



**Benemérita
Universidad Autónoma de Puebla**

FACULTAD DE INGENIERÍA QUÍMICA

**“ADSORCIÓN SELECTIVA DE ALCANOS Y BTX EN SÍLICES
DOPADAS CON Cu”**

TESIS PROFESIONAL

Que para obtener el Título de:

Licenciatura en Ingeniería Ambiental

Presenta:

DIANA LEÓN ROMERO

Director de Tesis:

**DR. MIGUEL ÁNGEL
HERNÁNDEZ ESPINOSA**

Asesora de Tesis:

M.C. KARLA FABIOLA QUIROZ ESTRADA

Puebla, Pue. Agosto 2019





BUAP

Oficio No. FIQ/AC/052/2019
Asunto: Registro de Tema de Tesis

**C. DIANA LEÓN ROMERO
PASANTE DE LA LICENCIATURA
EN INGENIERÍA AMBIENTAL
P R E S E N T E:**

Por medio del presente me permito informarle, de la aprobación del Registro de Tema de Tesis de la Licenciatura en Ingeniería Ambiental cuyo título es el siguiente:

“Adsorción selectiva de alcanos y BTX en sílices dopadas con Cu”

Con el siguiente contenido:

INTRODUCCIÓN

CAPÍTULO 1	ANTECEDENTES
CAPÍTULO 2	METODOLOGÍA
CAPÍTULO 3	RESULTADOS Y DISCUSIÓN

**CONCLUSIONES
BIBLIOGRAFÍA**

Director de Tesis: Dr. Miguel Ángel Hernández Espinosa
Co-Directora de Tesis: M.C. Karla Fabiola Quiroz Estrada

Lo cual me permito comunicarle para su conocimiento y fines consiguientes aclarando que la vigencia de este tema será **ÚNICAMENTE POR UN AÑO.**

A T E N T A M E N T E
“Pensar Bien, Para Vivir Mejor”
H. Puebla de Z., a 04 de enero de 2019


M.I.C. MA. GPE. TITA VÁZQUEZ E. DE LOS MONTEROS
SECRETARIA ACADÉMICA

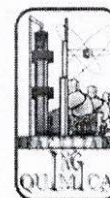


C.c.p. Director de Tesis: Dr. Miguel Ángel Hernández Espinosa
C.c.p. Co-Director de Tesis: M..C. Karla Fabiola Quiroz Estrada
C.c.p. Minutario Facultad de Ingeniería Química

CTAI01



**Benemérita Universidad
Autónoma de Puebla
FACULTAD DE INGENIERÍA QUÍMICA**



CIUDAD UNIVERSITARIA

**Mtro. Omar Gerardo Aguirre Ibarra
Director de la Administración Escolar
De la BUAP.
Presente**

ASUNTO:
**AUTORIZACIÓN
IMPRESIÓN DE TESIS**

Por este conducto me permito presentar a Ud. al C. pasante de la carrera de Ingeniería Ambiental

Diana León Romero

Quién presenta como tema de tesis:

“Adsorción selectiva de alcanos y BTX en sílices dopadas con Cu”

La cual ha sido debidamente revisada y se autoriza para su impresión correspondiente.

Sin otro particular y para los fines que se estimen conducentes reitero mi distinción.

ATENTAMENTE

“Pensar Bien, para Vivir Mejor”

H. Puebla de Z., a 21 de Agosto de 2019

Director de Tesis

Dr. Miguel Ángel Hernández Espinosa

...Tu título dirá Ambiental, tus tesis materiales pero tu corazón será Alimentos...

AGRADECIMIENTOS.

A mí por el tiempo y dedicación a lo largo del desarrollo a pesar de los altibajos que me ocasionaba, y esforzarme para continuar.

A mis padres Arq. Héctor León y Arq. Sofía Romero, a mi hermana Erika por su amor, el apoyo, paciencia, confianza y motivación durante todo el trayecto de mi vida. A mi familia que estuvo al pendiente en mis estudios.

A mis amigas y amigos, Faty, Lani, Cyn, Ira, Coral, Héctor por la motivación y apoyo que me otorgaron en los momentos de crisis, a Hugo, por estar en mis dudas, proporcionarme consejos y por todo, a Edgar por nada y por todo. A todos los amigos y amigas que conocí y estuvieron a lo largo del trayecto para hacer los momentos agradables.

A la M.C. Karla Quiroz por el apoyo, orientación, paciencia, tiempo y observaciones para desarrollar esta tesis.

Al Dr. Miguel Ánge Hernández, por el tiempo y las observaciones dadas durante este trabajo.

A todos los maestros que estuvieron a lo largo de mi experiencia académica.

Gracias...



CONTENIDO

INTRODUCCIÓN	1
OBJETIVOS	3
Objetivos específicos	3
HIPÓTESIS	3
CAPÍTULO 1. ANTECEDENTES	4
1.1. Contaminación del aire	4
1.2 Compuestos Orgánicos Volátiles (COVs).....	6
1.2.1. Efectos de los COVs en la salud y el medio ambiente	8
1.3. Regulación	17
1.4. Adsorción	19
1.5 Isotermas de adsorción.....	21
1.6 Modelos de equilibrio de isotermas de adsorción.....	26
1.6.1 Modelo de Langmuir.....	26
1.6.2 Modelo de Freundlich.....	27
1.6.3 Modelo de Dubinin.....	28
1.7 Calor isostérico de adsorción.....	29
1.8 Materiales porosos	29
1.8.1 Sílices	30
CAPÍTULO 2. METODOLOGÍA	32
2.1 Materiales:	32
2.2. Caracterización	32
2.2.1. Difracción de Rayos-X (DRX).....	32
2.2.2. Espectroscopia Infrarroja por Transformada de Fourier (FTIR-ATR)	33
2.2.3. Microscopia de Barrido Electrónico (SEM)	33
2.2.4. Adsorción de N ₂	33
2.3. Evaluación de la sílice para su capacidad de adsorción de COVs mediante cromatografía	34
2.3.1. Pruebas de adsorción por cromatografía de gases	34
CAPÍTULO 3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN	38



3.1. Caracterización	38
3.1.1. Difracción de Rayos-X.....	38
3.1.2. Espectroscopia Infrarroja por Transformada de Fourier	39
3.1.3. Microscopia Electrónica de Barrido.....	40
3.1.4. Adsorción de N₂.....	40
3.2. Evaluación de la capacidad de adsorción de BTX y alcanos.....	46
3.2.2. Isotermas de adsorción con el modelo Langmuir	55
3.2.3. Isotermas de adsorción con el modelo Freundlich	67
3.2.4. Isotermas de adsorción con el modelo Dubinin	80
3.3. Calor isostérico de Adsorción	93
CONCLUSIONES	99
REFERENCIAS	100



ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1. Efectos de los COVs.	9
Tabla 2. Compuestos Orgánicos Volátiles y sus características.	15
Tabla 3. Características de Quimisorción y Fisorción.	21
Tabla 4. Clasificación de isotermas según la IUPAC	22
Tabla 5. Tipos de Histéresis.	24
Tabla 6. Parámetros de adsorción presentes en la isoterma de Freundlich.	28
Tabla 7. Clasificación de los materiales porosos de acuerdo con la IUPAC.	29
Tabla 8. Clasificación del tamaño de microporos propuesta por la IUPAC.	30
Tabla 9. Temperaturas de las corridas.	37
Tabla 10. Parámetros texturales de SiO ₂	41
Tabla 11. Valores obtenidos a partir de D-A.	44
Tabla 12. Comparación de la capacidad de adsorción, 50 mmHg.	54
Tabla 13. Parámetros de la ecuación de Langmuir para la adsorción de los compuestos orgánicos volátiles (COVs) en SiO ₂ y Cu-SiO ₂ 2%.	64
Tabla 14. Parámetros de la ecuación de Langmuir para la adsorción de los compuestos orgánicos volátiles (COVs) en Cu-SiO ₂ 5 y 10%.	65
Tabla 15. Parámetros de la ecuación de Freundlich para la adsorción de los compuestos orgánicos volátiles (COVs) en SiO ₂ y Cu-SiO ₂ 2%.	76
Tabla 16. Parámetros de la ecuación de Freundlich para la adsorción de los compuestos orgánicos volátiles (COVs) en Cu-SiO ₂ 5 y 10%.	77
Tabla 17. Parámetros de la ecuación de Dubinin para la adsorción de los compuestos orgánicos volátiles (COVs) en SiO ₂ y Cu-SiO ₂ 2%.	88
Tabla 18. Parámetros de la ecuación de Dubinin para la adsorción de los compuestos orgánicos volátiles (COVs) en Cu-SiO ₂ 5% y 10%.	89
Tabla 19. Valores de los calores isostéricos de adsorción.	98



ÍNDICE DE FIGURAS

Fig. 1. Contaminación antropogénica	4
Fig. 2. Diagrama de interacciones de los contaminantes con los sistemas.	5
Fig. 3. Productos que liberan COVs.....	6
Fig. 4. Efecto invernadero por causa de los COVs	9
Fig. 5. Estructura del hexano.	11
Fig. 6. Estructura de heptano.....	11
Fig. 7. Estructura del octano.	11
Fig. 8. Estructura del benceno.	12
Fig. 9. Estructura tolueno.	13
Fig. 10. Estructuras del xileno a) <i>o</i> -xileno, b) <i>m</i> -xileno, c) <i>p</i> -xileno.	14
Fig. 11. Proceso de adsorción	20
Fig. 12. Representación gráfica de los diferentes tipos de isothermas de adsorción según la IUPAC	23
Fig. 13. Ciclos de histéresis	24
Fig. 14. Estructura amorfa de una sílice.....	31
Fig. 15. Esquema del proceso de cromatografía.....	35
Fig. 16. Diagrama de bloques del proceso.....	36
Fig. 17. Columnas.	36
Fig. 18. Difractograma de rayos X de las muestras Cu-SiO ₂ y SiO ₂	38
Fig. 19. Espectros IR de las muestras.	39
Fig. 20. Micrografías de Cu-SiO ₂ a) 100 μm, b) 10 μm y c) 0.1 μm.	40
Fig. 21. Isothermas de adsorción de Cu-SiO ₂ al 2, 5, 10% y sílice sin dopaje.	41
Fig. 22. Distribución de nanoporos, D-A.	43
Fig. 23. Distribución de tamaño de poro, BJH.....	45
Fig. 24. Isothermas de adsorción de Benceno, Tolueno, Xileno en Cu-SiO ₂ 2%. ...	46
Fig. 25. Isothermas de adsorción de Benceno, Tolueno, Xileno en Cu-SiO ₂ 5%. ...	47
Fig. 26. Isothermas de adsorción de Benceno, Tolueno, Xileno en Cu-SiO ₂ 10%. .	48
Fig. 27. Isothermas de adsorción de Benceno, Tolueno, Xileno en SiO ₂	49
Fig. 28. Isothermas de adsorción de Hexano, Heptano y Octano en Cu-SiO ₂ 2%. .	50
Fig. 29. Isothermas de adsorción de Hexano, Heptano y Octano en Cu-SiO ₂ 5%. .	51
Fig. 30. Isothermas de adsorción de Hexano, Heptano y Octano en Cu-SiO ₂ 10%. .	52
Fig. 31. Isothermas de adsorción de Hexano, Heptano y Octano en SiO ₂	53
Fig. 32. Isothermas de adsorción con el modelo Langmuir de Benceno, Tolueno, Xileno en Cu-SiO ₂ 2%.	56
Fig. 33. Isothermas de adsorción con el modelo Langmuir de Hexano, Heptano y Octano en Cu-SiO ₂ 2%.	57
Fig. 34. Isothermas de adsorción con el modelo Langmuir de Benceno, Tolueno, Xileno en Cu-SiO ₂ 5%.	58



Fig. 35. Isotermas de adsorción con el modelo Langmuir de Hexano, Heptano y Octano en Cu-SiO ₂ 5%.....	59
Fig. 36. Isotermas de adsorción con el modelo Langmuir de Benceno, Tolueno y Xileno en Cu-SiO ₂ 10%.	60
Fig. 37. Isotermas de adsorción con el modelo Langmuir de Hexano, Heptano, Octano en Cu-SiO ₂ 10%.....	61
Fig. 38. Isotermas de adsorción con el modelo Langmuir de Benceno, Tolueno, Xileno en SiO ₂	62
Fig. 39. Isotermas de adsorción con el modelo Langmuir de Hexano, Heptano y Octano en SiO ₂	63
Fig. 40. grafico de R _L para los 24 puntos de cada una de las sílices.	66
Fig. 41. Grafico de <i>am</i> obtenido por el ajuste de Lagmuir.....	67
Fig. 42. Isotermas de adsorción de Benceno, Tolueno y Xileno en Cu-SiO ₂ 2% con el modelo Freundlich.....	68
Fig. 43. Isotermas de adsorción de Hexano, Heptano y Octano en Cu-SiO ₂ 2% con el modelo Freundlich.....	69
Fig. 44. Isotermas de adsorción de Benceno, Tolueno, Xileno en Cu-SiO ₂ 5% con el modelo Freundlich.....	70
Fig. 45. Isotermas de adsorción de Hexano, Heptano y Octano en Cu-SiO ₂ 5% con el modelo Freundlich.....	71
Fig. 46. Isotermas de adsorción de Benceno, Tolueno, Xileno en Cu-SiO ₂ 10% con el modelo Freundlich.....	72
Fig. 47. Isotermas de adsorción de Hexano, Heptano y Octano en Cu-SiO ₂ 10% con el modelo Freundlich.	73
Fig. 48. Isotermas de adsorción de Benceno, Tolueno y Xileno en SiO ₂ con el modelo Freundlich.....	74
Fig. 49. Isotermas de adsorción de Hexano, Heptano y Octano en SiO ₂ con el modelo Freundlich.....	75
Fig. 50. Grafico de R _f para los 24 resultados, obtenidos de cada sílice con el modelo Freundlich.....	78
Fig. 51. Grafico de <i>n</i> para los 24 resultados, obtenidos de cada sílice con el modelo Freundlich.....	79
Fig. 52. Isotermas de adsorción de Benceno, Tolueno y Xileno en Cu-SiO ₂ 2% con el modelo de Dubinin.	80
Fig. 53. Isotermas de adsorción de Hexano, Heptano y Octano en Cu-SiO ₂ 2% con el modelo Dubinin.	81
Fig. 54. Isotermas de adsorción de Benceno, Tolueno y Xileno en Cu-SiO ₂ 5% con el modelo de Dubinin.	82
Fig. 55. Isotermas de adsorción de Hexano, Heptano y Octano en Cu-SiO ₂ 5% con el modelo Dubinin.	83



Fig. 56. Isotermas de adsorción de Benceno, Tolueno y Xileno en Cu-SiO ₂ 10% con el modelo de Dubinin.....	84
Fig. 57. Isotermas de adsorción de Hexano, Heptano y Octano en Cu-SiO ₂ 10% con el modelo de Dubinin.....	85
Fig. 58. Isotermas de adsorción de Benceno, Tolueno y Xileno en SiO ₂ con el modelo de Dubinin.	86
Fig. 59. Isotermas de adsorción de Hexano, Heptano y Octano en SiO ₂ con el modelo de Dubinin.	87
Fig. 60. Gráfico de R para los 24 resultados, obtenidos de cada sílice con Dubinin.	90
Fig. 61. Grafico de -E para los 24 resultados, obtenidos de cada sílice con Dubinin.	91
Fig. 62. Gráfico de W para los 24 resultados, obtenidos de cada sílice con Dubinin.	92
Fig. 63. Gráfico de a para los 24 resultados, obtenidos de cada sílice con Dubinin.	93
Fig. 64. Calor Isostérico de Adsorción del Benceno.....	94
Fig. 65. Calor Isostérico de Adsorción del Tolueno.....	95
Fig. 66. Calor Isostérico de Adsorción del Xileno.....	95
Fig. 67. Calor Isostérico de Adsorción del Hexano.	96
Fig. 68. Calor Isostérico de Adsorción del Heptano.	96
Fig. 69. Calor Isostérico de Adsorción del Octano.	97



INTRODUCCIÓN

Actualmente la contaminación atmosférica es un tema importante que debe atenderse, debido a que las numerosas actividades y procesos que se llevan a cabo hoy en día generan niveles considerables de contaminantes atmosféricos. Estos son producidos por fuentes antropogénicas y naturales. Las primeras incluyen todas aquellas causadas por la acción humana, procesos urbanos e industriales mientras que las fuentes naturales, son todos los procesos que ocurren de forma natural como erupciones volcánicas las cuales son inevitables.

La mayor fuente de contaminación atmosférica se da por el gran uso de los combustibles fósiles, de los cuales se pueden obtener, compuestos orgánicos volátiles (COVs), óxidos de nitrógeno (NOx), óxidos de azufre (SOx) y vapor de agua. Siendo los COVs los más problemáticos, debido a su estabilidad como molécula [1], y a que son difíciles de incorporar dentro de un ciclo biogeoquímico causando así efectos impactantes tanto para la salud y el medio ambiente.

Los COVs en conjunto con los NOx y la luz solar, son precursores del ozono troposférico O₃, que es perjudicial para la salud provocando daños respiratorios. Se puede producir el llamado smog fotoquímico que en concentraciones elevadas puede provocar daños en la salud humana, la vegetación y los ecosistemas, siendo además un factor importante para considerar respecto al cambio climático y causando así una mala calidad de vida. Entre los compuestos que encontramos generados mediante automóviles, industrias y solventes se encuentran alcanos, alquenos, formaldehído, acetileno, y algunos compuestos aromáticos como el benceno, etilbenceno y tolueno, entre otros [1].

La exposición de COVs genera muchos efectos en la salud desde irritación, náuseas, mareos, hasta dolores de cabeza, pérdida de coordinación y en otros casos puede desarrollarse problemas en el hígado, riñón y el sistema nervioso central. Algunos compuestos orgánicos pueden causar cáncer en animales, mientras que otros pueden causarlo directamente en humanos debido a la



exposición, tan solo en México se generan 12 millones de toneladas anuales de COVs de acuerdo al inventario nacional de compuestos orgánicos volátiles en 2015 por la INEEC (Instituto Nacional de Ecología y cambio climático) [2], por lo que el querer contrarrestar la cantidad de estos compuestos de la atmosfera, nos lleva a buscar alternativas de ciertos procesos que ayuden a realizar esta tarea.

Se sabe que existen materiales capaces de filtrar aires mediante procesos de adsorción, debido a la porosidad de dimensiones específicas de ciertos materiales que son usados como adsorbentes selectivos. Estos materiales pueden ser carbones activados, zeolitas y sílices microporosas [3]. Diversos grupos de trabajo han desarrollado investigaciones acerca del uso de sílices amorfas [3] [4], como adsorbentes de COVs.

En esta tesis se analiza el problema de contaminación atmosférica y los efectos que desarrollan los compuestos orgánicos volátiles en el ambiente y la salud humana. Estos compuestos pueden tener una reacción fotoquímica para crear ozono, produciendo el efecto invernadero. Creando así la necesidad de disminuir su concentración en la atmosfera por lo que en esta tesis se presenta un estudio comparativo de adsorción selectiva de compuestos como alcanos (C_6-C_8) y BTX (benceno, tolueno y xileno) en sílices dopadas de Cu (cobre) en diferentes concentraciones (2, 5 y 10%) en comparación de una sílice sin dopaje, evaluadas mediante cromatografía de gases.



OBJETIVOS

Determinar la capacidad de adsorción de compuestos orgánicos volátiles, benceno, tolueno, xileno, hexano, heptano y octano en sílices dopadas con Cu a concentraciones de 2, 5 y 10 % (m/m).

Objetivos específicos

- Caracterizar las sílices por diferentes metodologías, tales como Espectroscopia Infrarroja por Transformada de Fourier (FTIR-ATR), Difracción de Rayos-X (DRX), Microscopía Electrónica de Barrido (SEM) y adsorción de N₂ a 77 K.
- Realizar los experimentos de adsorción de BTX y alcanos (C₆-C₈) en sílices dopadas con Cu por cromatografía de gases.
- Comparar la eficiencia de las sílices dopadas y una sílice sin dopaje una vez obtenidos los resultados de adsorción.
- Evaluar el comportamiento de las interacciones energéticas entre las sílices y los compuestos en estudio por medio del calor isostérico de adsorción (qst).

HIPÓTESIS

El uso de sílices microporosas dopadas con Cu, aumentará la capacidad de adsorción de BTX y C₆-C₈ con el incremento de la concentración del dopaje respecto a la sílice sin dopar.



CAPÍTULO 1. ANTECEDENTES

1.1. Contaminación del aire

Se define como contaminación al cambio indeseable en las características físicas, químicas y/o biológicas del aire, el agua o el suelo que pueden afectar de manera adversa la salud la supervivencia o las actividades de los humanos o de otros organismos [5]. El incremento de la población en conjunto con los avances tecnológicos y los desechos originados por la quema de combustibles fósiles y otras emisiones gaseosas y particuladas de tipo antropogénico o naturales, trae consigo un incremento de la contaminación del aire (Figura 1).



Fig. 1. Contaminación antropogénica [6].

La principal causa de la contaminación del aire es el uso de combustibles fósiles, aunque no es un fenómeno nuevo, su historia parte de cuando el hombre comienza a hacer uso del fuego para cocinar sus alimentos, protegerse del frío, y agruparse en comunidades, ocasionando así la liberación de contaminantes a la atmósfera. Durante el último siglo, por el descubrimiento de nuevos combustibles, productos y procesos, trajo consigo un grupo nuevo de contaminantes del aire,



entre los que se encuentran los compuestos orgánicos volátiles COVs. La mayor parte de los problemas de contaminación hoy en día, son por el resultado de las actividades industriales y los medios de transporte. [7]. Se vuelve una complejidad el estudio de la contaminación del aire porque afecta a todos los sistemas, el aire, el agua y el suelo (Figura 2). La situación ambiental se agrava conforme la variedad y cantidad de contaminantes que se depositan en los diferentes sistemas, mientras que la capacidad de estos sistemas (aire, agua y suelo) para asimilarlos es limitada [8].

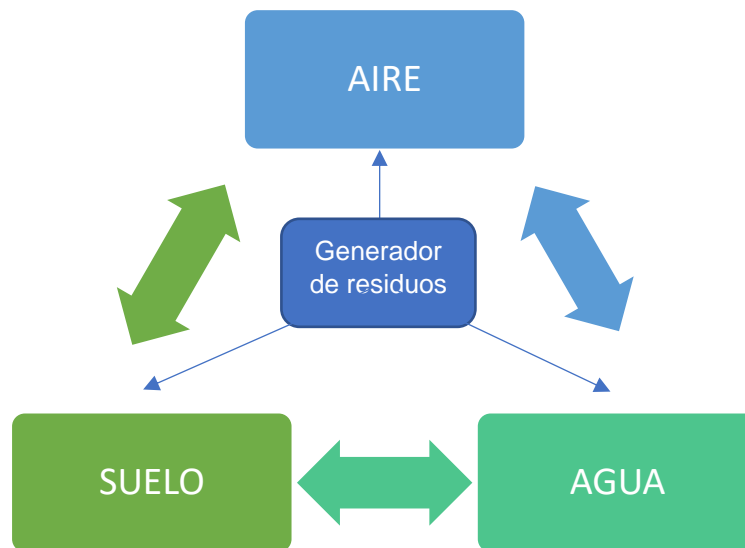


Fig. 2. Diagrama de interacciones de los contaminantes con los sistemas.

Se sabe que las personas que habitan en ciudades altamente contaminadas tienen más probabilidades de padecer cáncer u otras enfermedades crónicas degenerativas [8]. El estudio de la contaminación atmosférica se ha desarrollado a partir de que representa el mayor riesgo ambiental para la salud, ya que afecta todas las regiones, entornos, grupos socioeconómicos y todas las edades, aunque existen diferencias en la exposición a la contaminación [9].



1.2 Compuestos Orgánicos Volátiles (COVs)

La importancia de los COVs generados por la actividad humana en la química atmosférica fue establecida en los años 50 por Haagen-Smit en sus estudios pioneros sobre el smog de Los Ángeles, donde se identificó el papel clave de la oxidación de estos compuestos en presencia de luz solar y óxidos de nitrógeno, como una fuente de ozono y otros oxidantes. A raíz de estos estudios, el smog fotoquímico se ha detectado en las grandes ciudades a niveles que sobrepasan los valores establecidos de protección a la salud humana [2].

La Agencia de Protección Ambiental U.S., (por sus siglas en inglés, EPA) define a los COVs como compuestos químicos orgánicos cuya composición permite que se evaporen bajo condiciones atmosféricas normales de temperatura y presión. Tomando en cuenta a cualquier compuesto de carbono, excluyendo monóxido de carbono (CO), dióxido de carbono (CO₂), ácido carbónico (HO-(CO)-OH), carburos metálicos o carbonatos (CO²⁻) y carbonato de amonio (NH₄)₂CO₃, que participa en reacciones fotoquímicas atmosféricas, excepto aquellas designadas por la EPA como las que tienen una reactividad fotoquímica insignificante [10].

Los COVs son líquidos o sólidos que contienen carbón orgánico (carbón unido a carbón, hidrogeno, nitrógeno, o Sulfuros), con un numero de átomos de carbono entre 2 y 12 [7], liberados por la quema de combustibles, como gasolina, madera, carbón o gas natural. También son liberados por disolventes, pinturas, pegamentos, cosméticos y otros productos (Figura 3) ya sea al emplearlos o durante su almacén en los hogares y centros de trabajo [11].



Fig. 3. Productos que liberan COVs [12].



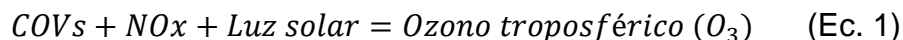
La volatilidad de un compuesto es generalmente más alta cuanto más baja es la temperatura de ebullición, la volatilidad de los compuestos orgánicos a veces se define y clasifica por sus puntos de ebullición.

La Organización Mundial de la Salud (OMS) clasifica los contaminantes orgánicos en interiores por la facilidad con que se emitirán como:

- Compuestos Orgánicos muy Volátiles (VVOCs).
- Compuestos Orgánicos Volátiles (COVs).
- Compuestos Orgánicos Semivolátiles (SVOCs).

Cuanto más alta sea la volatilidad (más bajo el punto de ebullición), más probabilidades habrá de que el compuesto sea emitido desde un producto o superficie hacia el aire. Los compuestos orgánicos muy volátiles son tan volátiles que son difíciles de medir y se encuentran casi completamente como gases en el aire en lugar de existir en materiales o en superficies [12].

Los COVs agrupan compuestos químicos como los hidrocarburos alifáticos, aldehídos, aromáticos, cetonas, éteres, ácidos y alcoholes [10]. La acumulación de estas sustancias tóxicas genera una nube gris conocida como smog industrial o fotoquímico [11]. Para que ocurra esto último se deben cumplir ciertas condiciones meteorológicas. El smog fotoquímico es conformado, entre otras especies, por el ozono troposférico (O_3), que es un gas que se forma en la atmósfera mediante una serie de complejas reacciones [13]. La concentración de ozono troposférico existente en una determinada localidad depende de varios factores, entre los que destacan la cantidad de dióxido de nitrógeno (NO_2), cantidad y tipo de COVs e intensidad de la radiación solar. La formación de ozono troposférico es un ciclo químico dado cuando la luz solar descompone el dióxido de nitrógeno (NO_2), en monóxido de nitrógeno (NO) y oxígeno (O), el cual se une con el oxígeno del aire (O_2) para formar ozono (O_3), resumiéndose en la siguiente relación [13]:





Este ciclo natural se cierra cuando el ozono reacciona con el monóxido de nitrógeno y forma de nuevo dióxido de nitrógeno y oxígeno del aire. El equilibrio que tiene el ciclo del ozono, puede alterarse por la presencia de COVs, que compiten con el ozono por el monóxido de nitrógeno disponible, de tal manera que parte del ozono puede permanecer sin reaccionar y acumularse en la atmósfera. Se tiene conocimiento que la mayoría de los COVs participan en la alteración del ciclo mencionado, con excepción de especies como el metano y los clorofluorocarbonos [2] [14].

1.2.1. Efectos de los COVs en la salud y el medio ambiente

El ozono que se encuentra a nivel de la tropósfera produce efectos perjudiciales en la salud, como problemas respiratorios y cambios en la función pulmonar que van precedidos por irritación de ojos y mareos [15].

Los efectos de los COVs sobre la salud humana dependen del compuesto y su grado de toxicidad, así como de la exposición, ya sea por inhalación, ingestión o contacto con la piel, esto a largo plazo puede causar lesión de hígado, riñones, sistema nervioso central y cáncer. A corto plazo puede causar irritación de ojos y vías respiratorias, dolor de cabeza, mareo, trastornos visuales, náuseas, fatiga, alergias [16]. Las enfermedades del sistema respiratorio se correlacionan generalmente con la contaminación atmosférica. La estructura y el funcionamiento del sistema respiratorio puede ser seriamente alterada por los contaminantes atmosféricos [3]. Los compuestos aromáticos están clasificados como carcinogénicos y mutagénicos. El grupo de hidrocarburos: benceno, tolueno, etilbenceno y los xilenos (denominados como BTEX), son considerados como altamente tóxicos, por lo que se recomienda el monitoreo continuo, para evaluar el riesgo al ambiente y a la salud humana [2].

Los contaminantes del aire afectan las condiciones atmosféricas provocando reducción de la visibilidad, formación de niebla, precipitación, disminución de la



radiación solar y alteración de la temperatura y distribución de vientos, provocando el fenómeno de efecto invernadero (Figura 4) [3].

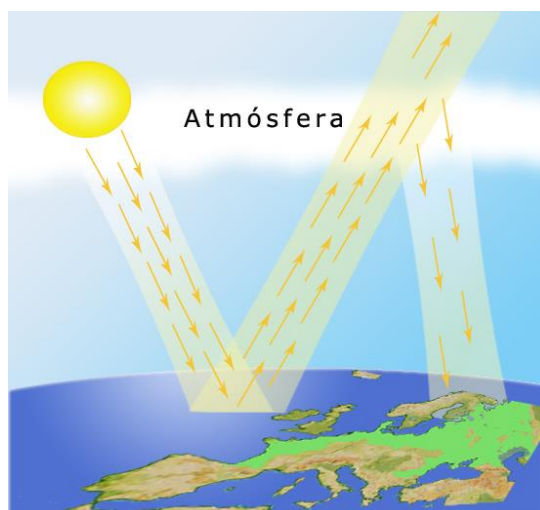


Fig. 4. Efecto invernadero por causa de los COVs [3].

En la tabla 1 se muestran los efectos que pueden causar los COVs en la salud y medio ambiente.

Tabla 1. Efectos de los COVs.

Salud	Medio Ambiente
Efectos tóxicos o cancerígenos	Agotamiento de ozono troposférico si contienen cloro o bromo en su estructura, los procesos de fotólisis pueden conducir a la liberación de compuestos desencadenantes de la destrucción de ozono [16].
Lesión de hígado riñones, sistema nervioso central	Potenciación del efecto invernadero global. Si los COVs que se acumulan en la troposfera absorben la radiación infrarroja pueden potenciar el efecto invernadero [16].



Irritación de ojos y vías respiratorias, dolor de cabeza, mareo, trastornos visuales, náuseas, fatiga, alergias.

Formación fotoquímica de ozono troposférico, irritación de ojos y vías respiratorias, dolor de cabeza, mareo, trastornos visuales, náuseas, fatiga, alergias [16].

Acumulación y persistencia en el ambiente. Algunos COVs, superan los procesos de oxidación y se vuelven persistentes, siendo adsorbidos sobre partículas y transportados a largas distancias [16].

1.2.2. Alcanos

Los alcanos son moléculas orgánicas no polares, por lo que se disuelven en disolventes orgánicos poco polares, son hidrófobos. Sus puntos de ebullición aumentan conforme aumenta la cantidad de átomos de carbono y a medida que aumentan las masas moleculares. Las moléculas más grandes tienen áreas superficiales más grandes, generando atracciones intermoleculares de Van der Waals en mayor cantidad. Por lo que, una molécula grande, con mayor área superficial y atracciones de Van der Waals, tienen una temperatura de ebullición muy elevada [9] [17].

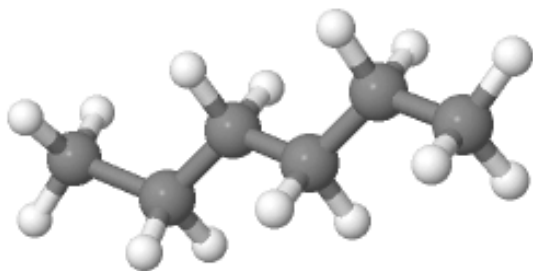


Fig. 6. Estructura del hexano.

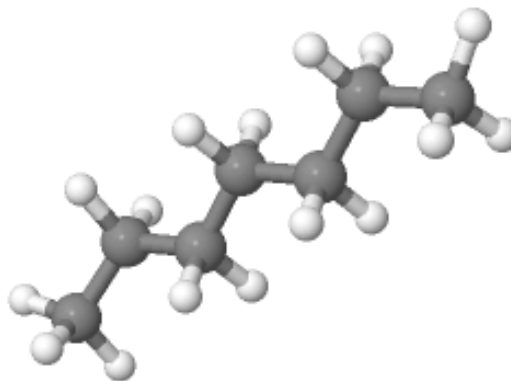


Fig. 7. Estructura de heptano.

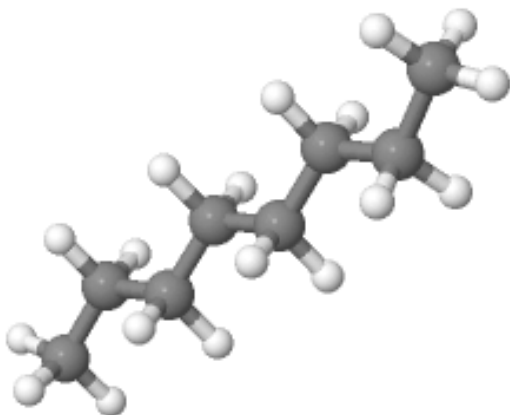


Fig. 5. Estructura del octano.

Los alcanos C_6 - C_8 que son los que se trabajan en esta investigación, son líquidos volátiles que fluyen libremente. Los isómeros del pentano, hexano (Figura 5), heptano (Figura 6) y octano (Figura 7), son los compuestos principales de la gasolina.



1.2.3. Aromáticos

Los compuestos aromáticos son parte de los COVs, característicos por ser compuestos cíclicos altamente estables. Entre los que se encuentran el benceno, tolueno y *p*-xileno.

Benceno

En primer lugar, el benceno es un anillo de seis átomos de carbono con hibridación sp^2 , cada uno unido a un átomo de hidrogeno. Todos los enlaces carbono-carbono tienen la misma longitud y todos los ángulos son exactamente de 120° . Cada átomo de carbono sp^2 tiene un orbital p que no está hidratado y que es perpendicular al plano del anillo y seis electrones ocupan este círculo de orbitales p [18], su estructura puede observarse en la figura 8.

La EPA ha clasificado al benceno como un carcinógeno humano conocido por todas las vías de exposición [10].

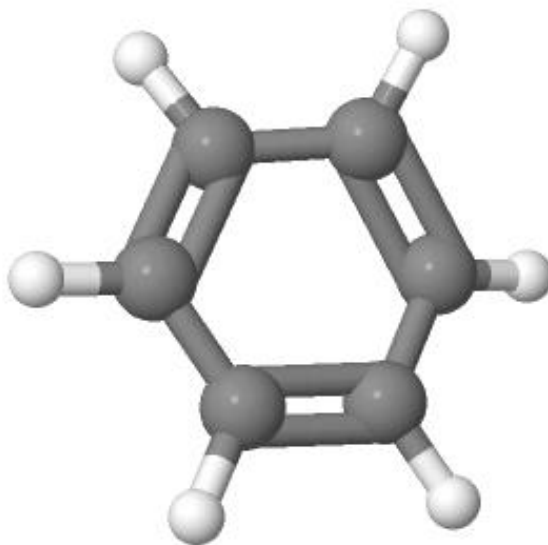


Fig. 8. Estructura del benceno.



