



Academia de Catálisis A.C.



UASLP

Universidad Autónoma
de San Luis Potosí



NUEVAS FRONTERAS EN CATÁLISIS

NUEVAS FRONTERAS EN CATÁLISIS

NUEVAS FRONTERAS EN CATÁLISIS

ISBN 978-607-535-283-1

Universidad Autónoma de San Luis Potosí

© Derechos reservados

México, 2022

Academia de Catálisis, A.C.
www.acat.org.mx



La **Academia de Catálisis A.C. (ACAT)** es una sociedad sin fines de lucro, con el objetivo fundamental de promover y difundir actividades de investigación, docencia y desarrollo tecnológico en catálisis.

Específicamente, la ACAT apoya:

- la formación de recursos humanos especializados en Catálisis,
- el estudio y la aplicación de la Catálisis,
- la difusión de los fundamentos, estrategias y herramientas de la Catálisis,
- la conformación de una comunidad en Catálisis, con el potencial para contribuir al desarrollo y bienestar de la sociedad.

Bianualmente, la ACAT organiza un Congreso Nacional e Internacional, abriendo un espacio interdisciplinar donde los investigadores y estudiantes dan conocer los avances y resultados de sus proyectos en las diferentes áreas de la Catálisis, donde los participantes nacionales y extranjeros intercambian ideas y experiencias, y establecen colaboraciones, y donde se identifican los nuevos retos y oportunidades, fundamentales y prácticos, en las fronteras de la Catálisis.

En 2021, la ACAT organizó el **VIII Congreso Internacional y el XVII Congreso Mexicano de Catálisis** teniendo como sede la Universidad Autónoma de San Luis Potosí.

Consejo Directivo de la ACAT 2020 – 2021



Dra. Aída Gutiérrez Alejandre

Presidente

Universidad Nacional Autónoma de México

aidag@unam.mx



Dra. Dora A. Solís Casados

Vicepresidente

Universidad Autónoma del Estado de México

dasolis@uaemex.mx



Dr. Jorge Noé Díaz de León Hernández

Secretario

Universidad Nacional Autónoma de México

noejd@ens.cnyn.unam.mx

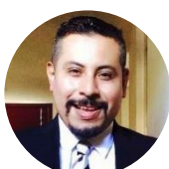


Dr. Luis Escobar Alarcón

Tesorero

Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares

luis.escobar@inin.gob.mx



Dr. Javier Rivera de la Rosa

Vocal 1

Universidad Autónoma de Nuevo León

javier.riverad@uanl.edu.mx



Dra. Sara Núñez Correa

Vocal 2

Universidad Veracruzana

sarnunez@uv.mx



Dra. Alejandra Espinosa de los Monteros

Reyna

Vocal 3

Universidad Juárez Autónoma de Tabasco

alejandra.espinosa@ujat.mx

Representantes Regionales de la ACAT

Dr. Jorge Noé Díaz de León Hernández

Baja California
Universidad Autónoma de México
Centro de Nanociencia y Nanotecnología
noejd@ens.cnyn.unam.mx



Dra. Esthela Ramos Ramírez

Bajío
Universidad de Guanajuato
ramosre@ugto.mx



Dr. Javier Rivera de la Rosa

Norte
Universidad Autónoma de Nuevo León
javier.riverad@uanl.edu.mx



Dr. Jaime Espino Valencia

Occidente
Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo
jespino@umich.mx



Dr. José Guadalupe Pacheco Sosa

Sur-Sureste
Universidad Juárez Autónoma de Tabasco
jose.pacheco@ujat.mx



Dra. Martha Leticia Hernández Pichardo

Valle de México
Instituto Politécnico Nacional
mlhpichardo@gmail.com



Presentación

La **Academia de Catálisis AC de México (ACAT)**, en conjunto con la **Universidad Autónoma de San Luis Potosí** y la **Región Bajío de la ACAT**, organizó el **VIII Congreso Internacional (CI)** y **XVII Congreso Mexicano de Catálisis (CMC)**, que se llevó a cabo del 7 al 12 de noviembre de 2021 y que por primera vez se realizó en modalidad virtual, en respeto a las medidas de higiene y seguridad implementadas en nuestro país para atenuar la pandemia de la COVID-19.

El tema central de este congreso fue “**Nuevas Fronteras en Catálisis**” y tuvo como objetivo principal crear un espacio apropiado para que la comunidad científica nacional e internacional que desarrolla investigación de frontera en catálisis, pueda difundir los avances más recientes en el área e identifique los nuevos retos científicos, tecnológicos, industriales, económicos y sociales, en los cuáles la catálisis puede influir determinadamente para encontrar soluciones novedosas y sostenibles. Este congreso se engalanó con la participación de seis conferencistas con gran reconocimiento internacional, líderes indiscutibles en sus disciplinas, que compartieron su conocimiento, experiencias y su visión para identificar nuevos horizontes en catálisis, estableciendo claramente los paradigmas que debemos atender ahora como comunidad científica y tecnológica. La definición de estos escenarios promoverá, sin duda, el establecimiento de nuevas colaboraciones y el desarrollo de estrategias y de herramientas inéditas en las interfaces de nuestros equipos de trabajo, para atender eficazmente los retos y oportunidades identificadas. La ACAT confía que la definición de estas fronteras sea un faro que dirija nuestro quehacer en catálisis de manera pertinente y con favorables impactos en el futuro mediato.

La ACAT agradece el loable esfuerzo del **Comité Organizador** y del **Comité Científico**, presididos por la **Dra. María Guadalupe Cárdenas Galindo** y por el **Dr. Jorge Noé Díaz de León Hernández**, respectivamente, por su liderazgo y dedicación para hacer posible la organización y la celebración de un congreso con elevados estándares académicos y con los retos que representa una modalidad a distancia. La ACAT también valora el esfuerzo de toda la comunidad de catálisis de México y de diversos países, mayoritariamente de nuestro continente, para ser sensibles a la invitación y solidarios en las diferentes etapas de este congreso. Gracias

a su interés y colaboración, el evento contó con un gran programa científico que incluyó 145 contribuciones técnicas de las cuales 6 fueron pláticas invitadas, 51 fueron presentaciones en modalidad oral y 88 en modalidad de cartel. Agradecemos a la comunidad nacional de catálisis que participó con 105 trabajos y destacamos las contribuciones recibidas de Argentina (18), Colombia (5), España (4), Brasil (4), Chile (1), Puerto Rico (1), Singapur (1), Venezuela (1), Francia (1), Canadá (1), Portugal (1), Estados Unidos (1) y Perú (1). Valoramos la activa participación de todos los asistentes a través del espacio que ofrecieron los canales de comunicación virtual, que propiciaron un fructífero intercambio de ideas. Esta dinámica fue de particular valía para motivar a las nuevas y futuras generaciones de jóvenes investigadores y estudiantes de posgrado, que ahora se adentran en el fascinante mundo de la catálisis.

La ACAT agradece a las autoridades de la **Universidad Autónoma de San Luis Potosí** por todas las facilidades y apoyo otorgados para la organización del Congreso. Aprecia también el apoyo brindado por los investigadores y profesores que participaron en los procesos colegiados establecidos para conformar el programa técnico. Así mismo, extiende su reconocimiento a los **Patrocinadores del CI y del CMC**; su participación demuestra su solidaridad para la comunidad de catálisis, que bien valoramos.

En nombre del Consejo Directivo de la ACAT, del Comité Organizador y del Comité Científico, agradecemos su participación en el **VIII Congreso Internacional** y el **XVII Congreso Mexicano de Catálisis**, haciendo votos para que el evento haya sido un espacio ideal para identificar nuevas perspectivas de desarrollo en las fronteras de la catálisis.

Atentamente,

Dra. Aída Gutiérrez Alejandre

Presidenta

Instituciones Organizadoras

Universidad Autónoma de San Luis Potosí



El origen de la Institución se remonta al 2 de agosto de 1859, cuando el Gobernador Lic. Vicente Chicosein dispuso la creación de un colegio: el “Instituto Científico y Literario”. El 10 de enero de 1923, el Gobernador don Rafael Nieto y la Legislatura local dictaron el decreto No. 106 que elevó al “Instituto Científico y Literario” a la categoría de Universidad de San Luis Potosí, otorgándole su Autonomía, siendo primera universidad en México a la que se reconoció públicamente este principio.

En el umbral de su primer centenario, en 2023, la **Universidad Autónoma de San Luis Potosí** se perfila como una institución de la más alta calidad, socialmente responsable, abierta, incluyente, integrada y vinculada de manera sólida con su entorno, promotora de la libre discusión de las ideas, sin relaciones de dependencia ideológica o de política partidista, y por su alto grado de gobernabilidad; por ser un polo de referencia local, regional, nacional e internacional, por la sólida formación de bachilleres, profesionales y ciudadanos conscientes de su responsabilidad social, por sus aportaciones al desarrollo del conocimiento, las humanidades, la cultura, la tecnología y la innovación, y por sus contribuciones oportunas y con los más altos estándares de calidad a la mejora del nivel de desarrollo humano de la sociedad potosina y del país.

Facultad de Ciencias Químicas - UASLP



FACULTAD DE
**CIENCIAS
QUÍMICAS**
UASLP



La **Facultad de Ciencias Químicas de la UASLP**, se visualiza como una dependencia universitaria de la más alta calidad, incluyente, integrada y vinculada con su entorno; considerada como un referente nacional e internacional del área química, por la formación de profesionistas de licenciatura y posgrado con alto nivel académico, científico y humano, conscientes de su responsabilidad social, así como por sus aportaciones al desarrollo del conocimiento, la tecnología y la innovación con los más altos estándares de calidad.

La Facultad ofrece 5 licenciaturas: **Ingeniería Química**, Ingeniera de Alimentos, Ingeniería de Bioprocesos, Químico Farmacobiólogo y Licenciado en Química, así como los posgrados en Ciencias: en **Ingeniería Química**, en Bioprocesos, en Farmacobiológica y en Química. También colabora en los programas institucionales de Ciencia e Ingeniería de Materiales y Ciencias Ambientales.

El **Posgrado en Ciencias en Ingeniería Química** incluye las siguientes líneas de generación y aplicación del conocimiento:

- Modelado y simulación de procesos.
- Ingeniería ambiental.
- Materiales avanzados y nanoestructuras.
- **Catálisis**, orientada a:
 - Diseño, Síntesis, Caracterización, evaluación funcional y modelado de catalizadores.
 - Diseño, desarrollo, operación y modelado de reactores.

Agenda Ambiental - UASLP



La UASLP, consciente de la importancia del cuidado del medio ambiente, ha establecido lineamientos que le permiten la creación y transferencia del conocimiento en prácticas ambientales sostenibles, fundamentadas con el Modelo Educativo y el Plan Institucional de Desarrollo (PIDE UASLP 2013-2023) con el objetivo de consolidarse como una Universidad Sustentable.

En este contexto, la **Agenda Ambiental** de la UASLP es una instancia de coordinación transversal entre las entidades académicas y administrativas que busca impulsar, articular y apoyar iniciativas que contribuyan a la incorporación de la perspectiva ambiental y de sostenibilidad en todas las funciones sustantivas y de gestión no sólo hacia dentro de la UASLP sino en toda la sociedad. Con esta perspectiva responsable e integradora ha alcanzado sus objetivos a través de proyectos académicos de calidad, evaluación continua y propuestas innovadoras de investigación y tecnología.

La **Agenda Ambiental** fomenta la capacitación, actualización y generación de conocimiento que contribuye a mejorar el compromiso social con la formación de profesionistas altamente especializados en temas de ambiente y sostenibilidad. Para cumplir sus objetivos la Agenda Ambiental trabaja a través de 4 ejes: Educación e Investigación, Gestión Institucional, Vinculación y Proyectos y Comunicación.

Universidad de Guanajuato



La fundación de la **Universidad de Guanajuato** se remonta al año 1732, aunque fue en marzo de 1945 cuando adquirió el rango de Universidad y el nombre de Universidad de Guanajuato (UG). Con una población de 46,417 estudiantes, actualmente la UG tiene 4 campus universitarios: Celaya-Salvatierra, Guanajuato, Irapuato-Salamanca y León, además de un campus digital.

El **Campus Guanajuato** cuenta con 6 divisiones, entre ellas la División de Ciencias Naturales y Exactas que está integrada por 6 Departamentos: Química, Ingeniería Química, Matemáticas, Farmacia, Biología y Astronomía. El **Departamento de Química** se formó en 2009 y su misión es la formación de profesionales e investigadores cuya excelencia sea reconocida en el ámbito regional, nacional e internacional, que sean capaces de generar nuevos conocimientos, de ser líderes en el desarrollo de la investigación que necesita el país y de incorporar avances científicos y tecnológicos a la realidad nacional a través de la extensión y asistencia profesional a la sociedad.

Las líneas de generación y aplicación del conocimiento incluyen: **Materiales Catalíticos, Procesos Avanzados de Oxidación, Procesos Sustentables, Química Aplicada a Catálisis, Catálisis Heterogénea, Fotocatálisis, Fuentes Renovables de Energía y Gestión e Innovación de la Tecnología**. Su claustro académico, con reconocimiento del Sistema Nacional de Investigadores, y los estudiantes de sus programas educativos, con reconocimiento del PNPC-CONACYT, participan activamente con la Academia de Catálisis, A.C. en el Comité Directivo, en la Representación de la Región Bajío, en los congresos nacionales de catálisis (CMC) y en congresos internacionales de catálisis (CICAT), entre otros.

Tecnológico Nacional de México – Celaya



El **Departamento de Ingeniería Química** del Tecnológico Nacional de México en Celaya ofrece programas de Licenciatura, Maestría en Ciencias y Doctorado en Ciencias, completos y balanceados, para lograr que nuestros egresados tengan una carrera exitosa. Nuestra planta académica ha trabajado para mantener el nivel de excelencia que ha caracterizado al Departamento desde sus inicios. Contamos con 26 profesores de tiempo completo, de los cuales el 70% pertenece al Sistema Nacional de Investigadores. Nuestros programas de posgrado son reconocidos por el Padrón Nacional de Posgrados de Calidad (PNPC), en el nivel de Competencia Internacional en el caso de la Maestría en Ciencias y en el nivel de Consolidado para el Doctorado. Nuestro programa de Licenciatura cuenta con acreditación internacional otorgada por el CACEI. Se cultivan tres líneas de investigación y generación de conocimiento: **a) Ciencias Básicas en Ingeniería Química, b) Diseño de Procesos y c) Nuevas Tecnologías para el Desarrollo Sustentable.**

Comité Organizador



Dra. María Guadalupe Cárdenas Galindo

Presidenta

Universidad Autónoma de San Luis Potosí

cardenas@uaslp.mx



Dra. Esthela Ramos Ramírez

Vicepresidenta

Universidad de Guanajuato

ramosre@ugto.mx



Dr. Brent E. Handy

Secretario

Universidad Autónoma de San Luis Potosí

handy@uaslp.mx



Dra. Brenda Zermeno Reséndiz

Tesorera

Universidad Autónoma de San Luis Potosí

brenda.zermeno@uaslp.mx



Dr. Juan Carlos Fierro González

Vocal

Tecnológico Nacional de México – Celaya

jcfierro@iqcelaya.itc.mx



Dr. Marco Antonio Sánchez Castillo

Vocal

Universidad Autónoma de San Luis Potosí

masanchez@uaslp.mx

Comité Local de Apoyo

Dra. Alma Gabriela Palestino Escobedo

Facultad de Ciencias Químicas - UASLP



Dr. Marcos Algara Siller

Agenda Ambiental - UASLP



M.E. Ma. Guadalupe Alejo González

Facultad de Ciencias Químicas - UASLP



Dra. María del Carmen González Castillo

Facultad de Ciencias Químicas - UASLP



M.C. Alma Delia Montante Montelongo

Facultad de Ciencias Químicas - UASLP



MEBC Eréndira Magdalena Ávalos Morales

Facultad de Ingeniería - UASLP



Dra. María del Rosario Morales Armenta

Facultad de Ciencias Químicas - UASLP



Q. Yadira Elena Marín Proa

Facultad de Ciencias Químicas - UASLP



IBP. Laura Daniela Hernández Rodríguez

Agenda Ambiental - UASLP



Comité Científico

Dr. Jorge Noé Díaz de León Hernández

Centro de Nanociencias y Nanotecnología
Universidad Nacional Autónoma de México
Presidente



Dr. Rafael Huirache Acuña

Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo



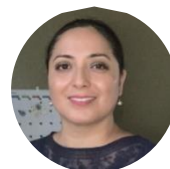
Dr. José Guadalupe Pacheco Sosa

Universidad Juárez Autónoma de Tabasco



Dra. Carolina Solís Maldonado

Universidad Veracruzana - Poza Rica



Dr. Juan Carlos Fierro González

Tecnológico Nacional de México - Celaya



Comité Técnico

- Aida Luz Villa
- Alfredo Solís García
- Aline Villarreal Medina
- Brenda Berenice Zermeño Reséndiz
- Brenda Jeanneth Acosta Ruelas
- Carlos Eduardo Soto Arteaga
- Carlos Javier Lucio Ortiz
- Carlos Omar Castillo Araiza
- Carlos Román Vera
- Daniela Xulú Martínez Vargas
- David Alejandro de Haro del Río
- Dora Alicia Solís Casados
- Edgar Alonso Reynoso Soto
- Eduardo Miro
- Elena Smolentseva
- Eliana Gabriela Vaschetto
- Esthela Ramos Ramírez
- Francisco José Morales Leal
- Gerardo Antonio Flores Escamilla
- Giane Gonçalves
- Gloria Janneth López Mercado
- Gloria Lourdes Dimas Rivera
- Guillermo Penche Hernando
- Hugo Jesús Tiznado Vazquez
- Hugo Pérez Pastenes
- Iván Alonso Santos López
- Jaime Espino Valencia
- Javier Alonso López Medina
- Javier Rivera de La Rosa
- Jesús Andrés Tavizón Pozos
- Joel Antúnez García
- José Antonio Colín Luna
- José Apolinar Cortes
- Juan Carlos Chavarría Hernández
- Julia Aguilar Pliego
- Julián E. Sánchez Velandia
- Katherine Paredes Gil
- Ladislao Sandoval Rangel
- Leda Colpini
- Leticia del Carmen Romero Castro
- Luis Cedeño Caero
- Luis Escobar Alarcón
- María Concepción Barrera Domínguez
- María Pilar González Marcos
- María Rocío Alfaro
- María Guadalupe Cárdenas Galindo
- Mario Alberto Guzmán Cruz
- Martha Leticia Hernández Pichardo
- Mayra Angélica Álvarez Lemus
- Misael Córdoba Arroyo
- Nelson Cardona Martínez
- Norma Alicia Ramos Delgado
- Norma Gutiérrez Ortega
- Omar U. Valdés Martínez
- Osmín Avilés
- Raúl Alejandro Luna Sánchez
- Rebeca Silva Rodrigo
- Reyna Natividad Rangel
- Rosario Isidro Yocupicio Gaxiola
- Rosendo López González
- Santiago Iván Suarez Vazquez
- Sara Núñez Correa
- Socorro Oros Ruiz
- Tatiana M. Bustamante
- Uriel Caudillo Flores
- Viviana Milt
- Yoxkin Estévez Martínez



EMPRESAS INVITADAS



<https://anyover.com.mx>

Una muestra de lo que hacemos



Te apoyamos en la adquisición y conservación de instrumentos para la caracterización de materiales.

Puesta en marcha de **espectrómetro de masas** Hiden en Universidad de Guadalajara

Capacitación de uso de **Sonicadores** en FES Cuatitlan UNAM

Instalación de **sistema experimental Probostat de análisis de membranas** en CIQA Saltillo.



Descubre toda nuestra oferta en www.anyover.com.mx

Ayudamos a conservar tus equipos

Conoce el servicio de mantenimiento *preventivo* y *correctivo* para equipos Quantachrome, modelos NOVA, Monosorb, Autosorb, Chembet.



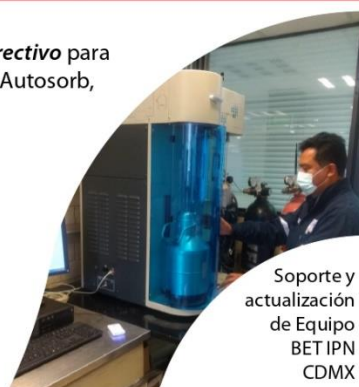
Reacondicionamiento de Calidad



Tiempo de Respuesta Más Rápido



Técnicos Capacitados



Soporte y actualización de Equipo BET IPN CDMX

Programa tu servicio de mantenimiento con nosotros.

Obten un 10% de descuento en tu **primer mantenimiento**

Escribanos en contacto@anyover.com.mx

Representantes Exclusivos de:





www.isasa.com.mx



Empresa mexicana con mas de 20 años de experiencia en Instrumentación, servicio, asistencia y soporte, brindamos un alto nivel de desempeño

Sectores:

- Industria
- Gobierno
- Academia e Investigación
- Servicios y evaluación de la conformidad



NicoletTM iS20 FTIR

Aplicaciones

- Caracterización de materiales
- Alimentos
- Farmacéuticos y cosméticos
- Control de Calidad
- Ambiental
- Automotriz y aeroespacial
- Geociencias y minería

Praying Mantis™



Identificación y cuantificación de elementos y compuestos en niveles

- Traza
- ppm, ppb
- Porcentaje



GC-MS Orbitrap Explorer



Nuestras soluciones en Instrumentación impulsan su avance en analítica



EVOLUTION One



DXRTM 3 Microscopio Raman

Contáctanos para más información

www.isasa.com.mx / contacto@isasa.com.mx



<https://nanociencias.mx>



mi micromeritics®

**INSTRUMENTACIÓN SOPORTE Y
SERVICIO PARA EL ANÁLISIS DE:**

*Área superficial y porosidad
Quimisorción y reactividad
Sorción dinámica de vapor
Microscopía electrónica
Tamaño de partícula
Reología de polvos
Densidad*



3A FLEX



DVS DISCOVERY



Microactivity Effi



Auto Chem™ II 2920

*Almacenamiento
Captura de gases
Separación de gases
Catálisis
Electrónicos*

freemantechology
a micromeritics company

Surface Measurement Systems
World Leader in Sorption Science

PID
a micromeritics company

Colloidal Dynamics
a micromeritics company



www.anton-paar.com/mx-es/

Anton Paar, propiedad de la organización benéfica Santner Foundation, es una empresa internacional que desarrolla, produce y distribuye instrumentos de laboratorio de alta precisión y sistemas de medición para proceso, además de ofrecer soluciones robóticas y de automatización personalizadas. **Anton Paar** es **líder mundial** en medición de densidad, concentración, CO₂ y en el campo de la reometría.

La especialización de **Anton Paar** en la producción de alta precisión, su cercanía con la comunidad científica, así como una constante inversión en investigación y desarrollo, se hacen patentes en la calidad de sus instrumentos.

Progreso e innovación, producción de alta precisión, pasión por la investigación, inversión en desarrollo tecnológico y cercanía con la comunidad científica, son rasgos distintivos de las expresiones que definen a **Anton Paar**. Nuestros instrumentos de medición reflejan nuestros pensamientos y acciones. Para nosotros la calidad significa componentes fabricados con la más alta precisión, principios de medición innovadores e interfaces de usuario bien diseñadas. Nuestros productos se han creado en estrecha colaboración con nuestros clientes y se integran sin problemas en sus entornos de trabajo. Estos satisfacen los requisitos específicos de los clientes y son las soluciones a los retos a los que se enfrentan. La idea de ampliar continuamente los límites de los que es técnicamente factible nos inspira y nos motiva en nuestro trabajo diario para producir los mejores instrumentos de medición para nuestros clientes.

Anton Paar México S.A. de C.V., establecida hace más de una década en México como filial de Anton Paar GmbH, vende y da soporte técnico y de aplicaciones a los instrumentos de Anton Paar utilizados por la industria y centros de investigación en todo el territorio nacional.

Vista nuestro sitio web o contacta a nuestros representantes para conocer tus necesidades en instrumentación y servicios técnicos de nuestra especialidad.

Oficina Central

Parque Industrial Platah
Calle 1 Lote 5, Manzana 3
Villa de Tezontepec, Hidalgo; 43894
Tel. 55-8502-6001
info.mx@anton-paar.com

Sucursal Monterrey

Av. Dr. José Eleuterio González 460, #6.
Col. San Jerónimo
Monterrey, N.L., 64640
Tel: 52-81-8103-7315



www.distribuidorarodval.com

Distribuidora Rodval, S.A. de C.V. es una empresa 100% mexicana, con más de 30 años de experiencia en la venta y distribución de equipos, material de consumo y reactivos para las industrias de

• **Alimentos y bebidas,** • **Farmacéutica** • **Metal-mecánica,**

en las áreas de producción, control de calidad e investigación.

Distribuidora Rodval S.A. de C.V. también ofrece apoyos a:

• **Universidades,** • **Centros de investigación,** • **Hospitales,**

• **Laboratorios de microbiología y en ciencias de la vida.**

Misión:

Satisfacer las necesidades de nuestros clientes con productos de alta calidad en el menor tiempo posible.

Distribuidora Rodval, S.A. de C.V, tiene su sede en Monterrey, N. L. y oficinas en Aguascalientes, Ags.

Distribuidora Rodval, S.A. de C.V.
Av. Francisco I. Madero 1955 Pte. Desp. 174
C.P. 64000 Monterrey, Nuevo León.
Tel. 818347-0235 y 36
ventas@distribuidorarodval.com



811044-1936

MERCK

SIGMA-ALDRICH



Distribuidor autorizado

Nuevas Fronteras en Catálisis

Editor

Dr. Marco Antonio Sánchez Castillo

Facultad de Ciencias Químicas
Universidad Autónoma de San Luis Potosí



Se agradece el apoyo del siguiente personal de la UASLP

M.P.S. Laura Elena Ochoa Leija.

I.Q. Claudia del Rocío Arellano del Río.

M.C. Luisiana Fabiola Palomo González.

I.Q. Clara María Martínez Jasso.

Presentación del Libro

En el marco del **VIII Congreso Internacional (CI) y XVII Congreso Mexicano de Catálisis (CMC)**, **Nuevas Fronteras de Catálisis** documenta el Programa Técnico del Congreso. La obra reseña las siguientes actividades:

- **Conferencias Plenarias**, con una breve semblanza de cada uno de los distinguidos líderes internacionales, quienes compartieron su visión sobre el futuro de la catálisis.
- **Conferencias invitadas**, con una breve semblanza de cada uno de los distinguidos invitados, quienes compartieron significativos avances en diversas disciplinas de la catálisis.
- **Cursos cortos** que se ofrecieron al final del programa técnico con el propósito que los participantes se capaciten y/o actualicen en conceptos, estrategias y herramientas que son relevantes para el desarrollo de la catálisis a nivel fundamental y práctico.
- Los resúmenes de cada una de las cinco **sesiones orales** de trabajos técnicos.
- Los resúmenes de cada una de las dos **sesiones de carteles** de trabajos técnicos.

La información incluida en la obra es ya un referente de la dinámica, los intereses y las direcciones en las que se dirige la investigación y el desarrollo tecnológico en catálisis en el contexto nacional, notablemente matizado con las experiencias, resultados e impactos de los grupos de trabajo de diferentes países. La obra es también un valioso referente para conocer los retos y oportunidades que demanda el sector social y productivo, que requieren de la aplicación de la catálisis para desarrollar procesos, productos o servicios que sean viables y pertinentes desde un enfoque sostenible. La información que reportan los autores de cada trabajo permite conocer nuevas metodologías, enfoques originales para el análisis de resultados y aristas novedosas que permiten redirigir el trabajo de los grupos para atender preguntas aún por resolver.

El Congreso estableció los canales de comunicación adecuados para proponer un favorable intercambio de experiencias entre todos los participantes, quienes se

abrieron al diálogo con sus colegas durante el Congreso y se fomentaron discusiones críticas, fundamentales y propositivas.

Confiamos que la difusión de los resultados del Congreso a través de “Nuevas Fronteras en Catálisis” dé cuenta de la relevancia y del favorable impacto que tiene la catálisis en diversos procesos, productos y servicios y, sobre todo, para identificar los retos y oportunidades que visionaria e interdisciplinariamente deberemos atender en catálisis para que nos guíen, como sociedad, hacia nuevos y mejores escenarios de bienestar económico y social.

Atentamente,

Dr. Marco Antonio Sánchez Castillo

Programa Técnico

VIII Congreso Internacional y XVII Congreso Mexicano de Catálisis

7 - 12 de noviembre de 2021

San Luis Potosí, México.

Nuevas Fronteras en Catálisis

Día Hora	Lunes 8		Martes 9		Miércoles 10
09:00	Conferencia Plenaria ENRIQUE IGLESIA		Conferencia Plenaria AVELINO CORMA		Conferencia Plenaria ANTONIA INFANTES MOLINA
10:00	Café	Café	Café	Café	Café
	Sesión 1	Sesión 2	Sesión 3	Sesión 4	Sesión 5
10:10	O-1-4	Plática Invitada 3-94 Juan M. Arce Ramos	O-29-63	Plática Invitada 5-122 Javier Rivera de la Rosa	Plática Invitada 6-34 Giane G. Lenzi
10:30	O-2-6		O-30-77		
10:50	O-3-103	Anyover	O-31-54	O-41-40	O-51-119
11:10	Descanso	Descanso	Descanso	Descanso	Descanso
11:20	Plática Invitada 1-25 Guillermo Penche	O-15-17	Plática Invitada 4-137 Gabriela Díaz Guerrero	O-42-104	Asamblea General de la ACAT
11:40		O-16-22		O-43-23	
12:00	O-4-12	ISASA	O-32-80	O-44-53	
12:20	O-5-16	O-17-24	O-33-82	O-45-75	
12:40	O-6-20	O-18-26	O-34-85	Anton Pear	
13:00	Comida	Comida	Comida	Comida	Comida
13:40					
14:00	O-7-21	O-19-32	O-35-88	Videos: Promoción de Posgrados	Conferencia Plenaria SERGIO FUENTES MOYADO
14:20	O-8-27	O-20-36	O-36-89		
14:40	O-9-28	O-21-51	O-37-95	O-46-113	
15:00	O-10-30	O-22-114	Nanociencias	O-47-115	
15:20	Plática Invitada 2-123 Dora A. Solís Casados	O-23-128	O-38-07	O-48-120	Clausura: Aida Gutiérrez-Alejandre J. Noé Díaz de León Premiaciones: Concurso de Carteles y Mejor Tesis de Maestría en Catalisis
15:40		O-24-130	O-39-107	O-49-124	
16:00	O-11-43	O-25-3	O-40-109	O-50-134	
16:20	O-12-44	O-26-29	Sesión 2 Carteles		
16:40	O-13-59	O-27-65			
17:00	O-14-62	O-28-139			
17:20	Sesión 1 Carteles		Actividad Cultural		
17:40					
18:00					
18:20					

Programa Técnico

VIII Congreso Internacional y XVII Congreso Mexicano de Catálisis 7 - 12 de noviembre de 2021 San Luis Potosí, México.

Nuevas Fronteras en Catálisis

Día Hora	Domingo 7	Jueves 11 y Viernes 12	
09:00		Curso: Empleo de la microscopía electrónica de barrido en la caracterización de catalizadores Dr. Antonio Aragón Piña 9:00 - 11:00	Curso: Energía Circular Dra. Diana Bustos Martínez y MC. Héctor Reider de la Garza 9:00 - 11:00
10:00			
10:10			
10:30			
10:50			
11:10		Sesión informativa ANTON PAAR 11:00 - 11:30	Sesión informativa ANYOVER 11:00 - 11:30
11:20			
11:40			
12:00		Curso: Uso de la Espectroscopía de Absorción de Rayos-X para la Caracterización de Catalizadores Dr. Juan Carlos Fierro González 11:30 - 13:30	Curso: Análisis Termométrico Combinado de Catalizadores Dr. Brent E. Handy y Dr. Ricardo García Alamilla 11:30 - 13:30
12:20			
12:40			
13:00			
13:40			
14:00			
14:20			
14:40			
15:00		Curso: Empleo de la microscopía electrónica de barrido en la caracterización de catalizadores Dr. Antonio Aragón Piña 15:00 - 17:00	Curso: Energía Circular Dra. Diana Bustos Martínez y MC. Héctor Reider de la Garza 15:00 - 17:00
15:20			
15:40			
16:00			
16:20			
16:40			
17:00	Apertura: Ma. Guadalupe Cárdenas Galindo		
17:20	Conferencia Plenaria: SUSANNAH SCOTT	Curso: Uso de la Espectroscopía de Absorción de Rayos X para la Caracterización de Catalizadores Dr. Juan Carlos Fierro González 17:30 - 19:30	Curso: Análisis Termométrico Combinado de Catalizadores Dr. Brent E. Handy y Dr. Ricardo García Alamilla 17:30 - 19:30
17:40			
18:00			
18:20			



CONFERENCIAS PLENARIAS

Conferencia plenaria



Susannah L. Scott

Estados Unidos

University of California, Santa Barbara.

Domingo 7 de noviembre, 17:00 h

**Catalysis for a circular carbon economy:
Depolymerization of renewable and recycled
feedstocks.**

Susannah Scott received her Ph. D. in Inorganic Chemistry from the Iowa State University in 1991. She got a NATO postdoctoral fellowship at IRCE-Lyon, France. After that, she joined the Chemistry Department at the University of Ottawa. In 2003, she moved to the University of California, Santa Barbara, where she currently holds the Duncan and Suzanne Mellichamp Chair in Sustainable Catalysis. She is an Executive Editor for ACS Catalysis, a member of the Board of Reviewing Editors for Science, and a member of Scientific Advisory Boards at the Fritz Haber Institute and many others. Her research interests include the design of heterogeneous catalysts with well-defined active sites for the efficient conversion of conventional and new feedstocks, as well as environmental catalysts to promote air and water quality. In 2014, she founded the Mellichamp Academic Initiative in Sustainable Manufacturing and Product Design at UC Santa Barbara, where she now leads an interdisciplinary program in research and education.

During her academic career, she has received more than 20 distinctions. Among them, gold medal in chemistry at the University of Alberta (1987). University of Ottawa Young Researcher of the Year Award (1999). YWCA Award for Women (Information, Technology and Science) (2000). She was elected as President of the Gordon Conference of Research on Catalysis beginning in 2022.

Conferencia plenaria

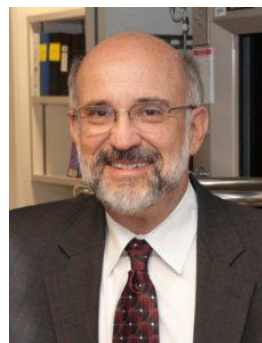
Enrique Iglesia

Estados Unidos

Universidad de California

Lunes 8 de noviembre, 9:00 h

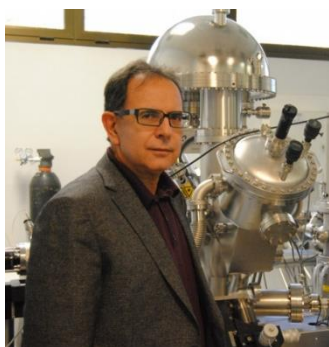
Mechanistic insights into acid catalysis: the myths and challenges of small voids.



El Dr. Iglesia trabaja en la síntesis y la caracterización de catalizadores de aplicación importante en procesos de interés industrial como son la refinación del petróleo, síntesis petroquímica, conversión de energía y control ambiental. En sus líneas de investigación destacan contribuciones originales en la conversión de metanol y dimetil éter a compuestos oxigenados, trabajo reportado en publicaciones de alto prestigio, como patentes de invención con la compañía BP. Su investigación en la conversión de metano a hidrocarburos superiores mediante el proceso Fischer-Tropsch (FT), tecnología aplicada por EXXON, ha sido desarrollada en gran medida por el Dr. Iglesia. Sus trabajos y patentes en este campo son lectura obligada para cualquier investigación en el proceso FT. Otras líneas de investigación son el uso de alcanos ligeros en reacciones para desulfuración y desnitrogenación, la deshidrogenación de alcanos ligeros en alquenos y aromáticos, los procesos de reformación y craqueo catalítico, las reacciones de isomerización, alquilación y combustión a baja temperatura. Los proyectos de investigación actuales también incluyen el desarrollo de catalizadores y procesos para deshidrogenación y conversión de alcanos y el desarrollo de métodos teóricos para predecir la estructura, transporte y propiedades químicas de catalizadores porosos.

Sus investigaciones se caracterizan por el rigor científico y la relevancia práctica, lo que ha permitido tener un elevado número de colaboraciones en la industria. Ha recibido las más altas distinciones por dedicación a la docencia de su Universidad, adicionalmente en la comunidad científica se ha desempeñado como editor en jefe de la revista *Journal of Catalysis*, y es integrante de diversos comités para el avance y promoción de la ciencia y la ingeniería. Tiene una amplia e impresionante lista de premios y reconocimientos, entre los más recientes están: el NACS Award for Distinguished Service in the Advancement of Catalysis, en 2021; el E. V. Murphree Award in Industrial and Engineering Chemistry, American Chemical Society, en 2020; y el Michel Boudart Award, North American Catalysis Society/European Federation of Catalysis Societies en 2019.

Conferencia plenaria



Avelino Corma Canós

España

Universidad Politécnica de Valencia

Martes 9 de noviembre, 9:00 h

Diseño molecular de catalizadores: desde el concepto a la aplicación industrial.

El Profesor Avelino Corma Canós realizó sus estudios de licenciatura en química en la Universidad de Valencia (1973) y posteriormente obtuvo su grado doctoral en la Universidad Complutense de Madrid (1976). Tras una estancia postdoctoral en el Departamento de Ingeniería Química de la Queen's University en Canadá, se incorporó como investigador en el Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC) en 1979. En 1987 se convirtió en profesor de investigación del CSIC y, a partir de 1990, desarrolla su labor científica en el Instituto de Tecnología Química de la Universidad de Valencia (ITQ CSIC/UPV), centro que dirigió desde su fundación hasta el 2010. Las investigaciones del Prof. Corma han contribuido notablemente no sólo en la comprensión fundamental del funcionamiento de catalizadores sólidos, sino también en el desarrollo de materiales para aplicaciones industriales. El grupo del Prof. Corma es reconocido internacionalmente por sus investigaciones y desarrollos de catalizadores sólidos ácidos, especialmente zeolitas para aplicaciones en la refinación del petróleo y la síntesis de químicos finos.

El Prof. Corma es coautor de más de 1400 artículos, autor de tres libros y más de 200 patentes (20 de las cuales se explotan comercialmente). A lo largo de su carrera ha recibido múltiples premios y reconocimientos, entre los que destacan el Premio Príncipe de Asturias de Investigación Científica y Técnica (2014), el Premio Premio Spiers Memorial de la Royal Society of Chemistry (2016), el Boudart Award for Advanced Catalysis (2009), G. A. Somorjai Award de la American Chemical Society (2008), Premio Nacional de Ciencia y Tecnología de México (2008) y la Medalla de Oro de la Real Sociedad Española de Química (2005).

Conferencia plenaria

Antonia Infantes Molina

España

Universidad de Málaga

Miércoles 10 de noviembre, 9:00 h

Catálisis y medioambiente, dos buenos amigos.



La Dra. Antonia Infantes-Molina es Profesora Contratada Doctora en la Universidad de Málaga (España). Es Ingeniero Químico (2002) y Doctor en Ciencias (2006-Universidad de Málaga). Ha desarrollado su línea de investigación en la síntesis y caracterización de nanomateriales y nanocatalizadores así como su uso para aplicaciones medioambientales. Entre sus colaboraciones, destaca el estudio de materiales adsorbentes en colaboración con Pesquisa em Separações por Adsorção, Universidade Federal do Ceará (Brasil); sistemas catalíticos para la producción de combustibles limpios en el Instituto de Catálisis y Petroleoquímica (ICP-CSIC) de Madrid (España); así como la eliminación catalítica de NO_x de fuentes móviles y procesos catalíticos para la transformación de CO₂ en el grupo Laboratorio de Catálisis y Procesos Catalíticos del Politécnico de Milán (Italia). Su investigación actual incluye la síntesis y caracterización de nuevos materiales para aplicaciones ambientales: adsorbentes y catalizadores en hidrotratamiento, hidrogenación, oxidación y reacciones fotocatalíticas; así como procesos catalíticos para el uso y transformación de CO₂ en productos de alto valor añadido. Colabora con numerosos grupos de investigación y cuenta con una dilatada experiencia en la caracterización de materiales mediante diferentes técnicas de caracterización, especialmente Espectroscopía fotoelectrónica de Rayos X. Actualmente es coordinadora académica de investigación en la Fundación General de la Universidad de Málaga.

Conferencia plenaria



Sergio Fuentes Moyado

México

Universidad Nacional Autónoma de México

Miércoles 10 de noviembre, 14:00 h

Avances recientes en catalizadores de sulfuro de metales de transición másicos y soportados.

Sergio Fuentes Moyado es originario de Fortín, Veracruz. Se graduó de Ingeniero Químico Petrolero en la Escuela Superior de Ingeniería Química e Industrias Extractivas del Instituto Politécnico Nacional. Obtuvo el grado de Doctor en Cinética Química de la Universidad Claude Bernard, Lyon, Francia y el de Doctor de Estado en Ciencias Físicas de la misma universidad. En 2011 le fue conferido el Doctorado Honoris Causa por la Universidad Veracruzana.

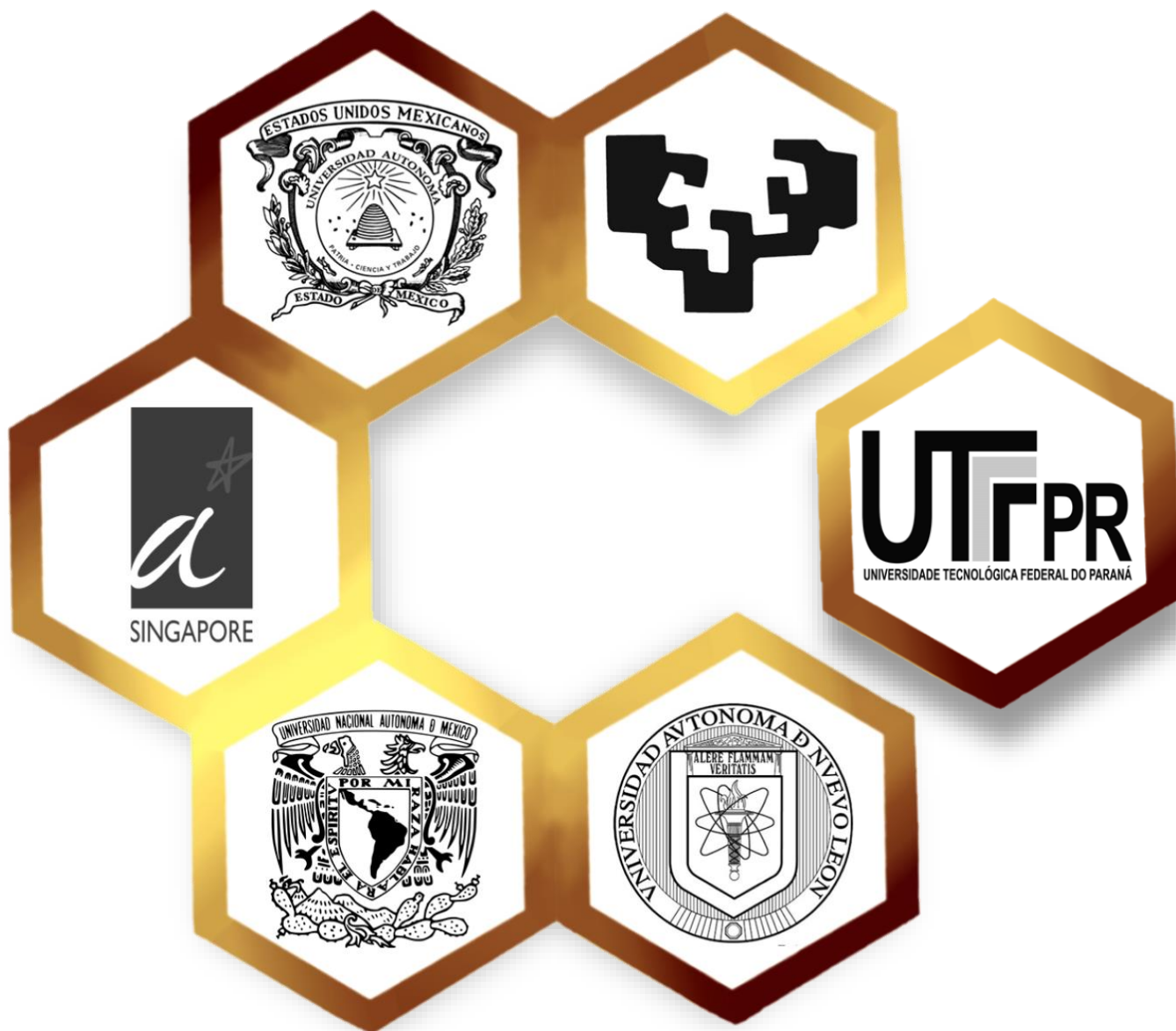
Sus campos de especialidad son en Química, la Cinética y la Catálisis; en Ingeniería Química, la Refinación del Petróleo y la Petroquímica y en Física, la Fisicoquímica de Superficies. Actualmente, está incursionando en el área de Nanotecnología.

Fue miembro fundador de la Academia Mexicana de Catálisis y es miembro regular de la Academia Mexicana de Ciencias, de la North American Catalysis Society, de la American Chemical Society. Actualmente es Secretario de la International Association of Catalysis Societies (IACS).

Es investigador nacional nivel 3 del Sistema Nacional de investigadores desde 1990 y Nivel D del PRIDE-UNAM. Ha sido reconocido con el Premio Estatal de Ciencia y Tecnología del estado de Baja California y con el premio de Investigador Senior de la Federación Iberoamericana de Catálisis.



UASLP
Universidad Autónoma
de San Luis Potosí



PLÁTICAS INVITADAS

Plática invitada

Guillermo Penche

España

Departamento de Ingeniería Química,

UPV/EHU, País Vasco

Sesión 1, lunes 8 de noviembre, 11:20 h

Porous hexacyanoferrate(II) complexes as catalysts for ringopening copolymerization of CO₂ and propylene oxide.



Nacido en 1994 en Basurto (Bilbao). Titulado en Ingeniería Química (2017) por la Universidad del País Vasco (UPV/EHU), obtuvo el Máster en Ingeniería Química impartido de manera conjunta por la Universidad del País Vasco y la Universidad de Cantabria (UC) en el año 2018.

Desde enero de 2019 forma parte del grupo de investigación TQSA (Tecnologías Químicas para la Sostenibilidad Ambiental), perteneciente al departamento de Ingeniería Química de la UPV/EHU, en calidad de investigador pre-doctoral. Su línea de investigación está dedicada al desarrollo de catalizadores tanto homogéneos como heterogéneos para la utilización de CO₂ en la fabricación de polímeros de alto valor añadido. Esta línea nace del contacto entre el grupo de Investigación y la empresa Reliance Petroleum, (www.reliancepetroleum.com) del Grupo Reliance Industries Limited, uno de los mayores complejos petroquímicos del mundo, en Mumbai, India.

Plática invitada



Dora A Solís Casados

México

Facultad de Química,
Universidad Autónoma del Estado de México.

Sesión 1, lunes 8 de noviembre, 15:20 h

**(Eu, Pd, Fe, Bi) modified-TiO₂ photocatalysts
sunlight-driven and their catalytic activity using
scavenger molecules.**

La Dra. Dora Alicia Solís Casados es investigadora del Centro Conjunto de Investigación en Química Sustentable UAEM-UNAM, de la Facultad de Química en la Universidad Autónoma del Estado de México. Siendo uno de sus principales logros la contribución a la generación de conocimiento en las áreas de Ciencia de Materiales y en Catálisis, manteniendo en mente el desarrollo sustentable de nuestra sociedad. Contribuye al entendimiento y mejora de materiales catalíticos con énfasis ambiental, enfocados a procesos como los de oxidación avanzada, para la eliminación de compuestos orgánicos en aguas residuales y a procesos de eliminación de azufre en algunas fracciones del petróleo como la hidrosulfuración selectiva de gasolinas y gasóleos. Miembro del Sistema Nacional de Investigadores SNI 2. Recibió el Premio Estatal de Ciencia y Tecnología 2018 por el Consejo Mexiquense de Ciencia y Tecnología. Ha participado en el Consejo Directivo de la Academia de Catálisis A.C., como secretaria durante los periodos 2015-2017 y 2017-2019 y vicepresidente en el periodo 2020-2021. Sus artículos de investigación (alrededor de 73) han sido publicados en revistas científicas. Ha formado recursos humanos, 6 doctores, 7 maestros y 6 licenciados en Ingeniería Química, Química, Nanotecnología y Ciencia de Materiales.

Plática invitada

Juan Manuel Arce-Ramos

Singapur

Agency for Science, Technology and Research.

Sesión 2, lunes 8 de noviembre, 10:10 h.

Modeling the restructuring of palladium nanoparticles during CO oxidation: a multiscale approach.



Juan Manuel Arce-Ramos es graduado del Doctorado en Ciencias en Ingeniería Química de la Universidad Autónoma de San Luis Potosí. Durante este periodo realizó estudios de caracterización de óxidos metálicos bajo la dirección de la Dra. María Guadalupe Cárdenas Galindo. Después de su graduación en el 2015, el Dr. Arce se unió al grupo del profesor Lars Grabow en la Universidad de Houston (USA) donde realizó una estancia postdoctoral por dos años. En este grupo de investigación, el Dr. Arce empleó la teoría de los funcionales de la densidad (DFT por sus siglas en inglés) con aplicación a problemas en catálisis heterogénea. En 2018 se unió a la agencia de investigación A*STAR (Agency for Science, Technology and Research), en Singapur, como investigador en el departamento de Ciencia de Materiales y Química (Materials Science and Chemistry) donde continúa aplicando metodologías teóricas en problemas de catálisis heterogénea. Actualmente, las líneas de investigación del Dr. Arce están enfocadas a estudios de superficies metálicas para la conversión de CO a CO₂, la reducción de CO₂ a hidrocarburos o alcoholes.

Plática invitada



Gabriela Díaz Guerrero

México

Instituto de Física,

Universidad Nacional Autónoma de México

Sesión 3, martes 9 de noviembre, 11:20 h

Ceria nanoestructurada como soporte de níquel para la obtención de hidrógeno a partir de alcoholes

La Dra. Gabriela Díaz Guerrero es investigadora titular del departamento de Física Química del Instituto de Física de la UNAM y es miembro del SNI nivel 3. Realizó en México la carrera de química, en la hoy Benemérita Universidad Autónoma de Puebla (BUAP) y la maestría en química en la Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa (UAM-I). Obtuvo el doctorado de estado por la Universidad Louis Pasteur en Estrasburgo, Francia, con mención honorífica. Su línea de investigación principal es el estudio de catalizadores soportados para la producción y purificación de hidrógeno y la eliminación de gases con efecto invernadero. Pone énfasis en estudiar los efectos de la nanoestructura del soporte (principalmente CeO_2), de la composición de la fase activa (usando metales de transición como Ni, Cu Co y su combinación con metales nobles como Pt y Pd) y de su dispersión, en las propiedades catalíticas del sistema. Ha publicado cerca de 90 artículos en revistas indizadas de prestigio y 46 artículos en revistas nacionales, de divulgación y memorias in-extenso. Es co-autora de un libro de la serie La Ciencia Para Todos del Fondo de Cultura Económica y de cuatro capítulos en libros. Ha dirigido 35 tesis de licenciatura, maestría y doctorado y ha impartido cursos a nivel licenciatura y posgrado. Fue miembro fundador de la Academia de Catálisis A.C (ACAT) en 1988, fue tesorera y presidente, en el periodo 1995- 1999. Ha participado activamente en la organización y comités científicos de eventos académicos de prestigio nacional e internacional. Recibió el Reconocimiento Sor Juana Inés de la Cruz a la Trayectoria por la UNAM en 2010. Es miembro de la ACAT, de la American Chemical Society (ACS), de North American Catalysis Society y de la Academia Mexicana de Ciencias (AMC).

Plática invitada

Javier Rivera de la Rosa

México

Universidad Autónoma de Nuevo León.

Sesión 4, martes 9 de noviembre, 10:10 h.

Síntesis verde del catalizador Pd-Fe soportado sobre $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ mediante el uso del extracto de gobernadora (*larrea tridentate*) para la hidrogenación de 2-metilfurano a productos de biorrefinerías,



El Dr. Javier Rivera de la Rosa es profesor de tiempo completo de la Facultad de Ciencias Químicas de la Universidad Autónoma de Nuevo León (UANL). Es Ingeniero Químico y Maestro en Ciencias en Ingeniería Mecánica por la UANL y Doctor en Ciencias en Ingeniería Química por el Politécnico di Torino, Italia. Su trabajo en catálisis heterogénea e ingeniería de reacciones químicas se ha enfocado a aplicaciones ambientales, la fotocatalisis de moléculas derivadas de biomasa para productos de biorrefinerías y el desarrollo de catalizadores por síntesis verde usando extractos de plantas. El Dr. Rivera tiene reconocimiento del Sistema Nacional de Investigadores nivel II, tiene un índice $h=15$, más de 100 presentaciones de Congresos y 4 capítulos de Libro. Ha graduado 7 Doctores y 16 Maestros en Ciencias. Ha recibido apoyo financiero para sus proyectos de investigación de CONACYT, de la Universidad Estatal de Florida, de la UANL y del sector productivo de la Ciudad de Monterrey. Ha sido asesor de estudiantes en el proyecto del Chem-E-Car del AIChE, siendo ganadores regionales en Texas, USA en 2019 y 2020.

El Dr. Rivera ha pertenecido y colaborado con el Consejo Directivo de la ACAT desde el 2013. Ha sido Representante de la Región Norte desde 2013 y Presidente del Comité Organizador del VI Congreso Internacional y XV Congreso Mexicano de Catálisis 2017. Colaboró en la organización del XXVII Congreso Iberoamericano de Catálisis 2020 y es el representante de México ante la North American Catalysis Society desde el 2019. El Dr. Rivera es evaluador del Consejo de Acreditación de la Enseñanza de la Ingeniería, A. C. desde el 2007, evaluador del Programa para el Desarrollo Profesional Docente (PRODEP) en el 2009 y evaluador del PNPC del CONACYT desde el 2012. También ha sido arbitro de múltiples revistas científicas internacionales indizadas. El Dr. Rivera colabora con diversas Universidades y Centros de Investigación de México, Estados Unidos de América y Canadá.

Plática invitada



Giane G. Lenzi

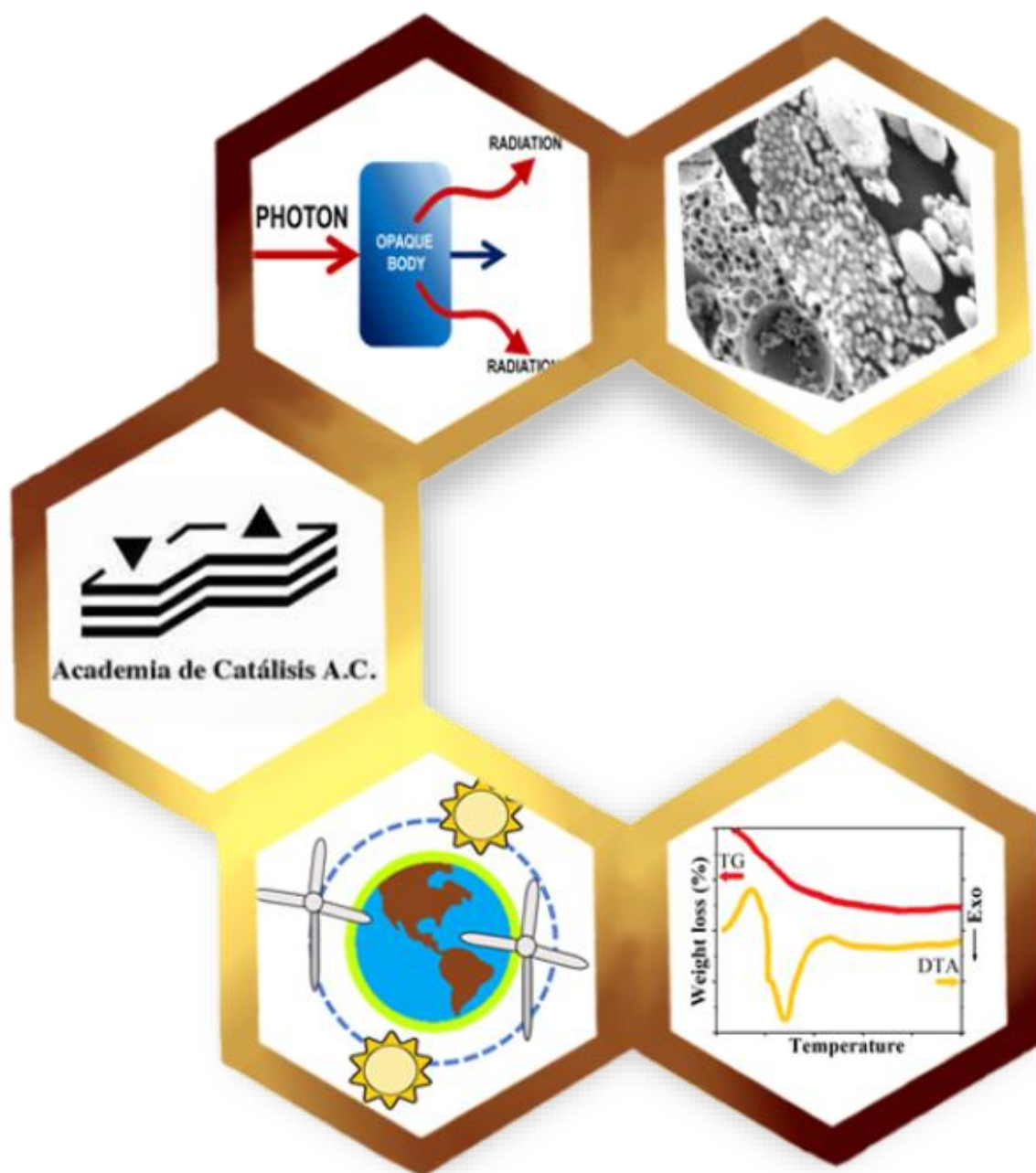
Brazil

Department of Chemical Engineering, Federal University of Technology – Paraná.

Sesión 5, miércoles 10 de noviembre, 10:10 h.

Immobilized Ag/Nb₂O₅ Catalysts: Degradation of 17 α -Ethinylestradiol in continuous process.

Giane Gonçalves Lenzi is PhD in Chemical Engineering (2008) – concentration area Chemical Processes –, Post-doctor – Politecnico di Torino (Italy). Her master's and doctoral's degrees involved both the thesis and the dissertation developed aiming at the production of hydrogen. Different catalysts were prepared, characterized and applied in dry-reforming as well as methane-steam reactions, generating publications in national and international journals. Professor in Federal University of Technology – Paraná (UTFPR) and coordinator of Post-Graduate Program in Chemical Engineering. In the industry, Prof. Lenzi worked as chemical engineer in the service provision project linked to Petrobrás/SIX, as well as coordinator to the technological development projects in partnership with the Companhia de Saneamento do Paraná SANEPAR/FUNDAÇÃO ARAUCÁRIA. Currently developing research about photocatalysis process for pollutants removal and CO₂ valorization.



CURSOS CORTOS

Cursos cortos



Empleo de la microscopía electrónica de barrido en la caracterización de catalizadores

Dr. Antonio Aragón Piña
Jueves 11 y viernes 12 de noviembre
9:00 - 11:00 y de 15:00 – 17:00



Uso de la Espectroscopía de Adsorción de Rayos X para la Caracterización de Catalizadores

Dr. Juan Carlos Fierro González
Jueves 11 y viernes 12 de noviembre
11:30 - 13:30 y 17:30 – 19:30



Energía Circular



Dra. Diana Bustos Martínez y
M.C. Héctor Reider de la Garza
Jueves 11 y viernes 12 de noviembre
9:00 - 11:00 y de 15:00 – 17:00



Análisis Termométrico Combinado de Catalizadores



Dr. Brent E. Handy y Dr. Ricardo García Alamilla
Jueves 11 y viernes 12 de noviembre
11:30 - 13:30 y 17:30 – 19:30



TRABAJOS TÉCNICOS

ÍNDICE DE TRABAJOS TECNICOS

Pláticas Invitadas

- 1 POROUS HEXACYANOFERRATE(II) COMPLEXES AS CATALYSTS FOR RING-OPENING COPOLYMERIZATION OF CO₂ AND PROPYLENE OXIDE. **69**
Guillermo Penche Hernando, María Pilar González Marcos y Juan Ramón González-Velasco.
- 2 (Eu, Pd, Fe, Bi) MODIFIED-TiO₂ PHOTOCATALYSTS SUNLIGHT-DRIVEN AND THEIR CATALYTIC ACTIVITY USING SCAVENGER MOLECULES. **70**
Dora Solis-Casados y Luis Escobar-Alarcón.
- 3 MODELING THE RESTRUCTURING OF PALLADIUM NANOPARTICLES DURING CO OXIDATION: A MULTISCALE APPROACH. **71**
Arce-Ramos, Juan Manuel y Wen-Qing Li.
- 4 CERIA NANOESTRUCTURADA COMO SOPORTE DE NÍQUEL PARA LA OBTENCIÓN DE HIDRÓGENO A PARTIR DE ALCOHOLES. **72**
Daniel G. Araiza, Antonio Gómez-Cortes, Gabriela Díaz.
- 5 SÍNTESIS VERDE DEL CATALIZADOR Pd-Fe SOPORTADO SOBRE γ -Al₂O₃ MEDIANTE EL USO DEL EXTRACTO DE GOBERNADORA (LARREA TRIDENTATE) PARA LA HIDROGENACIÓN DE 2-METILFURANO A PRODUCTOS DE BIORREFINERIAS. **73**
Diego Alexander González Casamachin, Javier Rivera de la Rosa, Carlos Javier Lucio Ortiz, Nora Elizondo Villareal, Luz Hypatia Verástegui Domínguez, Diana Bustos Martínez y Ladislao Sandoval Rangel.
- 6 IMMOBILIZED Ag/Nb₂O₅ CATALYSTS: DEGRADATION OF 17 α -ETHINYLESTRADIOL IN CONTINUOUS PROCESS. **74**
Eduardo Abreu, Michel Z. Fidelis, Rodrigo Brackmann, José L. Díaz de Tuesta, Helter T. Gomes, Onélia A. A. dos Santos y Giane G. Lenzi.

Sesión Oral I

- O-1-4 OPTIMIZATION OF THE METAL PHASE COMPOSITION OF Ir-Pd/SiO₂-Al₂O₃ CATALYSTS TO INCREASE THIO TOLERANCE IN SRO OF DECALIN. **77**
Silvana Dippolito, Santiago Rosas, Adriana Ballarini y Carlos Pieck.
- O-2-6 DRY REFORMING OF METHANE WITH Ni/Al₂O₃-MgO CATALYST: EFFECT OF MgO CONTENT. **78**
Montserrat Castro Gutiérrez, Fernando Morales Anzures, Pastora Salinas Hernández, Albina Gutiérrez Martínez, Gilberto Mondragón Galicia, Francisco Javier Tzompantzi Morales y Raúl Pérez Hernández.
- O-3-103 SÍNTESIS SOL-GEL DE ÓXIDOS MIXTOS Zr-Ti ASISTIDA POR COPOLÍMEROS TRIBLOQUE Y SU EFECTO COMO SOPORTES EN CATALIZADORES NiW PARA LA HIDRODESULFURACIÓN DEL 3-METIL-TIOFENO. **79**
Carlos Eduardo Soto Arteaga, Mario Alberto Guzmán Cruz, Sergio Fuentes Moyado y Jorge Noé Díaz de León Hernández.

