



Producción por LGAC – Congresos

Memorias del XXXV Encuentro Nacional de la AMIDIQ
6 al 9 de Mayo de 2014, Puerto Vallarta, Jalisco, México

SINTESIS HIDROTÉRMICA ASISTIDA POR AUTOCLAVE DE NANOTUBOS DE CARBONO BIMETÁLICOS Mo (PRESENTE COMO MoS₂) - Fe

Alma Mariela Cisneros Carranza^a, Rafael Huirache Acuña^a, Gabriel Alonso Núñez^b, Miguel José Yacamán^c,

^aFacultad de Ingeniería Química, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, Ciudad Universitaria, 58060, Morelia, Michoacán, México. rafael_huirache@yahoo.it

^bCentro de Nanociencias y Nanotecnología, UNAM, Ensenada, Baja California, C.P. 22860 México.

^cDepartment of Physics and Astronomy, The University of Texas at San Antonio, One UTSA Circle San Antonio, Texas 78249-0697

Resumen

En este trabajo se presenta la síntesis hidrotérmica asistida por autoclave de sulfuro de molibdeno (MoS₂) soportado en nanotubos de carbono (NTC), utilizando Fe como promotor de dicho catalizador. Mediante las técnicas de microscopía electrónica de barrido (SEM), microscopía electrónica de transmisión (TEM) y difracción de Rayos X (DRX) se confirmó que el utilizar este método permite la formación de especies de MoS₂ sobre la superficie de los nanotubos de carbono.

Introducción

La formación de compuestos cristalinos inorgánicos soportados en NTC provee un material híbrido con propiedades químicas, físicas y mecánicas especiales. Las aplicaciones potenciales se encuentran en el campo de la electrónica, electroquímica, tribología y catálisis [1-10]. En el pasado, los NTC han sido recubiertos con capas de MoS₂ y WS₂ [11-12]. Este tipo de síntesis requiere que especies de MoO₃ sean reducidas y convertidas en MoS₂, para finalmente ser depositadas en la superficie de los NTC. Para lo anterior es importante que se reduzca la tensión superficial de los NTC. Xu Chun Song y *col.* [13] realizaron intentos para formar MoS₂ en NTC, usando como precursor del MoS₂ una solución acuosa de (NH₄)₂MoS₄ y reducción en atmósfera de hidrógeno. Sin embargo, el rendimiento fue bajo y el método complejo. Un método muy similar fue desarrollado por Terrones y *col.* [14] pero de igual manera el requerimiento de energía fue elevado para lograr el recubrimiento de NTC con MoS₂. Actualmente, el uso del método hidrotérmico ha atraído la atención debido a las temperaturas en que se realiza (100-400 °C), además de que permite la formación de partículas nanométricas con propiedades interesantes. Lo anterior se puede modular mediante la elección adecuada de los parámetros de síntesis: concentración, pH, agitación, tipo de autoclave, temperatura y tiempo de reacción [15].

En base a lo anterior, en este trabajo se presenta la síntesis de MoS₂ soportado en NTC usando un método hidrotérmico asistido por autoclave, incorporando Fe proveniente de Fe(NO₃)₃ en una proporción (Fe/Mo+Fe)=0.3, para mejorar su actividad.

Metodología

Los NTC fueron funcionalizados (usando mezcla de ácidos), para permitir la incorporación de MoS₂ en su superficie utilizando un método hidrotérmico, incorporando posteriormente óxido de molibdeno (MoO₃) y KSCN como precursores de Mo y S, respectivamente. Para lo anterior, se dispersan los NTC en agua desionizada y se adiciona MoO₃, KSCN y Fe(NO₃)₃ a una proporción (Fe/(Fe+Mo)) = 0.3, se transfiere al ultrasonido durante 5 minutos, se depositara a un teflón para iniciar el tratamiento hidrotérmico en autoclave. Dicho tratamiento se realizó a 180 °C durante 24 horas, en una autoclave de 45 ml, depositado en una estufa, que será la fuente de calor para la reacción de componentes. Los materiales obtenidos fueron caracterizados mediante DRX, SEM/EDS y TEM.

Resultados.



Memorias del XXXV Encuentro Nacional de la AMIDIQ
6 al 9 de Mayo de 2014, Puerto Vallarta, Jalisco, México

ESTUDIO DE LA ACTIVIDAD FOTOCATALÍTICA DEL TiO₂ OBTENIDO POR SÍNTESIS QUÍMICA ASISTIDA POR MICROONDAS.

Francisco Ung Medina^a, Maricela Villicaña Méndez^a, Rafael Huirache Acuña^a,

Juan Zárate Medina^b, José Apolinar Cortés^{a}*

^a División de Estudios de Posgrado, Facultad de Ingeniería Química, UMSNH. Ciudad Universitaria, Morelia, Michoacán, 58030, MÉXICO.

apodito@gmail.com

^b Instituto de Investigaciones Metalúrgicas, UMSNH, Ciudad Universitaria, Morelia, Michoacán, 58030, MÉXICO.