Tolueno

También conocido como metilbenceno es un líquido incoloro, olor aromático agradable. Su estructura consta de un anillo aromático y un grupo metilo (Figura 9). Es soluble en alcohol, benceno y éter, insoluble en agua, inflamable, tóxico por ingestión, inhalación y absorción por la piel, normalmente es usado como solvente de pinturas y recubrimientos, gomas, resinas, la mayoría de los aceites, hule, vinil, diluyente y thinner en lacas de nitrocelulosa; intermedio químico (ácido benzoico, sacarina, medicinas, perfumes); fuente de tolueno de diisocianato (resinas de poliuretano); explosivos (TNT), toluensulfonato (detergentes) [19].

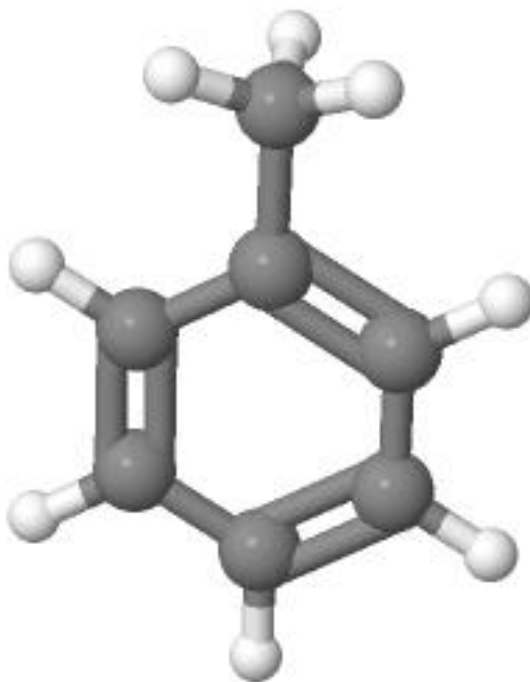


Fig. 9. Estructura tolueno.

Xileno

Finalmente, el xileno es un líquido incoloro, formado por la mezcla de los isómeros, *orto*, *meta* y *para* xileno (Figura 10) inflamable; de olor aromático,



insoluble en agua, soluble en alcohol y éter; se usa como disolvente en la imprenta y en las industrias de caucho y cuero. También se usa como agente de limpieza, diluyente de pintura y barnices. Pequeñas cantidades se encuentran en el combustible de aviones y en la gasolina [20].

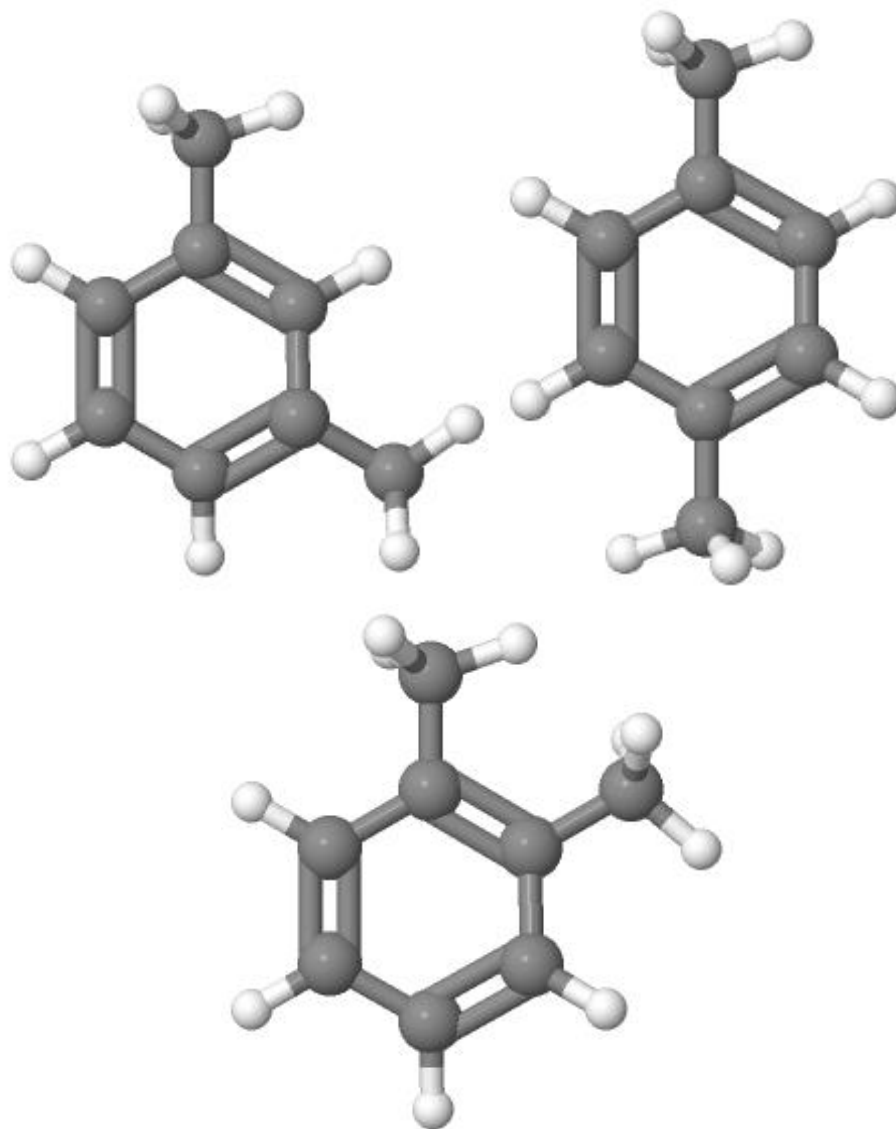


Fig. 10. Estructuras del xileno a) *o*-xileno, b) *m*-xileno, c) *p*-xileno.



Características del xileno:

- El xileno se evapora rápidamente al aire desde el suelo y aguas superficiales.
- En el aire, es degradado a sustancias menos perjudiciales por la luz solar en unos pocos días.
- En el suelo y el agua es degradado por microorganismos.
- Una pequeña cantidad se acumula en plantas, peces, mariscos y en otros animales que viven en agua contaminada con xileno

En la tabla 2 se muestran las propiedades físicas y características de los compuestos BTX y alcanos C₆-C₈.

Tabla 2. Compuestos Orgánicos Volátiles y sus características.

COV	Formula	P.M. ($\frac{g}{mol}$)	P.E. (°C)	σ Diámetro cinético (nm)	Características
Benceno	C ₆ H ₆	78.11	80.1	0.65	-Líquido incoloro de olor característico; -Sustancia tóxica que puede generar problemas muy graves a la salud
Tolueno	C ₇ H ₈	92.13	110	0.65/0.89	-Líquido incoloro, olor aromático agradable. -Soluble en alcohol, benceno y éter, insoluble en agua, inflamable, tóxico por ingestión, inhalación y absorción por la piel.



Xileno	C_8H_{10}	106.2	144	0.98/1.05	-Líquido incoloro, inflamable; de olor aromático, insoluble en agua, soluble en alcohol y éter.
Hexano	C_6H_{14}	86.17	68	0.43	-Líquido incoloro con ligero olor a gasolina, altamente inflamable, volátil, soluble en alcohol, acetona y éter. - Disolvente para algunas pinturas, procesos químicos y para quitar etiquetas.
Heptano	C_7H_{16}	100.21	98.42	0.43	-Líquido incoloro con olor característico de las gasolinas. Entre los límites inferior y superior, los vapores forman mezclas explosivas. -Exposiciones prolongadas puede causar daños en sangre, hígado, riñón y cardiovasculares. -Puede causar: efectos narcóticos o anestésicos, edema pulmonar, bronquitis, inflamación de



					los pulmones, efectos en el sistema nervioso periférico, efectos similares a una intoxicación y debilidad.
Octano	C_8H_{18}	114.22	125	0.43	-Líquido incoloro, de olor característico. -Reacciona con oxidantes fuertes originando riesgo de incendio y explosión -La exposición a altas concentraciones del vapor podría causar disminución de la consciencia

El proceso de adsorción es un método por el cual se capturarán las moléculas de estos compuestos para poder ser disminuidos de la atmosfera, este proceso es llevado a cabo mediante materiales porosos como son las sílices.

1.3. Regulación

Además de ser precursores de la formación de ozono y otros oxidantes, los COVs son de preocupación debido a su alta toxicidad ocasionando efectos crónicos en la salud por ser cancerígenos, hematológicos, genotóxicos, inmunológicos y neurológicos. Son comúnmente encontrados en el ambiente y su presencia aún en bajas concentraciones son un riesgo para la salud. El benceno ha sido identificado como un cancerígeno humano por la Agencia Internacional para la Investigación sobre el Cáncer (International Agency for Research on Cancer) [21] [2].



En 1999 en Europa, se estableció la Directiva 1999/13/CE para limitar emisiones de COVs por el uso de disolventes orgánicos en actividades de limpieza en seco, fabricación de calzado, imprenta, procesos de recubrimiento, acabado de vehículos, entre otros [16].

En Hong Kong el control de emisión de COVs se da a partir de abril de 2007, con la implementación de: la Regulación para el control de contaminación del aire y en 2009 se modificó para extender el control a más productos, lo que fue: Pinturas y recubrimientos en uso arquitectónico, taller automotriz, embarcaciones, tintas para imprimir, adhesivos y selladores, productos de consumo amplio [16].

El estado de California en EUA cuenta con una regulación más estricta y completa en cuanto a límites de contenido de COVs en productos, por lo que otros estados de EUA también han adoptado esta regulación. Los productos regulados son:

- Anti aspirantes y desodorantes. Aprobada en 1989, aplicada en 1991. Última actualización en 2005.
- Productos de consumo. Aprobada en 1990, aplicada en 1991. Última actualización en 2009.
- Productos de aerosol para recubrimiento (36 categorías). Aprobada en 1995, aplicada en 1996. Última actualización en 2009.

En los últimos años, el Instituto Nacional de Ecología y Cambio Climático realizó estudios en varias zonas industrializadas y urbanas de México, determinando la caracterización de COVs. Los resultados de estos estudios indican concentraciones de benceno que se encuentran arriba de los niveles máximos recomendados por organizaciones internacionales como la OMS y criterios de calidad del aire establecidos para COVs en otros países [2].



México carece de un programa continuo y de amplia cobertura en materia de compuestos tóxicos en el ambiente [16], siendo que para los compuestos orgánicos volátiles solo se cuenta con la **NOM-121-semarnat-1997**. Para fuentes fijas, que establece los límites máximos permisibles de emisión a la atmósfera de compuestos orgánicos volátiles provenientes de las operaciones de recubrimiento de carrocerías nuevas en planta de automóviles, unidades de uso múltiple, de pasajeros y utilitarios; carga y camiones ligeros, así como el método para calcular sus emisiones [22] y la **NOM-123-semarnat-1998**, Que establece el contenido máximo permisible de compuestos orgánicos volátiles en la fabricación de pinturas de secado al aire base disolvente para uso doméstico y los procedimientos para la determinación del contenido de los mismos en pinturas y recubrimientos. Pero no son suficientes para regular [23] [16].

En Puebla se encuentran estaciones de monitoreo atmosférico ubicadas en diferentes puntos de la ciudad, como lo son en el Benemérito Instituto Normal del Estado, el Parque de las Ninfas, Agua Santa, la Universidad Tecnológica de Puebla UTP y en el Velódromo en Coronango. Estas evalúan PM_{10} , $PM_{2.5}$, O_3 , SO_2 , NO_2 y CO en las zonas, para después compararlos con los límites normados [6]. Aunque no hay un monitoreo como tal de COVs, en estas estaciones se monitorea el O_3 que como se mencionó anteriormente este es un contaminante secundario formado por una reacción fotoquímica de los COVs y NO_x . La NOM-020-SSA1-2014, en materia de salud ambiental que establece los valores límites permisibles para la concentración de ozono (O_3) en el ambiente y criterios para su evaluación, menciona una exposición de 8 horas menor a 0.075ppm de O_3 [24].

1.4. Adsorción

La adsorción es el enriquecimiento de átomos iones o moléculas sobre la superficie de un sólido (Figura 11). La superficie de los sólidos es una región responsable de este proceso, y condiciona sus propiedades en función del tipo de



enlace que se forma. Los átomos que se encuentran en ella no tienen las fuerzas de cohesión compensadas, como ocurre en los átomos situados en el seno del sólido que es en definitiva responsable de las propiedades de adsorción de los sólidos [25].

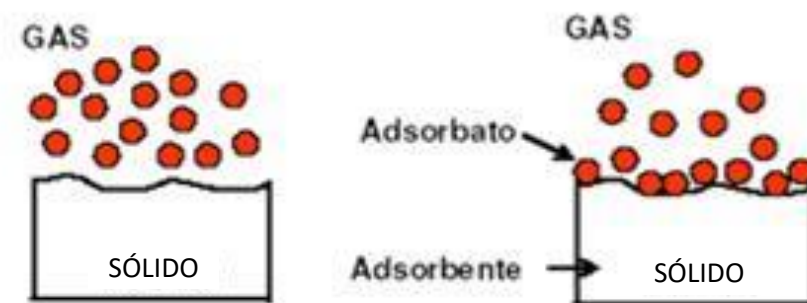


Fig. 11. Proceso de adsorción [26].

El fenómeno de la adsorción se debe a la existencia de un exceso de energía libre de la superficie. Y esto a su vez depende de las propiedades termodinámicas de la superficie y de la malla cristalina del cuerpo sólido que se ocupará como adsorbente. La superficie de un cuerpo sólido, a diferencia de la malla cristalina en el volumen, se caracteriza por la existencia de niveles insaturados de electrones. El grado relativo de insaturación de la superficie determina el tipo de enlace que surge entre la partícula adsorbida y la superficie. Es por esto que existen dos tipos de adsorción. La adsorción física o fisorción es donde las moléculas están unidas a la superficie por fuerzas físicas, por lo que no destruye la composición del adsorbato y es un proceso reversible. La adsorción química o quimisorción implica un enlace químico entre el adsorbato y el material adsorbente. Por lo que se considera a este tipo de adsorción como irreversible [27]. En la tabla 3 se muestran las características de la quimisorción y la fisorción.



Tabla 3. Características de quimisorción y fisisorción.

	Quimisorción	Fisisorción
Tipos de enlace	Covalente	Fuerzas de Van der Waals
Intervalo de temperatura	limitado	Cerca de la condensación del gas
Entalpia de adsorción	40-800 kJ/mol	5 kJ/mol
Tipo de adsorción	irreversible	No dispositiva, reversible
Saturación	Monocapa	Multicapa

Las características principales de la adsorción son:

- Es altamente selectiva.
- Es un proceso rápido cuya velocidad aumenta cuando aumenta la temperatura, pero disminuye cuando aumenta la cantidad adsorbida.
- Es un proceso espontáneo, es decir, que ΔG es negativa.
- Dado que los procesos de adsorción son generalmente exotérmicos, al aumentar la temperatura disminuye la cantidad adsorbida.

1.5 Isotermas de adsorción

Las isotermas de adsorción son descripciones gráficas del equilibrio de sorción (retención de una sustancia por otra cuando están en contacto) para la adsorción de un componente único o de intercambio iónico binario [28] proporcionando información de la cantidad de gas adsorbido en los poros del material adsorbente como una función de la presión externa del gas.

Las isotermas se clasifican, según la IUPAC (Unión Internacional de Química Pura y Aplicada por sus siglas en inglés), en seis tipos, como se menciona en la tabla 4 y se muestran en la figura 12 [29] [30]:



Tabla 4. Clasificación de isothermas según la IUPAC

Isoterma	Características
Tipo I	Están dadas por sólidos microporosos con superficies externas relativamente pequeñas
Tipo II	Se dan por la fisisorción de la mayoría de gases en adsorbentes no porosos o macroporosos, lo que permite que a altas p/p^0 exista una adsorción multimolecular sin restricciones.
Tipo III	Son isothermas poco comunes que suceden en sólidos no porosos o macroporosos cuyas interacciones adsorbente-adsorbato son débiles.
Tipo IV	Ocurre en adsorbentes mesoporosos como geles de óxidos, adsorbentes industriales y tamices moleculares mesoporosos.
Tipo V	Describe el llenado de agua de adsorbentes hidrófobos microporosos y mesoporosos con interacciones débiles de adsorbente-adsorbato, Ejemplo: H ₂ O-Carbón.
Tipo VI	Son isothermas relativamente raras, asociadas a la adsorción de capa por capa en superficies altamente uniformes. Los mejores ejemplos se dan con Kr y Ar en materiales como carbono grafitizado negro a bajas temperaturas, Materiales MCM y algunas zeolitas como las MFI y LTA.

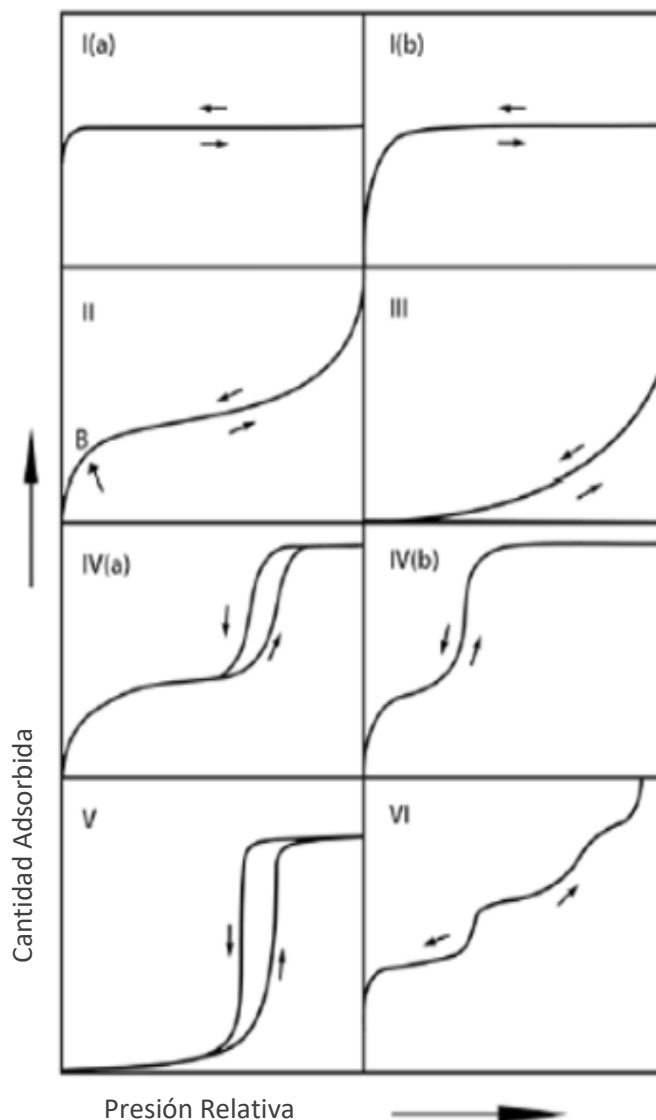


Fig. 12. Representación gráfica de los diferentes tipos de isothermas de adsorción según la IUPAC [31].

Aunque desde 1985 se han reportado distintas formas de ciclos de histéresis y se identificaron 4, debido a nuevos descubrimientos los tipos principales de ciclos de histéresis se extendieron a 6 [30], mostrados en la tabla 5 y representados en la figura 13.

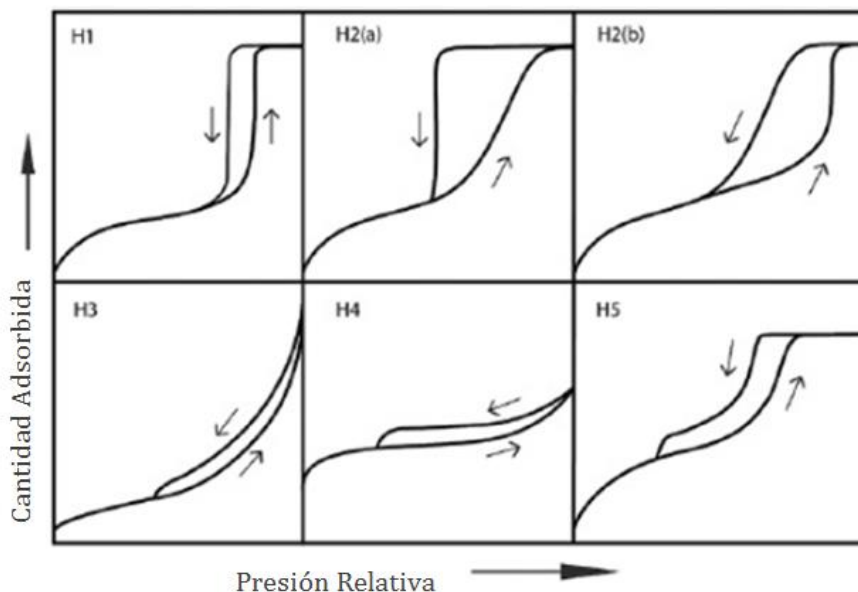


Fig. 14. Ciclos de histéresis [31].

Tabla 5. Tipos de histéresis.

Ciclo de histéresis	Características
Tipo H1	Presentado por materiales que exhiben un rango pequeño de mesoporos uniformes como algunos vidrios de poros controlados y ordenados, carbones mesoporosos, así como materiales que consisten en poros con canales cilíndricos bien definidos o aglomerados compactos de esferas rígidas de diámetros aproximadamente uniformes.
Tipo H2	Dada por estructuras de poro más complejas donde los efectos de red son importantes, es decir, substratos desordenados donde la distribución de tamaño de poros y la forma de estos no están bien definidas o presentan cuellos de botella. El aumento de la rama de desorción, que es característico de la H2(a) puede atribuirse al bloqueo de poro en un rango pequeño de cuellos de poro o de



evaporación inducida. La tipo H2 (b), se asocia con bloqueo de poros pero la distribución de tamaño de ancho de cuello ahora es mayor. Ejemplo de esto lo dan las espumas sílices meso celulares y ciertas sílices mesoporosas ordenadas después de tratamiento térmico

Tipo H3

Estos ciclos tienen dos características: i) la rama de adsorción recuerda a la isoterma tipo II, ii) el límite inferior de la rama de desorción está normalmente localizada a una cavitación inducida p/p^0 . Ciclos de este tipo no presentan algún límite superior de adsorción a altas p/p^0 , están dados por agregados no rígidos de partículas tipo placa (ciertas arcillas) lo que da lugar a poros entre estas láminas paralelas, pero también si la red del poro consiste en macroporos que no están completamente llenados con poros condensados. Presenta un fenómeno denominado efecto de la fuerza de tensión presente en una presión relativa de 0.4-0.45 donde existe un cierre abrupto de la curva de histéresis.

Tipo H4

En esta, la rama de adsorción está ahora compuesta de la tipo I y II, la subida más pronunciada a baja p/p^0 , asociada con el llenado de microporos debido a la asociación con poros estrechos en forma de placas paralelas pero con tamaños de poros en la región de microporos.

Este efecto puede ser asociado a una retención intensa de las moléculas de adsorbato en microporos de tamaños muy cercanos a los correspondientes a las moléculas de adsorbato o a la existencia de cavidades porosas no rígidas que se expanden o contraen con la entrada o salida de moléculas hacia o desde su interior o incluso pueden quedar atrapadas para siempre por el sólido.

Se encuentran en agregados de cristales de zeolitas, algunas zeolitas mesoporosas y carbones micro-mesoporosos.



Tipo H5 Aunque es inusual, tiene una forma distintiva asociada a ciertas estructuras de poro conteniendo tanto mesoporos abiertos como parcialmente bloqueados (arreglos hexagonales de sílice).

1.6 Modelos de equilibrio de isothermas de adsorción

1.6.1 Modelo de Langmuir

El modelo de Langmuir es una ecuación utilizada para el equilibrio de adsorción. Es preferible hacer uso de esta para sólidos microporosos, ya que hace referencia al caso ideal de la adsorción sobre una superficie homogénea energéticamente hablando [31].

Para la deducción de esta isoterma se parte de los siguientes postulados:

- a) La superficie del adsorbente es homogénea energéticamente.
- b) No hay interacción entre las moléculas adsorbidas.
- c) La adsorción termina cuando se alcanza la formación de la monocapa.
- d) Las moléculas adsorbidas no se desplazan por la superficie del adsorbente.
- e) En unas condiciones dadas (P, T) se establece el equilibrio entre las moléculas adsorbidas y las moléculas en la fase gaseosa (o líquida).

El modelo considera que la superficie de un sólido está formada por espacios elementales que describe la adsorción de una monocapa.

Este tipo de isothermas se observa a menudo, pero también frecuentemente tienen desviaciones. La causa de estas desviaciones se debe a que las superficies reales son heterogéneas y las moléculas adsorbidas interaccionan entre sí.

La isoterma de Langmuir se puede examinar de la siguiente forma:

1. Para presiones bajas ($KP < 1$) la isoterma se convierte en:

$$\theta = KP \text{ (Isoterma de Henry)} \quad (\text{Ec. 2})$$

2. Para presiones altas ($KP > 1$) la isoterma se convierte en:

$$\theta = 1 \text{ (formación de la monocapa)} \quad (\text{Ec. 3})$$



En la ecuación 4 muestra la ecuación general del modelo Langmuir que se emplea en este estudio para la evaluación de las isotermas.

$$\frac{P}{a} = \frac{1}{Ka_m} + \frac{P}{a_m} \quad (\text{Ec. 4})$$

Donde P es la presión del sistema, a es el volumen adsorbido a cierta presión, a_m es el volumen máximo que la superficie puede adsorber en el equilibrio y K es el valor de una constante.

La isoterma de Langmuir es cóncava hacia el eje X siempre y cuando el sólido sea poroso y la temperatura se encuentre por arriba del punto de ebullición del gas.

La ventaja de este modelo es que su ecuación es muy simple y puede facilitar su aplicación a un gran intervalo de datos. Sus desventajas es que el modelo considera solo una monocapa, la reversibilidad del enlace y las velocidades constantes de captación.

1.6.2 Modelo de Freundlich

Este modelo se utiliza principalmente cuando se tiene un proceso de fisisorción. Las características cualitativas de las isotermas de adsorción de diversos materiales son muy similares y se ajustan bien en un intervalo restringido de concentraciones.

La ecuación 5 muestra la expresión del modelo de Freundlich

$$a = K_f p^{\frac{1}{n}} \quad (\text{Ec. 5})$$

Donde a es la capacidad de adsorción en equilibrio con el adsorbente, k_f es la constante de equilibrio de Freundlich que indica la capacidad de adsorción y la afinidad del adsorbato por el adsorbente, $1/n$ se define como la velocidad de saturación del adsorbato.

La isoterma de Freundlich se obtiene a partir de la ecuación logarítmica:

$$\log a = \log K_f + \frac{1}{n} \log p \quad (\text{Ec. 6})$$

La ecuación 6 se adapta a una línea recta cuando se traza una gráfica sobre su base logarítmica en ambos ejes.



La aplicación más común del modelo es para predecir la tendencia de un compuesto que será adsorbido en superficies heterogéneas de un sólido. Además, se puede conocer parámetros de adsorción para amplios intervalos de presiones de equilibrio, los cuales se presentan en la Tabla 6:

Tabla 6. Parámetros de adsorción presentes en la isoterma de Freundlich.

Parámetros de adsorción	Pendiente de la recta 1/n
Sustancias adsorbidas irreversiblemente	= 0
Sustancias adsorbidas favorablemente	> 1
Sustancias no adsorbidas	Es muy grande

1.6.3 Modelo de Dubinin

La teoría de Dubinin se basa por la caracterización de microporos mediante el llenado del volumen de los mismos con adsorbato en un proceso de adsorción física. Este modelo está fundamentado en la teoría potencial de Polyani que fue modificado por Dubinin y Radushkevich para emplearlo en la adsorción de microporos y el llenado [32]. La ecuación Duvinin-Astakhov es una ecuación más generalizada para determinar tanto el volumen microporoso y la superficie específica, considerando las interacciones específicas entre las moléculas adsorbidas y sus interacciones con el material teniendo la relación en la siguiente ecuación.

$$\ln(V_a) = \ln(V_0) - \left(\frac{A}{E}\right)^n \quad (\text{Ec. 8})$$

Donde $A = RT \ln\left(\frac{p_0}{p}\right)$ y para su aplicación es necesario *conocer* V_0 , A y n . Los parámetros E y n son los responsables de la heterogeneidad superficial para cada adsorbato, aunque n es considerado más responsable de la variación, entre más grande sea n , el adsorbente será más microporoso [33].



1.7 Calor isostérico de adsorción

El calor de adsorción es la magnitud termodinámica que describe desde un punto de vista cuantitativo las interacciones entre un adsorbente y el adsorbato correspondiente. Su valor se puede deducir de las isotermas de adsorción. El calor de adsorción isostérico es el más utilizado para el cálculo de lechos fijos, el cual viene dado por la ecuación 9 de Clausius-Clapeyron.

$$\left[\frac{\partial p}{\partial T} \right]_a = \frac{q_{st}(a)}{RT^2} \quad (\text{Ec. 9})$$

Donde p es la presión de equilibrio cuando a moles de gas son adsorbidos a la temperatura T en kelvin (K).

Los calores de adsorción pueden determinarse a partir de isotermas medidas a diferentes temperaturas o independientemente por métodos calorimétricos [28].

1.8 Materiales porosos

De acuerdo con la clasificación IUPAC, la porosidad de un material puede ser clasificada como macroporoso, mesoporoso y microporoso con respecto al tamaño de poro a partir de las dimensiones mostradas en la tabla 7.

Tabla 7. Clasificación de los materiales porosos de acuerdo con la IUPAC.

Clasificación	Tamaño de poro
Microporos	$W < 2 \text{ nm}$
Mesoporos	$2 < W < 50 \text{ nm}$
Macroporos:	$de > 50 \text{ nm}$

A su vez, los microporos pueden ser clasificados en 3 grupos más, mostrados en la tabla 8 [30].



Tabla 8. Clasificación del tamaño de microporos propuesta por la IUPAC.

Tipo de Poro	Diámetro de Poro
Supermicroporos	$0.7 \leq W \leq 2 \text{ nm}$
Ultramicroporos	$W \leq 0.7 \text{ nm}$
Ultraporos	$W \leq 0.35 \text{ nm}$

En la última actualización de la IUPAC se incluye el término “nanoporo” para las clasificaciones anteriores, con la condición de un límite superior de ~100 nm [30].

Los materiales porosos son adsorbentes naturales o sintéticos con estructura amorfa o microcristalina [28], entre los cuales se encuentran carbones activados, zeolitas, sílices y alúminas. Estos materiales presentan una amplia aplicación como catalizadores, adsorbentes o materiales de lenta liberación [34]. Para conocer la porosidad de un material se hacen pruebas de adsorción de N_2 .

1.8.1 Sílices

La sílice llamada así comúnmente, también es conocida como Óxido de silicio IV o Dióxido de silicio SiO_2 [35], es un material amorfo que se produce por medio de una síntesis por el método sol-gel. La sílice microporosa (Figura 14) es una de las varias formas de la sílice amorfa, donde la superficie del gel de sílice contiene grupos silanoles (Si-O-H) y siloxanos (Si-O-Si). En muchos de los casos el grupo silanol actúa como sitios activos de adsorción. Cuando las moléculas de adsorbato interactúan con la superficie de los grupos silanoles existe la posibilidad de que estas moléculas puedan interactuar no solamente con un grupo silanol sino con dos o más grupos de este tipo al mismo tiempo [36].

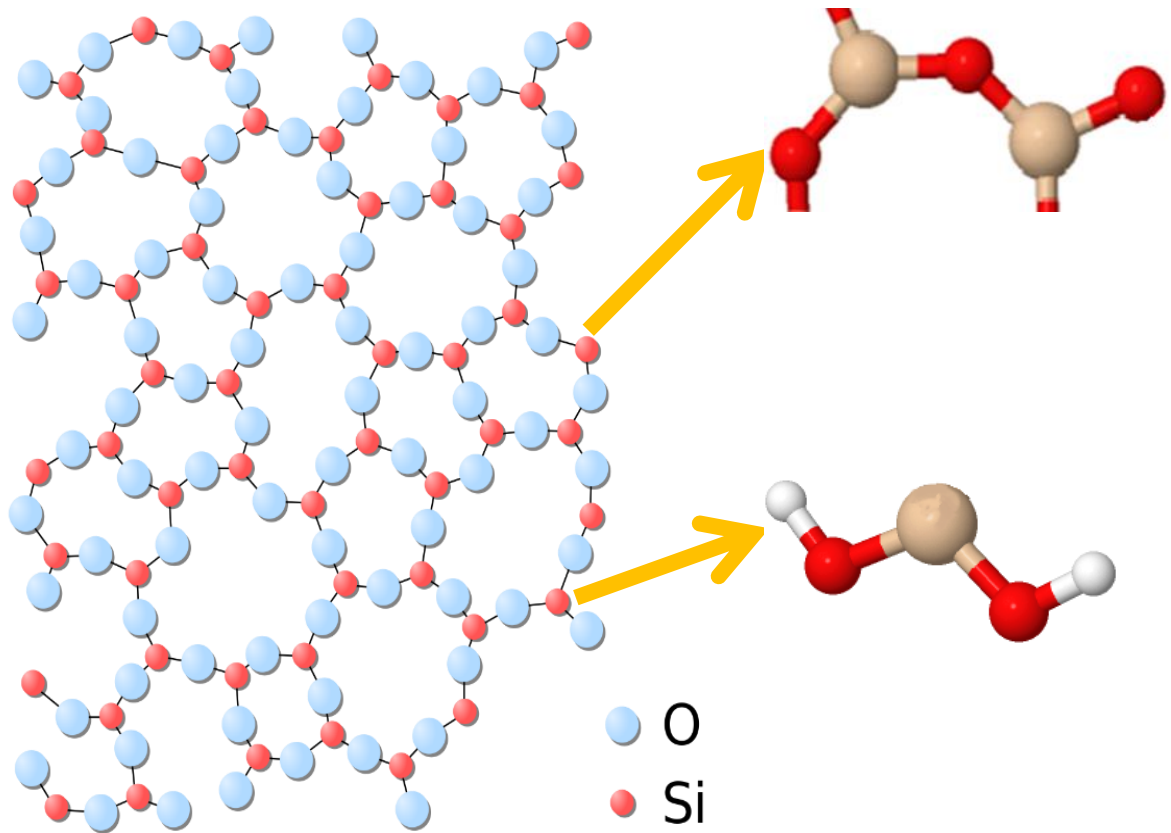


Fig. 15. Estructura amorfa de una sílice.



CAPÍTULO 2. METODOLOGÍA

2.1 Materiales:

Las sílices utilizadas en el presente trabajo de investigación fueron proporcionadas por el Dr. Maximiliano Asomoza del Departamento de catálisis de la UAM-Iztapalapa, dichos materiales fueron sintetizados bajo tratamientos sol-gel para que los compuestos obtenidos sean de tamaños controlados, de diferentes formas y con una gran pureza [37], el proceso de dopaje fue realizado a diferentes concentraciones de cobre (2, 5 y 10%). La metodología consiste en la caracterización y en la evaluación de la adsorción de alcanos (C₆-C₈) y BTX (benceno, tolueno, xileno), en sílices a diferentes concentraciones de Cu.

2.2. Caracterización

La caracterización de materiales consta de un conjunto de métodos instrumentales que permiten determinar las características de una muestra como su tamaño, volumen y distribución de poro, el área superficial, la cristalinidad, así como la composición de los materiales. Entre las técnicas que se encuentran, se emplearon las siguientes:

2.2.1. Difracción de Rayos-X (DRX)

Se determinó la presencia o ausencia de las fases cristalinas presentes en el material, mediante DRX con el equipo BRUKER D8 DISCOVER. Esta técnica consiste en hacer interaccionar un haz de rayos, con una determinada longitud de onda que incide en una sustancia cristalina, como consecuencia se originara que los átomos que conforman el cristal dispersen los rayos, produciendo un fenómeno de interferencia de ondas que, para determinadas direcciones de incidencia, pueden ser destructivas o constructivas surgiendo así el fenómeno de difracción.



2.2.2. Espectroscopia Infrarroja por Transformada de Fourier (FTIR-ATR)

Por sus siglas en inglés FTIR-ATR, está fundamentada en la absorción de la radiación IR por las moléculas en vibración, por lo que cada molécula presenta un espectro IR característico (huella dactilar). Para la obtención de los espectros de las muestras se utilizó el equipo Spectrum One FTIR-ATR.

