



Revista Cubana de Química

ISSN: 0258-5995

revcubanaquimica@uo.edu.cu

Universidad de Oriente

Cuba

Sánchez, Claudia; Restrepo, Gloria; Ríos, Luís; Marín, Juan Miguel; Llano, Biviana;
Paniagua, Victoria; Gómez, Wanda

ESTUDIO TEÓRICO Y EXPERIMENTAL DE LA DEGRADACIÓN POR VÍA
FOTOCATALÍTICA DEL CLOROBENCENO

Revista Cubana de Química, vol. XVIII, núm. 1, 2006, pp. 271-272

Universidad de Oriente
Santiago de Cuba, Cuba

Disponible en: <http://www.redalyc.org/articulo.oa?id=443543688091>

- Cómo citar el artículo
- Número completo
- Más información del artículo
- Página de la revista en redalyc.org

redalyc.org

Sistema de Información Científica

Red de Revistas Científicas de América Latina, el Caribe, España y Portugal

Proyecto académico sin fines de lucro, desarrollado bajo la iniciativa de acceso abierto

ESTUDIO TEÓRICO Y EXPERIMENTAL DE LA DEGRADACIÓN POR VÍA FOTOCATALÍTICA DEL CLOROBENCENO

Claudia Sánchez¹, Gloria Restrepo², Luis Ríos², Juan Miguel Marín², Biviana Llano², Victoria Paniagua¹, Wanda Gómez¹

¹*Politécnico Colombiano Jaime Isaza Cadavid - Facultad de Ciencias Básicas – Grupo de Investigación en Química Básica y Aplicada, A.A 4932, Medellín-Colombia*

²*Universidad de Antioquia, Facultad de Ingenierías - Grupo de Investigación en Procesos Físicoquímicos Aplicados A.A 1226, Medellín, Colombia*

Palabras Claves: Fotocatálisis, Clorobenceno, VOCs, Modelación Teórica

Introducción

La contaminación del aire es uno de los problemas ambientales más graves ocasionados no sólo por las emisiones de gases de los automotores sino también por la emisión de enormes cantidades de productos residuales potencialmente nocivos emanados principalmente de industrias e incineradores. Los compuestos orgánicos volátiles son considerados como uno de los contaminantes antropogénicos más importantes generados en las áreas urbanas e industriales [1-4]. Este proyecto de investigación involucra la comprensión de los diversos factores que actúan simultáneamente afectando la conversión que puede ser lograda por una determinada clase de reacción de fotodegradación, y con estos conocimientos se aplica la tecnología fotocatalítica en la destrucción de contaminantes tipo VOCs, para lo cual se determina la ruta de degradación teórica y experimental vía fotocatalisis con TiO₂ del clorobenceno, usado como compuesto modelo. Con el avance en los sistemas de computación y en la ingeniería de simulación se ha potenciado el uso de modelos matemáticos que interpretan los sistemas físicos y permiten analizar mayor cantidad de variables y posibles interacciones entre ellos [5].

Metodología

Los experimentos de fotodegradación del clorobenceno se realizaron depositando 0.025 mg de TiO₂ sobre un filtro de fibra de vidrio el cual se ubicó en el reactor de tal manera que el fotocatalizador cubriera toda la superficie expuesta. Se detectó la concentración inicial del clorobenceno y se encendió la lámpara; posteriormente se tomaron muestras a diferentes intervalos de tiempo hasta que la concentración final fue estable. El seguimiento de la reacción se realizó por cromatografía de gases con detector TCD y FTIR. El estudio teórico se realiza utilizando la Teoría de los Funcionales de la Densidad, DFT, la cual viene incorporada en el paquete computacional Gaussian03 [6]. Las optimizaciones de las geometrías para todas las especies incluidas en este estudio, se realizan utilizando el conjunto de bases 6-31(d) y los tres parámetros híbridos de intercambio no local de Becke y el funcional de correlación [7] denotado, (B3LYP) [8]. Las frecuencias vibracionales armónicas se evalúan al

mismo nivel de teoría para confirmar que las estructuras optimizadas corresponden a un mínimo de la superficie de energía potencial y para evaluar las correspondientes energías del punto cero, ZPE. Las características enlazantes se investigan utilizando la técnica de partición de población, el análisis de orbital de enlace natural, el análisis NBO (Natural Bond Order) de Reed y Weinhold [9,10] con el fin de estudiar los efectos de correlación electrónica. Así mismo se determinan las energías del HOMO y del LUMO.

Discusión de Resultados

Se realizaron estudios cinéticos en los cuales se midieron condiciones del sistema tales como: temperatura, caudal, presiones manométricas intensidad de radiación UV, superficie catalítica y la concentración de clorobenceno; también se identifican algunos de los productos intermedios y finales de la reacción desarrollada en laboratorio por medio de análisis cromatográficos y FTIR a partir de los compuestos teóricos que determina el modelo desarrollado. Estos factores se utilizan en el desarrollo de los modelos matemáticos que permiten obtener la ruta de degradación teórica del compuesto modelo y permitan formular las correlaciones necesarias con el comportamiento real. Para ello se usan programas Gaussian03, SpartanPro, Hyperchem entre otros, que permitan establecer un modelo a partir de las energías de adsorción, reacción, transporte, estados de transición y de estabilidad termodinámica.

Conclusiones

El sistema fotorreaccionante fue eficiente en la degradación del clorobenceno y los productos intermedios caracterizados por las técnicas de cromatografía de gases y FTIR, han sido modelados empleando los métodos teóricos descritos en la metodología. Este estudio profundizó en los métodos para la modelación de la ruta de degradación del clorobenceno por la tecnología fotocatalítica y además contribuye a la simulación de sistemas fotorreactivos en fase gas usando materiales semiconductores.

Bibliografía

- [1] Miguel Blesa, Eliminación de Contaminantes por Fotocatálisis Heterogenea, Red CYTED, 2001, Buenos Aires Argentina, 361p.
- [2] Huang C. P., Dong Ch. and Tang A., Waste Management, 13, 1993, 361-377.
- [3] Herrmann J. M. Et al., Catálisis Today, 54, 1999, 353-367.
- [4] Burrows H. D., Canle M., Santaballa J. A, and Steeken S., Journal of Photochemistry and Photobiology B: Biology, 67, 2002, 71 – 108.
- [5] Cramer, Ch. Essentials of Computational Chemistry. Theories and Models. University of Minnesota, USA. John Wilwy & Sons, Ltd. 2002
- [6] Becke, A. D. *J. Chem. Phys.*, 98, 1993, 5648-5652.
- [7] Lee, C., Yang, W., Parr, R. G. *Phys. Rev. B.*, 37, 1988, 785-789.
- [8] NBO 4.M E.D Glendening, J. K. Badenhoop, A. E. Reed, J. E. Carpenter, and F. Weinhold. Theoretical Chemistry Institute, University of Wisconsin, Madison, W.I, 1999.
- [9] A E. Reed and F. Weinhold, *J. Chem. Phys.*, 78, 1983, 1736 and 4066.