Resumen

La fotocatalisis heterogénea es un procesos de oxidación avanzada que se basa en la producción de radicales hidroxilo ($\cdot\text{OH}$) a partir de la excitación de un semiconductor. El dióxido de titanio es ampliamente utilizado para este proceso ya que presenta actividad fotocatalítica en sus fases cristalinas anatasa (A) y rutilo (R). Cuando éste contiene proporciones cercanas a 3:1 de las fases A:R existe un aumento de foto-actividad. En esta investigación se obtuvo TiO₂ por síntesis asistida por microondas a 120°C y 2 min; posteriormente fue secado en horno y tratado térmicamente a las temperaturas de 350, 400, 450, 550, 650 y 750 (°C) durante una hora. La actividad fotocatalítica fue evaluada, utilizando un reactor anular, colorante azul ácido 9 y luz UV-A, estimando los efectos por fotólisis y adsorción. Con difracción de rayos x se identificó la formación de fase anatasa en los polvos T-100, T-350, T-400 y T-450; combinación de anatasa y rutilo en T-550 y T-650; y solo rutilo en T-750. Los polvos tuvieron área superficial desde 125m²g⁻¹ hasta 1.1m²g⁻¹ y se observaron tamaños de cristal de 5-31nm para A y mayores de 100nm para R. La microscopía electrónica de barrido, revelan una morfología irregular del material con aglomerados de hasta 20µm. Con los polvos obtenidos a 350, 400, 450 y 550 (°C) se obtuvieron decoloraciones mayores al 95% en tres horas de tratamiento, presentando cinéticas de pseudo medio orden.

Introducción

Los contaminantes recalcitrantes, tóxicos y coloreados presentes en aguas residuales generan condiciones adversas en el medio ambiente. Su degradación con procesos de tratamiento convencionales no es efectiva. Por ello, los procesos de oxidación avanzada (POAs) son una opción viable para su descomposición hasta la mineralización. Dentro de los POAs se encuentra la fotocatalisis heterogénea, que emplea un semiconductor excitado para la producción de radicales hidroxilo ($\cdot\text{OH}$). El semiconductor más utilizado es el Dióxido de Titanio (TiO₂) ya que es relativamente económico, no tóxico y fácil de sintetizar [1]. Este semiconductor presenta polimorfismo estructural, donde las fases anatasa (A) y rutilo (R) presentan actividad fotocatalítica [2]. Uno de los catalizadores comerciales más utilizados es el Degussa P-25, el cual tienen una composición de 1:3 (A:R) [3]. Esta composición presenta una sinergia en la actividad fotocatalítica del TiO₂ [4] y es posible cambiar de fase anatasa a rutilo con un tratamiento térmico a la temperatura de transición; Sin embargo, existen algunas variables que modifican dicha temperatura [5], entre las que se encuentra el tamaño de partícula [6], el método de síntesis [7], tiempo de envejecimiento en sol-gel [8] o bien, el tipo de precursor como el TiOF₂ con el cual se obtiene un material termoestable, presentando la formación de fase rutilo hasta los 1000 °C [9]. Una manera novedosa de obtener el TiO₂ es la síntesis química asistida por microondas, es una técnica reproducible y no se tienen antecedentes sobre alguna temperatura de transición A-R bajo éstas condiciones. Por ello, en ésta investigación se cambiarán los valores de temperatura en el tratamiento térmico, para evaluar su efecto sobre las propiedades cristalográficas, morfológicas y la actividad fotocatalítica del material.



DEGRADACIÓN DE LOS COMPUESTOS LIGNOCELULOSICOS GENERADOS EN LA ETAPA DE BLANQUEAMIENTO DE LA CELULOSA CON PROCESOS DE OXIDACIÓN AVANZADA (UV/H₂O₂).

Carlos Irving Contreras Campos^a, Gabriel Martínez Herrera^b, Rafael Huirache Acuña^c

^a Posgrado de Ingeniería Química, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, Av. Francisco J. Mújica S/N, Morelia, Michoacán, 58030, México. Irving105@hotmail.com

^b Posgrado de Ingeniería Química, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, Av. Francisco J. Mújica S/N, Morelia, Michoacán, 58030, México.

^c Posgrado de Ingeniería Química, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, Av. Francisco J. Mújica S/N, Morelia, Michoacán, 58030, México.

Resumen

En la actualidad la sobrepoblación, la contaminación, el mal uso y el consumo excesivo han provocado una creciente restricción al agua. La industria celulosa y papel genera un elevado volumen de agua residual (80 m³ de agua residual/ tonelada de pulpa producida), es por ello la importancia de tratar sus efluentes. El presente trabajo proporciona una alternativa para el tratamiento de los mismos utilizando procesos avanzados de oxidación de fotólisis con H₂O₂/LUVVC en la etapa de blanqueamiento, es decir, desde la misma fuente, donde se genera la mayor contaminación del agua, alcanzando valores superiores al 60% de la carga orgánica del efluente industrial. Para llevar a cabo la degradación de los compuestos generados del efluente alcalino en un reactor tipo batch. Para el tratamiento se consideran dos etapas, la primera dónde se buscan los factores de mayor impacto en la degradación y decoloración del efluente; la segunda etapa consta de encontrar los valores óptimos de dichos factores que permitan tener un proceso más eficaz y eficiente a nivel laboratorio.

Introducción.