O-4-12	SYNTHESIS OF ACTIVATED CARBON FROM RIO TURBIO SUB-BITUMINOUS COAL. <u>Mariano Cristaldi</u> , Misael Cordoba Arroyo, Juan Badano, Pedro de Carli, Ernesto Haggi, Mabel Bregliani y Carlos Roman Vera.	80
O-5-16	ADICIÓN DE CERIO A CATALIZADORES NiMo SOPORTADOS EN ALÚMINA Y SU APLICACIÓN EN LA HIDRODESULFURACIÓN DE DIBENZOTIOFENO. Acela López-Benítez, Gilles Berhault, José Aarón Melo-Banda, Rebeca Silva-Rodrigo y <u>Alfredo Guevara-Lara</u> .	81
O-6-20	HIDRODESOXIGENACIÓN DE FENOL CON CATALIZADORES DE Ni Y Pd SOPORTADOS EN γ -Al ₂ O ₃ . <u>Sandra Liliana Herrera Mejía</u> , José Antonio de Los Reyes Heredia, Sara Núñez Correa y Aída Luz Villa Holguín.	82
O-7-21	EFFECTO SINÉRGICO ENTRE ÓXIDOS DE Mn Y Ce PARA LACOMBUSTIÓN CATALÍTICA DE HOLLÍN. Nicolas Sacco, Juan Pablo Bortolozzi, Eduardo Miró, Viviana Milt y <u>Ezequiel Banús</u> .	83
O-8-27	QUANTITATIVE DRIFT-MS DETERMINATION OF INTERMEDIARIES AND SPECTATORS DURING CO OXIDATION ON GOLD CATALYSTS SUPPORTED ON NANO-FACETED {111} IN CeO ₂ NANOCUBES <u>Aline Villarreal Medina</u> , Susana Fernández, Miguel Tinoco, José Calvino, Xiaowei Chen y Sebastián Collins.	84
O-9-28	OBTENCIÓN DE MATERIALES CATALÍTICOS A BASE DE HIERRO A PARTIR DE LLANTAS RESIDUALES Y SU POSIBLE APLICACIÓN EN SÍNTESIS FISCHER-TROPSCH. <u>Sebastián Amar Gil</u> , Alba Nelly Ardila Arias y Rolando Barrera Zapata.	85
O-10-30	REFORMADO CATALÍTICO DE ALQUITRANES MODELOS DERIVADOS DE LA GASIFICACIÓN DE RESIDUOS AGROFORESTALES. <u>Lina García</u> , Misael Córdoba, Liza Dosso, Carlos Román Vera, Mariana Busto y Juan Badano.	86
O-11-43	ESTUDIO DE CATALIZADORES BIMETÁLICOS Pd-Ni EN LA PURIFICACIÓN OLEFÍNICA Y ADSORCIÓN DRIFT IN-SITU. <u>Misael Córdoba</u> , Lina García, Luciana Bovier, Juan Badano, Carolina Betti, Mónica Quiroga y Cecilia Lederhos.	87
O-12-44	CATALIZADORES BIMETÁLICOS BASADOS EN Ni-Co PARA LA OBTENCIÓN DE HIDRÓGENO VÍA REFORMADO DE ETANOL. <u>Leticia del Carmen Romero Castro</u> , Manuel Gómez y Mariana Noelia Barroso.	88
O-13-59	EFFECTO PROMOTOR DEL Fe EN CATALIZADORES A BASE DE ÓXIDOS DE W PARA LA ODS. Manuel Alejandro Taboada Ortega, Marco Antonio Álvarez Amparán y <u>Luis Cedeño Caero</u> .	89
O-14-62	SÍNTESIS EN UN SÓLO PASO DE CATALIZADORES ÁCIDOS Sn-KIT-6. EFFECTO DE LA RELACIÓN Si/Sn EN LA VALORIZACIÓN DE GLUCOSA. <u>Rosalía Cortés Cerón</u> , Horacio González, Aída Gutiérrez Alejandre, Edgar Tututi Ríos, José Luis Rico, Alejandra Vargas Tah y Dora Solís-Casados.	90

Sesión Oral 2

O-15-17	THIOPHENE-BASED OLIGOMERS FORMED in-situ – A NOVEL SENSITIZER OF TiO ₂ /HY HYBRID MATERIAL. Alejandro Suárez-Méndez, Julio C. López-Curiel, Gustavo A. Fuentes, Benito Serrano-Rosales, Epifanio Morales-Zárate y <u>Víctor M. Rivera</u> .	93
O-16-22	NOVEL HYDROTHERMAL-ASSISTED MICROWAVE SYNTHESIS OF NiTiO ₃ /ZnO AND SONOPHOTOCATALYTIC EFFECT FOR DEGRADATION OF RHODAMINE B. <u>A. Sebastián Galindo Luna</u> , Ma. Elvira Zarazúa Morín, V. Jesús Gallegos Sánchez, B. Berenice Zermeño Reséndiz y Leticia M. Torres Martínez.	94
O-17-24	AN EFFECTIVE PHOTOCATALYTIC SYSTEM TO ELIMINATE CARBAMAZEPINE FROM WASTEWATER. <u>María Verónica Gerbaldo</u> , Verónica Rita Elías, Silvia Nazaret Mendieta y Mónica Elsie Crivello.	95
O-18-26	PHOTOCATALYTIC WATER SPLITTING AND CARBON DIOXIDE REDUCTION OVER Na ₂ Ti ₃ O ₇ DEPOSITED WITH M _x O _y (M = Co AND Cu) CO-CATALYSTS. <u>Luis Felipe Garay Rodríguez</u> , Leticia M. Torres-Martínez y Isaías Juárez Ramírez.	96
O-19-32	PHOTOCATALYTIC DEGRADATION OF HIGH CONCENTRATION AQUEOUS SOLUTIONS OF KETOPROFEN: ADSORPTION AND REACTION KINETIC STUDIES. Ilse Larissa Acosta, Edgar Moctezuma, Karla López de la O, Elisa Leyva y <u>Brenda Berenice Zermeño Reséndiz</u> .	97
O-20-36	FOTORREDUCCIÓN DE 4-NITROFENOL EMPLEANDO NANOVARILLAS DE TiO ₂ Y Ni-TiO ₂ Ariana Lizbeth Jiménez Rodríguez, Dora María Frías Márquez, Patricia Quintana, Rosendo López González, Orbelín de la Fuente, Cinthia García, Ruth Lezama, David Salvador García Zaleta y <u>Mayra Alvarez</u> .	98
O-21-51	DEGRADACIÓN FOTOCATALÍTICA DEL 2,4,6-TRICLOROFENOL UTILIZANDO HIDROTALCITAS HT-CoFe ACTIVADAS. Esthela Ramos-Ramírez, <u>Norma Leticia Gutiérrez Ortega</u> , Francisco Javier Tzompantzi Morales, Julio Cesar Castillo Rodríguez, Gloria del Angel, Israel Rangel Vazquez, Mirella Gutiérrez Arzaluz y Raúl Pérez Hernández.	99
O-22-114	FOTO-ELECTRO REDUCCIÓN DE OXÍGENO UTILIZANDO γ -C ₃ N ₄ DECORADO CON NANO-ISLAS DE Pt, Ru o Pd. <u>Caudillo-Flores Uriel</u> , Alonso-Nuñez Gabriel, Sigüenza Orozco Adriana y Fuentes-Moyado Sergio.	100
O-23-128	SUPPORT EFFECT IN BIMETALLIC PARTICLES PtNi FOR HYDROGEN OXIDATION REACTION IN ALKALINE MEDIA. <u>Carolina Silva-Carrillo</u> , Edgar A. Reynoso-Soto, Sergio Pérez-Sicairos, Moisés I. Salazar-Gastelum, Balter Trujillo-Navarrete y Rosa M. Felix-Navarro.	101
O-24-130	ELECTROCHEMICAL DETERMINATION OF GLUCOSE USING NITROGEN GRAPHENE. Edgar Alonsos Reynoso Soto, Rosa María Félix Navarro, Yorely Yazmin Rivera Lugo, Alondra Lozano García y <u>Carolina Silva Carrillo</u> .	102

O-25-3	SELECTIVE HYDROGENATION OF FAME TO FATTY ALCOHOLS ON Ru-Sn-B/Al ₂ O ₃ CATALYSTS. María Amparo Sánchez, María Ana Vicerich, Cristhian Fonseca Benítez, Francisco Javier Passamonti, Vanina Mazzieri y <u>Carlos Luis Pieck</u> .	103
O-26-29	SIMULATION OF FIBROUS CATALYSTS APPLIED TO CO ₂ METHANATION: ENHANCEMENT OF MASS AND HEAT TRANSPORT. Agustina Sánchez, Viviana Milt y <u>Eduardo Miró</u> .	104
O-27-65	THEORETICAL STUDY ON THE BRØNSTED ACIDITY EFFECT IN Al DOPED SBA-15 IN METHANOL DEHYDRATION. <u>Paulina Rocha Sánchez</u> y María Guadalupe Cárdenas-Galindo.	105
O-28-139	MODELOS BASADOS EN REDES NEURONALES ARTIFICIALES PARA LA DEGRADACIÓN DE CONTAMINANTES EMERGENTES: DESARROLLO Y VALIDACIÓN. <u>Dolores María Eugenia Álvarez</u> , Mario Roberto Modesti, María Verónica Gerbaldo, Silvia Nazareth Mendieta y Mónica Elsie Crivello.	106

Sesión Oral 3

O-29-63	SÍNTESIS VERDE DE NANOESTRUCTURAS DE TiO ₂ PARA LA PRODUCCIÓN DE FURFURAL DESDE LA FOTOHIDROLISIS DEL NEJAYOTE. Martha-Isabel González-Domínguez, Francisco-Javier Reynoso-Marín, Brenda Acosta-Ruelas, Elena Smolentseva, Apolo Nambo y <u>Janneth López-Mercado</u> .	109
O-30-77	Pt-Fe/CNT DEALLOYING BY THE ACTIVATION CYCLE PROCESS AS A CATHODIC CATALYST IN A PEM FUEL CELL. López Rosas Deisly Mildred, Félix Navarro Rosa María, Silva Carrillo Carolina, Flores Hernández José Roberto, Albarrán Sánchez I.L., Romero Castañón Tatiana y <u>Reynoso Edgar</u> .	110
O-31-54	STUDY OF NiMo CATALYSTS SUPPORTED ON HIERARCHICAL LAMELLAR SiO ₂ PILLARED MOR ZEOLITE FOR DIBENZOTHIOPHENE DESULPHURIZATION. <u>Rosario I. Yocupicio-Gaxiola</u> , Rene Obeso-Estrella, Fabián N. Murrieta-Rico, J. N. Díaz de León, Joel Antúnez-García, T. A. Zepeda, Sergio Fuentes Moyado, Vitalii Petranovskii.	111
O-32-80	N-COMPOUNDS REMOVAL FROM MIDDLE DISTILLATES BY MIL-101(Cr). IMPACT ON ULSD PRODUCTION. E. Meneses-Ruiz, <u>José Escobar</u> , R. J. Mora, J. A. Montoya, M. C. Barrera, D. Solís-Casados, L. Escobar-Alarcón, P. del Ángel y G. Laredo.	112
O-33-82	PERFORMANCE OF NATURAL CU-CHABAZITE DURING SELECTIVE CATALYTIC REDUCTION OF NO WITH NH ₃ UNDER OXIDIZING CONDITIONS. EFFECT OF H ₂ O VAPOR AND METAL CONTENT. <u>Julio C. López Curiel</u> , María Eugenia Hernández Terán y Gustavo A. Fuentes.	113
O-34-85	STRUCTURAL EFFECT OF SMALL PORE ZEOLITES UPON THE ACTIVITY OF Cu/SSZ-39 AND Cu/SSZ-13 DURING THE SCR-NOX WITH NH ₃ . <u>Gabriela Itzel Hernández-Salgado</u> , Julio López Curiel y Gustavo A. Fuentes.	114

O-35-88	EFFECTO DE LA MORFOLOGÍA DEL SOPORTE CERIA EN LAS PROPIEDADES CATALÍTICAS DE COBRE Y PLATINO PARA LA DESCOMPOSICIÓN DE METANOL. <u>Luis López-Rodríguez</u> , Daniel G. Araiza, Antonio Gómez-Cortés y Gabriela Díaz.	115
O-36-89	CoMoS ₂ CATALYSTS SUPPORTED ON AlHMS AND Al-SBA-16: INFLUENCE OF DOPING METHOD AND SUPPORT MORPHOLOGY ON THE CATALYST DEACTIVATION IN HDS OF DBT. <u>Rafael Huirache Acuña</u> , Rufino Navarro y Barbara Pawelec.	116
O-37-95	EFFECTO DE LA ADICION DE Fe EN LA ACTIVIDAD HIDRODESOXIGENANTE DE OXIDO MIXTO Ni-Al-O _x DERIVADO DE UN MATERIAL TIPO HIDROTALCITA. <u>Luis F. Vazquez</u> , Julia Aguilar Pliego, José A. Toledo Antonio y Jaime Sánchez Valente.	117
O-38-7	Pt-Pd SUPPORTED ON ZnO RODS CATALYSTS FOR HYDROGEN PRODUCTION: THEORETICAL AND EXPERIMENTAL STUDY ON METHANOL STEAM REFORMING. Melissa Toledo Toledo, Gilberto Modragón-Galicia, Fernando Morales-Anzures, Pastora Salinas-Hernández, Albina Gutiérrez-Martínez, Ma. Eufemia Fernández García, Jorge Reyna Alvarado, Oscar A. López-Galán, Manuel Ramos y <u>Raúl Pérez Hernández</u> .	118
O-39-107	BIOCHAR-SUPPORTED BIMETALLIC CATALYSTS FOR THE CONVERSION OF FURFURAL VIA CATALYTIC TRANSFER HYDROGENATION. <u>Ladislao Sandoval-Rangel</u> , Gloria Lourdes Dimas Rivera, Daniela Xulú Martínez-Vargas, Javier Rivera De La Rosa, Carlos Lucio, David A. de Haro-del Río, Alberto Mendoza y Alejandro Montesinos.	119
O-40-109	METHANOL DECOMPOSITION OVER COBALT-CERIA CATALYSTS: EFFECT OF THE SYNTHESIS METHOD IN THE LONG-TERM STABILITY. <u>Daniel G. Araiza</u> , Antonio Gómez-Cortés, Hugo A. Lara-García y Gabriela Díaz.	120

Sesión Oral 4

O-41-40	ESTUDIO DE CATALIZADORES NiPW/TiO ₂ -Al ₂ O ₃ EN LA OBTENCIÓN DE BIOCOMBUSTIBLES POR HIDROCONVERSIÓN CATALÍTICA DE ACEITE DE VEGETAL. <u>Ricardo Guasco</u> , Alfredo Guevara Lara, José Antonio Rodríguez Ávila, Antonio Rafael Tapia Benavides, Acela López Benítez y Gilles Berhault.	123
O-42-104	HIDRODESOXIGENACIÓN DE ANISOL SOBRE CATALIZADORES BASE Ni: EFECTO DEL SOPORTE Y Ru COMO PROMOTOR. <u>Reyna Ríos Escobedo</u> , Edgar Ortiz Santos, José Antonio Colín Luna, José Escobar y José Antonio de Los Reyes.	124
O-43-23	INCORPORACIÓN DE CATIONES LANTANO EN ZEOLITA BETA PARA LA ALQUILACIÓN DE ISOBUTANO CON BUTENOS. Lucas Gabriel Tonutti, Maira Maquirriain, Carlos Querini y <u>Bruno Dalla Costa</u> .	125

O-44-53	EVALUATION OF THE IMPACT OF SYNTHESIS METHOD OF VO _x /CeO ₂ /SiO ₂ CATALYSTS ON RED-OX PROPERTIES, ACID SITES AND CATALYTIC ACTIVITY ON THE OXIDATIVE DEHYDROGENATION OF n-BUTANE AND PROPANE. José Luis Sánchez-García, Brent E. Handy, Ángel Gabriel Rodríguez, Marco Martín González Chávez, Roberto García de León y <u>María Guadalupe Cárdenas Galindo</u> .	126
O-45-75	ESTUDIO TEÓRICO EXPERIMENTAL DE LOS SITIOS ACTIVOS EN CIRCONIA TUNGSTATADA. <u>Martha Leticia Hernández Pichardo</u> , Karina Madrigal-Carrillo, Jorge Vera-Iturriaga, Juan Ignacio Rodríguez-Hernández, Elisa Jiménez-Izal y Ascensión Montoya.	127
O-46-113	ACTIVACIÓN Y TRANSPORTE DE HIDRÓGENO DURANTE LA METANACIÓN DE CO ₂ CATALIZADA POR Ni/ZrO ₂ y Rh/ZrO ₂ . Agustín Camacho-Medrano, <u>María Lara-Pérez</u> , Jorge Cornejo-Romero, Jessica Chávez-García, Alfredo Solís-García, Trino Zepeda, Armando Almendarez-Camarillo y Juan Fierro-González.	128
O-47-115	NANOPARTÍCULAS BIMETÁLICAS Au-Ag EFECTIVAS EN LA REDUCCIÓN CATALÍTICA DE NITROFENOLES. <u>Carlos Eduardo Niño González</u> , Andrey Simakov y Brenda Jeanneth Acosta Ruelas.	129
O-48-120	OXIDACIÓN DE TRANS-2-HEXEN-1-OL EMPLEANDO ARCILLAS PILAREADAS Ti-PILC y V/Ti-PILC. <u>Belén Melisa Viola</u> , Ema Virginia Sabre, Analía Laura Cánepa y Sandra Graciela Casuscelli.	130
O-49-124	A NEW INSIGHT OVER OSC, SMSI, AND DISPERSION EFFECTS ON VOC OXIDATION USING Pt/Al ₂ O ₃ -CeO ₂ CATALYSTS <u>Hugo Pérez-Pastenes</u> y Tomás Viveros-García.	131
O-50-134	ESTUDIO DE LA REVERSIBILIDAD DEL EFECTO DEL H ₂ EN LA REDUCCIÓN CATALÍTICA SELECTIVA DE NO CONPROPANO SOBRE UN CATALIZADOR DE AG PARA SISTEMAS DE CONTROL DE LAS EMISIONES DE MOTORES DIÉSEL. <u>María Eugenia Hernández Terán</u> , Julio C. López Curiel, Gabriela Itzel Hernández-Salgado y Gustavo A. Fuentes.	132

Sesión Oral 5

O-51-119	EFEECTO DE LA ADICIÓN DE Pt EN CATALIZADORES DE γ -Al ₂ O ₃ -TiO ₂ EN LA FOTODEGRADACIÓN DEL ÁCIDO 2,4-D <u>Claudia Gómez</u> , Gloria Alicia del Ángel, Araceli Jacobo Azuara, Francisco Javier Tzompantzi, Esmeralda Vidal Robles y Beatriz Ruíz Camacho.	135
O-52-105	OBTENCIÓN DE BIOCOMBUSTIBLE VALÉRICO TIPO DIESEL A PARTIR DE γ -VALEROLACTONA USANDO CATALIZADORES BIFUNCIONALES. Karla G. Martínez Figueredo, Emanuel M. Virgilio, Darío J. Segobia, <u>Nicolás M. Bertero</u> .	136

Sesión de Posters 1

P-1-9	DISEÑO, SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE SÍLICAS MESOPOROSAS NANOESTRUCTURADAS A PARTIR DE MOLDEANTES RENOVABLES PARA SU APLICACIÓN EN LA DEGRADACIÓN DE GLIFOSATO. <u>Eliana Vaschetto</u> , Gabriel Ferrero, Germán Carrillo, Joaquín Pérez-Pariente y Griselda Eimer.	139
P-2-15	PREPARACIÓN Y CARACTERIZACIÓN DE MICROESFERAS DE γ -Al ₂ O ₃ MEDIANTE LA TÉCNICA DE SECADO POR ASPERSIÓN USANDO DOS ATOMIZADORES. <u>Arturo Pallares-García</u> , José L. Contreras-Larios, Beatriz Zeifert y Tamara Vázquez-Rodríguez.	140
P-3-33	SÍNTESIS HIDROTHERMAL Y CARACTERIZACIÓN DE ÓXIDOS MIXTOS DE ALUMINIO Y GALIO. Luis Gerardo Reyes Sánchez, Joel Antúnez García, Sergio Fuentes Moyado y Jorge Noé Díaz de León Hernández.	141
P-6-46	CATALIZADORES TIPO POLIOXOMETALATOS PARA DESULFURACIÓN OXIDATIVA. <u>Vanessa Martínez-Cornejo</u> , José Alfredo García López y Luis Cedeño Caero.	142
P-7-48	ESTUDIO COMPARATIVO DE ARCILLAS PILAREADAS IMPREGNADAS CON V vs Cu EN LA OXIDACIÓN DEL ALCOHOL BENCÍLICO. Ema Virginia Sabre, Belén Melisa Viola, Elías Origlia, Sandra Graciela Casuscelli y Analía Laura Cánepa.	143
P-10-58	UNRAVELING THE STRUCTURAL BEHAVIOR OF SODIUM TITANATE NANOTUBES AND HYDROGEN TITANATE NANOTUBES UNDER DIFFERENT ATMOSPHERES: A STUDY BY IN SITU RAMAN SPECTROSCOPY. <u>Iván Alonso Santos López</u> , Brent E. Handy, José Luis Sánchez García y Ángel G. Rodríguez.	144
P-12-61	EFFECTO DEL CONTENIDO DE Cu EN LA VELOCIDAD DE LA REDUCCIÓN DE NITROAROMÁTICOS SOBRE CATALIZADORES BIMETÁLICOS Ni-Cu. Victoria Avalos Ballester, Brenda Jeanneth Acosta Ruelas y Elena Smolentseva.	145
P-13-66	SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE MATERIALES BIMETÁLICOS DE Cu-Pd/TiO ₂ PARA LA DEGRADACIÓN FOTOCATALÍTICA DE DICLOFENACO E IBUPROFENO. <u>Alba Nelly Ardila Arias</u> , Juliana Reyes Calle y Erasmo Arriola Villaseñor.	146
P-14-67	CATALIZADORES SÓLIDOS ÁCIDOS Sn-TMA-MOF Y Sn-TMA-MOF-SO ₃ H. SÍNTESIS, CARACTERIZACIÓN Y ACTIVIDAD CATALÍTICA EN LA ESTERIFICACIÓN DE ÁCIDO OLEICO. <u>Juan Pablo Chávez León</u> , Horacio González, Denis Aidee Cabrera Munguía, Edgar Tututi Ríos y José Luis Rico.	147
P-15-69	ONE-POT SYNTHESIS OF PdRu@SiO ₂ CORE-SHELL NANOREACTORS HIGHLY EFFECTIVE IN THE REDUCTION OF 4-NITROPHENOL TO 4-AMINOPHENOL. <u>Eduardo Arenas</u> , Elena Smolentseva, Andrey Simakov y Brenda Acosta.	148

P-16-70	SÍNTESIS HIDROTÉRMICA, CARACTERIZACIÓN Y ACTIVIDAD CATALÍTICA DE MATERIALES KIT-6 FUNCIONALIZADOS CON GRUPOS SULFÓNICOS. <u>José Alejandro Alcauter Arreola</u> , Edgar Tututi Ríos, Horacio Gonzales Rodríguez, Denis Aidee Cabrera-Munguía y José Luis Rico Cerda.	149
P-17-71	SÍNTESIS DE NANOTUBOS DE CARBONO A PARTIR DE MOFs PARA EL ALMACENAMIENTO DE HIDRÓGENO. <u>José Manuel Jurado Flores</u> , Elizabeth García Rojas, Ana Marisela Maubet Franco, Mónica Calatayud Antonino, Naomi Nayeli González Hernández y José Luis Contreras Larios.	150
P-18-72	REDUCCIÓN DE NO USANDO CATALIZADORES DE Ag-Pt/Al ₂ O ₃ -WO _x SOPORTADOS SOBRE MONOLITOS DE CORDIERITA EN LA REDUCCIÓN CATALÍTICA SELECTIVA CON PROPANO. <u>Naomi González Hernández</u> , José L. Contreras Larios, Gustavo A. Fuentes Zurita, Beatriz Zeifert, Tamara Vazquez y Manuel Jurado Flores.	151
P-19-73	EFFECTO DE MODIFICACIONES TANDEM SOBRE LAS PROPIEDADES QUÍMICAS Y TEXTURALES DE LA CLINOPTILOLITA MEXICANA PARA USARSE EN PIRÓLISIS CATALÍTICA DE UNA MACROALGA MARINA. <u>Francisco Sanabria Pérez</u> , Carolina Solís Maldonado, María Rebeca Rojas Ronquillo, Rodrigo Cuervo González, Ladislao Sandoval-Rangel, Lucía Atehortúa, Gloria Lourdes Dimas-Rivera y Javier Rivera de la Rosa.	152
P-21-76	MICRO Y NANO ÓXIDOS MIXTOS DE ALUMINIO E ITRIO CON POTENCIAL APLICACIÓN COMO SOPORTES CATALÍTICOS. <u>Elvira Marina Mendoza Núñez</u> , Alfredo Solís García, Sergio Fuentes Moyado y Jorge Noé Díaz de León Hernández.	153
P-22-78	EFFECTO DE Fe SOBRE CATALIZADORES BASE Ni/Al ₂ O ₃ PARA LA DESHIDROGENACIÓN OXIDATIVA DE ETANO A ETILENO ASISTIDA POR CO ₂ . Félix Cancino Trejo, Víctor Florencio Santes Hernández, Yadira Maldonado, Armando López Miranda, Marisol Gallardo, Omar Valdés, José Antonio de los Reyes y Carlos Eduardo Santolalla Vargas.	154
P-23-68	CICLOCARBONILACIÓN REGIOSELECTIVA DE 3-ALIL-4- (FENILAMINO) CUMARINAS CATALIZADA POR PALADIO. Karla Vianey Almaraz Macuil y Manuel Amézquita-Valencia.	155
P-24-81	CATALIZADOR DE Ru-VINILIDENO [RuCl ₂ (=C=CH(p-C ₆ H ₄ CF ₃))(PCy ₃) ₂] EN LA METÁTESIS VERDE. <u>Araceli Martínez Ponce</u> , Joel Vargas Ortega y Arlette Arizbe Santiago de la Cruz.	156
P-25-101	TRATAMIENTO HIDROTÉRMICO ÁCIDO DE SUSTANCIAS PÉCTICAS Y FORMACIÓN DE FURFURAL. <u>Eva Estela Rivera Cedillo</u> , María-Guadalupe Cárdenas-Galindo, Brent E. Handy y Omar González Ortega.	157
P-26-8	EVALUACIÓN DE CATALIZADORES DE METALES ALCALINOS SOPORTADOS EN CaO PARA TRANSESTERIFICACIÓN DE TRIBUTIRINA, TRIESTEARINA Y TRIOLEÍNA. <u>David Geovani Olvera Mendoza</u> , José Antonio Rodríguez Ávila y Jesús Andrés Tavizón Pozos.	158
P-27-10	HETEROGENEOUS ENZYMIC CATALYSTS: COMPARING THEIR EFFICIENCY IN THE PRODUCTION OF BIODIESEL FROM ALTERNATIVE OILS. Gabriel Ferrero, Eliana Vaschetto, Edgar Sánchez Faba, Fabrizio Viale, Germán Carrillo y Griselda Eimer.	159

P-28-38	EFFECT OF SOLVENT ON CARBOHYDRATE CONVERSION TO α -HYDROXY ACIDS USING Sn-BETA AS CATALYST. <u>Isabel Hortal-Sánchez</u> y Nelson Cardona-Martinez.	160
P-29-41	REVALORIZATION OF COVID-19 DISPOSABLE FACE MASKS USING IN-SITU CATALYTIC PYROLYSIS. <u>Ivana Gabriela Esquivel López</u> , Ana Lucía Vélez-Barceló, Gloria Lourdes Dimas Rivera, Carolina Solís Maldonado, Eileen Carrillo Pedraza, Alejandro Montesinos y Ladislao Sandoval-Rangel.	161
P-30-56	EVALUACIÓN DE LA BIODEGRADACIÓN DE NAFTALENO PRESENTE EN LIGHT CYCLE OIL. Paulino Betancourt, Laynet Puentes y <u>Francis Gómez</u> .	162
P-32-136	REMOCIÓN DE NARANJA DE METILO Y AZUL DE METILENO USANDO COMO BIOADSORBENTE EICHHORNIA CRASSIPES (LIRIO ACUÁTICO) EXTRAÍDO DEL LAGO DE YURIRIA, GUANAJUATO . <u>Carlos David Hernández Origel</u> , Eunice López Ahumada, Laura Patiño Saldivar, Alba Ardila, Mercedes Salazar Hernández y José Hernández.	163
P-35-11	SYNERGISTIC EFFECT OF CO-DOPING OF FE AND ZN ON TiO ₂ SUPPORTS IN THE PREPARATION OF CATALYSTS FOR PHOTODISCOLORATION REACTIONS OF FOOD EFFLUENTS. Luiz Eduardo Castro, Larissa Matheus y <u>Leda Maria Colpini</u> .	164
P-37-18	ZnO AND ZnO-NANORODS THIN FILMS AS SUPPORTED CATALYSTS FOR ENHANCED DEGRADATION OF METHYLENE BLUE. Claudia Valero Luna, María Alfaro Cruz, Alan Bañuelos Frías y Gerardo Ortega Zarzosa.	165
P-38-19	HIGH PHOTOACTIVITY OF Zr _x O _y -Bi ₂ O ₃ (CO ₃) COMPOSITES PREPARED BY ONE-STEP SYNTHESIS FOR EFFICIENT DEGRADATION OF 4-CHLOROPHENOL UNDER UV LIGHT. Francisco Javier Tzompantzi Morales, Julio Cesar Castillo Rodríguez, Clara Tzompantzi Flores, José Ricardo Gómez Romero, Carlos Eduardo Santolalla Vargas, Mayra Angélica Álvarez Lemus, Esthela Ramos Ramírez y Mónica Esperanza Velásquez Torres.	166
P-39-35	DEGRADACIÓN FOTOCATALÍTICA DE AZUL DE METILENO USANDO PELÍCULAS DELGADAS CON NANOVARILLAS DE ÓXIDO DE ZINC. <u>Antonia del Rocío López Gumez</u> , Adrián Cordero García, Hermicenda Pérez Vidal, Laura Lorena Díaz Flores y José Luis Cervantes López.	167
P-40-37	ZnO USED AS A PHOTOCATALYST IN THE DISCOLORATION OF DYE PRESENT IN SYNTHETIC AND INDUSTRIAL EFFLUENT. Lariana N. B. Almeida, Laura S. Ribas, Othavio H. L. Nogueira, Tatiana G. Josué, Onélia A. A. dos Santos, Maria Eduarda Kounaris Fuziki y Giane Gonçalves Lenzi.	168
P-41-47	RUTA INICIAL DE DEGRADACION DEL ACETAMINOFEN EN UN REACTOR FOTOCATALITICO ESCALONADO (RFE). Mayra García Hernández, <u>Claudia Alejandra Aguilar</u> , María Cruz Arias Mateo, Carlos Montalvo, Francisco Anguebes y Aarón Flores Gil.	169
P-42-57	SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DEL CATALIZADOR TiO ₂ – Au: ESTUDIO DE LA CINÉTICA DE REACCIÓN. <u>María Arias</u> , Claudia Aguilar y Víctor Córdova.	170

Sesión de Posters 2

P-43-64	DEGRADACIÓN FOTOCATALÍTICA DE IBUPROFENO EMPLEANDO TiO ₂ IMPREGNADO CON COBALTO. <u>Selene González-Ledesma</u> , Reyna Ríos-Escobedo, José Antonio de Los Reyes, Víctor Santes y Carlos Eduardo Santolalla-Vargas.	173
P-44-83	DEGRADACIÓN DE METOPROLOL MEDIANTE PROCESOS DE OXIDACIÓN AVANZADA EMPLEANDO CATALIZADORES DE TiO ₂ DOPADO CON METALES. <u>Osmín Avilés-García</u> , Jaime Espino-Valencia, Arisbeht Mendoza-Zepeda, Kingsley Donkor, Sharon Brewer, Rubí Romero y Reyna Natividad.	174
P-45-84	FOTODEGRADACIÓN DEL HERBICIDA DIURÓN UTILIZANDO TiO ₂ P25 IMPREGNADO CON Eu ⁺³ BAJO IRRADIACIÓN DE LUZ UV, VISIBLE Y SOLAR. <u>Maribel Enríquez Reséndiz</u> , Carolina Solís Maldonado, Raúl Alejandro Luna Sánchez, Nayeli Ortiz Silos, Francisca Sandoval Reyes, Alfredo Cristóbal Salas, Ladislao Sandoval Rangel, Gloria Lourdes Dimas-Rivera, Daniela Xulú Martínez Vargas y Norma Alicia Ramos Delgado.	175
P-46-86	SÍNTESIS Y EVALUACIÓN DE FeCl/TiO ₂ EN LA DEGRADACIÓN FOTOCATALÍTICA DE FENOL. <u>Diego Álvarez Bustos</u> , Carlos Eduardo Santolalla Vargas, José Antonio de Los Reyes Heredia, Reyna Ríos Escobedo, Víctor Florencio Santes Hernández y José Felipe Sánchez Minero.	176
P-47-87	DISEÑO Y ANÁLISIS DEL PROCESO DE DEGRADACIÓN FOTOCATALÍTICA DE ACETAMINOFÉN. José Luis Naranjo-Cristóbal, Arick Castillo-Landero, Carolina Silos-Maldonado, Nayeli Ortiz-Silos, Nadia Angélica Cruz-Vázquez, Alfredo Cristóbal-Salas y Raúl Alejandro Luna-Sánchez.	177
P-48-93	ACTIVIDAD FOTOCATALÍTICA DE TiO ₂ /ZnO, TiO ₂ /Fe ₂ O ₃ y TiO ₂ /Eu ₂ O ₃ EN LA DEGRADACIÓN DE IBUPROFENO. Lilia Eugenia Hernández-Ortiz, Roberto Chargoy-Betancourt, <u>Raúl Alejandro Luna-Sánchez</u> , Carolina Solís-Maldonado, Alfredo Cristóbal-Salas, Brenda Berenice Zermeno-Reséndiz, Daniela Xulú Martínez-Vargas y Ladislao Sandoval-Rangel.	178
P-49-97	SÍNTESIS DE CATALIZADORES MESOPOROSOS TiO ₂ -SiO ₂ CON Cu PARA LA REACCIÓN OXIDACIÓN SELECTIVA DEL GLICEROL. <u>Jorge Luis Sánchez Escobar</u> , Jaime Espino Valencia y Reyna Natividad Rangel.	179
P-52-140	DEGRADACIÓN FOTOCATALÍTICA DE p-CRESOL EMPLEANDO TiO ₂ DOPADO CON Zn ²⁺ . Mónica Esperanza Velásquez Torres, Francisco Tzompantzi Morales, Julio Cesar Castillo Rodríguez, Ricardo Gómez y Judith Cardoso Martínez.	180
P-53-14	EXTRACTION-HYDROGENATION, AN IDEA FOR REFINING TROUBLESOME FEEDSTOCKS. Enrique Tarifa, Mariana Bustoy <u>Carlos Román Vera</u> .	181
P-56-50	SYNTHESIS OF FLAVANONE BY POTASSIUM MODIFIED SODIUM TITANATE NANOTUBE CATALYSTS. <u>Iván Alonso Santos López</u> , Brent E. Handy, José Julián Cano Gómez, Michel D. Amiridis y Oleg S. Alexeev.	182

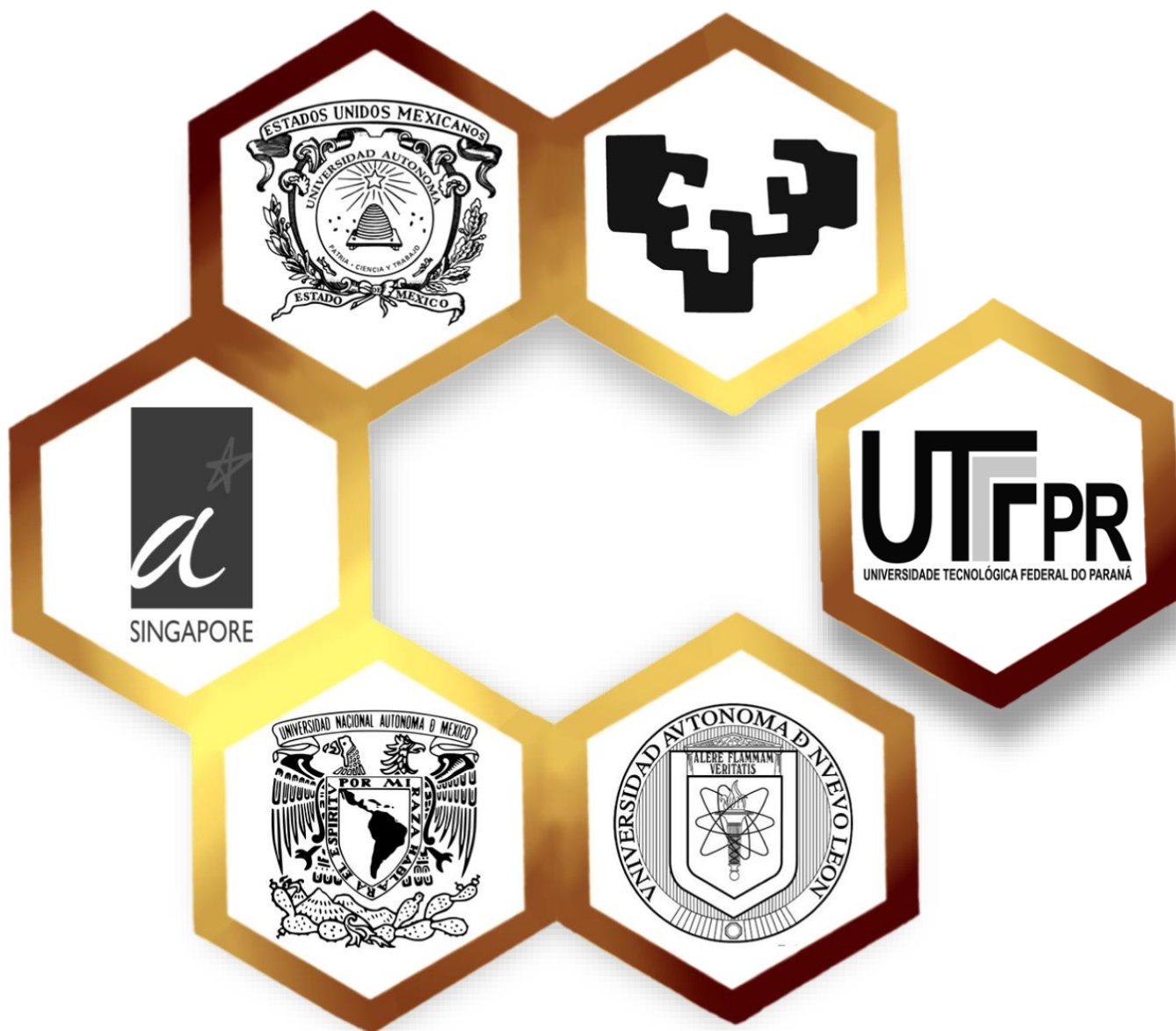
P-58-129	DESARROLLO DE UNA METODOLOGÍA EXPERIMENTAL PARA LA EVALUACIÓN DE LA DESACTIVACIÓN Y VIDA ÚTIL DE CATALIZADORES DE HIDROTRATAMIENTO DE DESTILADOS DE CRUDO EN REACTORES BATCH. <u>Francisco José Morales Leal</u> , Jorge Ancheyta Juárez, Pablo Torres-Mancera y Fernando Alonso Martínez.	183
P-59-79	EFFECTO DEL SOPORTE EN LA TRANSFORMACIÓN DE GLICEROL CON CATALIZADORES DE ÓXIDOS DE HIERRO. Francisco J. García-Delgado y <u>Nancy C. Martín Guaregua</u> .	184
P-60-90	ESTUDIO DE LA ADICIÓN DE EDTA A pH=7 EN CATALIZADORES OXIDADOS NiMo y NiW SOPORTADOS EN Zr-SBA-15 ORIENTADOS A PROCESOS DE HDS. <u>Diego Alejandro García-Ramos</u> , Rebeca Silva-Rodrigo, Amelia Olivas-Sarabia, Juan Navarrete-Bolaños, Acela López-Benítez y Alfredo Guevara-Lara.	185
P-61-91	OXIDACIÓN DE MONÓXIDO DE CARBONO EN CATALIZADORES CuPd SOPORTADOS EN CERIA NANOESTRUCTURADA. <u>Diana G. Arcos Álvaro</u> , Daniel G. Araiza, Antonio Gómez-Cortés y Gabriela Díaz.	186
P-62-92	EFFECTO DEL MÉTODO DE SÍNTESIS DE $Mn_{1-x}Ce_xO_y$ EN LA OXIDACIÓN DE TOLUENO. <u>Camila Vargas Castillo</u> , Arquímedes Cruz López, Miguel Ángel Ruiz Gómez y Santiago Iván Suarez Vazquez.	187
P-65-99	SÍNTESIS DE MATERIALES MeAPO-36 (Me=Zn, Co, Mg) Y ZEOLITAS ZSM-5 MODIFICADAS PARA LA TRANSFORMACIÓN DE METANOL A HIDROCARBUROS (MTH). Misael García Ruiz, Dora Alicia Solís Casados, Julia Aguilar Pliego, Nancy Martín Guaregua y Enrique Sastre de Andrés.	188
P-66-100	CARACTERIZACIÓN Y ACTIVIDAD CATALÍTICA DE CATALIZADORES BIMETÁLICOS SOPORTADOS SOBRE ALÚMINA Y ZEOLITA EN LA OBTENCIÓN DE PRODUCTOS DE INTERÉS COMERCIAL A PARTIR DE METANO. Carlos Javier Lucio Ortiz, Aldo Vázquez Rosales, <u>Arturo Mauricio Padilla González</u> , Javier Rivera de la Rosa, David de Haro del Río, Gerardo Flores Escamilla, Gloria Dimas Rivera, Carolina Solís Maldonado y Ladislao Sandoval Rangel.	189
P-67-102	MALACHITE GREEN DYE DEGRADATION OVER Au/TiO ₂ -NANOTUBES PHOTOCATALYST UNDER SIMULATE VISIBLE-LIGHT IRRADIATION. <u>María Guadalupe Hernández Cruz</u> , Dora Alicia Solís Casados, José Antonio Toledo Antonio, Jorge Roberto Vargas García, Miriam Estrada Flores, Carlos Ángeles Chávez, María Antonia Cortés Jácome y Cecilia Encarnación Gómez.	190
P-68-106	OBTENCIÓN DEL ADITIVO OXIGENADO "DIETIL ETER" USANDO CATALIZADORES DE $H_4SiW_{12}O_{40}/ZrO_2-SiO_2$. José Gonzalo Hernández Cortez, <u>José Eduardo Cruz Velázquez</u> y José Luis Sánchez López.	191
P-69-108	DISEÑO Y SIMULACIÓN DE UN PROCESO A PARTIR DE LA TRANSESTERIFICACIÓN DE ACEITE DE JATROPHA CURCAS POR CATÁLISIS HETEROGÉNEA. David Froylán Guerrero García, Rebeca Silva Rodrigo, Nancy Patricia Díaz Zavala y Hugo Eduardo de Alva Salazar.	192

P-70-110	GENERACION DE VACANTES DE OXIGENO EN NANOPARTICULAS DE NIQUEL PARA LA HIDRODESOXIGENACIÓN DE FENOL. Carlos León Cornelio, Perla Morales Gil, María A Cortés Jácome y <u>José A. Toledo Antonio</u> .	193
P-71-111	SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE NANOCUBOS DE NiMoW-S PARA LA HIDRODESULFURACION SELECTIVA DE AZUFRADOS EN CORTES LIGEROS Zuli Richards Figueroa, Sergio Fuentes Moyado y Jorge Noé Díaz de León Hernández.	194
P-72-116	SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE PUNTOS CUÁNTICOS DE HALURO DE PEROVSKITA CsPbBr ₃ PUROS Y DOPADOS CON EUROPIO, PARA SU APLICACIÓN POTENCIAL EN PROCESOS FOTOCATALÍTICOS. <u>Emmanuel Reyes Francis</u> , Haggeo Desirena Enríquez, Diego Esparza Salazar, Jaime Espino Valencia, Jin Z. Zhang, Juan Zárate Medina, Andrea Ceja Fernández, Cristopher Rosiles Pérez y Tzarara López Luke.	195
P-73-117	EFFECTO DE INSERCIÓN DE Ti EN KIT-6 EN CATALIZADORES DE Ru PARA HDO DE ANISOL. <u>Brenda Taylor Pinta</u> , José Antonio de los Reyes Heredia y Sergio Antonio Gómez Torres.	196
P-74-118	Co(Ni)MoW SULFIDE CATALYSTS SUPPORTED ON MESOPOROUS Al, Zr AND Nb MODIFIED SBA-15 FOR HDS OF DBT <u>Julio César Morales Ortuño</u> , Trino A Zepeda Partida, J. Noé Díaz de León y Rafael Huirache-Acuña.	197
P-75-121	MILD OXIDATIVE DEHYDROGENATION OF PROPANE OVER Pt-Ir CATALYSTS SUPPORTED ON Mg-SBA-15. <u>Leonardo Lara Moreno</u> , Perla Sánchez-López, Yulia Kotolevich, Sergio A. Gómez Torres, Sergio Fuentes Moyado y Trino A. Zepeda.	198
P-76-125	CARACTERIZACIÓN Y CINÉTICA DE FORMACIÓN DEL CATALIZADOR Cu/Al ₂ O ₃ A TRAVÉS DEL EXTRACTO DE LIPPIA GRAVEOLENS (OREGANO MEXICANO). Bárbara Jazmín Lino Galarza, <u>Javier Rivera de la Rosa</u> , Carlos Javier Lucio Ortiz, Diana Bustos Martínez y Carlos Enrique Escárcega González.	199
P-77-126	CARACTERIZACIÓN DE CATALIZADORES BIMETÁLICOS Cu-Ni/BENTONITA PARA HIDROGENACIÓN DE ÁCIDO LEVULÍNICO. Gloria Lourdes Dimas Rivera, <u>Alma Lizett Vargas Martínez</u> , Karen Yadira Villezca Valdez, David A. del Haro del Río, Carlos J. Lucio Ortiz, Javier Rivera de la Rosa, Ladislao Sandoval Rangel y Carolina Solís Maldonado.	200
P-78-127	SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE CATALIZADORES NiMo/CeO ₂ -Al ₂ O ₃ EDTA PREPARADOS POR EL MÉTODO SOL-GEL: EFECTO DEL CeO ₂ SOBRE LAS PROPIEDADES DE Al ₂ O ₃ . Nadia Dinhora de Jesús Soriano Mar, Rebeca Silva Rodrigo y Acela López Benítez.	201
P-79-131	INFLUENCIA DE LA ADICIÓN DE PLATINO SOBRE LA CATÁLISIS DE LA METANACIÓN DE DIÓXIDO DE CARBONO DESARROLLADA POR RODIO SOPORTADO EN ÓXIDO DE ZIRCONIO. <u>Alfredo Solís-García</u> , Trino Zepeda, María del Carmen Lara-Pérez y Juan Carlos Fierro-González.	202

P-80-132	ACTIVIDAD Y SELECTIVIDAD DE CATALIZADORES Pt, Pd Y Ni SOBRE PILC-Zr EN LA PRODUCCIÓN DE DIÉSEL VERDE. <u>Emigdio Gregorio Zamora-Rodea</u> , Miguel Ángel Mata Guadarrama, Carlos Eduardo Ramírez Castelán, Ana Karina Medina-Mendoza, Sara Nuñez-Correa, Carlos Rogelio Tapia-Medina y José Antonio Colín Luna.	203
P-81-133	HOMOGENEOUS AND HETEROGENEOUS CATALYSIS ASSISTED WITH ULTRASONIC IRRADIATION BY BIODIESEL PRODUCTION. Norma Gutiérrez-Ortega, Esthela Ramos-Ramírez, Alma Serafín-Muñoz, Adrián Zamorategui-Molina, Gabriel Herrera-Pérez, Elizabeth Pabón-Gelves y Jesús Monjaraz-Vallejo.	204
P-82-142	SÍNTESIS ASISTIDA POR MICROONDAS DE NANOPÁRTICULAS DE MoS ₂ SOPORTADAS EN NTC Y SU EVALUACIÓN CATALÍTICA EN REMOCIÓN DE AZUFRE. <u>Alma Gochi</u> , Rafael Huirache, Javier Lara, Eric Rivera, Trino Zepeda y Francisco Paraguay.	205
P-84-144	CARACTERIZACIÓN DE NANOPARTÍCULAS DE TiO ₂ SOPORTADAS, OBTENIDAS POR SÍNTESIS SONOQUÍMICA. <u>Vanessa Martínez-Cornejo</u> , Luis Cedeño Caero, Sergio Fuentes Moyado y Gabriel Alonso Núñez.	206
P-85-145	CARACTERIZACIÓN Y EVALUACIÓN CATALÍTICA EN HIDRODESOXIGENACIÓN DE ANISOL CON CATALIZADORES BIMETÁLICOS DE RuCu SOPORTADOS EN TiO ₂ . <u>Diego Durán Sánchez</u> , José Antonio de los Reyes Heredia, Reyna Ríos Escobedo y Omar Uriel Valdés Martínez.	207



UASLP
Universidad Autónoma
de San Luis Potosí



PLÁTICAS INVITADAS

POROUS HEXACYANOFERRATE(II) COMPLEXES AS CATALYSTS FOR RING-OPENING COPOLYMERIZATION OF CO₂ AND PROPYLENE OXIDE

Guillermo Penche-Hernando^{a,*}, María P. González-Marcos^a, Juan R. González- Velasco^a

^a Dept. Chemical Engineering, Fac. Science and Technology, University of the Basque Country, UPV/EHU, Campus of Leioa, P.O. Box 644, E-48080 Bilbao, Bizkaia, Spain.

*guillermo.penche@ehu.eus

Resumen

Los cianometalatos de metales de transición son polímeros de coordinación inorgánicos formados por el ensamblado de aniones de cianometalato ($[M(CN)_a]^{b-}$) a través de metales de transición (T^{c+}). Se trata de una familia de materiales de gran interés científico dado que su topología y propiedades se pueden modular fácilmente a partir del metal de transición y de los aniones de cianometalato seleccionados. Entre las innumerables aplicaciones que se les atribuyen a estos compuestos destaca la catálisis.

En el presente trabajo, se han sintetizado por coprecipitación una serie de hexacyanoferratos(II) porosos de fórmula general $T_2[Fe(CN)_6]$, donde $T = Ni, Co, Fe, Zn$. Los compuestos obtenidos se han caracterizado en profundidad mediante diversas técnicas de análisis: difracción de rayos X (DRX), espectroscopia infrarroja (IR), análisis termogravimétrico (TG), análisis elemental, fluorescencia de rayos X (FRX), fisisorción de N₂, microscopía electrónica de barrido (SEM), microscopía electrónica de transmisión (TEM) y desorción de NH₃ a temperatura programada (NH₃-TPD). Las propiedades catalíticas de estos sólidos se han testado en la copolimerización de óxido de propileno (OP) y CO₂ con apertura de anillo, para dar lugar a policarbonato de propileno (PPC), un polímero biodegradable y biocompatible con aplicación en la industria biomédica y del envasado.

Keywords: Utilización de CO₂, catálisis ambiental, nuevos materiales, materiales microporosos, copolimerización, polímeros biodegradables, polímeros basados en CO₂.

Abstract

Transition-metal cyanometallates are inorganic coordination polymers formed by the assembly of cyanometallate anions $[M(CN)_a]^{b-}$ through transition-metal cations (T^{c+}). This family of materials is of great scientific interest since its topology and properties can be easily modulated from the transition-metal cation and/or the cyanometallate anion selected. Among the countless applications of these compounds, catalysis arises as particularly interesting.

In the present work, a series of porous hexacyanoferrates(II) ($T_2[Fe(CN)_6]$; $T = Ni, Co, Fe, Zn$) have been synthesized by a coprecipitation method. The obtained compounds have been thoroughly characterized by different analytic techniques: X-ray diffraction (XRD), infrared spectroscopy (IR), thermogravimetric analysis (TG), elemental analysis, X-ray fluorescence (XRF), N₂ physisorption and scanning (SEM) and transmission (TEM) electron microscopy. Catalytic properties of the studied compounds were tested in the ring-opening copolymerization (ROCOP) of CO₂ and propylene oxide (PO) to yield polypropylene carbonate (PPC), a biodegradable and biocompatible polymer with potential applications in the fields of biomedicine and green packaging.

Keywords: CO₂ utilization, environmental catalysis, new materials, microporous materials, copolymerization, biodegradable polymers, CO₂-based polymers.

(Eu, Pd, Fe, Bi) MODIFIED-TiO₂ PHOTOCATALYSTS SUNLIGHT-DRIVEN AND THEIR CATALYTIC ACTIVITY USING SCAVENGER MOLECULES

Dora Solis-Casados^{*,1} and Luis Escobar-Alarcón²

¹ *Universidad Autónoma del Estado de México. Centro Conjunto de Investigación en Química Sustentable UAEM-UNAM, México.*

² *Departamento de Física, Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares, México.*

**e-mail: solis_casados@yahoo.com.mx*

Resumen

En este trabajo se presentan resultados sobre la síntesis caracterización y evaluación de actividad fotocatalítica de películas delgadas de TiO₂ modificadas con Eu, Pd, Fe y Bi, que fueron evaluadas usando luz solar simulada. Estas películas delgadas se caracterizaron usando diferentes técnicas para determinar su composición química elemental superficial, así como el entorno químico de los elementos presentes (XPS), su estructura cristalina (XRD y Raman), y sus propiedades ópticas (UV-Vis). Estas películas mostraron actividad fotocatalítica en la degradación del colorante Verde de Malaquita (VM) usando luz solar simulada, particularmente, las modificadas con Bi y Pd alcanzaron conversiones de 66.3 y 58.3 % respectivamente después de 180 minutos de reacción. Con el uso de moléculas captadoras como el TEOA, IPA y BZQ, se determinó que la ruta de reacción preferencial es la de reducción en la cual los radicales superóxido tienen una participación importante.

Palabras clave: Películas delgadas, TiO₂, fotocatálisis, Moléculas captadoras, Verde de Malaquita.

Abstract

This work presents results of the synthesis, characterization and evaluation of photocatalytic activity of thin films of TiO₂ modified with Eu, Pd, Fe and Bi, which were evaluated using simulated sunlight. These thin films were characterized using different techniques to determine their surface elemental chemical composition, as well as the chemical environment of the elements present (XPS), their crystalline structure (XRD and Raman), and their optical properties (UV-Vis). These films showed photocatalytic activity in the degradation of the Malachite Green (MG) dye using simulated sunlight, particularly, those modified with Bi and Pd reached conversions of 66.3 and 58.3% respectively after 180 minutes of reaction. With the use of scavenger molecules such as TEOA, IPA and BZQ, it was determined that the reduction was the preferential reaction route in which the superoxide radicals play an important role.

Keywords: Thin film, TiO₂, Photocatalysis, scavengers, Malachite Green.

MODELING THE RESTRUCTURING OF PALLADIUM NANOPARTICLES DURING CO OXIDATION: A MULTISCALE APPROACH

Arce-Ramos, Juan Manuel^a and Wen-Qing Li^a

^a Institute of High Performance Computing, Agency for Science, Technology, and Research, Singapore 138632, Singapore

*e-mail: juan_arce@ihpc.a-star.edu.sg

Resumen

Los catalizadores conformados de nanopartículas (NP) metálicas tienen morfologías que pueden evolucionar bajo condiciones de reacción. Estos cambios estructurales pueden alterar la reactividad de los sitios activos debido a modificaciones de su ambiente local. Por lo tanto, entender la dependencia de la morfología de estas NP bajo ciertas condiciones es crítico desde el punto de vista del diseño del catalizador. En este trabajo, aplicamos un enfoque de modelado multiescala para predecir la forma de NP de paladio bajo una atmósfera de CO y O₂ (oxidación de CO). Las interacciones adsorbato-sólido fueron descritas mediante cálculos de DFT, mientras que empleamos la isoterma de Fowler-Guggenheim para modelar el equilibrio de adsorción. Además, combinamos nuestras predicciones teóricas con experimentos sofisticados de *operando*-TEM para racionalizar los resultados de reacción. El comportamiento oscilatorio de la actividad de las NPs durante la reacción está asociado con su re-estructuración. Mientras que NP planas están asociadas con un catalizador de baja actividad, las NPs de forma más redondeada están ligadas con una actividad catalítica más alta. Esta metodología tiene el potencial para ser extendida a otros catalizadores y ayudar en el entendimiento de estos sistemas complejos.

Keywords: Nanopartículas de Pd, re-estructuración de nanopartículas, Construcción de Wulff, Cálculos de DFT.

Abstract

Catalysts made of supported metal nanoparticles (NP) have morphologies that can develop under reaction conditions. These structural changes can alter the reactivity of the active sites due to modifications in their local environment. Therefore, understanding the dependency of the NP's morphology under certain environmental conditions is critical from the point of view of the catalyst's design. In this work, we applied a multiscale modeling approach to predict the shape of Pd NP under a CO and O₂ atmosphere (CO oxidation). The adsorbate-solid interactions were described through DFT calculations, while we used the Fowler-Guggenheim isotherm to model adsorption equilibrium. We combined our theoretical predictions with sophisticated *operando* TEM experiments to rationalize the catalytic tests' results. The oscillatory behavior in the activity of Pd NP during CO oxidation is associated with their restructuring. While flat NPs are associated with a low active catalyst, rounded NPs were assigned to the high-activity states. This methodology has the potential to be extended to other catalysts and provide insights to aid in the understanding of such complex systems.

Keywords: Pd Nanoparticles, nanoparticle restructuring, Wulff construction, DFT calculations.

CERIA NANOESTRUCTURADA COMO SOPORTE DE NÍQUEL PARA LA OBTENCIÓN DE HIDRÓGENO A PARTIR DE ALCOHOLES

Daniel G. Araiza*, Antonio Gómez-Cortes, Gabriela Díaz*

Laboratorio de Reactividad Catalítica de Nanomateriales / Departamento de Física Química / Instituto de Física / Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad de México, México

*e-mail: araiza@materiales.unam.mx (D.G. Araiza); diaz@fisica.unam.mx (G. Díaz)

Resumen

En este trabajo se presentan las propiedades de Ni soportado en CeO₂ nanoestructurado (poliedros, barras y cubos) como catalizadores en las reacciones de reformado húmedo de etanol (SRE) y descomposición de metanol (MD) para la obtención de hidrógeno. Los soportes se prepararon por la vía hidrotermal y los catalizadores por impregnación húmeda. Los materiales se caracterizaron por XRD, HRTEM/SEM/EDS, espectroscopia Raman y técnicas termo-programadas H₂-TPR y O₂-TPD. La reacción SRE se estudió en condiciones estequiométricas (H₂O/CH₃CH₂OH= 3) en catalizadores de Ni al 10% en peso, mientras que la reacción MD se evaluó en catalizadores de Ni al 5% en peso. Para la reacción SRE, el mejor catalizador es el soportado en barras, Ni/Ce-r, tanto en actividad como en estabilidad; mientras que para la reacción MD, los más activos son los soportados en poliedros y barras, pero la estabilidad del soportado en cubos es mejor. Los depósitos de carbón como una de las causas de la desactivación, son de diferente naturaleza, dependiendo de las características de cada reacción; sin embargo, en cualquier caso, la muestra que produce menos carbón es la más estable. Esto último está en buen acuerdo con la tendencia observada en los experimentos de estabilidad, donde las mejores muestras son Ni/Ce-r en la SRE y Ni/Ce-c en la MD.

Palabras clave: Nanoceria, Morfología, Ni soportado, Hidrógeno.

Abstract

In this work we show the properties of Ni supported on nanostructured ceria (polyhedral, rods, and cubes) as catalysts for steam reforming of ethanol (SRE) and methanol decomposition (MD) for hydrogen production. The nanostructured supports were prepared by a hydrothermal synthesis and catalysts were prepared by wet impregnation. Several characterization techniques were employed: XRD, HRTEM/SEM/EDS, Raman spectroscopy, and temperature-programmed techniques as H₂-TPR and O₂-TPD. SRE reaction at stoichiometric conditions (H₂O/CH₃CH₂OH= 3) was studied over 10 wt.% Ni catalysts, while MD reaction was evaluated over 5 wt.% Ni catalysts. While for SRE reaction the best catalyst in terms of activity and stability is the one supported on rod-shaped ceria, Ni/Ce-r, for MD reaction, catalysts supported on polyhedra and rod-shaped ceria are more active, but the one supported on ceria cubes was the most stable. Carbon deposits studied after stability tests, as one of the catalyst deactivation pathways, are different on each reaction. However, in both cases, the best stability is directly linked with the sample which produces less carbon, Ni/Ce-r for SRE reaction, and Ni/Ce-c for MD reaction.

Keywords: Nanoceria, Morphology, Supported Ni, Hydrogen.

SÍNTESIS VERDE DE CATALIZADOR Pd-Fe SOPORTADO SOBRE γ -Al₂O₃ MEDIANTE EL USO DEL EXTRACTO DE GOBERNADORA (*Larrea tridentate*) PARA LA HIDROGENACION DE 2-MEYILFURANO A PRODUCTOS DE BIORREFINERÍAS

Diego Alexander González-Casamachin^a, Javier Rivera De la Rosa^{a,*}, Carlos J. Lucio-Ortiz^a, Nora Elizondo Villareal^b, Luz Hypatia Verastegui Dominguez^b, Diana Busto Martínez^a, y Ladislao Sandoval Rangel^c.

^a Universidad autónoma de Nuevo León, Facultad de Ciencias Químicas, Av. Universidad s/n, cd Universitaria, C.P. 64450, San Nicolás de los Garza, Nuevo León, México.

^b Universidad Autónoma de Nuevo León, Facultad de Físico Matemáticas, Av. Universidad s/n, cd Universitaria, C.P. 64450, San Nicolás de los Garza, Nuevo León, México.

^c Tecnológico de Monterrey, Av. Eugenio Garza Sada 2501 Sur, Tecnológico, 64849 Monterrey, N.L. (México).

*javier.riverad@ualp.edu.mx

Resumen

En el presente trabajo se propone la síntesis verde de catalizador biometálico de Pd-Fe soportado sobre gamma alúmina empleando extracto de Gobernadora (*Larrea tridentate*) de la región noroeste de México como agente reductor. El catalizador biometálico se empleó en la hidrogenación de 2-metilfurano (2-MF), molécula proveniente de derivados de la biomasa como furfural, en fase gaseosa para la obtención de productos químicos de alto valor agregado. Mediante el análisis de HPLC del extracto de Gobernadora se identificaron agentes reductores (antioxidantes) como: ácido clorogénico, ácido caféico, ácido p-cumárico y ácido ferúlico. Se alcanzaron conversiones hasta del 41% de 2-MF a 270 °C de temperatura de reacción con selectividades hacia 2-MTHF (metiltetrahidrofurano) del 97%. En consecuencia, se encontró que la relación molar 3:1 Pd-Fe en la síntesis de catalizadores biometálicos propicia la formación de la aleación biometálica Pd-Fe, la cual a su vez favorece la obtención de productos de alto valor agregado como el 2-MTHF.

Palabras clave: Nanopartículas de Pd-Fe/Al₂O₃, *Larrea tridentate*, 2-metilfurano, 2-metiltetrahidrofurano.

Abstract

The present work proposes the green synthesis of a Pd-Fe bimetallic catalyst supported on gamma alumina using Gobernadora extract (*Larrea tridentate*) from the northwestern region of Mexico as a reducing agent. The bimetallic catalyst was used in the hydrogenation of 2-methylfuran, molecule from biomass derivatives such as furfural in the gas phase to obtain chemical products with high added value. Through HPLC analysis of Gobernadora extract, reducing agent (antioxidants) were identified such as: chlorogenic acid, caffeic acid, p-coumaric acid and ferulic acid. Conversions of up to 41% of 2-MF were achieved at 270 °C reaction temperature with selectivities towards 2-MTHF of 97%. Consequently, it was found that the 3:1 molar ratio Pd-Fe in the Synthesis of biometallic catalysts favors the formation of the biometallic alloy Pd-Fe, which in turn favors to obtain high added chemicals as 2-MTHF.

Keywords: Nanoparticles de Pd-Fe/Al₂O₃, *Larrea tridentate*, 2-methylfuran, 2-methyltetrahydrofuran.

IMMOBILIZED Ag/Nb₂O₅ CATALYSTS: DEGRADATION OF 17 α -ETHINYLESTRADIOL IN CONTINUOUS PROCESS

Eduardo Abreu^{a,b}, Michel Z. Fidelis^b, Rodrigo Brackmann^c, José L. Díaz de Tuesta^d, Helter T. Gomes^d, Onélia A. A. dos Santos^b, Giane G. Lenzi^a

^a Departamento Acadêmico de Engenharia Química, Universidade Tecnológica Federal do Paraná (UTFPR), 84017-220, Ponta Grossa, Brasil.

^b Departamento de Engenharia Química, Universidade Estadual de Maringá (UEM), 87020-900, Maringá, Brasil.

^c Departamento de Química, Universidade Tecnológica Federal do Paraná (UTFPR), 85503-390, Pato Branco, Brasil.

^d Centro de Investigação de Montanha (CIMO), Instituto Politécnico de Bragança, Campus de Santa Apolónia, 5300-253 Bragança, Portugal.

*e-mail: gianeg@utfpr.edu.br

Resumen

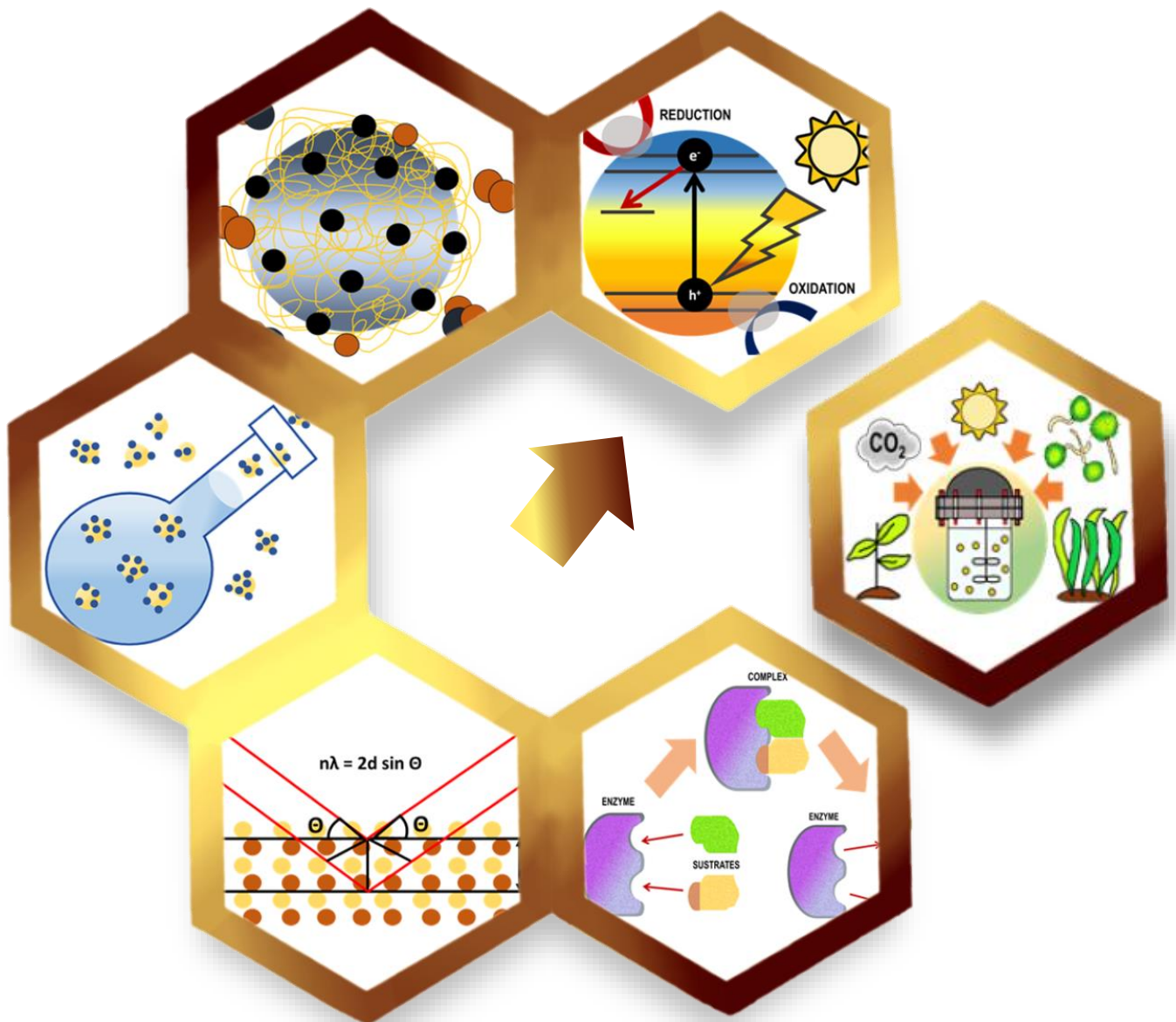
Este estudio describe la aplicación de catalizadores Nb₂O₅ y Ag/Nb₂O₅ promovidos con Ag, en suspensión e inmovilizados sobre esferas de alginato, para la degradación del 17 α -Ethinilestradiol (EE2). Las técnicas utilizadas para caracterizar los fotocatalizadores consistieron en: difracción de rayos X, área específica y puntode carga cero (PZC). Los catalizadores se sintetizaron a diferentes temperaturas de calcinación y con una cargametálica de plata al 5%. Entre las condiciones operativas analizadas se encuentran el pH, la concentración de catalizador y la fuente emisora de radiación. Los resultados de los experimentos iniciales realizados con catalizador en suspensión indicaron que el catalizador que presentó mayor actividad catalítica en la degradación de EE2 fue el catalizador 5%Ag/Nb₂O₅ calcinado a 973 K, removiendo 77.7% de la concentración inicial del contaminante en 120 minutos de reacción. La inmovilización del catalizador en esferas de alginato resultó en una reducción de la degradación, pudiendo degradar 69.2% de la EE2 inicial en un sistema discontinuo. En el sistema continuo, el catalizador inmovilizado degradó un total del 37.3%, con un caudal de 10 L.h⁻¹. La reutilización del catalizador fue prometedora, pero disminuyó la remoción, degradando un total del 27% en el tercer ciclo de uso.