2.2.3. Microscopia de Barrido Electrónico (SEM)

Por sus siglas en inglés SEM. Se utilizó para la caracterización estructural y morfológica de la muestra sólida (sílices) con el microscopio electrónico JEOL JSM-6610 LV. Esta técnica consiste en hacer incidir un barrido de haz de electrones sobre la muestra, la cual esta generalmente recubierta con una capa fina de oro o carbón, para que la muestra presente propiedades conductoras. Durante el proceso de incidencia del haz de electrones se emiten electrones secundarios que son dirigidos a un colector para posteriormente generar una imagen.

2.2.4. Adsorción de N₂

Se utilizó para evaluar el área superficial porosa de los materiales mediante la adsorción-desorción de N₂ a 77 K en el analizador automatizado de fisisorción y quimisorción marca Quantachrome, AS1-C-MS, evaluando las isotermas obtenidas con la aplicación de distintas fórmulas para determinar parámetros texturales y tamaño de poro.

La adsorción de N₂ es una técnica para la caracterización de sólidos porosos que consiste en la adsorción y desorción de N₂ a 77 K y ha sido aceptada como método estándar para analizar microporos y mesoporos, ya que permite conocer la superficie específica, capacidad de adsorción entre otros parámetros texturales.



2.3. Evaluación de la sílice para su capacidad de adsorción de COVs mediante cromatografía

La adsorción se refiere a procesos donde las moléculas de COVs son removidas de la corriente gaseosa al transferirse a la superficie sólida del adsorbente [30] en este caso particular, sílices dopadas con cobre.

Los sistemas de adsorción han sido utilizados principalmente para controlar la emisión de COVs. Típicamente, el control de emisiones de COVs reduce las concentraciones entre 400 y 2,000 partes por millón (ppm) hasta menos de 50 ppm. Además del control de emisión, un sistema de adsorción hace posible la recuperación de COVs. La recuperación de un COVs reutilizable o comercial puede contrarrestar significativamente el costo de controlar la emisión [38].

La cromatografía de gases es una técnica de separación en la cual los componentes a separar se distribuyen entre dos fases, una de las cuales constituye la fase estacionaria, de gran área superficial, y la otra es un fluido (fase móvil) que pasa a través o a lo largo de la fase estacionaria. La fase estacionaria puede ser un sólido o un líquido dispuesto sobre un sólido que actúa como soporte, de gran área superficial. La fase móvil es un fluido (puede ser gas, líquido o fluido supercrítico) que se usa como portador de la mezcla [39].

2.3.1. Pruebas de adsorción por cromatografía de gases

Para la evaluación de la adsorción de COVs sobre las sílices, se utilizó un cromatógrafo SHIMADZU modelo GC-14A, en donde se colocó una columna empacada con los materiales a estudiar (Cu-SiO₂ 2, 5,10%). Las muestras de COVs se introducen por inyección con jeringas de vidrio en el puerto de inyección estando este a temperaturas superiores al punto de ebullición. La muestra pasa por la columna, donde se hace el proceso de adsorción, con ayuda del gas acarreador de flujo regulado que fue helio a 30 mL/min, para llegar al detector y al



integrador, donde se obtuvieron los cromatogramas. En la figura 15 se presenta el esquema del proceso de cromatografía.

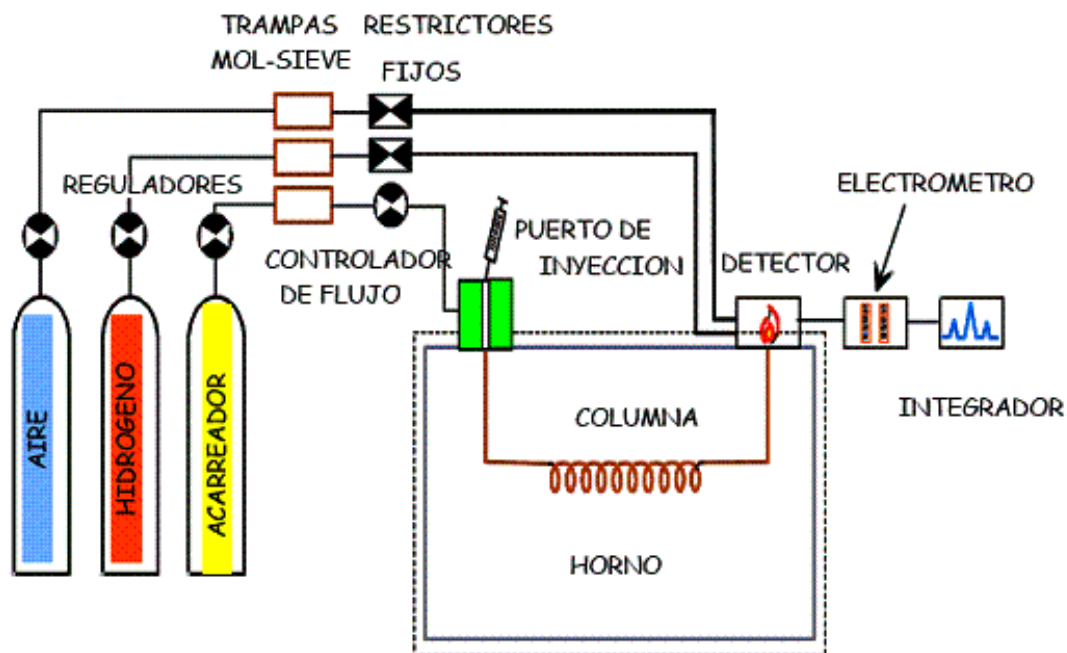


Fig. 16. Esquema del proceso de cromatografía.

Para el desarrollo de la parte experimental, se llevó a cabo a partir de una serie de pasos representados en la figura 16, de donde se obtuvieron los datos necesarios que fueron analizados y calculados como se muestra en esta tesis.

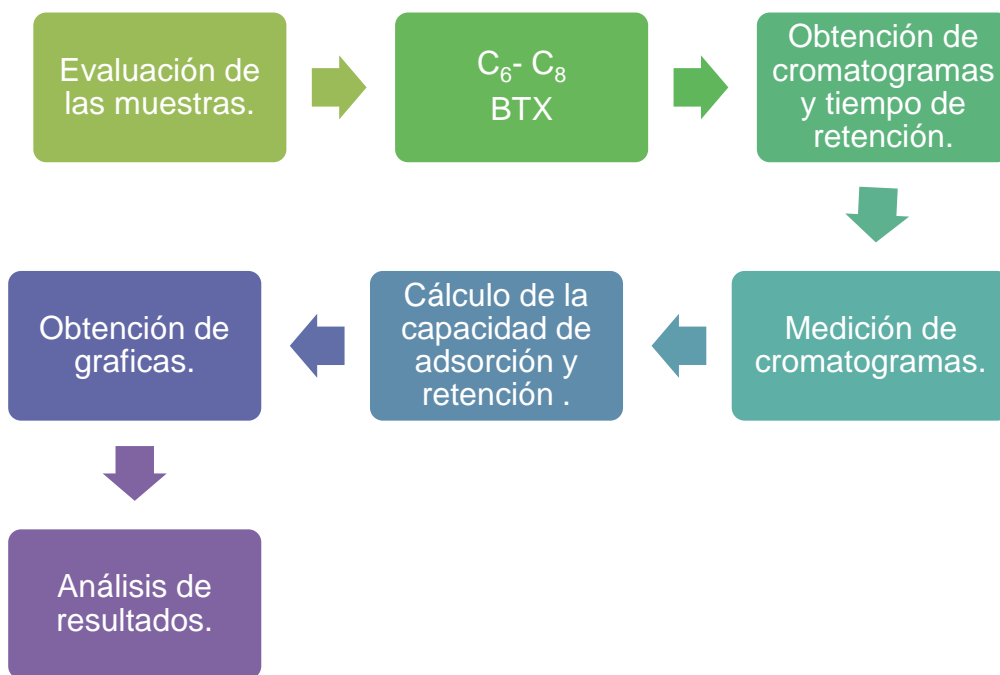


Fig. 17. Diagrama de bloques del proceso.

Las pruebas son realizadas en columnas empacadas con las sílices, obteniendo un total de 4 Columnas, SiO₂ sin dopaje, y las Cu-SiO₂ al 2, 5 y 10% (Figura 17).

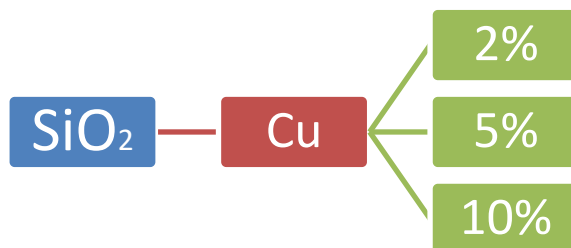


Fig. 18. Columnas.

Las temperaturas a las cuales son inyectadas las muestras dependen de su punto de ebullición, por lo que se estableció un intervalo de cuatro temperaturas entre 150 °C -230 °C con una diferencia de 25 °C entre cada una (Tabla 9).



Tabla 9. Temperaturas de las corridas experimentales.

Compuestos	P.E	150 °C	175 °C	200 °C	220 °C
Benceno	80.1	X	X	X	X
Tolueno	110.6	X	X	X	X
Xileno	138	X	X	X	X
Hexano	68	X	X	X	X
Heptano	98.42	X	X	X	X
Octano	126	X	X	X	X

La cantidad inyectada por muestra es de 20 μL , haciendo entre 3 y 5 inyecciones de acuerdo con los resultados.

Posterior a la obtención de los tiempos de retención y los cromatogramas correspondientes a cada corrida experimental, se realizó la evaluación de estos para la obtención de un total de 96 isotermas mediante los cálculos pertinentes a la capacidad de adsorción, y se aplicaron los modelos experimentales de Freundlich, Langmuir y Dubinin cada uno con sus respectivos gráficos.



CAPÍTULO 3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

3.1. Caracterización

3.1.1. Difracción de Rayos-X

La figura 18 muestra los patrones DRX de las sílices de estudio en comparación con un difractograma del cuarzo, en donde se logra observar la presencia de señales no definidas características de materiales amorfos tales como algunas sílices sintéticas que no presentan picos intensos en comparación con el cuarzo, debido a que el cuarzo presenta una estructura cristalina.

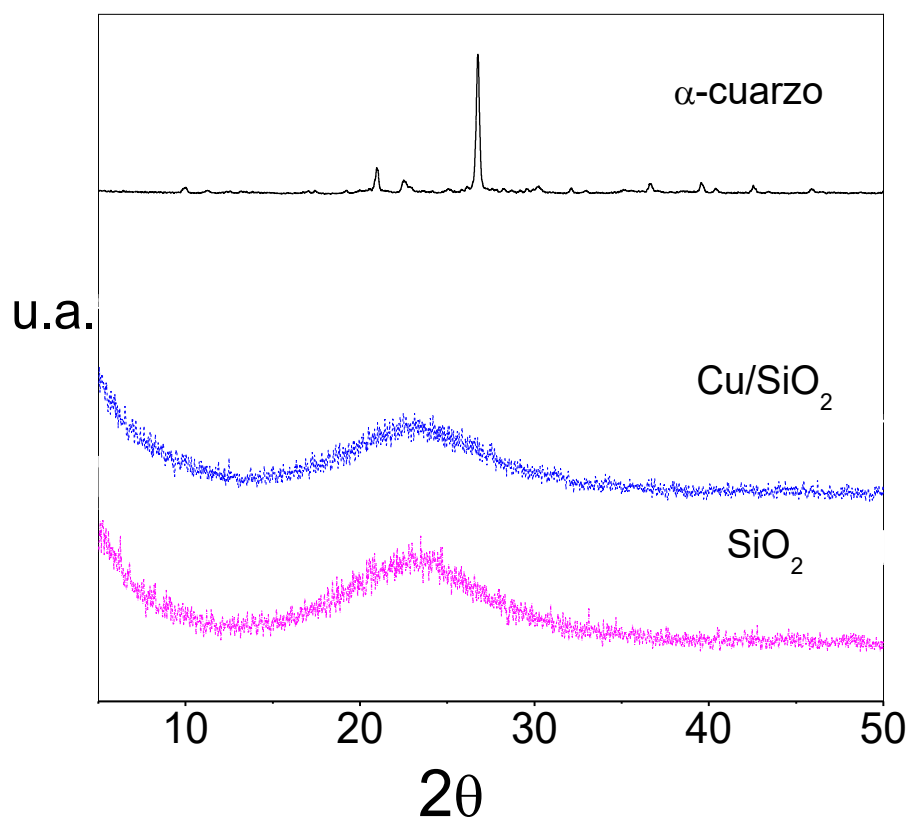


Fig. 19. Difractograma de rayos X de las muestras Cu-SiO₂ y SiO₂.



3.1.2. Espectroscopia Infrarroja por Transformada de Fourier

En la figura 19 se observa los espectros IR de las sílices de estudio donde se puede apreciar las vibraciones del enlace Si-O-Si (siloxano) en el punto ≈ 1070 cm^{-1} y las vibraciones del enlace Si-O-H (silanoles) en el punto ≈ 956 cm^{-1} [40]. Se observa que en el intervalo de 4000 - 1250 cm^{-1} la intensidad de las vibraciones aumenta conforme aumenta la concentración de Cu (cobre) en las sílices, aunque en la vibración en ≈ 1070 la Cu-SiO₂ 5% presenta una vibración más grande que el resto de las muestras.

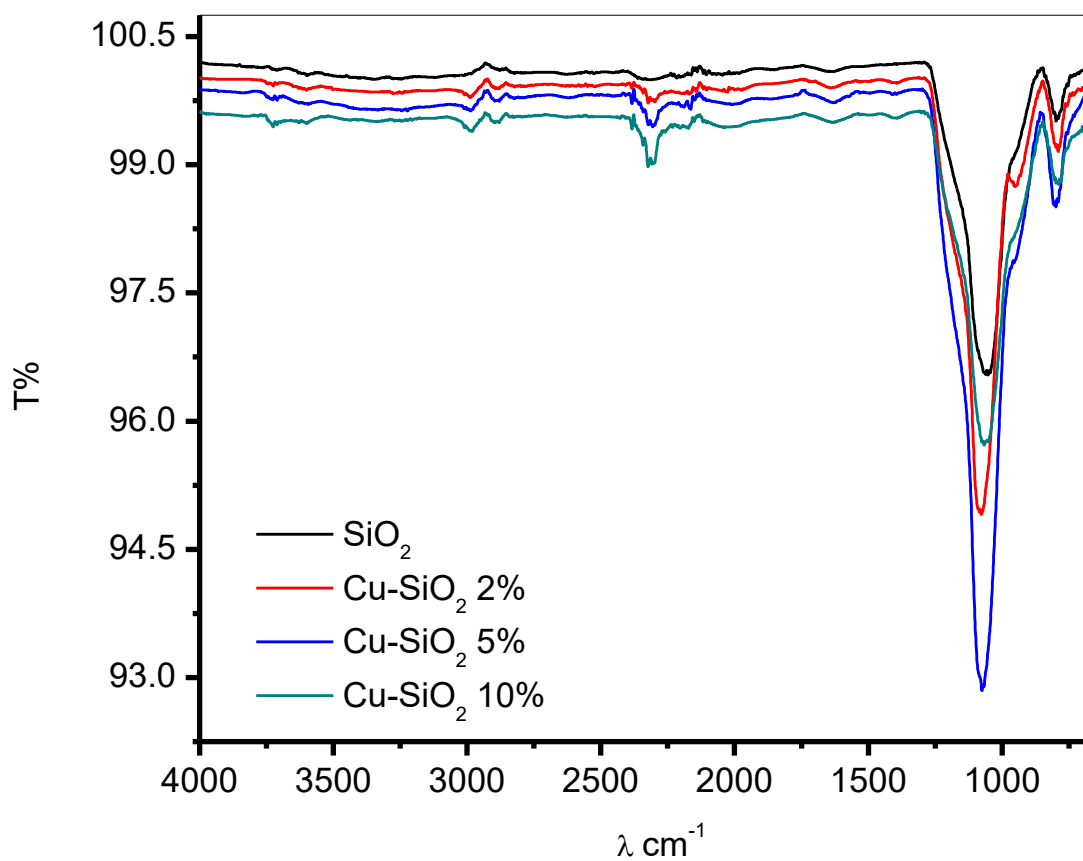


Fig. 20. Espectros IR de las muestras.



El análisis de las sílices por esta técnica nos permitió la identificación de los enlaces presentes en las muestras sintetizadas, lo que confirma que dichos materiales mantienen su estructura con los dopajes realizados.

3.1.3. Microscopia Electrónica de Barrido

En la figura 20 se observa las micrográficas obtenidas por SEM, a una escala de 100 μm , 10 μm y 0.1 μm en las que se perciben aglomerados de partículas sin forma definida, lo cual, nos indica que se trata de materiales amorfos.

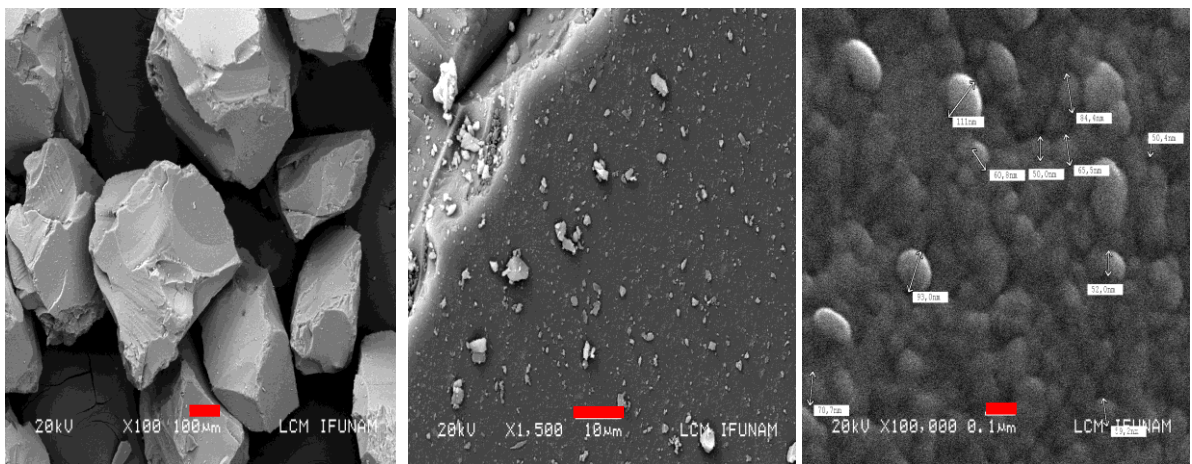


Fig. 21. Micrográficas de Cu-SiO₂ a) 100 μm , b) 10 μm y c) 0.1 μm .

3.1.4. Adsorción de N₂

Las isothermas de adsorción de N₂ de las muestras de sílice (presión relativa p/p^0 vs. volumen adsorbido en cm³ STP por gramo) a 77 K son mostradas en la figura 21, en primer lugar, se describe una isothermas características de tipo I para Cu-SiO₂ 2% y tipo II para Cu-SiO₂ 10%, mientras que SiO₂ presenta una combinación tipo I y tipo VIa y Cu-SiO₂ 5% presenta una combinación tipo II y tipo VI ambas muestras con ciclos de histéresis tipo H2b atribuidas a la presencia de cuellos de poro de acuerdo a la clasificación IUPAC [30] este tipo de isothermas híbridas muestran una combinación entre materiales con presencia de microporos y mesoporos.

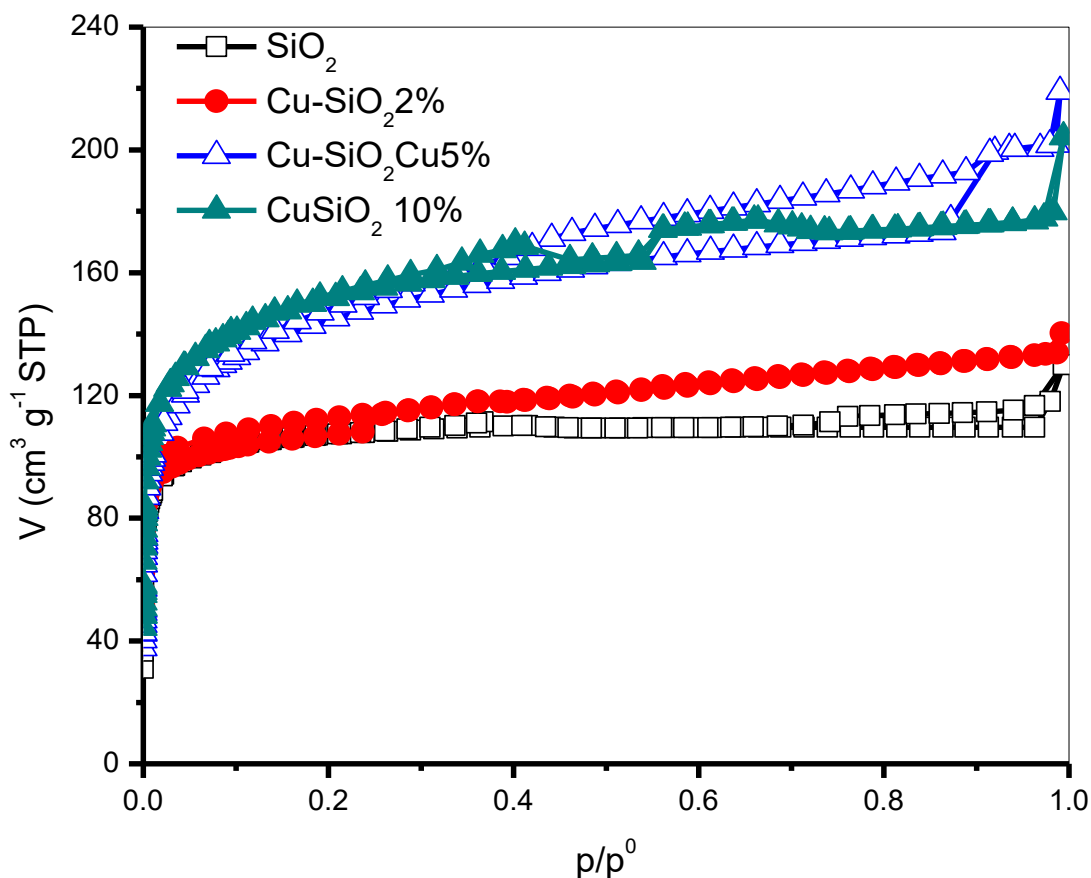


Fig. 22. Isotermas de adsorción de Cu-SiO₂ al 2, 5, 10% y sílice sin dopaje.

De acuerdo con los resultados obtenidos a partir de la evaluación de las isotermas de adsorción de N₂ se determinó la superficie específica por el método BET y Langmuir, así como el volumen de poro por el método t (Tabla 10).

Tabla 10. Parámetros texturales de SiO₂.

	A _{sB} m ² /g	C _B	R _{BET}	A _{sL} m ² /g	R _L	K _L	V _Σ cm ³ /g
SiO₂	405	3858	0.999	403	0.998	4384	0.168
Cu-SiO₂ 2%	403	50230	0.999	423	0.999	4177	0.204
Cu-SiO₂ 5%	375	11410	0.997	434	0.998	5295	0.308
Cu-SiO₂ 10%	521	2651	0.998	477	0.999	5866.	0.271



donde A_{sb} es la superficie específica por medio de la ecuación BET, A_{sL} la superficie específica Langmuir, C_B es la constante de BET, K_L es la constante de equilibrio de Langmuir, R el coeficiente de correlación y V_{Σ} es el volumen total de microporo, el cual representa el volumen adsorbido cercano a la presión de saturación ($p/p^0 \sim 0.95$).

Se observa una secuencia establecida en las propiedades texturales en donde la superficie específica se evaluó por Langmuir (A_{sL}): Cu-SiO₂ 10% > Cu-SiO₂ 5% > Cu-SiO₂ 2% > SiO₂, mientras que con la evaluación con BET (A_{sB}) de las propiedades texturales la secuencia es Cu-SiO₂ 10% > SiO₂ > Cu-SiO₂ 2% > Cu-SiO₂ 5%. El valor de la superficie específica es uno de los factores dependiente de la intensidad de las fuerzas físicas que actúan entre el adsorbato y el adsorbente, por lo tanto, la intensidad de estas fuerzas afecta la cantidad de adsorbato adsorbido en los sitios de adsorción [41]. En la misma tabla se puede apreciar que los valores C_{BET} son positivos, mismo que indica que este método es el idóneo en la evaluación del valor A_s . En cuanto a los resultados de V_{Σ} muestran que Cu-SiO₂ 5% presenta el mayor valor, seguidas por Cu-SiO₂ 10% > Cu-SiO₂ 2% > SiO₂.

Evaluación de distribución de tamaño de poro

La distribución de tamaño de poro es una característica de los materiales porosos que permite conocer las familias de poros que tienen mayor presencia en las muestras estudiadas. En los últimos años se han realizado diversos avances en la adsorción molecular de alta resolución, que permiten evaluar los micro y meso poros de los materiales. Los métodos utilizados en este trabajo son Dubinin-Astakhov (D-A) y Barrett-Joyner-Halenda (BJH), presentados a continuación.

Modelo de Dubinin- Astakhov

La ecuación de Dubinin-Astakhov (D-A) es usada para determinar tanto el volumen de microporos y el área superficial basándose en estudios de fisisorción.



Este modelo considera las interacciones específicas entre las moléculas adsorbidas y sus acciones, precisa mediciones de fisorción donde se usen gases o vapores como adsorbatos.

En la figura 22 se presenta la distribución obtenida aplicando la ecuación D-A donde se observa una familia de microporos con valor aproximado de 0.75 nm para todas las muestras.

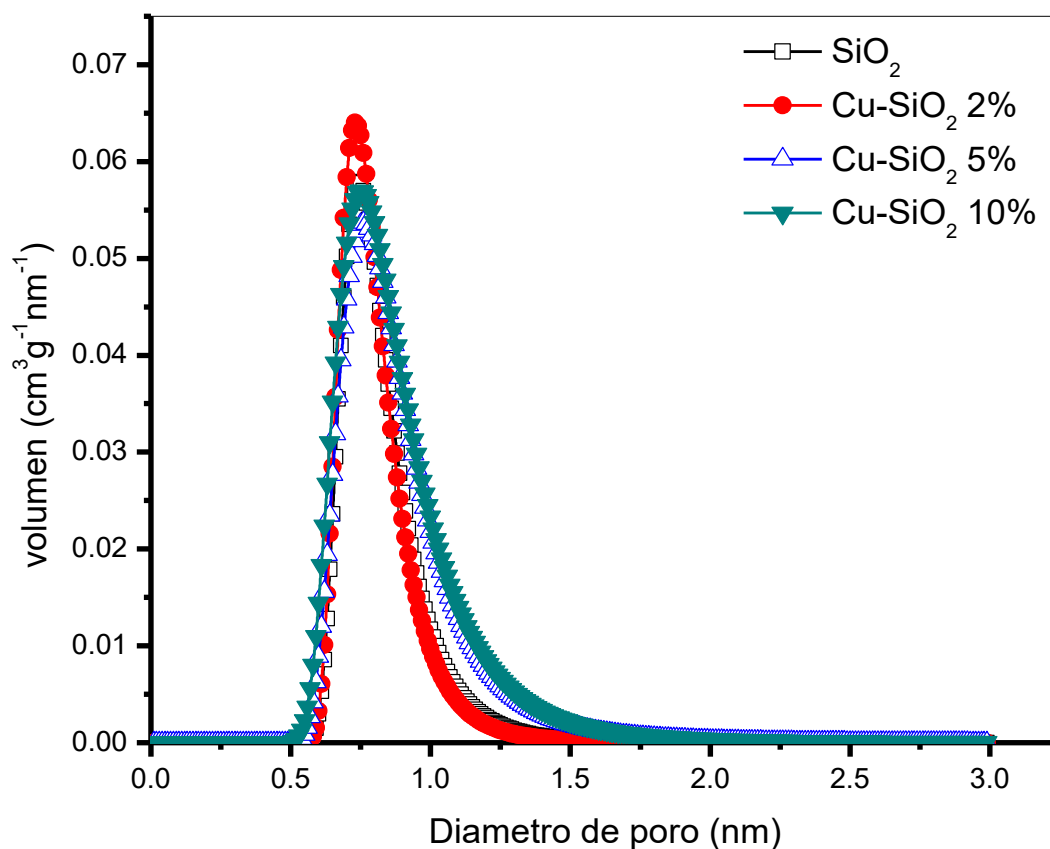


Fig. 23. Distribución de nanoporos, D-A.

En la tabla 11 observamos a detalle los resultados obtenidos por D-A donde se muestra que los diámetros de poro se encuentran entre 0.74- 0.76 nm, siendo Cu-SiO₂ 5% quien presenta menor energía característica de adsorción, con valores intermedios de n y mayor diámetro, mientras que Cu-SiO₂ 2% presenta mayor



energía, mayor n , pero menor diámetro. Aunque el sentido físico de n no es claro, esté hace relación entre las propiedades del adsorbente y del adsorbato y la afinidad con el proceso, se observa que este valor es favorable al obtener valores mayores a 1.

Tabla 11. Valores obtenidos a partir de D-A.

	E kJ/mol	n	W cm ³ /g	Dp nm
SiO ₂	6.89	2.6	0.15	0.74
Cu-SiO ₂ 2%	7.24	2.8	0.15	0.73
Cu-SiO ₂ 5%	6.16	1.9	0.2	0.76
Cu-SiO ₂ 10%	6.34	1.8	0.22	0.75

Donde n se relaciona a la estructura de la superficie de los poros del adsorbente, W es el volumen del poro, y Dp es el diámetro de poro, y E es energía característica de adsorción.

Método Barrett-Joyner-Halenda

El método propuesto por Barrett-Joyner-Halenda (BJH) es un procedimiento para calcular la distribución de tamaño de poro, calcular el diámetro y volumen de los poros presentes en los sólidos, a partir de las isotermas experimentales usando el modelo de llenado de poros de Kelvin. Esta técnica fue desarrollada para hacer frente a adsorbentes con poros relativamente grandes, exhibiendo un amplio rango de tamaños de poros, pero es aplicable a sólidos porosos de cualquier naturaleza [42]. Este análisis supone que los poros son cilíndricos y que la cantidad de adsorbato en equilibrio con la fase vapor se produce mediante adsorción física en las paredes y condensación capilar, por lo tanto, es adecuado en el análisis de sólidos mesoporosos, a pesar de que sobreestima el tamaño de poro [43]. El cálculo consiste en dividir la isoterma en intervalos. El valor medio de presión entre cada intervalo permite calcular el espesor de la capa adsorbida (t) y el radio de los poros ($r_p = r_k + t$). La representación de la derivada de volumen de mesoporos respecto a la derivada del logaritmo del radio, frente al logaritmo del radio, permite obtener la distribución del tamaño de mesoporos por el método BJH [44].



En la figura 23 se presenta el grafico obtenido por BJH, cabe destacar que este método es viable para la obtención de diámetros de poro > 2 nm, en este gráfico se observa en primer lugar una distribución unimodal para la sílice sin dopar y dopada al 2%, con valor de PSD ≈ 2.9 nm, después el aumento en el dopaje con cobre provoca la apertura de los mesoporos a partir de la muestra Cu-SiO₂ 5%, la cual obtuvo valores de 3.4 en diámetro de poro, y finalmente la muestra con mayor concentración de Cu% obtuvo una distribución trimodal con diámetros en 2.9, 3.2 y 4.5 nm.

Tomando en consideración el volumen total de poro de las muestras (Tabla 10), y el volumen de microporo (Tabla 11), se puede inferir que los tratamientos cobre, aumentan la microporosidad de las muestras y en el caso de Cu-SiO₂ 10%, este aumento se ve reflejado en la mesoporosidad (Figura 24).

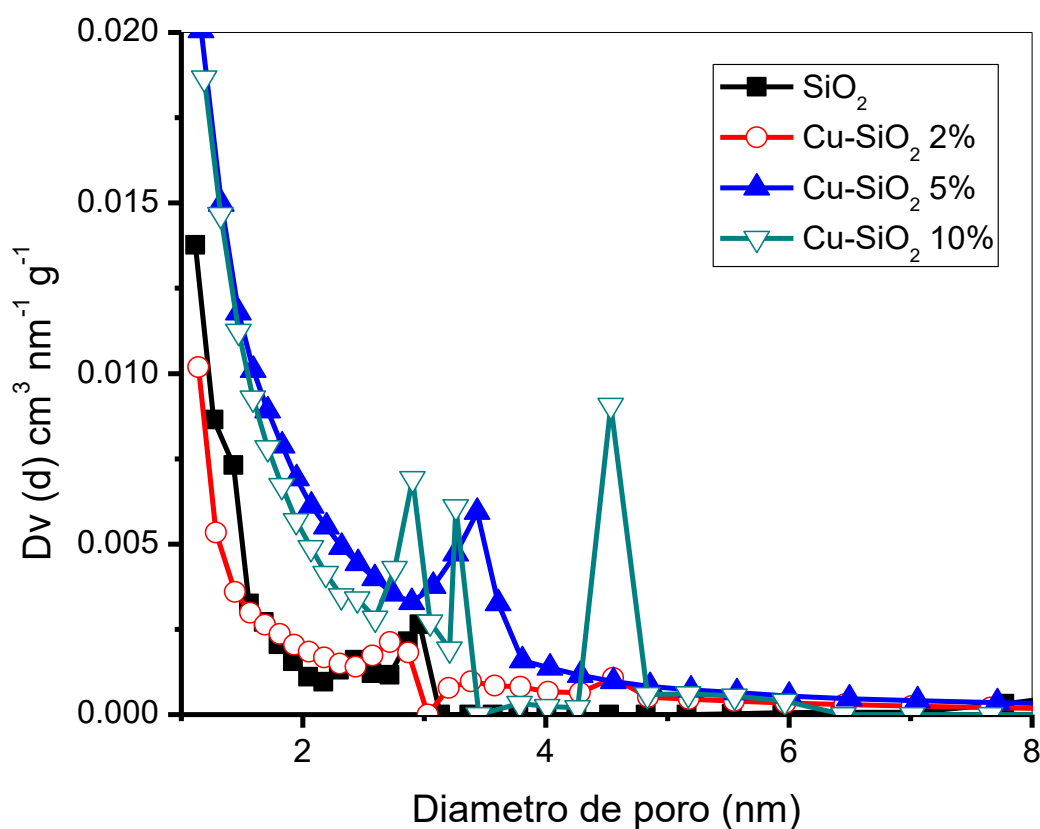


Fig. 24. Distribución de tamaño de poro, BJH.



3.2. Evaluación de la capacidad de adsorción de BTX y alcanos

A continuación, se presentan las isothermas de adsorción obtenidas de la evaluación de la adsorción de BTX y alcanos en las sílices por cromatografía de gases en el intervalo de temperaturas de 150 – 225 °C, presentando en primero las isothermas generadas por los compuestos BTX en las 4 sílices y posteriormente las isothermas generadas por los alcanos C₆-C₈. Comparando tanto los grupos de compuestos como las sílices.

3.2.1. Isothermas de adsorción de BTX en Cu-SiO₂ 2%

Las isothermas de adsorción de los compuestos BTX sobre la muestra Cu-SiO₂ 2% se presentan en la figura 24 notando que la capacidad de adsorción de estos compuestos se encuentra entre 0.98 - 1.4 mmol/g. Al comparar tomando una presión de 300 mmHg en los gráficos se observa que la absorción de benceno y xileno la temperatura máxima de adsorción es de 225 °C y para tolueno 175 °C. De esta forma se presenta una mayor capacidad de adsorción de la Cu-SiO₂ 2% con 0.980 mmol/g de xileno y tolueno adsorbido.