La industria de la celulosa y papel es una de las más importantes contribuye para la economía mundial y genera miles de empleos directos e indirectos, existen cerca de 9000 fábricas de celulosa y 14,000 fábricas de papel que producen actualmente 300 millones de toneladas de papel y cartón cada año [1].

Actualmente, la industria de la celulosa y el papel en México genera alrededor de 3,400 millones de dólares al año, esto es un 2% de la producción manufacturera y un 0.4% del Producto Interno Bruto (PIB) de nuestro país [2].

Según los reportes del INEGI, en México las industrias que se consideran más contaminantes con el flujo de aguas residuales y el grado de contaminación son: Azucarera, Petrolera, Siderúrgica, Química y la de Celulosa y Papel [SEMARNAT 2010].

Además de la importancia económica, la industria de la celulosa y papel presentan elevado potencial de contaminación ambiental, no sólo por la presencia compuestos refractarios, sino que requiere agua como parte de sus procesos además se utiliza para la generación de vapor, etapas de mantenimiento o enfriamiento, dando como resultado un elevado volumen



Memorias del XXXV Encuentro Nacional de la AMIDIQ
6 al 9 de Mayo de 2014, Puerto Vallarta, Jalisco, México

ESTUDIO DE MATERIALES MESOPOROSOS AL-SBA-15 EN LA CONVERSIÓN DE UNA MEZCLA MODELO CON ALTO CONTENIDO DE ÁCIDOS GRASOS.

Denis A. Cabrera-Munguía^a, Horacio González^{a*}, Aida Gutiérrez-Alejandre^b, Rafael Maya-Yescas^a, José L. Rico^a, Rafael Huirache-Acuña^a

^a Facultad de Ingeniería Química, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, Domicilio, Morelia, Michoacán, 58060, México. *hogoro@umich.mx

^bUNICAT Facultad de Química, México, D.F., México

Resumen

Se sintetizaron materiales mesoporosos del tipo Al-SBA-15 para emplearse como catalizadores en la producción de biodiesel. El aluminio se incorporó mediante los métodos de sol-gel y de injerto químico, con diferentes relaciones molares de $\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$ (20,40). Estos materiales se utilizaron para llevar a cabo de forma simultánea la esterificación y transesterificación de una mezcla modelo que contiene 20% en peso de ácido palmítico en tricaprilato de glicerina a 215°C. Los materiales calcinados de Al-SBA-15 fueron caracterizados por DRX, SEM, TEM, fisisorción de N_2 , RMN ^{27}Al y adsorción de piridina analizado por FT-IR. Los resultados confirmaron la estructura mesoporosa tipo SBA-15 en los catalizadores tipo AlSBA-15, así como la formación de acidez de tipo Brønsted y Lewis. Los resultados de reacción mostraron rendimientos de ~90% y de ~40% para la esterificación y transesterificación respectivamente, indicando que los materiales de Al-SBA-15 tienen una acidez superficial y diámetro de poro que los hacen potenciales catalizadores heterogéneos en la producción de biodiesel.

Introducción

A pesar de la alta actividad catalítica que presentan los catalizadores básicos homogéneos como el NaOH en la transformación de aceites vegetales a biodiesel, su uso se ve limitado cuando la carga contiene un alto porcentaje de ácidos grasos libres, debido a la formación de jabón por la saponificación de dichos ácidos grasos; lo que conlleva a etapas costosas de separación y purificación de los productos principales. Por lo que en los últimos años, para evitar dichas complicaciones, las investigaciones se han enfocado al estudio de catalizadores heterogéneos [1]. Dentro de ellos, los catalizadores ácidos heterogéneos resultan una opción interesante al poder efectuar simultáneamente la reacción de esterificación y transesterificación [2]. Sin embargo, además de acidez fuerte, es deseable que dichos catalizadores posean un diámetro de poro amplio y una superficie hidrofóbica, que faciliten la difusión de reactivos y productos, y que sea capaz de repeler el agua formada en la reacción de esterificación. Entre los materiales con potencial para ser utilizados en estas reacciones está la sílice amorfa del tipo SBA-15, la cual posee una estructura mesoporosa que permite el transporte de reactivos y productos, además de que presenta una superficie hidrofóbica. Sin embargo, la SBA-15 presenta características ácidas débiles, lo cual limita su actividad catalítica para las reacciones de esterificación y transesterificación. Por ello, en este trabajo se propone incorporar aluminio en su estructura, con distintas relaciones molares de $\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$ [3,4] con el objeto de generar sitios ácidos fuertes capaces de catalizar las reacciones deseadas. Los catalizadores Al-SBA-15 fueron caracterizados por DRX, RMN ^{27}Al , FT-IR de piridina adsorbida, fisisorción de N_2 , SEM y TEM, y utilizados en la esterificación y transesterificación de una mezcla modelo con 20% en peso de ácido palmítico en tricaprilato de glicerina a 215°C y con una relación molar metanol/aceite 30:1.