Keywords: Proceso continuo, catalizador inmovilizado, contaminantes emergentes, Ag/Nb₂O₅, diseño de experimentos.

Abstract

This study describes the application of Nb₂O₅ and Ag/Nb₂O₅ catalysts, suspension and alginate spheres immobilized, for the degradation of 17 α -Ethinylestradiol (EE2). The techniques used to characterize the photocatalysts consisted of: X-ray diffraction, specific area and point of zero charge (PZC). The catalysts were synthesized at different calcination temperatures and with 5% silver metallic load. Among the operational conditions analyzed are pH, catalyst concentration and the emitting source of radiation. The results of the experiments initial carried out with catalyst in suspension indicated that the catalyst that presented the highest catalytic activity in the degradation of EE2 was the catalyst 5%Ag/Nb₂O₅ calcined at 973 K, removing 77.7% of the pollutant initial concentration in 120 minutes of reaction. The immobilization of the catalyst in alginate spheres resulted in a reduction in degradation, being able to degrade 69.2% of the initial EE2 in a batch system. In the continuous system, the immobilized catalyst degraded a total of 37.3% of the EE2, with a flow rate of 10 L.h⁻¹. Catalyst reuse was promising, even dropping the removal, degrading a total of 27% of the initial EE2 concentration in the third cycle of use.

Keywords: Continuous process, immobilized catalyst, emerging pollutants, Ag/Nb₂O₅, design of experiments.



SESIÓN ORAL 1

OPTIMIZATION OF THE METAL PHASE COMPOSITION OF Ir-Pd/SiO₂-Al₂O₃ CATALYSTS TO INCREASE THIOTOLERANCE IN SRO OF DECALIN

Silvana A. D'Ippolito, Santiago M. Rosas, Adriana D. Ballarini, Carlos L. Pieck*

Instituto de Investigaciones en Catálisis y Petroquímica (INCAPE) (UNL, CONICET), Colectora Ruta Nacional. N° 168 - Paraje El Pozo - CP 3000, Santa Fe, Argentina.

**e-mail: pieck@fiq.unl.edu.ar*

Resumen

Se estudió la actividad y tiotolerancia de catalizadores mono y bimetalicos Ir-Pd con diferente relación atómica (Ir/Pd=0.5, 1 y 2) e igual contenido total de metal (1% en peso) soportados en SiO₂-Al₂O₃ en hidroconversión de decalina. En ausencia de azufre, los catalizadores bimetalicos mostraron menor actividad y selectividad a los productos de apertura de decalina que el catalizador monometálico de iridio. Sin embargo, exhibieron una mayor tolerancia al envenenamiento por tiofeno (S=10 ppm). Los catalizadores con relación atómica Ir/Pd=1 y 2, con similar dispersión metálica, mostraron mejor resistencia al azufre. La relación óptima encontrada, Ir/Pd=1, posiblemente se deba a la formación de partículas bimetalicas y una acidez adecuada. La acidez total de los catalizadores disminuye al aumentar la relación atómica Ir/Pd. La adición de azufre no modifica significativamente la selectividad a los productos de apertura del anillo, pero reduce la formación de productos deshidrogenados y de craqueo (indeseables). La distribución de los productos de craqueo confirmó que en ausencia de S la función metálica controla el mecanismo de apertura de decalina, excepto con el catalizador monometálico de Pd. Con la adición de S, predomina la función ácida dado que los resultados de actividad correlacionan con la acidez de los catalizadores.

Palabras clave: SRO, decalina, SiO₂-Al₂O₃, Ir-Pd, tiotolerancia.

Abstract

The activity and S-tolerance of monometallic and bimetallic Ir-Pd catalysts with different atomic ratio (Ir/Pd=0.5, 1 and 2) and the same total metal content (1% wt) supported on SiO₂-Al₂O₃ were studied in the hydroconversion of decalin. In the absence of sulfur, bimetallic catalysts showed less activity and selectivity to decalin opening products compared to the iridium monometallic catalyst. However they exhibited a greater tolerance to thiophene poisoning (S=10 ppm). The catalysts with an atomic ratio Ir/Pd=1 and 2, with similar metal dispersion, had better resistance to sulfur. The optimal ratio found, Ir/Pd=1, could be related to the formation of bimetallic particles and an adequate acidity. The total acidity of the catalysts decreased with an increasing atomic ratio Ir/Pd. The addition of sulfur does not significantly modify the selectivity to ring opening products but reduces the formation of dehydrogenated (undesirable) and cracking products. The distribution of the cracking products confirmed that in the absence of S the metallic function controls the decalin opening mechanism, except with the monometallic Pd catalyst. With the addition of S the acid function predominates since the activity results correlate with the acidity of the catalysts.

Keywords: SRO, decalin, SiO₂-Al₂O₃, Ir-Pd, thiotolerance.

DRY REFORMING OF METHANE WITH Ni/Al₂O₃-MgO CATALYST: EFFECT OF MgO CONTENT

Montserrat Castro Gutiérrez^a, Fernando Morales Anzures^a, Gilberto Mondragón Galicia^b, Pastora Salinas Hernández^a, Albina Gutiérrez Martínez^b, Francisco Javier Tzompantzi Morales^c and Raúl Pérez Hernández^{b,*}

^a Instituto de Estudios de la Energía, Universidad del Istmo, Campus Tehuantepec, Santo Domingo Tehuantepec, Oaxaca, México.

^b Departamento Estudios del Ambiente, Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares, Carretera México-Toluca S/N, La Marquesa, Ocoyoacac, Estado de México, México.

^c Departamento de Química, UAM-Iztapalapa, Av. San Rafael Atlixco 186, Leyes de Reforma 1ra Sección Delegación Iztapalapa, CDMX, México.

*e-mail: fmanzures@yahoo.com.mx, raul.perez@inin.gob.mx

Resumen

En este trabajo se presenta la síntesis y caracterización de catalizadores de Ni soportados en un óxido mixto de Al₂O₃-MgO (5,15 y 30% p/p), y Al₂O₃. La alúmina se sintetizó mediante el método sol-gel. Posteriormente, se impregnó con MgO al 5, 15 y 30% en peso. Finalmente, los soportes mixtos de Al₂O₃-MgO se impregnaron con un 15% en peso de Ni. Los catalizadores fueron caracterizados mediante las técnicas de TPR, XRD y TEM. La actividad catalítica se estudió en el reformado seco de CH₄ para la producción del gas de síntesis a 700 °C durante 70 horas. Se observó que dependiendo del contenido de MgO en los soportes, los catalizadores variaron en sus propiedades físico-químicas y mostraron diferentes tendencias en su actividad catalítica. El catalizador de Ni/Al₂O₃-MgO (5% p/p) mostró ligeramente mejor actividad y estabilidad catalítica, comportamiento asociado a la menor presencia de depósitos de carbón como lo evidencio XRD y TEM. Estos resultados demuestran que el MgO al 5% en peso, evita la formación de carbón y puede estar asociado a una mayor dispersión de este óxido en la superficie de la alúmina, bloqueando los sitios ácidos del Al₂O₃ y de esa forma previene la deposición de carbono.

Palabras clave: Methane Dry Reforming, SYNGAS, TPR, XRD, TEM.

Abstract

In this work we report the synthesis and characterization of Ni catalysts supported in a mixed oxide of Al₂O₃-MgO (5, 15 and 30% w/w) and Al₂O₃. The alumina was synthesized by the sol-gel method. Subsequently, it was impregnated with MgO at 5, 15 and 30% by weight. Finally, the Al₂O₃-MgO mixed supports were impregnated with 15% by weight of Ni. The catalysts were characterized by the techniques of TPR, XRD and TEM. The catalytic activity was studied in the dry reforming of CH₄ for the production of the synthesis gas at 700 °C for 70 hours. It was observed that depending on the content of MgO in the supports, the catalysts varied in their physical-chemical properties and showed different trends in their catalytic activity. The Ni/Al₂O₃-MgO catalyst (5% w/w) showed slightly better activity and catalytic stability, behavior associated with the lower presence of carbon deposits as evidenced by XRD and TEM. These results demonstrate that 5% MgO by weight, prevents the formation of carbon and may be associated with a greater dispersion of this oxide on the surface of the alumina, blocking the acidic sites of Al₂O₃ and thereby preventing carbon deposition.

Keywords: Methane Dry Reforming, SYNGAS, TPR, XRD, TEM.

SÍNTESIS SOL-GEL DE ÓXIDOS MIXTOS Zr-Ti ASISTIDA POR COPOLÍMEROS TRIBLOQUE Y SU EFECTO COMO SOPORTES EN CATALIZADORES NiW PARA LA HIDRODESULFURACIÓN DEL 3-METIL-TIOFENO

C.E. Soto-Arteaga^a, M.A. Guzmán-Cruz^b, S. Fuentes-Moyado^a, J.N. Díaz de León^{a*}

^a Universidad Nacional Autónoma de México, Centro de Nanociencias y Nanotecnología, Carretera Tijuana-Ensenada, Km. 107, C. P. 22800, Ensenada, B. C., México.

^b Universidad Juárez Autónoma de Tabasco, División Académica Multidisciplinaria de Jalpa de Méndez, Carretera Estatal Libre Villahermosa-Comalcalco Km. 27+000 s/n Ranchería Ribera Alta, C.P. 86205, Jalpa de Méndez, Tabasco, México.

*e-mail: noejd@chyn.unam.mx

Resumen

La adición de un surfactante resultó en la síntesis de soportes con porosidad definida, partículas de menor tamaño y en la ausencia de fases cristalinas de TiO₂ y ZrO₂. Los resultados confirmaron la formación de un óxido mixto y la variación de las propiedades electrónicas, texturales y estructurales dependiendo del surfactante utilizado. Se registró un aumento en las propiedades texturales en comparación de los óxidos individuales mediante fisiorción de N₂, además, se observó un efecto en la estructura porosa debido a la presencia de distintos ciclos de histéresis en las isothermas, los difractogramas adquiridos por difracción de rayos X (DRX) mostraron la ausencia de fases cristalinas; los espectros de absorción UV-Vis presentaron una banda amplia asignada a la formación de una fase mixta; las micrografías obtenidas por microscopía electrónica de transmisión (MET) exhibieron la estructura y homogeneidad de los materiales. El análisis químico de los catalizadores corroboró la relación equimolar Zr/Ti y atómica Ni/(Ni+W) aproximadamente igual 0.31. Las propiedades de los soportes influyeron en la estructura de las laminillas de sulfuros como se observó por MET y en el aumento en la velocidad de reacción registrado durante la hidrodesulfuración del 3-metil-tiofeno, donde la muestra ZT-P presentó la mejor actividad catalítica.

Palabras clave: síntesis sol-gel, surfactante, óxido mixto, hidrodesulfuración.

Abstract

The addition of surfactants during the synthesis of supports resulted in materials with defined porosity, smaller particle size, and the absence of characteristic ZrO₂ and TiO₂ crystalline phases. The data obtained by nitrogen physisorption showed an improvement in the textural properties compared with the individual oxides. Also, the porous structure was modified as shown in the presence of different types of hysteresis loops in the isotherms. The diffractograms obtained by x-ray diffraction (XRD) do not show crystalline phases. The UV-Vis absorption spectrums presented a broad band assigned to the mixed-phase. Meanwhile, the micrographs obtained by transmission electron microscopy confirmed the homogeneity of the samples. The chemical analysis performed by ICP-OES corroborates that the materials displayed the expected equimolar relation Zr/Ti and the atomic ratio Ni/Ni+W approximately equal to 0.31. The results confirmed the mixed oxide formation and showed that the general properties of the materials depend on the nature of the used surfactant. The support properties intrinsically influenced the sulfides sheet's morphologies, as observed in the TEM micrographs. The latter was also related to the obtained reaction rates, where the surfactant-based materials presented higher values than the reference material. Among all the materials, the sample ZT-P presented the maximum reaction rate.

Keywords: synthesis sol-gel, surfactants, mixed oxide, hydrodesulfurization.

SYNTHESIS OF ACTIVATED CARBON FROM RIO TURBIO SUB-BITUMINOUS COAL

Mariano Cristaldi^{a,b}, Misael Cordoba Arroyo^{b,c}, Juan Badano^{b,c}, Pedro de Carli^a, Ernesto Haggi^a, Mabel Bregliani^a, Carlos Vera^{b,c,*}

^a Unidad Acad. Río Gallegos/Universidad Nacional de la Patagonia Austral, 9400, Río Gallegos, Argentina

^b Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), C1425FQB, Godoy Cruz 2290, CABA, Argentina

^c Instituto de Investigaciones en Catálisis y Petroquímica (INCAPE), 3000, Santa Fe, Argentina

*e-mail: cvera@fiq.unl.edu.arResumen

Resumen

El carbón de Río Turbio (Santa Cruz, Argentina) es un recurso abundante que no ha sido utilizado para la fabricación de carbón activado. Es clasificado como carbón subbituminoso, con altos contenidos de ceniza y materia volátil que limitarían su uso como adsorbentes. En este trabajo se ensayan técnicas de tratamiento para aumentar el porcentaje de carbono fijo, disminuir el contenido de cenizas y desarrollar una estructura porosa. Las técnicas incluyen el tratamiento térmico con gas inerte, el desmineralizado por extracción con ácido y lavado con agua y la activación con vapor a temperaturas de gasificación. Los materiales obtenidos se caracterizaron con distintas técnicas (XRD, TPO, FTIR, índice de yodo, índice de azul de metileno, ICP-OES).

Un sondeo de variables de tratamiento arroja como resultado que la pirólisis a 650 °C es efectiva para estabilizar la estructura y disminuir la materia volátil, la activación a 850 °C y una razón vapor:carbón de 2 gg⁻¹ produce carbón activado con características satisfactorias (número de yodo: 513-573 mg_{I2} g_C⁻¹; índice de azul de metileno: 56-124 mg_{I2} g_{MB}⁻¹). Además, el lavado con agua o ácido disminuyen levemente el contenido de ceniza indicando que el material mineral estaría disperso en la matriz carbonosa y sería poco accesible. Los resultados apuntan a la viabilidad comercial del producto sintetizado.

Palabras claves: carbón, sub-bituminoso, Río Turbio, carbón activado, vapor.

Abstract

Coal from Río Turbio (Santa Cruz, Argentina) is an abundant resource that has not been used for the production of activated carbon. It is classified as a sub bituminous carbon, with high content of both ash and volatile matter which would limit its use as adsorbent. In this work, different techniques are tested to increase the percentage of fixed carbon, to decrease ash content and to develop a porous structure. Those techniques include heat treatment in an inert atmosphere, demineralization by acid extraction and water washing, and steam activation at gasification temperatures. The obtained materials are characterized using several techniques (XRD, TPO, FTIR, iodine number, methylene blue number, ICP-OES).

A screening of process conditions shows that pyrolysis at 650 °C is effective to stabilize the structure and reduce volatile matter, activation at 850 °C and a vapor:carbon ratio of 2 g g⁻¹ produce activated carbon with satisfactory characteristics (iodine number: 513-573 mg_{I2} g_C⁻¹; methylene blue index: 56-124 mg_{MB} g_C⁻¹). Moreover, water or acid washes slightly decrease the final ash content, indicating that the mineral material would be dispersed in the carbonaceous matrix and it would not be accessible. The results suggest commercial viability of the synthesized product.

Keywords: coal, sub-bituminous, Río Turbio, activated carbon, steam.

ADICIÓN DE CERIO A CATALIZADORES NiMo SOPORTADOS EN ALÚMINA Y SU APLICACIÓN EN LA HIDRODESULFURACIÓN DE DIBENZOTIOFENO

Acela López-Benítez^a, Gilles Berhault^b, José Aarón Melo-Banda^a, Rebeca Silva-Rodrigo^{a,*},
Alfredo Guevara-Lara^{c,*}.

^aCentro de Investigación en Petroquímica/Instituto Tecnológico de Ciudad Madero/Tecnológico Nacional de México, C.P. 89600, Prol. Bahía de Aldahir y Av. Bahías, Parque de la Pequeña y Mediana Industria, Altamira, Tamaulipas, México.

^bInstitut de Recherches sur la Catalyse et l'Environnement de Lyon/CNRS – Université Lyon 1, 69100, 2 Avenue Albert Einstein, Villeurbanne, France.

^cÁrea Académica de Química/Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, C.P. 42184, Carr. Pachuca-Tulancingo Km. 4.5, Pachuca, Hidalgo, México.

Resumen

La influencia de la adición de óxido de cerio a catalizadores NiMo/Al₂O₃ empleados en hidrodesulfuración (HDS) fue analizada en el presente estudio mediante la impregnación de sulfato de cerio en la superficie de una Al₂O₃, que fue obtenida por el método sol-gel, con concentraciones de 1 y 5 % mol de CeO₂. Estos soportes de CeO₂-Al₂O₃ se impregnaron con soluciones de Ni y Mo a pH=7 y 9. Los catalizadores NiMo/CeO₂-Al₂O₃ fueron caracterizados en estado óxido usando espectroscopías de reflectancia difusa UV-vis y Raman. Además, la acidez de los catalizadores en estado sulfuro fue analizada y cuantificada usando espectroscopía Infrarroja de adsorción de piridina. Los catalizadores fueron evaluados en la hidrodesulfuración (HDS) de dibenzotiofeno (DBT). Los resultados muestran que el pH de impregnación usado tiene una mayor influencia en la actividad final de HDS que el contenido de cerio, con un óptimo observado usando 1 % mol de CeO₂ y un pH de impregnación de 9. Esta actividad es 62 % mayor que la mostrada por el catalizador de referencia NiMo/Al₂O₃. Los resultados muestran que las condiciones básicas de impregnación ayudan a maximizar la dispersión de la fase CeO₂ en el soporte de alúmina mejorando sustancialmente la actividad final de HDS.

Palabras clave: Hidrodesulfuración, catalizadores ácidos de Lewis, óxidos mixtos, soporte de CeO₂-Al₂O₃, dibenzotiofeno.

Abstract

In the present study, the influence of adding cerium oxide to NiMo/Al₂O₃ hydrodesulfurization (HDS) catalysts was herein analyzed through the impregnation of cerium sulfate at the surface of an Al₂O₃ support obtained by a sol-gel method with concentrations of 1 and 5 mol % as CeO₂. The CeO₂-Al₂O₃ supports were then impregnated with Ni and Mo aqueous solutions at pH=7 or pH=9. The NiMo/CeO₂-Al₂O₃ catalysts were characterized at their oxide state using UV-vis diffuse reflectance and Raman spectroscopies. Acidity of catalysts at the sulfide state was analyzed and quantified using Infrared spectroscopy by pyridine adsorption. The sulfide catalysts were then evaluated in the hydrodesulfurization of dibenzothiophene (DBT). Results show that the pH of impregnation used influences more the final HDS activity than the amount of Ce with an optimum observed using 1 mol % and a pH of impregnation of 9. The activity achieved is then 62 % higher than for a NiMo/Al₂O₃ reference catalyst. Results show that impregnation under basic conditions help to maximize the dispersion of the CeO₂ phase onto the alumina support improving substantially the final HDS activity.

Keywords: Hydrodesulfurization, Lewis acid catalysts, mixed oxides, Ce-Al₂O₃ support, dibenzothiophene.

HIDRODESOXIGENACIÓN DE FENOL CON CATALIZADORES DE Ni Y Pd SOPORTADOS EN γ -Al₂O₃

Sandra Liliana Herrera Mejía^{a,*}, José Antonio de los Reyes Heredia, Sara Núñez Correa^c, Aída Luz VillaHolguín^a

^a Grupo de investigación Catálisis Ambiental/Departamento de Ingeniería Química/Facultad de Ingeniería/Universidad de Antioquia, Medellín, Colombia

^b Departamento de Ingeniería de Procesos e Hidráulica/Universidad Autónoma Metropolitana- Iztapalapa, 09340, México

^c Facultad de Ciencias Químicas/Universidad Veracruzana - Coatzacoalcos, 96535, Coatzacoalcos, México

*e-mail: sarnunez@uv.mx

Resumen

Se sintetizaron catalizadores monometálicos y bimetálico de níquel y paladio por el método de impregnación húmeda incipiente sobre γ -Al₂O₃ obtenida mediante el método sol-gel. El soporte γ -Al₂O₃ y los catalizadores fueron caracterizados mediante absorción atómica (AA), difracción de rayos X (DRX), área superficial BET (S_{BET}), reducción a temperatura programada (RTP-H₂), desorción de NH₃ a temperatura programada (DTP- NH₃) y espectroscopia ultravioleta-visible (UV-vis). Se evaluó la actividad de los catalizadores en la hidrodeseoxigenación de fenol a 320°C y 800 psi; se obtuvo conversiones alrededor de 90% con los catalizadores Pd/ γ -Al₂O₃ y NiPd/ γ -Al₂O₃ y 3,6% con el catalizador Ni/ γ -Al₂O₃. La interacción de los metales Ni y Pd en el catalizador bimetálico, parece tener un efecto sinérgico, ya que la selectividad a compuestos desoxigenados aumentó significativamente en las condiciones de reacción utilizadas, en comparación con los catalizadores monometálicos. A 20% de conversión de fenol, las selectividades a productos desoxigenados fueron de 13,2 %, 17,3 % y 62,6 % con los catalizadores Ni/ γ -Al₂O₃, Pd/ γ -Al₂O₃ y NiPd/ γ -Al₂O₃, respectivamente.

Palabras clave: Hidrodeseoxigenación, fenol, alúmina, níquel, paladio.

Abstract

Monometallic and bimetallic nickel and palladium catalysts were synthesized by the method of incipient wet impregnation on γ -Al₂O₃ obtained by the sol-gel method. Both γ -Al₂O₃ support and catalysts were characterized by atomic absorption (AA), X-ray diffraction (XRD), BET surface area (S_{BET}), temperature programmed reduction (H₂-TPR), NH₃ desorption temperature programmed (NH₃-DTP) and ultraviolet-visible spectroscopy (UV-vis). The catalysts were tested in the hydrodeoxygenation of phenol at 320°C and 800 psi, obtaining conversions of around 90% over the catalysts Pd/ γ -Al₂O₃ and NiPd/ γ -Al₂O₃ and 3,6% over the catalyst Ni/ γ -Al₂O₃. The interaction of the metals Ni and Pd in the bimetallic catalyst seems to have a synergistic effect, since the selectivity to deoxygenated compounds increased significantly under the reaction conditions used, in comparison with the monometallic catalysts. At 20% conversion of phenol, the selectivities to deoxygenated products were 13,2%, 17,3% and 62,6% over Ni/ γ -Al₂O₃, Pd/ γ -Al₂O₃ and NiPd/ γ -Al₂O₃ catalysts, respectively.

Keywords: Hydrodeoxygenation, phenol, alumina, nickel, palladium.

EFFECTO SINÉRGICO ENTRE ÓXIDOS DE Mn Y Ce PARA LA COMBUSTIÓN CATALÍTICA DE HOLLÍN

Sacco Nicolás, Bortolozzi Juan P., Miró Eduardo, Milt Viviana, Banús Ezequiel.

INCAPE-Universidad Nacional del Litoral, Facultad de Ingeniería Química, Santiago del Estero 2829, Santa Fe, CP:3000, Argentina.

**e-mail: edbanus@fiq.unl.edu.ar*

Resumen

Se sintetizaron catalizadores basados en Mn-Ce para su aplicación en la oxidación catalítica de hollín diésel. Para ello, se prepararon soluciones acuosas a partir de nitratos de Mn y Ce en diferentes proporciones en presencia y ausencia de ácido cítrico y se calcinaron directamente en aire. Se evaluó el efecto de diferentes variables de síntesis en las propiedades fisicoquímicas y catalíticas de los sistemas preparados. Los sistemas preparados en presencia de ácido cítrico mostraron una alta interacción entre Mn y Ce. Mediante diferentes técnicas de caracterización se evidenció una fuerte influencia de las variables de preparación en la proporción de Mn_2O_3 y Mn_3O_4 presentes en los sistemas. Además, se observó que para una relación $Mn/(Mn+Ce) < 0,25$ los iones Mn se incorporan dentro de la red de la ceria formando una solución sólida con elevada actividad catalítica.

Palabras clave: hollín diesel, MnO_x - CeO_2 , ácido cítrico.

Abstract

Mn-Ce-based catalysts were synthesized for their application in catalytic diesel soot oxidation. For this purpose, aqueous solutions of Mn and Ce nitrates in different proportions, in the presence and absence of citric acid, were prepared. Finally, these solutions were calcined in air. The effect of the synthesis parameters on the physicochemical and catalytic properties was evaluated. Catalysts prepared in the presence of citric acid showed a high interaction between Mn and Ce. Through different characterization techniques, an influence of the preparation variables on the Mn_2O_3 and Mn_3O_4 proportions was observed. Moreover, it was verified that a ratio of $Mn/(Mn+Ce) < 0.25$, led to the Mn ions incorporation into the ceria lattice to generate a solid solution with high catalytic activity.

Keywords: diesel soot, MnO_x - CeO_2 , citric acid.

QUANTITATIVE DRIFT-MS DETERMINATION OF INTERMEDIARIES AND SPECTATORS DURING CO OXIDATION ON GOLD CATALYSTS SUPPORTED ON NANO-FACETED {111} IN CeO₂ NANOCUBES

Aline Villarreal^{a,c,*}, Susana Fernandez^b, Miguel Tinoco², José Calvino², Xiaowei Chen², Sebastián Collins^a

^a Instituto de Desarrollo Tecnológico para la Industria Química (INTEC), Universidad Nacional del Litoral, CONICET, Güemes 3450, S3000GLN Santa Fe, Argentina.

^b Departamento de Ciencia de los Materiales e Ingeniería Metalúrgica y Química Inorgánica, Facultad de Ciencias, Universidad de Cádiz, Campus Río San Pedro, Puerto Real (Cádiz), E-11510, Spain

^c Departamento de Fisicoquímica, Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México. Cto. Exterior S/N, C.U., Coyoacán, 04510 Ciudad de México, CDMX.

*e-mail: scollins@santafe-conicet.gov.ar, aline.vime@gmail.com

Resumen

La oxidación de CO en catalizadores de oro se ha estudiado ampliamente como sistema modelo para otras reacciones heterogéneas y por su importancia para eliminar al CO de ambientes cerrados en donde puede causar daños a la salud. Una característica importante de estos catalizadores es la importante modificación de su actividad catalítica debido al soporte. Los catalizadores soportados en CeO₂ han demostrado mejor actividad catalítica especialmente si la morfología de la partícula conlleva una mayor reducibilidad del soporte. A pesar de los numerosos estudios, algunas preguntas acerca de la activación del oxígeno y la naturaleza del sitio activo han sido satisfactoriamente respondidas.

En este trabajo, se utilizó un catalizador de oro soportado en nanocubos de ceria nanoestructurados y un microreactor espectroscópico para determinar que en este catalizador se tiene un mayor número de oxígenos reactivos alrededor de las nanopartículas de oro que son capaces de oxidar al CO adsorbido en las nanopartículas. Adicionalmente, experimentos de espectroscopía de excitación modulada (MES) indicaron que estos oxígenos se consumen al alimentar CO y se reponen simplemente alimentando O₂ gaseoso. Una vez aplicado el algoritmo de detección sensible a la fase (PSD) los espectros obtenidos mostraron claramente la formación del intermediario CO-Au-O_{ads}.

Keywords: Catalizadores de oro, mecanismo de reacción, espectroscopia *operando*, oxidación de CO.

Abstract

CO oxidation in gold catalysts has been studied extensively as a model system for other heterogeneous reactions and for its importance in removing CO from closed environments where it can cause damage to health. An essential characteristic of these catalysts is the important modification of their catalytic activity due to the support. Catalysts supported on CeO₂ have shown better catalytic activity, especially if the morphology of the particle leads to greater reducibility of the support. Despite numerous studies, some questions about oxygen activation and the nature of the active site have not been satisfactorily answered.

In this work, a gold catalyst supported on nanostructured ceria nanocubes and a spectroscopic microreactor was used to determine that this catalyst has a greater number of reactive oxygens around the gold nanoparticles that can oxidize the CO adsorbed on the nanoparticles. Additionally, modulated excitation spectroscopy (MES) experiments indicated that these oxygens are consumed by feeding CO and replenished simply by feeding O₂ gas. Once the phase-sensitive detection algorithm (PSD) was applied, the spectra obtained showed the formation of the intermediate CO-Au-O_{ads}.

Keywords Au catalysts, reaction mechanism, *operando* spectroscopy, CO oxidation.

OBTENCIÓN DE MATERIALES CATALÍTICOS A BASE DE HIERRO A PARTIR DE LLANTAS RESIDUALES Y SU POSIBLE APLICACIÓN EN SÍNTESIS FISCHER-TROPSCH

Sebastian Amar Gil^{a, b}, Alba N. Ardila A.^{b*}, Rolando Barrera Zapata^a

^a Grupo de Investigación CERES Agroindustria & Ingeniería, Departamento de Ingeniería Química, Universidad de Antioquia, 050010, Medellín, Colombia

^b Grupo de Investigación en Catálisis Ambiental y Energías Renovables, Politécnico Colombiano Jaime Isaza Cadavid, 050010, Medellín, Colombia

*e-mail: anardila@elpoli.edu.co

Resumen

Las llantas residuales fueron empleadas como materia prima para el desarrollo de catalizadores basados en hierro con posible aplicación en la síntesis Fischer-Tropsch. Para ello, se emplearon etapas de proceso como tratamiento ácido, precipitación y pirólisis. El tratamiento realizado al caucho de llanta residual con ácido sulfúrico permitió incrementar cerca de un 22% el rendimiento hacia carbón derivado de llanta, debido a la remoción de rellenos inorgánicos empleados en la fabricación de llantas (Fe, Ni y Zn), igualmente, fue posible obtener una sal precursora ($\text{FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$) a partir del acero residual de llanta con características similares al sulfato de hierro heptahidratado comercial (Merck). Finalmente, se logró sintetizar catalizadores basados en hierro, donde la carga de Fe fue analizada por espectroscopia de absorción atómica, obteniendo pérdidas de Fe según la carga teórica cercanas al 7, 8 y 1% para los catalizadores con 1, 3 y 5% de Fe, respectivamente.

Palabras clave: Catalizadores Fischer-Tropsch, Carbón derivado de llanta, Llantas residuales.

Abstract

Waste tires were used as raw material for the development of iron-based catalysts with possible application in Fischer-Tropsch synthesis. For this purpose, process steps such as acid treatment, precipitation and pyrolysis were used. The treatment of residual tire rubber with sulfuric acid increased the yield towards tire-derived carbon by about 22%, due to the removal of inorganic fillers used in the manufacture of tires (Fe, Ni and Zn), and it was also possible to obtain a precursor salt ($\text{FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$) from the residual tire steel with similar characteristics to commercial iron sulfate heptahydrate (Merck). Finally, it was possible to synthesize iron-based catalysts, where the Fe loading was analyzed by atomic absorption spectroscopy, obtaining Fe losses according to the theoretical loading close to 7, 8 and 1% for the 1, 3 and 5% Fe catalysts, respectively.

Keywords: Catalysts, Tire-derived carbon, Waste tires, Fischer-Tropsch.

REFORMADO CATALÍTICO DE ALQUITRANES MODELOS DERIVADOS DE LA GASIFICACIÓN DE RESIDUOS AGROFORESTALES

García Lina^{a,b}, Córdoba Misael^{a,*}, Dosso Liza^a, Vera Carlos^a, Busto Mariana^a, Badano Juan^a

^aINCAPE, Instituto de Investigaciones en Catálisis y Petroquímica (FIQ-UNL, CONICET), Colectora Ruta Nacional 168 Km 0 – Predio CCT-Conicet Dr. Alberto Cassano Santa Fe, Argentina.

^bGrupo de Investigación Ciencia e Ingeniería en Sistemas Ambientales (GCISA), Facultad de Ingeniería Civil, Universidad del Cauca, calle 5 No. 4-70, Popayán Cauca, Colombia.

^cGrupo de Investigación en Catálisis, Facultad de Ciencias Naturales, Exactas y de la Educación, Universidad del Cauca, calle 5 No. 4-70, Popayán-Cauca, Colombia.

*e-mail:mcordoba@fiq.unl.edu.ar

Resumen

El trabajo estudia el reformado catalítico en fase vapor de una mezcla modelo de alquitranes (Tolueno, Xileno, Etilbenceno, Cumeno, Quinoleína, Naftaleno y Fenol) sobre diferentes catalizadores en un reactor de lecho fijo. La efectividad del catalizador derivado del residuo carbonoso de pirólisis de residuos de plástico es comparado con 3 catalizadores comerciales de Fe/C, NiMo/Al y Dolomita. Se estudia el efecto de la temperatura (600-700 °C), el tiempo de reacción (30-240 min), el W/F (6.2 y 12.2) y la relación mezcla alquitrán/ agua (10/2, 10/1 y 10/0) sobre la conversión, la relación H₂/CO y la desactivación del catalizador. Se cuantifican los depósitos carbonosos a través de TPO, donde se observa una correlación con la desactivación y el comportamiento catalítico. El aumento de temperatura favorece al catalizador de NiMo/Al manteniendo conversión total los 240 min de reacción, pero con el valor más bajo de H₂/CO de 2. El residuo de pirólisis presenta una actividad similar a los catalizadores evaluados a 600°C (X = 50%) pero con la mejor relación de H₂/CO cercana a 4, lo que hace que este catalizador sea desde lo comercial y ambiental, una opción altamente viable por ser un subproducto de los procesos industriales de pirólisis/gasificación.

Palabras claves: Reformado, Catalizador, Alquitrán, gas de síntesis.

Abstract

Catalytic steam reforming of tar model solution (Toluene, Xylene, Ethylbenzene, Cumene, Quinoline, Naphthalene and Phenol) over different catalyst was carried out in a fixed bed reactor. The effectiveness of pyrolysis char residue from plastic waste is compared with other 3 commercial catalyst of Fe/C, NiMo/Al y Dolomite. The effect of temperature (600-700 °C), reaction time (30-240 min), the W/F (6.2 and 12.2) and relation tar/water (10/2, 10/1 y 10/0) on conversion, H₂/CO ratio and catalyst deactivation was studied. The carbonaceous deposits were quantified through TPO, where a correlation is observed with the deactivation and the catalytic behavior. An increase temperature enhances NiMo/Al activity nearly 100% for 240 min of reaction with the lower value of H₂/CO of 2. The pyrolysis char residue has a similar activity to evaluated catalysts at 600 °C (X = 50%) but it has the best H₂/CO ratio near to 4, which makes this catalyst will be from commercial and environmental, an option highly viable for being a by-product of pyrolysis/gasification processes.

Keywords: Reforming, Catalyst, Tar, Syngas.

ESTUDIO DE CATALIZADORES BIMETÁLICOS Pd-Ni EN LA PURIFICACIÓN OLEFÍNICA Y ADSORCIÓN DRIFT IN-SITU

Cordoba Misael^{a,b,*}, García Lina^{a,c}, Bovier Luciana^a, Badano Juan^a, Betti Carolina^a, Quiroga Mónica^a, Lederhos Cecilia^a

^a INCAPE, Instituto de Investigaciones en Catálisis y Petroquímica (FIQ-UNL, CONICET), Colectora Ruta Nacional 168 Km 0 – Predio CCT-Conicet Dr. Alberto Cassano Santa Fe, Argentina.

^b Grupo de Investigación en Catálisis, Facultad de Ciencias Naturales, Exactas y de la Educación, Universidad del Cauca, calle 5 No. 4-70, Popayán-Cauca, Colombia.

^c Grupo de Investigación Ciencia e Ingeniería en Sistemas Ambientales (GCISA), Facultad de Ingeniería Civil, Universidad del Cauca, calle 5 No. 4-70, Popayán-Cauca, Colombia.

*e-mail: mcordoba@fiq.unl.edu.ar

Resumen

En este trabajo, se estudió el orden de impregnación del segundo metal y las propiedades catalíticas en catalizadores bimetálicos de Pd y Ni soportados, los cuales fueron empleados en la hidrogenación selectiva de 1-pentino en mezcla de 1-pentino/1-pentino 70/30 % vol para la purificación de olefinas. Para conocer las propiedades catalíticas se realizaron técnicas tales como: ICP, TEM, XPS, TPD-Piridina y la adsorción DRIFT *In-Situ* del 1-pentino puro. Como reacción test se realizó la hidrogenación selectiva de 1-Pentinopuro permitiendo observar la actividad y selectividad en los bimetálicos evaluados previo a la purificación olefínica. Los resultados mostraron que los catalizadores sintetizados son activos y muy selectivos ($\geq 85\%$) a la obtención del producto deseado (1-pentino), además se observaron diferentes especies adsorbidas ($-C\equiv C-$ y $-C=C-$) sobre la superficie de los bimetálicos mediante el análisis DRIFT *In-Situ*, que pueden promover la alta selectividad observada. El orden de impregnación de los metales modifica las propiedades electrónicas y geométricas del catalizador final, teniendo el mejor comportamiento catalítico cuando el Pd es impregnado en segundo lugar: Ni-Pd/Soportado. Los resultados muestran que los catalizadores bimetálicos sintetizados tienen propiedades favorables y son promisorios para las reacciones de purificación de olefinas.

Palabras clave: Bimetálicos, Alquinos, DRIFT *In-Situ*, Alqueno, Hidrogenación Selectiva.

Abstract

In this work, the impregnation order of the second metal and the catalytic properties of Pd and Ni bimetallic supported, which were used in the selective hydrogenation of 1-pentyne in a mixture of 1-pentene/1-pentyne 70/30% vol for the purification of olefins, were studied. To determine the catalytic properties, techniques such as: ICP, TEM, XPS, TPD-Pyridine and in-situ DRIFT adsorption of pure 1-Pentyne were carried out. As a test reaction, the selective hydrogenation of pure 1-Pentyne was carried out, allowing to analyze the activity and selectivity in the bimetallic catalysts evaluated prior to olefinic purification. The results showed that the synthesized catalysts are active and very selective ($\geq 85\%$) in obtaining the desired product (1-pentene), also different adsorbed species ($-C\equiv C-$ and $-C=C-$) were observed on the bimetallic Surface using in-situ DRIFT analysis, which can promote the high selectivity observed. The order of impregnation of the metals modifies the electronic and geometric properties of the final catalyst, obtaining the best catalytic performance when the Pd is impregnated in second place: Ni-Pd/Supported. The results show that the bimetallic catalysts synthesized have favorable properties and are promising for olefin purification reactions.

Keywords: Bimetallic, Alkynes, In-situ DRIFT, Alkene, Selective Hydrogenation.

CATALIZADORES BIMETÁLICOS BASADOS EN Ni-Co PARA LA OBTENCIÓN DE HIDRÓGENO VÍA REFORMADO DE ETANOL

Romero C. Leticia del C.^a, Gómez Manuel F.^a, Barroso Mariana N.^{a*}

^a Instituto de Investigaciones en Tecnología Química, INTEQUI (UNSL-CONICET), Almirante Brown 1455, 5700, San Luis, Argentina

*e-mail: mnbarro@unsl.edu.ar.

Resumen

Se prepararon catalizadores mono- y bimetalicos de Ni-Co soportados en $\text{MgAl}_2\text{O}_4\text{-CeO}_2$ a través del método sol-gel. Los sólidos se calcinaron en atmosfera reductora para obtener las fases metálicas de Ni y/o Co. Se estudió la influencia del contenido de Co (1, 3 y 5 % p/p) en catalizadores bimetalicos conteniendo un 8% p/p de Ni. Los catalizadores fueron caracterizados por S_{BET} , AA, DRX y RTP. Los DRX de las muestras reducidas no revelaron la presencia de Ni y/o Co o la posible formación de una aleación metálica, lo que sugiere que el tamaño de las partículas metálicas es menor al límite de detección de la técnica (4 nm). Los catalizadores fueron evaluados en la reacción de reformado de etanol con vapor a 650 °C y un tiempo de reacción de 7 h. Los resultados mostraron que la actividad catalítica y la selectividad a H_2 se ve favorecida en los catalizadores bimetalicos. Los principales productos de reacción fueron H_2 , CO_2 , CO y en menor cantidad CH_4 , siendo la selectividad a H_2 superior al 80%.

Palabras Clave: método sol-gel, catalizadores bimetalicos, Ni-Co, Ce- MgAl_2O_4 , hidrógeno.

Abstract

Mono- and bimetallic Ni-Co catalysts supported on $\text{MgAl}_2\text{O}_4\text{-CeO}_2$ were prepared by the sol-gel method. The solids were calcined in a reducing atmosphere to obtain the Ni and/or Co metal phases. The influence of the cobalt content (1, 3 and 5% w/w) was studied on bimetallic catalysts containing 8% w/w of Ni. The catalysts were characterized by S_{BET} , AA, XRD and TPR. XRD patterns of the reduced samples did not reveal the presence of Ni and/or Co, or the possible formation of a metallic alloy, which suggests that the metallic particles size is less than the technique detection limit (4 nm). The catalysts were evaluated in the ethanol steam reforming reaction at 650 °C for 7 h. The results showed that the catalytic activity and the H_2 selectivity is favored in bimetallic catalysts. The main reaction products were H_2 , CO_2 , CO and, to a lesser extent, CH_4 , being the hydrogen selectivity greater than 80%.

Palabras Clave: sol-gel method, bimetallic catalysts, Ni-Co, Ce- MgAl_2O_4 , hydrogen.

EFFECTO PROMOTOR DEL Fe EN CATALIZADORES A BASE DE ÓXIDOS DE W PARA LA ODS

Manuel. A. Taboada-Ortega^a, Marco A. Alvarez-Amparán^b, Luis Cedeño-Caero^a

^a *Departamento de Ingeniería Química, Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad de México 04510, México*

^b *Instituto de Ingeniería, Coordinación de Ingeniería Ambiental, Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad de México 04510, México*

*e-mail: caero@unam.mx

Resumen

Se prepararon y evaluaron catalizadores soportados de WFe para la desulfuración oxidativa de compuestos dibenzotiofenos. Los catalizadores fueron sintetizados en pseudo-bohemita para determinar el efecto promotor de las especies de Fe. Se evaluó el efecto del método de preparación de los catalizadores (impregnación sucesiva vs impregnación simultánea), el contenido de W (10 y 20 % m/m) y el efecto de la reducción parcial de las especies soportadas. Los catalizadores fueron caracterizados por SEM-EDS, fisisorción de N₂ y reducción a temperatura programada. La actividad catalítica fue discutida en términos de las constantes cinéticas de pseudo-primer orden y las especies superficiales. Se observó que la actividad catalítica se incrementó hasta siete veces para los catalizadores parcialmente reducidos y preparados por impregnación sucesiva. Los resultados de las caracterizaciones permitieron inferir que la actividad catalítica de ODS fue promovida por la presencia de especies octaédricas de W (WO₆), posiblemente en forma polimérica. El Fe interactúa fuertemente con el soporte (posiblemente como Fe₃O₄) y se inserta en los huecos y defectos de la Al₂O₃, promoviendo la mayor exposición de las especies de W. El uso de catalizadores WFe permite cumplir con la especificación de los combustibles de ultrabajo contenido de azufre (< 10 ppm).

Palabras clave: Desulfuración oxidativa, Catalizadores soportados de W, Compuestos dibenzotiofeno, Combustibles de ultrabajo contenido de azufre, Catalizadores soportados de W-Fe.

Abstract

Supported WFe catalysts were synthesized and tested for the oxidative desulfurization of dibenzothiophene compounds. Pseudo-boehmite was used as Al₂O₃ source to determine the promoter effect of Fe species. The impregnation method (successive impregnation vs simultaneous impregnation), the W loading (10 or 20% wt./wt.) and the partial reduction of the supported species were tested. SEM-EDS, N₂-physisorption and temperature programmed reduction (TPR) were used to the physicochemical characterization of the catalysts. The catalytic activity was discussed in terms of pseudo-first order kinetic constants and surface species. The catalytic activity increased up to seven-fold for the partially reduced catalysts and synthesized by successive impregnation. The catalytic activity was promoted by the octahedral W species (WO₆), possibly in polymeric form. The Fe could interact strongly with the support (maybe as Fe₃O₄) and it is added in the holes and defects of the Al₂O₃, promoting the distribution and exposition of the W species. The WFe catalysts allow to meet the regulations to ultra-low sulfur diesel (<10 ppm S).

Keywords: Oxidative desulfurization, W based catalysts, dibenzothiophene compounds, ultra-low sulfur fuels, W-Fe based catalysts.

SÍNTESIS EN UN SÓLO PASO DE CATALIZADORES ÁCIDOS Sn-KIT-6. EFECTO DE LA RELACIÓN Si/Sn EN LA VALORIZACIÓN DE GLUCOSA

Rosalía Cortés Cerón^a, Horacio González^{a,*}, Aída Gutiérrez-Alejandre^b, Edgar Tututi-Ríos^a, José L. Rico^a, Alejandra Vargas Tah^a, Dora A. Solís-Casados^c

^a Facultad de Ingeniería Química, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, 58060, Morelia, Mich., México.

^b UNICAT Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México, 04510, Ciudad de México, México.

^c Centro Conjunto de Investigación en Química Sustentable, UAEM-UNAM, 50200, Toluca, México.

*e-mail: horacio.gonzalez@umich.mx

Resumen

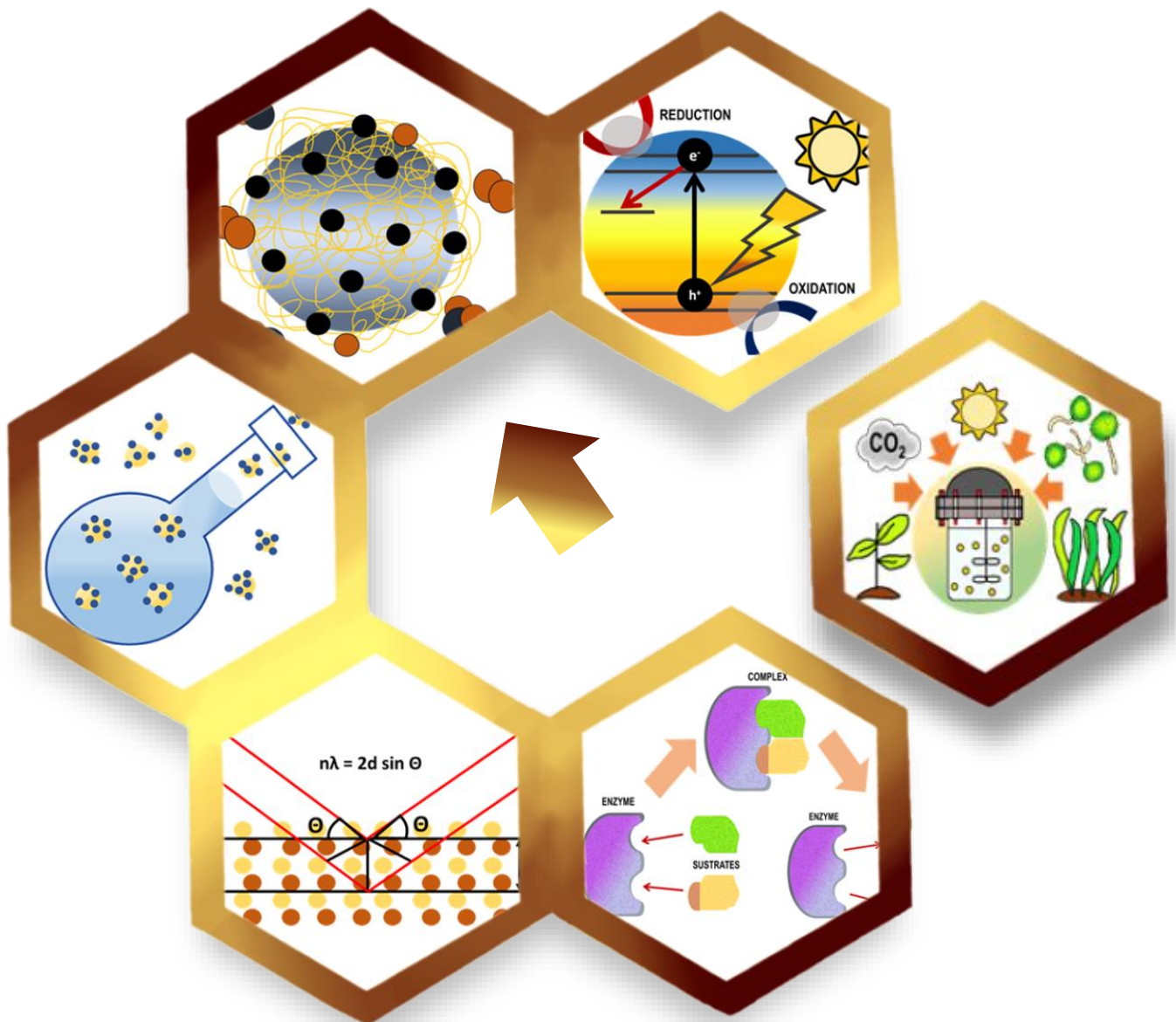
En este trabajo se estudió la influencia de la relación molar Si/Sn sobre las propiedades estructurales, texturales, especies de estaño presentes y acidez de los materiales Sn-KIT-6 en la conversión de glucosa hacia productos valiosos de plataforma, como fructosa y 5-hidroximetilfurfural. Los catalizadores Sn-KIT-6 se prepararon mediante el método sol-gel a partir de la hidrólisis de tetraetilortosilicato (TEOS) y cloruro de estaño pentahidratado ($\text{SnCl}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$), utilizando Pluronic P123 como tensoactivo a 35°C, y posterior calcinación a 550°C. Se sintetizaron catalizadores con diferente relación molar Si/Sn (80, 60 y 40) y se caracterizaron por SAXRD, SEM, Fisisorción de N_2 , UV-Vis-DRS, MP-AES y determinación de acidez total por titulación. Los resultados evidenciaron la formación de la estructura cúbica típica del material KIT-6 (*Ia3d*), áreas específicas altas entre 715.4 y 782.5 m^2/g , diámetros de poro que alcanzan los 7.8 nm y volumen de poro de $\sim 1.1 \text{ cm}^3/\text{g}$. Todas las muestras Sn-KIT-6 presentaron una mayor proporción de especies tetraédricas de estaño, asociadas con sitios ácidos de Lewis, además exhibieron formación de nanopartículas de SnO_2 dependiendo de la relación molar utilizada. Por último, se observó una relación estrecha entre la concentración de sitios ácidos en los catalizadores y la conversión de Glucosa.

Palabras clave: mesoporoso, KIT-6, estaño, sol-gel, glucosa, HMF.

Abstract

In this work, we studied the influence of the Si/Sn molar ratio on the morphological, structural, textural properties, existing tin species and acidity of Sn-KIT-6 materials, on the conversion of glucose to valuable platform products, such as fructose and 5-hydroxymethylfurfural. The Sn-KIT-6 catalysts were prepared by the sol-gel method from the hydrolysis of tetraethylorthosilicate (TEOS) and tin chloride pentahydrate ($\text{SnCl}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$) using Pluronic P123 as a surfactant at 35°C, and subsequent calcination at 550°C. Catalysts with different Si/Sn molar ratios (80, 60 and 40) were synthesized and characterized by SAXRD, SEM, N_2 fission, UV-Vis-DRS, MP-AES and determination of total acidity by titration. The results showed the formation of the typical cubic structure of the KIT-6 (*Ia3d*) material, high specific areas between 715.4 and 782.5 m^2/g , pore diameters reaching 7.8 nm and pore volume of $\sim 1.1 \text{ cm}^3/\text{g}$. All Sn-KIT-6 samples presented a higher proportion of tetrahedral tin species, associated with Lewis acid sites, they also exhibited formation of SnO_2 nanoparticles depending on the molar ratio used. Finally, the concentration of acid sites on catalysts was closely related to glucose conversion.

Keywords: mesoporous, KIT-6, tin, sol-gel, glucose, HMF.



SESIÓN ORAL 2

THIOPHENE-BASED OLIGOMERS FORMED *in-situ* – A NOVEL SENSITIZER OF TiO₂/HY HYBRID MATERIAL

Alejandro Suárez-Méndez^a, Julio C. López-Curiel^b, Gustavo A. Fuentes^b, Benito Serrano-Rosales^c, Epifanio Morales-Zárate^a, Victor M. Rivera^{a,*}

^a Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Veracruzana, 91000, Xalapa, México

^b Depto. Ing. Procesos e Hidráulica, Universidad A. Metropolitana, 09340, Ciudad de México, México

^c Unidad de Ingeniería Química, Universidad Autónoma de Zacatecas, 98160, Zacatecas, México

*e-mail: vicrivera@uv.mx

Resumen

El dióxido de titanio (TiO₂) o titania es únicamente fotoactivo en luz ultravioleta ($\lambda \leq 390$ nm), lo cual limita sus aplicaciones al desaprovechar el resto del espectro electromagnético. En ese sentido, distintos sensibilizadores se han utilizado para incrementar el rango de fotorespuesta del semiconductor, donde los sistemas π -conjugados son prometedores para este fin. De este modo, se propuso el uso de oligómeros de tiofeno protonados (OT_n⁺) como sensibilizadores, por su presencia en el espectro de luz visible y su estabilidad térmica y química; estos son formados por la interacción entre el monómero de tiofeno y zeolita Y protónica (HY). En este trabajo, se presenta la síntesis, caracterización y evaluación fotocatalítica de un novedoso material híbrido, TiO₂-OT_n⁺/HY. Este material se sintetizó por el método sol-gel, obteniendo nanopartículas depositadas en la superficie de la HY. La formación de los OT_n⁺ se corroboró por espectroscopía UV-Vis y resonancia magnética nuclear de ¹³C y su identificación va desde el monómero de tiofeno protonado hasta el pentatíofo protonado. Así mismo, los experimentos fotocatalíticos demostraron que los materiales con los OT_n⁺ degradaron mayor porcentaje de naranja de metilo que los materiales sin sensibilizar, de modo que se presenta un material activo usando luz visible.

Keywords: zeolite Y, oligómeros de tiofeno, dióxido de titanio, sensibilizador, fotocatalizador.

Abstract

Titanium dioxide (TiO₂) or titania is only photoactive under ultraviolet irradiation ($\lambda \leq 390$ nm), that limits its applications under visible light. Different sensitizers have been used to increase the semiconductor's photo-response range, and π -conjugated systems are promising for this application. In this work, the use of protonated thiophene-based oligomers (OT_n⁺) as sensitizers, was tested, for its characteristics such as thermal and chemical stability. These compounds can be formed by the reaction of thiophene and Brönsted acid sites on protonic zeolite Y. This work presents the synthesis, characterization, and photocatalytic evaluation of a novel hybrid material, TiO₂-OT_n⁺/HY. The composite was synthesized by an acid-catalyzed sol-gel method obtaining nanoparticles of TiO₂ attached to zeolite Y crystals; the OT_n⁺ were corroborated by ¹³C nuclear magnetic resonance and UV-Vis spectroscopy, species from the protonated thiophene monomer to the protonated pentathiophene were identified. Moreover, the photocatalytic experiments showed that the materials with OT_n⁺ were faster than non-sensitized materials in the methyl orange degradation, in this way, a visible light active material is presented.

Keywords: zeolite Y, thiophene-based oligomer, titanium dioxide, sensitizer, photocatalyst.

NOVEL HYDROTHERMAL-ASSISTED MICROWAVE SYNTHESIS OF NiTiO₃/ZnO AND SONOPHOTOCATALYTIC EFFECT FOR DEGRADATION OF RHODAMINE B

A. Sebastian Galindo-Luna^a, M.E. Zarazua Morín^a, V.J. Gallegos-Sánchez^b, Brenda Zermeno^c, L. M. Torres-Martínez^a

^a Universidad Autónoma de Nuevo León, UANL, Facultad de Ingeniería Civil, Departamento de Ecomateriales y Energía, Av. Universidad S/N, Ciudad Universitaria, C.P. 66455, San Nicolás de los Garza, Nuevo León, México

^b Universidad Tecnológica General Mariano Escobedo, Libramiento Noreste Km 33.05, C.P. 66050, General Escobedo N.L., México

^c Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Autónoma de San Luis Potosí, Av. Manuel Nava # 6, San Luis Potosí C.P. 78290, S.L.P., México

*arthur.cbastian@gmail.com

Resumen

Se reporta la síntesis a baja temperatura de NiTiO₃/ZnO utilizando el método microondas asistido por hidrotermal para la degradación fotocatalítica y sonofotocatalítica del colorante rodamina B. Los patrones de DRX revelaron las fases puras de los materiales, mientras que la morfología muestra prismas hexagonales de ZnO mezclados con partículas aglomeradas de NiTiO₃. Los valores de E_g variaron entre 2.2 y 2.9 eV. Las curvas de fotoluminiscencia muestran que NiTiO₃/ZnO (90:10) presentó la menor intensidad de emisión, indicando una menor recombinación de cargas. En la evaluación sonofotocatalítica de este óxido se logró el 95% de degradación del colorante RhB en 120 min, mientras que, los óxidos puros alcanzaron un 74%, incrementando un 35% la eficiencia y aumentando la velocidad de reacción 4 veces, comparado con las pruebas fotocatalíticas. Los análisis FTIR muestran que la descomposición de la molécula por sonofotocatálisis favoreció la ruptura de los enlaces C-C, C-O y C-N. Por lo tanto, los óxidos NiTiO₃/ZnO pueden ser considerados como materiales activos para su aplicación en procesos fotoinducidos favoreciendo la separación de cargas debido a la heterounión entre ambos semiconductores, incrementando durante los procesos sonofotocatalíticos la formación de radicales más reactivos.

Palabras clave: NiTiO₃/ZnO, Óxidos mixtos, Microondas asistido por hidrotermal, Sonofotocatálisis, Rodamina B.

Abstract

This paper presents synthesis hydrothermal-assisted microwave method at low temperature of NiTiO₃/ZnO for photocatalytic and sonophotocatalytic degradation of rhodamine B dye. XRD patterns revealed the presence pure phases of the materials, whereas morphology by SEM clearly indicates the presence of hexagonal nanorods-prisms of ZnO mixed with agglomerated particles of NiTiO₃. Photocatalysts showed energy band gap values between 2.2 at 2.9 eV allowing their activation under visible light irradiation. PL curves corroborated that NiTiO₃/ZnO with 90:10 ratio is the one that presented the lowest intensity indicating less electron-hole pair recombination. Results of sonophotocatalytic activity achieved almost 95% dye degradation in 120 min for NiTiO₃/ZnO (90:10), while the pure oxides degraded up to 74%. Obtaining a 35% increase in efficiency and increasing the reaction rate up to 4 times compared to photocatalytic tests. FTIR analyses show the decomposition of the molecule by sonophotocatalysis which favors the breaking of C-C, C-O and C-N bonds. In conclusion, synthesis of NiTiO₃/ZnO achieved a synergy between both oxides, enhanced the electron-hole separation due to heterojunction between both semiconductors, which during sonophotocatalytic processes favored the formation of more reactive radicals. Therefore, NiTiO₃/ZnO oxides can be considered as active materials for application in photoinduced processes.

Keywords: NiTiO₃/ZnO, Mixed oxides, Hydrothermal-assisted microwave, Sonophotocatalysis, Rhodamine B.

AN EFFECTIVE PHOTOCATALYTIC SYSTEM TO ELIMINATE CARBAMAZEPINE FROM WASTEWATER

Gerbaldo María Verónica^{a,*}, Elías Verónica Rita^a, Mendieta Silvia Nazaret^a, Crivello Mónica Elsie^a

^a Centro de Investigación y Tecnología Química (CITeQ – UTN – CONICET), Universidad Tecnológica Nacional, Facultad Regional Córdoba, CP 5000, Córdoba, Argentina.

*mgerbaldo@frc.utn.edu.ar, veronicagerbaldo@gmail.com

Resumen

Los compuestos farmacéuticos como la carbamazepina, son considerados contaminantes emergentes y han sido detectados en cursos de agua superficiales y aguas residuales en diferentes lugares del mundo. Su presencia ha sido demostrada en los ríos sudamericanos, en particular en el río Suquía ubicado en la provincia de Córdoba, Argentina. Numerosos estudios recientes señalan que las ferritas presentan propiedades para ser empleadas como fotocatalizadores en la degradación de contaminantes. En este trabajo se sintetizaron, caracterizaron y testearon ferritas de cobalto, níquel y zinc. Mediante difracción de rayos X se determinó que todos los materiales presentaron estructura de espinela. Una solución de 10 mg/L de carbamazepina fue mineralizada en un 98% en 4 horas de fotoreacción. Se empleó un sistema fotocatalítico con una lámpara Uv-germicida, peróxido de hidrógeno como agente oxidante y los materiales sintetizados como catalizadores. La ferrita de cobalto fue el material que mostró una mayor mineralización en las primeras muestras de reacción.

Palabras clave: fotocatalisis, carbamazepina, ferritas espinelas, degradación, aguas residuales.

Abstract

Pharmaceuticals compounds, like carbamazepine, are emerging pollutants that have been detected in wastewater and surface waters throughout the world. Their presence was demonstrated in South American rivers, particularly in the Suquía River basin, Córdoba, Argentina. There are several recent studies of applications of ferrites as photocatalyst used in the degradation of pollutants were reported. In this work cobalt, nickel and zinc ferrites synthesized by Pechini method were characterized and tested. By X-ray diffraction patterns were determined that all samples had spinel structure. A solution of 10 mg/L of carbamazepine was 98% mineralized on a photocatalytic system using Uv-germicide lamp, hydrogen peroxide as oxidant and synthesized ferrites as catalyst in 4 hours of photoreaction. The cobalt ferrite had the highest mineralization at the first reaction samples.

Keywords: photocatalysis, carbamazepine, spinel ferrites, degradation, wastewater.

**PHOTOCATALYTIC WATER SPLITTING AND CARBON DIOXIDE REDUCTION OVER
Na₂Ti₃O₇ DEPOSITED WITH M_xO_y (M = Co AND Cu) CO-CATALYSTS**

Luis F. Garay-Rodríguez^{a*}, Leticia M. Torres-Martínez^{a,b}, Isaías Juárez-Ramírez^a, Hisao Yoshida^c

^a Departamento de Ecomateriales y Energía / Facultad de Ingeniería Civil / Universidad Autónoma de Nuevo León, CP 66450, San Nicolás de los Garza, N. L., México

^b Centro de Investigación en Materiales Avanzados, S.C. / CP 31136, Chihuahua, México

^c Graduate School of Human and Environmental Studies / Kyoto University / 615-8520, Kyoto, Japan

*e-mail: lfgarayr@gmail.com

Resumen

Muestras en forma de polvo de Na₂Ti₃O₇ (NT3) fueron preparadas por el método cerámico tradicional (Reacción del estado sólido) y depositadas con partículas de CuO y Co₃O₄ por medio de impregnación húmeda en diferentes concentraciones. Se presenta la caracterización estructural confirmando la formación de las fases puras y la presencia de los óxidos mencionados en forma de aglomerados de nanopartículas sobre la superficie del NT3. Las muestras fueron evaluadas en los procesos de “water splitting” y foto-reducción de CO₂ simultáneamente, siendo el primer proceso predominante tanto en las muestras puras como en las cargadas con los óxidos metálicos en bajas concentraciones. En contraparte, concentraciones por encima del 2% en peso incrementan la selectividad hacia la formación de CO y CH₄ para el Co₃O₄ y CuO, respectivamente. Desafortunadamente, existe una baja estabilidad en la fase NT3, la cual se fue transformando lentamente en la fase protonada H₂Ti₃O₇ conforme avanza el tiempo de iluminación. Sin embargo, no se observaron cambios en el proceso fotocatalítico como resultado de esta transición. En contraparte, se observó la reducción en las especies de CuO hacia Cu₂O durante la reacción a causa del medio reductor, promoviendo un incremento en la producción de hidrógeno, haciendo a éste el proceso predominante.

Keywords: Trititanato de sodio, Impregnación, Reducción de CO₂, “Water splitting”, estabilidad.

Abstract

Powder samples of Na₂Ti₃O₇ (NT3) were prepared by the traditional ceramic solid-state method and deposited with CuO and Co₃O₄ by wet impregnation in different concentrations. The structural characterization is presented confirming the formation of pure phases and the presence of the mentioned oxides as clusters of nanoparticles over the NT3 surface. The samples were evaluated in the photocatalytic water splitting and carbon dioxide reduction processes simultaneously, being the first process the dominant in pure and low metal oxide content samples. In contrast, concentrations up to 2 wt % of metal oxide increased the selectivity to CO and CH₄ for Co₃O₄ and CuO, respectively. Low stability was observed in the NT3 phase, which was slowly transformed to the H₂Ti₃O₇ during the illumination time; however, no changes were observed in the development as a result of this transition. In contrast, the CuO reduction to Cu₂O during reaction caused a change in the predominant process, being increased the H₂ production through the recycling reactions.

Keywords: Sodium trititanate, impregnation, CO₂ reduction, Water splitting, stability.

PHOTOCATALYTIC DEGRADATION OF HIGH CONCENTRATION AQUEOUS SOLUTIONS OF KETOPROFEN: ADSORPTION AND REACTION KINETIC STUDIES

Ilse Acosta^a, Edgar Moctezuma^a, Karla López de la O^a, Elisa Leyva^a, Brenda Zermeño^{a,*}

^a Laboratorio de Fotocatálisis/Facultad de Ciencias Químicas/Universidad Autónoma de San Luis Potosí, 78290, San Luis Potosí, México.