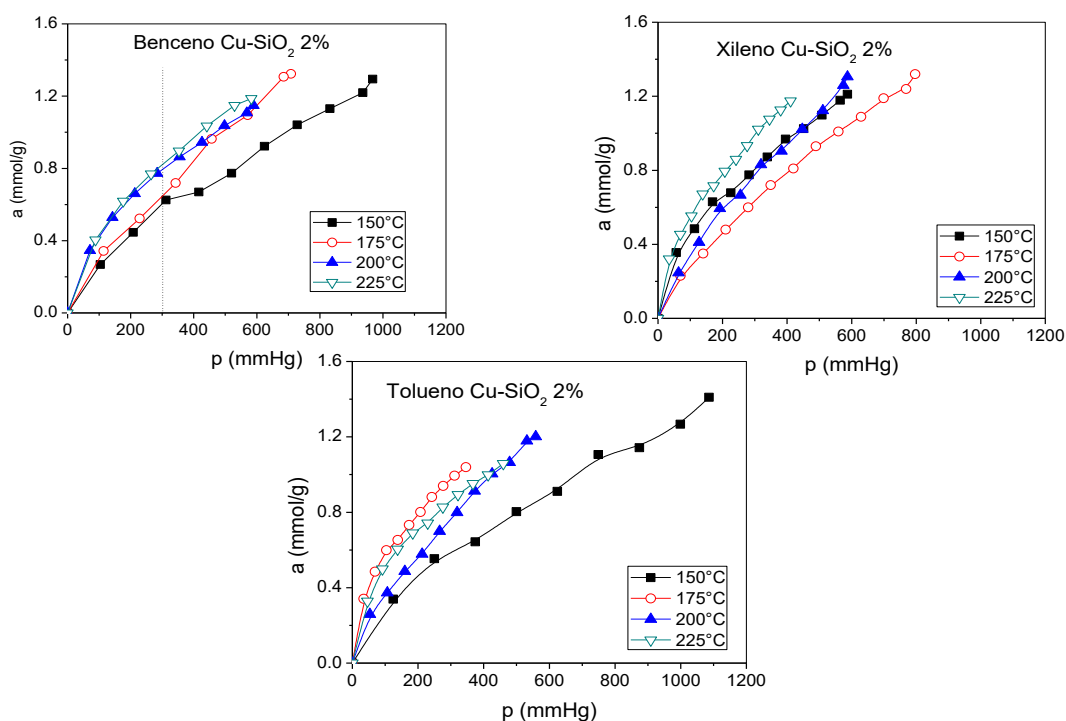


Fig. 25. Isothermas de adsorción de Benceno, Tolueno, Xileno en Cu-SiO₂ 2%.



3.2.2. Isotermas de adsorción de BTX en Cu-SiO₂ 5%

En el caso de la adsorción de BTX sobre la muestra Cu-SiO₂ 5% se observa que la capacidad de adsorción se encuentra entre 0.19 - 0.25 mmol/g. Al comparar los resultados a una presión de 100 mmHg en estos gráficos se observa que para la adsorción de benceno la temperatura máxima de adsorción es de 225 °C, mientras que para tolueno y xileno es 150 °C. La muestra de Cu-SiO₂ 5% obtuvo la mayor capacidad de adsorción de tolueno con 0.19 mmol/g adsorbidos (Figura 25).

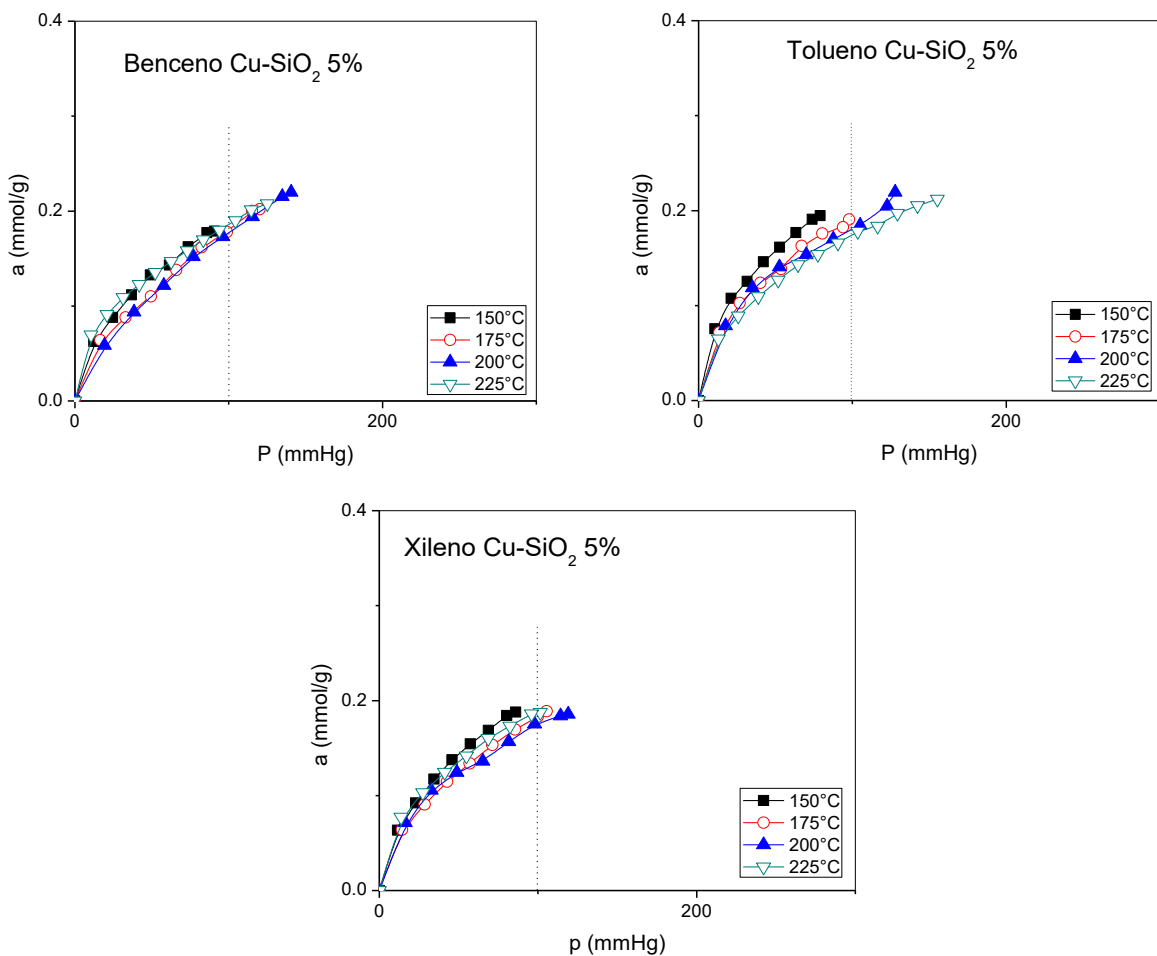


Fig. 26. Isotermas de adsorción de Benceno, Tolueno, Xileno en Cu-SiO₂ 5%.



3.2.3. Isotermas de adsorción de BTX en Cu-SiO₂ 10%.

Las isotermas de adsorción de los compuestos BTX en la muestra Cu-SiO₂ 10% se observan en la figura 26 donde se aprecia que la capacidad de adsorción se encuentra entre 0.8 - 1.0 mmol/g. A manera de comparación se tomó como referencia una presión de 300 mmHg y se observa que la temperatura máxima de adsorción es de 225 °C. De las 3 sustancias, se obtuvo una mayor capacidad de adsorción de la Cu-SiO₂ 10% con 0.93 mmol/g de xileno adsorbido.

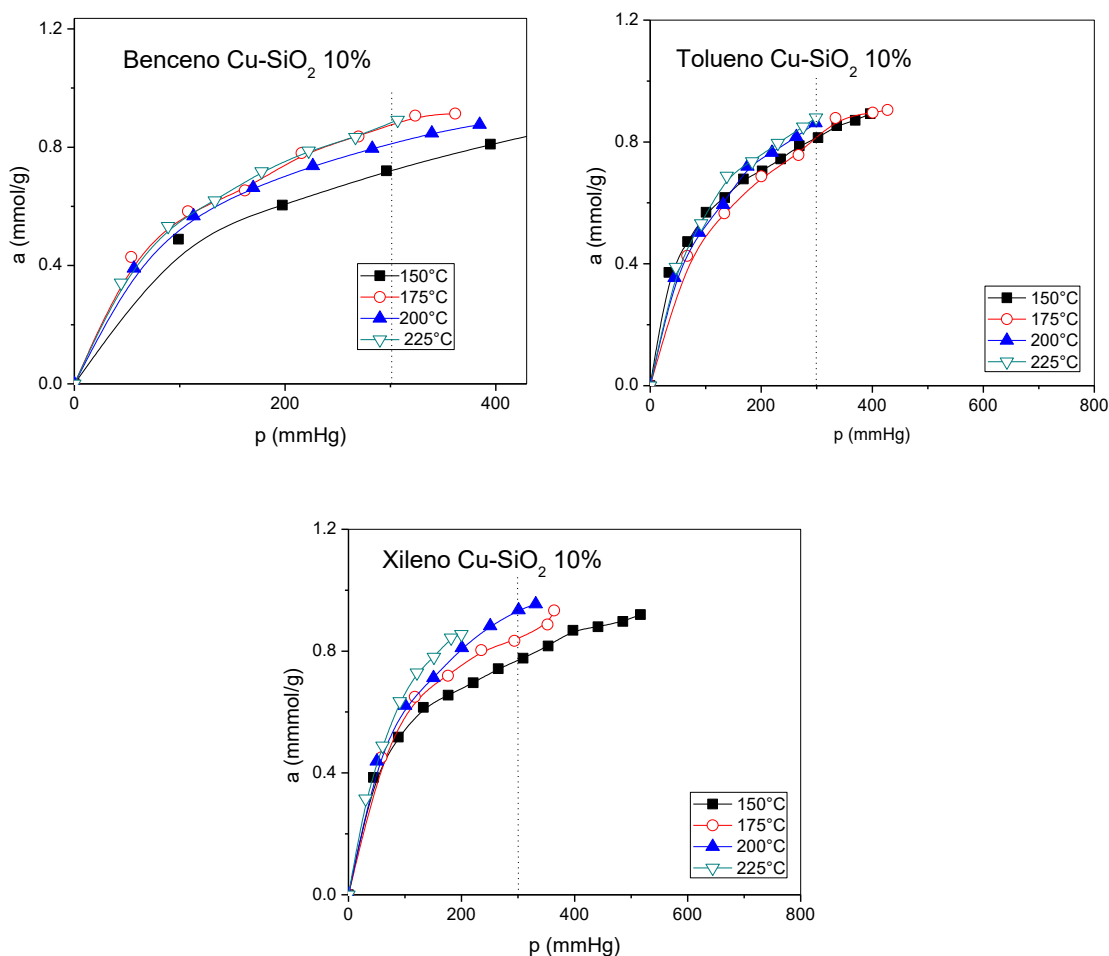


Fig. 27. Isotermas de adsorción de Benceno, Tolueno, Xileno en Cu-SiO₂ 10%.



Isotermas de adsorción de BTX en SiO₂.

Las isotermas de adsorción de BTX en SiO₂ se presentan en la figura 27 donde se obtiene que la capacidad de adsorción se encuentra entre 0.2 - 1.0 mmol/g. Al comparar los resultados a 300 mmHg de presión en estos gráficos, se observa que la temperatura máxima de adsorción es de 175 °C. Se presenta una mayor capacidad de adsorción de la sílice sin dopaje con 0.548 mmol/g de tolueno.

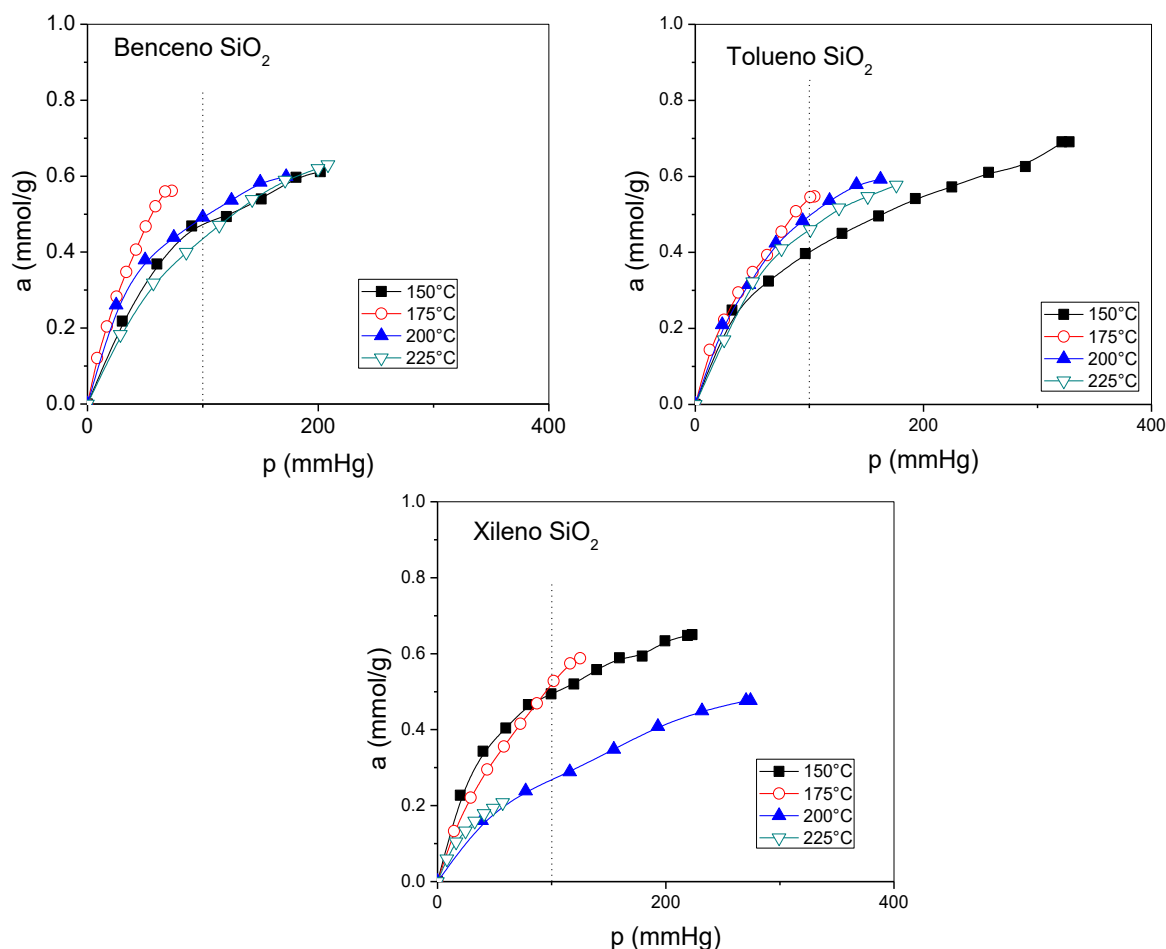


Fig. 28. Isotermas de adsorción de Benceno, Tolueno, Xileno en SiO₂.

Tomando en cuenta las comparaciones anteriores, se puede observar que las Cu-SiO₂ al 2 y 10 % la adsorción alcanza presiones mayores a 300 mmHg, siendo la Cu-SiO₂ 2% la que presenta mayor valor de la capacidad de adsorción con 0.980 mmol/g. Respecto a las SiO₂ y Cu-SiO₂ 5% la adsorción se da a presiones



mayores a 100 mmHg pero menores a 400 mmHg, la que presenta mayor valor de la capacidad de adsorción es la SiO₂ sin dopaje con 0.548 mmol/g.

3.2.5. Isotermas de adsorción de C₆-C₈ en Cu-SiO₂ 2%.

Las isotermas de adsorción de los compuestos C₆-C₈ en Cu-SiO₂ 2% se observan en la figura 28, donde se obtuvieron valores de 0.9-1.3 mmol/g adsorbidos. En donde, si tomamos una presión de 300 mmHg en estos gráficos, se observa que para la adsorción de los compuestos C₆-C₈ la temperatura máxima de adsorción es de 225 °C. De las 3 sustancias. Se puede notar que el heptano obtuvo una mayor capacidad de adsorción sobre la Cu-SiO₂ 2% con 1.048 mmol/g de heptano adsorbido.

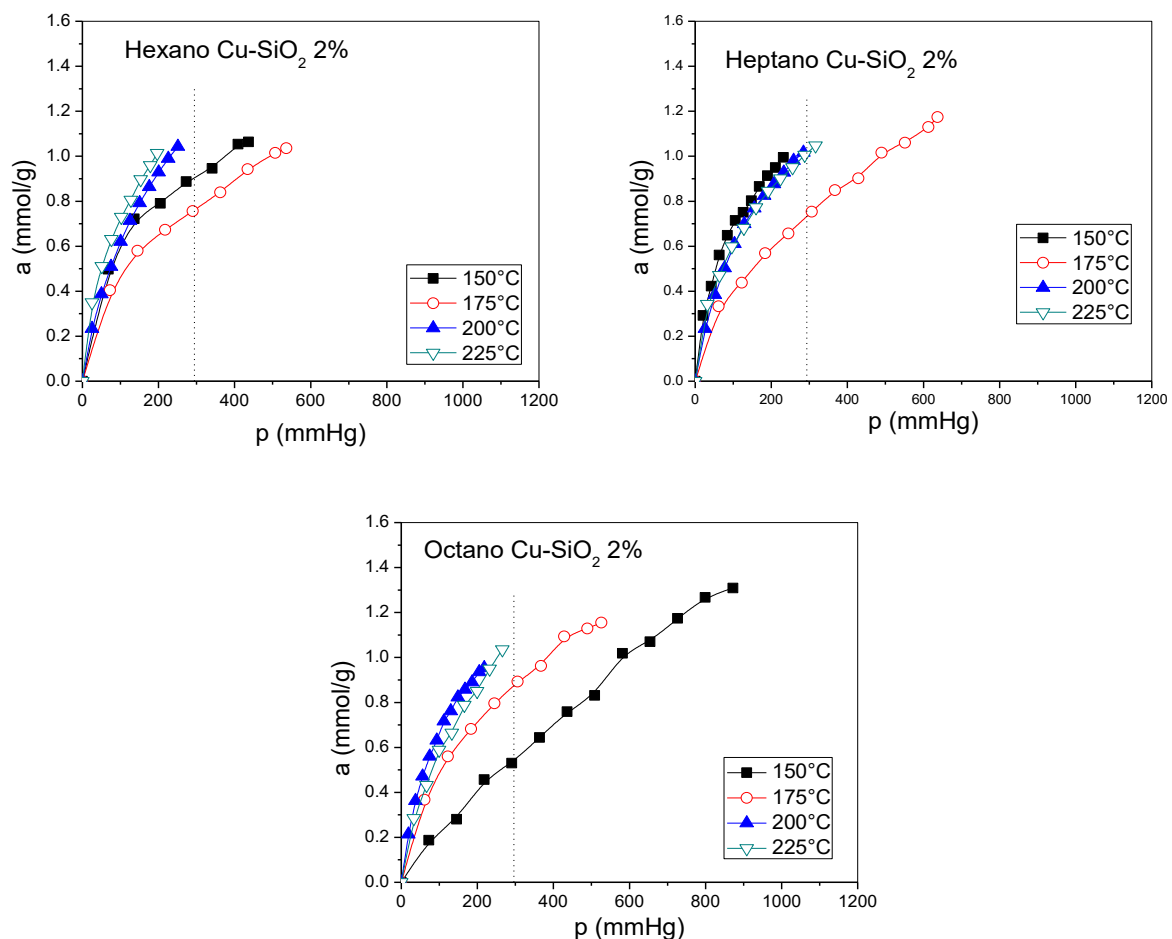


Fig. 29. Isotermas de adsorción de Hexano, Heptano y Octano en Cu-SiO₂ 2%.



3.2.6. Isotermas de adsorción de C₆-C₈ en Cu-SiO₂ 5%

Las isotermas de adsorción de C₆-C₈ en Cu-SiO₂ 5% se presentan en la figura 29, notando que la capacidad de adsorción se encuentra entre 0.15-0.25 mmol/g. Al comparar los resultados a una presión de 100 mmHg en estos gráficos se observa que para la absorción de hexano la temperatura máxima de adsorción es de 200 °C, mientras que para heptano es de 175 °C y para octano es 150 °C. La mayor capacidad de adsorción obtenida de la sílice dopada al 5% fue con 0.195 mmol/g de hexano y octano adsorbido.

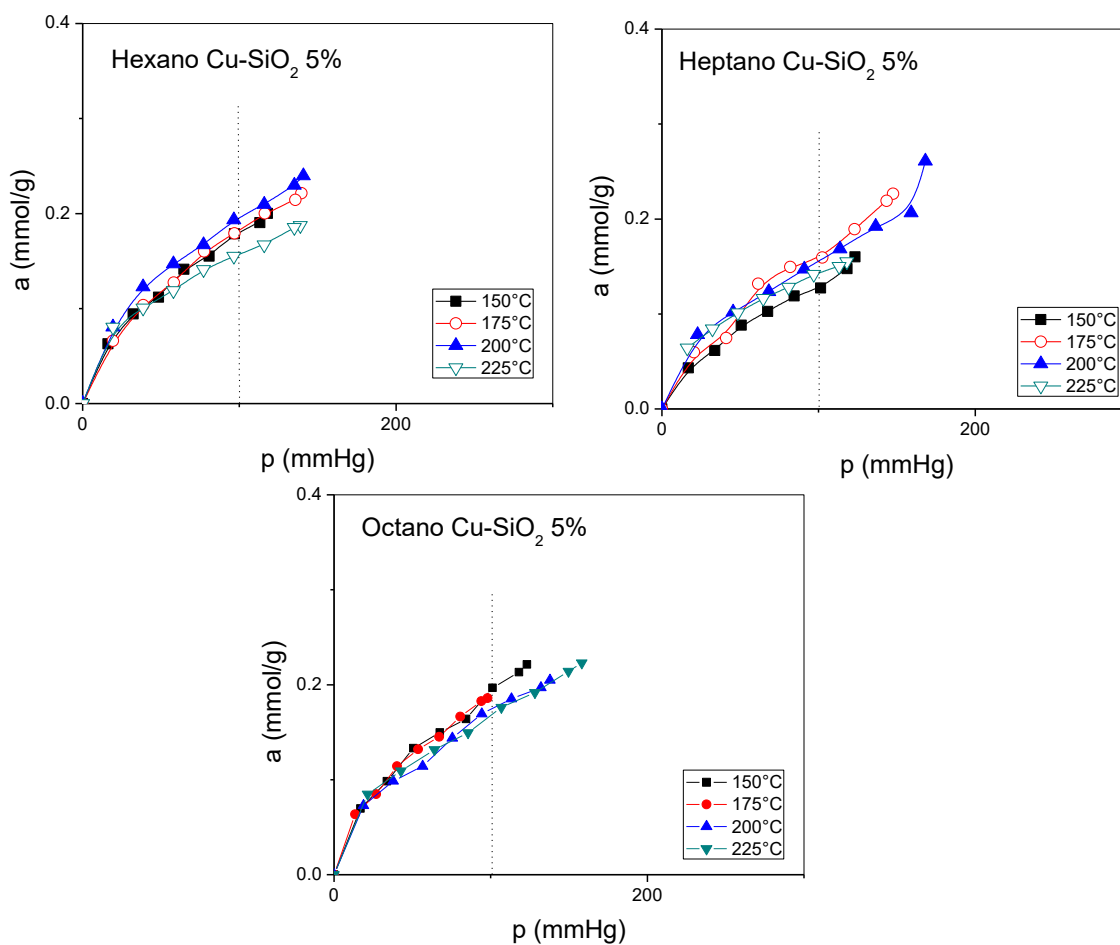


Fig. 30. Isotermas de adsorción de Hexano, Heptano y Octano en Cu-SiO₂ 5%.



3.2.7. Isotermas de adsorción de C₆-C₈ en Cu-SiO₂ 10%

Para los compuestos C₆-C₈ en SiO₂ dopada con Cu al 10% las isotermas de adsorción se presenta en la figura 30, notando que el volumen adsorbido se encuentra entre 0.55-1.0 mmol/g. a una presión de 300 mmHg y comparar los gráficos se observa que para la absorción de hexano la temperatura máxima de adsorción es de 225 °C, mientras que para heptano es de 200 °C y octano es 150 °C. De las 3 sustancias, se obtuvo una mayor capacidad de adsorción de la Cu-SiO₂ 10% con 0.908 mmol/g de heptano.

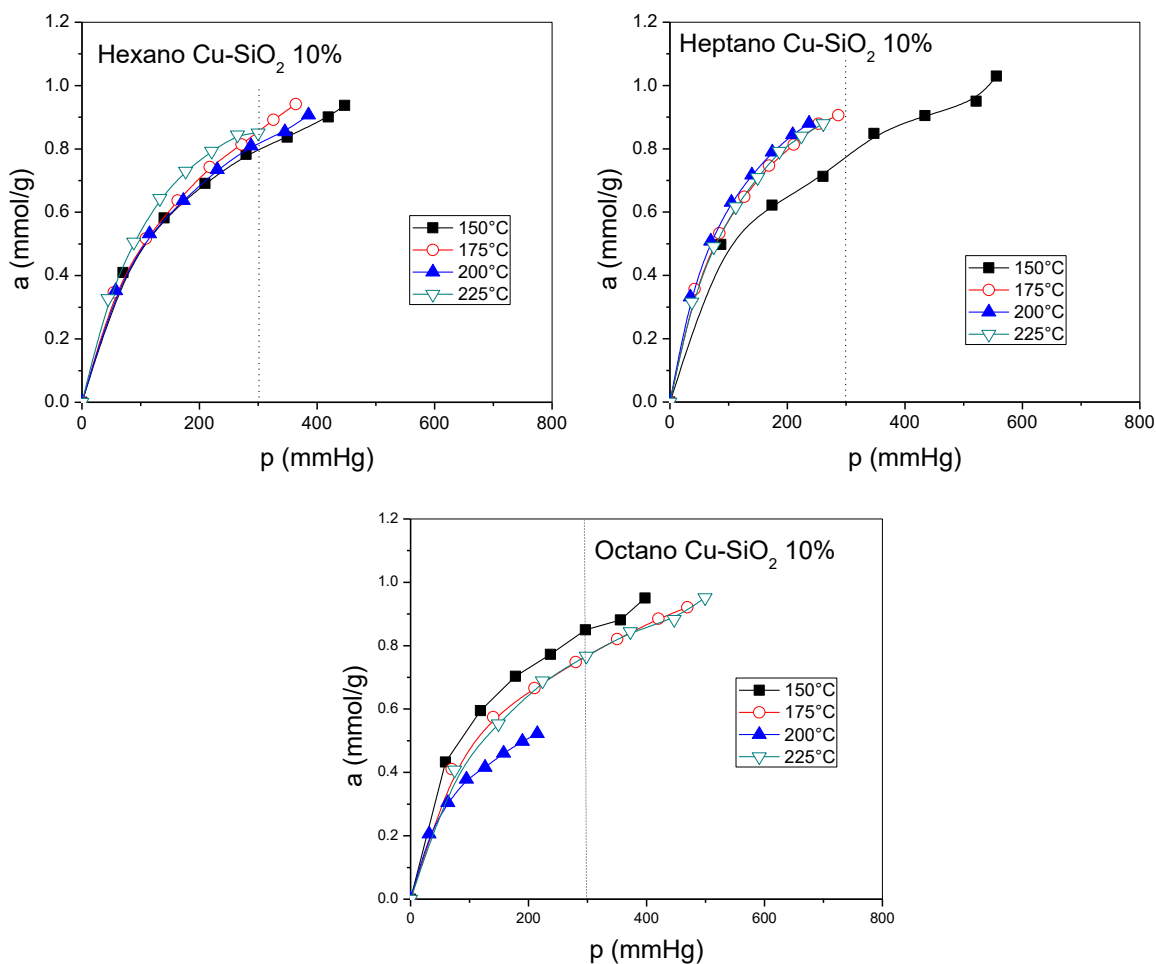


Fig. 31. Isotermas de adsorción de Hexano, Heptano y Octano en Cu-SiO₂ 10%.



3.2.8. Isotermas de adsorción de C₆-C₈ en SiO₂

Las gráficas de las isotermas de adsorción de C₆-C₈ en SiO₂ se presentan en la figura 31, donde el volumen adsorbido se encuentra entre 0.2-0.34 mmol/g. La temperatura máxima de adsorción para octano es de 200 °C y 150 °C para hexano y heptano. Se obtuvo una mayor capacidad de adsorción de la sílice sin dopaje con 0.222 mmol/g de heptano y octano a 100 mmHg.

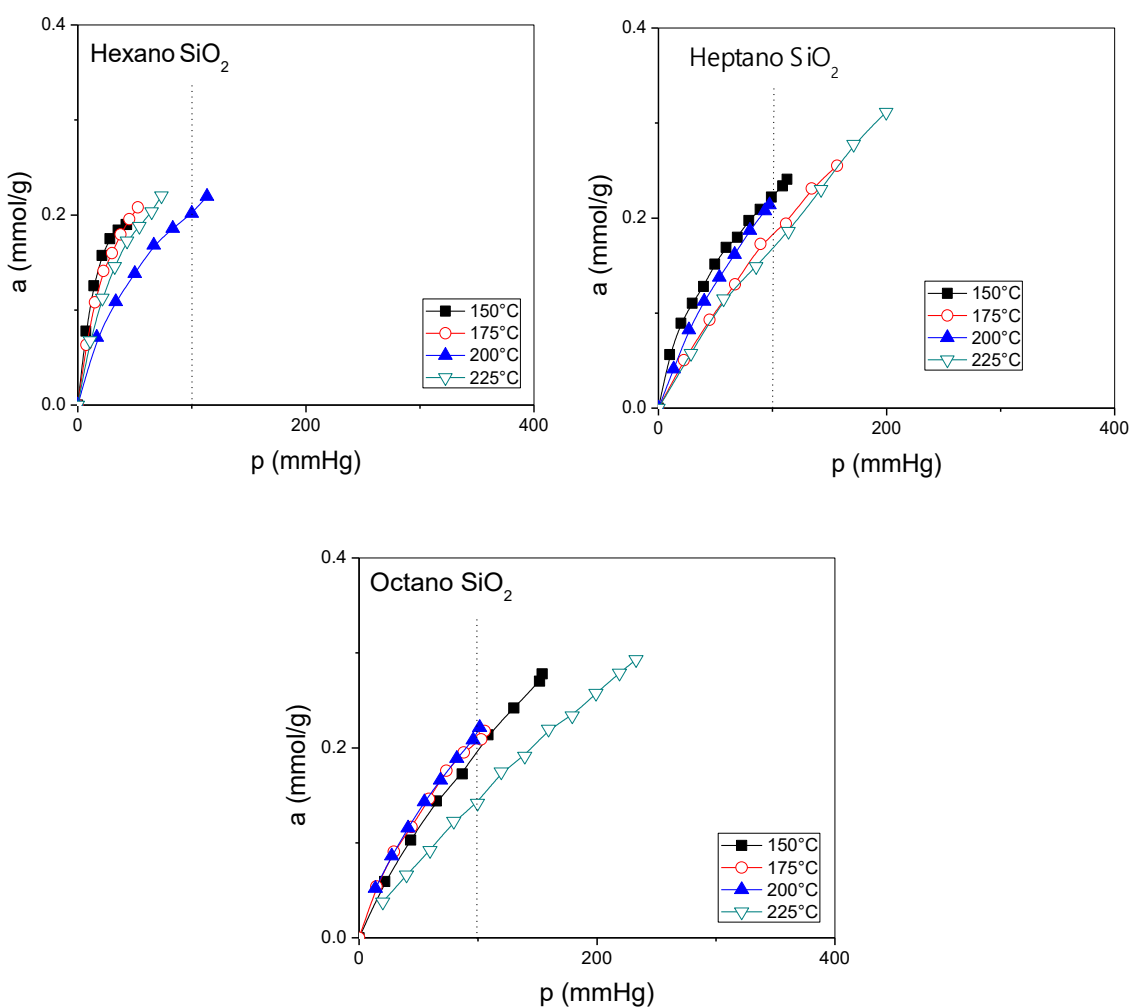


Fig. 32. Isotermas de adsorción de Hexano, Heptano y Octano en SiO₂.

Tomando en cuenta las comparaciones anteriores, se puede observar que, para los BTX, las muestras Cu-SiO₂ al 2 y 10 % la adsorción se da a presiones mayores



a 300 mmHg, siendo la Cu-SiO₂ 2% la que presenta mayor valor de la capacidad de adsorción con 1.048 mmol/g de heptano. Respecto a las SiO₂ y Cu-SiO₂ 5% la adsorción se da a presiones mayores a 100 mmHg pero menores a 300 mmHg la que presenta mayor valor de la capacidad de adsorción es la SiO₂ sin dopaje con 0.222 mmol/g de heptano y octano.

Tabla 12. Comparación de la capacidad de adsorción, 50 mmHg.

	T	SiO ₂	Cu-SiO ₂ 2%	Cu-SiO ₂ 5%	Cu-SiO ₂ 10%
	°C	mmol/g	mmol/g	mmol/g	mmol/g
Benceno	150	0.313	0.138	0.131	0.234
	175	0.459	0.163	0.111	0.354
	200	0.367	0.237	0.109	0.310
	225	0.279	0.247	0.132	0.341
Tolueno	150	0.289	0.130	0.157	0.414
	175	0.348	0.383	0.134	0.295
	200	0.334	0.216	0.136	0.350
	225	0.314	0.325	0.123	0.368
Xileno	150	0.370	0.279	0.144	0.361
	175	0.317	0.159	0.124	0.342
	200	0.176	0.181	0.124	0.378
	225	0.194	0.363	0.136	0.410
Hexano	150	0.190	0.363	0.114	0.283
	175	0.202	0.281	0.116	0.293
	200	0.137	0.398	0.136	0.287
	225	0.181	0.515	0.110	0.327
Heptano	150	0.151	0.482	0.085	0.276
	175	0.100	0.259	0.100	0.374
	200	0.130	0.380	0.106	0.405
	225	0.098	0.419	0.103	0.368
Octano	150	0.115	0.121	0.132	0.339
	175	0.128	0.281	0.127	0.279
	200	0.133	0.431	0.108	0.262
	225	0.079	0.352	0.116	0.269

Se analizaron los resultados más a detalle estableciendo una presión de 50 mmHg como referencia (Tabla 12), donde se comparó la capacidad de adsorción en todas las muestras y compuestos estudiados. De esta tabla podemos observar lo



siguiente: i) la SiO_2 presenta mayor capacidad de adsorción con 0.459 mmol/g de benceno a 175 °C; ii) la muestra Cu-SiO_2 10% presenta mayor capacidad de adsorción para tolueno a 150 °C y xileno a 225 °C con un incremento de 43 y 110% respectivamente respecto a la SiO_2 sin dopar; iii) la Cu-SiO_2 2% es la que presenta mayor capacidad para hexano, heptano y octano teniendo incrementos del 184, 327 y 345% respectivamente comparada con la SiO_2 sin cobre.

Por lo anterior, se observa que un solo material no es el adecuado para la adsorción de todos los COVs evaluados, siendo así que la Cu-SiO_2 2% tiene mayor capacidad de adsorción de alcanos, mientras que Cu-SiO_2 10% presenta mayor capacidad de adsorción en tolueno y xileno, quedando en segundo lugar para benceno ya que donde se presenta mayor adsorción es en la SiO_2 .

Los valores obtenidos en el presente trabajo respecto a la capacidad de adsorción de son mayores a los reportados en trabajos previos sobre zeolitas [45], SBA e hidrocalcita [46] y arcillas [47]

Una vez obtenidas las isotermas de adsorción de BTX y C6-C8 sobre las muestras de sílice, se procedió a evaluarlas mediante los modelos de Langmuir, Freundlich y Dubinin a fin de estudiar los parámetros de adsorción característicos del proceso.

3.2.2. Isotermas de adsorción con el modelo Langmuir

Este modelo es utilizado principalmente para describir el equilibrio ideal entre el adsorbente y el adsorbato describiendo la adsorción en una monocapa. Sus parámetros de adsorción obtenidos se pueden corroborar en la tabla 12.