Memorias del XXXV Encuentro Nacional de la AMIDIQ
6 al 9 de Mayo de 2014, Puerto Vallarta, Jalisco, México

SINTESIS HIDROTÉRMICA ASISTIDA POR MICROONDAS DE MoS₂ SOPORTADO EN NANOTUBOS DE CARBONO

*Alma Mariela Cisneros Carranza^a, Gabriel Alonso Núñez^b, Javier Lara Romero^c,
Eric Mauricio Rivera Muñoz^d, Miguel José Yacamán^d, Rafael Huirache Acuña^e,*

^aFacultad de Ingeniería Química, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo,
Ciudad Universitaria, 58060, Morelia, Michoacán, México. rafael_huirache@yahoo.it

^bCentro de Nanociencias y Nanotecnología, UNAM, Ensenada, Baja California, C.P. 22860 México.

^cCentro de Física Aplicada y Tecnología Avanzada, Universidad Nacional
Autónoma de México, A.P. 1-1010, C.P. 76000 Querétaro, México

^dDepartment of Physics and Astronomy, The University of Texas at San Antonio,
One UTSA Circle San Antonio, Texas 78249-0697

Resumen

En este trabajo se presenta la síntesis hidrotérmica asistida por microondas de sulfuro de molibdeno (MoS₂) soportado en nanotubos de carbono (NTC). Mediante las técnicas de microscopía electrónica de barrido (SEM), microscopía electrónica de transmisión (TEM) y difracción de Rayos X (DRX) se confirmó que el utilizar este método permite la formación de especies de MoS₂ sobre la superficie de los nanotubos de carbono.

Introducción

La formación de compuestos cristalinos inorgánicos soportados en NTC provee un material híbrido con propiedades químicas, físicas y mecánicas especiales. Las aplicaciones potenciales se encuentran en el campo de la electrónica, electroquímica, tribología y catálisis [1-10]. En el pasado, los NTC han sido recubiertos con capas de MoS₂ y WS₂ [11-12]. Este tipo de síntesis requiere que especies de MoO₃ sean reducidas y convertidas en MoS₂, para finalmente ser depositadas en la superficie de los NTC. Para lo anterior es importante que se reduzca la tensión superficial de los NTC. Xu Chun Song y *col.* [13] realizaron intentos para formar MoS₂ en NTC, usando como precursor del MoS₂ una solución acuosa de (NH₄)₂MoS₄ y reducción en atmósfera de hidrógeno. Sin embargo, el rendimiento fue bajo y el método complejo. Un método muy similar fue desarrollado por Terrones y *col.* [14] pero de igual manera el requerimiento de energía fue elevado para lograr el recubrimiento de NTC con MoS₂. Actualmente, el uso del método hidrotérmico ha atraído atención debido a las temperaturas en que se realiza (100-400 °C), además de que permite la formación de partículas nanométricas con propiedades interesantes. Lo anterior se puede modular mediante la elección adecuada de los parámetros de síntesis: concentración, pH, agitación, uso de surfactantes, tipo de autoclave, temperatura y tiempo de reacción [15]. Recientemente, Koroteev y colaboradores [16] sintetizaron NTC vía deposición química de vapor usando etileno (C₂H₄) a 900 °C en un horno tubular y posteriormente, los NTC fueron recubiertos utilizando un método hidrotérmico mezclando (NH₄)₂MoO₄ con (NH₄)₂CS y depositando la solución en un autoclave a 235°C por 72 h. La principal desventaja fue el tiempo de reacción y el bajo rendimiento del material resultante. Motivados por lo anterior, en este trabajo se presenta la síntesis de MoS₂ soportado en NTC usando un método hidrotérmico asistido por microondas.

Metodología

En el presente proyecto de investigación se sintetizan materiales de MoS₂ soportados en NTC de pared múltiple utilizando como precursor de carbono α -pineno (obtenido de resina de pino) y ferroceno como catalizador. Los NTC de multicapas se forman dentro de un tubo de cuarzo al llevarse a cabo dos reacciones, una homogénea, la cual es la pirólisis de una mezcla ferroceno/solución de α -pineno a través de un vaporizador en un horno de reacción (Horno tubular eléctrico, marca BI Barnstead Thermolyne,



SÍNTESIS DE BIODIESEL USANDO ÓXIDO DE CALCIO COMO CATALIZADOR

Alejandro Hernández Antúnez, Luis Ignacio Salcedo Estrada, Jaime Espino Valencia, Manuel Arroyo Albiter, José Luis Rico Cerda

Laboratorio de Catalisis, Facultad de Ingeniería Química, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, Edificio V1, CU, Morelia Mich., C.P., 58060, México.

Resumen

Con la finalidad de ir sentando las bases para el uso de energías alternas al petróleo, en este trabajo se realizó una investigación básica sobre la reacción catalítica de transesterificación del aceite de oliva para obtener biodiesel. La investigación se enfoca en la evaluación del catalizador CaO para esta reacción. Se investigaron diversas variables que afectan la reacción, como la relación molar metanol-aceite y la masa del catalizador en relación a la masa del aceite. La temperatura de reacción de reacción se fijó en 65 °C. El inconveniente que encontramos con el catalizador CaO es su inestabilidad en el medio ambiente. El CaO adsorbe agua y CO₂ rápidamente del ambiente y pierde su actividad catalítica. Las condiciones experimentales más favorables encontradas fueron las siguientes; temperatura de calcinación 800 °C, relación molar metanol aceite de 6:1, porcentaje de masa de catalizador en relación a la masa el aceite de 11%, temperatura de reacción de 65 °C y una velocidad de agitación de 1000 rpm. Bajo estas condiciones, se obtuvo una conversión de 89% en 4 horas. Estos resultados se compararon con los obtenidos con el NaOH con catalizador de referencia.