* brenda.zermeño@uaslp.mx

Resumen

Se estudió la degradación fotocatalítica de ketoprofeno, un medicamento antiinflamatorio no esteroideo, con concentraciones de hasta 50 ppm para calcular los parámetros de la isoterma de adsorción de LH- HW, determinar el efecto de la concentración inicial de reactante en la velocidad de reacción y para identificar los productos orgánicos más estables. Se usó TiO₂ Evonik-P25 como catalizador, irradiación UV y flujo constante de oxígeno. Se realizaron también, experimentos de adsorción de ketoprofeno en ausencia de luz con el objetivo de obtener información acerca de la interacción entre el ketoprofeno y la superficie del catalizador. El equilibrio de adsorción-desorción se alcanzó a los 30 minutos de interacción. De acuerdo a la isoterma de Langmuir, la capacidad de adsorción de la molécula orgánica sobre el catalizador es de 0.0672 mmoles de KTP por g de TiO₂ y la constante de adsorción es 1.771 L mM⁻¹. Los resultados experimentales en cuanto a la degradación fotocatalítica indican una completa mineralización de la molécula de ketoprofeno después de 6 horas de reacción para concentraciones de 50 ppm. La constante cinética de velocidad de reacción y los parámetros de adsorción de la ecuación de LH-HW resultaron ser de 0.14 min⁻¹ y 20.72 mM⁻¹ respectivamente. Mediante el análisis químico de las muestras de reacción por HPLC, TOC y espectroscopia UV-vis, se identificó como productos intermedios el ácido benzoico, hidroxi benzofenona, benzenotriol, hidroquinona, catecol, benzoquinona, y fenol.

Palabras clave: Ketoprofeno, degradación fotocatalítica, TiO₂.

Abstract

The photocatalytic degradation of ketoprofen, a non-steroidal anti-inflammatory medication, with concentrations up to 50 ppm was studied to evaluate the parameters of the LH-HW adsorption isotherm, determine the effect of initial reactant concentration on the reaction rate and to identify the most stable intermediate reaction products. TiO₂ Evonik-P25 was used as catalyst, UV radiation and constant flow of oxygen. Ketoprofen adsorption experiments under dark conditions were also carried out with the aim to get information about the interaction between ketoprofen and catalyst surface. Adsorption-desorption equilibrium was reached in 30 minutes of interaction. According to Langmuir isotherm, the maximum adsorption capacity of the organic molecule on the surface of TiO₂ is 0.0672 mmol KTP g⁻¹ TiO₂ and the adsorption constant is 1.771 L mM⁻¹. Experimental results in terms of photocatalytic degradation indicate a complete mineralization of ketoprofen molecule after 6 hours of reaction. The kinetic constant and adsorption parameters of the LH- HW equation are 0.14 min⁻¹ and 20.72 mM⁻¹ respectively. Through chemical analysis of reaction samples by HPLC, TOC and UV-vis spectroscopy, benzoic acid, hydroxy-benzophenone, benzenetriol, hydroquinone, catechol, benzoquinone and phenol were identified as intermediate products.

Keywords: Ketoprofen, photocatalytic degradation, TiO₂.

FOTORREDUCCIÓN DE 4-NITROFENOL EMPLEANDO NANOVARILLAS DE TiO₂ Y Ni-TiO₂

Ariana L. Jiménez Rodríguez^a, Dora M. Frías Márquez^a, Patricia Quintana^b, Rosendo López González^a, Orbelin de la Fuente^a, Cinthia García Mendoza^a, Ruth Lezama^a, David S. García Zaleta^b, Mayra A. Álvarez Lemus^{a*}

^a Laboratorio de Nanotecnología, División Académica de Ingeniería y arquitectura, CICTAT Universidad Juárez Autónoma de Tabasco, CP 86690, Cunduacán, México.

^b Laboratorio Nacional de Nano y Biomateriales, Dpto. de Física Aplicada, Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del IPN-Mérida, AP 143, Mérida, México.

^c Laboratorio de Materiales Avanzados, División Académica Multidisciplinaria de Jalpa de Méndez, Universidad Juárez Autónoma de Tabasco, CP 86205, Jalpa de Méndez, México.

Resumen

En el presente trabajo se investigó el efecto de la adición de níquel en las propiedades fotocatalíticas de nanovarillas de dióxido de titanio (TiO₂), obtenidas por el método hidrotermal.

Las nanovarillas se prepararon a través de dos etapas, la primera fue la obtención del TiO₂ y TiO₂ dopado con níquel en dos concentraciones (0.5 y 10% masa) mediante el proceso sol-gel y la segunda, para obtener la morfología de varillas a través del método hidrotermal empleando NaOH que posteriormente se estabilizaron a 400°C. La fase cristalina principal de las nanovarillas fue la anatasa con tamaño de cristalito alrededor de 11 nm, mientras que el valor de E_g más bajo se observó en el material con 0.5% de níquel (3.11 eV). Mientras que el análisis por fisisorción muestra que el tratamiento hidrotermal favorece la obtención de materiales con mayores áreas específicas BET que los materiales de partida siendo de 141, 185 y 153 m²/g para las muestras al 0,0.5 y 1.0% Ni. La microscopía electrónica de barrido confirmó la obtención de partículas en forma de varillas con diámetros de entre 10-20 nm y longitudes de 100-400 nm. Los análisis por XPS permitieron evaluar la presencia de deficiencias de oxígeno en la muestra al 1.0% hay una mayor proporción de especies de oxígeno tipo deficiencias con respecto a los oxígenos de grupos OH superficiales. La prueba fotocatalítica demostró que el catalizador con el 1.0% de níquel logró una mayor fotorreducción del 4-nitrofenol a 4-aminofenol, empleando dos distintas fuentes de radiación: UV (254 nm) y una lámpara de radiación solar simulada. En ambos casos se logró reducir el 100% del compuesto en 15 min (radiación solar) y en 40 min (λ=254 nm) en un primer ciclo, y para el segundo ciclo se logró reducir en un 63 y 78% respectivamente.

Palabras clave: 4-nitrofenol, 4aminofenol, nanovarillas de TiO₂, Fotorreducción.

Abstract

In this work we investigated the effect of nickel on the photocatalytic properties of TiO₂ nanorods. The photocatalysts were obtained in a two-stage procedure. First the sol-gel method was used for obtaining TiO₂ and Ni-TiO₂ at 0.5 and 1.0% of Ni(%wt), followed by hydrothermal treatment using highly alkaline conditions with NaOH. The obtained powders were thermally treated at 400°C. The main crystalline phase was anatase for all the samples, whereas the lower E_g value was estimated for 0.5%Ni sample (3.11 eV). Specific BET areas were obtained by N₂ physisorption being 141, 185, and 153 m²/g for 0.0,0.5, and 1.0% Ni samples, respectively. Scanning electron microscopy confirmed the obtaining of rod-shaped particles with diameters between 10-20 nm and 100-400 nm in length. XPS analysis showed the evidence of oxygen vacancies and surface hydroxyl oxygen species in all samples, but in a higher ratio for the 1.0%Ni sample. The photocatalytic test was performed using two different radiation sources: 254 nm and a simulated solar lamp, for the photoreduction of 4-nitrophenol to 4-aminophenol. The 1.0%Ni sample showed the higher efficiency reaching 100% of reduction after 15 min (solar simulated radiation) and 40 min (λ=254 nm) after a first cycle, while for the second cycle of the photocatalyst these values decreased to 63 and 78%, respectively.

Keywords: 4-nitrophenol, 4-aminophenol, TiO₂ nanorods, Photoreduction.

DEGRADACIÓN FOTOCATALÍTICA DEL 2,4,6-TRICLOROFENOL UTILIZANDO HIDROTALCITAS HT-CoFe ACTIVADAS

Esthela Ramos-Ramírez^{a,*}, Norma L. Gutiérrez-Ortega^b, Francisco Tzompantzi-Morales^c, Julio Castillo-Rodríguez^c, Gloria del Angel^c, Israel Rangel Vazquez^{a,c}, Mirella Gutiérrez^c, Raúl Pérez Hernández^d

^aLaboratorio de Materiales y Procesos Avanzados/Departamento de Química/División de Ciencias Naturales y Exactas (DCNE)/Noria Alta S/N, Col. Noria Alta, Universidad de Guanajuato, Guanajuato, Gto., México, C.P. 36050

^bDepartamento de Ingeniería Civil, División de Ingenierías, Universidad de Guanajuato. Av. Juárez 77 Centro Histórico, Guanajuato, Gto, México C.P. 36000

^cEcocatal/Departamento de Química/Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, Av. San Rafael Atlixco No. 186, Ciudad de México, México, C.P. 09340

^dDepartamento de Nanocatálisis, Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares. Carretera Toluca-México S/N, la Marquesa, Mex.

*e-mail: ramosre@ugto.mx, normagut@ugto.mx

Resumen

Se han buscado soluciones para el tratamiento de la contaminación del agua por compuestos tóxicos fenoles y clorofenoles, utilizados en la fabricación de pesticidas, insecticidas, la industria del papel, entre otros. El problema radica en que estos compuestos son muy persistentes en el medio ambiente porque son parcialmente biodegradables y no pueden ser fotodegradados directamente por la luz del sol. Los clorofenoles son extremadamente tóxicos, especialmente 2,4,6-triclorofenol que es potencialmente cancerígeno. En este trabajo, se presentan las hidrotalcitas Co/Fe activadas térmicamente como fotocatalizadores, obtenidas por coprecipitación con diferentes relaciones Co/Fe = 1, 2, 3 y 4. Los materiales se caracterizaron por Difracción de Rayos X, Análisis Térmico, Fisisorción de N₂ y Microscopía Electrónica de Barrido con Energía Dispersiva de Rayos-X. Los fotocatalizadores se probaron en la degradación de 2,4,6-triclorofenol en solución acuosa. Los materiales presentan la fase cristalina hidrotalcita, los cuales al ser activados a 500°C evolucionan térmicamente a óxidos mixtos. Los resultados muestran que los catalizadores tienen una buena actividad fotocatalítica con una eficiencia de degradación del 2,4,6-triclorofenol del 65% para HTM2-500°C, 58% HTM1-500°C, 50% HTM3-500°C y 33% para HTM4-50°C, valores de degradación superiores a la capacidad mostrada por el catalizador de referencia TiO₂-P25.

Palabras clave: fotocatalisis, hidrotalcitas co/fe, coprecipitación, clorofenoles, óxidos mixtos.

Abstract

Solutions for the treatment of water pollution have been sought for toxic compounds such as phenols and chlorophenols, used in the manufacture of pesticides, insecticides, the paper industry, among others. The problem is that these compounds are very persistent in the environment because they are partially biodegradable and cannot be directly photodegraded by sunlight. Chlorophenols are extremely toxic, especially 2,4,6-trichlorophenol which is potentially carcinogenic. In this work, thermally activated Co/Fe hydrotalcites are presented as photocatalysts, obtained by coprecipitation with different Co/Fe = 1, 2, 3 and 4 ratios. The materials were characterized by X-Ray Diffraction, Thermal Analysis, N₂ Physisorption and X-Ray Energy Dispersive Scanning Electron Microscopy. The photocatalysts were tested in the degradation of 2,4,6-trichlorophenol in aqueous solution. The materials present the crystalline hydrotalcite phase, which upon activation at 500°C thermally evolve to mixed oxides. The results show that the catalysts have a good photocatalytic activity with a 2,4,6-trichlorophenol degradation efficiency of 65% for HTM2-500°C, 58% HTM1-500°C, 50% HTM3-500°C and 33% for HTM4-50°C, which are degradation values higher than the capacity shown by the reference catalyst TiO₂-P25.

Keywords: Photocatalysis, Co/Fe Hydrotalcites, Coprecipitation, Chlorophenols, Mixed Oxides.

FOTO-ELECTRO REDUCCIÓN DE OXÍGENO UTILIZANDO g-C₃N₄ DECORADO CON NANO-ISLAS DE Pt, Ru o Pd

Uriel Caudillo-Flores^{a*}, Gabriel Alonso-Nuñez^a, Adriana Siguenza^b, Sergio Fuentes-Moyado^a

^a Universidad Nacional Autónoma de México, Centro de Nanociencias y Nanotecnología, 22800, Ensenada, B.C., México

^b Tecnológico Nacional de México/IT de Oaxaca, 68030, Oaxaca, Oax., Mexico

*e-mail: ucaudillo@gmail.com

Resumen

En este trabajo se evaluó la actividad fotoelectrocatalítica de una serie de materiales donde se utiliza como soporte nanoláminas de g-C₃N₄ decoradas con islas de nanopartículas de distintos metales (1% en peso de Pd, Ru o Pt). Los resultados obtenidos por TEM de cada uno de los materiales (Pd/g-C₃N₄, Ru/g-C₃N₄ y Pt/g-C₃N₄) muestran que el Pd, Ru y Pt se encuentran dispersas homogéneamente en la superficie del g-C₃N₄, formando islas de aglomerados de 5-10 nanopartículas (5 nm). De igual forma, los resultados de HRTEM y XPS, sugieren la presencia de distintas especies oxidadas del Ru, Pt y Pd con mayor cantidad en estado metálico. La evaluación fotoelectrocatalítica de los materiales en medio alcalino demuestra que los materiales g-C₃N₄ y Pd/g-C₃N₄ reducen el oxígeno molecular por la ruta de 2e⁻, mientras que los catalizadores Ru/g-C₃N₄ y Pt/g-C₃N₄ lo hacen por la ruta de 4e⁻. Considerando la baja cantidad de metal noble (normalmente utilizan 10-20 %) y el incremento en la densidad de corriente, de al menos 8 %, provocada por la combinación de ambas energías (luz visible y electricidad), hace a los materiales aquí obtenidos, atractivos para ser aplicados tanto para generación de H₂O₂ como para celdas de combustible.

Palabras clave: g-C₃N₄, Fotoelectrocatalisis, Luz visible, RRO.

Abstract

Here in was evaluated the photoelectrocatalytic performances of a series of Carbon nitride-based materials, which was used as support to deposit Pd, Ru or Pt (1 wt.%) nanoparticle-islands. TEM results showed the formation of Pd, Ru or Pt nanoislands (5-10 nanoparticles of 5 nm) homogeneously dispersed on g-C₃N₄ surface. HRTEM and XPS results suggest different oxidation states of the noble metals obtaining a higher concentration in metallic state than in metal oxide. Photoelectrocatalytic performance of the materials in an alkaline media demonstrates that g-C₃N₄ bare and Pd/g-C₃N₄ materials follow the 2e⁻ route to reduce de molecular oxygen, whilst Ru/g-C₃N₄ and Pt/g-C₃N₄ materials follow the 4e⁻ pathway. Considering both, the small amount of noble metal (1 wt.%) used in the materials here synthesized and the increase in the current density obtained with all materials by combining both lighting (visible light) and electric energies (at least 20% more than use only electric energy), make these g-C₃N₄ based materials suitable to be used in a potential application to H₂O₂ photoelectro-production or fuel cells.

Keywords: g-C₃N₄, Photoelectrocatalysis, Visible light, ORR.

SUPPORT EFFECT IN BIMETALLIC PARTICLES PtNi FOR HYDROGEN OXIDATION REACTION IN ALKALINE MEDIA

C. Silva-Carrillo^a, E.A. Reynoso-Soto^{a*}, S. Pérez-Sicairos^a, M.I. Salazar-Gastélum^a, B. Trujillo-Navarrete^a, R. M. Félix-Navarro^{a*}

^a Centro de Graduados e Investigación. Tecnológico Nacional de México - Instituto Tecnológico de Tijuana. C. P. 1166. Tijuana, B. C. 22000, México.

email: rmfelix@tectijuana.edu.mx

Resumen

Este trabajo reporta la síntesis, caracterización de partículas bimetalicas platino-níquel (Pt Ni) sobre materiales de carbono con diferente estructura, tales como, nanotubos de carbono (CNT) y carbón vulcano XC-72 (C). Los nanomateriales fueron sintetizados en dos etapas, en la primera se sintetizo la plantilla de Ni utilizando un método de microemulsión inversa. En la segunda etapa se incorpora el Pt mediante un el uso de un agente complejante y reducción directa. Los nanomateriales bimetalicos fueron caracterizados mediante diversas técnicas fisicoquímicas (TGA; SEM; ICP, BET) y electroquímicas (redisolución anódica de CO y reducción de β -NiOOH). Los nanomateriales bimetalicos fueron empleados como electrocatalizadores en la reacción de oxidación de hidrogeno (ROH) en medio básico. El electrocatalizador PtNi soportado sobre CNT mostró una mayor exposición de los metales en la superficie que los otros catalizadores, debido a la baja porosidad del soporte, aunque esta exposición también contribuyo con una menor estabilidad.

Abstract

This work reports the synthesis and characterization of platinum-nickel bimetallic particles (Pt Ni) on carbon materials with different structures, such as carbon nanotubes (CNT) and carbon vulcan XC-72 (C). The nanomaterials were synthesized in two stages, in the first the Ni template was synthesized using a reverse microemulsion method. In the second stage, the Pt is incorporated through the use of a complexing agent and direct reduction. The bimetal nanomaterials were characterized by various physicochemical (TGA; SEM; ICP,BET) and electrochemical techniques (anodic CO redissolution and reduction of β -NiOOH). Bimetallic nanoamterials were used as electrocatalysts in the hydrogen oxidation reaction (HOR) in a basic medium. The PtNi electrocatalyst supported on CNT showed a greater exposure of the metals on the surface than the other catalysts, due to the low porosity of the support, although this exposure also contributed to a lower stability.

Keywords: bimetallic, carbon support, HOR.

ELECTROCHEMICAL DETERMINATION OF GLUCOSE USING NITROGEN GRAPHENE

**E.A. Reynoso-Soto^a, R.M. Félix-Navarro^a, Y.Y. Rivera-Lugo^a, A. Lozano-Garcia^a,
C. Silva-Carrillo^a**

^a Centro de Graduados e Investigación. Tecnológico Nacional de México - Instituto Tecnológico de Tijuana. C.P. 1166. Tijuana, B. C. 22000, México.

e-mail: carolina.silvac@tectijuana.edu.mx

Resumen

En este trabajo se preparó grafeno nitrogenado mediante un paso por el método solvotermal, obteniendo pequeñas hojas de grafeno nitrogenada. Este material se empleó como sensores electroquímicos para catalizarla oxidación de glucosa mediante voltamperometria y redisolución catódica, en este sensor se monitoreo la señal de reducción de los ácidos glucónico La detección de glucosa se llevó a cabo a un pH neutro, se obtuvo una sensibilidad de 1.3767 $\mu\text{A}/\mu\text{M}$ de glucosa en un intervalo de 0 a 100 μM de glucosa. Se comparó con grafeno reducido y óxido grafeno como catalizador electroquímico para la oxidación de glucosa, estos mostraron un menor rendimiento.

Abstract

In this work, nitrogenous graphene was prepared by passing through the solvothermal method, obtaining small sheets of nitrogenous graphene. This material was used as an electrochemical sensor to catalyze the oxidation of glucose through voltammetry and cathodic redissolution; in this sensor, the gluconic acids reduction signal was monitored. Glucose detection was carried out at neutral pH, a sensitivity of 1.3767 $\mu\text{A}/\mu\text{M}$ of glucose in a range of 0 to 100 μM of glucose. The detection of glucose with nitrogen graphene was compared with reduced graphene and graphene oxide as an electrochemical catalyst for glucose oxidation, and they showed a lower performance.

Keywords: Glucose, Graphene, Nitrogen doping.

SELECTIVE HYDROGENATION OF FAME TO FATTY ALCOHOLS ON
Ru-Sn-B/Al₂O₃ CATALYSTS

María A. Sánchez, María A. Vicerich, Cristhian Fonseca Benítez, Francisco J. Passamonti,
Vanina A. Mazzieri, Carlos L. Pieck*

*Instituto de Investigaciones en Catálisis y Petroquímica, CONICET- UNL, Colectora Ruta Nac. 168- Km 0 –
Paraje el Pozo, 3000, Santa Fe, Argentina.*

**e-mail: pieck@fiq.unl.edu.ar*

Resumen

Se estudió la hidrogenación selectiva de biodiesel (FAME) a alcoholes grasos utilizando catalizadores Ru-Sn-B/Al₂O₃. El catalizador más activo y selectivo para la formación de alcohol oleico a partir de FAME por hidrogenación fue el catalizador Ru₁Sn₂/Al₂O₃. Esto se atribuyó a una relación adecuada de Ru y Sn. Si la cantidad de Sn es alta (4wt%), el catalizador tiene baja actividad porque los átomos de Ru son bloqueados o alterados electrónicamente por especies de Sn. Con una cantidad menor de Sn (2wt%) se observa una alta selectividad para hidrogenar el grupo carbonilo obteniéndose una mayor selectividad a alcoholes grasos. Además, se encontró que la temperatura óptima para la reacción es 290 °C mientras que la presión óptima es 6,12 MPa. Una temperatura de reacción más alta conduce a la pérdida de selectividad debido a la formación de n-octadecano y n-hexadecano.

Keywords: Hidrogenación selectiva, Biodiesel, Alcoholes grasos.

Abstract

The selective hydrogenation of biodiesel (FAME) to fatty alcohols was studied using Ru-Sn-B/Al₂O₃ catalysts. The most active and selective catalyst for the formation of oleic alcohol from FAME by hydrogenation was Ru₁Sn₂/Al₂O₃. This was attributed to an adequate balance between Ru and Sn. If the amount of Sn is high (4wt%) the catalyst has low activity because Ru atoms are blocked or electronically disturbed by Sn species while with a lower amount of Sn (2 wt%) a high selectivity is observed for hydrogenating the carbonyl group thus obtaining a higher selectivity to fatty alcohols. In addition, it was found that the optimum temperature for the reaction was 290 °C while the optimum pressure was 6.12 MPa. Higher reaction temperatures lead to loss of selectivity due to the formation of n-octadecane and n-hexadecane.

Keywords: Selective hydrogenation, Biodiesel, Fatty alcohols.

**SIMULATION OF FIBROUS CATALYSTS APPLIED TO CO₂ METHANATION:
ENHANCEMENT OF MASS AND HEAT TRANSPORT**

Sánchez, Agustina; Milt Viviana; Miró, Eduardo*

Instituto de Investigaciones en Catálisis y Petroquímica, INCAPE (CONICET-FIQ, UNL), Santiago del Estero 2829, Santa Fe, CP: 3000, Argentina.

**e-mail: emiro@fiq.unl.edu.ar*

Resumen

Un catalizador estructurado de fibras cerámicas fue estudiado mediante modelado y simulación, aplicado a la reacción exotérmica de metanación de CO₂. Las limitaciones a la transferencia de calor y la caída de presión resultaron ser los factores más importantes que afectan la eficiencia del reactor. Se aplicaron cambios en las dimensiones de las fibras y en la configuración del catalizador dentro del reactor para reducir las limitaciones y lograr mejoras en la performance.

Una breve comparación con un lecho empacado de pellets cerámicos mostró que los materiales fibrosos favorecen la transferencia de masa y de calor respecto del catalizador tradicional. Se logran hot-spots más moderados, y se incrementa la utilización del material catalítico en general. Los resultados sugieren que los catalizadores fibrosos pueden ser beneficiosos para reacciones limitadas por la transferencia de masa y de calor, y que son materiales interesantes por su potencial en la intensificación de procesos.

Palabras clave: catalizador fibroso cerámico, metanación de CO₂, transferencia de masa y calor.

Abstract

A structured ceramic fibrous catalyst was studied by modeling and simulation, applied to the exothermic CO₂ methanation reaction. Heat transfer limitations and pressure drop were the main factors affecting reactor efficiency. Changes in fiber dimensions and catalyst configuration inside the reactor were applied, in order to reduce the limitations and improve the performance.

A brief comparison to a packed bed of ceramic pellets showed that fibrous materials favor mass and heat transfer with respect to the traditional catalyst. More moderate hot-spots are achieved, and the overall catalyst utilization is incremented. The results suggest that fibrous catalysts can be beneficial for reactions limited by mass and heat transfer, and that they are interesting materials due to their potential for process intensification.

Keywords: ceramic fibrous catalyst, CO₂ methanation, mass and heat transfer.

THEORETICAL STUDY ON THE BRØNSTED ACIDITY EFFECT IN Al DOPED SBA-15 IN METHANOL DEHYDRATION

Paulina Rocha-Sánchez¹, María Guadalupe Cárdenas Galindo¹

¹ *Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Autónoma de San Luis Potosí, Av. Manuel Nava #6, Zona Universitaria, 78210, San Luis Potosí, S.L.P. México.*

* *cardenas@uaslp.com.mx*

Resumen

Este estudio tiene como objetivo elucidar los procesos de deshidratación que ocurren durante la conversión termoquímica de las biomásas, particularmente, el efecto de un catalizador mesoporoso con propiedades ácidas del tipo Brønsted; dado que este es uno de lo que posee mayores barreras energéticas. De la comparación de los parámetros estructurales observados experimentalmente y los obtenidos en este estudio por medio de cálculos de DFT se determinó el modelo base del catalizador. Este modelo fue funcionalizado por medio de sustitución isomórfica de Al para obtener acidez del tipo Brønsted. La energía de activación de metanol fue calculada para diferentes modelos para calcular la fuerza del sitio ácido. Los resultados obtenidos mostraron que la acidez Brønsted reduce las barreras energéticas en los procesos de deshidratación de metanol.

Abstract

This study aims to provide insights in the dehydration processes involved in the biomass thermochemical conversion, since this step have one of the higher energetic barrier, the effect of a mesoporous catalyst with Brønsted acidity was analyzed. The chemical structure of SBA-15 was optimized through a comparison from the experimental structural data and the structural parameters obtained from DFT calculations of several models. Once the representative SBA-15 cluster is established, Al functionalization was made in order to generate Brønsted acidity. The strength of the active sites is proved through the comparison between the activation energies in the methanol dehydration process. The activation energies obtained through the calculation of the catalyzed model were compared to the ones obtained with no catalyst involved. The Brønsted acidity in SBA-15 model decrease the energetic barrier of the dehydration processes of the biomass model molecule.

Keywords: DFT, SBA-15, Alumination, Dehydration, Biomass.

MODELOS BASADOS EN REDES NEURONALES ARTIFICIALES PARA LA DEGRADACIÓN DE CONTAMINANTES EMERGENTES: DESARROLLO Y VALIDACIÓN

Dolores M. Álvarez^{a*}, Mario R. Modesti^b, María V. Gerbaldo, Silvia N. Mendieta^a, Mónica E. Crivello^a

^a Centro de Investigación y Tecnología Química CONICET-UTN/Facultad Regional Córdoba, Universidad Tecnológica Nacional, CP5016, Córdoba, Argentina.

^b Laboratorio de Sensores/Dpto. de Ingeniería Electrónica/Facultad Regional Córdoba/Universidad Tecnológica Nacional, CP5016, Córdoba, Argentina.

*e-mail: dalvarez

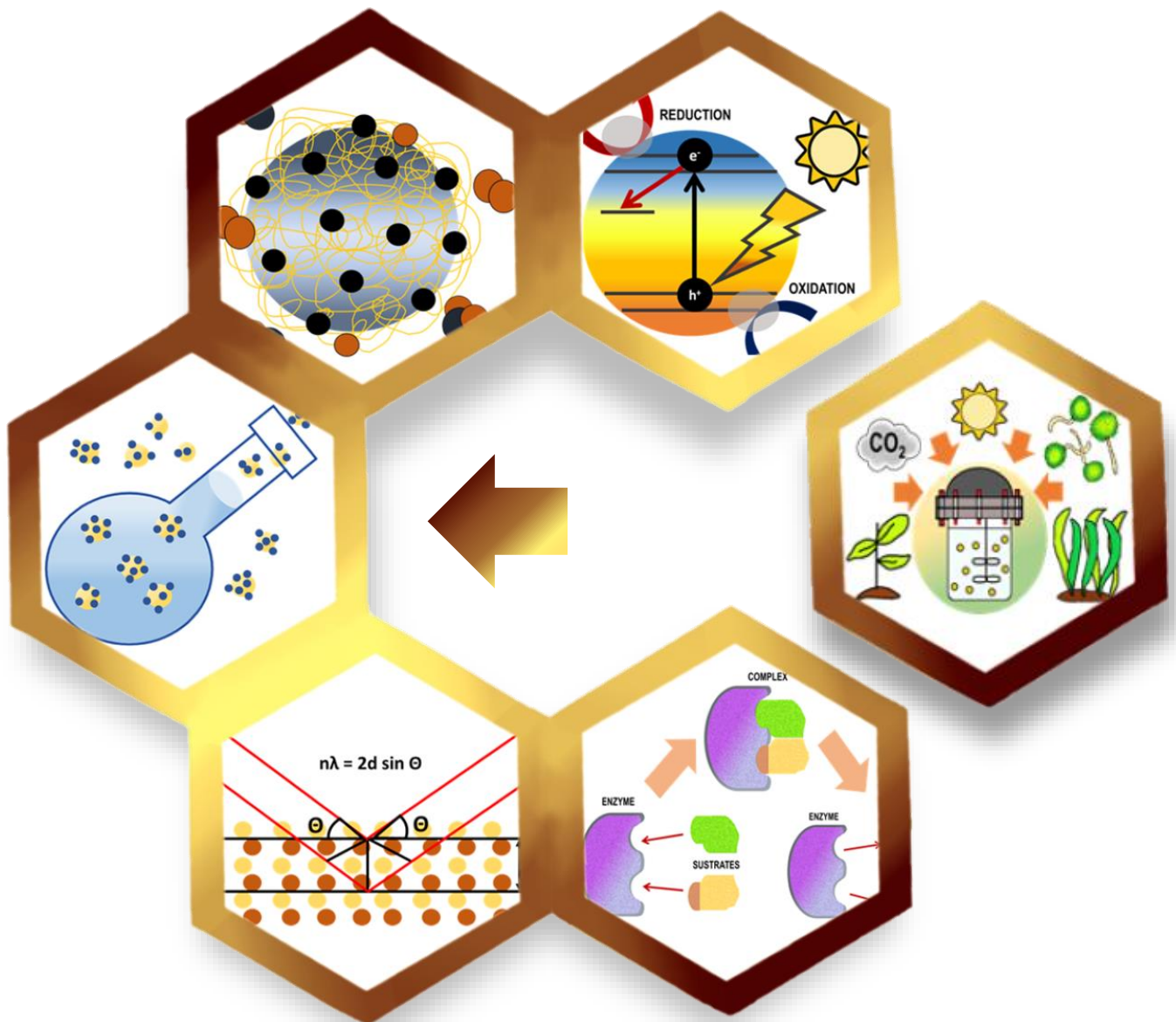
Resumen

Los contaminantes emergentes son sustancias químicas que comúnmente no se encuentran monitoreadas pero pueden causar efectos adversos ecológicos y para la salud humana, tal es el caso del diclofenaco sódico. Éste puede ser degradado mediante un proceso heterogéneo de Photo-Fenton, utilizando CoFe_2O_4 como catalizador, H_2O_2 como oxidante y radiación germicida UV. El objetivo del trabajo es comprobar la capacidad de generalización de modelos matemáticos basados en redes neuronales artificiales que caractericen la relación entre la degradación del diclofenaco y el consumo de H_2O_2 , con los porcentajes de Carbono Orgánico Total logrados en la mineralización del fármaco. La red neuronal *bakpropagation* que mejor desempeño mostró está constituida con una capa oculta con función de transferencia sigmoidea, conteniendo 10 neuronas y una de salida con lineal. Se determinó que el modelo posee capacidad de aproximar la tendencia en cuanto a la combinación de datos de entrada (Absorbancia y concentración de H_2O_2) y salida del mismo (% de TOC), cuando se valida con el catalizador reusado por primera y segunda vez. El desarrollo de estos modelos es de interés por la consecuente disminución de tiempos y costos en ensayos experimentales; representa un estudio preliminar de la evolución en el tratamiento de contaminantes emergentes.

Palabras clave: Contaminantes Emergentes, Redes Neuronales Artificiales, Ferritas, Modelos Matemáticos.

Abstract

Emerging contaminants are chemicals not commonly monitored but can cause adverse ecological and human health effects. Diclofenac sodium is one of them. It can be degraded by a heterogeneous Photo-Fenton process, using CoFe_2O_4 as catalyst, H_2O_2 as oxidant and UV germicidal radiation. The aim of the work is to test the capacity of mathematical models based on artificial neural networks to characterize the relationship between diclofenac degradation and H_2O_2 consumption, with the Total Organic Carbon (TOC) percentages achieved in the mineralization of the drug. The best performing *bakpropagation* neural network is constituted with a hidden layer with sigmoid transfer function, containing 10 neurons and one output neuron with linear. It was determined that the model has the ability to approximate the trend in terms of the combination of input data (Absorbance and H_2O_2 concentration) and output (% TOC), when validated with the reused catalyst for the first and second time. The development of these models is of interest due to the consequent reduction of time and costs in experimental work; it represents a preliminary study of the evolution in the treatment of emerging pollutants.



SESIÓN ORAL 3

SÍNTESIS VERDE DE NANOESTRUCTURAS DE TiO_2 PARA LA PRODUCCIÓN DE FURFURAL DESDE LA FOTOHIDROLISIS DEL NEJAYOTE

Martha-Isabel González-Domínguez^a, Francisco-Javier Reynoso-Marin^a, Brenda Acosta-Ruelas^b, Elena Smolentseva^c, Apolo Nambo^d, Janneth López-Mercado^a

^a Ingeniería en Nanotecnología. Universidad de La Ciénega del Estado de Michoacán de Ocampo. 59103, Sahuayo, México.

^b Cátedras CONACYT, Coordinación para la Innovación y la Aplicación de la Ciencia y la Tecnología, Universidad Autónoma de San Luis Potosí. 78000, San Luis Potosí, México

^c Centro de Nanociencias y Nanotecnología. Universidad Nacional Autónoma de México. 22860, Ensenada, México.

^d Conn Center for Renewable Energy Research. University of Louisville. 40292, Louisville, USA.

*e-mail: jannlopezm@gmail.com; gjlopez@ucemich.edu.mx

Resumen

El uso de extractos de metabolitos presentes en las plantas para la síntesis de nanomateriales, “síntesis verde”, se ha convertido en la alternativa sustentable y ambientalmente amigable, principalmente por la baja cantidad de residuos tóxicos. En este estudio se propuso preparar nanoestructuras a partir de plantas que formen parte del paisaje común en localidades mexicanas. Así, se procedió a la síntesis verde de TiO_2 desde los extractos naturales de *Ricinus communis*, *Moringa Oleifera* o *Bougainvillea spectabilis*. Las nanoestructuras preparadas fueron caracterizadas por DRX, MEB, BET y las espectroscopías UV-Vis y FTIR. En todos los casos, los resultados confirman la síntesis exitosa de nanoestructuras de TiO_2 , cuyas propiedades fisicoquímicas dependen de la fuente utilizada. Si bien algunas propiedades, como área superficial, de todos los nanomateriales sintetizados superan a las de la referencia comercial de TiO_2 , los metabolitos de *Bougainvillea*, resultaron en la formación de cristales de TiO_2 con morfología más homogénea, además de la menor energía de Gap. El estudio incluyó el análisis de la eficiencia de los nanomateriales obtenidos, en cada caso, como catalizadores en la producción de furfural a partir de la fotohidrólisis del nejayote. El TiO_2 *Bougainvillea* se caracterizó por una producción de furfural 2X mayor respecto a los otros sistemas. Lo anterior se atribuye a una resistencia química del catalizador de TiO_2 *Bougainvillea* ante la desactivación por envenenamiento provocada por la materia inorgánica presente en el nejayote. Este estudio, involucra dos puntos de interés para las localidades mexicanas: 1) revela la viabilidad de sintetizar nanomateriales eficientes a partir de extractos naturales habituales en las localidades; y 2) aprovechamiento de un residuo generado a partir de un proceso típico en México y base de la alimentación mexicana, la producción de las tortillas de maíz.

Palabras clave: Nejayote, TiO_2 , Furfural, Síntesis verde, Fotohidrólisis.

Abstract

Metabolites present in natural extracts from plants used for the synthesis of nanomaterials, the so-called “green synthesis”, has become the most widely used sustainable and eco-friendly alternative, mainly due to the low amount of toxic waste generated. In this study, it was proposed to prepare nanostructures from plants that are part of the common landscape in Mexican localities. Thus, the green synthesis of TiO_2 was carried out from the natural extracts of *Ricinus communis*, *Moringa Oleifera* or *Bougainvillea spectabilis*. The prepared nanostructures were characterized by XRD, SEM, BET and UV-Vis and FTIR spectroscopies. In all cases, the results confirm the successful synthesis of TiO_2 nanostructures, which physicochemical properties were dependent on the source used. Although some properties, such as surface area, of all synthesized nanomaterials, exceed those of the commercial TiO_2 used as a reference, *Bougainvillea* metabolites, resulted in the formation of TiO_2 crystals with remarkable homogeneous morphology, in addition to a lower Gap energy. The study included the analysis of the efficiency of the nanomaterials obtained, in each case, as catalysts in the production of furfural from the photohydrolysis of nejayote. The TiO_2 *Bougainvillea* was characterized by the highest production of furfural, 2X higher compared to the other systems. This was attributed to the chemical resistance of the TiO_2 *Bougainvillea* catalyst to the deactivation by poisoning caused by the inorganic matter still present in the nejayote waste. This study involves two points of interest for Mexican localities: 1) it reveals the viability of synthesizing efficient nanomaterials from natural extracts common in localities; and 2) the use of a waste generated from a typical process in Mexico and the basis of the Mexican diet, the production of corn tortillas.

Pt-Fe/CNT DEALLOYING BY THE ACTIVATION CYCLE PROCESS AS A CATHODIC CATALYST IN A PEM FUEL CELL

D.M. López-Rosas^a, R.M. Félix-Navarro^a, C. Silva-Carrillo^a, J.R. Flores-Hernández^b,
T. Romero Castañón^b, I.L. Albarrán-Sánchez^b, E.A. Reynoso-Soto^{a*}

^a Centro de Graduados e Investigación. Tecnológico Nacional de México - Instituto Tecnológico de Tijuana. C.P. 1166. Tijuana, B. C. 22000, México.

^b Instituto Nacional de Electricidad y Energías Limpias, Ave. Reforma 113 Col. Palmira, Cuernavaca, Morelos, 62490, México.

e-mail: edgar.reynoso@tectijuana.edu.mx

Resumen

Este trabajo reporta la síntesis y actividad del electrocatalizador catódico Pt-Fe/CNT con baja carga de platino para celdas de combustible de membrana de intercambio protónico (PEMFC). En un principio, los nanotubos de carbono empleados se prepararon mediante el método de asperjado pirolítico. Posteriormente, se depositaron las partículas de hierro por el método de microemulsión inversa sobre la superficie de los nanotubos de carbono (Fe/CNT). A continuación, las partículas de platino se depositaron sobre el material Fe/CNT mediante una reacción de desplazamiento galvánico para obtener el electrocatalizador catódico de Pt-Fe/CNT. Finalmente, se probó el electrocatalizador catódico Pt-Fe/CNT en la PEMFC con diferentes ciclos de activación y generando una densidad de potencia de 367 mW/cm² a 2000 ciclos similar al electrocatalizador comercial Pt/C. Sin embargo, los contenidos de Pt fueron del 5 % en peso para el electrocatalizador Pt-Fe/CNT mientras que para el catalizador comercial fue del 20% en peso.

Abstract

This work reports the synthesis and activity of Pt-Fe/CNT cathodic electrocatalyst with low platinum load for proton exchange membrane fuel cells (PEMFC). At First, carbon nanotubes employing were prepared by spray pyrolysis method. Subsequently, iron particles were deposited by the inverse microemulsion method on the carbon nanotubes surface (Fe/CNT). Next, the platinum particles were deposited over Fe/CNT material by galvanic displacement reaction to obtain Pt-Fe/CNT cathodic electrocatalyst. Finally, the Pt-Fe/CNT cathodic electrocatalyst was tasted in PEMFC with different activation cycles and generated power density around 367 mW/cm² at 2000 cycle similar to commercial Pt/C electrocatalyst. However, the Pt contents were 5 w%t for Pt-Fe/CNT electrocatalyst while for commercial catalysts of 20 wt%.

Keywords: Pt-Fe, PEMFC, activation cycles.

STUDY OF NiMo CATALYSTS SUPPORTED ON HIERARCHICAL LAMELLAR SiO₂ PILLARED MOR ZEOLITE FOR DIBENZOTHIOPHENE DESULPHURIZATION

Rosario I. Yocupicio-Gaxiola^a, Rene Obeso-Estrella^c, Fabian N. Murrieta-Rico^b, J. N. Diaz de Leon^b, Joel Antúnez-García^b, T. A. Zepeda^b, Sergio Fuentes Moyado^b, Vitalii Petranovskii^b

^aCenter for Scientific Research and Higher Education at Ensenada (CICESE), Ensenada, Baja California 22860, Mexico.

^bCentro de Nanociencias y Nanotecnología – UNAM, km. 107 Carretera Tijuana-Ensenada, CP. 22800 Ensenada, B.C., Mexico.

^cTecnológico Nacional de México/IT de Los Mochis, C.P.81259, Los Mochis, Sinaloa, México.

Resumen

La presente investigación reporta el uso de zeolita MOR pilareada como soporte de la fase activa NiMo con cantidades variables. Las cantidades de componentes en la síntesis se han calculado teóricamente para obtener cinco muestras conteniendo 10, 12, 14, 16 y 18% en peso de MoO₃. Para todos los materiales, se fijó la relación atómica Ni/(Ni+Mo) = 0.325 y la relación molar CA/Ni=2. Los materiales finales fueron analizados por diferentes técnicas como XRD, UV-Vis DRS, adsorción-desorción de N₂, TPR y fueron probadas en la hidrodesulfuración de dibenzotiofeno. Se observó un incremento en la posición del ángulo 2θ para el pico de la fase lamelar con un aumento en la cantidad de metal en el catalizador, que puede deberse al decremento de la distancia interplanar entre las láminas 2D. El catalizador más activo fue 18% NiMo/MOR, mientras que un comportamiento particular pudo verse con la cantidad de fase activa ya que el catalizador 12% NiMo/MOR arrojó una actividad muy cercana a la mostrada por el catalizador con la más alta cantidad de fase activa.

Palabras clave: Mordenita, dibenzotiofeno, pilareada, laminar, hidrodesulfuración.

Abstract

This research reports the use of pillared MOR zeolite to support NiMo with varying amounts of active phase. The amounts of components in the synthesis has been theoretically calculated to obtain five samples containing 10, 12, 14, 16 and 18 wt% of MoO₃. For all materials, the atomic ratio Ni/(Ni+Mo) = 0.325 and the molar ratio CA/Ni=2 were fixed. The materials were analyzed by different analytical techniques such as XRD, UV-Vis DRS, N₂ adsorption-desorption, TPR, and were tested in the hydrodesulphurization of dibenzothiophene. An increase in the 2θ angle position for the lamellar peak was observed with an increase in the amount of metal on the catalyst, which can be due to a decrease in the interplanar spacing between 2D sheet. The most active catalyst was 18% NiMo/MOR, and a particular behavior was observed with the active phase amount since 10% NiMo/MOR exhibited activity close to that shown by catalyst with a higher amount of active phase.

Keywords: Mordenite, dibenzothiophene, pillared, laminar, hydrodesulfurization.

N-COMPOUNDS REMOVAL FROM MIDDLE DISTILLATES BY MIL-101(Cr). IMPACT ON ULSD PRODUCTION

E. Meneses-Ruiz^a, J. Escobar^a, R. J. Mora^a, J. A. Montoya^a, M. C. Barrera^b, D. Solís-Casados^c, L. Escobar-Alarcón^d, P. Del Ángel^a, G. Laredo^a

^aGerencia Refinación de Hidrocarburos/Instituto Mexicano del Petróleo, 07730, CDMX, Mexico

^bFac.Ciencias Químicas-CIRES/Universidad Veracruzana,96538, Coatzacoalcas, Ver., Mexico

^cCCIQS/UAEM, Toluca, EDOMEX, México

^dININ, Ocoyoacac, EDOMEX, 52750, Mexico

*E-mail: jeaguila@imp.mx

Resumen

Destilados medios derivados de petróleo (gasóleo ligero primario y mezcla con aceite cíclico ligero y gasóleo de coquizadora) para producción de diésel de ultra bajo azufre (DUBA) por hidrotratamiento (HDT) se pretrataron por remoción selectiva de compuestos orgánicos nitrogenados (CON). Se preparó MOF MIL-101(Cr) altamente cristalino con óxido de propileno (proton scavenger) como mejorador textural. El MOF se caracterizó por fisisorción N₂, difracción rayos X, análisis térmico, espectroscopia Raman y microscopia electrónica (METAR). Remoción de CON se efectuó a temperatura ambiente y presión atmosférica, siendo el adsorbente fácilmente regenerable bajo condiciones no severas. El MOF extrudado adsorbió CON eficientemente (hasta aprox.80 ppm concentración final en efluente acumulado) permitiendo la obtención de DUBA por HDT a condiciones mucho menos severas que las usadas en caso de corrientes sin pre tratar. Temperatura de operación pudo disminuirse 20 °C (desde 350 hasta 330 °C) operando a 56 kg cm⁻², LHSV=h⁻¹ y H₂/oil=2500 pie³ bbl⁻¹, lo cual puede reflejarse en prolongada vida útil del catalizador NiMo/Al₂O₃ empleado.

Keywords: MOF, MIL-101(Cr), remoción de compuestos nitrogenados, destilados medios derivados de petróleo, DUBA.

Abstract

Oil-derived middle distillates (straight-run gas oil (SRGO) and mixture with light cycle oil (LCO) and coker gas oil (CGO)) for ultra-low sulfur diesel (ULSD) production by hydrotreating (HDT) were pretreated by selective nitrogen organic compounds (NOC) adsorption. Highly crystalline metal-organic framework (MOF) MIL-101(Cr) prepared with propylene oxide (PO, proton scavenger) as textural improver was used to that end. MOF was characterized by N₂ physisorption, X-ray diffraction, thermal analysis, Raman spectroscopy and electron microscopy (HR-TEM). NOC removal was carried out at room temperature and atmospheric pressure, the adsorbent being easily regenerable under mild conditions. Extruded MOF efficiently removed NOC from real feedstocks to concentrations ~ 80 ppm in cumulated effluent which allowed ULSD production at much milder conditions to those used during pristine feedstocks HDT. Operating temperature could be significantly diminished by 20 °C (from 350 to 330 °C) operating at 56 kg cm⁻², LHSV= 1.5 h⁻¹ and H₂/oil=2500 ft³ bbl⁻¹, which could notably prolong cycle life of NiMo/Al₂O₃ formulation used.

Keywords: MOF, MIL-101(Cr), nitrogen compounds removal, oil-derived middle distillates, ULSD.

PERFORMANCE OF NATURAL Cu-Chabazite DURING SELECTIVE CATALYTIC REDUCTION OF NO WITH NH₃ UNDER OXIDIZING CONDITIONS - EFFECT OF H₂O VAPOR AND METAL CONTENT

Julio C. López Curiel^a, María E. Hernández-Terán^a, Gustavo A. Fuentes*

^a Departamento de Ingeniería de Procesos, Universidad A. Metropolitana – Iztapalapa, CDMX, 09345, México.

*e-mail: gfuentes@xanum.uam.mx

Resumen

Se estudió el efecto de 5% vol. de vapor de agua durante la Reducción Catalítica Selectiva de NO con NH₃ (NH₃-RCS-NO) utilizando chabazita natural intercambiada con Cu (1.3, 2.8 y 6.5-Cu/CHA). Se determinó un efecto negativo por la presencia de H₂O, la conversión de NO disminuyó ligeramente durante el encendido debido a la presencia de agua, pero alcanzó conversión mayor a 90 % ya en un rango de operación normal (280-420°C). La conversión máxima aumentó con el contenido de Cu, pasando de 50% para 1.3-Cu/CHA a 90 y 95% a 350°C con 2.8-Cu/CHA y 6.5-Cu/CHA, respectivamente. Mediante H₂-TPR se determinó la relación Cu²⁺/Cu, y se encontró que la actividad aparentemente correlaciona con la presencia de especies Cu²⁺, las que parecen ser responsables de la actividad para la reducción de NO. Se observó y modeló el decaimiento en actividad, que ocurre en las primeras 2 h, manteniéndose estable posteriormente. Se determinó la alta estabilidad hidrotérmica del catalizador 2.8-Cu/CHA por 24 h al no mostrar ningún efecto al inyectar 5 % de H₂O.

Keywords: Reducción Catalítica Selectiva de NO, Cu-CHA, Chabazita natural, Estabilidad hidrotérmica.

Abstract

We studied the effect of 5 % v/v of water vapor during the Selective Catalytic Reduction of NO with NH₃ (NH₃-SCR-NO) using natural chabazite exchanged with Cu (1.3, 2.8 and 6.5-Cu / CHA). The conversion of NO decreases slightly during light-off in the presence of water, but it reaches higher values in a range of temperature required for normal operation (280-420°C). The maximum conversion increased with the Cu content, from 50% for 1.3-Cu/CHA to 90 and 95% at 350°C with 2.8-Cu/CHA and 6.5-Cu/CHA, respectively. The Cu²⁺/Cu ratio was determined by H₂-TPR and the activity correlates with the presence of Cu²⁺ species, which appear to be responsible for the activity for NO reduction. During a test of the 2.8-Cu / CHA catalyst for 24 h we observed and modelled a small decay in activity during the first 2 h, remaining stable thereafter. The catalyst showed high hydrothermal stability for 24 h against 5% water injection.

Keywords: Selective Catalytic Reduction of NO, Cu-CHA, Natural chabazite, hydrothermal stability, deactivation model.

STRUCTURAL EFFECT OF SMALL PORE ZEOLITES UPON THE ACTIVITY OF Cu/SSZ-39 AND Cu/SSZ-13 DURING THE SCR-NO_x WITH NH₃

Gabriela I. Hernández-Salgado^a, J.C. López-Curiel^a, Gustavo A. Fuentes^{a*}

^a Department of Process Engineering, UAM-Iztapalapa, 09340, Mexico City (México)

*e-mail: *gfuentes@xanum.uam.mx

Resumen

El efecto de la estructura de zeolitas de poro pequeño en los catalizadores Cu/SSZ-13 y Cu/SSZ-39 durante la reducción catalítica selectiva de NO con NH₃ (NH₃-RCS-NO) se investigaron para tratar de establecer una relación estructura-actividad catalítica. Análisis estructurales como DRX, fisisorción de N₂, RMN de ²⁹Si y ²⁷Al fueron llevados a cabo en las zeolitas H/SSZ-13 y Na/SSZ-39 mostrando que ambas estructuras son altamente cristalinas, ordenadas y con una gran área superficial (640 y 766 m² /g). Los resultados de acidez por TPD de NH₃ indican una cantidad de NH₃ adsorbido similar en ambos materiales (~14.5 mmol NH₃ /g). Sin embargo, la diferencia recae en la temperatura del máximo de desorción de cada uno (260°C-2.5/SSZ-13 y 320°C-3.7/SSZ-39). La tasa de conversión inicial fue similar para ambos catalizadores (~10 mol NO / mol Cu*min). La tasa de reacción a alta temperatura con el catalizador 3.7/SSZ-39 fue 1.4 veces mayor que con 2.5/SSZ-13 en el intervalo de 400 a 600°C, lo cual coincide con los resultados de TPD de NH₃ a alta temperatura. Nuestros resultados sugieren que las diferencias en porosidad y estructura de ambos materiales no modifican sustancialmente su alta actividad catalítica en la reacción de NH₃-RCS-NO.

Keywords: Reducción catalítica selectiva de NO, Cu-zeolitas, SSZ-13, SSZ-39.

Abstract

The effect of the structure of small pore zeolites on the Cu/SSZ-13 and Cu/SSZ-39 catalysts during the selective catalytic reduction of NO with NH₃ (NH₃-RCS-NO) was investigated to try to establish a structure- to-structure relationship. catalytic activity. Structural analyzes such as XRD, N₂ physisorption, ²⁹Si, and ²⁷Al NMR were carried out on H/SSZ-13 and Na/SSZ-39 zeolites showing that both structures are highly crystalline ordered and with a high surface area (640 and 766 m² /g). Acidity results by TPD- NH₃ indicate a similar amount of NH₃ adsorbed in both materials (~14.5 mmol NH₃ / g). However, the difference lies in the desorption maxima temperature of each material (260°C-2.5/SSZ-13 and 320°C-3.7/SSZ-39). Reaction tests showed similar conversion rates for both catalysts (~10 mol NO / mol Cu * min). The high-temperature reaction rate of catalyst 3.7/SSZ-39 was 1.4 times higher than with 2.5/SSZ-13 in the range of 400 to 600° C, which may correlate with the high temperature TPD- NH₃ results. The differences in porosity and structure of both materials do not modify substantially their high catalytic activity for NH₃-RCS-NO reaction.

Keywords: Selective Catalytic Reduction of NO, Cu-zeolite, SSZ-13, SSZ-39.

EFFECTO DE LA MORFOLOGÍA DEL SOPORTE CERIA EN LAS PROPIEDADES CATALÍTICAS DE COBRE Y PLATINO PARA LA DESCOMPOSICIÓN DE METANOL

Luis López-Rodríguez^{a*}, Daniel G. Araiza^a, Antonio Gómez-Cortés^a, Gabriela Díaz^{a,*}

^aLaboratorio de Reactividad Catalítica de Nanomateriales / Departamento de Física Química / Instituto de Física / Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad de México, México

**e-mail: luisrodriguez3665@gmail.com, diaz@fisica.unam.mx*

Resumen

En el presente trabajo se explora el efecto de la morfología del soporte CeO₂ (poliedros, barras y cubos), en las propiedades catalíticas de Cu y Pt. La síntesis de la ceria se llevó a cabo por la vía hidrotermal y la incorporación de los metales por impregnación húmeda. Los materiales se caracterizaron por medio de XRD, Adsorción física de N₂, EDS, H₂-TPR, Raman y Adsorción de CO seguida por DRIFTS. Las propiedades catalíticas se estudiaron en el intervalo de 100 - 450 °C. Los catalizadores soportados en poliedros y barras son más activos independientemente del metal, pero Pt > Cu. Este resultado correlaciona bien con el aumento de sitios vacantes de oxígeno en estas muestras. Un efecto del tipo de soporte se observó en los catalizadores de Pt al analizar el rendimiento a H₂ indicando probablemente la ocurrencia de reacciones secundarias.

Palabras clave: Descomposición de metanol, morfología, Cu, Pt, CeO₂ nanoestructurado.

Abstract

In the present work, the effect of the morphology of the ceria support, CeO₂ (polyhedra, rods and cubes) on the catalytic properties of Cu and Pt for methanol decomposition reaction was studied. The nanostructured CeO₂ was prepared by the hydrothermal route whereas incorporation of the metals was achieved by wet impregnation. Catalysts were characterized by XRD, N₂ adsorption, EDS, H₂-TPR, Raman and CO adsorption followed by DRIFTS. Catalytic properties were studied in the 100 - 450 °C temperature range. Catalysts supported on polyhedra and rods were more active independently of the metal, but Pt > Cu. This result correlates well with the increase of oxygen vacancies in these samples. Hydrogen yield seems to depend on the support morphology indicating the probable occurrence of side reactions.

Keywords: Methanol decomposition, morphology, Cu, Pt, CeO₂ morphology.

CoMoS₂ CATALYSTS SUPPORTED ON Al-HMS AND Al-SBA-16: INFLUENCE OF DOPING METHOD AND SUPPORT MORPHOLOGY ON THE CATALYST DEACTIVATION IN HDS OF DBT

R. Huirache-Acuña^{a*}, R. Navarro Yerga^b and B. Pawelec^b

^a *Facultad de Ingeniería Química, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, C. P. 58060, Morelia, Michoacán, Mexico.*

^b *Grupo de Energía y Química Sostenibles, Instituto de Catálisis y Petroleoquímica, CSIC, Cantoblanco, 28049 Madrid, Spain.*

*e-mail: rafael_huirache@yahoo.it

Resumen

Se han preparado catalizadores de sulfuro de cobalto-molibdeno soportados en Al-HMS y Al-SBA-16 utilizando como precursores de la fase activa el tiomolibdato de amonio (TMA). El efecto del soporte sobre la actividad catalítica se evaluó en la hidrodesulfuración (HDS) del dibenzotiofeno (DBT). En esta reacción, se investigó el efecto del método de incorporación de Al (post-síntesis vs. síntesis directa) en SBA-16 y la morfología del soporte (SBA-16 vs. HMS) sobre la actividad catalítica y su estabilidad durante el curso de reacción. La caracterización de los catalizadores usados mediante la técnica TG/TDA demostró que la desactivación del catalizador y la estabilidad de sus fases activas dependen en gran medida de la morfología del soporte y del método de incorporación de Al. En comparación con el catalizador CoMoS/Al-HMS, ambos catalizadores soportados en Al-SBA-16 fueron más resistentes a la desactivación por deposición de coque. Para ambos catalizadores con Al incorporado mediante síntesis directa (Al-HMS y Al-SBA-16), la morfología del soporte fue el factor decisivo que influyó en la desactivación del catalizador siendo el catalizador CoMoS/Al-SBA-16 dos veces más resistente a la deposición de coque que el CoMoS/Al-HMS. Esta conclusión tiene gran importancia para el diseño de los futuros catalizadores de hidrotratamiento.

Palabras clave: Hidrodesulfuración, TMA, coque.

Abstract

Cobalt-molybdenum sulfide catalysts supported on Al-HMS and Al-SBA-16 have been prepared using ex-situ Co-incorporated ammonium thiomolybdate (ATM) as precursor of the active phase. The activity of the catalysts has been evaluated in the hydrodesulfurization (HDS) of dibenzothiophene (DBT). The effect of Al incorporation method (post-synthesis vs. direct synthesis) on SBA-16 and support morphology (SBA-16 vs. HMS) was investigated. Characterization of the catalysts used by TG/TDA technique showed that catalyst deactivation by coke deposition is highly dependent on support morphology and Al incorporation method. Aluminium incorporation into SBA-16 substrate by post-synthesis method (grafting) led to highest coke deposition on the surface of CoMoS/Al/SBA-16 catalyst. For both catalysts having Al incorporated via direct synthesis (Al-HMS and Al-SBA-16), the support morphology was the decisive factor influencing on the catalyst deactivation being CoMoS/Al-SBA-16 catalyst 2-times more resistant to coke deposition than CoMoS/Al-HMS. The incorporation of Al into the SBA-16 substrate by the direct synthesis method (Co/ATM/Al-SBA-16) resulted in higher resistance to coke deactivation and the higher stability of the sulfide phases. This conclusion is of great importance for the design of future hydrotreating catalysts.

Keywords: Hydrodesulfurization; ATM; coke.

EFFECTO DE LA ADICION DE Fe EN LA ACTIVIDAD HIDRODESOXIGENANTE DE OXIDO MIXTO Ni-Al-O_x DERIVADO DE UN MATERIAL TIPO HIDROTALCITA

Luis F. Vázquez-Fuentes^{a,*}, Julia Aguilar Pliego^a, José A. Toledo-Antonio^{b,*}, J. Sánchez-Valente^b

^a Universidad Autónoma Metropolitana. Av. San Pablo 180, Col. Reynosa Tamaulipas, Alcaldía Azcapotzalco, C.P. 02200, Ciudad de México, México.

^b Instituto Mexicano del Petróleo, Eje Central Lázaro Cárdenas 152, Col. San Bartolo Atepehuacan, Ciudad de México 07730, México.

*e-mail: fernandovf1801@gmail.com, jtoledo@imp.mx

Resumen

Se sintetizaron óxidos mixtos (NiFeAlO_x), a partir de materiales tipo hidrotalcita con diferente contenido de Fe (0-15%), manteniendo una relación molar M^{2+}/M^{3+} de 3, dichos precursores se prepararon mediante el método de coprecipitación a baja supersaturación. Se evaluaron los óxidos mixtos obtenidos a partir de los compuestos tipo hidrotalcita en la reacción de hidrodeseoxigenación de vainillina, que se usó como molécula modelo de la despolimerización de la lignina. las evaluaciones se llevaron a cabo en un reactor tipo PARR a una temperatura de 533 K y una presión de hidrógeno de 1.2 MPa. Los materiales se caracterizaron mediante análisis TPR y DRX. La incorporación del Fe a la estructura tipo hidrotalcita, disminuyó la interacción de las especies de Ni con la alúmina, formando así, una mayor densidad de especies superficiales reducibles (NiO_x), con alta densidad de vacantes de oxígeno en la superficie del óxido mixto, lo que finalmente conlleva a una mayor selectividad de productos cíclicos completamente desoxigenados (80% con 10%Fe) en comparación con el catalizador sin Fe; cuya selectividad a productos cíclicos desoxigenados fue del 15%.

Palabras clave: Vainillina, hidrogenación, Hidrodeseoxigenación, óxidos mixtos NiFeAl.

Abstract

Mixed oxides (NiFeAlO_x) were synthesized from hydrotalcite type materials with different Fe content (0-15%), maintaining a M^{2+}/M^{3+} molar ratio of 3. The precursors were prepared by the coprecipitation method at low supersaturation. The mixed oxides obtained from the hydrotalcite type compounds were evaluated during the hydrodeoxygenation reaction of vanillin used as a model molecule, to simulate deoxygenation of lignin's moieties. The reactions were carried out in a PARR type reactor at a temperature of 533 K and hydrogen pressure of 1.2 MPa. The catalysts were characterized by TPR and XRD analysis. The incorporation of Fe into the hydrotalcite like structure, decreased the interaction between Ni species and alumina, increasing the amount of reducible surface species (NiO_x), with high density of vacancy sites on their surface, which finally leads to a higher selectivity towards completely deoxygenated cyclic products (80% with 10% Fe) compared to the catalyst without Fe; whose selectivity was 15%.

Keywords: Vanillin, hydrogenation, hydrodeoxygenation, NiFeAl mixed oxides catalyst.

**Pt-Pd SUPPORTED ON ZnO RODS CATALYSTS FOR HYDROGEN PRODUCTION:
THEORETICAL AND EXPERIMENTAL STUDY ON METHANOL STEAM REFORMING**

M. Toledo^{a,b}, G. Modragón-Galicia^a, F. Morales-Anzures^b, P. Salinas Hernández^b, A. Gutiérrez Martínez^a, Ma. Eufemia Fernández García^a, Jorge Reyna-Alvarado^c, Oscar A. López-Galán^c, Manuel Ramos^c and R. Pérez-Hernández^a

^a Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares, Carr. México-Toluca. S/N. La Marquesa, Ocoyoacac, Edo. de México, 52750, México.

^b Instituto de Estudios de la Energía, Universidad del Istmo-Campus Tehuantepec, Santo Domingo Tehuantepec, Oaxaca, C.P. 70760, México

^c Departamento de Física y Matemáticas, Universidad Autónoma de Ciudad Juárez, Avenida del Charro #450 N., Ciudad Juárez, Chihuahua, 32310, México

*e-mail: raul.perez@inin.gob.mx

Resumen

Pt/Pd soportado en ZnO-rods fueron evaluados en la reacción de reformado de metanol (SRM) para la producción de hidrógeno. Los catalizadores fueron caracterizados mediante: adsorción-desorción de N₂ (BET), SEM. XRX. TPR. TEM y espectrometría de masas (MS). Todas las muestras presentaron picos de difracción característicos de la estructura cristalina de cincita. Se identificaron por XRD y TEM fases de PtZn y PdZn. La reactividad de los catalizadores seguidos por espectrometría de masas en el que el catalizador Pt/ZnO-rod fue más activo que los catalizadores a base de Pd. No se observaron cambios por MS en la señal en tiempo real, indicando que el catalizador es estable en la reacción catalítica. La caracterización por XRD de las muestras después de reacción, mostraron que la aleación de PtZn es muy estable en los catalizadores mono y bimetalico, respectivamente. Mientras que en el catalizador Pd/ZnO-rod, se observó segregación de fases.

BIOCHAR-SUPPORTED BIMETALLIC CATALYSTS FOR THE CONVERSION OF FURFURAL VIA CATALYTIC TRANSFER HYDROGENATION

Ladislao Sandoval-Rangel^a, Gloria L. Dimas-Rivera^b, Daniela Xulú Martínez-Vargas^a, Javier Rivera de la Rosa^b, Carlos J. Lucio Ortiz^b, David A. de Haro-del Río^b, Alberto Mendoza^a, Alejandro Montesinos Castellanos^{a*}

^a Tecnológico de Monterrey, Escuela de Ingeniería y Ciencias, Ave. Eugenio Garza Sada 2501, C.P. 64849, Monterrey, Nuevo León, México

^b Universidad Autónoma de Nuevo León, Facultad de Ciencias Químicas, Pedro de Alba S/N, San Nicolás de los Garza Nuevo León, México

*e-mail: alejandro_montesinos@tec.mx

Resumen

El biocarbón (biochar) tiene potencial para usarse como un soporte catalítico sostenible para síntesis química, especialmente cuando es alterado vía modificación de grupos funcionales e inserción de sitios metálicos activos. En este trabajo, el biocarbón obtenido a partir de pirólisis de cáscara de coco fue usado como soporte para la síntesis de catalizadores bimetalicos Ni-Cu; para mejorar sus características, el biocarbón fue sujeto a modificación química superficial. Cuando se obtuvieron los biocarbones modificados, se cargaron con 10% Cu y Ni, usando impregnación húmeda incipiente. Finalmente, se probaron los catalizadores en la conversión de furfural, usando 2-pentanol como fuente de hidrógeno. Las pruebas catalíticas se llevaron a cabo a distintas temperaturas, usando diferentes biocarbones. De los resultados de caracterización se observó que los sitios Ni-Cu se redujeron entre 200 y 700 °C, y aunque algo de la acidez original del biocarbón parece perderse después del tratamiento químico, la presencia de sitios activos Ni-Cu promovió un incremento en las propiedades ácidas del material. Los catalizadores claramente mejoraron la conversión de furfural (hasta 5 veces) comparado con la prueba no catalítica; el catalizador NiCu-60TFA mostró la mayor conversión (100%), y también se mejoró la selectividad hacia 2-metilfurano como producto.

Palabras clave: Biocarbón, Ni-Cu, Modificaciones químicas, Conversión de furfural.