3.2.2.1. Isotermas con el modelo Langmuir para Cu-SiO_2 2%

En la figura 32 se presentan las isotermas de adsorción con el modelo Langmuir de los compuestos BTX y en la figura 33 las isotermas de los compuestos C₆-C₈ en Cu-SiO_2 2%, en las que se aprecia que en casi todas presentan linealidad, con excepción de Xileno a 150 °C y 225 °C al igual que heptano a 175 °C

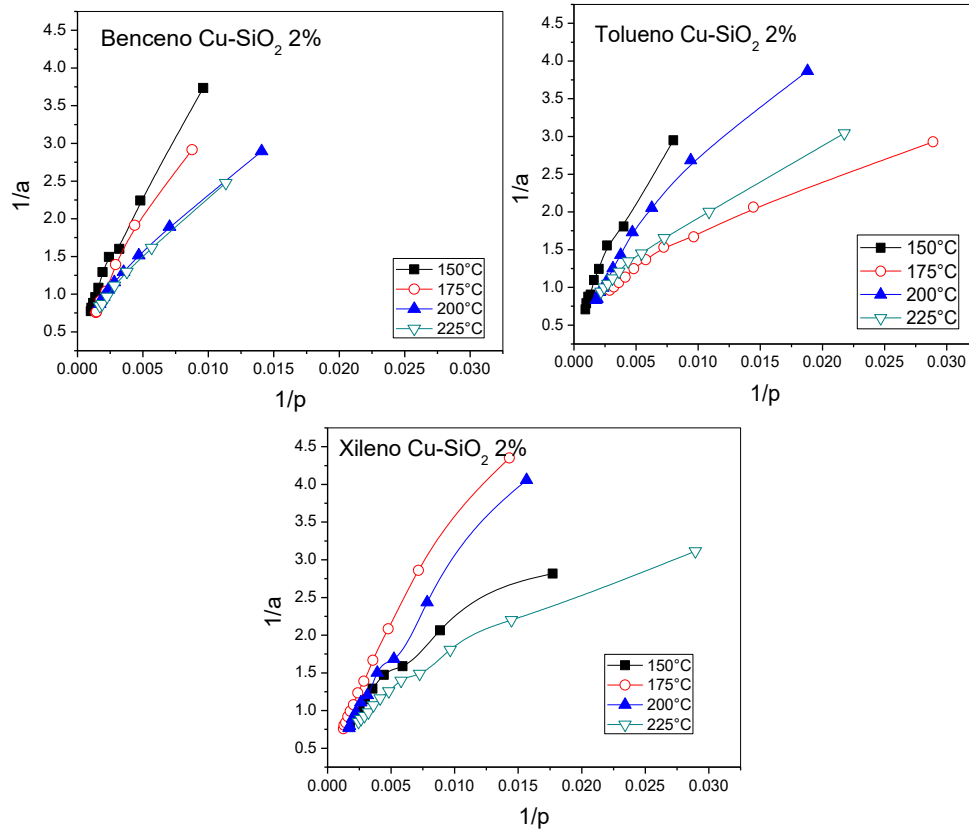


Fig. 33. Isothermas de adsorción con el modelo Langmuir de Benceno, Tolueno, Xileno en Cu-SiO₂ 2%.

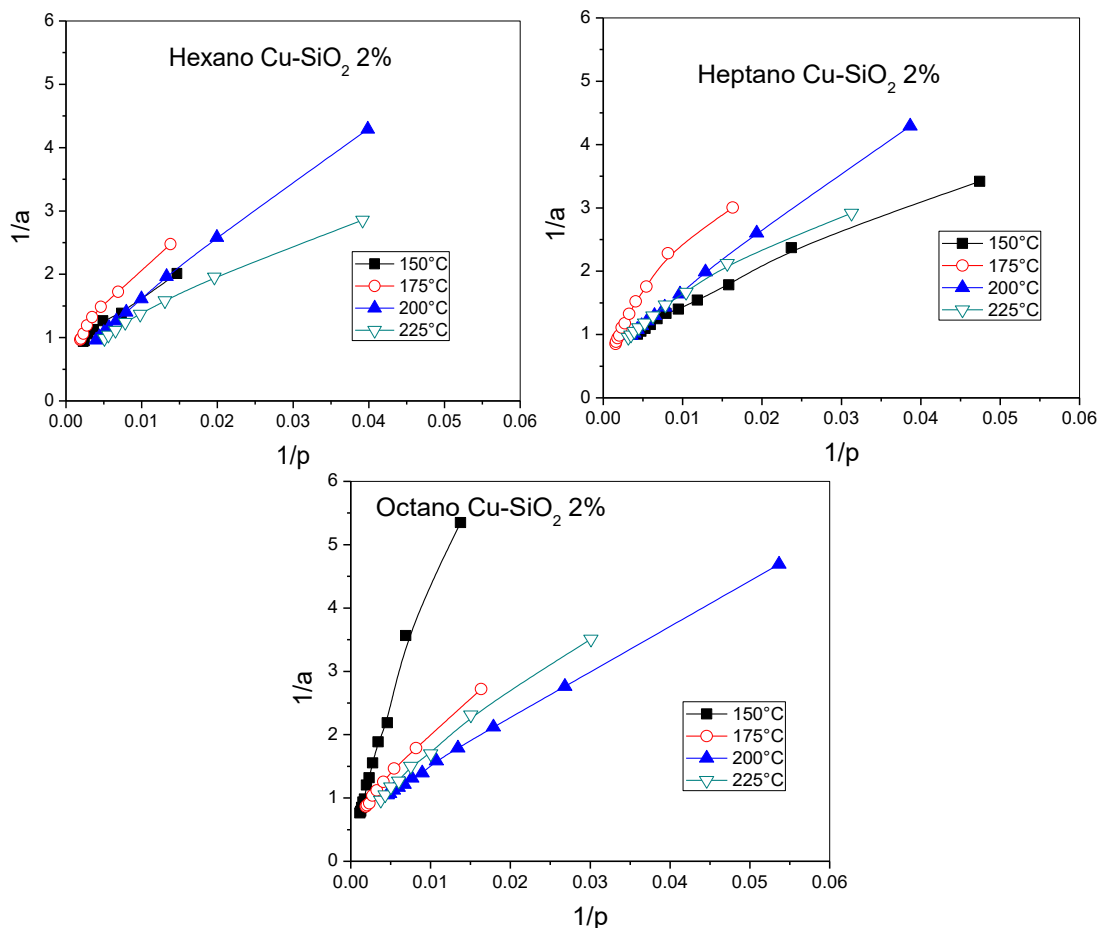


Fig. 34. Isotermas de adsorción con el modelo Langmuir de Hexano, Heptano y Octano en Cu-SiO_2 2%.

3.2.2.2. Isotermas con el modelo Langmuir para Cu-SiO_2 5%

La figura 34 se presentan las isotermas con el modelo Langmuir de los compuestos BTX en Cu-SiO_2 5%, y en la figura 35 se muestran las isotermas de los compuestos $\text{C}_6\text{-C}_8$ en las que casi no se aprecia linealidad, en especial con heptano a 150 °C y 175 °C, hexano a 225 °C y benceno a 225 °C por lo que el modelo no se ajusta adecuadamente.

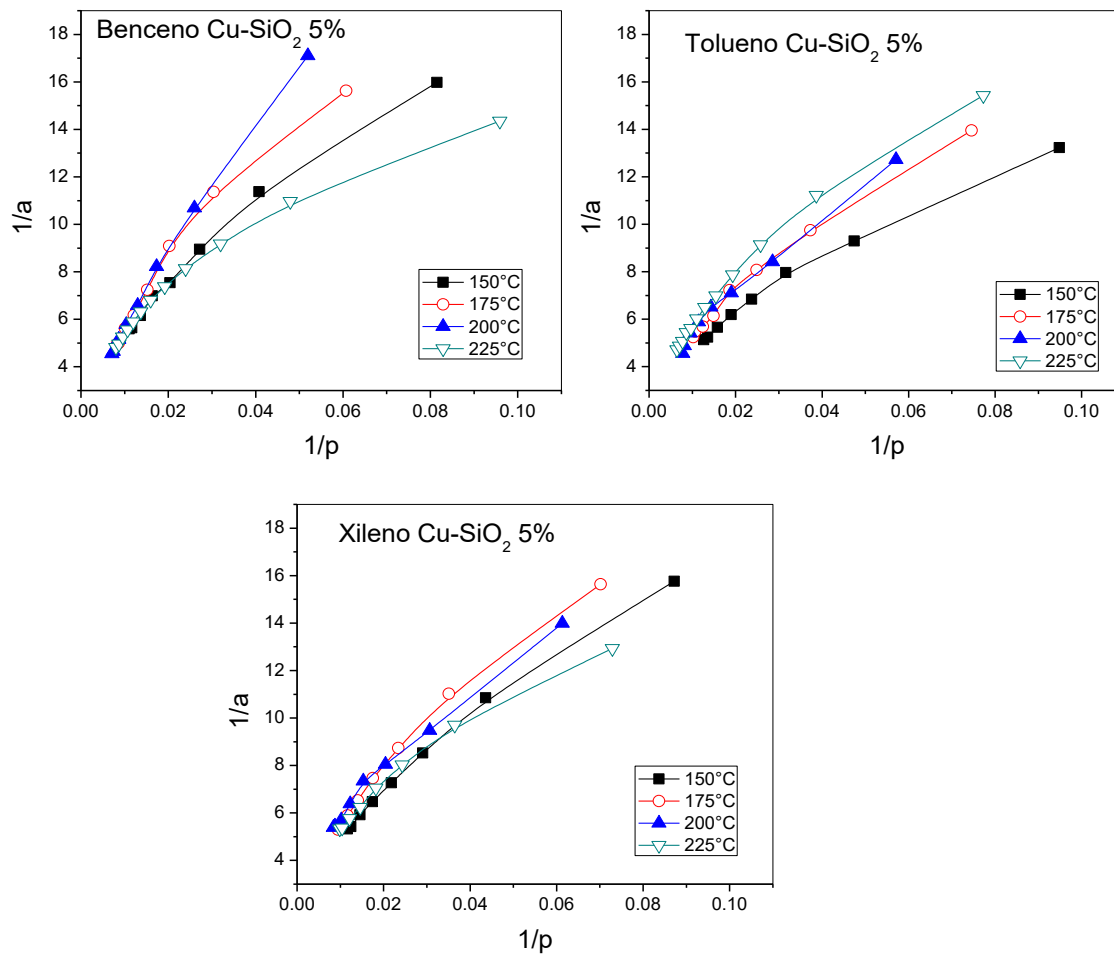


Fig. 35. Isothermas de adsorción con el modelo Langmuir de Benceno, Tolueno, Xileno en Cu-SiO₂ 5%.

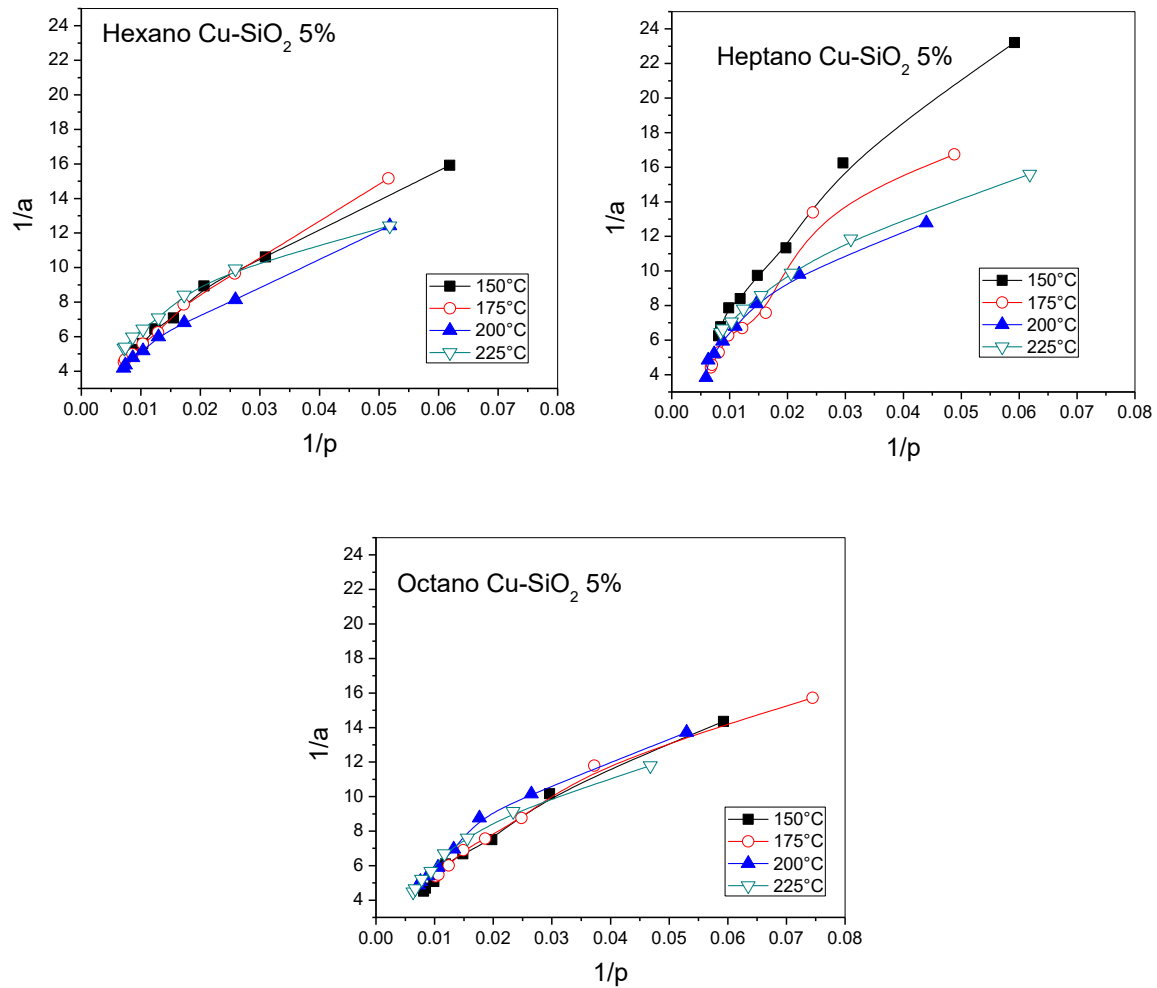


Fig. 36. Isothermas de adsorción con el modelo Langmuir de Hexano, Heptano y Octano en Cu-SiO₂ 5%.

3.2.2.3. Isothermas con el modelo Langmuir para Cu-SiO₂ 10%

A continuación, se presentan las isothermas para BTX (Figura 36) y C₆-C₈ (Figura 37) con el modelo Langmuir en las que la linealidad se puede apreciar más en los alcanos, por lo que el modelo no se ajusta adecuadamente para todos los casos.

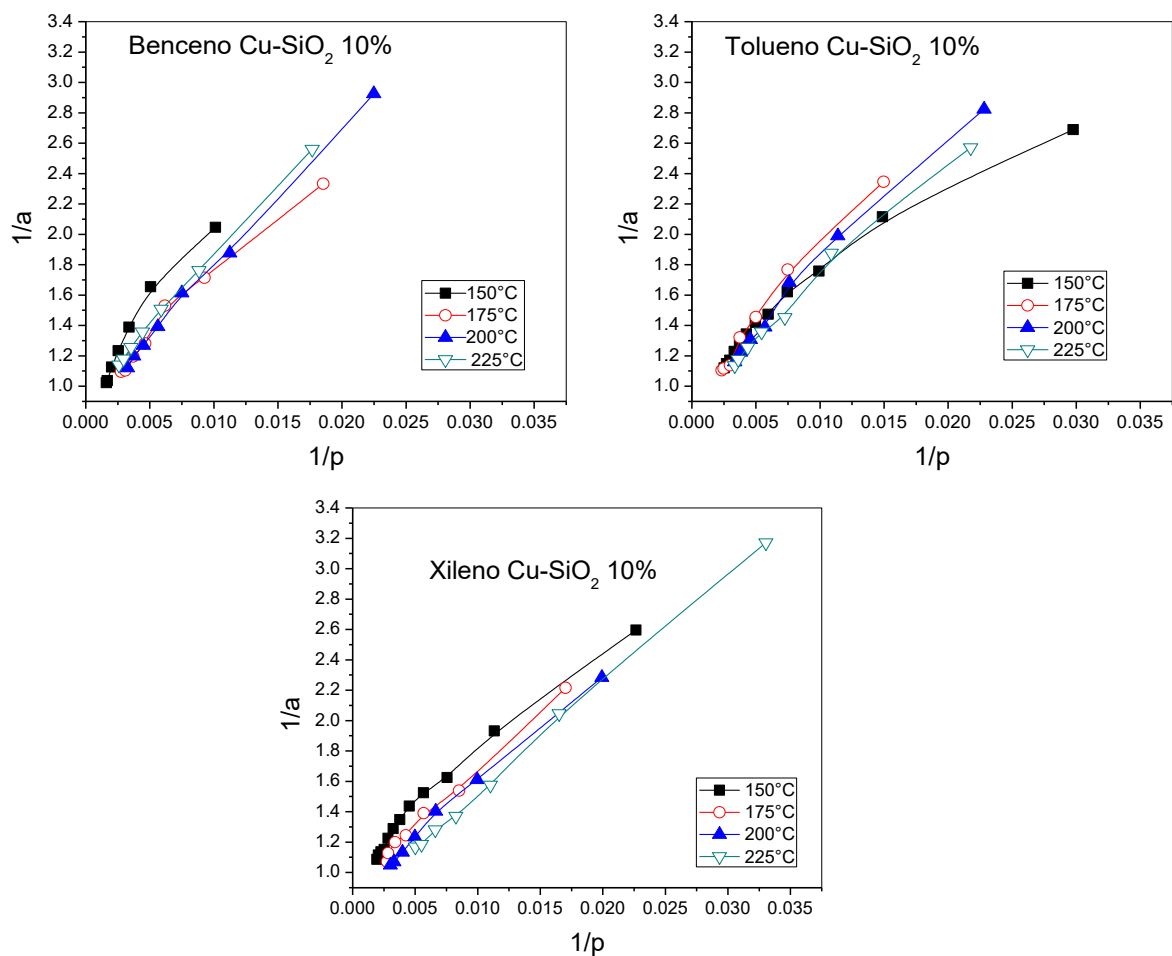


Fig. 37. Isothermas de adsorción con el modelo Langmuir de Benceno, Tolueno y Xileno en Cu-SiO₂ 10%.

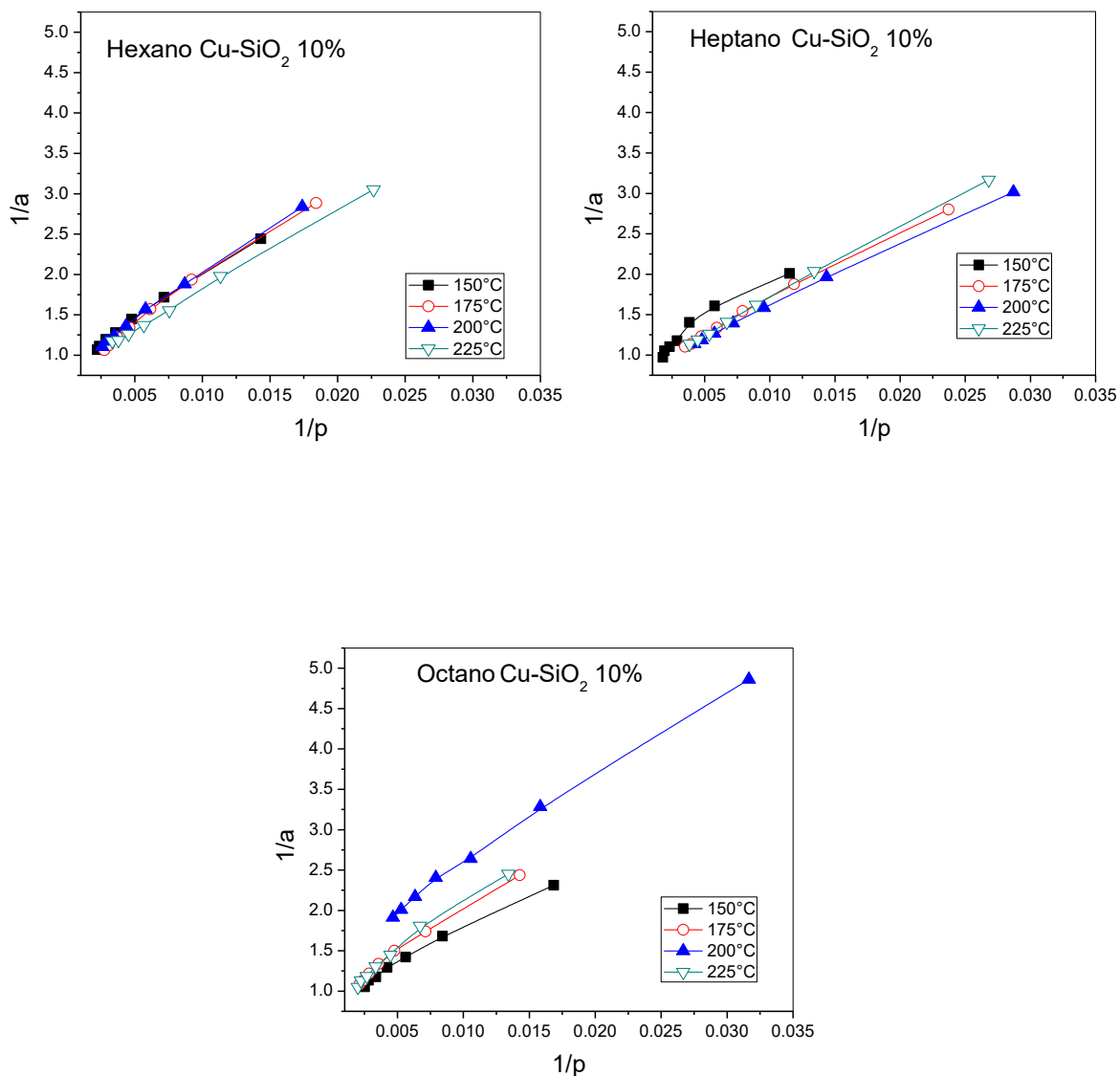


Fig. 38. Isotermas de adsorción con el modelo Langmuir de Hexano, Heptano, Octano en Cu-SiO₂ 10%.

3.2.2.4. Isotermas con el modelo Langmuir para SiO₂ con Langmuir

En la figura 38 se presentan las isotermas de adsorción de los compuestos BTX en SiO₂ con el modelo Langmuir y en la figura 39 se presentas las isotermas para



C₆-C₈, en los gráficos se puede apreciar una linealidad en la mayoría, con excepción de xileno a 200 °C por lo que se determina un ajuste para el 90%.

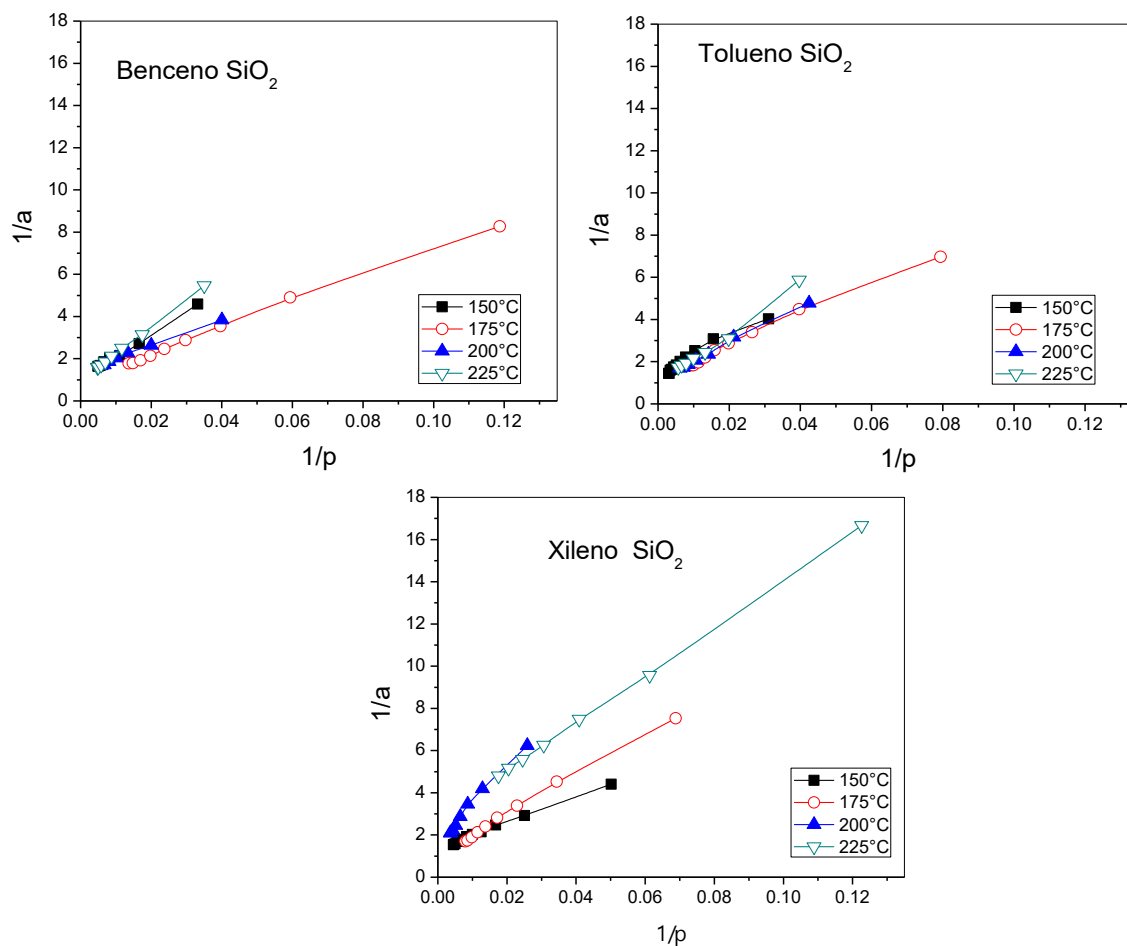


Fig. 39. Isothermas de adsorción con el modelo Langmuir de Benceno, Tolueno, Xileno en SiO_2 .

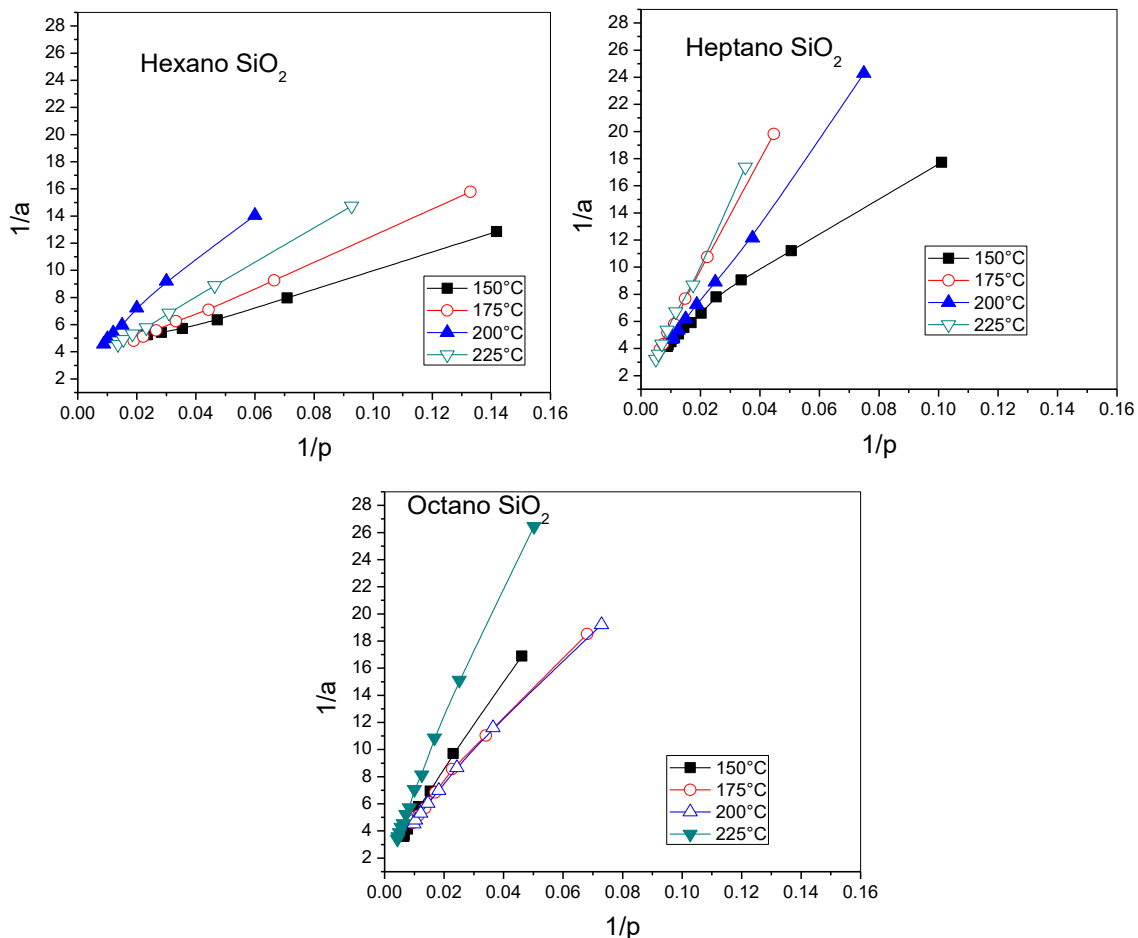


Fig. 40. Isothermas de adsorción con el modelo Langmuir de Hexano, Heptano y Octano en SiO₂.

El modelo de Langmuir se basa en el supuesto de que la adsorción está limitada por un número fijo de sitios de adsorción y no hay interacción entre las moléculas adsorbidas. Los parámetros de adsorción obtenidos mediante el ajuste de Langmuir son mostrados en la tablas 13 y 14 a sus distintas temperaturas, en primer lugar el coeficiente de correlación R_L muestra un mejor ajuste con este modelo en las muestras sin dopaje, y este se aleja de la unidad considerablemente en las muestras Cu-SiO₂ 5% donde la porosidad no es idealmente homogénea y al terminar la formación de la monocapa en los poros



más pequeños, resulta en la formación de multicapas en la porosidad secundaria donde las moléculas interactúan entre sí perdiendo la homogeneidad energética de adsorción.

Tabla 13. Parámetros de la ecuación de Langmuir para la adsorción de los compuestos orgánicos volátiles (COVs) en SiO₂ y Cu-SiO₂ 2%.

	T		SiO ₂		Cu-SiO ₂ 2%		
	°C	am	K _L	R _L	am	K _L	R _L
Benceno	150	0.908	0.011	0.994	1.892	0.002	0.99
	175	1.048	0.015	0.999	2.407	0.001	0.976
	200	0.734	0.022	0.994	1.48	0.004	0.99
	225	1.032	0.008	0.997	1.663	0.004	0.991
Tolueno	150	0.742	0.014	0.988	1.822	0.002	0.979
	175	0.79	0.017	0.994	1.159	0.012	0.972
	200	0.863	0.013	0.99	1.497	0.004	0.959
	225	1.057	0.008	0.951	1.233	0.008	0.988
Xileno	150	0.75	0.021	0.981	1.331	0.006	0.952
	175	0.959	0.011	1	1.857	0.002	0.979
	200	0.647	0.008	0.994	2.163	0.002	0.993
	225	0.354	0.025	0.995	1.274	0.009	0.962
Hexano	150	0.281	0.055	0.999	1.266	0.009	0.985
	175	0.336	0.031	0.992	1.223	0.007	0.986
	200	0.31	0.018	1	1.55	0.007	0.976
	225	0.347	0.022	0.995	1.257	0.015	0.997
Heptano	150	0.297	0.023	0.998	1.18	0.015	0.987
	175	0.75	0.003	0.997	1.299	0.005	0.941
	200	0.655	0.005	0.986	1.439	0.007	0.998
	225	0.98	0.002	0.999	1.206	0.012	0.971
Octano	150	0.603	0.005	0.995	2.262	0.001	0.977
	175	0.381	0.011	0.995	1.473	0.005	0.989
	200	0.382	0.011	0.995	1.35	0.01	0.999
	225	0.625	0.003	0.997	1.421	0.007	0.987



Tabla 14. Parámetros de la ecuación de Langmuir para la adsorción de los compuestos orgánicos volátiles (COVs) en Cu-SiO₂ 5 y 10%.

	T	Cu-SiO ₂ 5%			Cu-SiO ₂ 10%		
		°C	am	K _L	R _L	am	K _L
Benceno	150	0.227	0.03	0.975	1.104	0.008	0.973
	175	0.259	0.019	0.95	1.083	0.012	0.997
	200	0.349	0.01	0.992	1.163	0.009	0.998
	225	0.21	0.043	0.936	1.079	0.01	0.938
Tolueno	150	0.233	0.044	0.978	0.925	0.019	0.954
	175	0.234	0.032	0.98	1.102	0.009	0.973
	200	0.259	0.025	0.985	1.072	0.011	0.985
	225	0.231	0.028	0.964	1.092	0.012	0.987
Xileno	150	0.246	0.029	0.975	0.97	0.014	0.974
	175	0.24	0.024	0.984	1.097	0.012	0.992
	200	0.23	0.027	0.963	1.164	0.012	0.992
	225	0.221	0.037	0.984	1.253	0.011	0.998
Hexano	150	0.261	0.019	0.987	1.152	0.008	0.999
	175	0.32	0.013	0.92	1.242	0.007	0.993
	200	0.304	0.018	0.977	1.183	0.007	0.993
	225	0.208	0.03	0.99	1.215	0.008	0.997
Heptano	150	0.22	0.014	0.91	1.126	0.009	0.932
	175	0.327	0.01	0.902	1.194	0.01	0.997
	200	0.259	0.018	0.956	1.201	0.011	0.999
	225	0.178	0.033	0.97	1.238	0.009	0.999
Octano	150	0.284	0.018	0.969	1.107	0.011	0.988
	175	0.232	0.026	0.955	1.095	0.008	0.987
	200	0.244	0.021	0.935	0.673	0.014	0.996
	225	0.246	0.023	0.922	1.138	0.007	0.981

Donde *am* es la capacidad de monocapa de Langmuir (mmol/g), *K_L* la constante de Langmuir (mmHg⁻¹) y *R_L* el coeficiente de correlación lineal.

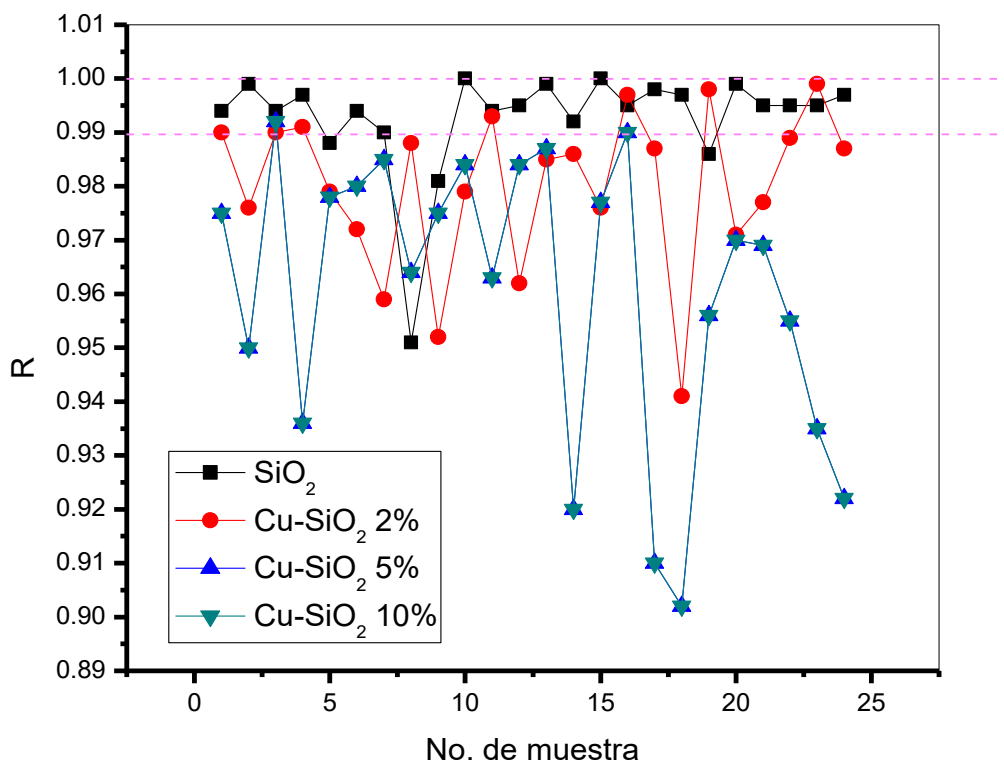


Fig. 41. grafico de R_L para los 24 puntos de cada una de las sílices.