Introducción

Biodiesel es el nombre comercial del producto principal que se obtiene de la transesterificación de los triglicéridos presentes en grasas y aceites. Estrictamente hablando, el biodiesel es una mezcla de metil ésteres de ácidos grasos, también conocido como FAME por sus siglas en inglés [1]. La materia prima para producir biodiesel depende en gran medida de la región del mundo en la que se produzca, pero tiene que ser barata y el biodiesel debe de cumplir con las normas internacionales establecidas. Actualmente el 95% de los aceites que se usan como materia prima para producir biodiesel son aceites comestibles. Esta alternativa no es factible a largo plazo porque entran en competencia directa con los productos alimenticios que se consumen alrededor del mundo. Además de generar otros problemas de tipo social y ambiental, puesto que para cumplir las demandas cada vez más altas de estos productos, generalmente se recurre a la tala de bosques, debido a esto los aceites son cada vez más caros. Alternativamente se han propuesto aceites de grado no comestible que pueden ser cultivados en áreas no aptas para el cultivo de productos alimenticios [2], lo cual desvincula totalmente la competencia con los productos alimenticios y crea a su vez oportunidades de trabajo en países en vías de desarrollo. La alternativa que ofrece el biodiesel es atractiva por diferentes razones, primero en teoría puede ser producido en su totalidad de fuentes totalmente renovables disponibles en todos los lugares del mundo, es totalmente biodegradable, se sabe que, cuando el biodiesel es quemado en las máquinas de combustión interna se reducen las emisiones de CO₂ en un 78%, y las del dióxido de azufre en un 98% y alrededor de un 50% la emisión de partículas sólidas [3]. Además de lo anterior el biodiesel puede ser utilizado en las máquinas de combustión prácticamente sin ninguna modificación y se mezcla con el diesel ordinario en



CARACTERIZACIÓN DE CATALIZADORES TRIMETÁLICOS NiMoW SOPORTADOS SOBRE MATERIALES MESOPOROSOS SINTETIZADOS POR TRATAMIENTO HIDROTÉRMICO Y PROBADOS EN LA REACCIÓN DE HDS

Marcela Sarai Gutiérrez Díaz^a, Maritza Elizabeth Cervantes Gaxiola^b, Manuel Arroyo Albiter^a, José Luis Rico Cerda^a, Jaime Espino Valencia^a

^aLaboratorio de catalisis, División de estudios de posgrado, Facultad de Ingeniería Química, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, Gral. Francisco J. Magica S/N, Morelia, Michoacán, 58030, MEXICO. E-mail:bba_3gp@hotmail.com

^bFacultad de Ciencias Químico Biológicas, Universidad Autónoma de Sinaloa, Blvd. De las Américas y Josefa Ortiz de Domínguez S/N, Ciudad Universitaria, Culiacán, Sinaloa, 80000, MEXICO.

Resumen

En el presente trabajo se reporta la síntesis y caracterización de catalizadores NiMoW soportados en un óxido mixto de AlTiMg. Los soportes fueron sintetizados por el método sol-gel y secados mediante tratamiento hidrotérmico a 150 o 180 °C y 4 u 8 hr. Los metales Ni, Mo y W fueron obtenidos a partir de nitrato de níquel, tiomolibdato de amonio y tiotungstato de amonio e incorporados al soporte mediante co-impregnación. Los catalizadores fueron calcinados a 500°C bajo flujo de aire y posteriormente reducidos y activados a 400°C bajo flujo de H₂S/H₂ (15% v/v). Los catalizadores fueron caracterizados mediante DRX, fisisorción de nitrógeno, espectroscopia IR y Raman, los cuales presentaron distribución de tamaño de poro de 3 a 5 nm y área superficial específica de 142-217m²/g, además de estructuras pobremente cristalinas. La actividad catalítica fue evaluada en la reacción de hidrodesulfuración (HDS) del dibenzotiofeno (DBT), las constantes de velocidad obtenidas fueron del orden de 10⁻⁶ y selectividad hacia la ruta de desulfuración directa (DDS). El catalizador tratado hidrotérmicamente a 180 °C durante 8 h fue el más activo y mostró las mejores propiedades superficiales texturales y estructurales.

Introducción

Debido a las nuevas regulaciones ambientales se han intensificado las investigaciones en el desarrollo de nuevos y mejores catalizadores con el objetivo de disminuir el azufre contenido en el petróleo [1]. Los catalizadores de HDS más usados por la industria para este propósito son los sulfuros de metales de transición, (Co)NiMo(W)S₂, soportados generalmente sobre γ -alúmina [2,3]. Soled y col., desarrollaron y patentaron el catalizador trimetálico NEBULA, el cual se ha comentado que es hasta el momento el más activo para procesar crudos con alto contenido de azufre. Este material está formado básicamente de Ni, Mo y W [4]. A raíz de esto, diversos grupos de investigación han venido desarrollando nuevos materiales catalíticos empleando diferentes precursores o haciendo modificaciones en los soportes [5, 6].