Abstract

Biochar possesses potential to be used as a sustainable catalyst support for chemical synthesis, especially when altered via functional group modification and insertion of active metal sites. In this work, biochar obtained from coconut shell pyrolysis was used as support for the synthesis of bimetallic Ni-Cu catalysts; in order to improve its characteristics, biochar was subjected to chemical surface modification. When the modified biochars were obtained, they were loaded with 10% Cu and Ni using incipient wetness impregnation. Finally, the catalysts were tested for furfural conversion, using 2-pentanol as hydrogen source. The catalytic tests were performed at different temperatures, and with different biochars. From the characterization results, it was observed that Ni-Cu sites were reduced between 200 and 700 °C, and while some of the original biochar acidity seems to be lost with the chemical treatment, the presence of the Ni-Cu active sites promoted an increase in the acid properties of the material. The catalysts clearly improved furfural conversion (up to 5 times) compared with the non-catalytic test; the NiCu-60TFA catalyst showed the highest conversion (100%), also boosting selectivity to 2-methylfuran rather than furfuryl alcohol as products.

Keywords: Biochar, Ni-Cu, Chemical modifications, Furfural conversion.

METHANOL DECOMPOSITION OVER COBALT-CERIA CATALYSTS: EFFECT OF THE SYNTHESIS METHOD IN THE LONG-TERM STABILITY

Daniel G. Araiza^{a,*}, Antonio Gómez-Cortés^a, Hugo A. Lara-García^{a,*}, Gabriela Díaz^a

^a Instituto de Física, Departamento de Física Química, Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad de México, C.P. 04510, México

*e-mail: araiza@materiales.unam.mx (D.G. Araiza); hugo.lara@fisica.unam.mx (H. A. Lara-García)

Resumen

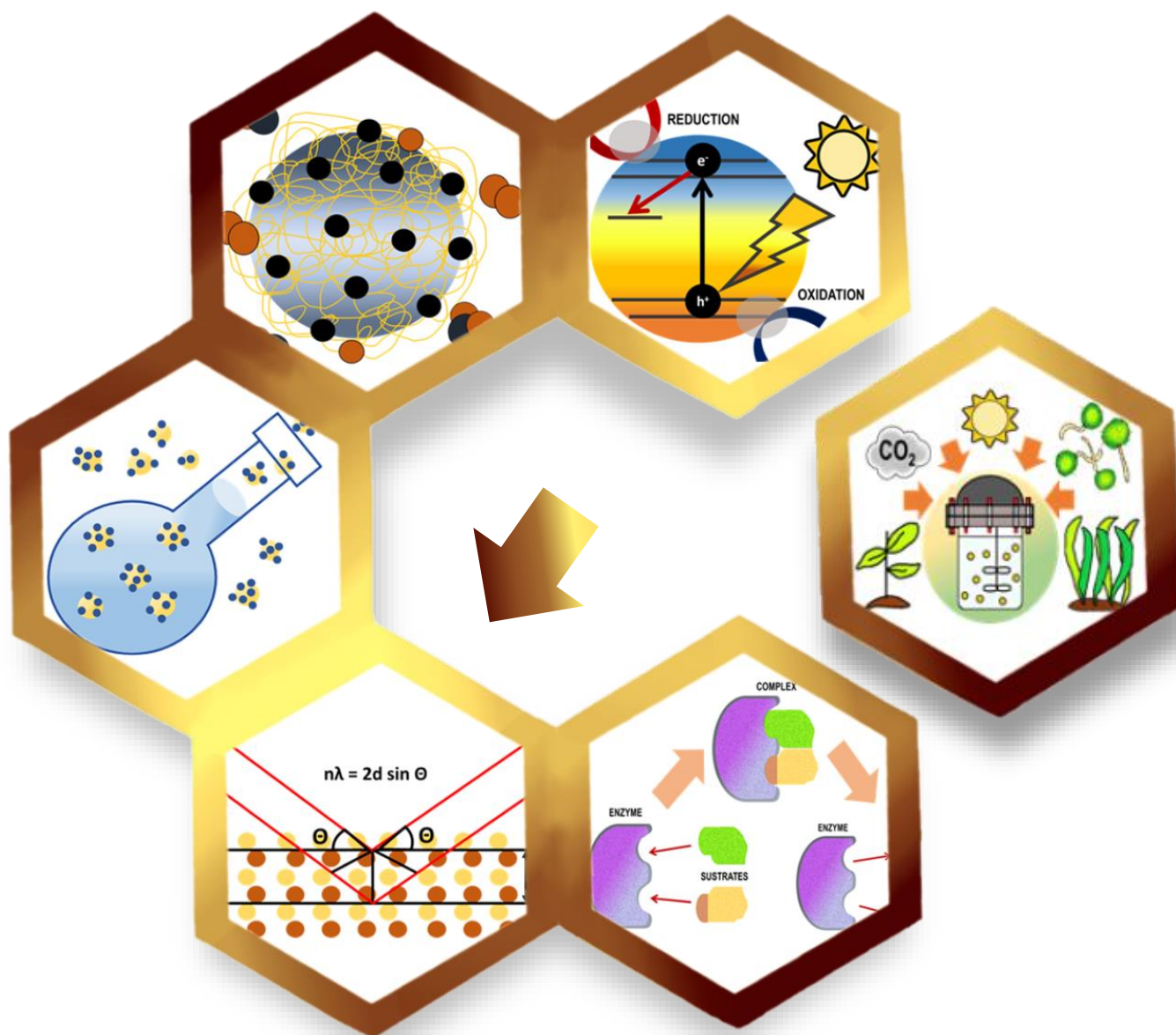
Catalizadores de cobalto-ceria (5 % en peso de Co) se prepararon mediante dos diferentes rutas: i) en una, el catalizador se sintetiza en un paso por el método de complejos EDTA-citrato al añadir el precursor de cobalto al momento de sintetizar el CeO₂; y ii) por la vía tradicional de impregnación húmeda del soporte ceria con la disolución del precursor metálico. Los materiales fueron caracterizados mediante microscopía electrónica, DRX, adsorción de N₂, y RTP de hidrógeno; mientras que las propiedades catalíticas se evaluaron en la reacción de descomposición de metanol (DM). Las pruebas en la reacción DM indicaron que el procedimiento de síntesis impacta en las propiedades catalíticas de los materiales. El catalizador preparado a partir de un solo paso (Co/CeO₂ OS) mostró una excelente estabilidad en la reacción DM, aún después de 96 h de reacción; además, en esta prueba catalítica de largo tiempo, los valores de rendimiento a hidrógeno fueron también altos y significativamente estables. A través de la caracterización de los materiales, se evidenció que el catalizador Co/CeO₂ OS presentó una buena dispersión de especies cobalto, así como la formación de una solución sólida superficial Co-O-Ce; esta última ayudó a mejorar la reducibilidad de la ceria. Estas dos características se proponen como las responsables no solo de la alta conversión de metanol, pero también de una mejor gasificación de las especies carbón que son generadas durante la reacción DM.

Palabras clave: Cobalto-ceria, descomposición de metanol, hidrógeno, estabilidad a largo plazo.

Abstract

Cobalt-ceria catalysts (5 wt. % in Co) were prepared using two different approaches: i) a one-step method, through EDTA-citrate complexing synthesis where the cobalt precursor was added while synthesizing the CeO₂; and ii) via a traditional wet impregnation of the Co precursor onto the as-prepared ceria support. Materials were characterized by electron microscopy, XRD, N₂ adsorption, and H₂-TPR; while the catalytic properties were evaluated in the methanol decomposition (MD). Catalytic tests showed that the synthesis procedure impacts the materials' catalytic properties, especially in terms of the stability. The catalyst prepared through a one-step procedure (Co/CeO₂ OS) showed an excellent stability in the MD reaction, even after 96 h on-stream; besides, in this long-term catalytic test, the hydrogen yield values were high and significantly stable. Through the characterization of materials, it was revealed that the Co/CeO₂ OS catalyst presented well-dispersion of cobalt species, and the formation of a surface Co-O-Ce solid solution; the latter helped to enhance the ceria reducibility. Both features are proposed to be responsible not only for the high methanol conversion, but also for the better gasification of carbonaceous species generated during the MD reaction.

Keywords: Cobalt-ceria, methanol decomposition, hydrogen, long-term stability.



SESIÓN ORAL 4

ESTUDIO DE CATALIZADORES NiPW/TiO₂-Al₂O₃ EN LA OBTENCIÓN DE BIOCOMBUSTIBLES POR HIDROCONVERSIÓN CATALÍTICA DE ACEITE DE VEGETAL

Ricardo Rivera Guasco^a, José Antonio-Rodríguez-Ávila^a, Rafael Tapia-Benavides^a, Acela López- Benítez^a, Gilles Berhault^b, Alfredo Guevara Lara^{a,*}

^a Área Académica de Química, Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo. Carretera Pachuca-Tulancingo Km 4.5 s/n. Col. Carboneras. Mineral de la Reforma, Hidalgo, C.P. 42184, México.

^b Institut de Recherches sur la catalyse et l'environnement de Lyon, 02 av. Albert Einstein, 69100 Villeurbanne, France.

e-mail: ricardo.guasco94@gmail.com

Resumen

Los biocombustibles han sido propuestos como una alternativa al uso de combustibles fósiles debido a sus beneficios ambientales. Los catalizadores a base de sulfuros de Ni y W han demostrado ser una opción para obtener biocombustibles por hidroconversión catalítica. En este trabajo se presentan resultados de la caracterización y actividad de los catalizadores NiW industrial, NiW/TiO₂-Al₂O₃ y NiPW/TiO₂-Al₂O₃ en la hidroconversión catalítica de aceite vegetal. El soporte TiO₂-Al₂O₃ se sintetizó por el método de precipitación, este presentó una estructura anatasa de TiO₂, una área BET de 190 m²/g y un pH neto superficial de 4.8. Las especies de Ni y W de los catalizadores fueron analizadas por espectroscopía Raman y UV-vis. Las caracterizaciones mostraron las estructuras W₁₂O₄₀⁶⁻ y PW₁₂O₄₀³⁻, además del Ni²⁺ con simetría local octaédrica distorsionada. La evaluación catalítica muestra que la velocidad de reacción de hidroconversión aumenta con la adición de P. Esto probablemente debido a la formación de polioxometalatos de Ni-P-W. Los resultados sugieren que los catalizadores de NiPW/TiO₂-Al₂O₃ es más activo que el catalizador industrial de NiW.

Abstract

Due to their environmental benefits, biofuels have been proposed as an alternative to fossil fuels. Sulfide Ni-W catalysts have been tested to be an option to obtain biofuels by catalytic hydroconversion. This work present a characterization study of NiW/Al₂O₃, NiW/TiO₂-Al₂O₃ and NiPW/TiO₂-Al₂O₃ catalysts and its catalytic test in vegetable oil hydroconversion. TiO₂-Al₂O₃ support was synthesized by precipitation method, this support presented an anatase TiO₂ structure, a S_{BET}= 190 m²/g and a net surface pH of 4.9. Ni and W species were analyzed by Raman and reflectance diffuse UV-vis spectroscopies. The analysis showed W₁₂O₄₀⁶⁻ and PW₁₂O₄₀³⁻ structures on the catalyst surface. In addition, Ni²⁺ showed a distorted octahedral symmetry. Catalytic evaluation results show that hydroconversion reaction rate increases with the P addition. It is probably due to formation of Ni-P-W polyoxometalates. These results suggest that the NiPW/TiO₂-Al₂O₃ catalyst is more active than the commercial NiW catalyst.

Keywords: Biodiesel, NiPW/TiO₂-Al₂O₃ catalyst, NiW/Al₂O₃ catalyst, Vegetal oil hydroconversion.

HIDRODESOXIGENACIÓN DE ANISOL SOBRE CATALIZADORES BASE Ni: EFECTO DEL SOPORTE Y Ru COMO PROMOTOR

Reyna Ríos Escobedo^a, Edgar Ortiz Santos^b, José Antonio Colín Luna^b, José Escobar^{c,}, José Antonio de los Reyes^{a,*}**

^a Laboratorio de Catálisis Ambiental e Ingeniería de Reacción, División de Ciencias Básicas e Ingeniería, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, San Rafael Atlixco 186, Col. Vicentina, 09340, Iztapalapa, Ciudad de México, México.

^b Departamento de Energía, Área de Análisis de Procesos, División de Ciencias Básicas e Ingeniería, Universidad Autónoma Metropolitana-Azcapotzalco, Av. San Pablo 180, Col. Reynosa Tamaulipas, 02200, Azcapotzalco, Ciudad de México.

^c Instituto Mexicano del Petróleo, Eje Central Lázaro Cárdenas 152, San Bartolo Atepehuacan, 07730, G.A. Madero, Ciudad de México, México

* jarh@xanum.uam.mx, **jeaguila@imp.mx

Resumen

El presente trabajo tuvo como objetivo el estudio de la hidrodesoxigenación (HDO) de anisol (metoxibenceno) a 573 K y 4 MPa de H₂ sobre catalizadores de Ni soportados en TiO₂ y TiO₂-ZrO₂, para determinar el efecto de la naturaleza del soporte en la actividad y selectividad. Además, se empleó el catalizador bimetalico NiRu soportado en TiO₂ para analizar el efecto de la incorporación de Ru. Los resultados mostraron diferencias en la cantidad de sitios ácidos, la reducibilidad de las especies de Ni e interacciones de los metales y el soporte. El catalizador Ni/TiO₂ produjo metoxiciclohexano y ciclohexanol como productos principales. Ni/TiO₂-ZrO₂ presentó mayor actividad que los soportados en TiO₂, así como alta producción de compuestos desoxigenados. Por su parte, la incorporación de Ru favoreció la selectividad hacia benceno y triplicó la velocidad inicial de reacción con respecto a Ni/TiO₂. El catalizador Ni/TiO₂-ZrO₂ promovió la selectividad hacia la hidrogenación total, generando ciclohexano. De esa forma, es posible favorecer las vías de reacción para producir compuestos químicos relevantes, propiciado por la combinación de los efectos del soporte y la fase metálica para catalizadores con base en Ni.

Palabras clave: Hidrodesoxigenación, anisol, TiO₂-ZrO₂, níquel, rutenio.

Abstract

The present work was aimed to determine the effect of the nature of the support on the anisole (methoxybenzene) hydrodeoxygenation (HDO) at 573 K and 4 MPa H₂ on Ni catalysts supported on TiO₂ and TiO₂-ZrO₂. Besides, a NiRu bimetallic catalyst supported on TiO₂ was studied to analyze the effect of Ru. The results showed differences in the amount of acid sites, reducibility of Ni, and interactions of metals and support as well. Ni/TiO₂ produces methoxycyclohexane and cyclohexanol as the main products. Ni/TiO₂-ZrO₂ catalyst exhibited higher HDO activity than the one supported on TiO₂, as well as high production of deoxygenated compounds. In turn, Ru incorporation increased the initial reaction rate by a factor of three compared with Ni/TiO₂ and favored benzene selectivity. Ni/TiO₂-ZrO₂ drove up the selectivity towards a fully hydrogenated compound (cyclohexane). In this way, it is possible to promote the desired reaction pathway to produce relevant chemical compounds associated with the combined effect of the support and the metallic phase for Ni-based catalysts.

Keywords: Hydrodeoxygenation, anisole, TiO₂-ZrO₂, nickel, ruthenium.

INCORPORACIÓN DE CATIONES LANTANO EN ZEOLITA BETA PARA LA ALQUILACIÓN DE ISOBUTANO CON BUTENOS

Lucas Tonutti, Maira Maquirriáin, Carlos Querini, Bruno Dalla Costa*

Instituto de Investigaciones en Catálisis y Petroquímica “Ing. José Miguel Parera” (INCAPE) – CONICET/UNL, 3000, Santa Fe, Argentina

**e-mail: bdallacosta@fiq.unl.edu.ar*

Resumen

Se estudió la incorporación parcial de cationes lantano como ion de compensación en zeolita *BEA, con el fin de mejorar la selectividad y estabilidad de los catalizadores en la reacción de alquilación de isobutano con butenos en fase gas para obtener trimetilpentanos (TMPs). En función del contenido de lantano incorporado se lograron distintos valores de cantidad, fuerza y naturaleza de sitios ácidos. Para una relación molar La/Al cercana a 0,16 se obtuvo un catalizador con una mayor proporción de sitios ácidos Brønsted fuertes, que favoreció las reacciones de transferencia de hidruro y craqueo, permitiendo una rápida desorción de los TMPs y evitando la polimerización y la alquilación múltiple, por lo que la desactivación por depósito de coque resultó ralentizada.

Palabras clave: lantano, zeolita beta, alquilación, acidez.

Abstract

The partial incorporation of lanthanum cations as compensation ions in *BEA zeolite was studied in order to improve the selectivity and stability of the catalysts for the alkylation of isobutane with butenes in gas phase to obtain trimethylpentanes (TMPs). The different amounts of lanthanum incorporated led to different quantities, strength and nature of acid sites. For a molar La/Al ratio of approximately 0.16, a catalyst with higher proportion of strong Brønsted sites was obtained, which favored hydride-transfer and cracking reactions, thus allowing a faster desorption of TMPs and avoiding polymerization and multiple alkylation. Thus, deactivation by coke deposition was decelerated.

Keywords: lanthanum, beta zeolite, alkylation, acidity.

EVALUATION OF THE IMPACT OF SYNTHESIS METHOD OF VOX/CeO₂/SiO₂ CATALYSTS ON RED-OX PROPERTIES, ACID SITES AND CATALYTIC ACTIVITY ON THE OXIDATIVE DEHYDROGENATION OF n-BUTANE AND PROPANE

J.L. Sánchez-García^a, B.E. Handy^a, A.G. Rodríguez^b, M.M. González-Chávez^a, R. García de León^c, M.G. Cardenas-Galindo^{a,*}

^a Facultad de Ciencias Químicas./Universidad Autónoma de San Luis Potosí, CP 78219, San Luis Potosí, México.

^b Coordinación para la Innovación y la Aplicación de la Ciencia y la Tecnología, UASLP, Álvaro Obregón 64, San Luis Potosí, SLP 78000, Mexico.

^c Instituto Mexicano del Petróleo, Eje Central Lázaro Cárdenas 152, San Bartolo Atepehuacan, Gustavo A. Madero, 07730, Ciudad de México.

*e-mail: cardenas@uaslp.mx

Resumen

Se prepararon catalizadores con la misma carga de vanadio y cerio sobre sílica usando las técnicas de injerto ((VO_x/CeO₂/S-GA, VO_x/CeO₂/S-GB) e impregnación húmeda incipiente (VO_x/CeO₂/S-IA, VO_x/CeO₂/S-IB), para estudiar el efecto de las propiedades ácidas y redox de especies V y Ce en la deshidrogenación oxidativa (DOH) de n-butano y propano. Estudios de Raman y difracción de Rayos-X (DRX) mostraron diferencias significativas entre los catalizadores. Se encontraron especies de V₂O₅ y V polimérico en los catalizadores sintetizados por impregnación húmeda, mientras que CeVO₄ fue la especie predominante en aquellos preparados por injerto. Las especies encontradas en VO_x/CeO₂/S-IA están relacionadas a sitios ácidos (> 90 kJ/mol) responsables por la fragmentación catalítica oxidativa en DOH de n-butano. Acidez del catalizador y propiedades redox del vanadio fueron responsables de formación de productos de oxidación total, además de la selectividad a butadieno y acroleína, los que en una reacción Diels-Alder y posterior deshidrogenación produjeron benzaldehído. El catalizador VO_x/CeO₂/S-GA no mostró sitios ácidos importantes, pero la presencia de CeVO₄ junto a especies de vanadio altamente dispersas (monovanadatos) fueron responsables por la selectividad a butenos sin producción de CO. En la DOH de propano los catalizadores sintetizados por impregnación húmeda incipiente presentaron elevada selectividad a propileno.

Abstract

Catalysts were synthesized via grafting (VO_x/CeO₂/S-GA and VO_x/CeO₂/S-GB) and incipient wetness impregnation (VO_x/CeO₂/S-IA and VO_x/CeO₂/S-IB) with the same vanadium and cerium loadings over silica support, in order to understand the role of acid sites and redox properties of V and Ce species in the oxidative dehydrogenation (ODH) of n-butane and propane. Significant differences were found on each catalyst with Raman and X-ray diffraction (XRD) analysis: V₂O₅ and polymeric vanadium species were found on those catalyst synthesized via impregnation, and CeVO₄ was the predominant specie on those prepared via grafting. According to our results, those species found on VO_x/CeO₂/S-IA are related to acid sites (> 90 kJ/mol) responsible for the oxidative catalytic cracking on the ODH reaction of n-butane. The catalyst acidity combined with the redox properties of the vanadium species on the same material, resulted in selectivity to butadiene and acrolein, which reacted in a Diels-Alder addition to produce benzaldehyde and total oxidation products. The catalyst VO_x/CeO₂/S-GA did not showed acid sites, but the presence of CeVO₄ combined with highly dispersed vanadium specie were responsible for the selectivity to butenes without CO production. For the ODH of propane the catalyst synthesized via incipient wetness impregnation showed high selectivity to propylene.

Keywords: Vanadium oxide catalyst, Acid site strength, Oxidative dehydrogenation, Diels-Alder reaction, Benzaldehyde.

ESTUDIO TEÓRICO EXPERIMENTAL DE LOS SITIOS ACTIVOS EN CIRCONIA TUNGSTATADA

M. L. Hernández-Pichardo^a, K. G. Madrigal-Carrillo^b, J. Vera-Iturriaga^a, J. I. Rodríguez-Hernández^b, E. Jiménez-Izal^{c,d}*, J. A. Montoya de la Fuente^e **

^a Instituto Politécnico Nacional, ESIQIE, Av. IPN S/N Zacatenco, 07738, México City, México.

^b Instituto Politécnico Nacional, ESFM, Av. IPN S/N Zacatenco, 07738, México City, México.

^c Polímero eta Material Aurreratuak: Fisika, Kimika eta Teknologia Saila, Kimika Fakultatea, Euskal Herriko Unibertsitatea (UPV/EHU) and Donostia International Physics Center (DIPC), M. de Lardizabal Pasealekua 3, Donostia, Euskadi, Spain.

^d IKERBASQUE, Basque Foundation for Science, Bilbao, Euskadi, Spain

^e Instituto Mexicano del Petróleo, Eje Central L. Cárdenas 152, 07730, México City, México.

*elisa.jimenez@ehu.es ** amontoya@imp.mx

Resumen

Se prepararon catalizadores mesoporosos de Pt/WO₃-ZrO₂ mediante sol-gel libre de alcóxido metálico. Empleando estos catalizadores se obtuvo una mezcla de alto índice de octano en la reacción de isomerización de n-hexano. Los resultados muestran que estos catalizadores alcanzaron altos valores de conversión (hasta 85% mol) y una mayor selectividad para los isómeros biramificados que la circonia tungstada convencional (17% mol para 2,2-dimetil-butano y 13% mol para 2,3-dimetil-butano). La alta actividad catalítica se atribuye a su estructura mesoporosa que permitió la formación de cúmulos de WO_x bien dispersos en la superficie de circonia con un tamaño de dominio intermedio. Los cálculos de DFT confirmaron que los tamaños intermedios de los grupos de WO_x ofrecen el mejor equilibrio entre la fuerza y el número de sitios ácidos de Brønsted.

Palabras clave: Circonia tungstatada, índice de octano, DFT, energía de deprotonación, isomerización de n-hexano.

Abstract

Mesoporous Pt/WO₃-ZrO₂ catalysts were prepared by sol-gel free of metal alkoxide. Using these catalysts, a high-octane mixture was obtained in the n-hexane isomerization reaction. The results show that these catalysts reached high conversion values (up to 85% mol) and a higher selectivity for biramified isomers than conventional tungstate circonia (17% mol for 2,2-dimethyl-butane and 13% mol for 2,3-dimethyl-butane). The high catalytic activity is attributed to its mesoporous structure which allowed the formation of well dispersed WO_x clusters on the circonia surface with an intermediate domain size. The DFT calculations confirmed that the intermediate sizes of the WO_x clusters offer the best balance between strength and the number of acidic Brønsted sites.

Keywords: Tungstated circonia, Octane Number, DFT, deprotonation energy, n-hexane isomerization.

ACTIVACIÓN Y TRANSPORTE DE HIDRÓGENO DURANTE LA METANACIÓN DE CO₂ CATALIZADA POR Ni/ZrO₂ y Rh/ZrO₂

Agustín F. Camacho-Medrano^a, María del Carmen Lara-Pérez^a, Jorge Cornejo-Romero^a, Jessica Chávez-García^a, Alfredo Solís-García^{ab}, Trino A. Zepeda^b, Armando Almendarez-Camarillo^a, Juan C. Fierro-Gonzalez^{a,*}.

^aDepartamento de Ingeniería Química. Tecnológico Nacional de México en Celaya. Celaya, México 38010.

^bCentro de Nanociencias y Nanotecnología Universidad Nacional Autónoma de México Ensenada, B. C. Mexico. 22800

*e-mail: jcfierro@iqcelaya.itc.mx

Resumen

Se prepararon muestras de Rh y Ni soportados en óxido de zirconio (Rh/ZrO₂ y Ni/ZrO₂) por un método de impregnación. Ambas muestras funcionan como catalizadores en la metanación de CO₂ a presión atmosférica y temperaturas menores a 300 oC, siendo el catalizador de Rh significativamente más activo que el de Ni. Espectros de infrarrojo (IR) medidos en condiciones de reacción indican que la activación del CO₂ sobre las muestras de Ni/ZrO₂ ocurre en el soporte, formándose especies bicarbonato, que son hidrogenadas a formiatos y metóxidos antes de la formación de metano. En cambio, la activación del CO₂ en los catalizadores de Rh/ZrO₂ ocurre preferentemente sobre las partículas de Rh, formándose carbonilos de Rh(0). Mediante experimentos de quimisorción de H₂ a varias temperaturas, se comprobó que la muestra de Ni/ZrO₂ era significativamente más susceptible que la de Rh/ZrO₂ a experimentar spillover de hidrógeno hacia el soporte, y que este fenómeno aumentaba cuando se había pre-adsorbido CO₂ sobre las muestras. Espectros UV-vis de los catalizadores indican que, a condiciones de reacción, parte del Zr⁴⁺ del soporte se reduce a Zr³⁺, lo que es consistente con el transporte de hidrógeno a través de la interfase metal-soporte durante la catálisis.

Palabras clave: Metanación de CO₂, spillover de hidrógeno, quimisorción de H₂.

Abstract

ZrO₂-supported Rh and Ni samples (Rh/ZrO₂ and Ni/ZrO₂) were synthesized by an impregnation method. Both samples were catalytically active for the CO₂ methanation at atmospheric pressure and below 300 oC. The supported Rh catalyst was significantly more active than that of supported Ni. Infrared (IR) spectra recorded during catalysis indicate that the CO₂ activation occurred on the ZrO₂ in the presence of the supported Ni sample, giving rise to the formation of bicarbonate species that were subsequently hydrogenated to give formate and methoxy species prior to the production of methane. In contrast, when the reaction was done in the presence of the Rh/ZrO₂ sample, CO₂ was activated on the supported metal particles in the form of Rh(0) carbonyls. By means of hydrogen chemisorption experiments at various temperatures it was demonstrated that the supported Ni sample favored hydrogen spillover, which was enhanced when CO₂ was pre-adsorbed on the catalyst. UV-vis spectra of the catalysts indicate that, under reaction conditions, part of the Zr⁴⁺ sites on the support were reduced to Zr³⁺, consistent with the transport of hydrogen across the metal-support interface during catalysis.

Keywords: CO₂ methanation, hydrogen spillover, H₂ chemisorption.

NANOPARTÍCULAS BIMETÁLICAS Au-Ag EFECTIVAS EN LA REDUCCIÓN CATALÍTICA DE NITROFENOLES

Carlos Niño González^{a*}, Andrey Simakov^b, Brenda J. Acosta Ruelas^{c}**

^a Posgrado en Ciencias Aplicadas, Coordinación para la Innovación y la Aplicación de la Ciencia y la Tecnología, Universidad Autónoma de San Luis Potosí, Av. Sierra Leona #550, Col. Lomas 2a. Sección, CP 78210, San Luis Potosí, SLP, México.

^b Universidad Nacional Autónoma de México, Centro de Nanociencias y Nanotecnología, Km. 107 Carretera Tijuana a Ensenada, C.P. 22860, Ensenada, Baja California, México

^c Cátedra-CONACYT, Coordinación para la Innovación y la Aplicación de la Ciencia y la Tecnología, Universidad Autónoma de San Luis Potosí, Av. Sierra Leona #550, Col. Lomas 2a. Sección, CP 78210, San Luis Potosí, SLP, México

inercarlos.hh@gmail.com*, *brenda.acosta@uaslp.mx*

Resumen

Las nanopartículas bimetálicas se han caracterizado por el mejoramiento de sus propiedades catalíticas, al compararse con las monometálicas, debido al efecto sinérgico entre los metales que las conforman. Aquí se realiza la modificación parcial de la superficie de nanopartículas de oro (AuNPs) con trazas de Ag (AuAgX%, donde X representa el porcentaje de cobertura). La incorporación de trazas de Ag no afectó el tamaño promedio de las AuNPs (~17nm) ni la posición de la cresta del plasmón de resonancia del Au (~52 nm). El efecto de la incorporación de trazas de Ag en las AuNPs se estudió en la reducción catalítica de los isómeros 2-, 3- y 4-nitrofenol (2-NP, 3-NP y 4-NP). Se encontró que la velocidad de la reacción depende del % de cobertura de las AuNPs con Ag, así como de la naturaleza de la molécula a reducir. Las nanopartículas coloidales de AuAg estabilizadas en PVP, son catalíticamente más activas que las reportadas en la literatura con composiciones similares, alcanzando valores de TOF de hasta 72 $\mu\text{mol}\cdot\text{s}^{-1}$ para el coloide AuAg30% en la transformación del isómero 4-NP, 103 $\mu\text{mol}\cdot\text{s}^{-1}$ para el coloide AuAg50% en el isómero 2-NP y 234 $\mu\text{mol}\cdot\text{s}^{-1}$ para el coloide AuAg80% en el isómero 3-NP.

Palabras clave: nanopartículas, AuAg, decoración, reducción, nitroaromáticos.

Abstract

Bimetallic nanoparticles have been characterized by the improvement of their catalytic properties, when compared to monometallic ones, due to the synergistic effect between the metals that formed. In this work, the gold nanoparticles (AuNPs) surface partial modification by Ag traces was proposed (AuAgX%, where X represent the surface coverage percent). The incorporation of Ag traces did not affect the ave AuNPs (~17nm) used as seeds nor the position of the Au surface plasmon resonance crest (~521nm). The effect of the incorporation of Ag traces in the AuNPs surface were studied in the catalytic reduction of the 2-, 3- and 4-nitrophenol isomers (2-NP, 3-NP and 4-NP). It was found that the reaction rate depends on the Au surface coverage % with Ag, as well as on the nature of the molecule to be reduced. Colloidal Au-Ag nanoparticles stabilized in PVP were catalytically more active than those reported in the literature with similar compositions, reaching TOF values up to 72 $\mu\text{mol}\cdot\text{s}^{-1}$ for the colloid AuAg30% in the 4-NP isomer transformation, 103 $\mu\text{mol}\cdot\text{s}^{-1}$ for the AuAg50% colloid in the 2-NP isomer and 234 $\mu\text{mol}\cdot\text{s}^{-1}$ for the AuAg80% in the 3-NP isomer.

Keywords: nanoparticles, AuAg, decoration, nitroaromatics, reduction.

OXIDACIÓN DE TRANS-2-HEXEN-1-OL EMPLEANDO ARCILLAS PILAREADAS TI-PILC y V/TI-PILC

Viola, Belén Melisa^{a,*}, Sabre, Ema Virginia^a, Cánepa, Analía Laura^a, Casuscelli, Sandra Graciela^a

^a Centro de Investigación y Tecnología Química (CITeQ-CONICET-UTN)/Universidad Tecnológica Nacional, Facultad Regional Córdoba, 5016, Córdoba, Argentina

*e-mail: bviola@frc.utn.edu.ar

Resumen

En este trabajo se exponen los resultados de la reacción de oxidación del alcohol trans-2-hexen-1-ol utilizando peróxido de hidrógeno como oxidante, acetonitrilo como solvente y arcillas pilareadas como catalizadores. Los materiales catalíticos se sintetizaron a partir de arcillas minerales naturales y fueron caracterizados mediante DRX, UV-Vis RD e isotermas de adsorción de N₂. Los análisis realizados mostraron evidencia de la formación de pilares de titanio en el soporte utilizado. Además, no hubo indicios de la presencia de óxidos de vanadio en el material V/Ti-PILC, por lo que el metal impregnado se encontró de manera dispersa en la estructura. La evaluación de los materiales se realizó a 70 °C, en fase líquida y en un período de 5 h, y los resultados demostraron que el V/Ti-PILC presentó la mejor performance catalítica alcanzando una conversión de alcohol de 28,73% aplicando una relación molar de sustrato/oxidante igual a 1/1.

Palabras clave: oxidación, trans-2-hexen-1-ol, arcillas pilareadas, titanio, vanadio.

Abstract

In this work, the results of the oxidation reaction of the alcohol trans-2-hexen-1-ol using hydrogen peroxide as oxidant, acetonitrile as solvent and pillared clays as catalysts are exposed. The catalytic materials were synthesized from natural mineral clays and were characterized by XRD, UV-Vis RD and N₂ adsorption isotherms. The analyzes carried out showed evidence of the formation of titanium pillars in the support used. Furthermore, there were no indications of the presence of vanadium oxides in the V/Ti-PILC material, so the impregnated metal was found dispersed in the structure. The evaluation of the materials was carried out at 70 °C, in liquid phase and in a period of 5 h, and the results showed that the V/Ti-PILC presented the best catalytic performance, reaching an alcohol conversion of 28.73% applying a substrate/oxidant molar ratio equal to 1/1.

Keywords: oxidation, trans-2-hexen-1-ol, pillared clays, titanium, vanadium.

A NEW INSIGHT OVER OSC, SMSI, AND DISPERSION EFFECTS ON VOC OXIDATION USING PT/AL₂O₃-CeO₂ CATALYSTS

Hugo Pérez-Pastenes^a *, Tomás Viveros-García^b *

^a Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Veracruzana – Campus Coatzacoalcos, Av. Universidad Km 7.5 Coatzacoalcos, Veracruz, 96538, México.

^b Área de Ingeniería Química, IPH, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa; Av. San Rafael Atlixco #186, Col. Vicentina, D.F., 09340, México

*e-mail: huperez@uv.mx; tvig@xanum.uam.mx

Resumen

En este trabajo se presenta la relación entre la carga de ceria (0, 2, 5, 10, 20, 50 % en peso) en los catalizadores Pt/Al₂O₃-CeO₂ con la actividad catalítica en la oxidación de 1-butanol y tolueno. Los materiales fueron caracterizados por TPR, quimisorción de CO y TEM; adicionalmente se determinó la capacidad de almacenar/desprender oxígeno mediante la técnica OBC en estado transitorio y con la OSC tradicional. La interacción de las especies de CeO₂ con la fase activa se obtuvieron mediante los experimentos de TPR, los cuales se complementaron con la quimisorción de CO y las micrografías de TEM, para comprender tanto el efecto SMSI como la dispersión de Pt en los diferentes catalizadores. Se encontró una relación compleja entre el SMSI, el tamaño de partícula de Pt y la capacidad almacenar/desprender oxígeno con la actividad en la oxidación de COV. Se concluye que usando catalizadores de Pt/Al₂O₃-CeO₂ en reacciones de eliminación de 1-butanol y tolueno, la temperatura de encendido (hasta 50% de conversión) disminuye a valores mayores de OSC/OBC y dispersión de Pt, pero para alcanzar 100% de eliminación de tolueno, se requiere de una menor dispersión de Pt y un menor efecto SMSI, teniendo el material con 5% de CeO₂ el mejor desempeño catalítico, para 50 y 100 % de conversión.

Palabras clave: Pt/Al₂O₃-CeO₂, oxidación de tolueno, OSC, OBC, SMSI.

Abstract

In this work, a correlation between the ceria loading (0, 2, 5, 10, 20, 50 wt.%) in Pt/Al₂O₃-CeO₂ catalysts with the catalytic activity of 1-butanol and toluene oxidation is presented. The materials were characterized by TPR, CO chemisorption and TEM; additionally, the capacity to store/release oxygen was determined with the OBC technique in a transient state and with the typical OSC. The interaction of the CeO₂ species with the active phase was obtained by TPR experiments, which were complemented with CO chemisorption and TEM analyses, to understand the SMSI effect and Pt dispersion in the different catalysts. A complex relation between SMSI, Pt particle size and the capacity to store/release oxygen with the activity in the VOC oxidation was found. It is concluded that using Pt/Al₂O₃-CeO₂ in deep oxidation of 1-butanol and toluene, the light-off temperature (50% conversion) is reduced with higher values of OSC/OBC and Pt dispersion, but to reach 100% of toluene removal, it is necessary to have lower SMSI effect and lower Pt dispersion. The results show that the best catalytic performance, for 50 and 100 % of conversion, was obtained with the material with 5% CeO₂.

Keywords: Pt/Al₂O₃-CeO₂, toluene oxidation, OSC, oxygen buffering capacity (OBC), SMSI.

ESTUDIO DE LA REVERSIBILIDAD DEL EFECTO DEL H₂ EN LA REDUCCIÓN CATALÍTICA SELECTIVA DE NO CON PROPANO SOBRE UN CATALIZADOR DE AG PARA SISTEMAS DE CONTROL DE LAS EMISIONES DE MOTORES DIÉSEL

María E. Hernández-Terán^a, Julio C. López Curiel^a, Gabriela I. Hernández Salgado^a, Gustavo A. Fuentes^{a*}

^a *Departamento de Ingeniería de Procesos, Universidad A. Metropolitana – Iztapalapa, CDMX, 09345, México.*

**e-mail: gfuentes@xanum.uam.mx*

Resumen

Se estudió el efecto de la adición de H₂ y su reversibilidad en la Reducción Catalítica Selectiva de NO_x con propano (C₃H₈-RCS) bajo condiciones oxidantes en presencia de 6 % de vapor de agua sobre un catalizador con 2 % p. de Ag/γ-Al₂O₃ bajo ciclo transitorio a temperatura constante (RTC) desde 100 hasta 500 °C y un GHSV de 70,651 h⁻¹. El H₂ promovió la conversión de NO desde los 80 °C durante la reacción a temperatura programada de H₂-C₃H₈-RCS (RTP), se observaron dos picos máximos de conversión de NO a 140 °C y entre 340 y 500 °C. El catalizador fue caracterizado por adsorción de N₂, STEM/HAADF, HRTEM, DRX, TPR-H₂ y DRS UV-Vis ex situ. Los espectros de UV-Vis mostraron que la estructura de Ag es sensible a las condiciones de reacción formándose especies oxidadas altamente dispersas sobre el soporte después de la C₃H₈-RCS o especies reducidas (nanopartículas de Ag⁰) después de la H₂-C₃H₈-RCS.

Keywords: Reducción Catalítica Selectiva de NO, Ag/γ-Al₂O₃, H₂-C₃H₈-RCS, efecto reversible.

Abstract

The effect of the addition of hydrogen and its reversibility in the Selective Catalytic Reduction of NO_x with propane (C₃H₈-SCR) under oxidizing conditions in the presence of 6 % of H₂O vapor on a catalyst with 2 wt. % Ag/γ-Al₂O₃ was studied under transient cycle at RTC from 100 to 500 °C at GHSV of 70,651 h⁻¹. H₂ promoted NO conversion from 80 °C, two maximum NO conversion peaks were observed at 140 °C and between 340 and 500 °C during PRT H₂-C₃H₈-RCS. The catalyst was characterized by N₂-sorption, STEM/HAADF, HRTEM, XRD, H₂-TPR and ex situ UV-Vis DRS. UV-Vis spectra show that Ag structure is sensible to the reaction conditions, forming highly dispersed oxidized species on the support after C₃H₈-RCS or reduced species (Ag⁰ nanoparticles) after H₂-C₃H₈-RCS.

Keywords: Selective Catalytic Reduction of NO, Ag/γ-Al₂O₃, C₃H₈-RCS, reversible effect.



SESIÓN ORAL 5

EFFECTO DE LA ADICIÓN DE Pt EN CATALIZADORES DE g-Al₂O₃-TiO₂ EN LA FOTODEGRADACIÓN DEL ÁCIDO 2,4-D

Claudia M. Gómez^a, G. del Ángel^b, A. Jacobo Azuara^a, F. Tzompantzi^b, Esmeralda Vidal Robles^c, Beatriz Ruiz Camacho^a

^a Universidad de Guanajuato Departamento de Química, Noria Alta S/N, Col. Noria Alta, C.P. 36050, México

^b Universidad Autónoma Metropolitana-Unidad Iztapalapa, Departamento de Química, Área de Catálisis, Av. San Rafael Atlixco No. 186, C.P. 09340. México

^c Facultad de Ingeniería Química, BUAP, Ciudad Universitaria Av. Sn. Claudio y, Blvd. 18 Sur Col. Jardines de San Manuel, 72570 Puebla, Pue

*e-mail: claudia.martinez@ugto.mx

Resumen

Hoy en día, la escasez de agua potable y la alta demanda de esta, han convertido en algo imprescindible la búsqueda de nuevos procesos de tratamiento para el reciclaje de la misma, sin embargo, la presencia de compuestos tóxicos y recalcitrantes dificultan su tratamiento, sin embargo los POA's representan una opción muy prometedora para la degradación de este tipo de compuestos, siendo la fotocatalisis una de las más utilizadas dentro de este grupo de procesos debido a los resultados obtenidos. Dentro de este proceso uno de los materiales más estudiados es el TiO₂ pues ha demostrado alta eficiencia en la fotodegradación, sin embargo, factores como la baja área específica que presenta y la rápida recombinación del par electrón-hueco limitan e inhiben su actividad, por lo que en este trabajo analiza el efecto de la dispersión de TiO₂ en un material con área de superficie específica alta como -Al₂O₃ (1-3) y su impregnación con Pt. Los materiales se caracterizaron utilizando las siguientes técnicas: BET, XRD, UV-Vis, NMR y FTIR de piridina. La reacción se siguió usando UV-Vis, TOC (Total Organic Carbon).

Palabras clave: Pt/g-Al₂O₃-TiO₂, Acid 2,4-Dichlorophenoxyacetic, Photodegradation.

Abstract

Environmental pollution is one of the problems that most concern humanity, being the pollution of the water one of the most serious problems, due to their scarcity and to the demographic overexploitation, and even more so when the different industrial processes in which it is used do not give it proper treatment before disposing of it, and the different toxic compounds are discarded in rivers and aquifers, causing various damages to the health, especially of the human. Within the different toxic compounds that have been found in rivers and aquifers, 2,4-Dichlorophenoxyacetic acid, which is a very common herbicide, is used in the control of broadleaved weeds and reduces grass that prevents mainly cereals, this is the Third most widely used herbicide in North America, and the most widely used in the world an classified as carcinogenic 2B by the EPA. However, there are different processes that study different methods for their degradation, among which are the Advanced Oxidation Processes (POA's), which have shown encouraging results, being the most promising, since has been able to degrade 100% different organic and toxic compounds, for this reason, this work focuses on the study of the catalytic Photodegradation of 2,4-D, with catalysts of Pt support in Al₂O₃-TiO₂, since it is TiO₂ one of the Semiconductors most used in this technique, however this material has some deficiencies, so it is imperative to modify its physicochemical properties by doping it with other materials, and Pt and Al₂O₃ have demonstrated good interaction in the photoactivity due to the Synergistic effect between this materials and TiO₂, the treatment being a crucial point in its activity. An increase was observed in the specific area, and the Uv spectra showed a 95% degradation at the characteristic wavelength for 2,4-dichlorophenoxyacetic acid for the catalyst of Pt treated with H₂, and this was corroborated by the TOC.

Keywords: Pt/g-Al₂O₃-Tio, acid 2,4-Dichlorophenoxyacetic, Photodegradation.

OBTENCIÓN DE BIOCOMBUSTIBLE VALÉRICO TIPO DIESEL A PARTIR DE γ -VALEROLACTONA USANDO CATALIZADORES BIFUNCIONALES

Karla G. Martínez Figueredo^a, Emanuel M. Virgilio^a, Darío J. Segobia^a, Nicolás M. Bertero^{a,*}

^a Grupo de Investigaciones en Ciencia e Ingeniería Catalíticas (GICIC)/Instituto de Investigaciones en Catálisis y Petroquímica (INCAPE)-CONICET/Universidad Nacional del Litoral (UNL), Ruta Nac. 168 KM 0, Paraje El Pozo, (3000) Santa Fe, Argentina.

*e-mail: nbertero@fiq.unl.edu.ar

Resumen

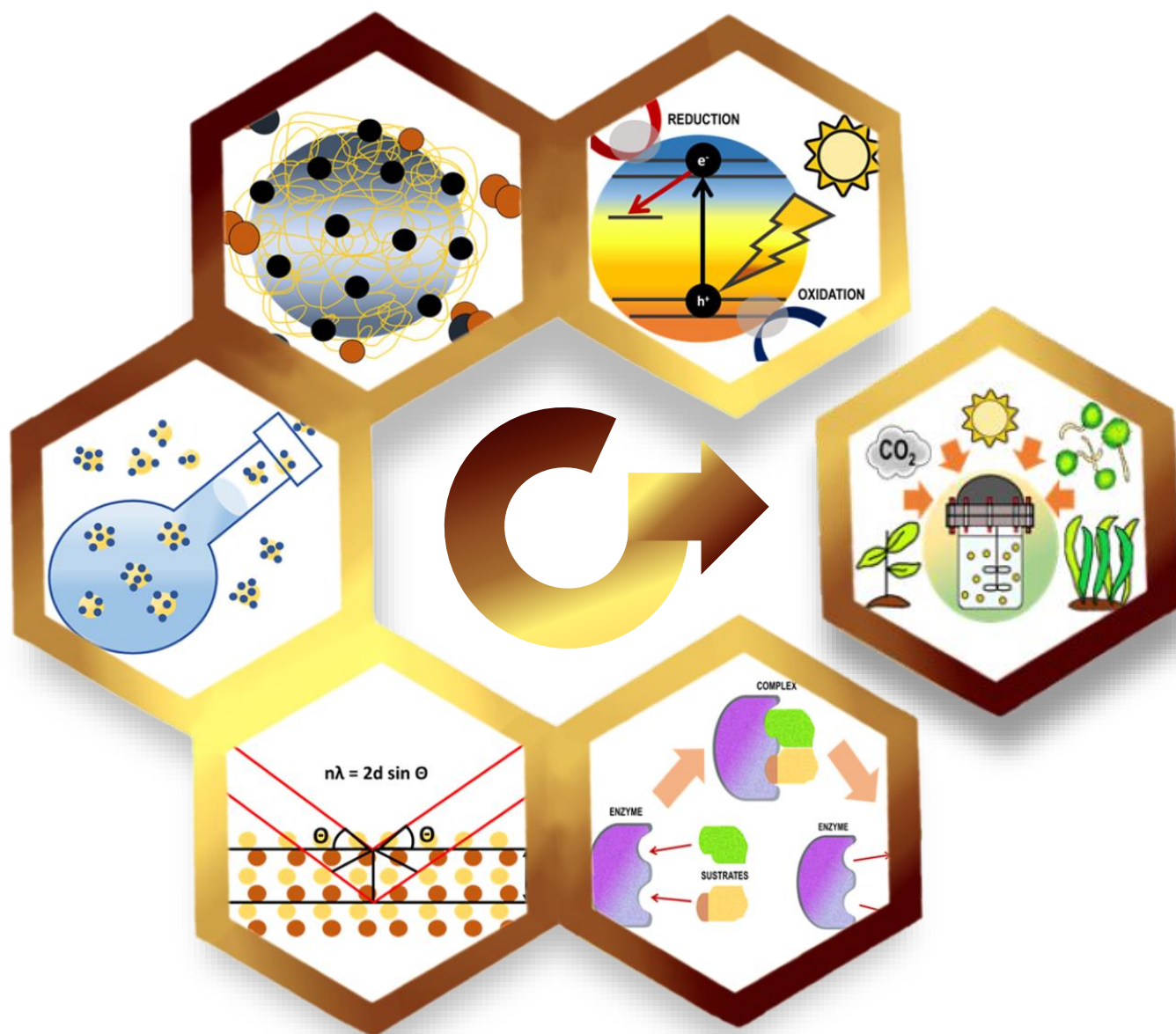
En este trabajo se estudió la producción de valerato de pentilo (VP) desde γ -valerolactona (GVL) en fase líquida en presencia de pentanol sobre catalizadores bifuncionales metal/ácido de Pd y Rh soportado en $\text{SiO}_2\text{Al}_2\text{O}_3$ con cargas metálicas cercanas al 1% y preparados por impregnación a humedad incipiente a partir de precursores clorados. El valerato de pentilo es un biocombustible valérico tipo diesel, cuyas características lo hacen apto para mezclarse con diesel tradicional hasta en un 20%. Se determinó que Pd/ $\text{SiO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3$, sin residuos de Cl, con una densidad de sitios ácidos más alta que la del soporte, con sitios de mayor fuerza y con un tamaño de partículas metálicas promedio de 3,7 nm fue más activo y selectivo a VP que Rh/ $\text{SiO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3$, con un elevado contenido de Cl, con menor densidad de sitios ácidos y partículas metálicas con un tamaño promedio de 5,6 nm. El balance entre sitios metálicos y ácidos parece ser la variable crítica para garantizar la promoción de las dos primeras reacciones ácidas como también la hidrogenación del intermediario final a VP con elevada velocidad. La productividad de VP obtenida sobre Pd/ $\text{SiO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3$ está entre 7 y 27 veces los valores informados en literatura.

Palabras clave: biomasa; γ -valerolactona; valerato de pentilo; biocombustible; Pd/ $\text{SiO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3$.

Abstract

The liquid-phase production of pentyl valerate (PV) from γ -valerolactone (GVL) in the presence of pentanol over $\text{SiO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3$ -supported bifunctional catalysts based on Rh and Pd with metal loadings of about 1% and prepared by incipient wetness impregnation from chlorinated precursors was studied in this work. Pentyl valerate is a diesel-type valeric biofuel with properties that make possible to blend it with traditional diesel up to 20% proportion. It was determined that Pd/ $\text{SiO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3$, without chlorinated residues, with a higher acid site density than the support, with stronger acid sites and with an average metal particle size of 3.7 nm was more active and selective to PV than Rh/ $\text{SiO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3$, with a high chlorine content, with a lower acid site density and an average metal particle size of 5.6 nm. The balance between metal and acid sites need to be adjusted in order to promote not only the first two acid-catalyzed reactions, but also the hydrogenation of the last intermediate towards PV with an appropriate rate. The PV productivity over Pd/ $\text{SiO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3$ was between 7 and 27 times the reported values.

Keywords: biomass; γ -valerolactone; pentyl valerate; biofuel; Pd/ $\text{SiO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3$.



SESIÓN DE CARTELES 1

**DISEÑO, SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE SÍLICAS MESOPOROSAS
NANOESTRUCTURADAS A PARTIR DE MOLDEANTES RENOVABLES PARA SU APLICACIÓN
EN LA DEGRADACIÓN DE GLIFOSATO**

Eliana Vaschetto^{a*}, Gabriel Ferrero^a, Germán Carrillo^a, Joaquín Pérez-Pariente^b, Griselda Eimer^a

^a Centro de Investigación y Tecnología Química (CITEQ), Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), Universidad Tecnológica Nacional (UTN), Facultad Regional Córdoba– Maestro Lopez esq. Cruz Roja Argentina, 5000, Córdoba, Argentina.

^b Instituto de Catálisis y Petroleoquímica, ICP-CSIC, C/ Marie Curie 2, 28049, Madrid, España.

*elivaschetto@hotmail.com

Resumen

En este trabajo se diseñaron, sintetizaron y caracterizaron sílicas mesoporosas nanoestructuradas a partir de agentes moldeantes renovables (monoestearato de glicerilo y glicerol) para desarrollar catalizadores heterogéneos, a fin de evaluarlos en la reacción de degradación/fragmentación de glifosato bajo condiciones de reacción extremadamente suaves: presión atmosférica y temperatura ambiente. Estos materiales se desarrollaron mediante el método de impregnación húmeda con diferentes contenidos de hierro (2,5; 5; 10 y 20% p/p) y por incorporación directa del metal con relación molar Si/Fe=20. Los catalizadores se caracterizaron por DRX, Isotermas de adsorción y desorción de N₂, UVvis-DR e ICP. Los catalizadores fueron evaluados mediante oxidación húmeda catalítica con aire, logrando niveles de degradación del herbicida del orden del 70%. De esta manera se pretende aportar sustentabilidad a la industria química, a partir del empleo de glicerol residual y/o monoestearato de glicerilo para la síntesis del soporte catalítico mesoporoso presentando una interesante tecnología con menor impacto ambiental para la remediación de aguas contaminadas con glifosato.

Palabras clave: porógenos renovables, sílicas mesoporosas, degradación de glifosato.

Abstract

In this work nanostructured mesoporous silicas from renewable molding agents (glyceryl monostearate and glycerol) were successfully designed, synthesized and characterized to develop heterogeneous catalysts, in order to evaluate them in the degradation/fragmentation reaction of glyphosate under extremely mild reaction conditions: atmospheric pressure and room temperature. These materials were developed by wet impregnation method with different iron contents (2.5; 5; 10 and 20% w/w) and by direct incorporation of the metal (molar ratio Si/Fe=20). The catalysts were characterized by XRD, N₂ adsorption and desorption isotherms, UVvis- DR and ICP. The catalysts were evaluated by catalytic wet oxidation with air, achieving herbicide degradation levels of about 70%. In this way, it is intended to add sustainability to the chemical industry from the use of residual glycerol and/or glyceryl monostearate in the synthesis of the mesoporous catalytic supports, for its application in an lower environmental impact technology for the remediation of water contaminated with glyphosate.

Keywords: Renewable porogens, mesoporous silicas, glyphosate degradation.

PREPARACIÓN Y CARACTERIZACIÓN DE MICROESFERAS DE γ - Al_2O_3 MEDIANTE LA TÉCNICA DE SECADO POR ASPERSIÓN USANDO DOS ATOMIZADORES

Arturo Pallares-García^{a*}, José L. Contreras-Larios^a, Beatriz Zeifert^b, Tamara Vázquez^b

^a Laboratorio de Catálisis, Dep. Energía, CBI, Universidad Autónoma Metropolitana–Azcapotzalco, C.P. 02200, CDMX, México.

^b ESIQIE, Instituto Politécnico Nacional, C.P. 07738, CDMX, México.

*e-mail: rotuar20@hotmail.com

Resumen

En este trabajo se prepararon microesferas de γ - Al_2O_3 mediante secado por aspersión de una suspensión acuosa de bohemita y posterior tratamiento térmico. Se utilizó una boquilla de un solo fluido y un atomizador rotatorio de disco. Se probaron los diámetros de orificio de boquilla de 0,74, 1,32 y 1,47 mm, variando la presión de atomización de 2,45, 3,43 y 4,41 MPa para cada orificio de boquilla. En el caso del atomizador rotatorio, la velocidad de rotación del disco se varió en el rango de 3000-14,000 rpm. Se determinaron las variables reológicas y el TGA de la suspensión de bohemita. Las microesferas calcinadas a 550 °C se caracterizaron por fisisorción de N_2 , XRD y SEM. Se analizan los efectos de la presión de atomización en la boquilla, el tamaño del orificio de la boquilla y las diferentes velocidades de rotación del disco sobre las propiedades físicas y de textura de los polvos. Los resultados revelaron que al aumentar la presión de atomización en la boquilla y la velocidad de rotación del disco, el tamaño máximo de partícula y el diámetro promedio Sauter de partícula disminuyeron; sin embargo, aumentó el área específica y la densidad aparente de los polvos. Las microesferas de γ - Al_2O_3 obtenidas se pueden utilizar como soportes en la preparación de catalizadores.

Palabras clave: microesferas de γ - Al_2O_3 , morfología, propiedades físicas, secado por aspersión, atomizador rotatorio, boquilla de un solo fluido.

Abstract

In this work, γ - Al_2O_3 microspheres were prepared by spray drying of an aqueous boehmite suspension and a subsequent heat treatment. A single-fluid nozzle and disk rotary atomizer were used. The nozzle orifice diameters of 0.74, 1.32 and 1.47 mm were tested, varying the atomization pressure of 2.45, 3.43 and 4.41 MPa for each nozzle orifice. In the case of rotatory atomizer, the disk rotation speed was varied in the range of 3000- 14,000 rpm. The rheological variables and the TGA of boehmite suspension were determined. The calcined microspheres at 550 °C were characterized by N_2 physisorption, XRD and SEM. The effects of the atomization pressure into nozzle, nozzle orifice size, and the different disc rotation speeds on the physical and textural properties of the powders are analyzed. The results revealed that by increasing the atomization pressure at the nozzle and the disc rotation speed, the maximum particle size and the Sauter mean diameter of particle decreased; however, the specific area and the bulk density of the powders increased. The obtained γ - Al_2O_3 microspheres can be used as supports in the preparation of catalysts.

Keywords: γ - Al_2O_3 microspheres, morphology, physical properties, spray drying, rotary atomizer, single-fluid nozzle.

SÍNTESIS HIDROTHERMAL Y CARACTERIZACIÓN DE ÓXIDOS MIXTOS DE ALUMINIO Y GALIO

Reyes L.G.^{a,*}, Antúñez-García J.^b, Fuentes-Moyado S.^b, Díaz de León J.N.^b

^a Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada Baja California, CICESE, 22800, Ensenada Baja California, México

^b Centro de Nanociencias y Nanotecnología, Universidad Nacional Autónoma de México, 22800, Ensenada Baja California, México.

*e-mail: lgreyes@cicese.edu.mx

Resumen

En este trabajo se sintetizaron óxidos mixtos de aluminio y galio con 0, 25, 50, 75 y 100 w.t.% de óxido de galio mediante el método hidrotermal asistido con Tritón X-100. Asimismo, se caracterizó la morfología, propiedades texturales, estructura, y propiedades ópticas de los materiales. Se encontró una gran compatibilidad del aluminio y el galio para formar óxidos mixtos. Asimismo, se encontró la formación preferencial de nanovarillas y de ortodros a bajas y altas concentraciones de galio respectivamente. Además, se identificó que las nanovarillas representan la principal contribución al área superficial de los materiales. Aún más, se observó una disminución lineal de la brecha de banda al aumentar la concentración de galio en los materiales. La fuerte dependencia de las propiedades con la composición observada permite el diseño racional de materiales potencialmente aplicables como catalizadores o soportes catalíticos.

Palabras clave: óxidos mixtos, alúmina, galia.

Abstract

In this work, Al-Ga mixed oxides with 0, 25, 50, 75 y 100 wt.% of gallium oxide were synthesized by a Triton X-100 assisted hydrothermal precipitation method. Moreover, the material's morphology, texture properties, structure, and optical properties were characterized. Excellent compatibility to form aluminum-gallium mixed-oxides was found. Likewise, the preferential formation of nanorods and orthohedric bars was found at low and high concentrations of gallium, respectively. In addition, it was identified that nanorods represent the main contribution to the surface area of materials. Furthermore, a linear decrease in band gap occurs with increasing gallium concentration in materials. The strong dependence of the properties on the composition allows the rational design of potentially suitable materials as catalysts or catalytic supports.

Keywords: mixed-oxides, alumina, galia.

CATALIZADORES TIPO POLIOXOMETALATOS PARA DESULFURACIÓN OXIDATIVA

Vanessa Martínez Cornejo^a, José Alfredo García López^a, Luis Cedeño Caero^{a*}

^a Unidad de Investigación en Catálisis/Dpto. Ingeniería de Química. /Facultad de Química/Universidad Nacional Autónoma de México, 04510, Ciudad de México, México.

*e-mail: caero@unam.mx

Resumen

Los polioxometalatos (POMs) han llamado la atención en los últimos años por su alta estabilidad térmica y favorables propiedades catalíticas, los que los hacen excelentes candidatos como catalizadores para el proceso de desulfuración oxidativa (ODS). Para estudiar sus propiedades, se sintetizaron una serie de catalizadores tipo POMs monometálicos y bimetalicos a base de óxidos de molibdeno y/o vanadio soportado en alúmina modificada con fósforo. Los catalizadores fueron caracterizados por reducción a temperatura programada (TPR) y microscopía electrónica de barrido (SEM-EDX). La actividad de los catalizadores fue discutida en función de la producción de sulfonas y las especies parcialmente reducidas de Mo y V. Se encontró que la adición de fósforo aumentaba la actividad intrínseca de los catalizadores monometálicos y bimetalicos de Mo en el proceso ODS. El aumento de la actividad está relacionado con el incremento de las especies tetraédricas de Mo y a la incorporación del P en los sitios tetraédricos de la alúmina.

Palabras clave: Polioxometalatos, Desulfuración oxidativa, Catalizadores bimetalico Mo-V, fósforo.

Abstract

Polyoxometalates (POMs) have attracted attention in recent years for their high thermal stability and favorable catalytic properties. Polyoxometalates are excellent candidates as catalysts for the oxidative desulfurization (ODS) process. A series of monometallic and bimetallic polyoxometalate type catalysts were synthesized based on molybdenum and/or vanadium oxides supported on phosphorus-modified alumina. The catalysts were characterized by temperature programmed reduction (TPR) and scanning electron microscopy (SEM-EDX). The activity of the catalysts was discussed as a function of the production of sulfones and the partially reduced species of Mo and V. The addition of phosphorus increased the intrinsic activity of the Mo monometallic and bimetallic catalyst in the ODS process. The increase in activity is related to the increment in the tetrahedral species of Mo and the incorporation of P in the tetrahedral sites of alumina.

Keywords: Polyoxometalates, ODS, bimetallic catalysts-based molybdenum-vanadium, phosphorus.

**ESTUDIO COMPARATIVO DE ARCILLAS PILAREADAS IMPREGNADAS CON V vs Cu
EN LA OXIDACIÓN DEL ALCOHOL BENCÍLICO**

Ema V. Sabre^{a,*}, Belén M. Viola^a, Elías Origlia^a, Sandra G. Casuscelli^a, Analía L. Cánepa^a

^a Centro de Investigación y Tecnología Química (CITeQ-CONICET-UTN)/Universidad Tecnológica Nacional/Facultad Regional Córdoba, X5016ZAA, Córdoba, Argentina

*e-mail: emasabre@gmail.com; esabre@frc.utn.edu.ar

Resumen

Se sintetizaron arcillas pilareadas con policationes de Al y Ti, las cuales posteriormente fueron impregnadas con vanadio y cobre. En todos los materiales, el área específica fue superior al de la arcilla original, dando cuenta de la formación de los pilares, que permiten expandir las capas de la misma. Además, en los espectros de UV-vis-RD no se evidenció la presencia de los óxidos de V y Cu, probablemente porque la cantidad que se agregó de estos metales es apropiada para permitir que sus especies se puedan dispersar sobre el material.

Todos los catalizadores preparados se estudiaron en la reacción de oxidación de alcohol bencílico en fase líquida utilizando H₂O₂ al 30% como oxidante y acetonitrilo como disolvente. El benzaldehído fue el principal producto obtenido. Se observó que V(0,5%)/Ti-PILC y V(0,5%)/Al-PILC mostraron mayor actividad catalítica que Cu(0,5%)/Ti-PILC y Cu(0,5%)/Al-PILC. Estos materiales mostraron un rendimiento a benzaldehído cercano al 7% con una selectividad superior al 95% en las condiciones utilizadas.

Palabras clave: Arcillas pilareadas, vanadio, cobre, oxidación, alcohol bencílico.

Abstract

Pillared clays with polycations of Al and Ti were synthesized, which were later impregnated with vanadium and copper. In all materials, the specific area was greater than that of the original clay, accounting for the formation of the pillars, which allow its layers to expand. Furthermore, the UV-vis-RD spectra did not show the presence of V and Cu oxides, probably because the amount of these metals added is appropriate to allow their species to be dispersed on the material.

All the prepared catalysts were tested over the liquid phase benzyl alcohol oxidation reaction using 30% H₂O₂ as oxidant and acetonitrile as solvent. Benzaldehyde was the main product obtained. It was observed that V(0,5%)/Ti-PILC and V(0,5%)/Al-PILC exhibited higher activity catalytic than Cu(0,5%)/Ti-PILC and Cu(0,5%)/Al-PILC. These materials showed a yield to benzaldehyde close to 7% with selectivity greater than 95% under the conditions used.

Keywords: Pillared clays, vanadium, copper, oxidation, benzyl alcohol.

UNRAVELING THE STRUCTURAL BEHAVIOR OF SODIUM TITANATE NANOTUBES AND HYDROGEN TITANATE NANOTUBES UNDER DIFFERENT ATMOSPHERES: A STUDY BY IN SITU RAMAN SPECTROSCOPY

Iván Alonso Santos-López^{a,b*}, Brent E. Handy^{b*}, Angel G. Rodríguez^c, José Luis Sánchez García^b

^a Universidad Autónoma de Nuevo León, Facultad de Ciencias Químicas. Ave. Universidad S/N, Cd. Universitaria, C.P. 66455, San Nicolás de los Garza, N.L. México.

^b Universidad Autónoma de San Luis Potosí, Facultad de Ciencias Químicas. Av. Dr. Manuel Nava No.6, Zona Universitaria, C.P. 78210, San Luis Potosí, S.L.P., México.

^c Coordinación para la Innovación y la Aplicación de la Ciencia y la Tecnología, UASLP, Álvaro Obregón 64, San Luis Potosí, S.L.P. 78000, Mexico.

*e-mail: ivan.santoslp@uanl.edu.mx, handy@uaslp.mx

Resumen

Nanotubos de titanatos de sodio (NaTNT) o de hidrogeno (HTNT) sintetizados por medio de la síntesis hidrotérmica, tienen desde décadas pasadas potenciales aplicaciones en diferentes áreas: conversión de energía-fuentes renovables de energía-, catálisis, electrocatálisis, fotocatalisis. Por ende, caracterización térmica y estructural es indispensable para el entendimiento de su comportamiento catalítico. Nanotubos de titanatos protonados y sódicos se sintetizaron por la técnica hidrotermal, estudiándose la estabilidad térmica de los nanotubos, por medio de análisis in situ y ex situ mediante rampas de calentamiento en función de la atmósfera (N₂, O₂ y H₂) de tratamiento. La evolución estructural, morfología y fases cristalinas fueron analizadas por TEM, XRD y espectroscopía Raman in situ. Los NaTNT mantienen su morfología tubular hasta temperaturas de 600 °C, por encima de esta temperatura se presentaron transformaciones estructurales detectadas por espectroscopia Raman; y la estructura cristalina es dependiente de la atmósfera de tratamiento térmico (700 °C & 800 °C), obteniendo la fase cristalina de Na₂Ti₃O₇ en N₂ y Na₂Ti₆O₁₃ en oxígeno e hidrógeno determinadas por Raman y XRD. La morfología tubular de HTNT colapsa y la evolución estructural inicia a temperaturas de 400 °C, presentando la fase anatasa y rutilo, y partículas, esto sin importar la atmósfera de tratamiento.

