroquímica -INCAPE- (UNL-CONICET). Santiago del Estero 2654, (3000) Santa Fe, Argentina. E-mail: [verodiez@fiq.unl.edu.ar](mailto:verodiez@fiq.unl.edu.ar)

**Palabras Claves/Key words:** ionona, catálisis ácida, ácido tungstofosfórico, modelado cinético / ionone, acid catalysis, tungstophosphoric acid, kinetic modeling

### Resumen

Se estudió el mecanismo de la síntesis de  $\alpha$ -,  $\beta$ - y  $\gamma$ -iononas a partir de pseudoionona (PS) en fase líquida sobre catalizadores de ácido tungstofosfórico soportado sobre sílice (HPAS) usando un modelo heterogéneo tipo Langmuir-Hinshelwood-Hougen-Watson (LHHW). Se emplearon catalizadores HPAS con diferente contenido de HPA preparados por el método de impregnación a humedad incipiente. Los ensayos de actividad catalítica se llevaron a cabo en fase líquida en un reactor Parr a temperaturas entre 343 y 383K y presión autógena. El mecanismo propuesto involucró la formación inicial de los isómeros  $\alpha$ -  $\beta$ - y  $\gamma$ -ionona por ciclización de PS y la posterior isomerización del isómero más inestable,  $\gamma$ -ionona, en  $\alpha$ -ionona. El mejor ajuste se obtuvo suponiendo que la PS forma un intermediario cíclico sobre sitios protónicos superficiales, a partir del cual se obtienen los tres isómeros ionona.

### Abstract

The reaction mechanism of the liquid-phase synthesis of  $\alpha$ -,  $\beta$ - and  $\gamma$ -ionones from pseudoionone (PS) on silica-supported heteropolyacid (HPAS) catalysts was studied using heterogeneous Langmuir-Hinshelwood-Hougen-Watson (LHHW) kinetics. Four silica-supported heteropolyacid catalysts with different HPA loadings were prepared by incipient wetness impregnation. Catalytic tests were carried out in a batch Parr reactor at 343-383 K under autogenous pressure. The mechanism involved the initial formation of  $\alpha$ -,  $\beta$ - and  $\gamma$  isomers and the subsequent isomerization of the least stable isomer  $\gamma$ -ionone toward  $\alpha$ -ionone. The best fitting was achieved by assuming that PS forms a cyclic intermediate on surface proton sites that is consecutively converted to the three ionone isomers.