Metodología

Los soportes fueron sintetizados mediante el método sol-gel, con relación peso inicial de 76% Al₂O₃, 19% TiO₂ y 5% de MgO. El gel obtenido fue envejecido y posteriormente tratado por método hidrotérmico a 150 °C o 180 °C en un autoclave durante 4 u 8 h y fueron etiquetados como A, B-4, B-8, C-4 y C-8 respectivamente, donde A es un xerogel secado a temperatura ambiente. Los sólidos obtenidos fueron calcinados a 500 °C durante 4 h bajo flujo de aire, prensados y tamizados. Los metales W y Mo se obtuvieron a partir de las tiosales correspondientes, los cuales, junto con el Ni(NO₃)₂ fueron disueltos en agua y



RENDIMIENTO DE CARBÓN ACTIVADO A PARTIR DE DOS ESPECIES DE PINO

Oswaldo Moreno Arguiano^a, Francisco Márquez Montesinos^b, Artemio Carrillo-Parral^c, José Luis Rico Cerda^d, Pablo López Albarrán^d, José Guadalupe Rutiaga Quiñones^d

^aFacultad de Ingeniería en Tecnología de la Madera, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, Francisco J. Mújica S/N Ciudad Universitaria, Morelia, Michoacán, C.P. 58030, MÉXICO, oma7387@hotmail.com.

^bFacultad de Ciencias Técnicas, Universidad de Pinar del Río, José Martí No. 270, Pinar del Río, Pinar del Río, C.P. 20100, CUBA.

^cFacultad de Ciencias Forestales, Universidad Autónoma de Nuevo León. Carretera Nacional km 145, Linares, Nuevo León. MÉXICO.

^dFacultad de Ingeniería Química, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, Francisco J. Mújica S/N Ciudad Universitaria, Morelia, Michoacán, C.P. 58030, MÉXICO.

Resumen

En el presente trabajo se empleó la madera en forma de harina de dos especies de pino: *Pinus pseudostrobus* y *Pinus leiophylla*. Se realizó un análisis químico inmediato de la madera en el que se determinó el contenido de humedad, el porcentaje de materia volátil y el porcentaje de cenizas. Los carbones activados fueron preparados utilizando como precursores dichas maderas, la activación se realizó en una mufla y se llevó a cabo empleando como agente activante al ácido fosfórico (H_3PO_4) al 30% y el tiempo de activación fue de 2 horas, teniendo como variables en el proceso la relación de impregnación y la temperatura de activación. Las relaciones de impregnación utilizadas fueron $R = 1, 2$ y 3 ($R = \text{masa disolución/masa madera}$), mientras que las temperaturas de activación fueron 400 y 500°C , obteniendo así 6 combinaciones por especie. Se determinaron los rendimientos de carbón activado para cada combinación, obteniendo mejores rendimientos la madera de *P. pseudostrobus* con una relación de impregnación de $R = 2$ y una temperatura de activación de 400°C .

Introducción

Biomasa

La biomasa es la materia de origen vegetal o animal o resultado de la transformación natural o artificial de la misma que es susceptible de aprovechamiento energético. La biomasa está siendo considerada en todo el mundo como una fuente de energía inagotable y limpia [1]. Se podría clasificar la biomasa en cinco grandes grupos: biomasa forestal, biomasa agrícola, biomasa ganadera, biomasa industrial y biomasa urbana. Uno de los principales exponentes de la biomasa es la madera, ya sea como material primario o como residuo de la transformación de esta. La madera es un material natural formado por cadenas de celulosa, hemicelulosa y lignina.

Conversión termoquímica

Los procesos termoquímicos son aquellas en los que se encuentran implicadas reacciones químicas irreversibles, a elevadas temperaturas y en condiciones variables de oxidación. Entre los procesos termoquímicos más importantes podemos encontrar los siguientes:

- ❖ **Pirólisis:** es la descomposición físico-química de una material bajo la acción del calor y en ausencia de un medio oxidante [2].
- ❖ **Gasificación:** se realiza en condiciones de presión y temperatura más severas que las de la pirólisis y lleva implícita una combustión parcial por defecto de aire [2].



SÍNTESIS DE BIODIESEL USANDO ÓXIDO DE CALCIO COMO CATALIZADOR

Alejandro Hernández Antúnez, Luis Ignacio Salcedo Estrada, Jaime Espino Valencia, Manuel Arroyo Albiter, José Luis Rico Cerda

Laboratorio de Catalisis, Facultad de Ingeniería Química, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, Edificio V1, CU, Morelia Mich., C.P., 58060, Mexico.

Resumen

Con la finalidad de ir sentando las bases para el uso de energías alternas al petróleo, en este trabajo se realizó una investigación básica sobre la reacción catalítica de transesterificación del aceite de oliva para obtener biodiesel. La investigación se enfoca en la evaluación del catalizador CaO para esta reacción. Se investigaron diversas variables que afectan la reacción, como la relación molar metanol-aceite y la masa del catalizador en relación a la masa del aceite. La temperatura de reacción de reacción se fijó en 65 °C. El inconveniente que encontramos con el catalizador CaO es su inestabilidad en el medio ambiente. El CaO adsorbe agua y CO₂ rápidamente del ambiente y pierde su actividad catalítica. Las condiciones experimentales más favorables encontradas fueron las siguientes; temperatura de calcinación 800 °C, relación molar metanol aceite de 6:1, porcentaje de masa de catalizador en relación a la masa el aceite de 11%, temperatura de reacción de 65 °C y una velocidad de agitación de 1000 rpm. Bajo estas condiciones, se obtuvo una conversión de 89% en 4 horas. Estos resultados se compararon con los obtenidos con el NaOH con catalizador de referencia.