Palabras clave: Espectroscopia Raman in situ, nitrógeno, hidrogeno, oxígeno, nanotubos de titanatos de sodio/hidrogeno.

Abstract

Nanotubes of sodium titanates (NaTNT) or hydrogen (HTNT) synthesized through hydrothermal synthesis, have since decades past potential applications in different areas: energy conversion -renewable energy sources-, catalysis, electrocatalysis, photocatalysis. Therefore, thermal and structural characterization is essential for understanding its catalytic behavior. Nanotubes of protonated and sodium titanates were synthesized by the hydrothermal technique, studying the thermal stability of the nanotubes, using in situ and ex situ analysis utilizing heating ramps as a function of the treatment atmosphere (N₂, O₂, and H₂). The structural evolution, morphology, and crystalline phases were analyzed by TEM, XRD, and in situ Raman spectroscopy. NaTNTs maintain their tubular morphology up to temperatures of 600 °C, above this temperature, structural transformations detected by Raman spectroscopy occur; and the crystalline structure is dependent on the heat treatment atmosphere (700°C & 800°C), obtaining the crystalline phase of Na₂Ti₃O₇ in N₂ and Na₂Ti₆O₁₃ in oxygen and hydrogen detected by Raman and XRD. The tubular morphology of HTNT collapses and the structural evolution begins at temperatures of 400 °C, presenting the anatase and rutile phase, and particles, regardless of the treatment atmosphere.

Keywords: in situ Raman Spectroscopy, nitrogen, hydrogen, oxygen, sodium/hydrogen titanates nanotubes.

EFFECTO DEL CONTENIDO DE Cu EN LA VELOCIDAD DE LA REDUCCIÓN DE NITROAROMÁTICOS SOBRE CATALIZADORES BIMETÁLICOS Ni-Cu

Ávalos Ballester Victoria^{a*}, Smolentseva Elena^b, Acosta Ruelas Brenda Jeanneth^{c§}.

^a Posgrado en Ciencias Aplicadas, Coordinación para la Innovación y la Aplicación de la Ciencia y la Tecnología, Universidad Autónoma de San Luis Potosí, Álvaro Obregón 64, San Luis Potosí, S.L.P. 78000, México.

^b Universidad Nacional Autónoma de México, Centro de Nanociencias y Nanotecnología, Km. 107 Carretera Tijuana a Ensenada, C.P. 22860, Ensenada, Baja California, México.

^c Cátedras CONACYT, Coordinación para la Innovación y la Aplicación de la Ciencia y la Tecnología, Universidad Autónoma de San Luis Potosí, Álvaro Obregón 64, San Luis Potosí, S.L.P. 78000, México.

*e-mail: victoria_avalos04@hotmail.com

§e-mail: brenda.acosta@uaslp.mx

Resumen

En este trabajo se realizó la decoración de nanopartículas de Ni con diferentes contenidos de Cu para estudiar su desempeño en la reducción catalítica de nitroaromáticos. Los catalizadores fueron sintetizados por la ruta coloidal y caracterizados por ICP, TEM y XPS. Los resultados demostraron que las condiciones de depósito de Cu promueven la hidrólisis de las nanopartículas iniciales de Ni. Los catalizadores se caracterizaron con morfologías jerárquicas, mostradas por primera vez en nanopartículas bimetálicas NiCu, con alta dispersión de los metales. Las nanopartículas bimetálicas de NiCu se caracterizaron con mayor actividad en la reducción catalítica de los isómeros 2- 3- y 4-nitrofenol que pueden atribuirse al efecto sinérgico entre los metales Ni y Cu independientemente del contenido de Cu. Hasta el momento, las nanopartículas bimetálicas NiCu que preparamos excede la actividad catalítica de las reportadas en la literatura estudiadas en la misma reacción.

Palabras clave: Catalizadores bimetálicos, níquel, cobre, nitroaromáticos, reduccion.

Abstract

In this work the decoration of Ni nanoparticles with Cu at different Cu loadings was carried out to study their catalytic performance in the reduction of nitroaromatics. The catalysts were synthesized by the colloidal approach and characterized by ICP, TEM and XPS. It was found that Cu deposition promoted the hydrolysis of the initial Ni nanoparticles. The catalysts were characterized with hierarchical morphologies firstly obtained for the NiCu bimetallic nanoparticles, with a high metal dispersion. The bimetallic NiCu nanoparticles were characterized with highest activity in the catalytic reduction of the 2- 3- and 4-nitrophenol isomers that may be attributed to the synergetic effect between Ni and Cu metals independently on the Cu content. To the best of our knowledge, the catalytic activity of NiCu bimetallic nanoparticles presently prepared exceed the catalytic activity of those reported in the literature studied in the same reaction.

Keywords: Bimetallic catalysts, nitroaromatics, nickel, copper, reduction.

SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE MATERIALES BIMETÁLICOS DE Cu-Pd/TiO₂ PARA LA DEGRADACIÓN FOTOCATALÍTICA DE DICLOFENACO E IBUPROFENO

Juliana Reyes Calle^a, Alba Nelly Ardila Arias^{b*}, Erasmo Arriola Villaseñor^c

^a Grupo de Investigación en Catálisis Ambiental y Energías Renovables, Politécnico Colombiano Jaime Isaza Cadavid, 050010, Medellín, Colombia

*e-mail: anardila@elpoli.edu.co

Resumen

Se realizó la síntesis y caracterización de fotocatalizadores bimetálicos de Pd y Cu sobre TiO₂ para evaluar su desempeño en la posterior degradación fotocatalítica de diclofenaco e ibuprofeno en aguas reales y dilucidar el rol de las propiedades electrónicas y cristalinas de los materiales en la fotodegradación de dichos fármacos. Se sintetizaron los materiales por el método de impregnación húmeda del TiO₂ con una carga de 5%p para cada metal. Se caracterizaron por UV-Vis-DRS, AAS, área BET, FTIR y TPD-NH₃, y se evidenció una banda entre 200 y 400 nm por las transiciones de la banda de valencia a la de conducción. Se observó una disminución en el band gap de 3.0eV a 1.50 eV, mostrando cambios en las propiedades electrónicas del soporte. En el catalizador bimetalico, las intensidades disminuyeron significativamente. Con AAS se encontró que los fotocatalizadores exhibieron una carga de metal muy cercana a la nominal. Se concluye que el dopaje de TiO₂ con Cu y Pd produce una reducción de la energía de brecha del mismo y cuando se combinan ambos metales en el material, la cantidad de sitios ácidos disminuye en comparación con el catalizador monometálico, su naturaleza mismos no se afecta significativamente.

Palabras clave Fotocatalizadores de CuPd, Fotocatálisis, Diclofenaco, Ibuprofeno.

Abstract

Synthesis and characterization of bimetallic photocatalysts of Pd and Cu on TiO₂ was carried out to evaluate their performance in the subsequent photocatalytic degradation of diclofenac and ibuprofen in real waters and to elucidate the role of the electronic and crystalline properties of the materials in the photodegradation of these drugs. The materials were synthesized by the wet impregnation method of TiO₂ with a load of 5% w for each metal. They were characterized by UV-Vis-DRS, AAS, BET area, FTIR and TPD-NH₃, and a band between 200 and 400 nm was evidenced by the transitions from the valence band to the conduction band. A decrease in the band gap from 3.0eV to 1.50 eV was observed, showing changes in the electronic properties of the support. In the bimetallic catalyst, the intensities decreased significantly. With AAS it was found that the photocatalysts exhibited a metal load very close to the nominal one. It is concluded that the doping of TiO₂ with Cu and Pd produces a reduction of the band gap of the same and when both metals are combined in the material, the amount of acid sites decreases compared to the monometallic catalyst, its nature itself is not affected significantly.

Keywords CuPd photocatalysts, Photocatalysis, Diclofenac, Ibuprofen.

CATALIZADORES SÓLIDOS ÁCIDOS Sn-TMA-MOF Y Sn-TMA-MOF-SO₃H. SÍNTESIS, CARACTERIZACIÓN Y ACTIVIDAD CATALÍTICA EN LA ESTERIFICACIÓN DE ÁCIDO OLEICO

Juan Pablo Chávez-León^a, Horacio González^{a,*}, Denis Aidee Cabrera-Munguia^b, Edgar Tututi-Ríos^a, J.L. Rico^a.

^a Facultad de Ingeniería Química, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, 58060, Morelia, Michoacán, México.

^b Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Autónoma de Coahuila, 25280, Saltillo, México.

*e-mail: horacio.gonzalez@umich.mx.

Resumen

En este trabajo se presenta la síntesis y caracterización de las estructuras organometálicas Sn-TMA-MOF y Sn-TMA-MOF-SO₃H, las cuales poseen propiedades ácidas interesantes, haciendo atractivo su uso como catalizadores para la esterificación de ácido oleico con metanol. El uso de este tipo de materiales representa un enfoque atractivo para la producción de biodiesel a partir de aceites con un alto contenido de ácidos grasos. Dichos materiales fueron caracterizados para determinar su estructura cristalina (DRX), propiedades texturales (fisisorción de N₂), estabilidad térmica (TGA), grupos funcionales (FTIR), morfología (SEM), coordinación de las especies de Sn (UV-Vis-DRS) y acidez total (titulación). El estudio de reacción se realizó a T = 80 °C; treacción= 1 h; mcatalizador = 0.50 g; mácido oleico = 10 g; relación molar etanol/ácido oleico=15:1. Los resultados experimentales de actividad catalítica sugieren que la conversión de ácido oleico está relacionada con los mayores valores de área específica (139.6 m²/g) y concentración de sitios ácidos (2.2 mmol H⁺/g) determinados para el catalizador Sn-TMA-MOF-SO₃H, ya que este catalizador fue el que presentó la mayor conversión de ácido oleico (25.49%).

Palabras clave: esterificación, ácido oleico, Sn-TMA-MOF, Sn-TMA-MOF-SO₃H.

Abstract

This work presents the synthesis and characterization of Sn-TMA-MOF and Sn-TMA-MOF-SO₃H metal- organic frameworks, which possess interesting acid properties, making their use attractive as catalysts for the esterification of oleic acid with methanol. The use of such materials represents an attractive approach for the production of biodiesel from oils with a high content of free fatty acids. These materials were characterized to determine their crystalline structure (XRD), textural properties (N₂ physisorption), thermal stability (TGA), functional groups (FTIR), morphology (SEM), coordination of Sn species (UV-Vis-DRS) and total acidity (titration). The reaction study was carried out at T = 80 °C; treaction = 1 h; mcatalyst = 0.50 g; moleic acid = 10 g; ethanol/oleic acid molar ratio = 15:1. The experimental results of catalytic activity suggest that the conversion of oleic acid is related to the highest values of specific area (139.6 m²/g) and concentration of acid sites (2.2 mmol H⁺/g), determined for the Sn-TMA-MOF-SO₃H catalyst, since this catalyst was the one that presented the highest conversion of oleic acid (25.49%).

Keywords: esterification, oleic acid, Sn-TMA-MOF, Sn-TMA-MOF-SO₃H.

ONE-POT SYNTHESIS OF PdRu@SiO₂ CORE-SHELL NANOREACTORS HIGHLY EFFECTIVE IN THE REDUCTION OF 4-NITROPHENOL TO 4-AMINOPHENOL

Eduardo Arenas-Sánchez^a, Elena Smolentseva^b, Andrey Simakov^b, Brenda Acosta^{c*}

^a Coordinación para la Innovación y la Aplicación de la Ciencia y la Tecnología, Universidad Autónoma de San Luis Potosí, Av. Sierra Leona #550, Col. Lomas 2a. Sección, CP 78210, San Luis Potosí, SLP,

Mexico

^b Universidad Nacional Autónoma de México, Centro de Nanociencias y Nanotecnología, Km. 107 Carretera Tijuana a Ensenada, C.P. 22860, Ensenada, Baja California, Mexico

^c Cátedra-CONACYT, Coordinación para la Innovación y la Aplicación de la Ciencia y la Tecnología, Universidad Autónoma de San Luis Potosí, Av. Sierra Leona #550, Col. Lomas 2a. Sección, CP 78210, San Luis Potosí, SLP, Mexico

*e-mail: brenda.acosta@uaslp.mx

Resumen

En este trabajo, se presenta la síntesis one-pot de nanorreactores tipo core-shell basados en núcleos de Pd, Ru y PdRu y cápsulas de sílice mesoporosa (@mSiO₂). Las muestras obtenidas se caracterizaron por XRD, TEM, Fisisorción de N₂ y XPS. Los resultados confirman el confinamiento de los núcleos mono- y bi- metálicos en las estructuras amorfas y mesoporosas (tamaño de poro ~3 nm) de sílice. La eficiencia catalítica de los nanorreactores fue evaluada en la reacción modelo de reducción de 4-nitrofenol a 4-aminofenol, además de compararse con los catalizadores soportados de referencia (Pd/SiO₂, Ru/SiO₂ y PdRu/SiO₂). La estimación del TOF reveló la siguiente tendencia en actividad PdRu@mSiO₂ > Pd@mSiO₂ > Ru@mSiO₂ con 400, 271, y 215 min⁻¹μmol de metal-1, respectivamente. El sobresaliente resultado del nanorreactor bimetalico PdRu@mSiO₂, se atribuye al efecto sinérgico entre los metales por la transferencia de electrones desde el Pd al Ru, sumado a una baja aglomeración de las nanopartículas por la presencia de la cápsula. La prueba de estabilidad catalítica evidenció que los nanorreactores continuaron activos incluso después de 4 corridas consecutivas, en contraste con los catalizadores soportados de referencia. La metodología de síntesis optimizada permite preparar nanorreactores de estructura uniforme, independiente de la naturaleza del núcleo.

Palabras clave: síntesis one-pot, nanorreactores, core-shell, PdRu@SiO₂, 4-nitrofenol.

Abstract

In this work, the one-pot synthesis of core-shell nanoreactors based on Pd, Ru and PdRu nuclei and mesoporous silica shell (@mSiO₂) is presented. The obtained samples were characterized by XRD, TEM, N₂ Physisorption and XPS. The results confirm the confinement of the mono- and bi-metallic nuclei inside the amorphous and mesoporous silica structures (pore size ~ 3 nm). The catalytic efficiency of the nanoreactors was evaluated in the model reaction of 4-nitrophenol reduction to 4-aminophenol, further compared with their reference supported catalysts (Pd/SiO₂, Ru/SiO₂ and PdRu/SiO₂). The TOF estimation revealed the following trend in activity PdRu@mSiO₂ > Pd@mSiO₂ > Ru@mSiO₂ with 400, 271 and 215 min⁻¹μmol of metal-1, respectively. The highest activity of the PdRu@mSiO₂ bimetallic nanoreactor is attributed to the synergetic effect between metals due to the electrons transfer from Pd to Ru, and the low agglomeration of nanoparticles due to the presence of the shell. In fact, the catalytic stability test showed that the nanoreactors remained active even after 4 consecutive runs, in contrast to the reference supported catalysts. The optimized synthesis methodology made possible to prepare nanoreactors with a uniform structure, independent of the nature of the nucleus.

Keywords: one-pot synthesis, nanoreactors, 4-nitrophenol, Core-shell, PdRu@SiO₂.

SÍNTESIS HIDROTÉRMICA, CARACTERIZACIÓN Y ACTIVIDAD CATALÍTICA DE MATERIALES KIT-6 FUNCIONALIZADOS CON GRUPOS SULFÓNICOS

José Alejandro Alcauter Arreola^a, Edgar Tututi Ríos^a, Horacio Gonzáles Rodríguez^{a,*}, Denis Aidee Cabrera-Munguia^b y José Luis Rico Cerda^a

^a Facultad de Ingeniería Química, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, 58030, Morelia, Michoacán, México.

^b Materiales avanzados, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Autónoma de Coahuila, Ing. Cárdenas Valdez s/n, República, Saltillo, Coahuila, 25280, México.

*e-mail: horacio.gonzalez@umich.mx

Resumen

En este trabajo se sintetizaron materiales mesoporosos KIT-6 funcionalizados con grupos $-\text{PrSO}_3\text{H}$, en un sólo paso, empleando el método sol-gel. Se investigó el efecto de la relación molar Si/S (10, 20 y 40) sobre su estructura cristalina (DRX), propiedades texturales (fisisorción de N_2), estabilidad térmica (TGA), grupos funcionales (FTIR), morfología (SEM), y acidez total (titulación). Los catalizadores mesoporosos resultantes presentan la estructura tridimensional cúbica típica del material KIT-6, áreas específicas grandes (472 a 798 m^2/g) y diámetros de poro amplios (56-78 Å). Se estudió el efecto de la relación molar Si/S en los catalizadores, sobre la conversión de ácido oleico, en la reacción de esterificación de ácido oleico con metanol. Los resultados experimentales a 80° C y 1 hora de reacción mostraron que para los catalizadores KIT-6- PrSO_3H con relaciones molares Si/S de 40, 20 y 10, se aprecia un incremento gradual en la conversión de ácido oleico de 22, 34 y 47 % respectivamente, en comparación con la KIT-6 que sólo presentó una conversión de 8%. El incremento gradual de la conversión de ácido oleico al aumentar el contenido de grupos sulfónicos en los materiales está en línea con el incremento en la acidez total de los catalizadores.

Palabras clave: KIT-6, grupos sulfónicos, método sol-gel, esterificación, ácido oleico.

Abstract

In this work, KIT-6 mesoporous materials functionalized with $-\text{PrSO}_3\text{H}$ groups were synthesized in a single step, using the sol-gel method. The effect of the Si/S molar ratio (10, 20 and 40) on its crystalline structure (XRD), textural properties (N_2 physisorption), thermal stability (TGA), functional groups (FTIR), morphology (SEM) and total acidity (titration) was investigated. The resulting mesoporous catalysts exhibit the typical cubic three-dimensional structure of the KIT-6 material, large specific areas (472 to 798 m^2/g) and large pore diameters (56-78 Å). The effect of the Si/S molar ratio in the catalysts, on the conversion of oleic acid, in the esterification reaction of oleic acid with methanol was also studied. Experimental results at 80 ° C and 1 hour of reaction, showed that for the KIT-6- PrSO_3H catalysts with Si/S molar ratios of 40, 20 and 10 there is a gradual increase in the conversion of oleic acid of 22, 34 and 47% respectively, compared with the KIT-6, which showed only an 8% conversion. The gradual increase in the conversion of oleic acid by increasing the content of sulfonic groups in the materials is in line with the increase in the total acidity of the catalysts.

Keywords: KIT-6, sulfonic groups, sol-gel method, esterification, oleic acid.

SÍNTESIS DE NANOTUBOS DE CARBONO A PARTIR DE MOFs PARA EL ALMACENAMIENTO DE HIDRÓGENO

Manuel Jurado F.^{a*}, Elizabeth Rojas G.^a, Marisela Maubert F.^a Mónica Calatayud A.^b Naomi Gonzalez H.^c José Contreras L.^c

^a Laboratorio/Dpto. Ciencias Básicas./Universidad Autónoma Metropolitana-Azcapotzalco, 02200, Ciudad de México, México

^b Laboratoire de Chimie Quantique/ Université Pierre et Marie Curie, 75005, Paris, Francia

^c Laboratorio de Catalisis./Universidad Autónoma Metropolitana-Azcapotzalco, 02200, Ciudad de México, México

e-mail: josemanueljuradoflores@outlook.com

Resumen

Se sintetizaron nanotubos de carbono (NTC) por el método CVD para el almacenamiento de H₂, utilizando MOFs tipo BTC y MIL-53 con diferentes composiciones de Fe, Ni y Co que fueron utilizados como catalizadores y fuente primaria de carbono. Los MOFs y NTCs se caracterizaron por las técnicas de DRX, FTIR, MEB Área BET y espectroscopia Raman. Los parámetros de síntesis de los NTCs se modificaron para determinar las condiciones óptimas del crecimiento. La adsorción de H₂ se realizó a 77K para determinar la capacidad de almacenamiento. La espectroscopia Raman In situ se utilizó para determinar los sitios óptimos de adsorción en los NTCs, también se realizó la simulación de la estructura de la MOF Fe-BTC y adsorción de H₂ por medio de un estudio computacional en la UPMC.

Palabras clave (NTC, Hidrógeno, MOFs, Almacenamiento, Raman In situ).

Abstract

Carbon nanotubes (CNT) were synthesized by the CVD method for the storage of H₂, using MOFs type BTC and MIL-53 with different compositions of Fe, Ni and Co that were used as catalysts and primary source of carbon. MOFs and NTCs are characterized by XRD, FTIR, SEM Area BET and Raman spectroscopy techniques. The synthesis parameters of the CNT are modified to determine the optimal growth conditions. H₂ adsorption was performed at 77K to determine storage capacity. In situ Raman spectroscopy was used to determine the optimal adsorption sites in the NTCs, the structure of the Fe-BTC MOF and H₂ adsorption were also simulated by means of a computational study at the UPMC.

Keywords CNT, Hydrogen, MOFs, Storage, Raman In situ.

REDUCCIÓN DE NO USANDO CATALIZADORES DE Ag-Pt/Al₂O₃-WO_x SOPORTADOS SOBRE MONOLITOS DE CORDIERITA EN LA REDUCCIÓN CATALÍTICA SELECTIVA CON PROPANO.

Naomi González Hernández^{a,*}, José L. Contreras Larios^a, Gustavo A. Fuentes Zurita^b, Beatriz Zeifert^c, Tamara Vázquez^a, Manuel Jurado Flores^a.

^a Depto. de Energía. Universidad Autónoma Metropolitana-Azcapotzalco, 02200, Ciudad de México, México

^b Depto. de I.P.H. Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, 09340, Ciudad de México, México

^c ESIQIE. Instituto Politécnico Nacional, 07738, Ciudad de México, México

*e-mail: iq_naomi@hotmail.com.

Resumen

Se estudiaron catalizadores monolíticos de Ag/Al₂O₃ y Ag-Pt/Al₂O₃ promovidos con óxidos de tungsteno (WO_x) como una de las alternativas para la eliminación de óxidos de nitrógeno (NO_x), empleado la reducción catalítica selectiva con propano (HC-SCR). Se utilizó γ-Al₂O₃ preparada por el método de coprecipitación, misma que se depositó sobre monolitos de cordierita comercial. Los materiales se caracterizaron por fisisorción de N₂ (área BET), microscopia electrónica de barrido (SEM/EDS) y difracción de rayos x (XRD). Se empleó la técnica de quimisorción de hidrogeno para determinar la dispersión de Pt. Por espectroscopia UV-vis se observó la presencia de óxidos de plata del tipo Ag₂O, asimismo se tiene la presencia de agrupaciones esféricas de Ag por SEM y una concentración promedio de Ag del 2.40% por EDS. La evaluación catalítica se llevó a cabo en un reactor monolítico, se preparó una mezcla sintética de gases de emisión similar a la de un motor diésel. Se empleó una velocidad espacial de 12.000 h⁻¹ (GHSV) y un flujo volumétrico de 550 ml/min, la temperatura de evaluación se mantuvo constante (350°C) por 4 h. Los resultados obtenidos muestran que todos los catalizadores resultaron ser activos en la reducción de NO, en la combustión de CO y C₃H₈ hacia la formación de CO₂.

Palabras clave: Reducción Catalítica Selectiva-NO_x, Catalizador Pt-Ag/Al₂O₃-WO_x/Cordierita, Reactor monolítico, Impacto ambiental.

Abstract

Monolithic catalysts of Ag/Al₂O₃ and Ag-Pt/Al₂O₃ promoted with tungsten oxides (WO_x) were studied as one of the alternatives for the elimination of nitrogen oxides (NO_x), using selective catalytic reduction with propane (HC-SCR). γ-Al₂O₃ prepared by the coprecipitation method was used, which was deposited on commercial cordierite monoliths. The materials were characterized by N₂ physisorption (BET area), scanning electron microscopy (SEM/EDS) and x-ray diffraction (XRD). The hydrogen chemisorption technique was used to determine the dispersion of Pt. By UV-vis spectroscopy, the presence of silver oxides of the Ag₂O type was observed, as well as the presence of spherical Ag clusters by SEM and an average concentration of Ag 2.40% by EDS. The catalytic evaluation was carried out in a differential reactor; a synthetic mixture of emission gases was prepared similar to that of a diesel engine. A space velocity of 12,000 h⁻¹ (GHSV) and a volumetric flow of 550 ml/min were used, the evaluation temperature was kept constant (350°C) for 4 h. The results obtained show that all the catalysts turned out to be active in the reduction of NO, in the combustion of CO and C₃H₈ towards the formation of CO₂.

Keywords: Selective Catalytic Reduction -NO_x, Pt-Ag/Al₂O₃-WO_x/Cordierite Catalyst, Monolithic Reactor, Environmental Impact.

EFFECTO DE MODIFICACIONES TANDEM SOBRE LAS PROPIEDADES QUÍMICAS Y TEXTURALES DE LA CLINOPTILOLITA MEXICANA PARA USARSE EN PIRÓLISIS CATALÍTICA DE UNA MACROALGA MARINA

Francisco Javier Sanabria-Pérez^a, Carolina Solis Maldonado^{a,b,*}, María Rebeca Rojas Ronquillo^a, Rodrigo Cuervo González^a, Ladislao Sandoval-Rangel^c, Lucía Atehortua^d, Gloria Lourdes Dimas-Rivera^e, Javier Rivera de la Rosa^e

^a Universidad Veracruzana, Facultad de Ciencias Biológicas y Agropecuarias, Doctorado en Ciencias Marinas y Costeras, Carretera Tuxpan - Tampico S/N, Col. Universitaria, CP 92859, Tuxpan de Rodríguez Cano, Veracruz, México.

^b Universidad Veracruzana, Facultad de Ciencias Químicas, Prolongación Venustiano Carranza S/N, CP 93390, Poza Rica de Hidalgo, Veracruz, México.

^c Tecnológico de Monterrey, Av. Eugenio Garza Sada 2501 Sur. Col. Tecnológico, CP 64849, Monterrey, Nuevo León, México.

^d Universidad de Antioquia, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Calle 67, No. 53 – 108, Medellín, Colombia.

^e Universidad Autónoma de Nuevo León, UANL, Facultad de Ciencias Químicas, Ave. Universidad S/N, Cd. Universitaria, CP 66455, Monterrey, Nuevo León, México.

e-mail: casolis@uv.mx

Resumen

Las zeolitas son minerales utilizados en procesos industriales, remediación ambiental y catálisis. Las zeolitas naturales poseen estructuras porosas con propiedades físicas, químicas y catalíticas que pueden ser modificadas para mejorar su desempeño en una reacción o proceso específico. El objetivo del trabajo comprende la determinación de los cambios químicos y texturales ocasionados por las modificaciones ácidas, alcalinas, de intercambio iónico y un proceso tandem sobre la clinoptilolita natural mexicana. La finalidad comprende el diseño de materiales para su uso futuro en procesos de pirólisis catalítica con macroalga. Se realizó una caracterización primaria mediante espectrofotometría de infrarrojo con transformada de Fourier (FTIR). El espectro de los materiales demostró que grupos funcionales característicos de zeolitas tipo clinoptilolita aún se encuentran presentes, pero sufrieron cambios posterior las modificaciones. También se presentaron nuevas señales relacionadas a grupos C=O que se presume fue ocasionado por las modificaciones ácidas, básicas, intercambio iónico y sus combinaciones mediante el proceso tandem aplicado.

Palabras clave: Clinoptilolita, modificación ácida, modificación alcalina, intercambio iónico, tandem.

Abstract

Zeolites are minerals used for industrial processes, environmental remediation, and catalysis. Natural zeolites possess porous structures with physical, chemical, and catalytic properties that can be modified to improve their performance in a specific reaction or process. The objective of this work includes the determination of chemical and textural changes caused by acidic, alkaline, ion exchange modifications, and a tandem process over Mexican natural clinoptilolite. The purpose includes the design of materials for future use in catalytic pyrolysis with macroalgae. A primary characterization was performed by Fourier transform infrared spectrophotometry (FTIR). Spectra of the materials showed that the characteristic functional groups of clinoptilolite-type zeolite are still present. New signals related to C=O groups were also presented, presumably caused by the acid, alkali, ion exchange modifications, and tandem procedure applied.

Keywords: Clinoptilolite, acid modification, alkaline modification, ion exchange, tandem.

MICRO Y NANO ÓXIDOS MIXTOS DE ALUMINIO E ITRIO CON POTENCIAL APLICACIÓN COMO SOPORTES CATALÍTICOS

E. M. Mendoza-Núñez^{a1}, A. Solís-García^b, S. Fuentes-Moyado^b, J.N. Díaz de León H.^{b2}

^a Centro de Investigación Científica y Educación Superior de Ensenada - Departamento de Nanocatálisis, Centro de Nanociencias y Nanotecnología, Universidad Nacional Autónoma de México, 22860, Ensenada, México.

^b Departamento de Nanocatálisis, Centro de Nanociencias y Nanotecnología, Universidad Nacional Autónoma de México, 22860, Ensenada, México.

¹elvira@cicese.edu.mx, g6_mend17@ens.cnyn.unam.mx

²noejd@ens.cnyn.unam.mx

Resumen

Los óxidos mixtos de metales tienen una gran capacidad de cambiar sus propiedades respecto a sus óxidos puros. En cuanto a aquellos del sistema $Y_2O_3-Al_2O_3$, se ha encontrado que la adición de bajos porcentajes de Y_2O_3 en soportes de $\gamma-Al_2O_3$ puede tener varios efectos positivos en la catálisis, así como algunos efectos adversos. A pesar de que varios estudios han analizado el sistema $Y_2O_3-Al_2O_3$, pocos lo han hecho utilizando algún agente director de estructura (ADE) para obtener morfologías micro y nanométricas. Es por ello que en este trabajo se sintetizaron óxidos mixtos de aluminio e itrio con 0, 25, 50, 75 y 100% en peso de Y_2O_3 mediante el método hidrotermal usando Tritón X-100 como ADE. Se caracterizaron los materiales para comparar los óxidos mixtos con los óxidos puros y examinar su potencial como soportes catalíticos. Se analizó su estructura cristalina, morfología, porosidad y energía de banda prohibida. Se encontró que de 0 a 25% en peso de Y_2O_3 , existe un gran potencial para aplicar estos materiales como soportes debido a su alta área superficial ($\geq 190 \text{ m}^2/\text{g}$), su estructura micro y nanométrica particular y una disminución de la energía de banda prohibida de 6.07 eV a 3.56 eV al incrementar el porcentaje de Y_2O_3 en este intervalo.

Palabras clave: óxidos mixtos; soportes catalíticos; Al_2O_3 ; Y_2O_3 ; síntesis hidrotermal; microestructura; nanoestructura.

Abstract

Mixed metal oxides (MMO) have a great capacity to change their properties compared to their pure oxides. Particularly in the system $Y_2O_3-Al_2O_3$, it has been found that the addition of a low percentage of Y_2O_3 in $\gamma-Al_2O_3$ supports can have several positive catalytic effects, as well as some adverse ones. Although several studies have analyzed the $Y_2O_3-Al_2O_3$ system, few have done so using a structure-directing agent (SDA) to obtain micro and nanometric morphologies. Therefore, in this work, MMO of aluminum and yttrium were synthesized with 0, 25, 50, 75, and 100 wt% of Y_2O_3 via hydrothermal method using Triton X-100 as SDA. Materials were characterized to compare mixed oxides with pure oxides to examine their potential as catalytic supports. The analysis was done in terms of their crystalline structure, morphology, porosity, bandgap energy, and surface chemistry. It was found that from 0 to 25 wt% of Y_2O_3 , there is great potential to apply materials as supports due to their high surface area ($\geq 190 \text{ m}^2/\text{g}$), their particular micro and nanometric structure, and a decrease in bandgap from 6.07 eV to 3.56 eV by the increase of Y_2O_3 in this interval.

Keywords: mixed oxides; catalytic supports; Al_2O_3 , Y_2O_3 ; hydrothermal synthesis; microstructure; nanostructure.

EFFECTO DE Fe SOBRE CATALIZADORES BASE Ni/Al₂O₃ PARA LA DESHIDROGENACIÓN OXIDATIVA DE ETANO A ETILENO ASISTIDA POR CO₂

F. Cancino-Trejo^a, Víctor Santes^a, Yadira G. Maldonado^b, López. Miranda A^b, Marisol Gallardo^c, Omar Valdés^d, José Antonio de los Reyes^d, C. E. Santolalla-Vargas^a

^a Departamento de Biociencias e Ingeniería, Centro Interdisciplinario de Investigaciones y Estudios sobre Medio Ambiente y Desarrollo (CIIEMAD), Instituto Politécnico Nacional, C.P. 07340 Cd. de México, México

^b Centro Nacional de Metrología, Ciencia de Materiales, km 4.5 Carretera a los Cues, El Marques, Querétaro, Querétaro, MX

^c Facultad de Ingeniería, Universidad Autónoma de Coahuila, Blvd. Fundadores Km, 13 Ciudad Universitaria, Arteaga, Coahuila, C. P. 25354, México

^d Universidad A. Metropolitana-Iztapalapa, Área de Ingeniería Química, Av. FFCC R, Atlixco 186, Vicentina, 09340 Distrito Federal, México

*e-mail: fct_83@hotmail.com

Resumen

Se prepararon catalizadores Ni/Al₂O₃ y NiFe/Al₂O₃ mediante impregnación por humedad incipiente para la deshidrogenación oxidativa (DHO) de etano a etileno asistida por CO₂. Los catalizadores se caracterizaron mediante difracción de rayos-X (DRX), espectroscopia Raman, reflectancia difusa ultravioleta-visible (RD UV-vis), microscopia electrónica de barrido (MEB), y reducción a temperatura programada con H₂ (RTP- H₂). La DHO de etano se realizó en un reactor tubular Hasteloy de lecho fijo a 550 °C, 575°C y 600° C. La mezcla de reacción consistió de 5% etano, 10% CO₂ y 85% N₂. Los resultados mostraron la formación de NiO sobre los catalizadores monometálicos y espinelas (NiFe₂O₄ y FeAl₂O₄) en los bimetálicos. El tamaño de cristal del NiO no superó los 8 nm en los catalizadores bimetálicos y Ni10-Al mientras que el catalizador Ni₂0-Al mostró un tamaño superior a 20 nm. Los catalizadores Ni10-Al y NiFe0.60 presentaron una alta dispersión de Ni y Fe sobre el soporte y la formación de especies Ni con simetrías octaédrica Ni(O_h) y tetraédrica Ni(T_d). A 600 °C, los catalizadores NiFe0.50 y NiFe0.60 exhibieron la conversión y rendimiento a etileno más altos en comparación con los otros catalizadores, 22% y 11%, respectivamente.

Palabras clave: deshidrogenación, oxidante, bimetálico, espinela, reducción.

Abstract

Ni/Al₂O₃ and NiFe/Al₂O₃ catalysts were prepared by incipient wetness impregnation for the oxidative dehydrogenation (ODH) of ethane to ethylene assisted by CO₂. The catalysts were characterized by X-ray diffraction (XRD), Raman spectroscopy, ultraviolet-visible diffuse reflectance (UV-vis DR), scanning electron microscopy (SEM), and temperature-programmed of reduction with H₂ (H₂-TPR). The DHO of ethane was performed in a fixed-bed Hasteloy tubular reactor at 550 °C, 575 °C, and 600 °C. The reaction mixture consisted of 5% ethane, 10% CO₂ and 85% N₂. The results showed the formation of NiO on the monometallic catalysts and spinels (NiFe₂O₄ and FeAl₂O₄) on the bimetallic. The crystal size of NiO did not exceed 8 nm on the bimetallic and Ni10-Al catalysts. The Ni₂0-Al catalyst showed a NiO-crystallite size greater than 20 nm. The Ni10-Al and NiFe0.60 catalysts showed high dispersion of Ni and Fe on the support and formation of Ni species with octahedral Ni(O_h) and tetrahedral Ni(T_d) symmetries. At 600 °C, the NiFe0.50 and NiFe0.60 catalysts exhibited the highest conversion and yield to ethylene compared to the other catalysts, 22% and 11%, respectively.

Keywords: dehydrogenation, oxidant, bimetallic, spinel, reduction.

CICLOCARBONILACIÓN REGIOSELECTIVA DE 3-ALIL-4-(FENILAMINO)CUMARINAS CATALIZADA POR PALADIO

Karla Almaraz-Macuil^{a*}, Manuel Amézquita-Valencia^b

^a Laboratorio 2-12, Departamento de química inorgánica, Instituto de Química, Universidad Nacional Autónoma de México, 04510, Ciudad de México, México

^b Laboratorio 2-12, Departamento de química inorgánica, Instituto de Química, Universidad Nacional Autónoma de México, 04510, Ciudad de México, México

*e-mail: karla11vianey@gmail.com

Resumen

La reacción de ciclocarbonilación es una herramienta de síntesis que permite la obtención de diversos compuestos heterocíclicos como lactonas y lactamas. La síntesis de lactamas fusionadas a un anillo cumarínico se puede considerar de alto valor, debido a las potenciales propiedades biológicas que estos nuevos compuestos podrían presentar. Sin embargo, una de las complicaciones más frecuentes de este tipo de metodologías es la baja regioselectividad de la reacción, frecuentemente encontrando mezclas de anillos de diferentes tamaños. Por ello, realizamos la evaluación de las condiciones de reacción para obtener lactamas de seis miembros sobre un núcleo cumarínico vía aminocarbonilación intramolecular catalizada por paladio en presencia de ligantes fosfinicos. Para lo cual, encontramos las condiciones que nos permitieron obtener una alta selectividad hacia un único producto, y en las condiciones generalizadas obtuvimos una familia de compuestos cumarínicos. En el futuro se estudiarán las propiedades biológicas de esta familia de compuestos, donde el análisis de la relación estructura actividad podrían guiar al diseño de nuevos compuestos de interés.

Palabras clave: Catálisis homogénea, carbonilación, lactamas, heterociclos de oxígeno, heterociclos de nitrógeno.

Abstract

The cyclocarbonylation reaction is a tool that permits the synthesis of different heterocycles such as lactams and lactones. Coumarins are a privileged scaffold, as they are found in numerous bioactive organic materials, pharmaceuticals, and natural products. The lactam fused to a coumarin scaffold could be regarded as a potential bioactive compound. Nevertheless, a common issue with the cyclocarbonylation reaction is its low selectivity resulting in a mixture of lactams of different sizes. We carried out different catalytic reactions to find the best conditions to obtain the six-membered lactam via an aminocarbonylation reaction using a palladium source and phosphine ligands. With the optimal reaction conditions, a series of coumarin with high selectivity was obtained. In the future, biological analysis of these fused heterocycles could exhibit interesting bioactivities. Therefore, their structure-activity analysis is necessary.

Keywords: Homogeneous catalysis, carbonylation, lactams, oxygen heterocycles, nitrogen heterocycles.

CATALIZADOR DE Ru-VINILIDENO $[\text{RuCl}_2(=\text{C}=\text{CH}(\text{p-C}_6\text{H}_4\text{CF}_3))(\text{PCy}_3)_2]$ EN LA METÁTESIS VERDE

Araceli Martínez^{a,b,*} Joel Vargas^c Arlette A. Santiago^a

^a Laboratorio de síntesis de materiales, Ed. Investigación A. Lic. En Ciencia de Materiales Sustentables. Escuela Nacional de Estudios Superiores, Unidad Morelia, Universidad Nacional Autónoma de México, Antigua Carretera a Pátzcuaro No. 8701, Col. Ex Hacienda de San José de la Huerta, C.P. 58190 Morelia, Michacán, México.

^b Laboratorio internacional de dispositivos electrónicos ambientales. (LAIDEA UNAM)

^c Instituto de Investigaciones en Materiales, Unidad Morelia, Universidad Nacional Autónoma de México, Antigua Carretera a Pátzcuaro No. 8701, Col. Ex Hacienda de San José de la Huerta, C.P. 58190 Morelia,

*e-mail: aracelimp@enesmorelia.unam.mx

Resumen

Los catalizadores de vinilideno de metales de transición son considerados complejos importantes para una gran variedad de reacciones catalíticas en la metátesis de olefinas. Este trabajo se reporta la síntesis del catalizador Ru-vinilideno $[\text{RuCl}_2(=\text{C}=\text{CH}(\text{p-C}_6\text{H}_4\text{CF}_3))(\text{PCy}_3)_2]$ empleando el complejo $[\text{RuCl}_2(\text{p-cimeno})]_2$ rico en electrones, y como fuente de carbeno el acetileno-terminal 4-etinil-a,a,a-trifluorotolueno. El catalizador obtenido, se aisló como sólidos cristalinos en un 93% y fue caracterizado por las técnicas de $^1\text{H-NMR}$, difracción de rayos-X y análisis elemental. El complejo exhibió una alta eficiencia catalítica en las reacciones de metátesis de olefinas como: 1) La preparación de polímeros biodegradables a partir del aceite del hueso de aguacate modificado con norborneno vía polimerización de metátesis por apertura de anillo. Estos polímeros presentaron pesos moleculares del orden $\text{Mn} \times 10^5 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$ y rendimientos $> 95\%$, 2) Degradación por metátesis cruzada del hule natural utilizando como agente de transferencia de cadena y disolvente verde al aceite de mandarina, dando como resultado productos de oligómeros de isopreno con grupos terminales terpenos, con pesos moleculares controlados del orden $\text{Mn} \times 10^3 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$ y rendimientos $> 94\%$, y 3) Síntesis de esteres insaturados a partir del β -pineno vía metátesis cruzada con dietil maleato, dando selectividades del 22% en la formación de esteres.

Palabras clave: Catalizadores de Ru-vinilideno, Química sustentable, Metátesis de olefinas.

Abstract

Transition metal vinylidene complexes are important intermediates for a large variety of catalytic reactions in olefin metathesis. This research reports the synthesis of the Ru-vinylidene catalysts $[\text{RuCl}_2(=\text{C}=\text{CH}(\text{p-C}_6\text{H}_4\text{CF}_3))(\text{PCy}_3)_2]$ from the electron-rich ruthenium dimer $[\text{RuCl}_2(\text{p-cymene})]_2$ and the terminal alkynes (carbon source) 4-ethynyl-a,a,a-trifluorotoluene. The catalyst was isolated to obtained crystalline solids with yields of 93 %, and characterized by $^1\text{H-NMR}$, X-ray diffraction and elemental analyses. This complex exhibited high catalytic efficiency in the metathesis olefins reactions such as: 1) Preparation of biodegradable polymer from norbornene modified by avocado bone oil via ring-opening metathesis polymerization. These polymers showed molecular weights values around $\text{Mn} \times 10^5 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$ and yields about 95 %, 2) Natural rubber degradation via cross-metathesis with mandarin oil as chain transfer agent and green solvent. When the natural rubber degradation was performed at 80°C low molecular weight terpene terminated polyisoprene was obtained with values around $\text{Mn} \times 10^3 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$ and yields around $> 94\%$, and 3) Cross-metathesis of the unsaturated esters from β -pinene terpene with diethyl maleate. The formation of unsaturated esters products was selective by 22 %.

Keywords: Ru-vinylidene catalysts, Sustainable chemistry, Olefin metathesis.

TRATAMIENTO HIDROTÉRMICO ÁCIDO DE SUSTANCIAS PÉCTICAS Y FORMACIÓN DE FURFURAL

Eva E. Rivera-Cedillo^a, O González-Ortega^a, Brent E. Handy^a and María Guadalupe Cárdenas-Galindo^a

^aCIEP Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Autónoma de San Luis Potosí, C.P. 78210, San Luis Potosí, S. L.P., México

e-mail: cardenas@uaslp.mx

Resumen

En vista del agotamiento de los recursos petroleros y los crecientes problemas ambientales, la investigación de procesos de transformación de recursos renovables como biomásas lignocelulósicas ha tenido un gran auge. En este contexto, la pectina es componente de biomásas que son residuos agroindustriales, que puede ser alternativa para producir compuestos plataforma como furfural. En este trabajo se muestra un estudio de la transformación de la pectina por medio de hidrólisis. Se analiza la deshidratación del ácido galacturónico (DGalA), principal componente de la pectina, a furfural, obteniendo la mayor concentración a partir DGalA, según lo reportado en la literatura. También se estudió la despolimerización de pectinas con diferente grado de esterificación (GE) en un sistema reactivo donde ocurren simultáneamente la despolimerización y la deshidratación de los monosacáridos producidos. Se obtuvo una conversión total de DGalA como monómero y como parte del homopolímero. Sin embargo, el rendimiento a furfural es bajo, debido a que está siendo consumido en reacciones de resinificación, dando lugar a la formación de huminas. Se encontró que valores bajos de GE favorecen la formación de furfural, ya que la descarboxilación se favorece frente a la deesterificación.

Palabras clave: Pectina, hidrólisis, pentosas, deshidratación, furfural.

Abstract

In view of oil depletion resources and growing environmental problems, research into processes renewable resources transformation such as lignocellulosic biomass has had a great boom. Pectin is a biopolymer present in biomasses from agroindustrial waste, that can be an alternative to produce platform compounds such as furfural. This paper shows a study of pectin transformation by hydrolysis. The main component of pectin, D- galacturonic acid (DgalA) was dehydrated to furfural. Depolymerization of pectins with different degree of esterification (GE) was also analyzed, where in one pot system reaction occurs the depolymerization and dehydration of the carbohydrates produced. The total conversion of DGalA was obtained as a monosaccharide and as a part of the polysaccharide. However, the yield to furfural is low, since it is consumed in resinification reactions resulting in humins formation. The yield to furfural further decreases as the GE increases: low GE values favor the formation of furfural because decarboxylation is favored over deesterification.

Keywords: Pectin, hydrolysis, pentoses, dehydration, furfural.

EVALUACIÓN DE CATALIZADORES DE METALES ALCALINOS SOPORTADOS EN CaO PARA TRANSESTERIFICACIÓN DE TRIBUTIRINA, TRIESTEARINA Y TRIOLEÍNA

Olvera Mendoza, D.G.^a, Rodríguez Ávila, J.A.^a, Tavizón Pozos, J.A.^{b,*}

^a Área Académica de Química, Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, Carretera Pachuca-Tulancingo km 4.5, Carboneras, 42184, Mineral de la Reforma, Hidalgo, México.

^b Cátedras CONACyT - Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, Carretera Pachuca-Tulancingo km 4.5, Carboneras, 42184, Mineral de la Reforma, Hidalgo, México.

*e-mail: jesus.tavizon@conacyt.mx

Resumen

Se estudiaron catalizadores de Li y K soportados en CaO para reacciones de transesterificación. El CaO se obtuvo por calcinación de cal comercial. Los catalizadores fueron impregnados con LiNO₃ y KNO₃ con una carga de 3 %p/p de metal alcalino. Los catalizadores sintetizados se caracterizaron por análisis termogravimétrico, difracción de rayos X e indicadores de Hammett. Las evaluaciones catalíticas de transesterificación se llevaron a cabo en aceite de soya, trioleína, tributirina y triestearina a 60 °C por una hora, con una relación metanol:aceite de 20:1, con 3 %p/p de catalizador. Se encontró que la fuerza de los sitios alcalinos aumentó al impregnar el soporte con el metal alcalino ya que evitaron la formación de Ca(OH)₂. Así, se encontró una correlación entre la fuerza básica y la actividad del catalizador. El catalizador de Li/CaO presentó mayor fuerza básica y mayor actividad catalítica. Se observó que los triglicéridos con cadena corta son más reactivos que los de cadena larga e insaturados; así mismo, los triglicéridos de cadena saturada son más reactivos que los insaturados debido a menores interacciones con los sitios activos. Por último, la presencia de potasio evitó la lixiviación del catalizador a la fase líquida.

Abstract

CaO supported Li and K catalysts were studied for transesterification reactions. The CaO was obtained by calcination of commercial limestone. The catalysts were impregnated with LiNO₃ and KNO₃ reaching a loading of 3 wt.% of alkali metal. The synthesized catalysts were characterized by thermogravimetric analysis, X-ray diffraction and Hammett indicators. The catalytic transesterification evaluations were carried out on soybean oil, tributyrin, triestearin and triolein at 60 °C for one hour, with a methanol to oil ratio 20:1, with 3 wt.% of catalyst. It was found that the strength of the alkaline sites increased when alkali metal was added to the support since these metals prevented the formation of Ca(OH)₂. Thus, a correlation was found between the basic strength and the activity of the catalyst. The Li/CaO catalyst presented higher basic strength and higher catalytic activity. It was observed that short chain triglycerides were found to be more reactive than long chain and unsaturated ones; likewise, saturated chain triglycerides are more reactive than unsaturated ones due to fewer interactions with the active sites. Finally, the presence of potassium avoided the lixiviation of the catalysts to the liquid phase.

Keywords: transesterificación de aceites, fuerza alcalina, lixiviación, triglicéridos, metales alcalinos.

HETEROGENEOUS ENZYMATIC CATALYSTS: COMPARING THEIR EFFICIENCY IN THE PRODUCTION OF BIODIESEL FROM ALTERNATIVE OILS

Gabriel O. Ferrero^{a*}, Eliana G. Vaschetto^a, Edgar M. Sánchez Faba^a, Fabrizio E. Viale^a, Germán Carrillo^a, Griselda A. Eimer^{a*}

^a CITEQ-UTN-CONICET / Universidad Tecnológica Nacional, CP:5016, City: Córdoba, Country: Argentina.

*e-mail: gferrero@frc.utn.edu.ar, geimer@frc.utn.edu.ar

Resumen

En este estudio, se sintetizaron cuatro catalizadores enzimáticos heterogéneos: tres inmovilizando la lipasa de *Pseudomonas fluorescens* (LPf) en SBA-15, Ca/SBA-15 y Na/SBA-15, y uno mediante la técnica de coprecipitación en un solo paso, llamado LOBE (enzima biosilicificada de bajo orden). Las propiedades fisicoquímicas de estos materiales se determinaron mediante dispersión de rayos X de ángulo pequeño (SAXS) y espectroscopía infrarroja por transformada de Fourier (FT-IR). Se evaluó la actividad de los biocatalizadores en la producción de biodiesel con diferentes materias primas oleosas. De estos resultados se pudo inferir que además del efecto sinérgico enzima-soporte metálico (LPf/Ca/SBA-15 o LPf/Na/SBA-15), los efectos del confinamiento influyen en la difusión o transferencia de masa de los sustratos, determinando la eficiencia catalítica de acuerdo con la arquitectura del poro, canal o cavidad. Mientras que el material SBA-15 presenta canales unidimensionales, el biocatalizador LOBE tiene cavidades tridimensionales interconectadas que favorecen la mezcla de las fases reactivas (aceite-alcohol) y la interacción con los sitios activos. Esta característica incrementaría la actividad específica del biocatalizador LOBE aproximadamente cinco veces con respecto al resto de biocatalizadores estudiados, dependiendo de la materia prima utilizada.

Palabras Clave: Biodiesel, Inmovilización enzimática, Biocatálisis, Materias primas alternativas, Sostenibilidad.

Abstract

In this study, four heterogeneous enzymatic catalysts were synthesized: three from the immobilization of *Pseudomonas fluorescens* lipase (LPf) on SBA-15, Ca/SBA-15, and Na / SBA-15, and one using the one-step coprecipitation technique, called LOBE (Low Ordered Biosilicified Enzyme). The physicochemical properties of these materials were determined by small-angle X-ray scattering (SAXS) and Fourier Transform infrared spectroscopy (FT-IR). The biocatalysts activity was evaluated in the production of biodiesel with different oily raw materials. It was possible to infer from these results that besides enzyme-metal-support synergistic effect (LPf/Ca/SBA-15 or LPf/Na/SBA-15), confinement effects influence the substrates diffusion or mass transfer depending on the pore, channel, or cavity architecture, determining the catalytic efficiency. While the SBA-15 material presents one-dimensional channels, the LOBE biocatalyst has interconnected three-dimensional cavities that favor the mixing of reactant phases (oil-alcohol) and interaction with active sites. This characteristic would increase the specific activity of the LOBE biocatalyst approximately five times concerning the other studied biocatalysts, depending on the raw material used.

Keywords: Biodiesel, Enzymatic immobilization, Biocatalysis, Alternative raw materials, Sustainability.

EFFECT OF SOLVENT ON CARBOHYDRATE CONVERSION TO α -HYDROXY ACIDS USING Sn-BETA AS CATALYST

Hortal-Sanchez Isabel^a, Cardona-Martínez Nelson^{a*}

^a Department of Chemical Engineering, University of Puerto Rico-Mayagüez Campus, 00681-9001, Mayagüez, Puerto Rico

*e-mail: nelson.cardona@upr.edu

Resumen

Los alfa-hidroxiácidos (AHAs) como el ácido láctico son moléculas plataforma que pueden ser obtenidos de carbohidratos provenientes de residuos de biomasa mediante el uso de catalizadores con la estructura de zeolita Beta que contienen acidez de Lewis. Usamos un método de post-síntesis para sintetizar Sn-Beta. El método de inserción clásico para obtener Sn-Beta usa isopropanol como solvente. Sin embargo, isopropanol se adsorbe compitiendo con el precursor por los grupos OH en la superficie.[1] Nosotros proponemos el uso de heptano para eliminar dicha limitación.

Previamente, demostramos que la mezcla de solventes gama-valerolactona (GVL) y agua incrementa la rapidez de reacción para la conversión de carbohidratos comparado con agua sola y modifica la distribución de productos especialmente inhibiendo la producción de 5-hidroximetil furfural (HMF). Sin embargo, el uso de GVL presenta algunos inconvenientes como la formación de muchos subproductos durante la reacción.[2] El uso de acetona:agua como solvente mejora el rendimiento de reacciones catalizadas por acidez Brønsted.[3] Nosotros proponemos el uso de acetona:agua como solvente para la conversión de carbohidratos a AHAs. Los resultados para la conversión de fructosa a AHAs en acetona:agua 9:1 muestran que a un 70% de conversión los rendimientos hacia ácido láctico fueron un 60% superior que en GVL:agua 9:1.

Palabras clave: Sn-Beta, biomasa, efecto de solvente, ácido láctico y carbohidratos.

Abstract

α -hydroxy acids (AHAs) such as lactic acid (LA) are platform molecules that can be obtained by the reaction of carbohydrates obtained from biomass residues using Lewis acidic Beta zeolite catalysts. We use a post-synthesis method for the synthesis of Sn-Beta. The classical grafting method to obtain Sn-Beta uses isopropanol as solvent. However, isopropanol adsorbs competing with the precursor for the surface OH sites.[1] To overcome this limitation, we propose the use of heptane as solvent.

Previously, we demonstrated that gamma-valerolactone (GVL) and water solutions increase the reaction rate for carbohydrate conversion compared to using only water and modify the product distribution specially inhibiting the production of 5-hydroxymethyl furfural (HMF). However, the use of GVL shows some drawbacks such as the formation of many subproducts during the reaction.[2] Solutions of acetone:water improve the performance of Brønsted acid catalyzed reaction.[3] We propose the use of acetone:water solutions as solvent for carbohydrate conversion to AHAs. Results for the conversion of fructose to AHAs in acetone:water 9:1 show that at 70% conversion the yield to LA was 60% higher than in GVL:water 9:1.

Keywords: Sn-Beta, biomass, solvent effect, lactic acid and carbohydrates.

**REVALORIZATION OF COVID-19 DISPOSABLE FACE MASKS USING IN-SITU
CATALYTIC PYROLYSIS**

**Ivana Gabriela Esquivel López^a, Ana Lucía Vélez-Barceló^a, Gloria Lourdes Dimas-Rivera^b,
Carolina Solis Maldonado^c, Eileen Susana Carrillo-Pedraza^b, Alejandro Montesinos
Castellanos^{a*}, Alberto Mendoza^a, Ladislao Sandoval-Rangel^{a*}**

^a Tecnológico de Monterrey, Escuela de Ingeniería y Ciencias, Ave. Eugenio Garza Sada 2501, C.P. 64849, Monterrey, Nuevo León, México

^b Universidad Autónoma de Nuevo León, Facultad de Ciencias Químicas, Pedro de Alba S/N, San Nicolás de los Garza Nuevo León, México

^c Universidad Veracruzana, Facultad de Ciencias Químicas, Av. Venustiano Carranza S/N, Col. Revolución, C.P. 93390, Poza Rica, Veracruz, México

*e-mail: l.sandoval.r@tec.mx

Resumen

La reciente pandemia del COVID-19 ha afectado fuertemente a la mayoría de los países a nivel mundial, lo cual ha hecho que muchos gobiernos obliguen a sus ciudadanos a utilizar cubrebocas para reducir el número de infecciones virales. Esto ha promovido a su vez un incremento significativo en la cantidad de residuos de cubrebocas, lo cual puede producir una mayor contaminación del suelo y de los cuerpos de agua. Los cubrebocas desechables están compuestos principalmente por polímeros, los cuales son difíciles de reciclar. Por lo tanto, en este trabajo se propone la revalorización de este residuo usando procesos termoquímicos, de los cuales se seleccionó la pirólisis para poder obtener productos flexibles y de valor agregado, como químicos finos y/o moléculas precursoras de combustibles. De los experimentos FTIR, fue evidente que el principal componente tanto de los cubrebocas N95 como los quirúrgicos es el polipropileno, el cual estuvo presente en todas las distintas capas filtrantes que componen ambos respiradores. Por otro lado, el material que compone los elásticos varió dependiendo del tipo de cubrebocas; para el cubrebocas quirúrgico se encontró que el principal componente era el Nylon-6, mientras que para el N95 se observó la presencia de un tipo diferente de polímero.

Palabras clave: pirólisis, COVID-19, cubrebocas, catalizadores.

Abstract

The recent COVID-19 pandemic has harshly affected most of the countries, with many governments mandating face mask use for the general population in order to decrease the number of viral infections. This has therefore promoted a significant increase of mask wastes, which can lead to pollution of land and water bodies. Disposable masks are mainly composed of polymers, and are currently difficult to recycle. Accordingly, this work proposes revalorization of this waste using thermochemical processes, from which pyrolysis was selected in order to obtain flexible, value-added products such as fine chemicals and/or fuel precursor molecules. From the FTIR experiments, it was evident that the main component of both N95 and surgical masks is polypropylene, which was present in all the different filtering layers composing the respirators. On the other hand, the material composing the ear straps varied according to the mask type, with the surgical mask ear strap consisting mainly of Nylon-6, while the N95 ear strap was composed of a different polymer type.

Keywords: pyrolysis, COVID-19, face masks, catalysts.

EVALUACIÓN DE LA BIODEGRADACIÓN DE NAFTALENO PRESENTE EN LIGHT CYCLE OIL

Betancourt Paulino^a, Puentes Laynet^b, Gómez Francis^{*a,b}

^a Laboratorio de Desarrollo de Procesos, Escuela de Química, Facultad de Ciencias, Universidad Central de Venezuela (UCV), Caracas, Venezuela.

^b Dirección de Energía y Ambiente, Fundación Instituto de Estudios Avanzados (IDEA), Sartenejas, Miranda, Venezuela.

*e-mail: francisbgomez86@gmail.com

Resumen

Con el objetivo de evaluar la capacidad de degradación de naftaleno por aislados bacterianos provenientes de una corriente denominada aceite de ciclo liviano (LCO del inglés: Light Cycle Oil) se probó su potencial en la molécula modelo y luego en la corriente de refinería LCO de origen. Se obtuvo en los ensayos con cristales de naftaleno mediante espectrofotometría UV-Visible valores de degradación mayores al 64% y en los ensayos con LCO degradación de naftaleno entre 8-44% aproximadamente, evidenciando la formación de salicilato uno de los metabolitos generados y de crecimiento bacteriano empleando el naftaleno como fuente de carbono y energía, quedando por evaluar su consecuente efecto sobre la calidad del LCO obtenido.

Palabras clave: Biocatálisis, aceite de ciclo liviano (LCO), biodesaromatización, aislados bacterianos, naftaleno.

Abstract

In order to evaluate the degradation capacity of naphthalene by bacterial isolates from a stream called Light Cycle Oil (LCO), its potential was tested in the model molecule and then in the original LCO refinery stream. Degradation values greater than 64% were obtained in the tests with naphthalene crystals by UV-Visible spectrophotometry and in the tests with LCO, naphthalene degradation between 8-31% approximately, showing the formation of salicylate, one of the metabolites generated and growth bacterial using naphthalene as a source of carbon and energy, and its consequent effect on the quality of the LCO obtained remains to be evaluated.

Keywords: biocatalysis, light cycle oil (LCO), biodearomatization, bacterial Isolates, naphthalene.

REMOCIÓN DE NARANJA DE METILO Y AZUL DE METILENO USANDO COMO BIOADSORBENTE *EICHHORNIA CRASSIPES* (LIRIO ACUÁTICO) EXTRAÍDO DEL LAGO DE YURIRIA, GUANAJUATO

Carlos David Hernández Origel^a, Eunice López Ahumada^a, Laura Patiño-Saldivar^a, Mercedes Salazar-Hernández^b, Alba N. Ardilas A.^c, José A. Hernández^{a, *}

^a Instituto Politécnico Nacional-UPNIG, Av. Mineral de Valenciana 200, Col. Fracc. Industrial Puerto Interior, C. P. 36275 Silao de la Victoria, Guanajuato, México

^b Departamento de Ingeniería en Minas, Metalurgia y Geología, División de Ingeniería, Universidad de Guanajuato, Ex Hacienda de San Marías s/n, Fracc. San Javier, C. P 36025, Guanajuato México

^c Politécnico Colombiano Jaime Isaza Cadavid, carrera 48 No. 7-151, Medellín, Colombia. CP 4932

*e-mail: jahernandezma@ipn.mx

Resumen

En este estudio se busca analizar la adsorción en equilibrio y cinética de los colorantes azul de metileno (AM) y naranja de metilo (NM) utilizando *Eichhornia Crassipes* (Lirio acuático). Los datos experimentales en equilibrio se ajustaron al modelo de Freundlich siendo el que mejor se acopla en ambos tintes. Se obtuvo que LAW (Lirio acuático tratado con agua) presenta una mejor capacidad de adsorción en ambos tintes a 30°C (95.218 mg/g) y 60°C (78.35 mg/g) para AM y NM, respectivamente, esto también se refleja en el porcentaje de remoción calculado que se establece en un valor de 95.19% para AM y 97.94% para NM. Los datos cinéticos ajustados al modelo de Pseudo segundo orden indicaron que corresponde a un proceso de adsorción química. En los espectros de FTIR se observa que hay cambios significativos en las bandas relacionadas con lignina, celulosa y hemicelulosa del LA. Se aprecia que el uso de LA en ambos colorantes cuenta con una capacidad de adsorción máximas en el proceso cinético de 200.76 mg/g (LAW), 171.77 mg/g (LAH0.15) y 228.93 mg/g (LAH0.5) mg/g para AM y 193.65 mg/g (LAW), 142.78 mg/g (LAH0.15) y 158.36 mg/g (LAH0.5) para NM. Se encontró que el pH de la solución es mayor al punto isoeléctrico del adsorbente lo cual indica la existencia de fuerzas electrostáticas. Se considera al lirio acuático como un buen bioadsorbente para AM y NM.

Palabras clave: Lirio acuático, adsorción, tintes, cinética, remoción.

Abstract

This study aims to analyze the equilibrium and kinetic adsorption of methylene blue (AM) and methyl orange (NM) dyes using *Eichhornia Crassipes* (Water hyacinth). The equilibrium experimental data were adjusted to the Freundlich model being the one that best fits in both dyes. LAW (water-treated Water hyacinth) was found to have a better adsorption capacity in both dyes at 30°C (95.218 mg/g) and 60°C (78.35 mg/g) for AM and NM respectively, this is also reflected in the calculated removal percentage which is established at a value of 95.19% for AM and 97.94% for NM. Kinetic data adjusted to the Pseudo second order model indicated that it corresponds to a chemical adsorption process. The FTIR spectra show that there are significant changes in the bands related to lignin, cellulose and hemicellulose of LA. It is appreciated that the use of LA in both dyes has a maximum adsorption capacity in the kinetic process of 200.76 mg/g (LAW), 171.77 mg/g (LAH0.15) and 228.93 mg/g (LAH0.5) mg/g for AM and 193.65 mg/g (LAW), 142.78 mg/g (LAH0.15) and 158.36 mg/g (LAH0.5) for NM. It was found that the pH of the solution is higher than the isoelectric point of the adsorbent which indicates the existence of electrostatic forces. The Water hyacinth is considered a good bioadsorbent for AM and NM.

Keywords: Water hyacinth, adsorption, kinetics, isotherm, removal.

SYNERGISTIC EFFECT OF CO-DOPING OF FE AND ZN ON TiO₂ SUPPORTS IN THE PREPARATION OF CATALYSTS FOR PHOTODISCOLORATION REACTIONS OF FOOD EFFLUENTS

Luiz Eduardo Nochi Castro^{a,b}, Larissa Resende Matheus^a, Leda Maria Saragiotto Colpini^{a,b,c,*}

^a Universidade Federal do Paraná/Campus Avançado de Jandaia do Sul, 86900-000, Jandaia do Sul, Brasil

^b Programa de Pós-Graduação em Biotecnologia, Universidade Federal do Paraná/Setor Palotina, 85950-000, Palotina, Brasil

^c Programa de Pós-Graduação em Engenharia e Tecnologia Ambiental, Universidade Federal do Paraná/Setor Palotina, 85950-000, Palotina, Brasil

*e-mail: ledasaracol@ufpr.br

Resumen

El objetivo principal de este trabajo fue estudiar la aplicación de catalizadores Fe/Zn/TiO₂ obtenidos por el método sol gel, en procesos de descontaminación ambiental mediante reacciones de fotodegradación de colorantes alimentarios Rojo 40 y Tartrazina Amarilla en presencia de luz solar. Los catalizadores se caracterizaron mediante varias técnicas como: mediciones de adsorción de N₂, microscopía electrónica de barrido de energía de rayos X dispersiva (SEM/EDS), punto de carga cero (PCZ) y difracción de rayos X (DRX). Las pruebas fotocatalíticas se llevaron a cabo en una unidad discontinua en presencia de luz solar durante 2 horas. En relación a los análisis SEM/EDS, se comprobó que las proporciones másicas de zinc y hierro en los catalizadores eran similares a las propuestas en el trabajo. Mientras que el análisis DRX mostró la presencia de picos relacionados con fases fotolíticas activas de TiO₂, como anatasa y rutilo y fases Fe₂O₃ como hematita, por análisis PCZ se pudo observar que la superficie de los catalizadores está cargada positivamente. Los resultados de las pruebas fotocatalíticas atestiguan que en general los soportes de TiO₂ presentaron valores más altos de porcentaje de decoloración, pero los catalizadores dopados en proporciones de masa de 10% Fe y Zn, presentaron resultados de decoloración cercanos al 100%.