Con los resultados de Langmuir y graficar R_L se obtiene el grafico anterior (Figura 40) en donde se puede apreciar mejor la tendencia de R_L a 1, en donde 20 de los puntos de SiO_2 son los que se encuentran entre 0.99 y 1.00, mientras que de Cu-SiO_2 2% solo 8 puntos.

El parámetro más característico del modelo de Langmuir representa la capacidad máxima de adsorción en la monocapa (a_m) (Figura 41), indicativo de altas interacciones energéticas entre adsorbato-adsorbente, en la figura se graficó a_m y se observa que las sílices dopadas con cobre al 2% obtienen una mayor adsorción en la monocapa principalmente de benceno a 175 °C, xileno a 200 °C y octano a 150 °C de acuerdo con la tabla 13. El dopaje al 5% reduce significativamente la



capacidad máxima de adsorción en la monocapa. Lo cual, hace a esta muestra menos viable en la adsorción.

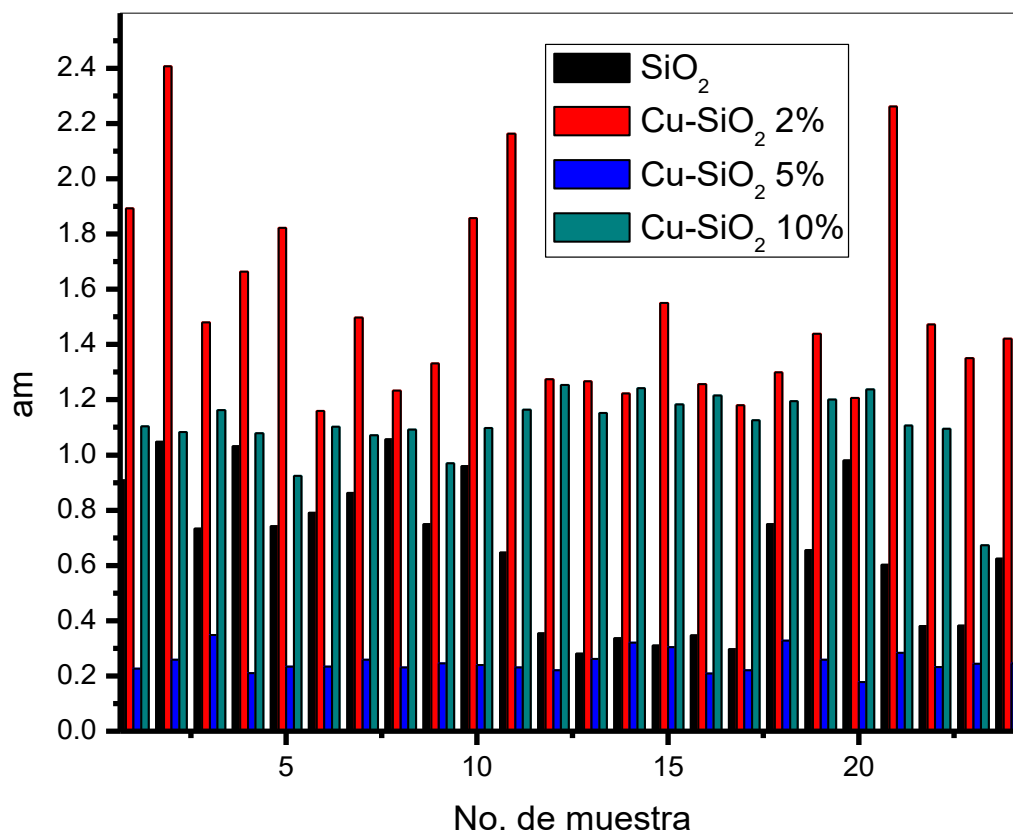


Fig. 42. Grafico de am obtenido por el ajuste de Lagmuir.

3.2.3. Isotermas de adsorción con el modelo Freundlich

En esta ecuación se establece que, a una temperatura constante, la cantidad de adsorbato unido por unidad de peso de adsorbente es una función logarítmica de la concentración en la fase sólida en equilibrio y se representa por medio de una línea recta.



3.2.3.1. Isotermas de adsorción con el modelo Freundlich de Cu-SiO₂ 2%

En la figura 42 se presentan las isotermas de adsorción con el modelo Freundlich de los compuestos BTX en Cu-SiO₂ 2%, y en la figura 43 las isotermas de los compuestos C₆-C₈. La linealidad no se aprecia en todos los gráficos, en especial para todos los compuestos a 150 °C.

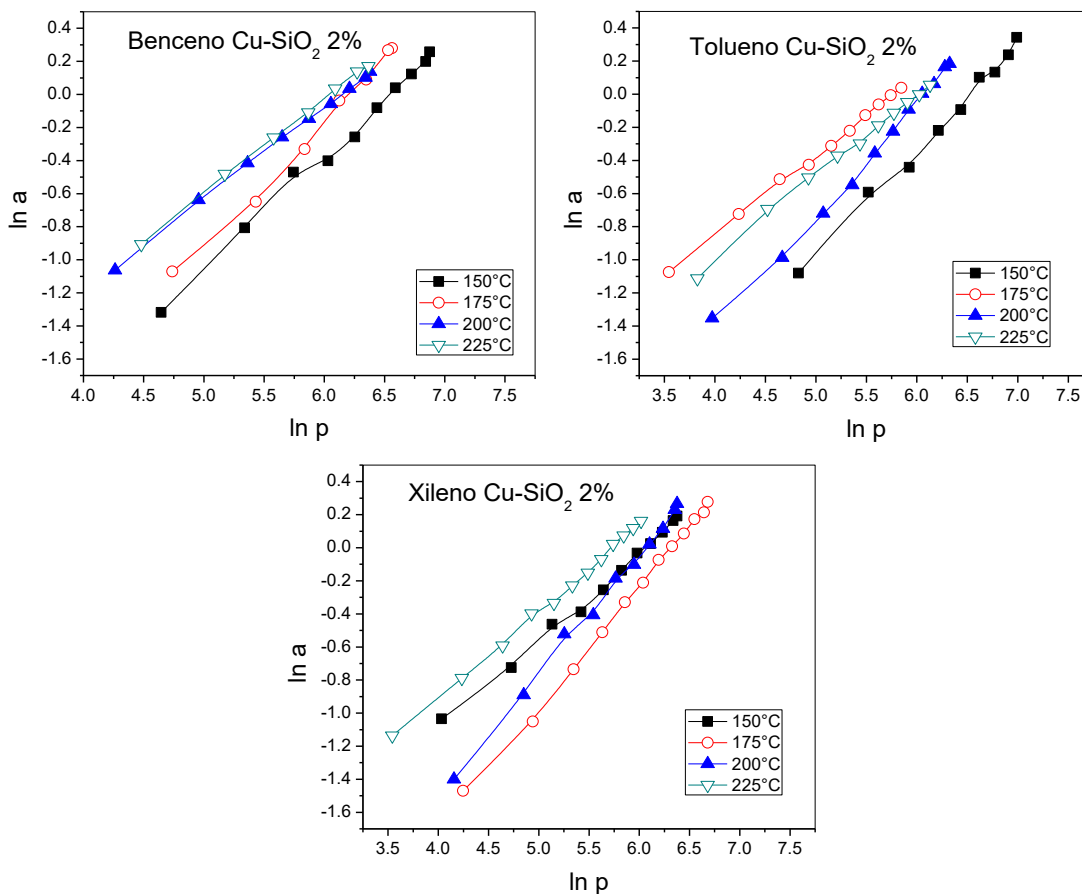


Fig. 43. Isotermas de adsorción de Benceno, Tolueno y Xileno en Cu-SiO₂ 2% con el modelo Freundlich.

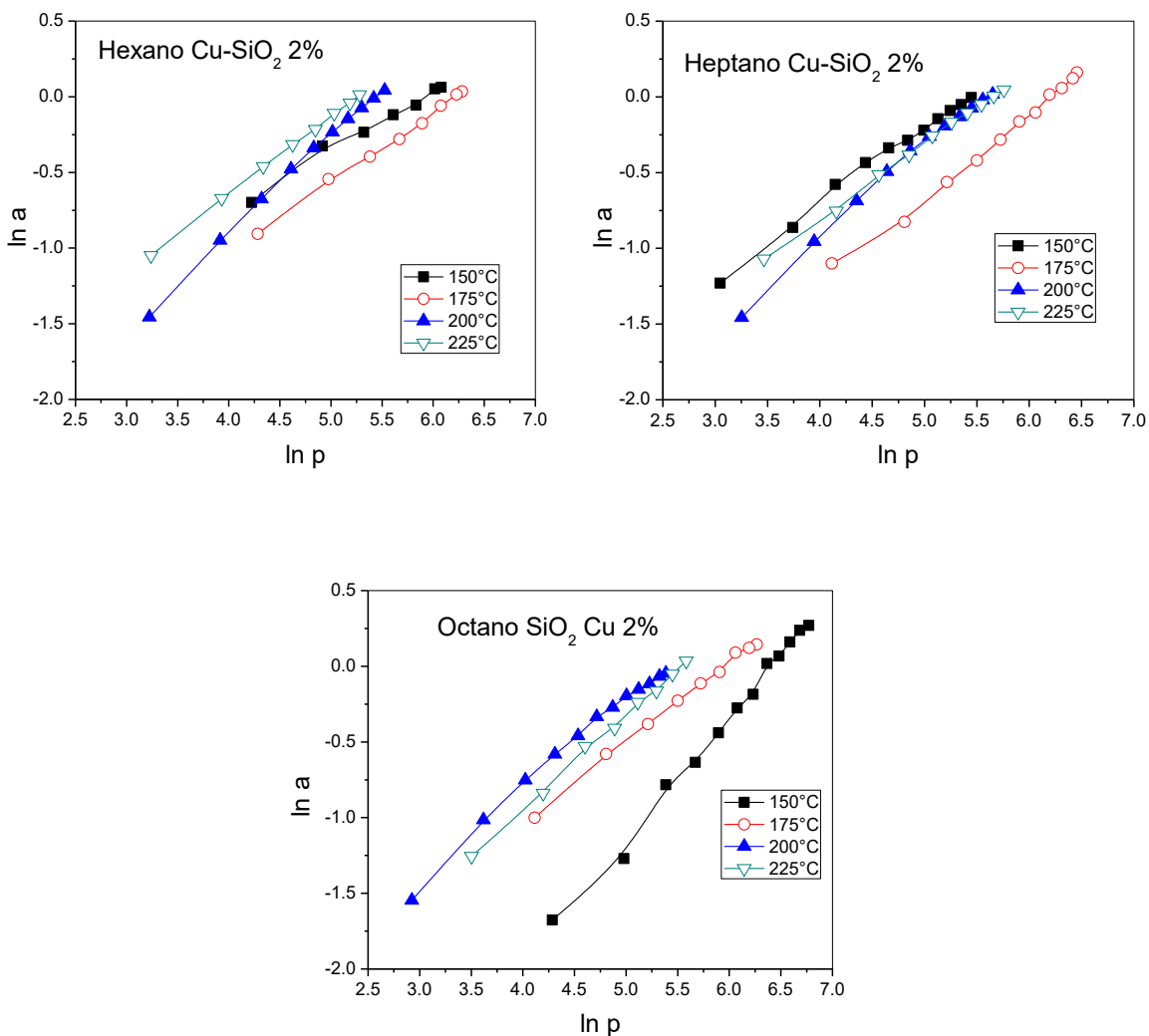


Fig. 44. Isothermas de adsorción de Hexano, Heptano y Octano en Cu-SiO₂ 2% con el modelo Freundlich.

3.2.3.2. Isothermas de adsorción con el modelo Freundlich en Cu-SiO₂ 5%

Los gráficos de la figura 44 presentan isothermas de adsorción con el modelo Freundlich de los compuestos BTX en Cu-SiO₂ 5%, y en la figura 45 se presentan las isothermas para los alcanos C₆-C₈ en donde se parecía una mayor linealidad en



los BTX con excepción de xileno y tolueno a 200 °C, mientras que, en heptano a 150 °C y a 175 °C, y en octano a 175 °C y 200 °C la linealidad no es apreciada.

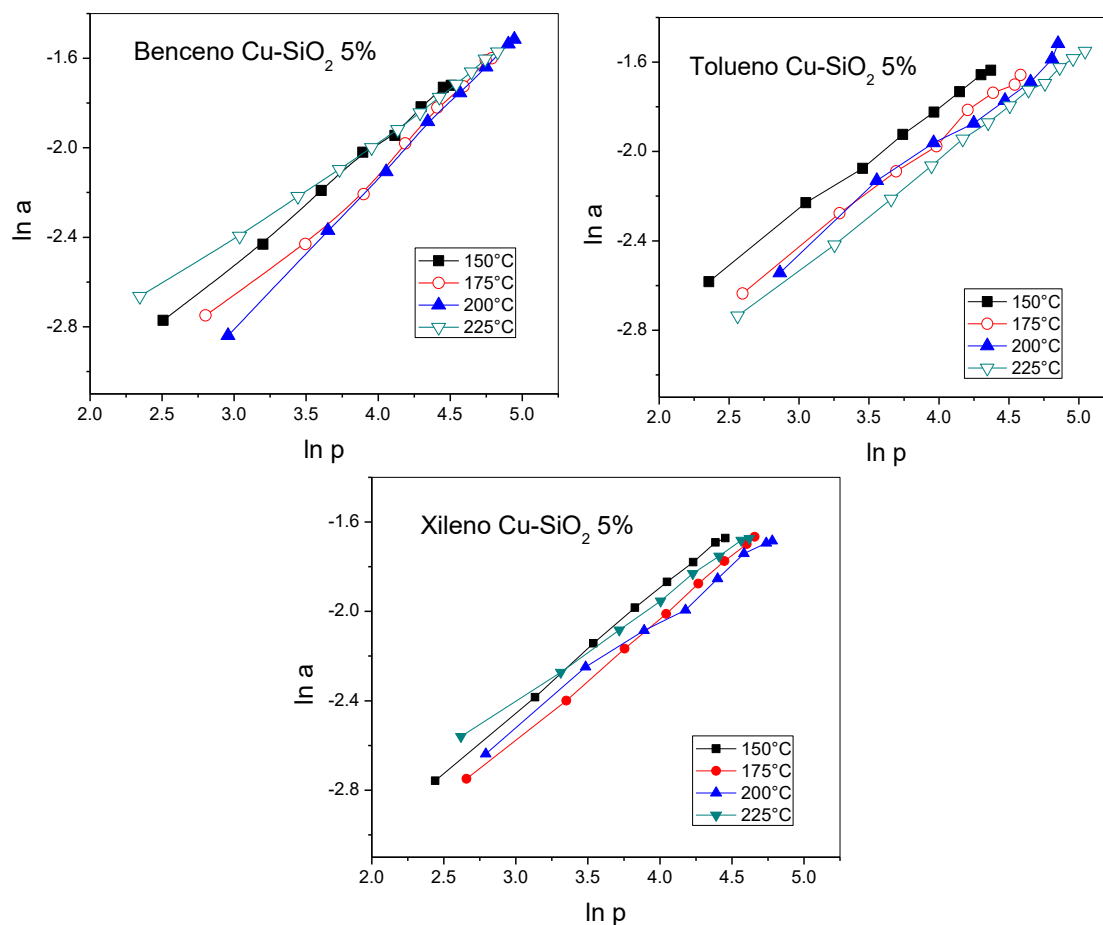


Fig. 45. Isotermas de adsorción de Benceno, Tolueno, Xileno en Cu-SiO_2 5% con el modelo Freundlich.

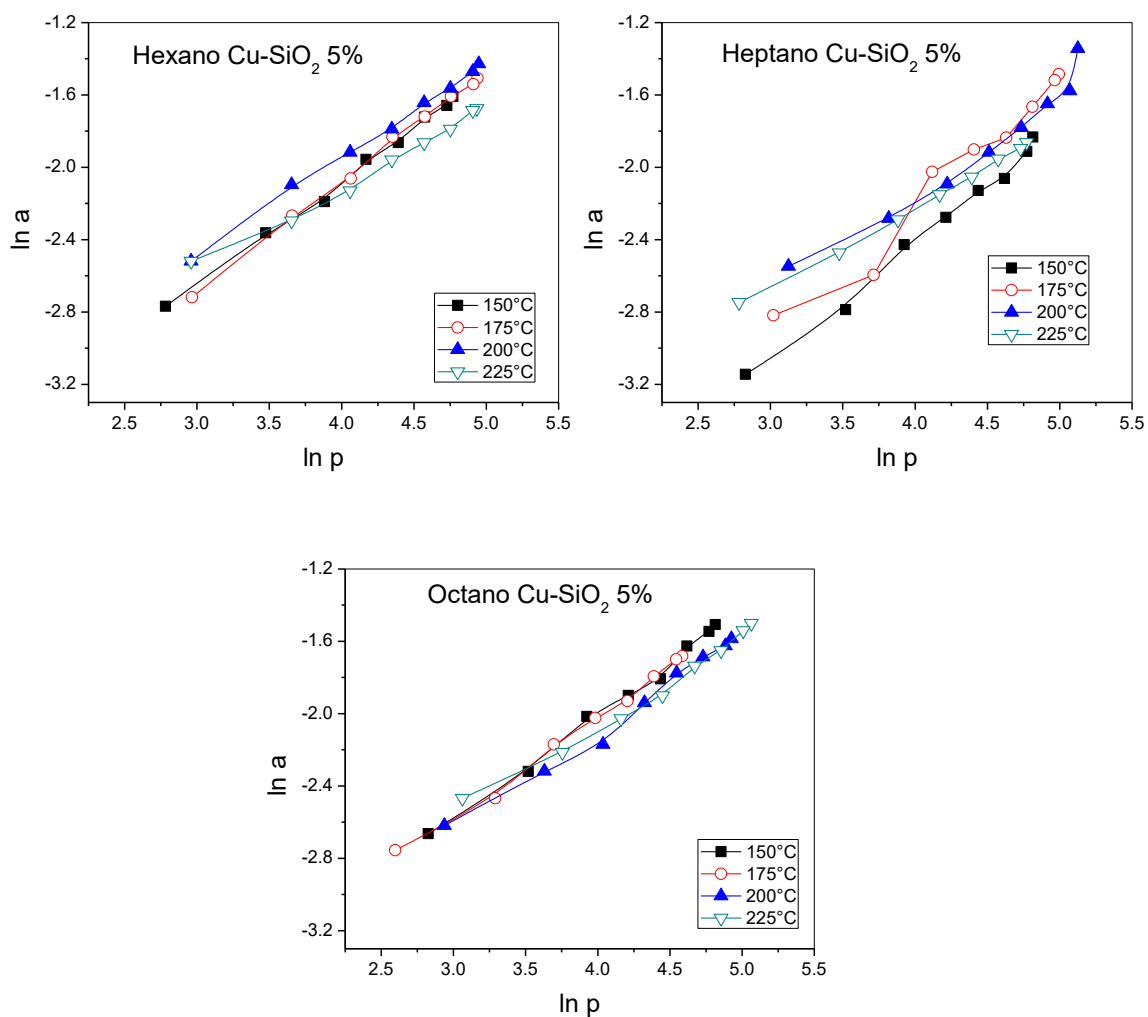


Fig. 46. Isotermas de adsorción de Hexano, Heptano y Octano en Cu-SiO₂ 5% con el modelo Freundlich.

3.2.3.3. Isotermas de adsorción con el modelo Freundlich en Cu-SiO₂ 10%

Los gráficos de la figura 46 presentan las isotermas de adsorción de los compuestos BTX en Cu-SiO₂ 10% con el modelo Frundlich y en la figura 47 se presentan las isotermas de C₆-C₈. Se puede observar que no se cumple linealidad



en los BTX a 225 °C, así como tampoco en el caso de xileno, heptano y octano a 150 °C.

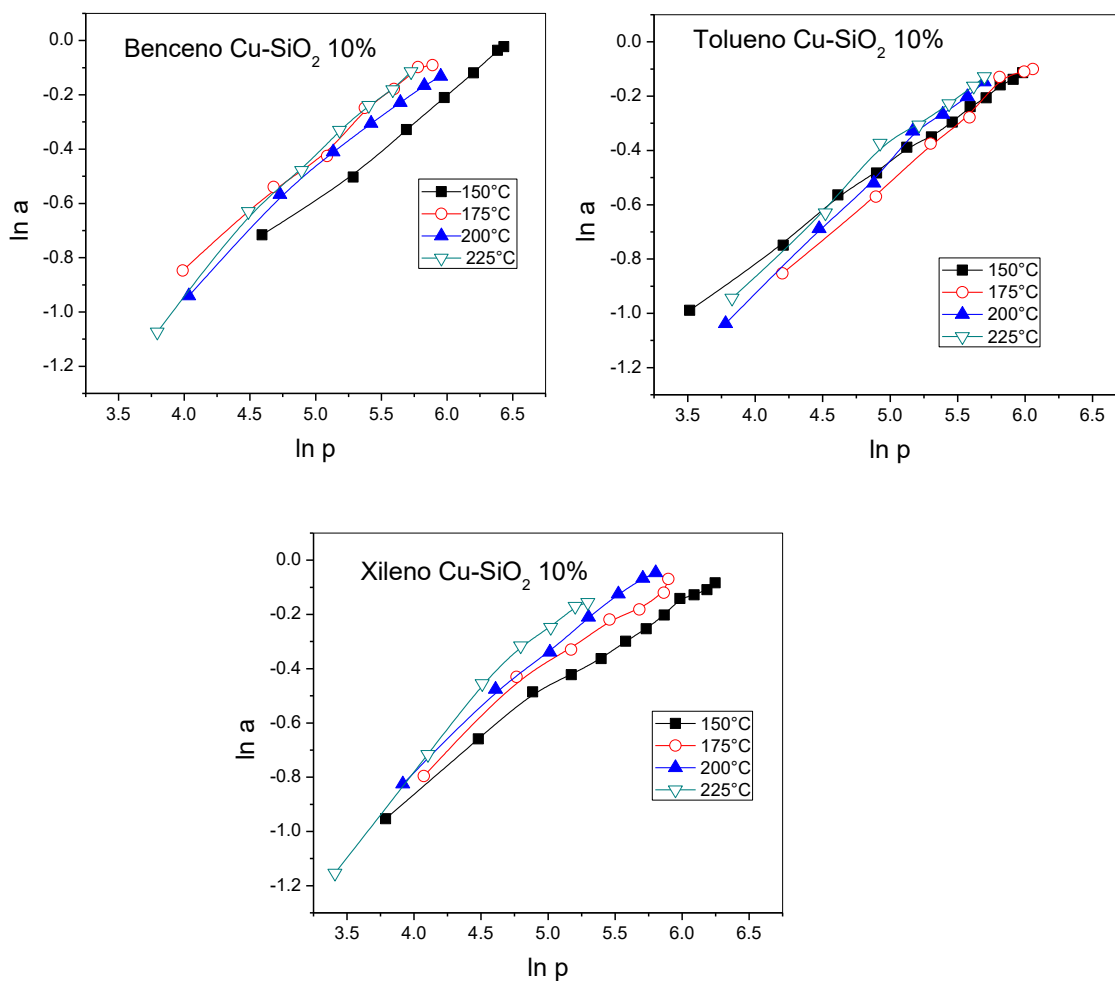


Fig. 47. Isotermas de adsorción de Benceno, Tolueno, Xileno en Cu-SiO₂ 10% con el modelo Freundlich.

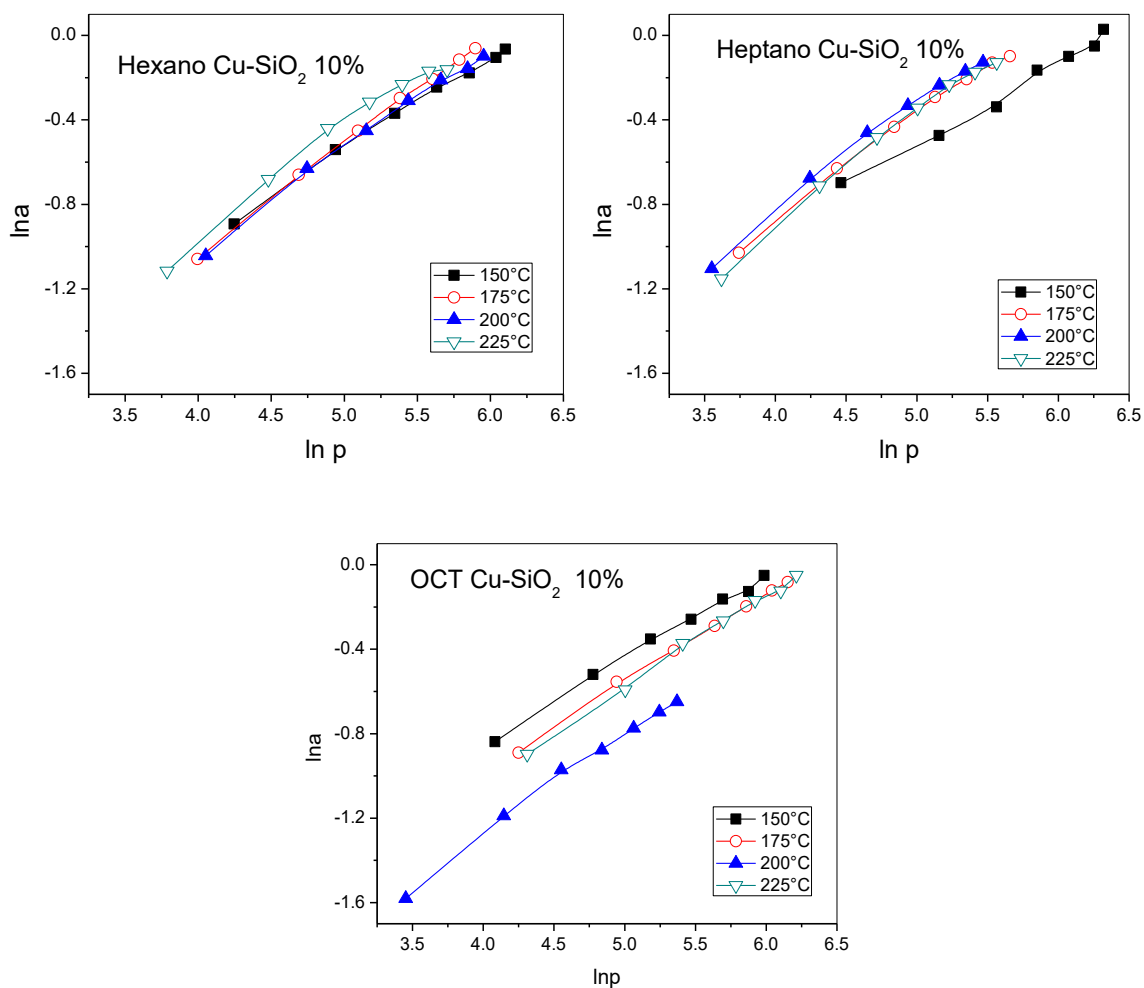


Fig. 48. Isotermas de adsorción de Hexano, Heptano y Octano en Cu-SiO₂ 10% con el modelo Freundlich.

3.2.3.4. Isotermas de adsorción con el modelo Freundlich en SiO₂

A continuación, en la figura 48 se presentan las isotermas de adsorción de los compuestos BTX en SiO₂ sin dopaje y en la figura 49 se presentan las isotermas para C₆-C₈. En estos gráficos se observa que algunas no se ajustan a la linealidad, como es el caso de tolueno y xileno a 225 °C, y xileno a 200 °C. En el caso de los



alcanos, la linealidad no se cumple como en hexano a 150 °C y heptano a 200 °C y 225 °C.

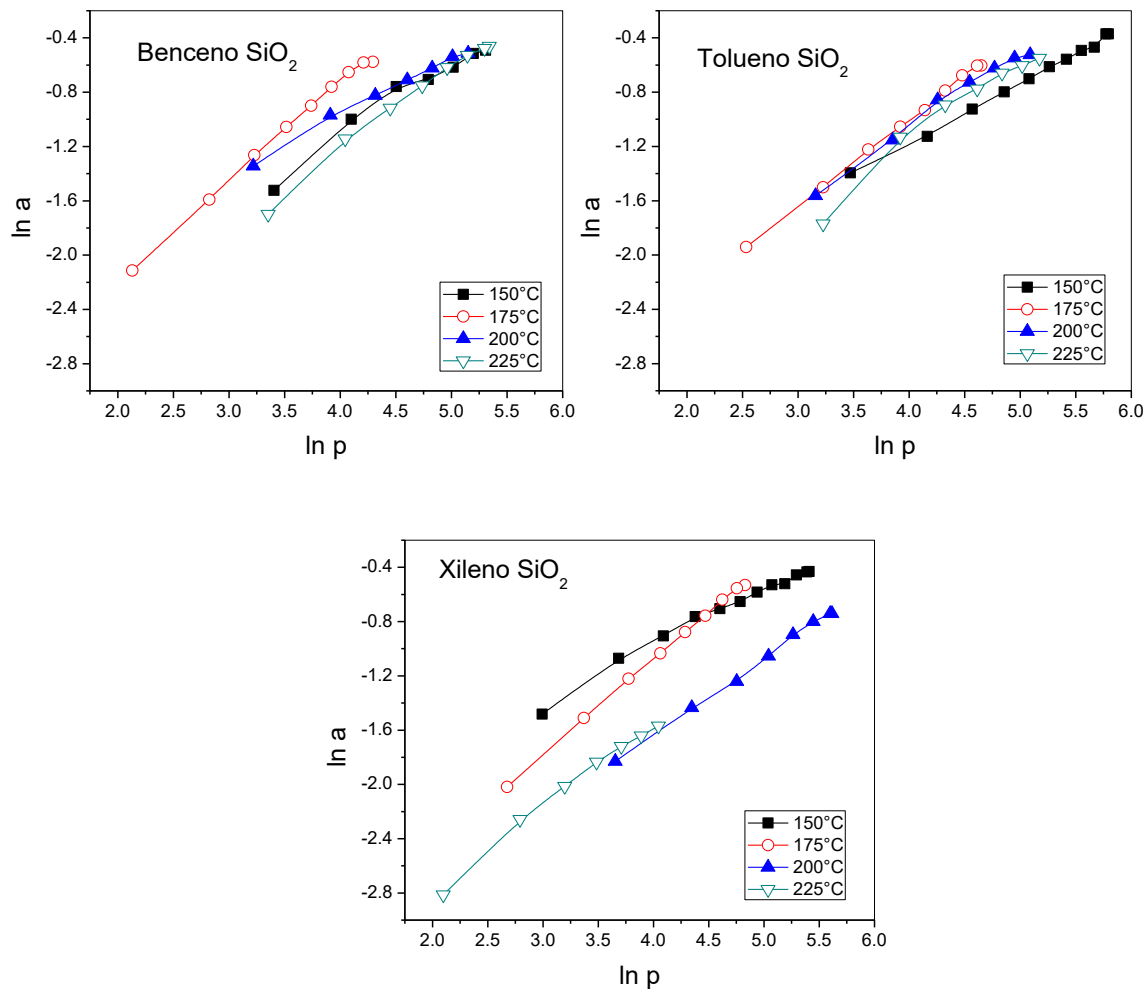


Fig. 49. Isotermas de adsorción de Benceno, Tolueno y Xileno en SiO₂ con el modelo Freundlich.

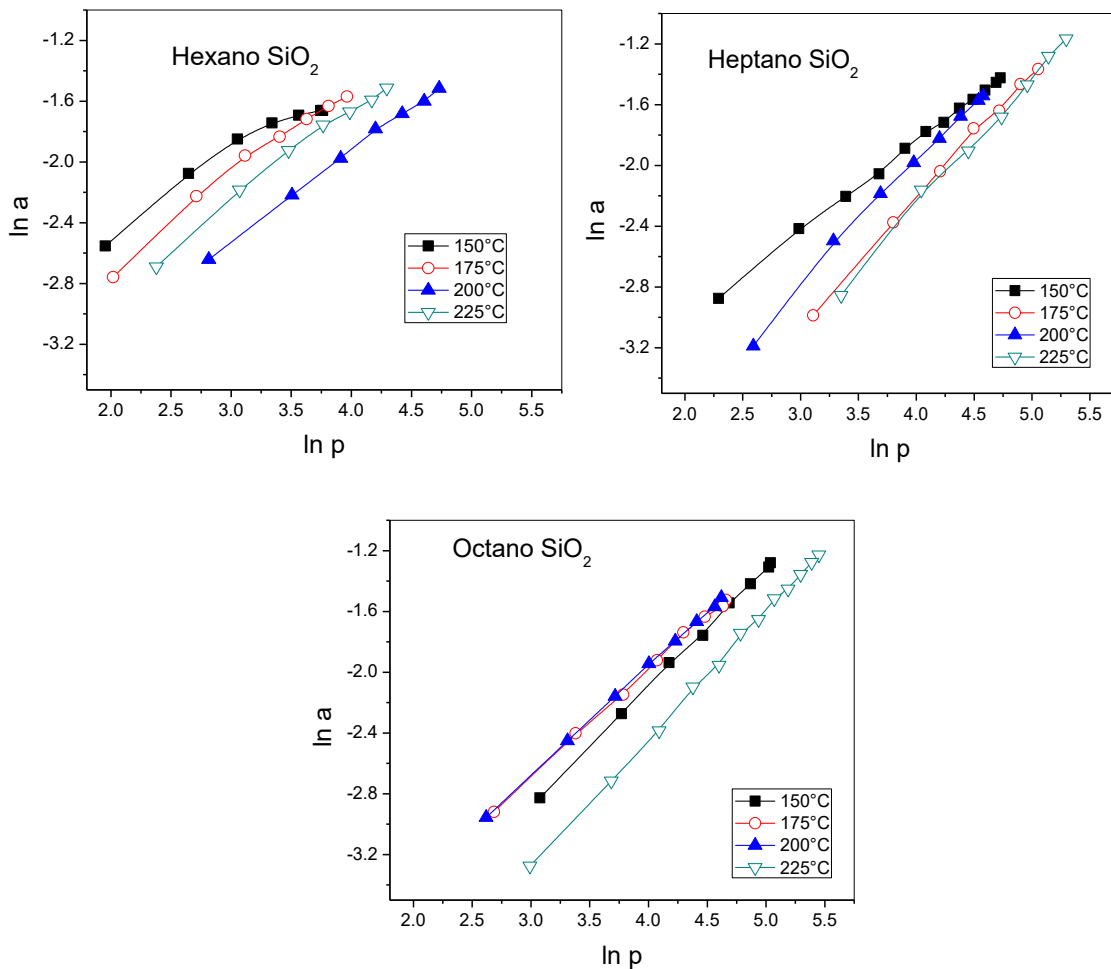


Fig. 50. Isothermas de adsorción de Hexano, Heptano y Octano en SiO_2 con el modelo Freundlich.

El modelo de Freundlich es una ecuación empírica en comparación a los otros modelos y tiene como principal aplicación conocer la tendencia de adsorción de un compuesto que será adsorbido en una superficie. Sus parámetros de adsorción obtenidos mediante el ajuste son mostrados en las tablas 15 y 16 a sus distintas temperaturas.



Tabla 15. Parámetros de la ecuación de Freundlich para la adsorción de los compuestos orgánicos volátiles (COVs) en SiO₂ y Cu-SiO₂ 2%.