Introducción

Biodiesel es el nombre comercial del producto principal que se obtiene de la transesterificación de los triglicéridos presentes en grasas y aceites. Estrictamente hablando, el biodiesel es una mezcla de metil ésteres de ácidos grasos, también conocido como FAME por sus siglas en inglés [1]. La materia prima para producir biodiesel depende en gran medida de la región del mundo en la que se produzca, pero tiene que ser barata y el biodiesel debe de cumplir con las normas internacionales establecidas. Actualmente el 95% de los aceites que se usan como materia prima para producir biodiesel son aceites comestibles. Esta alternativa no es factible a largo plazo porque entran en competencia directa con los productos alimenticios que se consumen alrededor del mundo. Además de generar otros problemas de tipo social y ambiental, puesto que para cumplir las demandas cada vez más altas de estos productos, generalmente se recurre a la tala de bosques, debido a esto los aceites son cada vez más caros. Alternativamente se han propuesto aceites de grado no comestible que pueden ser cultivados en áreas no aptas para el cultivo de productos alimenticios [2], lo cual desvincula totalmente la competencia con los productos alimenticios y crea a su vez oportunidades de trabajo en países en vías de desarrollo. La alternativa que ofrece el biodiesel es atractiva por diferentes razones, primero en teoría puede ser producido en su totalidad de fuentes totalmente renovables disponibles en todos los lugares del mundo, es totalmente biodegradable, se sabe que, cuando el biodiesel es quemado en las máquinas de combustión interna se reducen las emisiones de CO₂ en un 78%, y las del dióxido de azufre en un 98% y alrededor de un 50% la emisión de partículas sólidas [3]. Además de lo anterior el biodiesel puede ser utilizado en las máquinas de combustión prácticamente sin ninguna modificación y se mezcla con el diesel ordinario en



CARACTERIZACIÓN DE CATALIZADORES TRIMETÁLICOS NiMoW SOPORTADOS SOBRE MATERIALES MESOPOROSOS SINTETIZADOS POR TRATAMIENTO HIDROTÉRMICO Y PROBADOS EN LA REACCIÓN DE HDS

Marcela Sanal Gutiérrez Díaz^a, Maritza Elizabeth Cervantes Gaxiola^b, Manuel Arroyo Albiter^a, José Luis Rico Cerda^a, Jaime Espino Valencia^a

^aLaboratorio de catalisis, División de estudios de posgrado, Facultad de Ingeniería Química, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, Gral. Francisco J. Magica S/N, Morelia, Michoacán, 58030, MÉXICO. E-mail: bba_3gp@hotmail.com

^bFacultad de Ciencias Químico Biológicas, Universidad Autónoma de Sinaloa, Blvd. De las Américas y Josefa Ortiz de Domínguez S/N, Ciudad Universitaria, Culiacán, Sinaloa, 80000, MÉXICO.

Resumen

En el presente trabajo se reporta la síntesis y caracterización de catalizadores NiMoW soportados en un óxido mixto de AlTiMg. Los soportes fueron sintetizados por el método sol-gel y secados mediante tratamiento hidrotérmico a 150 o 180 °C y 4 u 8 hr. Los metales Ni, Mo y W fueron obtenidos a partir de nitrato de níquel, tiomolibdato de amonio y tiorungstato de amonio e incorporados al soporte mediante co-impregnación. Los catalizadores fueron calcinados a 500°C bajo flujo de aire y posteriormente reducidos y activados a 400°C bajo flujo de H₂S/H₂ (15% v/v). Los catalizadores fueron caracterizados mediante DRX, fisisorción de nitrógeno, espectroscopia IR y Raman, los cuales presentaron distribución de tamaño de poro de 3 a 5 nm y área superficial específica de 142-217m²/g, además de estructuras pobremente cristalinas. La actividad catalítica fue evaluada en la reacción de hidrodesulfuración (HDS) del dibenzotiofeno (DBT), las constantes de velocidad obtenidas fueron del orden de 10⁻⁶ y selectividad hacia la ruta de desulfuración directa (DDS). El catalizador tratado hidrotérmicamente a 180 °C durante 8 h fue el más activo y mostró las mejores propiedades superficiales texturales y estructurales.

Introducción

Debido a las nuevas regulaciones ambientales se han intensificado las investigaciones en el desarrollo de nuevos y mejores catalizadores con el objetivo de disminuir el azufre contenido en el petróleo [1]. Los catalizadores de HDS más usados por la industria para este propósito son los sulfuros de metales de transición, (Co)NiMo(W)S₂, soportados generalmente sobre γ -alúmina [2,3]. Soled y col., desarrollaron y patentaron el catalizador trimetálico NEBULA, el cual se ha comentado que es hasta el momento el más activo para procesar crudos con alto contenido de azufre. Este material está formado básicamente de Ni, Mo y W [4]. A raíz de esto, diversos grupos de investigación han venido desarrollando nuevos materiales catalíticos empleando diferentes precursores o haciendo modificaciones en los soportes [5, 6].