Keywords: caracterización, sol-gel, tratamiento de aguas residuales, fotocatalisis.

Abstract

The main objective of this work was to study the application of Fe/Zn/TiO₂ catalysts obtained by the sol-gel method, in environmental decontamination processes through photodegradation reactions of food dyes Red 40 and Yellow Tartrazine in the presence of sunlight. The catalysts were characterized by several techniques as: N₂ adsorption measurements, scanning electron microscopy with energy dispersive X-ray (SEM/EDS), point of zero charge (PCZ) and X-ray diffraction (XRD). The photocatalytic tests were carried out in a batch unit in the presence of sunlight for 2 hours. In relation to the SEM/EDS analyses, it was proved that the mass proportions of zinc and iron in the catalysts were similar to those proposed in the work. Whereas XRD analysis showed the presence of peaks related to TiO₂ active photolytic phases, like anatase and rutile and Fe₂O₃ phases such as hematite, by PCZ analysis it was possible to observe that the surface of the catalysts is positively charged. The results of the photocatalytic tests attest that in general the TiO₂ supports presented higher values of discoloration percentage, but the catalysts doped in mass proportions of 10% Fe and Zn, presented discoloration results close to 100%.

Keywords: characterization, sol-gel, wastewater treatment, photocatalysis.

**ZnO AND ZnO-NANORODS THIN FILMS AS SUPPORTED CATALYSTS FOR
ENHANCED DEGRADATION OF METHYLENE BLUE**

C. Valero-Luna¹, M.R. Alfaro Cruz^{2*}, A. Bañuelos-Frias¹, G. Ortega-Zarzosa³

¹Universidad Autónoma de Zacatecas, Unidad Académica de Ingeniería Eléctrica, Ramón López Velarde 801, Zacatecas, Zacatecas 98000, México.

²CONACYT, Universidad Autónoma de Nuevo León, Facultad de Ingeniería Civil, Av. Universidad s/n. Anáhuac, San Nicolas de los Garza 66450, México.

³Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de San Luis Potosí. Av. Parque Chapultepec 1570, 78210. San Luis Potosí, México.

*e-mail: malfaroc@uanl.edu.mx; mralfaro@conacyt.mx (M. R. Alfaro Cruz).

Resumen

Las películas de ZnO y nanorods de ZnO fueron probadas en la degradación fotocatalítica de azul de metileno, mostrando que los nanorods de ZnO tienen una mejor eficiencia que las películas de ZnO. Las películas fueron depositadas por el método Sol-gel y depósito por baño químico. Ambas películas se orientaron en el eje c que corresponde al plano (002). Sin embargo, la cristalinidad de las películas fue mejor para la capa semilla de ZnO. La morfología en la superficie de la película de ZnO fue en forma de ondas. Esta morfología permite que los nanorods crezcan alrededor de las ondas y se incremente el área de contacto con la solución. Los nanorods de ZnO generaron un incremento en el proceso de absorción en donde en aproximadamente con 2.491 horas de irradiación es posible degradar hasta el 50% del colorante. Las propiedades estructurales como la buena cristalinidad y la orientación preferencial en el plano (002) ayuda a mejorar la eficiencia fotocatalítica de las películas. Por lo que las películas de ZnO y los nanorods de ZnO podrían ser consideradas como una opción eficiente para los procesos fotocatalíticos.

Palabras clave: Thin films, ZnO, photocatalysis, nanorods, Sol-gel.

Abstract

ZnO and ZnO nanorods thin films were tested in the photocatalytic degradation of Methylene Blue showed that the ZnO nanorods have better efficiency than the ZnO film. The films were deposited by the Sol-gel method and chemical bath deposition at low temperatures. Both films were oriented in the c-axis oriented in the (002) plane. However, the crystallinity of the ZnO nanorod film was better than the ZnO seed layer. The surface morphology of the ZnO film was in ripples form. This morphology allows the ZnO nanorods to grow around the ripples and increase the contact area with the solution. The ZnO nanorod film generates an increase in the adsorption process, where about 2.491 hours of irradiation is possible to degrade until 50% of the dye. The structural properties as good crystallinity and the orientation in the (002) plane helps to improve the photocatalytic efficiency of the films. So, the ZnO and ZnO nanorod films could be considered as an efficient option for photocatalytic processes.

Keywords: Thin films, ZnO, photocatalysis, nanorods, Sol-gel

HIGH PHOTOACTIVITY OF $Zr_xO_y-Bi_2O_2(CO_3)$ COMPOSITES PREPARED BY ONE-STEP SYNTHESIS FOR EFFICIENT DEGRADATION OF 4-CHLOROPHENOL UNDER UV LIGHT.

F. Tzompantzi^a, J.C. Castillo-Rodríguez^{a*}, C. Tzompantzi-Flores^a, M.E. Velásquez-Torres^e, R. Gómez^a, C.E. Santolalla-Vargas^b, M.A. Álvarez-Lemus^c and E. Ramos-Ramírez^e

^a Departamento. de Química, Área de Catálisis, Universidad Autónoma Metropolitana–Iztapalapa, Av. San Rafael Atlixco No. 189, Ciudad de México., 09340, México.

^b Departamento de Biociencias e Ingeniería, Centro Interdisciplinario de Investigaciones y Estudios sobre Medio Ambiente y Desarrollo (CIIEMAD), Instituto Politécnico Nacional, C.P. 07340, Ciudad de México, México)

^c Universidad Juárez Autónoma de Tabasco, Av. Universidad s/n, Magisterial, Villahermosa, Tabasco, 86040, Mexico

^d Departamento de Química, Universidad de Guanajuato, Cerro de la Venada S/N, Pueblito de Rocha, C. P. 36040, Guanajuato, Gto.

^e Departamento de Ingeniería de procesos e hidráulica, Universidad Autónoma Metropolitana–Iztapalapa, Av. San Rafael Atlixco No. 189, Ciudad de México., 09340, México.

*e-mail: iqjuliocastillo@gmail.com

Resumen

Se prepararon nuevos materiales compósitos $ZrO_2-Bi_2O_2(CO)_3$ (ZrBi) en un paso mediante el método de coprecipitación química en las mismas condiciones de síntesis. Se incorporó $Bi_2O_2(CO)_3$ a ZrO_2 añadiendo 0,5, 1 y 2% en moles. Los compósitos ZrBi se caracterizaron mediante diferentes técnicas: XRD, FTIR, PL, DRS, fisisorción de N_2 , XPS, SEM y HR-TEM. Se utilizó una solución de 40ppm de 4-clorofenol y los resultados mostraron que la fotodegradación en los compuestos de ZrBi mejoró significativamente. La novedad de este material es que es en parte nanocristalino, y a pesar de tener una energía de banda prohibida de 3,9 eV se utiliza sin calcinación, teniendo un ahorro energético considerable. Además, se observan vacantes de oxígeno así como la presencia de heterouniones entre el ZrO_2 y la estructura ortogonal de $Bi_2O_2(CO)_3$. La presencia de heterouniones y vacantes de oxígeno aumenta la transferencia de cargas, disminuyendo la probabilidad de recombinación de cargas portadoras (par hueco-electrón) y aumentando la eficiencia fotocatalítica.

Palabras clave: Compósitos ZrBi, Fotocatálisis, Fotodegradación 4-Clorofenol.

Abstract

Novel composite $ZrO_2-Bi_2O_2(CO)_3$ (ZrBi) materials were prepared in one step by the chemical co-precipitation method under the same synthesis conditions. $Bi_2O_2(CO)_3$ was incorporated to ZrO_2 adding in 0.5, 1 and 2 mol%. The ZrBi composites were characterized by different techniques: XRD, FTIR, PL, DRS, N_2 physisorption, XPS, SEM and HR-TEM. A 40 ppm 4-Chlorophenol solution was used and the results showed that the photocatalytic activity was significantly enhanced when $Bi_2O_2(CO)_3$ is added. The novelty of this material is that is part nanocrystalline, and despite having a band gap energy of 3.9 eV is used without calcining, having considerable energy savings. In addition, oxygen vacancies are observed as well as the presence of heterojunctions between the amorphous phase of ZrO_2 and the orthogonal structure of $Bi_2O_2(CO)_3$. The presence of heterojunctions and oxygen vacancies increases the transfer of charges, decreasing the probability of recombination of carrier charges (hole-electron pair) and increasing photocatalytic efficiency.

Keywords: ZrBi composites, Photocatalysis, 4-Chlorophenol photodegradation.

DEGRADACIÓN FOTOCATALÍTICA DE AZUL DE METILENO USANDO PELÍCULAS DELGADAS CON NANOVARILLAS DE ÓXIDO DE ZINC

Antonia del Rocío López Guemez^{a,b}, Adrián Cordero García^a, Hermicenda Pérez Vidal^a, Laura Lorena Díaz Flores^{b,*}, José Luis Cervantes López^b

^a Universidad Juárez Autónoma de Tabasco, División Académica de Ingeniería y Arquitectura, CP 86690, Cunduacán, Tabasco, México

^b Universidad Juárez Autónoma de Tabasco, División Académica de Ciencias Básicas, CP 86690, Cunduacán, Tabasco, México

*e-mail: laura.diaz@ujat.mx

Resumen

La degradación de contaminantes en cuerpos de agua utilizando óxidos metálicos continúa siendo un motivo de estudio en nuestros días. El óxido de zinc es el segundo semiconductor más utilizado debido a su bajo costo, naturaleza no tóxica, propiedades ópticas, y fotoquímicas. En este trabajo se sintetizaron nanovarillas de ZnO crecidas mediante el método hidrotermal sobre películas delgadas de ZnO en 3 y 5 capas. Lo anterior, para conocer el efecto de la forma y tamaño de las nanovarillas en la degradación fotocatalítica de azul de metileno usando luz UV como fuente de activación. Mediante las pruebas de caracterización de las películas se obtuvo que estas tienen la forma cristalina hexagonal tipo wurtzita del ZnO de acuerdo a la ficha PDF 01-071-6424, además, que las dimensiones promedio de las nanovarillas fueron las siguientes: 91 y 112 nm de diámetro, 512 y 543 nm de largo para 3 y 5 capas, respectivamente. Según los resultados de la evaluación fotocatalítica, existe una correlación entre las dimensiones de las nanovarillas y la eficiencia fotocatalítica para la degradación de azul de metileno obteniendo un máximo de transformación de 100 % en 3 horas de irradiación cuando se usaron 5 capas de película de ZnO.

Palabras clave: crecimiento hidrotermal, nanovarillas, fotocatalizador.

Abstract

The degradation of pollutants in water bodies using metal oxides continues to be a reason of study today. Zinc oxide is the second most widely used semiconductor due to its low cost, non-toxic nature, optical, and photochemical properties. In this work, ZnO nanorods grown by the hydrothermal method were synthesized on thin films of ZnO in 3 and 5 layers. The above, to know the effect of the shape and size of the nanorods in the photocatalytic degradation of methylene blue using UV light as an activation source. Through the characterization tests of the films, it was obtained that they have the hexagonal wurtzite-type crystalline form of ZnO according to the PDF file 01-071-6424, in addition, that the average dimensions of the nanorods were the following: 91 and 112 nm in diameter, 512 and 543 nm long for 3 and 5 layers, respectively. According to the results of the photocatalytic evaluation, there is a correlation between the dimensions of the nanorods and the photocatalytic efficiency for the degradation of methylene blue, obtaining a maximum transformation of 100% in 3 hours of irradiation when 5 layers of ZnO film were used.

Keywords: hydrothermal growth, nanorods, photocatalyst.

**ZNO USED AS A PHOTOCATALYST IN THE DISCOLORATION OF DYE PRESENT
INSYNTHETIC AND INDUSTRIAL EFFLUENT**

**Lariana N. B. Almeida^{a*}, Laura S. Ribas^b, Othavio H. L. Nogueira^b, Tatiana G. Josué^b, Onélia
A. A. dos Santos^a, Giane G. Lenzi^b**

*Chemical Engineering Dept.- State University of Maringá, 87020-900, Maringá, PR- Brazil. Chemical
Engineering Dept -Federal University of Technology, 84016-210, Ponta Grossa, PR- Brazil.*

**e-mail: beraldolariana@gmail.com*

Resumen

El presente estudio tuvo como objetivo utilizar ZnO como fotocatalizador en la decoloración de efluentes sintéticos que contienen colorante CI Basic Yellow 96, evaluando parámetros como la concentración inicial del catalizador, el pH y la fuente de radiación. Luego de las pruebas con soluciones sintéticas, se realizó una prueba con efluente industrial de la industria del embalaje de papel que contenía el mismo tinte. Se pudo verificar que la mínima cantidad de catalizador agregado a la solución (0.5 g L⁻¹) favoreció la reacción, el pH tuvo poca influencia y la fuente de radiación más potente (250 W) se consideró ideal para la decoloración del efluente sintético (99%). En pruebas con efluente industrial, posiblemente por tener una alta carga orgánica y otros aditivos presentes, la eficiencia del proceso no fue la misma, siendo mucho menor (-23%) en comparación con la solución sintética. Sin embargo, las pruebas realizadas muestran que el ZnO es un material prometedor para la decoloración de este tinte aquí estudiado.

Palabras clave: Óxido de zinc, Fotocatálisis heterogénea, Efluente, Fotorreacción.

Abstract

This study aimed to use ZnO as a photocatalyst in the decolorization of synthetic effluent containing C.I Basic Yellow 96 dye, evaluating parameters such as initial catalyst concentration, pH and radiation source. After the tests with synthetic solutions, a test was carried out with industrial effluent from the paper packaging industry that contained the same dye. It was possible catalyst added to the solution (0.5 g L⁻¹) favored the reaction, the pH had little influence and the most powerful radiation source (250 W) was considered ideal for the decoloration of the effluent synthetic (-99%). In tests with industrial effluent, possibly because it has a high organic load and other additives present, the process efficiency was not the same, being much lower (-23%) when compared to the synthetic solution. However, the tests performed show that ZnO is a promising material for the decoloration of this dye studied here.

Keywords: Zinc oxide, Heterogeneous photocatalysis, Effluent, photoreaction.

RUTA INICIAL DE DEGRADACION DEL ACETAMINOFEN EN UN REACTOR FOTOCATALITICO ESCALONADO (RFE)

Mayra García^a, Claudia Aguilar^{a,*} Maria Arias^a, Carlos Montalvo^a, Francisco Anguebes^a, Aaron Flores^b

^a Facultad de Química/Universidad Autónoma del Carmen , CP 24180, Ciudad del Carmen, Campeche, México

^b Facultad de Ingeniería/ Universidad Autónoma del Carmen , CP 24180, Ciudad del Carmen, Campeche, México

*e-mail: caguilar@pampano.unacar.mx

Resumen

Se evaluó la eficiencia de un prototipo de reactor fotocatalítico escalonado RFE, con la remoción del acetaminofén; partículas de anatasa fueron sintetizadas por Sol Gel e impregnadas sobre placas rectangulares de arcilla como soporte. Los resultados por DRX indican que la temperatura de calcinación y el método de síntesis tienen gran influencia sobre las propiedades del material sintetizado. Los difractogramas confirman que la fase cristalina anatasa fue obtenida y depositada sobre el material arcilloso. Las micrografías de la morfología del catalizador por MEB, confirman la distribución del catalizador sobre placas de arcilla en forma de conglomeraciones de partículas esféricas como consecuencia del método de impregnación. Los isoterms de adsorción de N₂ obtenidos por análisis BET, clasifican al material sintetizado como sólidos mesoporosos y a la superficie de reacción TiO₂ – arcilla como un material poroso adsorbente con Sg = 8.055 m²/g y Dporos = 21.492 nm. Se estudiaron los efectos del caudal de reacción sobre el proceso de degradación; bajo condiciones óptimas, porcentajes altos de remoción de acetaminofen fueron alcanzados resaltando el efecto sinérgico del material TiO₂ – arcilla y los beneficios de la geometría del prototipo de reacción. Las muestras extraídas de las reacciones fotocatalíticas fueron analizadas mediante diferentes técnicas analíticas (Espectrofotometría UV – VIS, HPLC y Espectrofotometría Raman) exhibiendo degradación de la molécula de acetaminofen y la formación compuestos fenólicos y ácidos carboxílicos.

Palabras clave: acetaminofén, degradación, Reactor fotocatalítico escalonado (RFE).

Abstract

The efficiency of a RFE staggered photocatalytic reactor prototype was evaluated, with the removal of acetaminophen. Anatase nanoparticles were synthesized by Sol Gel and impregnated on rectangular clay plates as a support. The XRD results indicate that the calcination temperature and the synthesis method have a great influence on the properties of the synthesized material. The diffractograms confirm that the anatase crystalline phase was obtained and deposited on the clay material. The micrographs of the catalyst morphology by SEM confirm the distribution of the catalyst on clay plates in the form of conglomerates of spherical particles as a consequence of the impregnation method. The N₂ adsorption isotherms obtained by BET analysis classify the synthesized material in the category of mesoporous solids and the TiO₂-clay reaction surface as a porous adsorbent material with Sg = 8,055 m² / g and Dpores = 21,492 nm. The effects of the reaction flow rate on the degradation process were studied; Under optimal conditions, high acetaminophen removal percentages were achieved highlighting the synergistic effect of the TiO₂-clay material and the benefits of the reaction prototype geometry. The samples extracted from the photocatalytic reactions were analyzed using different analytical techniques (UV-VIS Spectrophotometry, HPLC and Raman Spectrophotometry) exhibiting degradation of the acetaminophen molecule and the formation of phenolic compounds and carboxylic acids.

Keywords: Step Photocatalytic Reactor (RFE), acetaminophen, degradation.

SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DEL CATALIZADOR TiO_2 – Au: ESTUDIO DE LA CINÉTICA DE REACCIÓN

María Arias^{a,*}, Claudia Aguilar^a, Víctor Córdova Quiroz^a

^a Facultad de Química/Universidad Autónoma del Carmen, C.P. 24180, Ciudad del Carmen, Campeche, México

*e-mail: mc_ariasmateo@yahoo.com.mx

Resumen

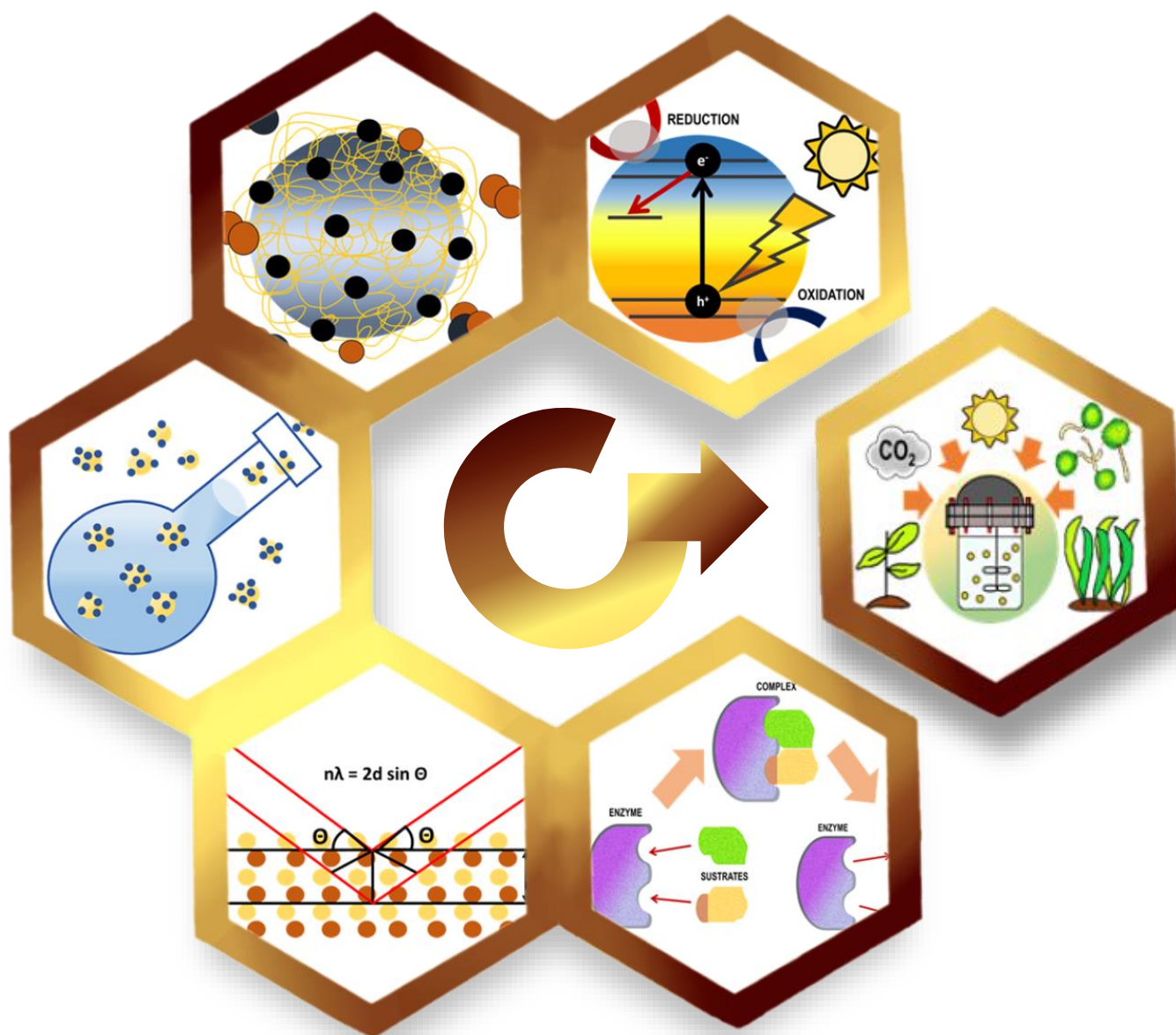
El presente trabajo se refiere a la síntesis y caracterización del catalizador TiO_2 -Au y su evaluación en la degradación fotocatalítica del colorante azul de metileno (MEB). Inicialmente, se llevó a cabo la síntesis del óxido de titanio (TiO_2) mediante el método de Sol-gel y se empleó la técnica de deposición fotoquímica para fijar partículas de oro (Au), modificando así la superficie del semiconductor, para obtener un material con mejores propiedades fotocatalíticas, útil para la degradación de contaminantes orgánicos disueltos en agua. Para la caracterización de los materiales obtenidos, se utilizaron las técnicas de Difracción de Rayos X, Microscopía Electrónica de Barrido, Espectroscopía UV-vis con Reflectancia Difusa y Fisisorción de nitrógeno. Los materiales obtenidos se probaron experimentalmente como catalizadores, en la degradación fotocatalítica del azul de metileno variando las concentraciones iniciales y obteniendo hasta 97.4% de remoción de la molécula inicial. Se determinaron las constantes cinéticas para la reacción utilizando el modelo de Langmuir-Hinshelwood, por GC-MS se determina la ruta inicial de transformación del MEB.

Palabras clave: Azul de metileno, degradación fotocatalítica, TiO_2 -Au, fotocatalisis heterogénea.

Abstract

The present work refers to the synthesis and characterization of TiO_2 -Au and their evaluation in the photocatalytic degradation of the methylene blue dye (MEB). Initially, the synthesis of titanium oxide (TiO_2) was carried out by sol-gel method. Subsequently, the photochemical deposition technique was used to set gold particles (Au) on the metal oxides, thus modifying the surface of the semiconductor, to obtain a material with better photocatalytic properties, useful for the degradation of organic pollutants dissolved in water. For the characterization of the materials obtained, the techniques of X-ray Diffraction (DRX), Scanning Electron Microscopy, UV-VIS Spectroscopy with Diffuse Reflectance and Surface Area by the BET method were used. The materials obtained were tested experimentally as catalysts, in the photocatalytic degradation of methylene blue, varying the initial concentrations and obtaining up to 97.4% removal of the initial molecule. Kinetic constants were determined for the reaction using the LH-HW model and by GC-MS the initial path of transformation of the MEB is determined.

Keywords: Methylene blue, degradation, titanium oxide, heterogeneous photocatalysis.



SESIÓN DE CARTELES 2

DEGRADACIÓN FOTOCATALÍTICA DE IBUPROFENO EMPLEANDO TiO₂ IMPREGNADO CON COBALTO

S. González-Ledesma^{a,*}, R. Ríos-Escobedo^b, J. A. de los Reyes^b, V. Santes^a, C.E. Santolalla-Vargas^a

^a Centro Interdisciplinario de Investigaciones y Estudios sobre Medio Ambiente y Desarrollo (CIIEMAD), Instituto Politécnico Nacional (IPN), Calle 30 de junio de 1520, Barrio la Laguna Ticomán, Gustavo A. Madero, Ciudad de México, CDMX C.P. 07340, México

^b Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, Área de Ingeniería Química, Av. FFCC R, Atlixco 186, Vicentina, Iztapalapa, Ciudad de México, CDMX C.P. 09340, México

*e-mail: sgonzalezl2000@alumno.ipn.mx

Resumen

Se sintetizó Co-TiO₂ a diferentes porcentajes por la técnica de impregnación incipiente. Los espectros infrarrojos por transformada de Fourier (FT-IR) nos indican la presencia de TiO₂ en fase anatasa; mientras que los diferentes fotocatalizadores de Co presentan un cambio de tamaño en los cristales asociados a la presencia de especies de fase superficial de Co (FSC). En los espectros de reflectancia difusa (DRS), las transiciones electrónicas muestran la presencia de estructuras tetraédricas y octaédricas que se asocian a FSC y Co₃O₄. Además, es posible calcular la banda prohibida. En este sentido, el fotocatalizador de 2.5% Co-TiO₂ exhibió 2.92 eV. Para la reducción a temperatura programada (TPR) se observa que, a mayor cantidad de Co, aumenta la temperatura a lo que se asocia en la actividad fotocatalítica. La actividad fotocatalítica se analizó con la degradación de ibuprofeno (IBP) irradiado a una longitud de onda (λ) a 254 nm. Se obtuvo un porcentaje de degradación de 62% para los fotocatalizadores 2.5% y 5.0% de Co-TiO₂. Así mismo, se calcularon las velocidades de reacción inicial donde el fotocatalizador 2.5% Co-TiO₂ obtuvo $1.96 \times 10^{-6} \text{ molh}^{-1}\text{g}^{-1}$ logrando mejorar la actividad fotocatalítica en comparación de TiO₂.

Palabras clave: fotocatalisis, ibuprofeno, degradación, TiO₂, cobalto.

Abstract

Co-TiO₂ were synthesized at different percentages by incipient wetness impregnation technique. Fourier transform infrared spectroscopy (FT-IR) indicate the presence of TiO₂ in the anatase phase; while the different Co photocatalyst present a change crystals size associated with the presence of a Co surface phase (CSP). Diffuse reflectance spectra (DRS), electronic transitions show the presence of tetrahedral and octahedral structures associated with CSP and Co₃O₄. In addition, it is possible to calculate the band gap. In this sense, the 2.5% Co-TiO₂ photocatalyst exhibited 2.92 eV. For temperature-programmed reduction (TPR) is observed that, the higher amount of Co, the temperature increases, which is associated with the photocatalytic activity. The photocatalytic activity was analyzed with the degradation of ibuprofen (IBP) irradiated at a wavelength (λ) at 254 nm. A degradation percentage of 62% for the 2.5% and 5.0% Co-TiO₂ photocatalysts. Likewise, the initial reaction rate was calculated where the 2.5% Co-TiO₂ photocatalyst obtained 1.96×10^{-6} , managing to improve the photocatalytic activity compared to TiO₂.

Keywords: photocatalysis ibuprofen, degradation, TiO₂, cobalt.

**DEGRADACIÓN DE METOPROLOL MEDIANTE PROCESOS DE OXIDACIÓN
AVANZADA EMPLEANDO CATALIZADORES DE TiO₂ DOPADO CON METALES**

**Osmín Avilés-García^a, Jaime Espino-Valencia^b, Arisbeht Mendoza-Zepeda^a, Kingsley Donkor^c,
Sharon Brewer^c, Rubi Romero^a, Reyna Natividad^{a,*}**

^a Laboratorio de Ingeniería Química, CCIQS, UAEMéx-UNAM, Universidad Autónoma del Estado de México, km 14.5 carretera Toluca-Atlacomulco, México, 50200

^b Facultad de Ingeniería Química, UMSNH, CU, Morelia, Michoacán, México, 58060

^c Facultad de Ciencias, Universidad Thompson Rivers, 805 TRU Way, Kamloops, Columbia Británica, Canadá, V2C 0C8

*e-mail: agosmin@gmail.com, reynanr@gmail.com

Resumen

En este estudio, metoprolol (compuesto farmacéutico) fue degradado por fotocatalisis y foto-Fenton catalizado con Cu-TiO₂ y Fe-TiO₂. Los catalizadores fueron sintetizados por el método de Autoensamblaje por evaporación inducida, caracterizados y su desempeño fue comparado con TiO₂ puro y con el fotocatalizador comercial Degussa P25. Se logró una mineralización del 90% del fármaco con el proceso foto-Fenton catalizado con Cu-TiO₂. Este proceso demostró ser más rápido que la fotocatalisis y que el proceso UV-H₂O₂. Menos compuestos intermediarios en la degradación del metoprolol fueron identificados al utilizar Cu-TiO₂ + H₂O₂, lo cual está relacionado con su alto poder oxidativo.

Palabras clave: metoprolol, TiO₂ dopado, fotocatalisis, foto-Fenton-like.

Abstract

In this study, metoprolol (pharmaceutical compound) was degraded by photocatalysis and photo-Fenton catalyzed with Cu-TiO₂ and Fe-TiO₂. The catalysts were synthesized by the EISA method, characterized and their catalytic performance was compared with pure TiO₂ and with the commercial photocatalyst Degussa P25. A 90% mineralization of the drug was achieved with the photo-Fenton process catalyzed with Cu-TiO₂. This process proved to be faster than photocatalysis and the UV-H₂O₂ process. Fewer intermediate compounds in the degradation of metoprolol were identified when using Cu-TiO₂ + H₂O₂, which is related to its high oxidative power.

Keywords: metoprolol, doped TiO₂, photocatalysis, photo-Fenton-like.

**FOTODEGRADACIÓN DEL HERBICIDA DIURÓN UTILIZANDO TiO₂ P25
IMPREGNADO CON Eu⁺³ BAJO IRRADIACIÓN DE LUZ UV, VISIBLE Y SOLAR**

**Maribel Enríquez Reséndiz^{ab}, Carolina Solis Maldonado^{ab*}, Raúl Alejandro Luna Sánchez^{ab},
Nayeli Ortiz Silos^a, Francisca Sandoval Reyes^a, Alfredo Cristobal Salas^c, Ladislao Sandoval
Rangel^d, Gloria Lourdes Dimas-Rivera^e, Daniela Xulú Martínez Vargas^f, Norma Alicia Ramos
Delgado^g**

^a Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Veracruzana, 93396, Poza Rica, Ver., México

^b Facultad de Ciencias Biológicas y Agropecuarias, Universidad Veracruzana, 92870, Tuxpan, Ver., México.

^c Facultad de Ingeniería en Electrónica y Comunicaciones, Universidad Veracruzana, 93396, Poza Rica, Ver., México.

^d Tecnológico de Monterrey, 64849, Monterrey, N.L., México.

^e Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Autónoma de Nuevo León, 66455, San Nicolás de los Garza, Nuevo León, México.

^f Desarrollo Ambiental Máximo, 67120, Guadalupe, N.L., México.

^g Centro de Investigación e Innovación Tecnológica, 66629, Apodaca, Nuevo León, México

*e-mail: casolis@uv.mx

Resumen

En este trabajo, se modificó el material fotocatalítico TiO₂ Evonik P25 (TiO₂), mediante la adición de 0.1% (I-TiO₂ 0.1%Eu) y 0.5% (I-TiO₂ 0.5%Eu) en peso de europio (Eu⁺³) utilizando el método de impregnación. Esto con el propósito de acrecentar el desempeño fotocatalítico en la fracción visible del espectro solar. Se midió el rendimiento de los materiales evaluando la degradación del diurón en medio acuoso a nivel laboratorio utilizando tres tipos diferentes de irradiación: luz ultravioleta, luz visible y luz solar. Los materiales obtenidos por el método de impregnación obtuvieron resultados que indican que la incorporación del europio sobre el TiO₂ permitió su activación en la fracción visible del espectro, favoreciendo la degradación del diurón bajo radiación solar, por encima de los tratamientos con luz ultravioleta y visible. El mejor desempeño fotocatalítico bajo radiación solar lo presentó el TiO₂ 0.5% con 80% de a los 40 minutos.

Palabras clave: fotocatalisis solar, diurón, banda ancha prohibida, impregnación TiO₂- Eu⁺³.

Abstract

In this work, the photocatalytic material TiO₂ Evonik P25 (TiO₂) was modified, by adding 0.1% (I-TiO₂ 0.1% Eu) and 0.5% (I-TiO₂ 0.5% Eu) by weight of europium (Eu⁺³) using the impregnation method. This with the purpose of increasing the photocatalytic performance in the visible fraction of the solar spectrum. The performance of the materials was measured by evaluating the degradation of diuron in aqueous medium at the laboratory level using three different types of irradiation: ultraviolet light, visible light and sunlight. The materials obtained by the impregnation method obtained results that indicate that the incorporation of europium on TiO₂ allowed its activation in the visible fraction of the spectrum, favoring the degradation of diuron under solar radiation, over treatments with ultraviolet and visible light. The best photocatalytic performance under solar radiation was presented by TiO₂ 0.5% with 80% degradation at 40 minutes.

Keywords: solar photocatalysis, diuron, band gap energy, impregnation, TiO₂-Eu⁺³.

SINTÉISIS Y EVALUACIÓN DE FeCl/TiO₂ EN LA DEGRADACIÓN FOTOCATALÍTICA DE FENOL

Diego Alvarez Bustos^{a*}, Carlos Santolalla Vargas^b, José Antonio de los Reyes Heredia^c, Reyna Ríos Escobedo^c, Víctor Florencia Santes Hernández^b, José Felipe Sánchez Minero^a

a Escuela Superior de Ingeniería Química e Industrias Extractivas/Dpto. de Ingeniería Química Petrolera/Instituto Politécnico Nacional, 07738, Ciudad de México, México

b Centro Interdisciplinario de Investigaciones y Estudios sobre Medio Ambiente y Desarrollo/Dpto. de Catálisis/Instituto Politécnico Nacional, 07340, Ciudad de México, México

c Universidad A. Metropolitana-Iztapalapa /Área de Ingeniería Química / Av. FFCC R. Atlixco 186, Vicentina, 09340 Ciudad de México, México

*e-mail: dalvareb1902@alumno.ipn.mx

Resumen

En el presente trabajo se empleó fenol como molécula modelo para la evaluación fotocatalítica de TiO₂ impregnado con hierro y cloro. El soporte TiO₂ se calcinó a 500 °C, el catalizador hierro-cloro se preparó impregnando Fe(NO₃)₃ y NaCl sobre TiO₂ previamente calcinado. Después el catalizador se calcinó a 300 °C y se sulfuró a 300 °C durante 1 hora. Los catalizadores se prepararon a diferentes concentraciones de cloro, utilizando diagramas de equilibrios químicos HYDRA. Posteriormente, los catalizadores se caracterizaron por espectrometría RAMAN y reflectancia difusa (DRS UV-Vis). Las muestras contaminadas, se analizaron con absorción UV-VIS y la confirmación de los principales productos, con espectrometría de masas. Se determinó la formación de especies FeCl₃ y la degradación de fenol fue 8.35 veces mayor con el catalizador FeS-2Cl/TiO₂ en comparación con TiO₂ sulfurada. Asimismo, fue 6.4 veces mayor en comparación con el catalizador FeS- 0.25Cl/TiO₂.

Palabras clave: Degradación, Fotocatálisis, Fenol, Impregnación.

Abstract

In the present work, phenol was used as a model molecule for the photocatalytic evaluation of iron-chlorine impregnated TiO₂. The TiO₂ support was calcined at 500 °C, the iron-chlorine catalyst was prepared by impregnating Fe(NO₃)₃ and NaCl on previously calcined TiO₂. Subsequently, the catalyst was calcined at 300 °C finally, sulphide at 300 °C for 1 hour. The catalysts were prepared at different chlorine concentrations using HYDRA chemical equilibrium diagrams. Subsequently, the catalysts were characterized by RAMAN spectrometry and diffuse reflectance (DRS UV-Vis). Contaminated samples were analyzed by UV-VIS absorption and confirmation of the main products by mass spectrometry. The formation of FeCl₃ species was determined, and the phenol degradation was 8.35 times higher with FeS-2Cl/TiO₂ catalyst compared to sulfurized TiO₂. It was also 6.4 times higher compared to the FeS-0.25Cl/TiO₂ catalyst.

Keywords: Degradation, Photocatalysis, Phenol, Impregnation.

DISEÑO Y ANÁLISIS DEL PROCESO DE DEGRADACIÓN FOTOCATALÍTICA DE ACETAMINOFÉN

José Luis Naranjo-Cristóbal^a, Arick Castillo-Landero^a, Carolina Solis-Maldonado^a, Nayeli Ortiz-Silos^a, Nadia A. Cruz-Vázquez^a, Alfredo Cristóbal-Salas^b, Raúl Alejandro Luna-Sánchez^{a*}

^a Facultad de Ciencias Químicas región Poza Rica-Tuxpan, Universidad Veracruzana, 93390, Poza Rica de Hidalgo, México.

^b Facultad de Ingeniería Electrónica y Comunicaciones región Poza Rica-Tuxpan, Universidad Veracruzana, 93390, Poza Rica de Hidalgo, México.

*e-mail: raluna@uv.mx

Resumen

El agua es un recurso natural ampliamente utilizado por todos los seres vivos que habitan el planeta tierra. Por esta razón, la contaminación de los cuerpos de agua se ha constituido como un problema ambiental grave, de pronta actuación. La contaminación emergente es una nueva forma de contaminación del agua. Su principal característica es la presencia de compuestos químicamente estables en ríos, mares, océanos, etc.; se encuentran en bajas concentraciones y sus efectos van desde bioacumulación, persistencia ambiental, disrupción endocrina hasta toxicidad, etc. La aplicación de los procesos de oxidación avanzada (POA) son procesos muy eficaces para degradar a los contaminantes emergentes. Estas tecnologías, en conjunto con el diseño de sistemas de reacción adecuados y el empleo de herramientas de simulación de procesos químicos permiten el completo desarrollo de análisis cinéticos en la degradación de estos contaminantes. En este proyecto se analizó el proceso de degradación fotocatalítica de acetaminofén, un contaminante emergente. Se obtuvieron parámetros cinéticos como la constante de velocidad de reacción, el orden de reacción y gráficos representativos del comportamiento de la degradación.

Palabras clave: diseño, análisis, simulación, fotocatalisis, acetaminofén.

Abstract

Water is a natural resource widely used by all living beings that inhabit planet earth. For this reason, the contamination of bodies of water has become a serious environmental problem, with prompt action. Emerging pollution is a new form of water pollution. Its main characteristic is the presence of chemically stable compounds in rivers, seas, oceans, etc; They are found in low concentrations and their effects range from bioaccumulation, environmental persistence, endocrine disruption to toxicity, etc. The application of advanced oxidation processes (AOP) are very effective processes to degrade emerging pollutants. These technologies, together with the design of suitable reaction systems and the use of chemical process simulation tools, allow the complete development of kinetic analyzes in the degradation of these pollutants. In this project, the photocatalytic degradation process of acetaminophen, an emerging pollutant. Kinetic parameters such as the reaction rate constant, the reaction order and representative graphs of the degradation behavior were obtained.

Keywords: design, analysis, simulation, photocatalysis, acetaminophen.

ACTIVIDAD FOTOCATALÍTICA DE TiO_2/ZnO , $\text{TiO}_2/\text{Fe}_2\text{O}_3$ y $\text{TiO}_2/\text{Eu}_2\text{O}_3$ EN LA DEGRADACIÓN DE IBUPROFENO

Lilia Eugenia Hernández-Ortiz^a, Roberto Chargoy-Betancourt^b, Raúl Alejandro Luna-Sánchez^b, Carolina Solis-Maldonado^b, Alfredo Cristobal-Salas^b, Brenda Berenice Zermeno-Reséndiz^c, Daniela Xulú Martínez-Vargas^d, Ladislao Sandoval-Rangel^d

^a Facultad de Ciencias Biológicas y Agropecuarias, Universidad Veracruzana, CP 92859, Tuxpan de Rodríguez Cano, Veracruz de Ignacio de la Llave, México.

^b Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Veracruzana, CP 93390, Prolongación Venustiano Carranza S/N Col. Revolución. Poza Rica de Hidalgo, Veracruz de Ignacio de la Llave, México.

^c Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Autónoma de San Luis Potosí, CP 78210, Av. Dr. Manuel Nava 6, Zona Universitaria, San Luis Potosí, S.L.P., México.

^d Laboratorio del Centro del Agua para América Latina y el Caribe, Escuela de Ingeniería y Ciencias, Tecnológico de Monterrey, CP 64849, Monterrey Nuevo León, México.

e-mail: raluna@uv.mx

Resumen

Se prepararon catalizadores bimetalicos de tipo TiO_2/ZnO , $\text{TiO}_2/\text{Fe}_2\text{O}_3$ y $\text{TiO}_2/\text{Eu}_2\text{O}_3$ con diferentes porcentajes en peso, obtenidos por el método de sol-gel. Posteriormente, se evaluaron en la degradación fotocatalítica de Ibuprofeno (IB) como molécula modelo en medio acuoso, considerada como una de las más importantes en los procesos avanzados de oxidación (PAO'S), que son muy efectivos en la oxidación de contaminantes orgánicos, como es el caso del Ibuprofeno. Los catalizadores serán caracterizados por difracción de rayos X (DRX), reflectancia difusa de UV-vis y espectroscopia FTIR. La degradación de IB fue monitoreada por espectroscopia UV-Vis, en donde los materiales obtenidos en la combinación TiO_2/ZnO , $\text{TiO}_2/\text{Fe}_2\text{O}_3$ y $\text{TiO}_2/\text{Eu}_2\text{O}_3$ superaron los porcentajes de degradación fotocatalítica de IB, en comparación a los porcentajes que se obtuvieron con catalizadores de TiO_2 comercial en presencia de luz UV.

Palabras clave: Fotocatálisis, TiO_2 , Ibuprofeno, Contaminantes Emergentes.

Abstract

Bimetallic catalysts TiO_2/ZnO , $\text{TiO}_2/\text{Fe}_2\text{O}_3$ and $\text{TiO}_2/\text{Eu}_2\text{O}_3$ were prepared with different percentages by weight, obtained by the sol-gel method. Subsequently, they were evaluated in the Ibuprofen (IB) photocatalytic degradation in an aqueous medium, considered one of the most important in advanced oxidation processes (PAO'S), which are very effective in the oxidation of organic pollutants, such as the case of Ibuprofen. The catalysts will be characterized by X-ray diffraction (XRD), diffuse UV-vis reflectance and FTIR spectroscopy. The degradation of IB was monitored by UV-Vis spectroscopy, where the materials obtained in the combination of TiO_2/ZnO , $\text{TiO}_2/\text{Fe}_2\text{O}_3$ and $\text{TiO}_2/\text{Eu}_2\text{O}_3$ exceeded the percentages of photocatalytic degradation of IB, compared to the percentages obtained with catalysts TiO_2 commercial in the presence of UV light.

Keywords: Photocatalysis, TiO_2 , Ibuprofen, Emerging Contaminants.

SÍNTESIS DE CATALIZADORES MESOPOROSOS TiO₂-SiO₂ CON Cu PARA LA REACCIÓN OXIDACIÓN SELECTIVA DEL GLICEROL

Sánchez-Escobar Jorge Luis^{a,*}, Espino-Valencia, Jaime^a, Natividad Rangel, Reyna^b

^a Laboratorio de cinética y catálisis /Facultad de Ingeniería Química /UMSNH, 58004, Morelia, México

^b Laboratorio de cinética y catálisis /Facultad de Química / Universidad Autónoma del Estado de México, 56900, Toluca, México

*0849099f@umich.mx

Resumen

Se sintetizaron catalizadores compuestos de TiO₂-SiO₂ con 14 % en peso de Ti con porcentajes del 0, 5, 10, 15 y 20% de cobre combinando el método sol-gel con el método de Auto-ensamblaje por Evaporación Inducida (EISA), los materiales obtenidos fueron caracterizados por TGA-DSC y tratados térmicamente, para la muestra sintetizada sin cobre se observa una pérdida de peso cercano al 38 %, a los 750 °C, esta se atribuye a la descomposición de los compuestos que aún estaban atrapados dentro de la estructura para los sólidos a diferentes concentraciones de cobre, la pérdida de peso se encuentra entre 32 y 35 % a 750 °C, perdiendo su mayor proporción cerca los 350 °C,. Los sólidos se caracterizaron por el método BET obteniendo un valor de 1.42 nm de diámetro de poro en todos los materiales, obteniendo áreas superficiales en un intervalo de 457 a 380 m²/g.

La reacción del glicerol con el foto-catalizador aún se encuentra en desarrollo, aún no está concluido es por ello que no se cuentan con datos experimentales.

Palabras clave: Meso-poros, Foto-catálisis, Dopados, Oxidación, Titania.

Abstract

Catalysts composed of TiO₂-SiO₂ with 14% by weight of Ti with percentages of 0, 5, 10, 15 and 20% of copper, they were synthesized by combining the sol-gel method with Self-Assembly by Induced Evaporation (EISA). The materials obtained were characterized by TGA-DSC and heat treated, for the sample synthesized without copper, a weight loss close to 38% is observed, at 750 C, this is attributed to the decomposition of the compounds that were still trapped within the structure. the solids at different concentrations of copper, the weight loss is between 32 and 35% at 750 C, losing its greatest proportion near 350 C, The solids were characterized by BET, obtaining a value of 1.42 nm in diameter of pore in all materials, obtaining surfaces in a range of 457 to 380 m²/g.

The reaction of glycerol with the photocatalyst is still under development, it is not yet completed, which is why there are no experimental data.

Keywords: Mesopores, Photocatalysis, Doped, Oxidation, Titania.

DEGRADACIÓN FOTOCATALÍTICA DE p-CRESOL EMPLEANDO TiO₂ DOPADO CON Zn²⁺

M. E. Velásquez-Torres^{a,*}, F. Tzompantzi^b, J. C. Castillo-Rodríguez^b R. Gómez^b y J. Cardoso-Martínez^c

^{a*} Dpto de Ingeniería de Procesos e Hidráulica, Posgrado en Energía y Medio Ambiente, Universidad Autónoma Metropolitana – Iztapalapa, Av. San Rafael Atlixco No. 189, Ciudad de México, 09340, México.

^b Dpto. de Química, Área de Catálisis, Universidad Autónoma Metropolitana – Iztapalapa, Av. San Rafael Atlixco No. 189, Ciudad de México, 09340, México.

^c Dpto. de Física, Área de Polímeros, Universidad Autónoma Metropolitana – Iztapalapa, Av. San Rafael Atlixco No. 189, Ciudad de México, 09340, México.

*cbi2161801558@izt.uam.mx

Resumen

Los fotocatalizadores TiO₂ X%Zn 400 °C, en donde la X representa el porcentaje molar de Zn²⁺ (3%,5%,10% y 15%) fueron sintetizados mediante el método de sol gel en un solo paso. En un reactor tipo Batch, bajo la irradiación de una lámpara de mercurio ($\lambda = 254$ nm, Pen-Ray), se obtuvieron degradaciones altas de 46 ppm p-cresol a 360 minutos con los fotocatalizadores sintetizados: 70% (3% Zn), 83% (5% Zn), 84% (10% Zn) y 69% (15% Zn).

Palabras clave: p-cresol, contaminante, fotodegradación, TiO₂.

Abstract

The TiO₂ X% Zn 400 °C photocatalysts, where X represents the molar percentage of Zn²⁺ (3%, 5%, 10% and 15%) were synthesized using the sol gel method in a single step. In a Batch type reactor, under the irradiation of a mercury lamp ($\lambda = 254$ nm, Pen-Ray), high degradations of 46 ppm p-cresol were obtained at 360 minutes with the synthesized photocatalysts: 70% (3% Zn), 83% (5% Zn), 84% (10% Zn) and 69% (15% Zn).

Keywords: p-cresol, pollutant, photodegradation, TiO₂.

EXTRACTION-HYDROGENATION, AN IDEA FOR REFINING TROUBLESOME FEEDSTOCKS

Enrique E. Tarifa^a, Mariana Busto^{b#}, Carlos R. Vera^{b*}

^a Facultad de Ingeniería / Universidad Nacional de Jujuy, CONICET, 4600, San Salvador de Jujuy, Argentina

^b Instituto de Investigaciones en Catálisis y Petroquímica / FIQ-UNL, CONICET, 3000, Santa Fe, Argentina

*e-mail: cvera@fiq.unl.edu.ar

#Currently at Y-TEC, 1923 Berisso, Argentina

Resumen

Se analiza la posibilidad de acoplar un reactor continuo de hidrogenación a una unidad continua de extracción. La corriente de extracto es tratada para hidrogenar impurezas diluidas y estas se vuelven menos solubles en el extracto. Esto permite establecer un lazo cerrado de regeneración de solvente. El proceso puede reemplazar la regeneración de solvente mediante destilación, que resulta prohibitiva en costo en el caso de impurezas minoritarias poco volátiles. Se obtienen ecuaciones de diseño para el caso simple de un mezclador/decantador acoplado a un reactor slurry. Se estudia un ejemplo de extracción de crudos ácidos con alcohol donde el extracto se regenera a una mezcla de metanol e hidrocarburo decarboxilado gracias a la hydrodeoxigenación de ácido nafténico sobre un catalizador NiMo/Al₂O₃. Se obtienen parámetros experimentales de transferencia de masa y reacción y se simula el proceso en computadora. El sistema se comporta como uno de pseudo primer orden en concentración de reactivo disuelto, por la gran dilución de la impureza en el extracto. La dilución ayuda a mantener altas relaciones de hidrógeno disuelto a impureza, aunque genera velocidades bajas de reacción. La mayor dificultad es encontrar un solvente selectivo y estable que no genere reacciones paralelas indeseadas en el reactor.

Palabras clave: extracción, hidrogenación, integración, crudos ácidos.

Abstract

The possibility of coupling a continuous hydrogenation reactor to a continuous extraction unit was analyzed. The extract was treated to hydrogenate diluted impurities that then became less soluble in the extract. This enables a closed loop of solvent regeneration. The process can replace the regeneration of extraction solvents by distillation, which becomes prohibitive in the case of minor impurities of low volatility. Design equations are obtained for the simple case of a mixer/settler coupled to a slurry reactor. An example was studied of extraction of naphthenic acids from petroleum crudes with methanol in which the extract is regenerated to a mixture of methanol and decarboxylated hydrocarbon because of the hydrodeoxygation of naphthenic acids over a NiMo/Al₂O₃ catalyst. Experimental parameters mass transfer and reaction are obtained and the process is simulated in a computer. The system has a pseudo first order reaction rate due to big dilution of the impurity in the extract. Dilution helps maintaining high ratios of dissolved hydrogen to impurity. However, dilution leads to low overall reaction rates. The biggest difficulty is finding a selective solvent that does not generate parallel undesired reactions in the reactor.

Keywords: extraction, hydrogenation, integration, acid crudes.

SYNTHESIS OF FLAVANONE BY POTASSIUM MODIFIED SODIUM TITANATE NANOTUBE CATALYSTS

Iván Alonso Santos-López^{a*}, Brent E. Handy^{b*}, José Julián Cano Gómez, Michael D. Amiridis^c, Oleg S. Alexeev^c

^a *Universidad Autónoma de Nuevo León, Facultad de Ciencias Químicas. Ave. Universidad S/N, Cd. Universitaria, C.P. 66455, San Nicolás de los Garza, N.L. México.*

^b *Universidad Autónoma de San Luis Potosí, Facultad de Ciencias Químicas. Av. Dr. Manuel Nava No.6, Zona Universitaria, C.P. 78210, San Luis Potosí, S.L.P., México.*

^c *University of South Carolina, Columbia, SC 29208, USA*

*e-mail: ivan.santoslp@uanl.edu.mx, handy@uaslp.mx

Resumen

Los flavonoides son compuestos químicos de interés debido a sus diferentes propiedades químicas, entre ellas la propiedad antioxidante; flavanona pertenece a este grupo. Flavanona es obtenida por medio de la reacción de condensación de Claisen-Schmidt entre benzaldehído y 2'-hidroxiacetofenona; las reacciones se llevaron a cabo en la presencia de catalizadores de nanotubos de titanatos de sodio modificados con potasio. Los catalizadores presentan sitios básicos de naturaleza tipo Lewis & Brønsted, con densidad de sitios de 140 μmol/g y sitios básicos de fuerza intermedia & fuerte, caracterizados a través de adsorción de CO₂ en DRIFTS, TPD & microcalorimetría, respectivamente. La actividad catalítica obtenida por los catalizadores es: conversión del 78% del benzaldehído, 65% de selectividad & 75% de rendimiento de flavanona; este comportamiento se relacionó con la basicidad de la superficie de los catalizadores, en donde la activación de 2'-hidroxiacetofenona -primer paso en la síntesis de flavanona- están involucrados los sitios de fuerza intermedia de naturaleza tipo Lewis.

Palabras clave: Flavanona, Condensación Claisen-Schmidt, Nanotubos de Titanatos, Potasio, Antioxidantes.

Abstract

Flavonoids are chemical compounds of interest due to their different chemical properties, among them the antioxidant property; flavanone belongs to this group. Flavanone is obtained using the Claisen-Schmidt condensation reaction between benzaldehyde and 2'-hydroxyacetophenone; the reactions were carried out in the presence of potassium-modified sodium titanate nanotube catalysts. The catalysts show basic sites of a Lewis & Brønsted nature, with a site density of 140 μmol / g and basic sites of intermediate & strong strength, characterized through CO₂ adsorption in DRIFTS, TPD & microcalorimetry, respectively. The catalytic activity obtained by the catalysts is: a conversion of 78% of benzaldehyde, 65% of selectivity, and 75% of flavanone yield; this behavior was related to the surface basicity of the catalyst, where the activation of 2'- hydroxyacetophenone -the first step in the synthesis of flavanone- are involved the sites of the intermediate strength of a Lewis nature.

Keywords: Flavanone, Claisen-Schmidt condensation, Titanate nanotubes, Potassium, Antioxidants.

**EFFECTO DEL SOPORTE EN LA TRANSFORMACIÓN DE GLICEROL CON
CATALIZADORES DE ÓXIDOS DE HIERRO**

García-Delgado F. J.[†] y Martín-Guaregua N. C.^{a,*}

^a Depto. Química, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, C.P. 09340 CDMX, México.

*e-mail: mgnc@xanum.uam.mx

Resumen

Se presenta el estudio de catalizadores basados en óxidos de hierro, másicos y soportados. Se prepararon tres catalizadores de óxido de hierro, uno por el método de deposición-precipitación (Fe), otro por coprecipitación soportado en sílice (FeSi) y un aluminofosfato de aluminio con óxido de hierro (FeAl). Se usaron dos referencias comerciales, un hierro nanoestructurado (FeNano) y un oxihidróxido de hierro (FeOOH). Las muestras se caracterizaron por DRX, TPR-H₂ y adsorción de N₂. La actividad catalítica se evaluó en la reacción de deshidratación-deshidrogenación de glicerol en fase gaseosa. Los resultados de TPR-H₂ de catalizadores de óxido de hierro mostraron diferencias en la reducción de las especies de hierro entre las muestras soportadas y las másicas. En la reacción de glicerol, los catalizadores mostraron también diferencias en la conversión y en la selectividad hacia acroleína, acetol y alcohol alílico. En las muestras soportadas (FeAl y FeSi) se observó una mayor cantidad de acroleína en relación con las másicas, donde se observó mayor cantidad de acetol y alcohol alílico. Los resultados obtenidos indican que los grupos hidroxilos en la superficie favorecen las especies reducidas de hierro y la selectividad hacia el acetol y la acroleína.

Palabras clave: Óxido de hierro, Acroleína, Glicerol, Acetol, Alcohol Alílico.

Abstract

The study of catalysts based on iron oxides, mass and supported, is presented. Three catalysts were prepared, of iron oxide one by precipitation-deposition method (Fe), another by coprecipitation supported on silica (FeSi) and an aluminum aluminophosphate with iron oxide (FeAl). Two commercial references were used, a nanostructured iron (FeNano) and an iron oxyhydroxide (FeOOH). The samples were characterized by XRD, TPR-H₂ and N₂ adsorption. The catalytic activity was evaluated in the dehydration-dehydrogenation reaction of glycerol in the gas phase. The TPR-H₂ results of iron oxide catalysts showed differences in the reduction of iron species between the supported and unsupported catalysts. In the glycerol reaction, the catalysts also showed differences in conversion and selectivity towards acrolein, acetol and allyl alcohol. In the supported samples (FeAl and FeSi) a greater amount of acrolein was observed in relation to the unsupported, where a greater amount of acetol was observed. The results obtained indicate that the surface hydroxyl groups favors the reduced iron species and selectivity towards acetol and acrolein.

Keywords: Iron oxides, Acrolein, Glycerol, Acetol, Allyl Alcohol.

ESTUDIO DE LA ADICIÓN DE EDTA A PH=7 EN CATALIZADORES OXIDADOS NiMo y NiW SOPORTADOS EN Zr-SBA-15 ORIENTADOS A PROCESOS DE HDS

Diego Alejandro García-Ramos^{a,*}, Rebeca Silva-Rodrigo^a, Amelia Olivas-Sarabia^b, Juan Navarrete-Bolaños^c, Acela López-Benítez^a, Alfredo Guevara-Lara^d

^a Tecnológico Nacional de México /Instituto Tecnológico de Ciudad Madero /Centro de Investigación en Petroquímica, C.P. 89600, Altamira, México.

^b Universidad Nacional Autónoma de México /Centro de Nanociencias y Nanotecnología, C.P. 22860, Ensenada, México.

^c Instituto Mexicano del Petróleo, C.P. 07730, CDMX, México.

^d Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo /Área Académica de Química, C.P. 42181, Mineral de la Reforma, México.

*e-mail: crag.somar@gmail.com, rebsilva_2000@yahoo.com.mx

Resumen

Este estudio muestra la influencia de la adición de circonio a los catalizadores de hidrodesulfuración (HDS) mediante impregnación directa de propóxido de circonio en la superficie de un soporte SBA-15 obtenido mediante el método sol-gel. La preparación del soporte de Zr-SBA-15 se obtuvo con una relación molar teórica de Zr/Si=0.07. Posteriormente, se impregnó el soporte con las soluciones precursoras de nitrato de níquel, heptamolibdato de amonio y/o metatungstato de amonio, respectivamente, para obtener catalizadores bimetalicos (NiMo y NiW) con una relación atómica teórica Ni/(Ni+Mo+W) de 0.3. Además, se utilizó EDTA como agente quelante durante la etapa de impregnación con una relación molar teórica Ni: EDTA=1:1 ajustando el pH a neutro. Los catalizadores bimetalicos se caracterizaron en cada paso de la preparación (secado y calcinación). Los resultados muestran que la adición de EDTA influye en la naturaleza de las especies de Ni, Mo y W formadas. En el caso de los catalizadores bimetalicos de NiW, el EDTA da como resultado especies de tungstato bien dispersas en el estado de óxido. Sin embargo, la formación de especies de MoO₃ están presentes en los catalizadores bimetalicos de NiMo.

Palabras clave: EDTA, pH neutro, especies de tungstato bien dispersas.

Abstract

This study shows the influence of the addition of zirconium to hydrodesulfurization catalysts (HDS) was studied by direct impregnation of zirconium propoxide on the surface of an SBA-15 support obtained by sol-gel method. The preparation of the Zr-SBA-15 support was obtained with a theoretical molar ratio of Zr/Si=0.07. Subsequently, the support was impregnated with the precursor solutions of nickel nitrate, ammonium heptamolybdate and/or ammonium metatungstate, respectively, to obtain bimetallic catalysts (NiMo and NiW) with a theoretical atomic ratio Ni/(Ni+Mo+W) of 0.3. Furthermore, EDTA was used as a chelating agent during the impregnation step with a theoretical molar ratio Ni: EDTA = 1:1 adjusting the pH to neutral. The bimetallic catalysts were characterized in each step of the preparation (drying and calcination). The results show that the addition of EDTA influences the nature of the Ni, Mo and W species formed. In the case of NiW bimetallic catalysts, EDTA results in well dispersed tungstate species in the oxide state. However, the formation of MoO₃ species are present in NiMo bimetallic catalysts.

Keywords: EDTA, neutral pH, well dispersed tungstate species.

DESARROLLO DE UNA METODOLOGÍA EXPERIMENTAL PARA LA EVALUACIÓN DE LA DESACTIVACIÓN Y VIDA ÚTIL DE CATALIZADORES DE HIDROTRATAMIENTO DE DESTILADOS DE CRUDO EN REACTORES BATCH

Francisco José Morales-Leal^a, Jorge Ancheyta^{a*}, Pablo Torres-Mancera^a, Fernando Alonso Martínez^a

^a Instituto Mexicano del Petróleo, Eje Central Lázaro Cárdenas Norte 152, Col. San Bartolo Atepehuacan, México D.F. 07730, México

*jancheyt@imp.mx

Resumen

El estudio de la desactivación del catalizador es uno de los principales intereses en la práctica de los procesos catalíticos industriales. En las refinerías de petróleo, la estimación de la tasa de desactivación del catalizador es importante para evaluar y comparar el rendimiento de diferentes catalizadores en los procesos de hidrotratamiento (HDT), disminuyendo así los costosos procesos de parada de planta para su reemplazo. La desactivación del catalizador es inevitable. Sin embargo, algunas de sus consecuencias pueden retrasarse, evitarse o incluso revertirse. Este trabajo presenta el desarrollo de una metodología para evaluar el impacto de las condiciones de desactivación acelerada en el desempeño del catalizador durante las reacciones de HDT. Dicha metodología permitirá obtener información relevante sobre la desintegración de la actividad antes del uso industrial del catalizador mediante el control de las variables que influyen en el proceso: temperatura y tipo de alimentación.

Palabras clave: Desactivación-acelerada, hidrotratamiento, crudos, catalizadores.

Abstract

The study of catalyst deactivation is one of the main interests in the practice of industrial catalytic processes. In oil refineries, the estimation of catalyst deactivation rate is important to evaluate and compare the performance of different catalysts in hydrotreating (HDT) processes, thus decreasing costly plant shutdown processes for replacement. Catalyst deactivation is inevitable. However, some of its consequences can be delayed, avoided, or even reversed. This work presents the development of a methodology to evaluate the impact of accelerated deactivation conditions on catalyst performance during HDT reactions. This methodology will allow obtaining relevant information about the activity disintegration before the industrial use of the catalyst by controlling the variables that influence the process: temperature and type of feed.

Keywords: Deactivation-accelerated, hydrotreatment, crude oils, catalysts.

OXIDACIÓN DE MONÓXIDO DE CARBONO EN CATALIZADORES CuPd SOPORTADOS EN CERIA NANOESTRUCTURADA

Diana Arcos Alvaro^{a*}, Daniel G. Araiza^a, Antonio Gómez-Cortés^a, Gabriela Díaz^{a*}

^a *Laboratorio de Reactividad Catalítica de Nanomateriales / Departamento de Física Química / Instituto de Física / Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad de México, México*

*e-mail: araldig.09@gmail.com, diaz@fisica.unam.mx

Resumen

La oxidación de CO fue estudiada en catalizadores CuPd soportados en ceria comercial (poliedros) y cerias con morfología de barras y cubos. Se utilizaron dos cargas metálicas totales, 2 y 5% en peso, y una composición atómica rica en Cu en los bimetalicos. Los catalizadores se prepararon por impregnación húmeda. Se caracterizaron por DRX, adsorción de N₂, HRTEM, H₂-TPR, DRIFTS de CO y NO adsorbidos. La oxidación de CO se estudió en condiciones de exceso de oxígeno. Se observaron efectos promotores de la reducción y dispersión del Cu debido a la presencia de Pd. Se puso en evidencia la presencia de sitios Cu y Pd expuestos en la superficie con una abundancia relativa diferente. Los catalizadores bimetalicos fueron más activos que los monometalicos de Cu y de entre ellos, la serie soportada en barras mostró la T50 más baja. Sin embargo, considerando la masa total de metal en los catalizadores, el mayor TOF lo presentó el catalizador con un contenido metálico total de 2% en peso. Los resultados parecen indicar una combinación de mayor dispersión y un enriquecimiento de paladio en la superficie como responsables de la actividad observada en los catalizadores bimetalicos.

Palabras clave: Oxidación de CO, Catalizadores CuPd, Ceria nanoestructurada.

Abstract

CO oxidation was studied on CuPd catalysts supported on commercial ceria (polyhedra) and ceria synthesized via hydrothermal route showing rod and cube morphology. Catalysts were prepared by wet impregnation; the total metal content was fixed at 2 and 5 wt.%, and the metal composition in the bimetallic samples was always Cu rich. Catalysts were characterized by XRD, N₂ adsorption, HRTEM, DRIFTS of adsorbed CO, and NO. The CO oxidation was studied in oxygen-rich conditions. Promotion of Cu reduction and dispersion was observed in the bimetallic catalysts due to the presence of Pd. Cu and Pd sites are exposed on the surface of the bimetallic catalysts but with different relative occurrences. The activity of all CuPd catalysts was higher than that of the Cu ones, and among them, the one supported on ceria rods showed the lowest T50. However, when considering the total metal content in the catalysts, the low metal content catalyst showed the highest TOF. Results seem to indicate a combination of higher dispersion and a Pd enrichment on the surface as responsible for the activity shown by the bimetallic catalysts.

Keywords: CO oxidation, CuPd catalysts, Nanostructured ceria.