	T	SiO ₂			Cu-SiO ₂ 2%		
	°C	K _f	n	R _f	K _f	n	R _f
Benceno	150	0.04	1.909	0.99	0.011	1.461	0.993
	175	0.026	1.373	0.986	0.009	1.318	0.993
	200	0.068	2.339	0.958	0.033	1.799	0.999
	225	0.025	1.636	0.996	0.031	1.746	0.999
Tolueno	150	0.053	2.263	0.999	0.015	1.563	0.992
	175	0.028	1.564	0.985	0.063	2.083	0.998
	200	0.038	1.809	0.954	0.016	1.48	0.994
	225	0.027	1.636	0.997	0.052	2.026	0.996
Xileno	150	0.072	2.418	0.997	0.041	1.899	0.995
	175	0.021	1.438	0.986	0.01	1.374	0.998
	200	0.02	1.769	0.982	0.012	1.361	0.997
	225	0.017	1.578	0.999	0.049	1.9	0.998
Hexano	150	0.033	2.072	0.945	0.098	2.538	0.982
	175	0.02	1.656	0.982	0.056	2.159	0.996
	200	0.014	1.706	0.998	0.03	1.543	0.996
	225	0.017	1.654	0.987	0.066	1.936	0.999
Heptano	150	0.015	1.701	0.993	0.066	1.986	0.991
	175	0.004	1.196	0.995	0.032	1.812	0.994
	200	0.005	1.235	0.999	0.034	1.644	0.991
	225	0.003	1.175	0.997	0.062	2.025	0.998
Octano	150	0.005	1.277	0.999	0.005	1.226	0.994
	175	0.008	1.419	0.998	0.042	1.88	0.997
	200	0.008	1.395	1	0.041	1.677	0.988
	225	0.003	1.192	0.999	0.033	1.617	0.997



Tabla 16. Parámetros de la ecuación de Freundlich para la adsorción de los compuestos orgánicos volátiles (COVs) en Cu-SiO₂ 5 y 10%.

	T	Cu-SiO ₂ 5%			Cu-SiO ₂ 10%		
		°C	K _f	n	R _f	K _f	n
Benceno	150	0.016	1.874	0.99	0.081	2.595	0.994
	175	0.011	1.668	0.999	0.085	2.457	0.992
	200	0.008	1.496	0.997	0.076	2.406	0.985
	225	0.024	2.246	0.998	0.057	2.063	0.986
Tolueno	150	0.025	2.132	0.999	0.108	2.822	0.985
	175	0.020	2.048	0.996	0.074	2.387	0.998
	200	0.021	2.085	0.987	0.062	2.142	0.991
	225	0.019	2.074	0.999	0.076	2.302	0.993
Xileno	150	0.017	1.834	0.999	0.11	2.918	0.992
	175	0.015	1.828	0.999	0.105	2.708	0.973
	200	0.019	2.103	0.994	0.090	2.430	0.992
	225	0.023	2.206	0.999	0.054	1.876	0.98
Hexano	150	0.012	1.727	0.998	0.051	1.976	0.974
	175	0.011	1.639	0.997	0.066	2.295	0.994
	200	0.017	1.881	0.987	0.044	1.918	0.997
	225	0.021	2.285	0.996	0.05	2.045	0.991
Heptano	150	0.007	1.538	0.998	0.087	2.59	0.988
	175	0.007	1.435	0.991	0.060	2.051	0.987
	200	0.013	1.793	0.960	0.057	1.969	0.986
	225	0.018	2.235	0.946	0.048	1.885	0.991
Octano	150	0.013	1.722	0.983	0.086	2.489	0.994
	175	0.015	1.811	0.992	0.070	2.382	0.997
	200	0.014	1.868	0.993	0.041	2.081	0.991
	225	0.018	2.047	0.985	0.061	2.263	0.995

Donde n es una constante empírica que representa la velocidad de saturación del adsorbato, K_f la constante de Freundlich, y R_f el coeficiente de correlación lineal.



En las tablas 15 y 16, se muestran los parámetros obtenidos de las isothermas con el modelo de Freundlich, en las que se puede apreciar un mejor ajuste para las isothermas de SiO_2 para octano y Cu-SiO_2 5% para xileno por su coeficiente de correlación lineal R_f en 0.999, pero también se observa que en las isothermas de SiO_2 , a pesar de que no muchas obtiene en 0.999, la mayoría se encuentran dentro de los rangos 0.996-0.999, en comparación con SiO_2 , Cu-SiO_2 5% y Cu-SiO_2 10%.

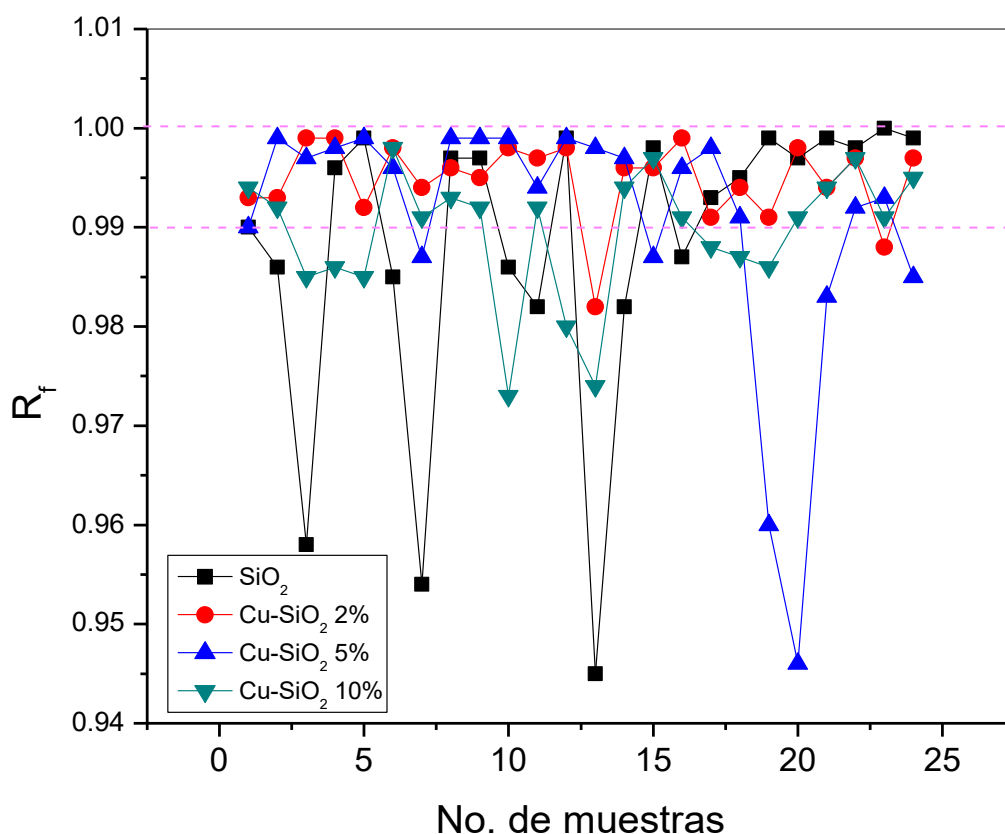


Fig. 51. Grafico de R_f para los 24 resultados, obtenidos de cada sílice con el modelo Freundlich.

Con el grafico anterior (Figura 50), se puede determinar que hay mayor número de puntos entre los rangos 0.99-1.00 siendo así que para Cu-SiO_2 2%, 22 puntos se encuentran dentro de ese rango, casi el 90% de los puntos para esta muestra. 18 puntos de Cu-SiO_2 5%, 15 puntos de Cu-SiO_2 10% y 15 puntos de SiO_2 también



son los que se encuentran en estos rangos. Por lo que se puede afirmar que existe una adsorción favorable y un mejor ajuste de esta ecuación ya que es más del 72% del total de los puntos obtenidos.

En la figura 51 podemos observar el comportamiento de los valores de n obtenidos a partir del ajuste de Freundlich aplicado a las muestras, este parámetro indica la afinidad de los gases adsorbidos sobre las sílices, los datos obtenidos indican que al ser mayores a 1, la adsorción es favorable en todos los casos, siendo la Cu-SiO₂ 10%, la que presenta mayor afinidad energética entre los adsorbatos y esta muestra, seguida de Cu-SiO₂ 5% > Cu-SiO₂ 2% > SiO₂.

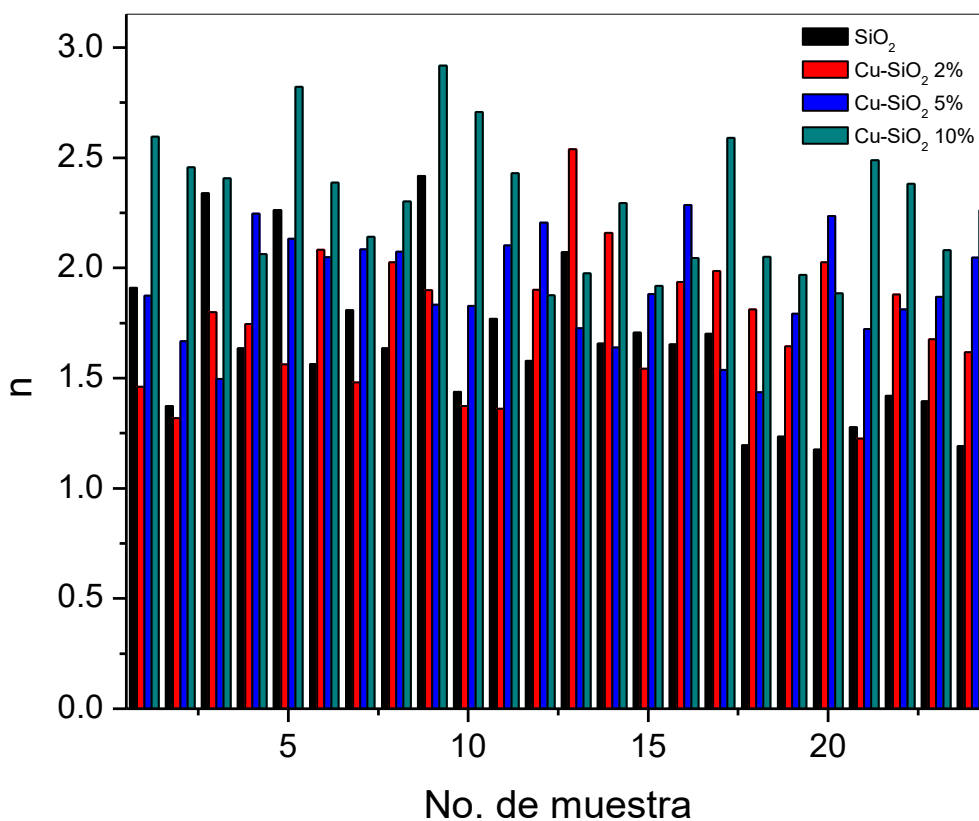


Fig. 52. Grafico de n para los 24 resultados, obtenidos de cada sílice con el modelo Freundlich.



3.2.4. Isotermas de adsorción con el modelo Dubinin

Los datos de adsorción también se ajustaron a al modelo de Dubinin mediante regresión lineal para determinar el llenado del microporo mediante su ecuación. Es aplicable para describir la adsorción de gases y vapores en microporos energéticamente uniformes.

3.2.4.1 Isotermas de adsorción con el modelo de Dubinin en Cu-SiO₂ 2%

En el caso de todas las isotermas se observa que tienen una pendiente negativa pero no todas presentan líneas rectas. En las figura 52-59 se observan las gráficas para BTX y alcanos aplicando el modelo Dubinin.

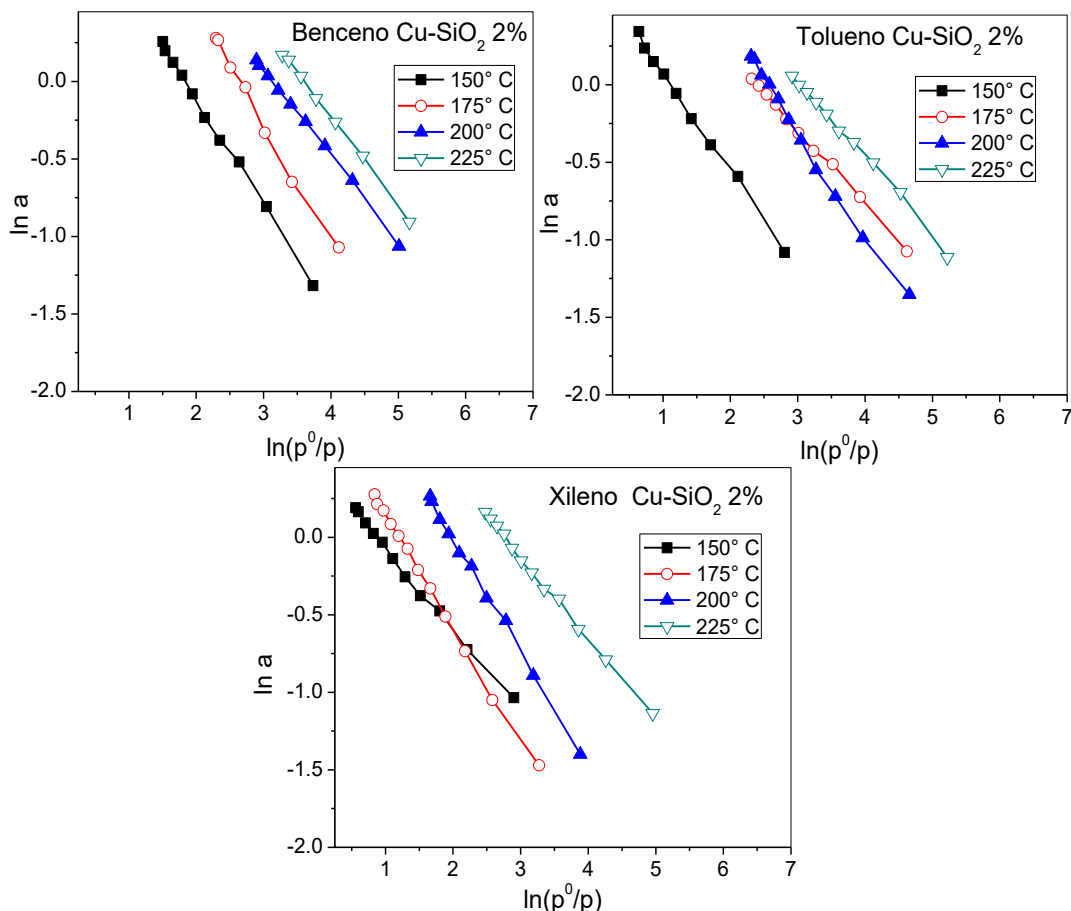


Fig. 53. Isotermas de adsorción de Benceno, Tolueno y Xileno en Cu-SiO₂ 2% con el modelo de Dubinin.

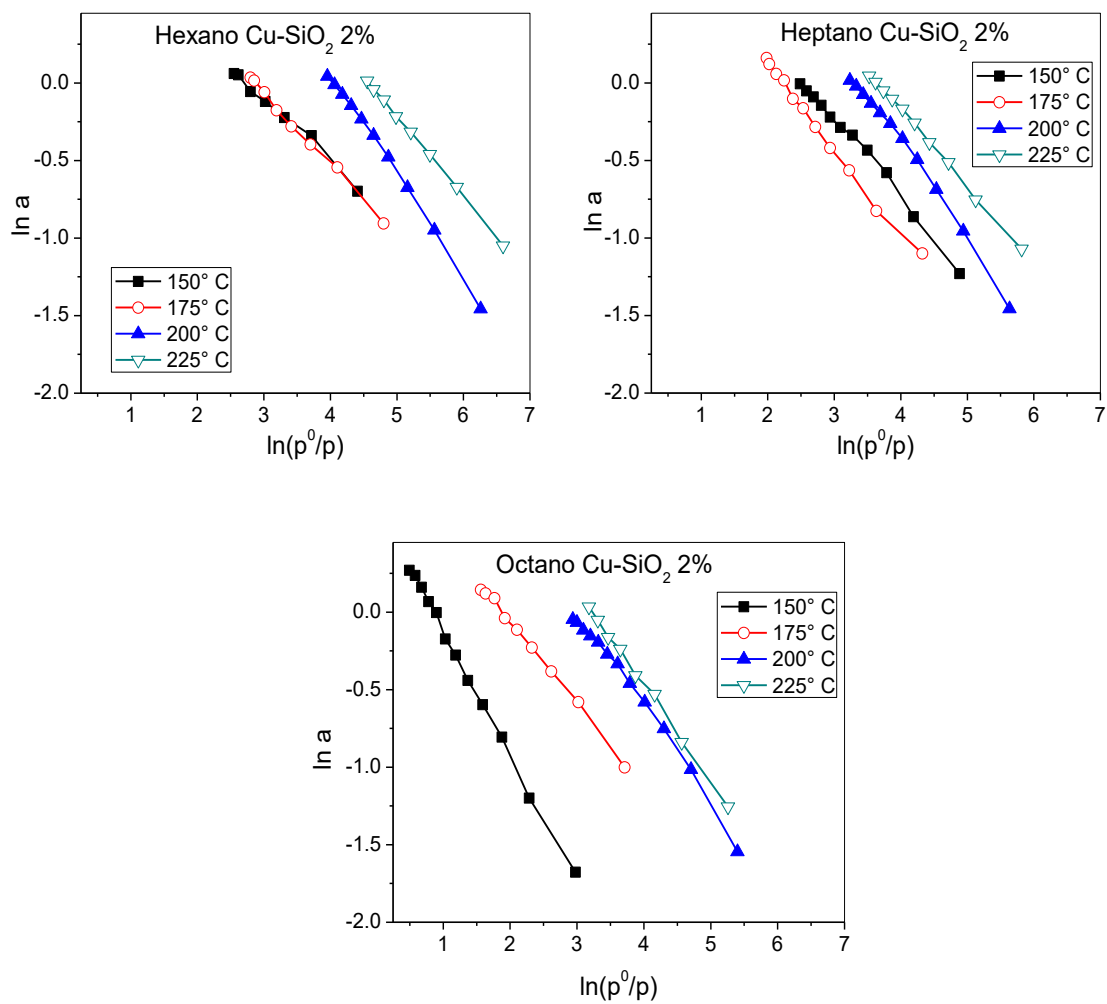


Fig. 54. Isothermas de adsorción de Hexano, Heptano y Octano en Cu-SiO₂ 2% con el modelo Dubinin.



3.2.4.2. Isotermas de adsorción con el modelo de Dubinin en Cu-SiO₂ 5%

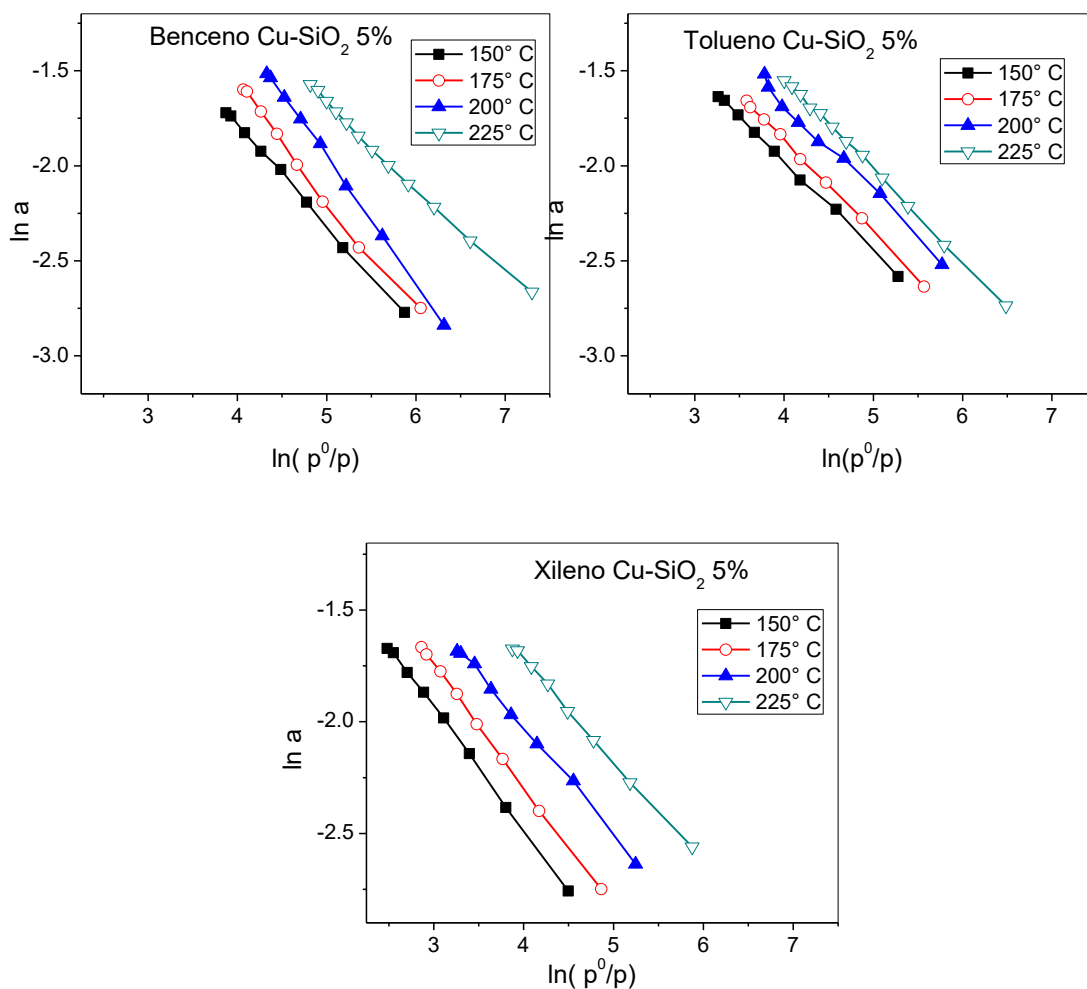


Fig. 55. Isotermas de adsorción de Benceno, Tolueno y Xileno en Cu-SiO₂ 5% con el modelo de Dubinin.

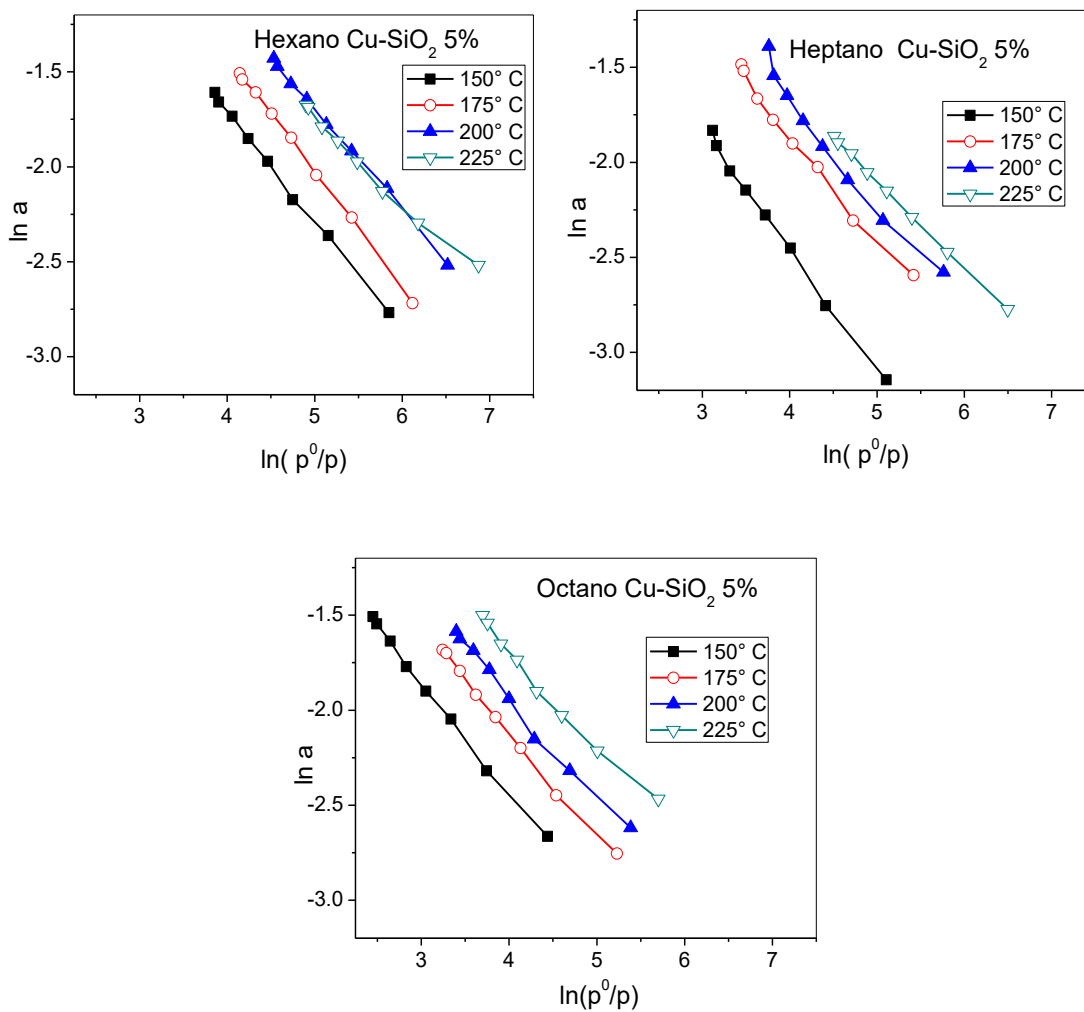


Fig. 56. Isothermas de adsorción de Hexano, Heptano y Octano en Cu-SiO₂ 5% con el modelo Dubinin.



3.2.4.3. Isotermas de adsorción con el modelo de Dubinin en Cu-SiO₂ 10%

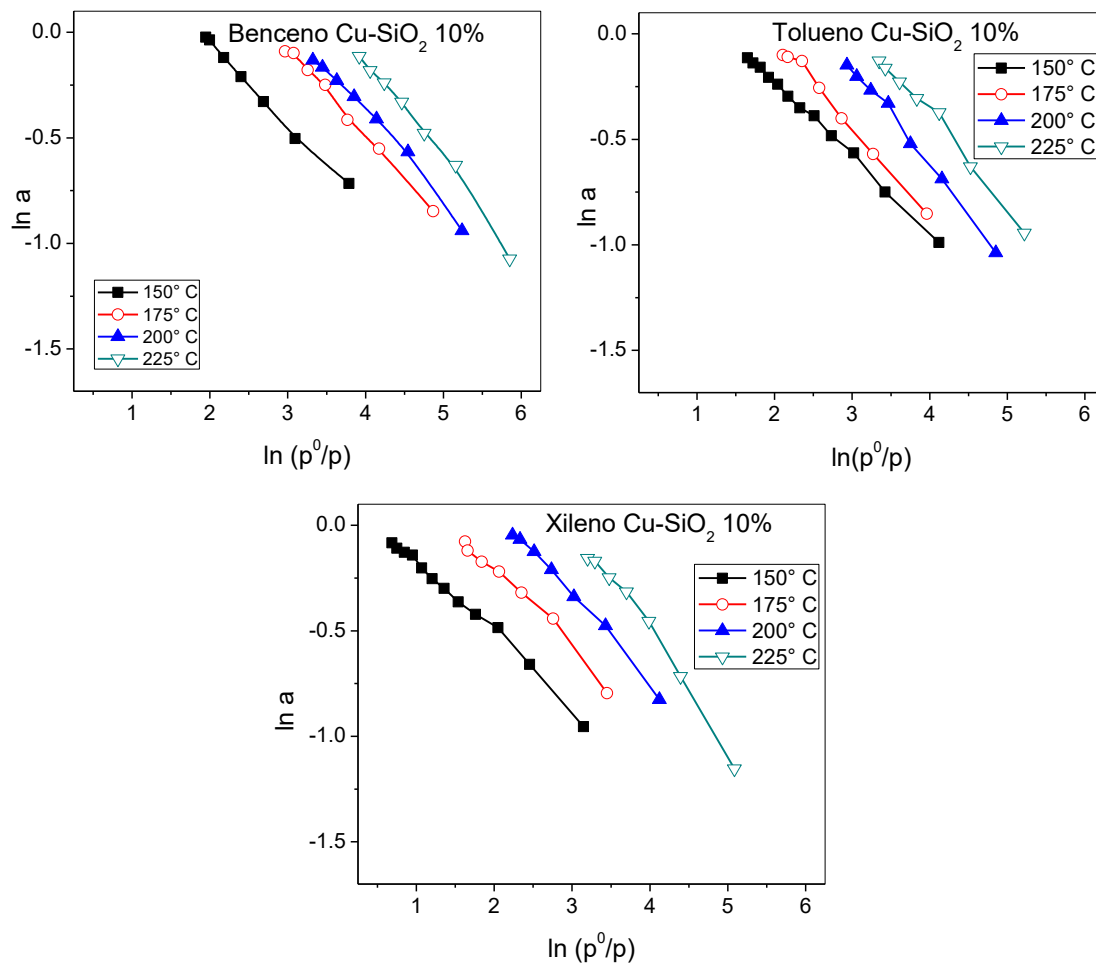


Fig. 57. Isotermas de adsorción de Benceno, Tolueno y Xileno en Cu-SiO₂ 10% con el modelo de Dubinin.

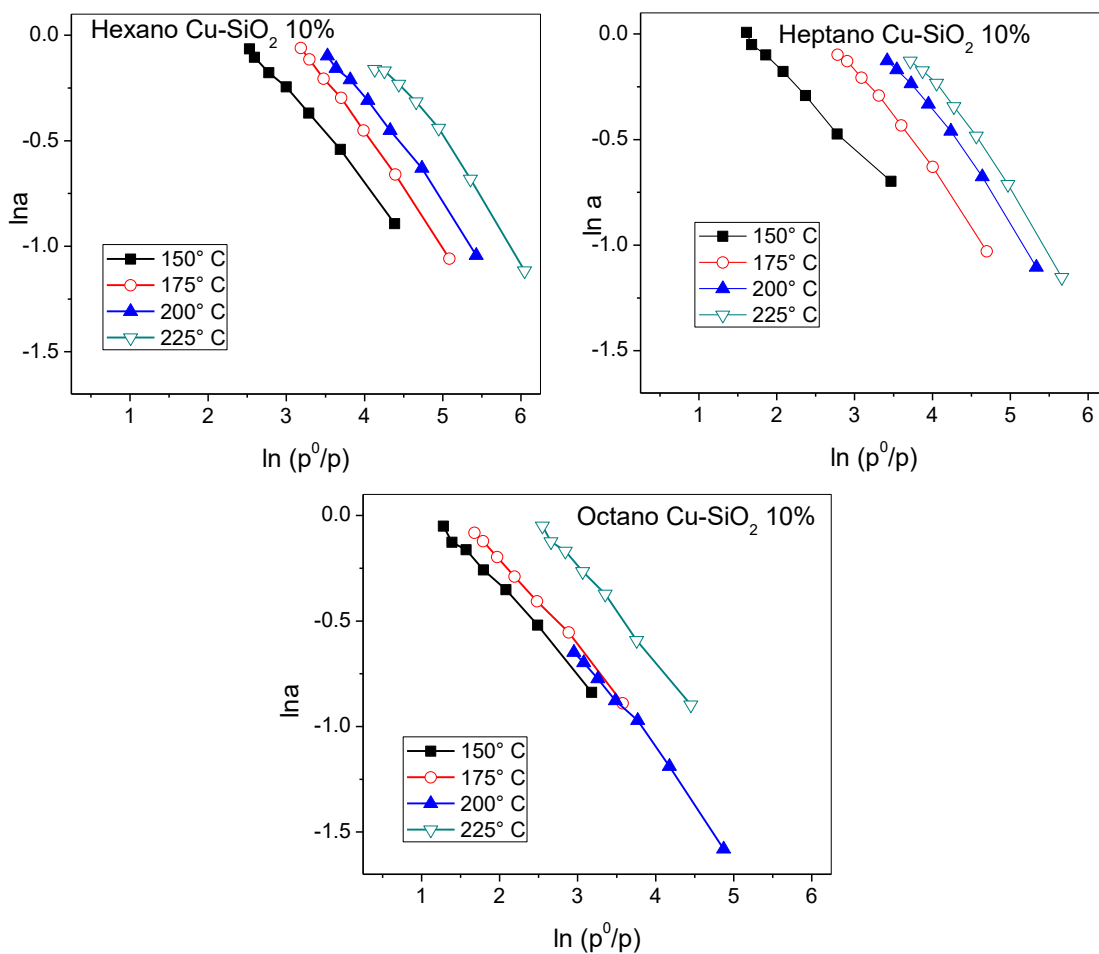


Fig. 58. Isothermas de adsorción de Hexano, Heptano y Octano en Cu-SiO₂ 10% con el modelo de Dubinin.



3.2.4.4. Isotermas de adsorción con el modelo de Dubinin en SiO_2

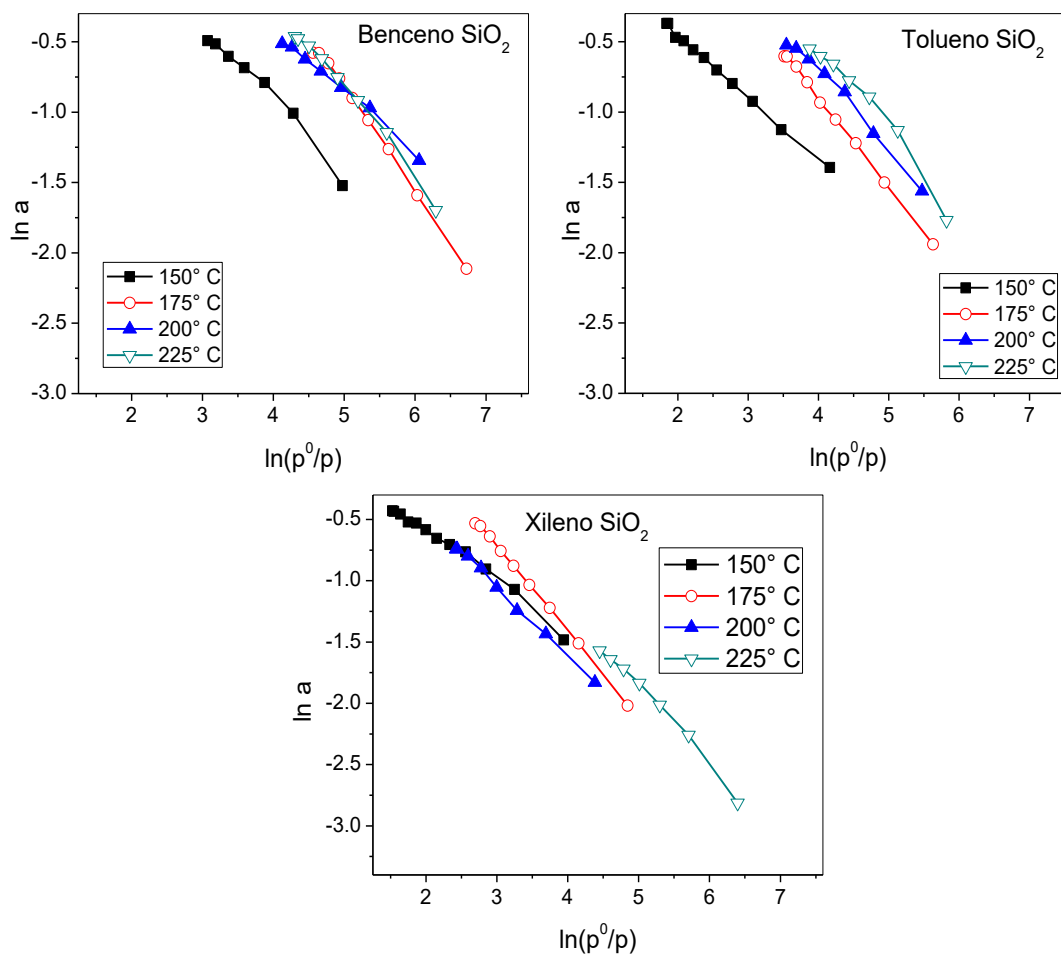


Fig. 59. Isotermas de adsorción de Benceno, Tolueno y Xileno en SiO_2 con el modelo de Dubinin.