Metodología

Los soportes fueron sintetizados mediante el método sol-gel, con relación peso inicial de 76% Al₂O₃, 19% TiO₂ y 5% de MgO. El gel obtenido fue envejecido y posteriormente tratado por método hidrotérmico a 150 °C o 180 °C en un autoclave durante 4 u 8 h y fueron etiquetados como A, B-4, B-8, C-4 y C-8 respectivamente, donde A es un xerogel secado a temperatura ambiente. Los sólidos obtenidos fueron calcinados a 500 °C durante 4 h bajo flujo de aire, prensados y tamizados. Los metales W y Mo se obtuvieron a partir de las tiosales correspondientes, los cuales, junto con el Ni(NO₃)₂ fueron disueltos en agua y



ADSORCIÓN DE DIBENZOTIOFENO SOBRE SUPERFICIES DE Mo(W)S_2 , NiMo(W)S_2 Y NiMoWS USANDO LA TEORÍA DEL FUNCIONAL DE LA DENSIDAD

Maritza Elizabeth Cervantes-Gaxiola^a, Jaime Espino-Valencia^b y Perla B. Balbuena^c

^a Facultad de Ciencias Químico Biológicas, Universidad Autónoma de Sinaloa, Culiacán, Sinaloa, 80000, México. Email: mecg@uas.edu.mx

^b División de Estudios de Posgrado de la Facultad de Ingeniería Química, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, Edif. V1, Ciudad Universitaria, Morelia, Michoacán, 58060, México.

^c Department of Chemical Engineering, Texas A&M University, College Station, TX 77843, USA.

Resumen

En este trabajo se presenta un estudio comparativo de la adsorción del dibenzotiofeno (DBT) sobre superficies de Mo(W)S_2 , NiMo(W)S_2 y NiMoWS utilizando la Teoría del Funcional de la Densidad (TFD). Se estudiaron dos configuraciones de adsorción del DBT: paralela y plana; y el efecto del contenido del promotor en la energía de adsorción. Se analizaron los valores de la energía de adsorción y la densidad de estados de tipo d de las superficies antes y después de la adsorción del DBT con el fin de explicar el tipo de interacciones existentes entre el DBT y cada una de las superficies. Los resultados indicaron que la adsorción plana del DBT es energéticamente más favorable que la adsorción paralela y además, la superficie NiMoWS generó interacciones moderadas adecuadas para la HDS-DBT.

Introducción

La Teoría del Funcional de la Densidad (DFT) ha permitido el estudio de algunos factores importantes de los catalizadores destinados a hidrot ratamiento, entre estos factores se encuentran la localización y rol del promotor (Ni o Co), estructura electrónica, adsorción de compuestos de azufre sobre superficies catalíticas, rutas de reacción, entre otros [1]. Sin embargo, la mayoría de los estudios reportados respecto a la adsorción de compuestos de azufre sobre superficies de catalizadores se basan en superficies de MoS_2 y Ni(Co)MoS , y en compuestos de azufre tales como el tiofeno. Hasta el momento no existe ningún trabajo previo reportado en el que se considere la adsorción de compuestos de azufre sobre superficies catalíticas trimetálicas. Por lo que en el presente estudio se aborda la adsorción de dibenzotiofeno (DBT) sobre superficies de Mo(W)S_2 , NiMo(W)S_2 y NiMoWS , para elucidar las diferencias en el tipo de interacciones del DBT con dichas superficies.

Metodología

Los cálculos periódicos de *spin*-polarizado por la TFD fueron llevados a cabo utilizando el software “*Vienna ab initio simulation package (VASP)*” [2-5], en el cual las ecuaciones de Kohn-Sham son resueltas por algoritmos autoconsistentes. El funcional de intercambio-correlación fue descrito por la aproximación del gradiente generalizado (GGA por sus siglas en inglés) propuesto por Perdew, Burke y Ernzerhof (PBE) [6]. Para mejorar la eficiencia computacional, los pseudo potenciales de ondas aumentadas proyectadas (PAW por sus siglas en inglés) [7, 8] fueron aplicados a los electrones internos, mientras que los electrones de valencia fueron descritos por una base de ondas planas con una energía *cut-off* de 400 eV. Para los cálculos de las superficies la zona Brillouin fue dividida en $3 \times 4 \times 1$ puntos k Gamma en el espacio recíproco. El método de Methfessel-Paxton fue utilizado para determinar las ocupaciones de los electrones con un *smearing width* de 0.2 eV. Se estableció un criterio de convergencia para la relajación de la estructura de 0.02 eV/Å.

En este trabajo se estudio la adsorción del DBT sobre las superficies catalíticas de Mo(W)S_2 , NiMo(W)S_2 y NiMoWS para analizar las diferencias en sus interacciones, las superficies catalíticas de Mo(W)S_2 fueron consideradas para propósitos de comparación. Se analizó la superficie (100) de los catalizadores, ya que ha sido publicado que los sitios activos son los sitios coordinativamente