EFFECTO DEL MÉTODO DE SÍNTESIS DE $Mn_{1-x}Ce_xO_y$ EN LA OXIDACIÓN DE TOLUENO

C. Vargas-Castillo, A. Cruz-López^a, M. A. Ruiz-Gómez^b, S.I. Suárez-Vázquez^{a,*}

^a Universidad Autónoma de Nuevo León, Facultad de Ingeniería Civil, Av. Universidad s/n, San Nicolás de los Garza, Nuevo León. 66455.

^b CONACYT-Departamento de Física Aplicada, CINVESTAV-IPN, Mérida, Yucatán 97310, México

*e-mail: santiago.suarezvz@uanl.edu.mx, ssuarezvazquez@gmail.com.

Resumen

Las propiedades texturales y fisicoquímicas de un catalizador están directamente relacionadas con el método de síntesis. Se sintetizaron catalizadores del tipo $Mn_{1-x}Ce_xO_y$ con un rango de valores de x de 0.05 a 0.50 utilizando el método de hidrotermal y de sonoquímica. Todos los catalizadores se probaron en la reacción catalítica de tolueno. Los resultados muestran que $Mn_{0.9}Ce_{0.1}O_y$ preparado por sonoquímica, fue el mejor catalizador obteniendo valores de $T_{90} = 267.4^\circ\text{C}$ y $E_a = 132.2$ kJ/mol. Este comportamiento es atribuido a la existencia de defectos identificados por espectroscopia Raman y están relacionados con la concentración de las especies de Mn^{4+} que se identificaron. La presencia de estas especies de Manganese es promovida por la fase presente identificada como MnO_2 por DRX y por el método de sonoquímica. Por otro lado, la síntesis hidrotermal promueve la formación de la fase Mn_2O_3 , sin embargo, el catalizador con un valor de x de 0.30 es el que demostró mejor actividad catalítica lo que es atribuido a la existencia de las especies de Ce^{3+} , obteniendo valores de $T_{90} = 274.9^\circ\text{C}$ y $E_a = 75.5$ kJ/mol.

Palabras clave: Compuestos orgánicos volátiles, Óxidos binarios, Oxidación catalítica, Sonoquímica, Hidrotermal.

Abstract

It is well known that the textural and physicochemical properties are strongly related with their synthesis method. It was synthesized catalyst $Mn_{1-x}Ce_xO_y$ type with x values in the range of 0.05-0.50 by hydrothermal and sonochemistry method. All catalysts were tested in the catalytic oxidation of toluene. Results shown that $Mn_{0.9}Ce_{0.1}O_y$ prepared by a sonochemical method, was the best catalyst with the T_{90} value of 267.4°C and $E_a = 132.2$ kJ/mol. This behavior is attributed to existence of defects identified by Raman spectroscopy which are strongly related with the concentration of Mn^{4+} species identified in this catalyst. The existence if these Mn species is promoted for the MnO_2 phase identified by XRD and clearly promoted by the sonochemical synthesis. On the other hand, hydrothermal synthesis promoted the formation of Mn_2O_3 phase, however the catalyst with x value of 0.30 showed the best catalytic activity for this synthesis method which is attributed to the existence of Ce^{3+} species identified in this catalyst obtained T_{90} value of 274.9°C and $E_a = 75.5$ kJ/mol.

Keywords: Volatile organic compounds, Mixed binary oxides, Catalytic oxidation, Sonochemistry, Hydrothermal.

SÍNTESIS DE MATERIALES MeAPO-36 (Me=Zn, Co, Mg) Y ZEOLITAS ZSM-5 MODIFICADAS PARA LA TRANSFORMACIÓN DE METANOL A HIDROCARBUROS (MTH)

Misael García Ruiz^{a*}, Dora A. Solís Casados^a, Julia Aguilar Pliego^b, Nancy Coromoto Martin Guaregua^c, Enrique Sastre de Andrés^d

^aUniversidad Autónoma del Estado de México, Centro Conjunto de Investigación en Química Sustentable UAEM-UNAM. Personal Académico Adscrito a la Facultad de Química, UAEMex.

^bÁrea de Química Aplicada, Departamento de Ciencias Básicas, UAM-A, San Pablo 180, C.P. 02200, Cd de México.

^cÁrea de catalisis, UAM-I, Av. San Rafael Atlixco N° 186. Col. Vicentina, C.P. 09340, Cd de México

^dInstituto de Catálisis y Petroleoquímica, CSIC, C/Marie Curie 2, 28049 Madrid, España

*e-mail: misagr89@gmail.com

Resumen

En este trabajo se presenta un estudio preliminar del uso de catalizadores zeolíticos y zeotipos modificados para la reacción de transformación de metanol a hidrocarburos (MTH). Se prepararon materiales del tipo aluminofosfato MeAPO-36 donde Me es Zn, Mg y Co, además de modificar una zeolita comercial ácida con iones zinc por intercambio iónico. Los materiales preparados se han caracterizado mediante diversas técnicas físico-químicas y sus propiedades catalíticas se han evaluado en un reactor automatizado de lecho fijo, con análisis de los productos en línea. Los catalizadores y zeolitas modificadas con Zn presentan mayor selectividad a la fracción BTX (benceno, tolueno y xilenos). La zeolita comercial modificada con iones Zn presentó una conversión completa de metanol con mayor selectividad a compuestos aromáticos totales a 400

°C (34.88 % mol) al igual que el zeotipo ZnAPO-36 (57.72 % mol). Este último material fue sintetizado con un equipo microondas a condiciones más suaves de temperatura y con menos tiempo de síntesis obteniéndose un material con menor tamaño de cristal.

Palabras clave: Conversión de metanol, hidrocarburos, materiales MeAPO-36, zeolitas modificadas, olefinas.

Abstract

This work presents a preliminary study of the use of zeolitic catalysts and modified zeotypes for the reaction of transformation of methanol to hydrocarbons (MTH). Materials of the aluminophosphate type MeAPO-36 where Me is Zn, Mg and Co were prepared, in addition to modifying an acidic commercial zeolite with zinc ions by ion exchange. The materials prepared have been characterized by various physicochemical techniques and their catalytic properties have been evaluated in an automated fixed-bed reactor, with on-line product analysis. Zn-modified catalysts and zeolites show higher selectivity to the BTX fraction (benzene, toluene and xylenes). The commercial zeolite modified with Zn ions presented a complete conversion of methanol with a higher selectivity of aromatics compounds totals (34.88 % mol) at 400 ° C, as did the ZnAPO-36 zeotype. (57.72 % mol). This last material was synthesized with a microwave equipment at milder temperature conditions and with less synthesis time, obtaining a material with a smaller crystal size.

Keywords: Methanol conversion, hydrocarbons, MeAPO-36 materials, modified zeolites, olefins.

CARACTERIZACIÓN Y ACTIVIDAD CATALÍTICA DE CATALIZADORES BIMETÁLICOS SOPORTADOS SOBRE ALUMINA Y ZEOLITA EN LA OBTENCIÓN DE PRODUCTOS DE INTERÉS COMERCIAL A PARTIR DE METANO

Aldo Vázquez Rosales^a, Arturo M. Padilla González^a, Carlos J. Lucio Ortiz^{a*}, Javier Rivera de la Rosa^a, David de Haro del Río^a, Gerardo Flores Escamilla^a, Gloria Dimas Rivera^a, Carolina Solís Maldonado^b, Ladislao Sandoval Rangel^c

^a Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Autónoma de Nuevo León, 66451, San Nicolás de los Garza, N.L.

^b Universidad Veracruzana, Facultad de Ciencias Químicas. Av. Venustiano Carranza S/N, Col. Revolución, CP 93390, Poza Rica, Veracruz, (México).

^c Tecnológico de Monterrey, Escuela de Ingeniería y Ciencias, Ave. Eugenio Garza Sada 2501, Monterrey, N.L., México, 64849.

*e-mail: carlos.lucioor@uanl.edu.mx

Resumen

Uno de los procesos que se ha desarrollado en los últimos años por lo conveniente que sería, no solo para el sector energético si no todos sus derivados, es el aprovechamiento de un gas de efecto invernadero como el metano (CH_4) para la síntesis de diferentes productos oxigenados de alto valor como el metanol (CH_3OH) y el formaldehído (CH_2O). En el presente trabajo, se prepararon catalizadores bimetálicos Pd-Ru, Pt-Ru y Cu-Ru utilizando γ -alúmina comercial y mordenita faujasita, los cuales fueron utilizados como soporte. Los catalizadores fueron reducidos en una corriente de hidrógeno (H_2/N_2 30%) a 550°C por 2 h y posteriormente fueron caracterizados por difracción de rayos X (DRX), fisisorción de nitrógeno, microscopia electrónica de barrido (MEB), reducción a temperatura programada (TPR), y posteriormente fue evaluada su actividad catalítica donde los catalizadores Pd-Ru/MOR y Cu-Ru/ Al_2O_3 obtuvieron la mejor actividad catalítica con una conversión del 15.78% a 550°C y 85.73 a 750°C respectivamente. Se calculó la selectividad hacia el metanol y los catalizadores Pt-Ru/MOR (0.0279% a 350°C) y Cu-Ru/ Al_2O_3 (0.06% a 650°C) obtuvieron las mejores selectividades mientras que para el formaldehído, los catalizadores Pd-Ru/MOR (0.253% a 350°C) y PtRu/ Al_2O_3 (0.441% a 650°C) fueron los que presentaron mejor selectividad.

Palabras clave: catalizadores bimetálicos, metanol, formaldehído, alúmina, mordenita.

Abstract

One of the processes that has been developed in recent years because of how convenient it would be, not only for the energy sector but all its derivatives, is the use of a greenhouse gas such as methane (CH_4) for the synthesis of different high-value oxygenated products such as methanol (CH_3OH) and formaldehyde (CH_2O). In the present work, bimetallic catalysts Pd-Ru, Pt-Ru and Cu-Ru were prepared using commercial γ -alumina and mordenite faujasite, which were used as support. The catalysts were reduced by a hydrogen stream (H_2/N_2 30%) at 550°C for 2 h and were subsequently characterized by X-ray diffraction (XRD), nitrogen physisorption, scanning electron microscopy (SEM), programmed temperature reduction (PTR), and subsequently its catalytic activity was evaluated where the catalysts Pd-Ru/MOR and Cu-Ru/ Al_2O_3 obtained the best catalytic activity with a conversion of 15.78% to 550°C and 85.73 to 750°C respectively. The selectivity towards methanol was calculated and the catalysts Pt-Ru/MOR (0.0279% at 350°C) and CuRu/ Al_2O_3 (0.06% at 650°C) obtained the best selectivities while for formaldehyde, the catalysts Pd-Ru/MOR (0.253% at 350°C) and Pt-Ru/ Al_2O_3 (0.441% at 650°C) were the ones with the best selectivity.

Keywords: bimetallic catalysts, methanol, formaldehyde, alumina, mordenite.

**MALACHITE GREEN DYE DEGRADATION OVER Au/TiO₂-NANOTUBES
PHOTOCATALYST UNDER SIMULATE VISIBLE-LIGHT IRRADIATION**

M. G. Hernández-Cruz^a, D. A. Solís-Casados^b, J. A. Toledo-Antonio^c, J. R. Vargas- García^d, M. Estrada Flores^e, C. Ángeles-Chávez^c, M.A. Cortés-Jácome^c, C. Encarnación-Gómez^{a*}

^a Universidad Juárez Autónoma de Tabasco, División Académica Multidisciplinaria de Jalpa de Méndez, Carr. Villahermosa-Comalcalco Km 27 S/N, Ranchería Ribera Alta, Jalpa de Méndez, 86205, Tabasco, México

^b Universidad Autónoma del Estado de México, Centro Conjunto de Investigación en Química Sustentable UAEM-UNAM, Toluca, México.

^c Instituto Mexicano del Petróleo, Eje Central Lázaro Cárdenas # 152, Ciudad de México, 07730 México.

^d Instituto Politécnico Nacional, Depto. De Ing. Metalúrgica, Ciudad de México, 07300, AP. 75-874, Cd. de México, México.

^e Instituto Politécnico Nacional. Escuela Superior de Ingeniería Química e Industrias Extractivas. DIQI, Unidad Profesional Adolfo López Mateos (UPALM), Edif. Z-5, 2do. Piso. Zacatenco, Av. Instituto Politécnico Nacional s/n C.P. 07330, CDMX

*e-mail: cecilia.encarnacion@ujat.mx

Resumen

En este trabajo se presenta la evaluación fotocatalítica de sistemas constituidos por nanopartículas de Au en diferente concentración nominal, depositadas sobre nanotubos de TiO₂ a través de la metodología de impregnación en fase vapor (VPI). El objetivo de este estudio fue evaluar la capacidad de estos materiales en la fotodegradación del colorante verde de malaquita (MG), con la visión de correlacionar las propiedades químicas, estructurales, morfológicas y ópticas con su desempeño fotocatalítico. Para ello, los fotocatalizadores se caracterizaron mediante difracción de rayos-X, espectroscopia Raman, espectroscopia fotoelectrónica de rayos X (XPS), microscopia electrónica (HAADF-STEM y HRTEM) y espectroscopia UV- vis. Las nanopartículas de Au con diferente carga metálica tienen un tamaño alrededor de 3,1 nm, y una dispersión alta incluso con cargas metálicas de hasta 15% p/p. De acuerdo con los resultados de XPS las nanopartículas de Au se encuentran en estado reducido (Au⁰) y presentan una interacción electrónica alta con los nanotubos de TiO₂, lo que origina un intercambio electrónico entre ellos, y en consecuencia una disminución de la energía de banda prohibida. Además, la resonancia plasmónica superficial observada a través de la espectroscopia UV-vis de las nanopartículas de Au, es un factor que puede relacionarse con la alta fotodegradación observada, específicamente con el material de 15 p/p% Au que muestra la máxima fotodegradación de MG con 93%.

Keywords: Nanotubos de titania, Degradación fotocatalítica, Impregnación en fase vapor, Nanopartículas de oro.

Abstract

This work presents the photocatalytic evaluation of systems consisting of Au nanoparticles in different nominal concentration, deposited on TiO₂ nanotubes through the vapor phase impregnation (VPI) methodology. The aim of this study was to evaluate the capacity of these materials in the photodegradation of malachite green (MG) dye, with the vision to correlate the chemical, structural, morphological, and optical properties with its photocatalytic performance. To achieve this, the photocatalysts were characterized by X-ray diffraction, Raman spectroscopy, X-ray photoelectron spectroscopy (XPS), electronic microscopy (HAADF-STEM and HRTEM), and UV-vis spectroscopy. Au nanoparticles with different metal loading prepared by VPI, have a small size around 3.1 nm for all analyzed systems and a high apparent dispersion even at high metal loading. According to the XPS results the Au nanoparticles remain in reduced state (Au⁰) and present a high electronic interaction with TiO₂, which eventually originates an electronic exchange between them and consequently a decrease in the band gap energy. In addition, the surface plasmonic resonance observed through UV-vis spectroscopy of the Au nanoparticles, are factors that can be related with the high photodegradation observed in this photocatalysts, specifically in the 15 wt% Au material which achieves maximum photodegradation of MG dye at 93%.

Keywords: Titania nanotubes, Photocatalytic degradation, Vapor-phase impregnation, Gold Nanoparticles.1.

OBTENCIÓN DEL ADITIVO OXIGENADO “DIETIL ÉTER” USANDO CATALIZADORES DE $\text{H}_4\text{SiW}_{12}\text{O}_{40}/\text{ZrO}_2\text{-SiO}_2$

J. G. Hernández-Cortez^{a,*}, J. Eduardo Cruz V^b, J. L. Sánchez López^b

^a Instituto Mexicano del Petróleo, Eje Lázaro Cárdenas 152, 07730, Ciudad de México, México

^b Universidad del Istmo, 70760, Sto. Domingo Tehuantepec, Oaxaca, México

*e-mail: jhcortez@imp.mx

Resumen

Este trabajo reporta la obtención de Dietil éter (DEE), como un posible aditivo oxigenante para diesel, empleando catalizadores formados por $\text{H}_4\text{SiW}_{12}\text{O}_{40}$ (WSi) y un soporte comercial de Grace-Davison ($\text{ZrO}_2\text{-SiO}_2$, ZS). A los catalizadores preparados se les realizó un estudio del comportamiento catalítico en la reacción de obtención de DEE, en un intervalo de temperaturas de entre 160 y 240°C. A bajas temperaturas se obtuvo en mayor proporción el éter. El catalizador con 20WSi/ZS presentó una selectividad del 70% mol a DEE a 180°C. Los catalizadores se caracterizaron por DRX, análisis textural (método BET), y además se incluyó como método de estudio de propiedades ácidas y básicas, la reacción de transformación de 2-propanol, con la finalidad de correlacionar las propiedades físico-químicas con la actividad catalítica. Uno de los mecanismos probables para la formación de DEE es el llamado “mecanismo de Rideal-Eley”.

Palabras clave: Aditivo oxigenado, Dietil éter, Heteropoliácido, $\text{ZrO}_2\text{-SiO}_2$, 2-Propanol.

Abstract

The present work reports the production of diethyl ether (DEE), as a possible oxygenating additive for diesel, using catalysts formed by $\text{H}_4\text{SiW}_{12}\text{O}_{40}$ (WSi) and a commercial Grace-Davison support ($\text{ZrO}_2\text{-SiO}_2$, ZS). With the prepared catalysts, a study of the catalytic behaviour in the reaction to obtain DEE was carried out, in a temperature range between 160 and 240°C. At low temperatures it is possible to obtain a higher proportion of ether. The 20WSi/ZS catalyst showed a selectivity of 70% mol at DEE at 180°C. The catalysts were characterised by XRD, textural analysis (BET method), and the 2-propanol transformation reaction is also included as a method to study the acidic and basic properties, in order to correlate the physicochemical properties with the catalytic activity. One of the probable mechanisms for DEE formation is the so-called “Rideal-Eley mechanism”.

Keywords: Oxygenated additive, Di-ethyl ether, Heteropoly acid, $\text{ZrO}_2\text{-SiO}_2$, 2-Propanol.

DISEÑO Y SIMULACIÓN DE UN PROCESO A PARTIR DE LA TRANSESTERIFICACIÓN DE ACEITE DE JATROPHA CURCAS POR CATÁLISIS HETEROGÉNEA

David Froylán Guerrero García, Rebeca Silva Rodrigo, Nancy Patricia Diaz Zavala, Hugo Eduardo de Alva Salazar

Tecnológico Nacional de México/ Instituto Tecnológico de Ciudad Madero, Centro de Investigación en Petroquímica, Prol. Bahía del Aldair, Av. De las Bahías, Parque Industrial Tecnia, Altamira, Tamaulipas, C.P. 89600, México.

**e-mail: david.garcia256@outlook.es, rebeca.sr@cdmadero.tecnm.mx*

Resumen

El presente trabajo se centra en el diseño y simulación en Aspen Plus del proceso de producción de biodiésel por transesterificación de aceite de Jatropha Curcas con el catalizador sólido de dióxido de circonio impregnado con sodio sintetizado por método Sol-Gel, empleando valores previos cinéticos del catalizador obtenidos por laboratorio. El diseño y simulación toma en cuenta una capacidad de producción de 11,000 Kg/h de biodiésel. Las etapas de separación por columnas de destilación fueron las de mayor impacto debido a la afinidad del metanol a los compuestos. El proceso final logra un biodiésel con una pureza del 99% en esteres metílicos y con un valor competitivo.

Palabras claves: Biodiesel, Transesterificación, Catálisis, Diseño, Simulación.

Abstract

The present work is focused on the design and simulation in Aspen Plus of the biodiesel production process by transesterification of Jatropha Curcas oil with the solid catalyst of sodium-impregnated zirconium dioxide synthesized by Sol-Gel method, using previous kinetic values of the catalyst obtained by laboratory. The design and simulation takes into account a production capacity of 11,000 kg/h of biodiesel. The separation stages by distillation columns were the ones with the greatest impact due to the affinity of methanol to the compounds. The final process achieves a biodiesel with 99% purity in methyl esters and with a competitive value.

Keywords: Biodiesel, Transesterification, Catalysis, Design, Simulation.

GENERACION DE VACANTES DE OXIGENO EN NANOPARTICULAS DE NIQUEL PARA LA HIDRODESOXIGENACIÓN DE FENOL

Carlos A. León-Cornelio^{a,*}, P. Morales Gil^a, M.A. Cortés Jácome^a, José A. Toledo-Antonio^{a,*}

^a Instituto Mexicano del Petróleo, Eje Central Lázaro Cárdenas 152, Col. San Bartolo Atepehuacan, Ciudad de México 07730, México.

*e-mail: cleon@imp.mx, jtoledo@imp.mx

Resumen

Se sintetizaron catalizadores de partículas de Ni por el método de reducción química de nitrato de Ni hexahidratado, variando la concentración de una solución de hidracina como agente reductor. Se evaluaron los catalizadores en la reacción de hidrodesoxigenación (HDO) de fenol, empleado como molécula modelo representativo de compuestos contenidos en bioaceites lignocelulósicos. La reacción se llevó a cabo en un reactor por lotes a 320 °C y 5.5 MPa de presión de H₂, empleando los catalizadores previamente reducidos a 400 °C con flujo de H₂. Los resultados de caracterización indicaron que a baja concentración de hidracina, se obtienen nanopartículas de Ni no reducidos de un hidróxido de Ni con fase β -Ni(OH)₂, con morfología de hojas laminares de ~90 nm de espesor. La HDO ocurre preferentemente por la vía de hidrogenación del anillo aromático de fenol, continuando con la formación de ciclohexanona, ciclohexanol y posteriormente ocurre la deshidratación/hidrogenación para la obtención de ciclohexano con rendimiento de 95.7 %. Esta actividad se atribuyó a las vacancias de oxígeno generados por la reducción directa de fase β -Ni(OH)₂ que actúan como sitios hidrogenantes.

Palabras clave: Hidrodesoxigenación, Nanopartículas de Ni, Fenol, bioaceites lignocelulósicos.

Abstract

Five Ni particle catalysts were synthesized by chemical reduction method varying the concentration of a hydrazine solution as a reducing agent. Development of catalysts were evaluated during the hydrodeoxygenation (HDO) reaction of phenol used as a representative model molecule of compounds contained in lignocellulosic bio-oils. The reaction was carried out in a batch reactor at 320 °C and 5.5 MPa of H₂ pressure, using the catalysts previously reduced at 400 °C with H₂ flow. The characterization results indicated that at low hydrazine concentration, non-reduced Ni nanoparticles are obtained from a Ni hydroxide with a β -Ni(OH)₂ phase with laminar sheet morphology of ~90 nm thick. It was determined that the HDO was preferably carried out by the hydrogenation route of the aromatic ring yielding cyclohexanol and cyclohexanone and, by consequent hydrogenation/dehydration, obtaining cyclohexane with a yield of 95.7 %. The HDO activity was attributed to the oxygen surface vacancies which acts as hydrogenating sites generated by the direct reduction at 400 °C in H₂ flow of the β -Ni(OH)₂.

Keywords: Hydrodeoxygenation, Ni nanoparticles, Phenol, lignocellulosic bio-oils.

SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE NANOCUBOS DE NiMoW-S PARA LA HIDRODESULFURACIÓN SELECTIVA DE AZUFRADOS EN CORTES LIGEROS

Richards-Figueroa Z.^a, Fuentes-Moyado S.^b, Díaz de León J.N.^{b,*}

^a Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada Baja California, CICESE, 22800, Ensenada Baja California, México

^b Centro de Nanociencias y Nanotecnología, Universidad Nacional Autónoma de México, 22800, Ensenada Baja California, México.

*e-mail: noejd@cnyun.unam.mx

Resumen

La presencia de contaminantes en el aire como los SO_x, NO_x, CO, CO₂ se debe mayormente al uso de combustibles fósiles para generar energía y para el funcionamiento de los medios de transporte. Esto tiene consecuencias graves que impactan directamente en el medio ambiente, lo que ha llevado a organismos gubernamentales de todo el mundo a emitir normas que regulen su emisión, así como para regular la cantidad de azufre permitido en gasolina y diésel. Para hidrodesulfuración, se utiliza comúnmente catalizadores NiMo o CoMo soportado en Al₂O₃. También, se ha reportado la síntesis y comercialización de ciertos tipos de catalizadores autosoportados con alta actividad catalítica. Además, se ha demostrado que la catálisis con nanoestructuras puede incrementarse significativamente. Entonces por ello se sintetizaron catalizadores trimetálicos autosoportados con morfología cúbica por impregnación e hidrotermal. En ambos métodos se añadieron 1%, 2% y 3% en peso de tungsteno. Los materiales se analizaron por fisisorción de N₂, SEM y la hidrodesulfuración de 3-metiltiofeno. Todos los materiales tienen una tendencia de más del 90% hacia la desulfuración directa. Los catalizadores tienen un área menor a 10 m²·g⁻¹. El catalizador con el que se obtuvo una conversión mayor de 3MT fue nC-1-H.

Palabras clave: Hidrodesulfuración (HDS), 3-metiltiofeno (3MT), nanocubos (nC), hidrotermal (H), impregnación (I).

Abstract

Hazardous gases in the air as SO_x, NO_x, CO, CO₂ are due to the generation of electric energy and transportation because these activities need fossil fuels. The harmful consequence of that directly affects the environment. Then, government organizations worldwide emit norms regulating air emissions and controlling sulfur amounts in gasoline and diesel. For hydrodesulfurization, it's a widespread use NiMo and CoMo supported into Al₂O₃ catalysts. Also, it has reported the synthesis and selling of certain kinds of self-supported catalysts with high catalytic activity.

Furthermore, it had demonstrated that catalysis with nanostructures increases significantly. Then, trimetallic self-supported catalysts with cubic morphology have synthesized by hydrothermal and impregnation. In both methods, tungsten has added 1%, 2%, and 3% wt. Materials analyzed by nitrogen physisorption, SEM, and 3-methyl thiophene hydrodesulfurization. All materials have a trend to direct desulfurization of more than 90%. Catalysts have an area lower than 10 m²·g⁻¹. The material that obtained the highest 3MT conversion was nC- 1-H.

Keywords: Hydrodesulfurization (HDS), 3-methyl thiophene (3MT), nanocubes (nC), hydrothermal (H), impregnation (I).

SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE PUNTOS CUÁNTICOS DE HALURO DE PEROVSKITA CsPbBr₃ PUROS Y DOPADOS CON EUROPIO, PARA SU APLICACIÓN POTENCIAL EN PROCESOS FOTOCALÍTICOS

E. Reyes-Francis¹, H. Dessirena², D. Esparza³, A Ceja-Fdez⁴, J. Espino Valencia⁵, Jin Z. Zhang⁶, J. Zárate Medina¹, C. Rosiles-Perez⁷ and T. López-Luke^{1*}

¹ Instituto de Investigación en Metalurgia y Materiales, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, Edificio U, Avenida Francisco J. Múgica S/N, Edificio Torre de Rectoría 2do. Piso C.P. 58030, Morelia, Michoacán, México.

² Centro de Investigaciones en Óptica, Lomas del Bosque 115, Lomas del Campestre, 37150 León, Gto, México.

³ Unidad Académica de Ingeniería Eléctrica, Universidad Autónoma de Zacatecas. Jardín Juárez 147, Zacatecas Centro, C.P. 98000, Zacatecas, Zacatecas, México.

⁴ División de Ciencias e Ingenierías de la Universidad de Guanajuato. Calle Pedro Lascurain de Retana 5, Zona Centro, 36000 Guanajuato, México.

⁵ Facultad de Ingeniería Química, División de Estudios de Posgrado, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, Edificio Q, Avenida Francisco J. Múgica S/N, Edificio Torre de Rectoría 2do. Piso C.P. 58030, Morelia, Michoacán, México.

⁶ Department of Chemistry and Biochemistry, University of California, Santa Cruz, California, E.U.

*e-mail: manu_rf7@hotmail.com

Resumen

Se sintetizaron puntos cuánticos coloidales de CsPbBr₃ puros y dopados con distintas concentraciones de Eu⁺³ por el método de inyección coloidal en caliente. La síntesis se llevó a cabo partiendo de sales. Además, se introdujeron iones de Eu⁺³ en la red cristalina de la perovskita de CsPbBr₃ partiendo de iones de haluro de europio. Se evaluaron las propiedades ópticas de fotoluminiscencia y UV Vis de los materiales puros como dopados, tanto en suspensión coloidal como en solución, obtenidos después de lavado y centrifugado. Se obtuvieron puntos cuánticos de haluro de perovskita del orden de los nanómetros que presentan luminiscencia. Además, el material con el 0.0075% Eu⁺³ %mol de dopado presenta un máximo en relación a su luminiscencia, respecto al material puro y al resto de materiales dopados.

Palabras clave: Puntos cuánticos, Europio, Dopaje, Perovskita Cesio-Plomo-Bromo, Hot injection, Fotocatálisis.

Abstract

Colloidal quantum dots of pure and doped CsPbBr₃ with different concentrations of Eu⁺³ were synthesized by the hot colloidal injection method. The synthesis was carried out starting from salts. Also, Eu⁺³ ions were introduced into the crystalline lattice of the CsPbBr₃ perovskite starting from europium halide ions. The optical properties of photoluminescence and UV Vis of the pure and doped materials, both in colloidal suspension and in solution, obtained after washing and centrifugation, were evaluated. Perovskite halide quantum dots of the order of nanometers exhibiting luminescence were obtained. In addition, the material with 0.0075% Eu⁺³ %mol doped presents a maximum about its luminescence, concerning the pure material and the rest of the doped materials.

Keywords: Quantum Dots, Europium, Doped, Cesium Lead Bromide Perovskite, Hot injection. Photocatalysis.

EFFECTO DE INSERCIÓN DE Ti EN KIT-6 EN CATALIZADORES DE Ru PARA HDO DE ANISOL

Brenda Taylor Pinta*, José Antonio De los Reyes Heredia, Sergio Antonio Gómez Torres

^a Laboratorio de Ingeniería de Reacción y Catálisis Ambiental / Departamento de Ingeniería de Procesos e Hidráulica. Universidad Autónoma Metropolitana unidad Iztapalapa, 09340, Ciudad de México, México.

**brendataylorp11@gmail.com*

Resumen

El bioaceite se puede mejorar mediante hidrodesoxigenación (HDO) para eliminar las características desfavorables relacionadas con los altos niveles de oxígeno. Es importante el desarrollo de nuevos materiales catalíticos para HDO con soportes alternativos y fases activas. En este trabajo, los catalizadores de Ru se prepararon mediante impregnación húmeda incipiente con diferentes soportes; TiO₂, KIT-6 y TiKIT-6 con relaciones molares Ti / Si (13 y 16) y cantidad de metal. Fueron evaluados durante la HDO de anisol en un reactor por lotes a 300 °C y 40 bar de H₂. Todos los catalizadores mostraron actividad, Ru/TiO₂ fue el de mayor velocidad de reacción inicial con 48.8 X 10⁶ (mol/gcat*s). Se analizaron los productos obtenidos en las reacciones; el catalizador Ru / KIT-6 tuvo mayor preferencia por compuestos oxigenados en la ruta de hidrogenación directa (HYD) mientras que los catalizadores Ru / TiKIT-6 y Ru / TiO₂ tuvieron selectividad hacia compuestos desoxigenados; benceno y ciclohexano por la ruta de desoxigenación directa (DDO). Estos resultados indicaron que la selectividad depende del soporte, este efecto se asoció con los resultados obtenidos de deshidratación de isopropanol.

Palabras clave: HDO, KIT-6, Titanosilicatos, Rutenio.

Abstract

The bio oil can be upgraded via hydrodeoxygenation to remove unfavorable characteristics related to high levels of oxygen. The development of new catalytic materials for HDO with alternative supports and active phases is relevant. In this work, Ru catalysts were prepared by incipient wetness impregnation with different supports; TiO₂, KIT-6 and Ti / KIT-6 with different Ti / Si molar relations (13 y 16) and amount of metal (0.5 y 1). They were evaluated during the HDO of anisole in a batch reactor with conditions 300 °C and 40 bar of H₂. All the catalysts were active, All the catalysts showed activity, Ru / TiO₂ had the highest initial reaction rate with 48.8 X 10⁶ (mol / gcat * s). The products obtained in the reactions were analyzed; Ru / KIT-6 catalyst had the highest preference for oxygenates in direct hydrogenation route (HYD) and Ru/TiKIT-6 y Ru/TiO₂ had selectivity for deoxygenated compounds; benzene and cyclohexane by direct deoxygenation route (DDO). The results show that the selectivity depend on the support, which was associated with the results obtained in deshydration IPA.

Keywords: HDO, KIT-6, Titanosilicate, Ruthenium.

**Co(Ni)MoW SULFIDE CATALYSTS SUPPORTED ON MESOPOROUS Al, Zr AND Nb
MODIFIED SBA-15 FOR HDS OF DBT**

**Julio César Morales-Ortuño^{a*}, Trino A. Zepeda Partida^b, J. Noé Díaz de León^b, Rafael
Huirache-Acuña^a**

^a *Facultad de Ingeniería Química, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, 58060 Morelia, Michoacán, Mexico.*

^b *Centro de Nanociencias y Nanotecnología – UNAM, 22800 Ensenada, B.C., Mexico*

**e-mail: jcmo_830508@hotmail.com*

Resumen

Se sintetizó una serie de catalizadores trimetálicos de NiMoW y CoMoW con ácido cítrico soportados en materiales de sílice mesoestructurada SBA-15 modificados con ZrO₂, Al₂O₃ y Nb₂O₅ durante la síntesis. Dichos catalizadores se caracterizaron por diversas técnicas (fisisorción de N₂, DRX, TPR, SEM, HRTEM); y se evaluó su actividad en Hidrodesulfuración de dibenzotiofeno.

Keywords: Catalizadores trimetálicos, SBA-15 modificados, Hidrodesulfuración, NiMoW, CoMoW.

Abstract

A series of NiMoW and CoMoW catalysts were synthesized with citric acid supported on SBA-15 mesostructured silica materials modified with ZrO₂, Al₂O₃ and Nb₂O₅ during synthesis. These catalysts were characterized by various techniques (physisorption of N₂, DRX, TPR, SEM, HRTEM); and its activity in hydrodesulfurization of dibenzothiophene was evaluated.

Keywords: Trimetallic catalysts, SBA-15 modification, hydrodesulfurization, NiMoW, CoMoW.

MILD OXIDATIVE DEHYDROGENATION OF PROPANE OVER Pt-Ir CATALYSTS SUPPORTED ON Mg-SBA-15

Leonardo Lara Moreno^a, Perla Sánchez-López^{b,*}, Yulia Kotolevich^b, Sergio A. Gómez Torres^c, Sergio Fuentes Moyado^b, Trino A. Zepeda^b

^a Posgrado en Nanociencias, Centro de Investigación Científica y Educación Superior de Ensenada (CICESE), 22860, Ensenada, Baja California, México

^b Departamento de Nanocatálisis, Centro de Nanociencias y Nanotecnología, Universidad Nacional Autónoma de México, 22860, Ensenada, Baja California, México

^c Ingeniería de Procesos e Hidráulica, Universidad Autónoma Metropolitana, 09340, Ciudad de México, México

*e-mail: perlasanchezlopez23@gmail.com

Resumen

Una serie de catalizadores Pt-Ir soportados en sílice mesoporosa (SBA-15) modificada con Mg (2% en peso) fueron evaluados en la deshidrogenación oxidativa suave de propano usando dióxido de carbono como oxidante. Los catalizadores fueron caracterizados por: ICP-OES, DRX, UV-Vis, MET de alta resolución. De acuerdo a los difractogramas de rayos-X, la estructura SBA-15 modificada con Mg se mantuvo estable después de la impregnación de los metales, presentando una mesoestructura bien ordenada de forma hexagonal con diámetro de poro entre 5 y 7 nm. Esta estructura fue confirmada por microscopía electrónica. En los catalizadores Ir/MgM, Pt_{0.5}Ir_{0.03}/MgM, y Pt/MgM, se observó la presencia de NPs de Ir y Pt con tamaños entre 4, 5 y 7 nm. El mapeo de elementos por EDS reveló que el catalizador Pt_{0.5}Ir_{0.03}/MgM contenía nanopartículas bimetalicas; mientras, que la espectroscopía UV-Vis mostró contribuciones asociadas a las especies Pt⁺⁴ e Ir⁺³ para todos los catalizadores. El catalizador bimetalico Pt_{0.5}Ir_{0.03}/MgM logró una conversión de propano del 36% a 650 °C, la cual fue más alta que sus contrapartes mono- y bimetalicas. La interacción con magnesio favoreció la dispersión de Pt e Ir, lo que a su vez mejoró el desempeño catalítico en la reacción estudiada. Se concluye que la presencia de nanopartículas bimetalicas Pt- Ir en el catalizador Pt_{0.5}Ir_{0.03}/MgM causó el aumento de la actividad catalítica.

Palabras clave: Deshidrogenación oxidativa suave, Propano, Catalizadores Pt-Ir, Mg-SBA-15, CO₂.

Abstract

A series of Pt-Ir catalysts supported on mesoporous silica (SBA-15) modified with Mg (2% by weight) were evaluated in the mild oxidative dehydrogenation of propane using carbon dioxide as oxidant. The catalysts were characterized by: ICP-OES, XRD, UV-Vis and high resolution TEM. According to the X-ray diffractograms, the structure of SBA-15 modified with Mg remained stable after impregnation of the metals, presenting a well-ordered mesostructure in a hexagonal shape with a pore diameter between 5 and 7 nm. This structure was confirmed by electron microscopy. In the Ir/MgM, Pt_{0.5}Ir_{0.03}/MgM, y Pt/MgM catalysts, the presence of Ir and Pt NPs with size between 4, 5 and 7 nm was observed. Elemental mapping showed the presence of bimetallic nanoparticles in Pt_{0.5}Ir_{0.03}/MgM catalyst, meanwhile, UV-Vis spectroscopy showed contributions associated with the metal species Pt⁺⁴ and Ir⁺³ for all catalysts. The bimetallic catalyst Pt_{0.5}Ir_{0.03}/MgM achieved a propane conversion of 36% at 650 °C, which is higher than its mono- and bimetallic counterparts. The interaction with Mg favored the dispersibility of Pt and Ir, which in turns improved the catalytic performance. In conclusion, the formation of bimetallic nanoparticles in the catalyst Pt_{0.5}Ir_{0.03}/MgM produced an increase of the catalytic activity.

Keywords: Mild Oxidative dehydrogenation, Propane, Pt-Ir catalysts, Mg-SBA-15, CO₂.

CARACTERIZACIÓN Y CINÉTICA DE FORMACIÓN DEL CATALIZADOR Cu/Al₂O₃ A TRAVÉS DEL EXTRACTO DE LIPPIA GRAVEOLENS (ORÉGANO MEXICANO)

Bárbara Jazmín Lino Galarza^a, Javier Rivera De la Rosa^{a,*}, Carlos Javier Lucio Ortiz^a Diana Bustos Martínez^a, Carlos Enrique Escárcega González^a.

^a Departamento de Ingeniería Química, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Autónoma de Nuevo León, UANL, C.P. 66455, San Nicolás de los Garza, Nuevo León, México.

*e-mail: javier.riverad@uanl.edu.mx

Resumen

El presente trabajo muestra la síntesis verde para la obtención de la cinética de formación del catalizador metálico de cobre al 5 % peso soportado en alúmina obtenidos a partir de extractos de orégano, del cual se caracterizó mediante cromatografía líquida de alta eficacia (HPLC) para elucidar los componentes fitoquímicos responsables de la reducción de la sal metálica CuCl₂•2H₂O, secándolo en atmosfera de aire y de nitrógeno, usándolo como agente reductor y posteriormente se caracterizó mediante fisisorción de nitrógeno, microscopia electrónica de barrido (SEM) y espectroscopia de transmisión de infrarrojo con transformada de Fourier (FTIR), para elucidar las propiedades de dichos catalizadores.

Palabras clave: Síntesis verde, Cu/Al₂O₃, extractos de orégano, aceite esencial.

Abstract

The present work shows the kinetics of the green synthesis to obtain the 5 wt.% copper metal catalyst supported on alumina obtained from oregano extracts, which was characterized by high performance liquid chromatography (HPLC) to elucidate the phytochemical components responsible for the reduction of the metal salt CuCl₂•2H₂O, it was subsequently characterized by nitrogen physisorption, scanning electron microscopy (SEM) and Fourier transform infrared spectroscopy (FTIR) to elucidate the properties of these catalysts.

Keywords: Green synthesis, Cu/Al₂O₃, oregano extracts, essential oil.

CARACTERIZACIÓN DE CATALIZADORES BIMETÁLICOS Cu-Ni/BENTONITA PARA HIDROGENACIÓN DE ÁCIDO LEVULÍNICO

Alma L. Vargas-Martínez^a, Karen Y. Villezca-Valdez^a, David A. Del Haro-Del Río^a, Carlos J. Lucio-Ortiz^a, Javier Rivera de la Rosa^a, Ladislao Sandoval-Rangel^b, Carolina Solís Maldonado^c, Gloria L. Dimas-Rivera^{a,*}

^a Universidad Autónoma de Nuevo León, UANL, Facultad de Ciencias Químicas, Ave. Universidad S/N, Cd. Universitaria, San Nicolás de los Garza, Nuevo León C.P. 64455, Mexico

^b Tecnológico de Monterrey, Av. Eugenio Garza Sada 2501 Sur, Col. Tecnológico, C.P. 64849 Monterrey, Nuevo León, Mexico

^c Universidad Veracruzana, Facultad de Ciencias Químicas, Prolongación Venustiano Carranza S/N, Poza Rica, Veracruz CP 93390, Mexico

*e-mail: gdimasr@uanl.edu.mx

Resumen

Los catalizadores base Cu y Ni soportados en bentonita fueron sintetizados por el método de Poliol y caracterizados por la técnica de Espectroscopía de Infrarojo con Transformadas de Fourier (FTIR) y DRV-UV-visible. Los resultados mostraron que fue posible anclar los metales de Cu y Ni en la estructura de la bentonita. Las bandas en FTIR en 3617, 3412, 1631 cm⁻¹ de N-H, O-H y OH del agua, lo cual indica que los metales de Cu y Ni se enlazan y bloquean a estos grupos funcionales modificando la capa octaédrica de la bentonita. Y la banda de 986 cm⁻¹ asignada a Si-O en la hoja tetraédrica fue desplazada con la presencia de los metales, lo cual se atribuye esta alteración a la formación del enlace Si-O-metal. Esta modificación de la estructura de la bentonita también fue observada en los resultados de DRV-UV/visible, donde se mostró una deformación de la banda característica de la bentonita en 262 nm al anclar los metales. Están pendientes las técnicas de caracterización de Fisisorción de N₂, DRX y NH₃-TPD, las cuales aportaran más información de las características de los catalizadores que se utilizaran en la reacción de hidrogenación del ácido levulinico.

Palabras clave: Bentonita, DRV-UV/visible, FTIR/Bentonita, Cu-Ni.

Abstract

Cu/Ni based catalysts supported on bentonite were synthesized using the polyol method and characterized using Fourier-transform infrared spectroscopy (FTIR) and diffuse-reflectance ultraviolet-visible spectroscopy (DRUV-Visible). The results showed anchoring of Cu and Ni was over the bentonite structure was successful. FTIR signals on 3617, 3412 and 1631 cm⁻¹ are characteristic of N-H, O-H and -OH functional groups vibrations, which indicates Cu and Ni metals bond and block these groups modifying the octahedral layer of bentonite. The band at 986 cm⁻¹ ascribed to Si-O on the tetrahedral layer was shifted in presence of metals, which is attributed to Si-O-metal bond formation. This modification to the bentonite structure was also observed in the DRUV-Visible results, were a deformation of the characteristic band of bentonite at 262 nm was observed after metal loading. Further characterization results such as N₂ physisorption, X-ray diffraction and NH₃-temperature programmed desorption are pending; these analyses will provide more information on the catalyst properties which will be used for levulinic acid hydrogenation reaction.

Keywords: Bentonite, DRV-UV/visible, FTIR/Bentonite, Cu-Ni.

SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE CATALIZADORES NiMo/CeO₂-Al₂O₃ EDTA PREPARADOS POR EL MÉTODO SOL-GEL: EFECTO DEL CeO₂ SOBRE LAS PROPIEDADES DE Al₂O₃

Nadia Dinhora de Jesús Soriano Mar, Rebeca Silva Rodrigo, Acela López Benitez

División de Estudios de Posgrado e Investigación, Centro de Investigación en Petroquímica, Prolongación Bahía del Aldair y Av. De las Bahías s/n, C.P. 89600, Altamira Tamaulipas, México.

Resumen

El presente trabajo catalizadores de NiMo soportados en óxidos mixtos de CeO₂-Al₂O₃ fueron sintetizados. El soporte de CeO₂-Al₂O₃ fue sintetizado por medio del método sol-gel. El método de humedad incipiente fue empleado para realizar la impregnación de Ni y Mo en el soporte CeO₂-Al₂O₃ utilizando ácido etilendiaminetetraacético como agente quelante manteniendo un pH=7 con concentraciones de 3% en peso de NiO y 12% en peso de MoO₃ en todos los catalizadores. La relación atómica empleada de Ni/Ni+Mo fue de 0.3. Los análisis térmicos TGA y DTA demostraron que las temperaturas utilizadas durante el proceso de calcinación de los soportes no afectan en la formación de la fase γ -Al₂O₃. Los patrones DRX mostraron la presencia de γ -Al₂O₃ y CeO₂ en los materiales sintetizados. Las propiedades estructurales del soporte γ -Al₂O₃ indicaron que la γ -Al₂O₃ obtenida corresponde a un material mesoporoso con poros cilíndricos definidos. El análisis FTIR confirmó la existencia de la fase gamma-alúmina en los materiales. En el análisis de Espectroscopía de Reflectancia Difusa Uv-Vis, se encontraron especies NiO y MoO₃ con simetría tetraédrica y octaédrica en catalizadores soportados en γ -Al₂O₃ y en los catalizadores soportados en CeO₂-Al₂O₃ se encontraron especies NiO con simetría octaédrica y especies MoO₃ con simetría tetraédrica.

Palabras clave: CeO₂, γ -Al₂O₃, CeO₂-Al₂O₃, NiMo.

Abstract

The present work NiMo catalysts supported on mixed oxides of CeO₂-Al₂O₃ were synthesized. The CeO₂-Al₂O₃ support was synthesized by means of the sol-gel method. The incipient humidity method was used to carry out the impregnation of Ni and Mo in the CeO₂-Al₂O₃ support using ethylenediaminetetraacetic acid as a chelating agent, maintaining a pH = 7 with concentrations of 3% by weight of NiO and 12% by weight of MoO₃ in all catalysts. The Ni / Ni + Mo atomic ratio used was 0.3. The TGA and DTA thermal analyzes demonstrated that the temperatures used during the calcination process of the supports do not affect the formation of the γ -Al₂O₃ phase. The XRD standards showed the presence of γ -Al₂O₃ and CeO₂ in the synthesized materials. The structural properties of the γ -Al₂O₃ support indicated that the γ -Al₂O₃ obtained corresponds to a mesoporous material with defined cylindrical pores. The FTIR analysis confirmed the existence of the gamma-alumina phase in the materials. In the Uv-Vis Diffuse Reflectance Spectroscopy analysis, NiO and MoO₃ species with tetrahedral and octahedral symmetry were found in catalysts supported on γ -Al₂O₃ and in catalysts supported on CeO₂-Al₂O₃, NiO species with octahedral symmetry and MoO₃ species with tetrahedral symmetry were found.

Keywords: CeO₂, γ -Al₂O₃, CeO₂-Al₂O₃, NiMo.

INFLUENCIA DE LA ADICIÓN DE PLATINO SOBRE LA CATÁLISIS DE LA METANACIÓN DE DIÓXIDO DE CARBONO DESARROLLADA POR RODIO SOPORTADO EN ÓXIDO DE ZIRCONIO

**Trino A. Zepeda^a, Maria del Carmen Lara-Perez^b, Juan Fierro-Gonzalez^b,
Alfredo Solis-Garcia^{a,*}**

^a Dpto. de nanocatálisis/Centro de Nanociencias y Nanotecnología/Universidad Nacional Autónoma de México, 22800, Ensenada B.C., México.

^b Departamento de Ingeniería Química. Tecnológico Nacional de México en Celaya. Celaya, México 38010.

*e-mail: asolis@ens.cnyn.unam.mx

Resumen

Se investigó el efecto de la adición de platino sobre la hidrogenación catalítica de CO₂ a CH₄ desarrollada por Rh soportado en ZrO₂. Se sintetizaron muestras monometálicas y bimetálicas de Rh-Pt soportado en ZrO₂, las cuales fueron probadas como catalizadores para la reacción de metanación de CO₂. La caracterización FTIR in-situ mostró que la adición de cantidades adecuadas de platino incrementa la producción de metano por encima de 240°C en catalizadores de Rh/ZrO₂. Basados en los datos obtenidos por espectroscopía FTIR y quimisorción de H₂ asumimos que la mejora en la producción de CH₄ puede ser debido al aumento en la adsorción de CO₂ y H₂, potenciada posiblemente por la presencia de sitios Pt. Los espectros FTIR tomados en condiciones de reacción mostraron que en todos los catalizadores el CO₂ puede ser adsorbido en el soporte (ZrO₂) y en los sitios metálicos (Rh y Pt). Nuestros resultados también revelaron que el CH₄ puede ser formado mediante la hidrogenación de especies formato (en ZrO₂) y carbonilo (en Rh y Pt).

Palabras clave: FTIR, in-situ, Metanación, CO₂.

Abstract

The effect of the platinum incorporation over the CO₂ catalytic hydrogenation to CH₄ developed by ZrO₂-supported Rh was investigated. Monometallic and bimetallic samples of Rh-Pt supported on ZrO₂ were synthesized and tested as catalysts for CO₂ methanation reaction. The FTIR in-situ characterization shown that the addition of appropriate amounts of the Pt increases the methane production above 240°C in Rh/ZrO₂ catalysts. Based on the data obtained by FTIR spectroscopy and H₂ chemisorption we propose that the improvement in the CH₄ production can be due to an increment in the adsorption of CO₂ and H₂, enhanced possibly by the presence of Pt sites. The IR spectra recorded under reaction conditions displayed the CO₂ can be adsorbed on the support (ZrO₂) and on the metal sites (Rh and Pt). Additionally, our results also revealed that CH₄ can be formed by the hydrogenation of formate species (on ZrO₂) and carbonyls (on Rh and Pt).

Keywords: FTIR, in-situ, Methanation, CO₂.

ACTIVIDAD Y SELECTIVIDAD DE CATALIZADORES Pt, Pd Y Ni SOBRE PILC-Zr EN LA PRODUCCIÓN DE DIÉSEL VERDE

Emigdio Gregorio Zamora-Rodea^a, Miguel Ángel Mata Guadarrama^a, Carlos Eduardo Ramírez Castelán^a, Ana Karina Medina-Mendoza^b, Sara Nuñez-Correa^c, Carlos Rogelio Tapia-Medina^b, José Antonio Colín Luna^{a,*}

^a Laboratorio de Análisis de Procesos, Departamento de Energía, Universidad Autónoma Metropolitana, Unidad Azcapotzalco, C.P. 02200, CDMX, México

^b Departamento de Ciencias Básicas, Universidad Autónoma Metropolitana, Unidad Azcapotzalco, C.P. 02200, CDMX, México

^c Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Veracruzana Campus Coatzacoalcos, C.P. 96538, Coatzacoalcos, Veracruz, México

* jacl@uam.azc.mx

Resumen

En los últimos años, la comunidad científica ha enfocado su atención en la búsqueda de fuentes de energía limpias. En este sentido la biomasa (BM) se ha convertido en una materia prima renovable prometedora para la obtención de productos de alto valor agregado alcoholes, benceno, tolueno, xileno y polímeros, o bien para su transformación en combustibles como biodiesel y diésel verde. Dentro de la BM disponible se encuentran los aceites vegetales los cuales son fuentes ideales, ya que presentan ácidos grasos de cadena larga de 16 - 24 átomos de carbono en su estructura. En el presente proyecto se probaron catalizadores de Pt, Pd y Ni soportados en arcillas pilareadas con circonio (PILC-Zr) en la producción de diésel verde (DV) a partir de aceite de canola (AC), empleando una presión de H₂, 3 MPa, en presencia de catalizadores de Pt soportados en PILC-Zr a 573 K. La actividad de estos catalizadores fue correlacionada con la incorporación del metal noble y el catión pilareante.

Palabras clave: Biomasa, diésel verde, hidrodesoxigenación, aceite de canola, arcillas pilareadas.

Abstract

In recent years, the scientific community has focused its attention on the search for clean energy sources. In this sense, biomass (BM) has become a promising renewable raw material for obtaining high added value products: alcohols, benzene, toluene, xylene and polymers, or for its transformation into fuels such as biodiesel and green diesel. Within the available BM are vegetable oils which are ideal sources, since they have long chain fatty acids of 16 - 24 carbon atoms in their structure. In the present project, Pt, Pd and Ni catalysts supported on clays piled up with zirconium (PILC-Zr) were tested in the production of green diesel (DV) from canola oil (AC), using a pressure of H₂ (3 MPa) in the presence of Pt catalysts supported in PILC-Zr at 573 K. The activity of these catalysts was correlated with the incorporation of the noble metal and the cation pilate.

Keywords: Biomass, green diesel, hydrodeoxygenation, canola oil, pillared clays.

HOMOGENEOUS AND HETEROGENEOUS CATALYSIS ASSISTED WITH ULTRASONIC IRRADIATION BY BIODIESEL PRODUCTION

Norma Gutiérrez-Ortega^{a*}, Esthela Ramos-Ramírez^{b*}, Alma Serafín-Muñoz^a, Adrian Zamorategui-Molina^a, Gabriel Herrera-Pérez^c, Elizabeth Pabón-Gelves^d, Jesús Monjaraz-Vallejo^b

^a Departamento de Ingeniería Civil y Ambiental, División de Ingenierías, Campus Guanajuato, Universidad de Guanajuato. Juárez No 77, Zona Centro, Guanajuato, GTO 36000. México.

^b Departamento de Química, División de Ciencias Naturales y Exactas, Campus Guanajuato, Universidad de Guanajuato. Noria Alta s/n, Guanajuato, GTO 36050, México.

^c Instituto Tecnológico Superior de Irapuato, Carretera Irapuato - Silao km 12.5 Colonia El Copal, C.P. 36821, Irapuato, GTO 36824, México

^d Escuela de Química-Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Colombia, Sede Medellín, Carrera 65 No. 59A-110 Bloque 21 Of. 214, Medellín, Colombia.

*normagut@ugto.mx and ramosre@ugto.mx Tel.: +52-4737320006 (2227 and 1457)

Abstract

Since the world's energy demand has increased, and oil reserves have decreased; and in addition to the increase in global warming and environmental pollution in general, it has become a priority to cover the energy demand in a sustainable way through the development of alternative energy sources, such as solar energy, wind energy and biofuels, which are capable of replacing fossil fuels, or at least reducing their demand. Biodiesel is an energy source that offers many benefits such as biodegradability, safety, and renewability, among others. At an industrial level, biodiesel is produced in a conventional way through the reaction of transesterification of vegetable oils with basic homogeneous catalysts in conventional thermal heating systems and mechanical mixing, which makes it an energetically costly and complex process. For this research it is proposed to determine the effect of ultrasonic radiation on the improvement of the conversion capacity of triglycerides of vegetable origin to biodiesel using a classic homogeneous transesterification system with sodium hydroxide and compare it with a heterogeneous system using cobalt ferrite as a catalyst. The results show that catalysis using ultrasonic irradiation is favored by reaching a conversion of 97% in 30 minutes, which is attributed to the catalytic capacity of cobalt ferrite which is a semiconductor material.

Keywords: biofuels, transesterification, bioenergy, catalysis, ultrasound.

Resumen

Debido a que actualmente a nivel mundial ha incrementado la demanda energética y han disminuido las reservas de petróleo; y aunado al aumento del calentamiento global y en general a la contaminación ambiental, se ha vuelto prioritario cubrir la demanda energética de manera sustentable mediante el desarrollo de fuentes alternas de energía, como son la energía solar, energía eólica y los biocombustibles, los cuales son capaces de remplazar los combustibles fósiles, o al menos disminuir su demanda. El biodiesel es una fuente de energía que ofrece muchos beneficios como son la biodegradabilidad, la inocuidad, su renovabilidad, entre otras. A nivel industrial el biodiésel es producido de manera convencional mediante la reacción de transesterificación de aceites vegetales con catalizadores homogéneos básicos en sistemas de calentamiento térmico convencional en sistemas de calentamiento térmico convencional y mezclado mecánico, lo cual lo hace un proceso energéticamente costoso y complejo. Para esta investigación se propone determinar el efecto de la radiación ultrasónica sobre el mejoramiento de la capacidad de conversión de triglicéridos de origen vegetal a biodiesel empleando un sistema de transesterificación homogénea clásica con hidróxido de sodio y compararlo con un sistema heterogéneo empleando ferrita de cobalto como catalizador. Los resultados muestran que la catálisis heterogénea empleando la irradiación ultrasónica se ve favorecida al llegar a una conversión del 97% un tiempo de 30 min, lo cual se atribuye a la capacidad catalítica de la ferrita de cobalto el cual es un material semiconductor.

Palabras clave: biocombustibles; transesterificación, bioenergía, catálisis, ultrasonido.

SINTESIS ASISTIDA POR MICROONDAS DE NANOPÁRTICULAS DE MoS₂ SOPORTADAS EN NTC Y SU EVALUACIÓN CATALÍTICA EN REMOCIÓN DE AZUFRE

Alma Ileri Gochi Bautista^a, Eric Mauricio Rivera Muñoz^b, Francisco Paraguay Delgado^c, Trino Armando Zepeda Partida^d, Javier Lara Romero^a, Rafael Huirache Acuña^a.

^a Facultad de Ingeniería Química, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo. Edif V1, Ciudad Universitaria, 58060, Morelia, Michoacán, México *AlmaIleri2@gmail.com, *Rafael_huirache@yahoo.it, *Lararom@umich.mx.

^b Centro de Física Aplicada y Tecnología Avanzada, Universidad Nacional Autónoma de México, Juriquilla, Querétaro, México.

^c Física de Materiales, Centro de Investigación en Materiales Avanzados, S.C., Chihuahua, Chih., México, *Francisco.paraguay@cimav.edu.mx.

^d Centro de Nanociencias y Nanotecnología Universidad Nacional Autónoma de México. Ensenada, México.

Resumen

Las tecnologías hidrotérmicas a temperaturas moderadas (100-400°C) han ganado atención como procesos empleados en la síntesis nanoquímica. Han sintetizado nanotubos de carbono mediante el método de deposición química catalítica de vapor utilizando etileno C₂H₄ a 900°C, y posteriormente recubiertos con MoS₂ por una ruta hidrotérmica mezclándolos en una solución de (NH₄)₂MoO₄ y (NH₂)₂CS a 235°C durante 72 h, en el trabajo de Koroteev y col. [5]. El principal inconveniente es el tiempo de reacción y el bajo rendimiento del material resultante. En este trabajo se obtuvieron nanotubos de carbono (NTC) sintetizados por el método rocío pirolítico; estos fueron posteriormente purificados y funcionalizados, por lixiviación con ácidos [6] para ser utilizado como soporte catalítico para la fase activa MoS₂. La fase activa se depositó mediante un método hidrotérmico asistido por microondas a 190°C durante 15 minutos de reacción. La caracterización de las nanopartículas MoS₂/NTC por las técnicas DRX, Espectroscopía Raman y Microscopía Electrónica de Transmisión indican que se obtuvieron cristales de MoS₂ pequeños depositados de manera dispersa y aleatoria a lo largo de los NTC y que las condiciones a las cuales se llevaron a cabo las síntesis pueden ser mejoradas para transformar el precursor a MoS₂.

Palabras clave: NTC, Método asistido por Microondas, AOT, HDS, 3-Metil Tiofeno.

Abstract

Hydrothermal technologies at moderate temperatures (100-400°C) have gained attention as processes employed in nanochemical synthesis. Koroteev et al. [5] have synthesized carbon nanotubes by catalytic chemical vapor deposition method using ethylene C₂H₄ at 900°C, and subsequently coated with MoS₂ by a hydrothermal route by mixing them in a solution of (NH₄)₂MoO₄ and (NH₂)₂CS at 235°C for 72 h. The main drawback is the reaction time and the low yield of the resulting material. In this work, carbon nanotubes (CNTs) synthesized by the pyrolytic spray method were obtained; these were subsequently purified and functionalized, by acid leaching [6] to be used as catalytic support for the MoS₂ active phase. The active phase was deposited by a microwave-assisted hydrothermal method at 190°C for 15 min or reaction. Characterization of the MoS₂/NTC nanoparticles by XRD, Raman Spectroscopy and Transmission Electron Microscopy techniques indicate that small MoS₂ crystals deposited in a dispersed and random manner along the NTCs were obtained and that the conditions at which the syntheses were carried out can be improved to transform the precursor to MoS₂.

Keywords: CNTs, Microwave Assisted Method, AOT, HDS, 3-Methyl Thiophene.

CARACTERIZACIÓN DE NANOPARTÍCULAS DE TiO₂ SOPORTADAS, OBTENIDAS POR SÍNTESIS SONOQUÍMICA

Vanessa Martínez Cornejo^a, Luis Cedeño Caero^{a,*}, Sergio Fuentes Moyado^b, Gabriel Alonso Núñez^b

^a Unidad de Investigación en Catálisis/Dpto. Ingeniería de Química. /Facultad de Química/Universidad Nacional Autónoma de México, 04510, Ciudad de México, México

^b Laboratorio de Catálisis/ Dpto. Nanocatálisis/Edificio B/ CNyN-UNAM/Universidad Nacional Autónoma de México, 22800, Ensenada, Baja California, México

*e-mail: caero@unam.mx; v_martinez_cornejo@outlook.com

Resumen

A consecuencia de la pandemia mundial COVID-19, el uso de las mascarillas faciales como medida de prevención se ha vuelto indispensable. La fabricación de mascarillas faciales antivirales que sean capaz de inactivar al virus causante de la enfermedad proporcionaría al usuario una protección adicional. Con este fin, se sintetizaron nanopartículas de TiO₂ (NPs-TiO₂) por el método sol-gel con irradiación ultrasónica y fueron simultáneamente inmovilizadas en telas de algodón. Las telas funcionalizadas con TiO₂ fueron caracterizadas por espectroscopía FTIR-ATR, comprobando la formación de las NPs-TiO₂, por la señal característica de la fase anatasa. Las soluciones de reacción fueron caracterizadas por espectroscopía UV-vis, encontrado la banda de absorción reportada en la literatura para las NPs-TiO₂. Las aguas de lavado de las telas de algodón también fueron caracterizadas por UV-vis, se observó que la banda de absorción característica de las NPs-TiO₂ era de baja intensidad, demostrando que la lixiviación de las nanopartículas es mínima. Por lo tanto, es posible funcionalizar con NPs-TiO₂ las telas de algodón con propiedades antivirales, autolimpiables y que pueden ser usadas en varios ciclos de lavado.

Palabras clave: nanopartículas, TiO₂, mascarillas faciales, autolimpiables, COVID-19.

Abstract

The use of face masks as a preventive measure has become essential by the pandemic COVID-19. The manufacture of antiviral face masks that can be inactivating the virus causing the disease would provide the user with additional protection. To this end, TiO₂ nanoparticles (NPs-TiO₂) were synthesized by the sol-gel method with ultrasonic irradiation and were simultaneously immobilized on cotton fabrics. Fabrics functionalized with TiO₂ were characterized by FTIR-ATR spectroscopy, verifying the formation of NPs- TiO₂, by the characteristic signal of the anatase phase. The reaction solutions of the cotton fabrics were characterized by UV-vis spectroscopy, finding the absorption band reported in the literature for NPs-TiO₂. The washing waters of cotton fabrics were characterized by UV-vis. The characteristic absorption band of the NPs- TiO₂ was of low intensity for the washing waters, showing that the leaching of the nanoparticles is minimal. Therefore, it is possible to functionalize with NPs-TiO₂ cotton fabrics with antiviral properties, self-cleaning and that can be used in several washing cycles.

Keywords: nanoparticles, TiO₂, face mask, self-cleaning, COVID-19.

CARACTERIZACIÓN Y EVALUACIÓN CATALÍTICA EN HIDRODESOXIGENACIÓN DE ANISOL CON CATALIZADORES BIMETÁLICOS DE Ru-Cu SOPORTADOS EN TiO₂

D. Duran Sánchez^{a*}, J. A. de los Reyes^a, R. Ríos Escobedo^a, O. U. Valdés^a

^a *Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, División de Ciencias Básicas e Ingeniería, Av. San Rafael Atlixco 186, Col. Vicentina, 09340 Ciudad de México, México*

**durandiego501@gmail.com*

Resumen

Se evaluaron las propiedades catalíticas de dos series de catalizadores, una serie monometálica de cobre y rutenio soportado en óxido de titanio, haciendo un barrido de cargas de cobre de 3, 5 y 10% en peso y de 0.5% en peso para rutenio, y una serie bimetalica de catalizadores rutenio-cobre. Se encontró que al combinar el cobre y el rutenio con cargas nominales de 5 y 0.5% respectivamente se favorece la actividad catalítica del material en la reacción de HDO de anisol. Por su parte, la caracterización mediante desorción a temperatura programada de amoníaco (TPD-NH₃) sugiere una dispersión de los metales sobre los sitios ácidos de carácter fuerte, lo que favorece la actividad catalítica. Por otro lado, los perfiles de reducción a temperatura programada (TPR) muestran que las especies de cobre presentan una disminución en la temperatura de reducción, acoplándose con la temperatura de reducción del rutenio, llevándose a cabo una reducción en simultaneo de los metales soportados.

Palabras clave: Rutenio, cobre, HDO, anisol, TPD-NH₃.

Abstract

The catalytic properties of two series of catalysts were evaluated, a monometallic series of copper and ruthenium supported on titanium oxide, making different copper loadings of 3, 5 and 10% by mass and 0.5% by mass for ruthenium. And a bimetallic series of ruthenium-copper catalysts. It was found that combining copper and ruthenium with nominal loadings of 5 and 0.5% favored the catalytic activity of the material in the anisole HDO reaction. On the other hand, the characterization by programmed temperature desorption of ammonia (TPD-NH₃) suggests a dispersion of the metals over the strong acid sites, which favors the catalytic activity. On the other hand, the temperature programmed reduction (TPR) profiles show that the copper species present a decrease in the reduction temperature, coupling with the reduction temperature of ruthenium, carrying out a simultaneous reduction of the supported metals.

Keywords: Ruthenium, copper, HDO, anisole, TPD-NH₃.



UASLP
Universidad Autónoma
de San Luis Potosí