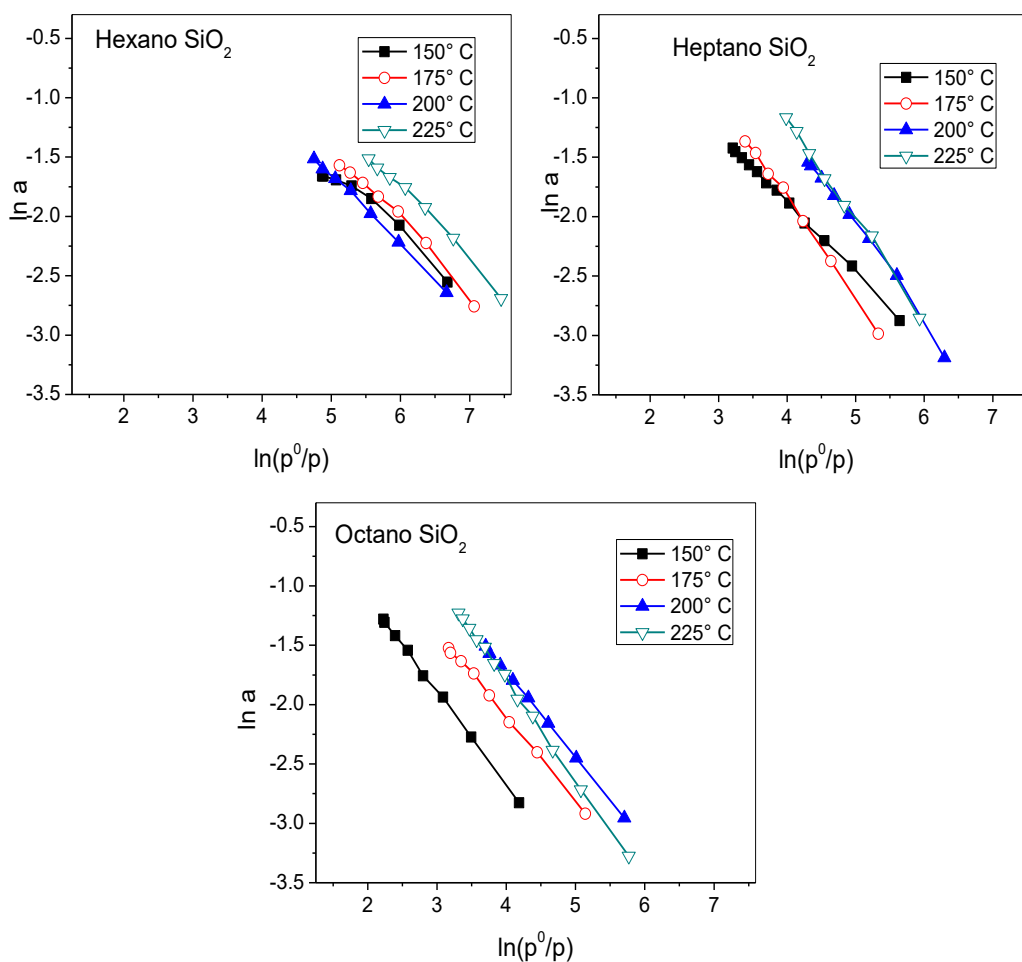


Fig. 60. Isothermas de adsorción de Hexano, Heptano y Octano en SiO₂ con el modelo de Dubinin.

En las tablas 17 y 18 se muestran los resultados obtenidos del empleo del modelo de Dubinin, al hacer un promedio de W de los datos registrados, se obtiene que Cu-SiO₂ 10% presenta mayor volumen con un promedio de 0.047 cm³/g, seguido por Cu-SiO₂ 2% con un promedio del volumen de 0.014 cm³/g, SiO₂ con 0.0055 cm³/g y por ultimo Cu-SiO₂ 5% con 0.0018 cm³/g de promedio.



Tabla 17. Parámetros de la ecuación de Dubinin para la adsorción de los compuestos orgánicos volátiles (COVs) en SiO₂ y Cu-SiO₂ 2%.

	T		SiO ₂			Cu-SiO ₂ 2%			
	°C	-E	W (cm ³ /g)	a	R	-E	W (cm ³ /g)	a	R
Benceno	150	3.476	0.00763	0.00330	0.969	3.497	0.00310	0.00355	0.998
	175	4.833	0.00871	0.01660	0.996	3.875	0.00319	0.00743	0.993
	200	2.837	0.04496	0.00360	0.990	2.839	0.00130	0.00571	0.999
	225	4.058	0.00948	0.00921	0.986	2.926	0.03044	0.00788	0.999
Tolueno	150	2.932	0.00804	0.00153	0.997	3.268	0.00392	0.00204	0.997
	175	4.244	0.00399	0.00526	0.999	2.453	0.00473	0.00316	0.998
	200	3.668	0.00835	0.00447	0.985	3.451	0.01029	0.00560	0.994
	225	4.055	0.00654	0.00669	0.954	2.521	0.00815	0.00450	0.996
Xileno	150	2.745	0.00978	0.00126	0.982	2.691	0.00093	0.00159	0.996
	175	4.615	0.00150	0.00393	0.999	3.719	0.00141	0.00239	0.998
	200	3.751	0.00154	0.00191	0.997	3.753	0.00669	0.00432	0.998
	225	4.207	0.00182	0.00368	0.986	2.688	0.01117	0.00428	0.998
Hexano	150	3.202	0.00610	0.00212	0.945	2.013	0.06828	0.00294	0.987
	175	4.008	0.00373	0.00483	0.982	2.366	0.02470	0.00376	0.996
	200	3.889	0.00231	0.00359	0.998	3.311	0.01369	0.01409	0.996
	225	4.011	0.00483	0.00648	0.987	2.639	0.05919	0.01068	0.999
Heptano	150	3.902	0.00081	0.00159	0.999	2.573	0.01434	0.00357	0.991
	175	5.550	0.00022	0.00445	0.997	2.819	0.00530	0.00342	0.994
	200	5.372	0.00058	0.00719	0.993	3.108	0.00961	0.00769	0.991
	225	5.650	0.00043	0.00925	0.995	2.523	0.03418	0.00606	0.998
Octano	150	5.195	0.00011	0.00158	0.999	4.168	0.00012	0.00199	0.998
	175	4.676	0.00031	0.00205	0.998	2.717	0.00551	0.00272	0.997
	200	4.758	0.00048	0.00313	1.000	3.046	0.00834	0.00585	0.988
	225	5.568	0.00019	0.00475	0.999	3.158	0.00812	0.00739	0.997



Tabla 18. Parámetros de la ecuación de Dubinin para la adsorción de los compuestos orgánicos volátiles (COVs) en Cu-SiO₂ 5% y 10%.

	T °C	Cu-SiO ₂ 5%				Cu-SiO ₂ 10%			
		-E	W (cm ³ /g)	a	R	-E	W (cm ³ /g)	a	R
Benceno	150	3.525	0.00124	0.00142	0.999	3.518	0.04150	0.00205	0.994
	175	3.961	0.00098	0.00228	0.992	3.716	0.05699	0.00315	0.995
	200	4.418	0.00091	0.00401	0.999	3.794	0.05821	0.00360	0.985
	225	2.941	0.00673	0.00174	0.997	4.425	0.03746	0.00612	0.986
Tolueno	150	3.099	0.00174	0.00090	0.999	3.235	0.05409	0.00162	0.998
	175	3.226	0.00162	0.00108	0.999	3.824	0.02501	0.00226	0.991
	200	3.168	0.00230	0.00125	0.990	4.262	0.02155	0.00346	0.993
	225	3.186	0.00268	0.00148	0.999	3.965	0.04624	0.00385	0.985
Xileno	150	3.602	0.00043	0.00074	0.999	3.128	0.03694	0.00118	0.992
	175	3.614	0.00053	0.00090	0.999	3.370	0.04202	0.00169	0.977
	200	3.142	0.00139	0.00090	0.997	3.757	0.03504	0.00246	0.992
	225	2.996	0.00286	0.00110	0.999	4.866	0.01486	0.00499	0.98
Hexano	150	3.826	0.00094	0.00183	0.998	4.619	0.06192	0.00284	0.994
	175	4.031	0.00112	0.00277	0.999	3.978	0.09660	0.00502	0.997
	200	3.513	0.00311	0.00267	0.998	4.759	0.08856	0.00519	0.991
	225	2.892	0.00608	0.00155	0.987	4.463	0.04709	0.00739	0.974
Heptano	150	4.295	0.00018	0.00114	0.995	3.524	0.06802	0.00182	0.995
	175	4.603	0.00021	0.00148	0.987	4.451	0.04374	0.00366	0.991
	200	3.686	0.00119	0.00188	0.966	4.636	0.03445	0.00520	0.988
	225	2.956	0.00319	0.00121	0.999	4.842	0.08499	0.00666	0.987
Octano	150	3.836	0.00036	0.00091	0.997	3.668	0.05676	0.00159	0.994
	175	3.648	0.00067	0.00110	0.995	3.832	0.05194	0.00188	0.997
	200	3.537	0.00093	0.00123	0.988	4.387	0.03431	0.00221	0.991
	225	3.228	0.00199	0.00130	0.983	4.034	0.00928	0.00294	0.995



Donde E es la energía característica del sistema de adsorción en kJ/mol que refleja la influencia de la naturaleza del sustrato en la cantidad adsorbida. W es el volumen ocupado por el adsorbato en cm^3/g y a es la cantidad de adsorbato adsorbido en mol/g a cierta temperatura.

Graficando R (Figura 60), se puede determinar que el mayor número de puntos entre los rangos 0.99 - 1.00 los presenta la muestra Cu-SiO_2 2% con 22 puntos que se encuentran dentro de ese rango, casi el 90% de los puntos, 19 puntos de Cu-SiO_2 5%, 16 puntos de Cu-SiO_2 10% y 15 puntos de SiO_2 también son los que se encuentran en estos rangos. Por lo que se puede afirmar que existe un ajuste favorable con el 75% de los puntos dentro del rango 0.99-1.00.

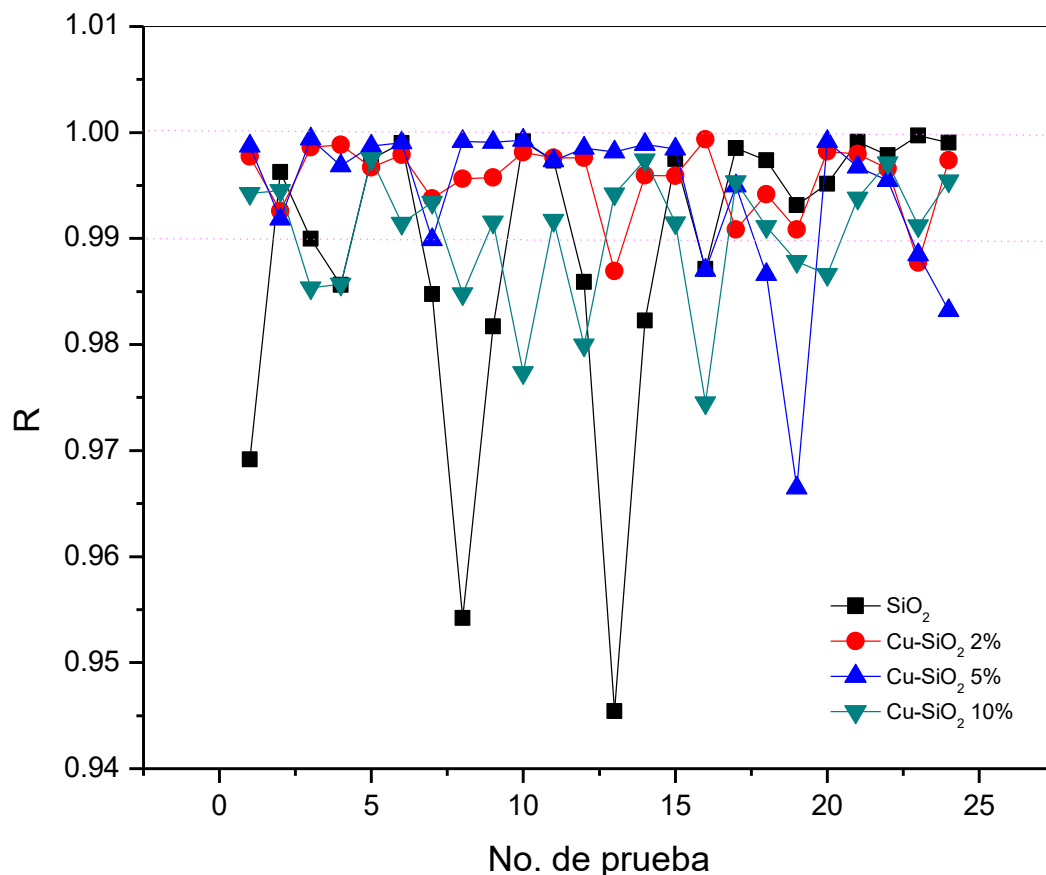


Fig. 61. Gráfico de R para los 24 resultados, obtenidos de cada sílice con Dubinin.



En la figura 61 podemos observar el parámetro de la energía característica de adsorción, se observa la velocidad con la que ocurre el proceso y aunque esta energía es negativa, significa que es un proceso espontaneo, la sílice que presenta mayores niveles es la SiO_2 , siendo así la que libera más energía para realizar este proceso seguida de Cu-SiO_2 10% > Cu-SiO_2 5% > Cu-SiO_2 2%.

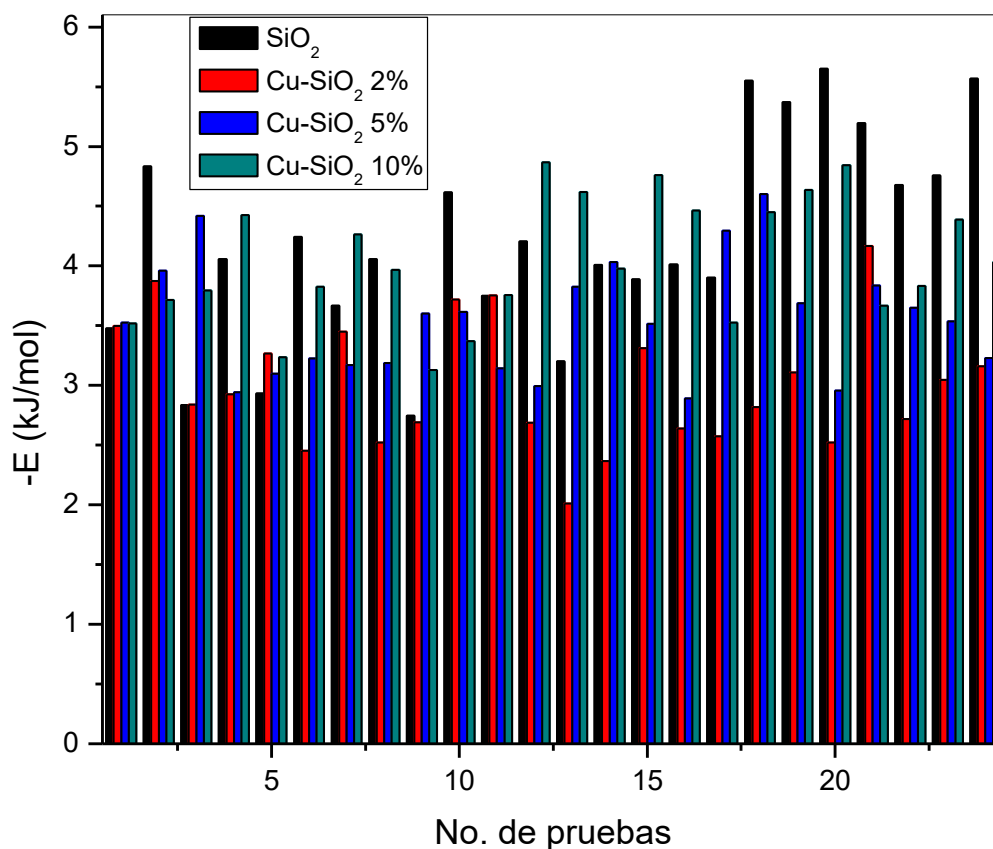


Fig. 62. Grafico de -E para los 24 resultados, obtenidos de cada sílice con Dubinin.

En la figura 62 se muestra el volumen ocupado por el adsorbato en la sílice obteniendo mayores niveles para Cu-SiO_2 10% seguida de Cu-SiO_2 2% > SiO_2 > Cu-SiO_2 5% como se había determinado anteriormente con los promedios.

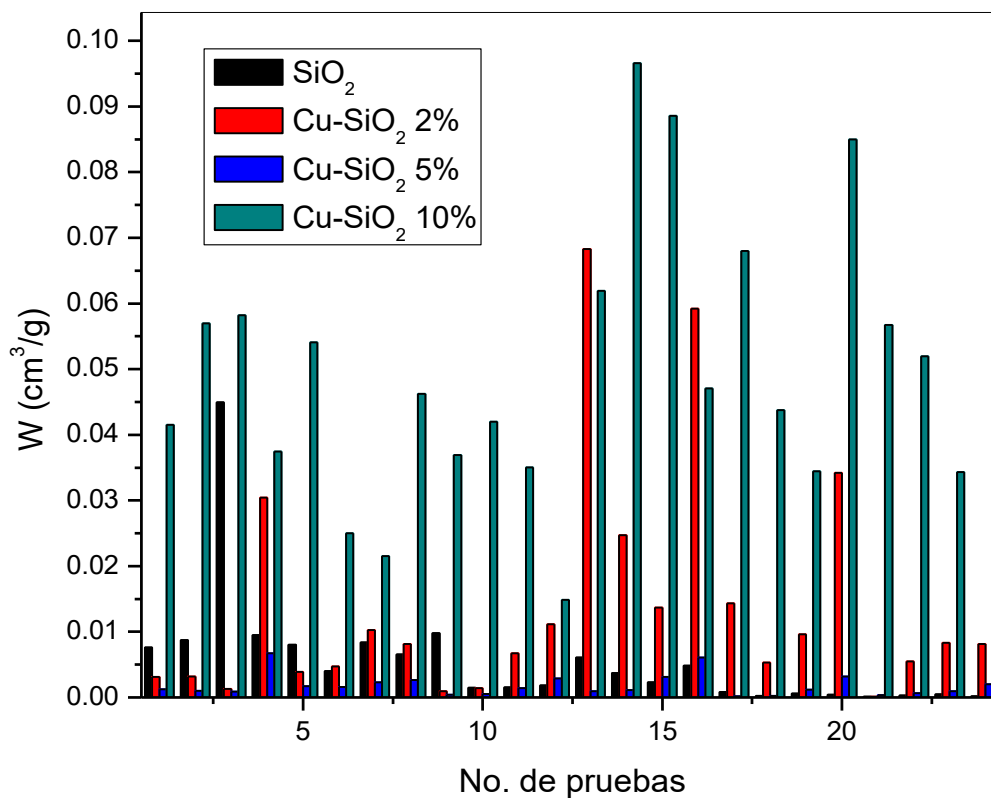


Fig. 63. Gráfico de W para los 24 resultados, obtenidos de cada sílice con Dubinin.

En el gráfico de la figura 63 se puede observar el comportamiento de a en donde se aprecia que las sílices que presentan mayores índices de adsorción del adsorbato son la SiO₂ y Cu-SiO₂ 2% dependiendo de la temperatura y el compuesto adsorbido.

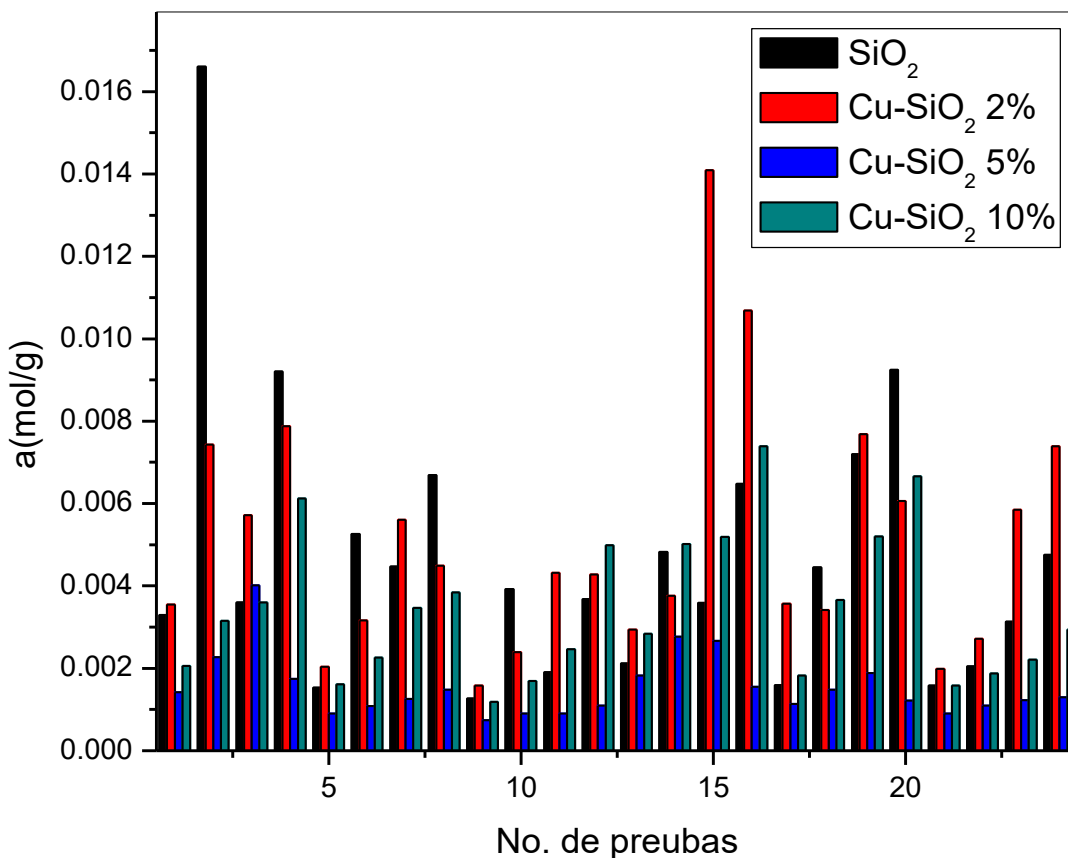


Fig. 64. Gráfico de a para los 24 resultados, obtenidos de cada sílice con Dubinin.

3.3. Calor isostérico de Adsorción

Como la adsorción es un proceso exotérmico, el incremento de la temperatura y mantener la presión constante favorece la desorción del adsorbato. En algunos sistemas la fisisorción es el proceso dominante a bajas temperaturas, mientras la adsorción química se manifiesta a altas temperaturas [48]. El calor isostérico de adsorción (q_{st}) es una función del volumen adsorbido y puede ser obtenido mediante una medición directa utilizando métodos calorimétricos. También puede ser calculado basándose en el comportamiento de las isothermas de adsorción [49].



En los gráficos presentados a continuación se presenta el comportamiento del llamado calor isostérico de adsorción q_{st} (o más estrictamente, entalpía isostérica de adsorción) de la adsorción de BTX y C_6-C_8 sobre las sílices (Figuras 64-69). Se observa que en su mayoría estos valores q_{st} se encuentran por encima del calor de vaporización de los adsorbatos, mismo que indica una fuerte interacción de las moléculas con la superficie de las sílices. En el caso de la adsorción de benceno en la $Cu-SiO_2$ 2%, los valores se obtienen por debajo del calor de vaporización, representativas del proceso de fisisorción donde se describen interacciones débiles y heterogéneas.

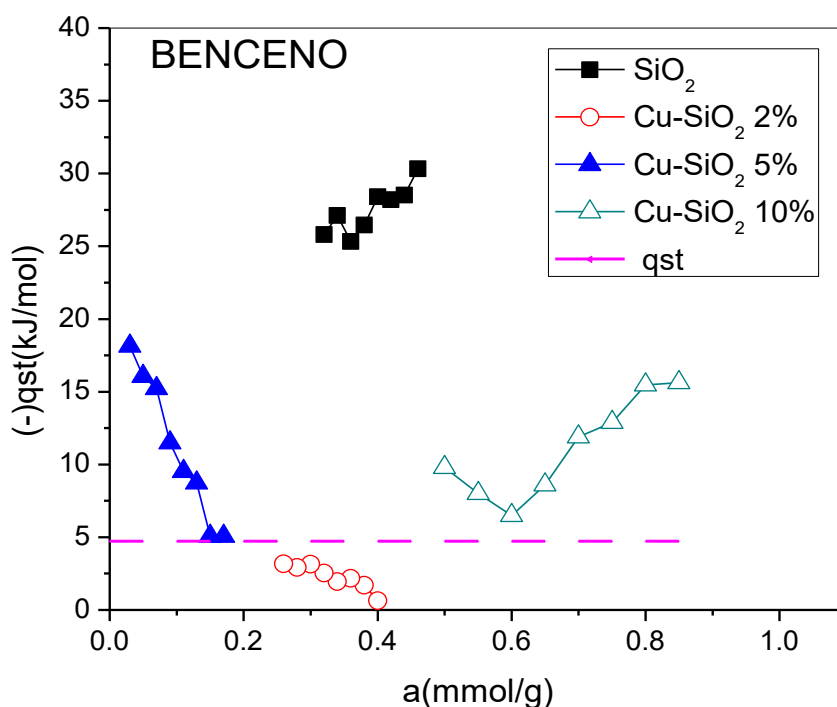


Fig. 65. Calor Isostérico de Adsorción del Benceno

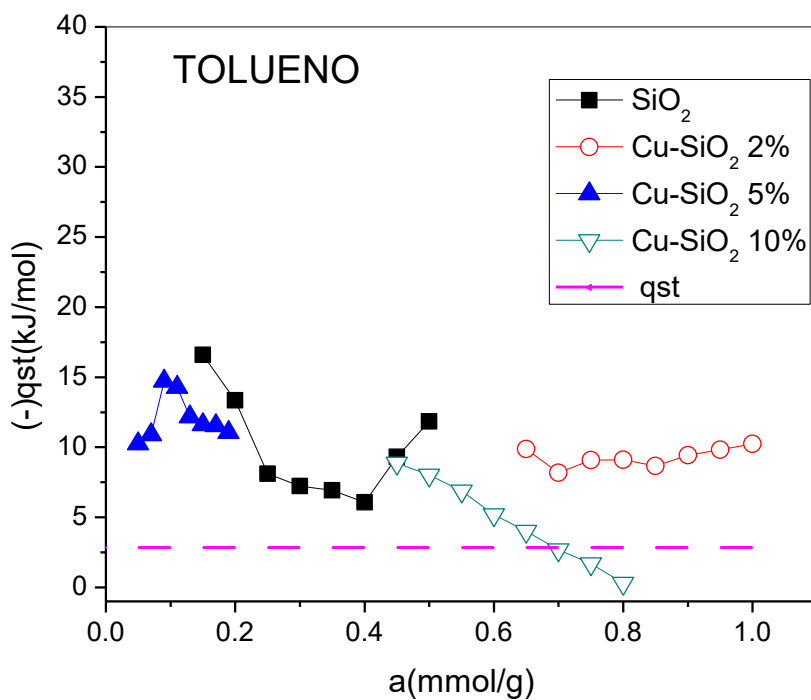


Fig. 66. Calor Isostérico de Adsorción del Tolueno.

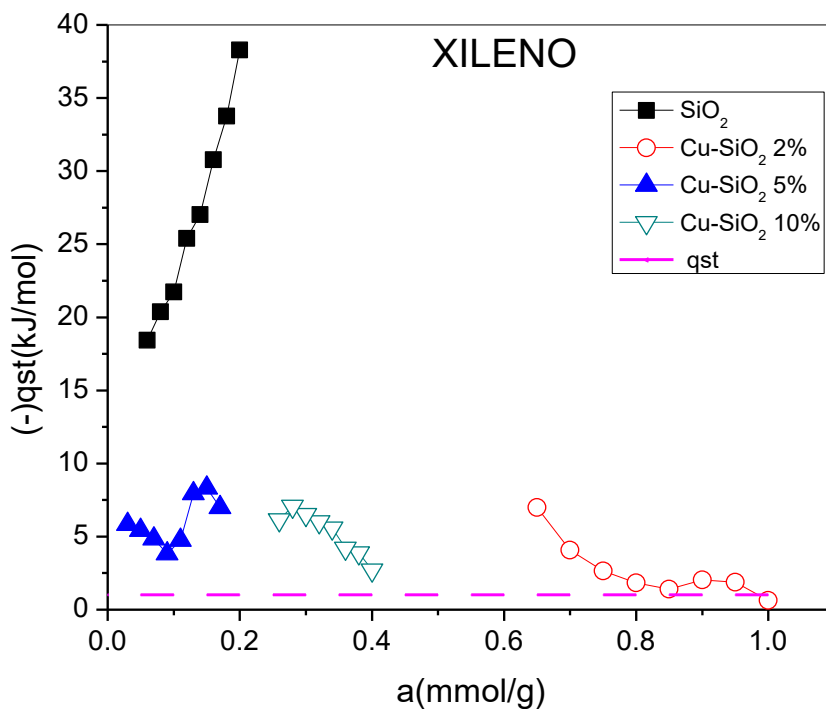


Fig. 67. Calor Isostérico de Adsorción del Xileno

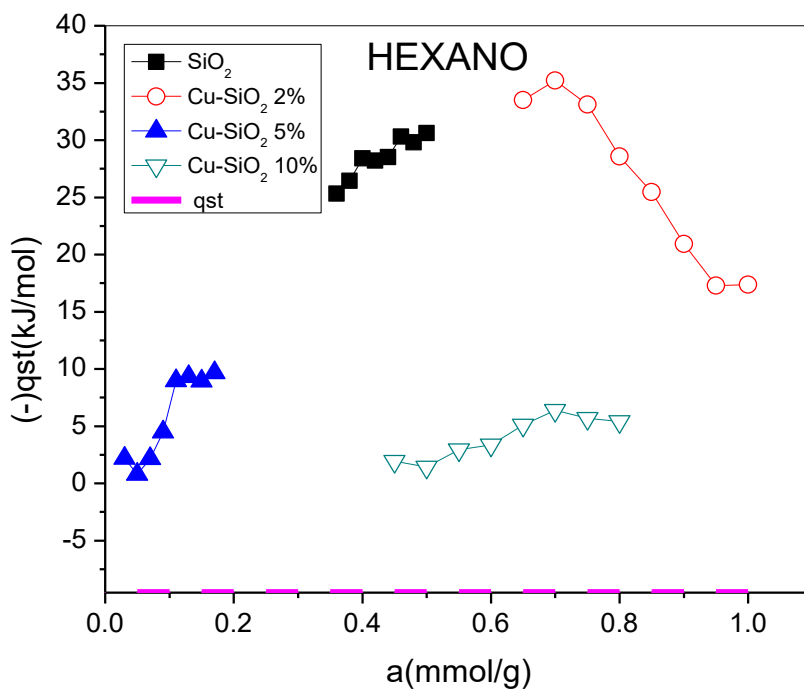


Fig. 68. Calor Isostérico de Adsorción del Hexano.

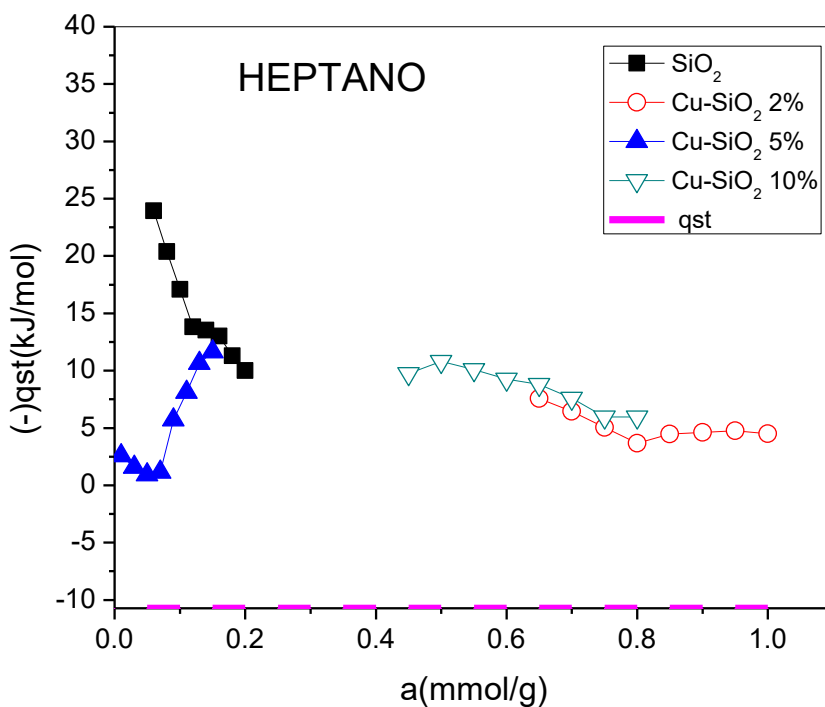


Fig. 69. Calor Isostérico de Adsorción del Heptano.

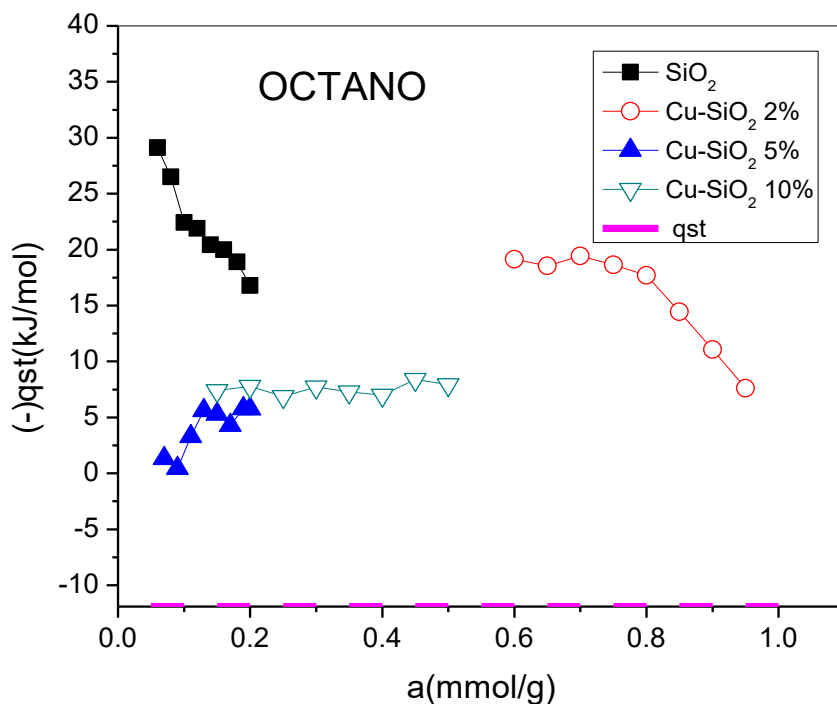


Fig. 70. Calor Isostérico de Adsorción del Octano.

En todos los casos se puede apreciar que el qst teórico es menor que los obtenidos, con excepción del benceno en Cu-SiO_2 2%. En el caso de SiO_2 para heptano (Figura 68), octano (Figura 69) y tolueno (Figura 65) se presenta un comportamiento decreciente que indica un material heterogéneo y para hexano (Figura 67), benceno (Figura 64) y xileno (Figura 66) presenta un comportamiento ascendente. Para Cu-SiO_2 2% todas presentan un comportamiento descendente indicando un material heterogéneo. En el caso de Cu-SiO_2 5% en todos los compuestos con excepción del benceno presenta un comportamiento ascendente indicando un material homogéneo. Cu-SiO_2 10% presenta un comportamiento hacia abajo, con excepción de hexano y octano donde el calor isostérico es independiente de la cantidad adsorbida.

En la tabla 19 se puede observar los qst obtenidos de los gráficos de adsorción.



Tabla 19. Valores de los calores isostéricos de adsorción.

	SiO₂	Cu-SiO₂2%	Cu-SiO₂5%	Cu-SiO₂10%	Teórico
COMPUESTO	- qst (kJ/mol)	- qst (kJ/mol)	- qst (kJ/mol)	- qst (kJ/mol)	- qst (kJ/mol)
Benceno	27.752	2.275	11.160	11.093	4.737
Tolueno	9.927	9.301	12.053	4.707	2.856
Xileno	26.970	2.689	5.985	5.266	1.025
Hexano	33.158	26.430	5.814	4.033	-9.550
Heptano	15.385	5.129	5.289	8.479	-10.726
Octano	22.004	15.821	3.971	7.547	-11.907



CONCLUSIONES

- La presencia de los enlaces Si-O y Si-O-H se confirmó con el análisis FTIR, mientras que la caracterización por DRX y SEM confirmaron el carácter amorfo de las muestras.
- De acuerdo a los resultados texturales de adsorción de N₂ y la evaluación de adsorción de C₆ – C₈, la muestra Cu-SiO₂ 2% presenta una mayor cantidad de alcanos adsorbida debido a que presenta mayor volumen microporos y menor diámetro de poro, al ser moléculas con diámetro cinético de 0.43 nm, permitiendo la ocupación de poros con menor requerimiento energético (E₀) y mayor adsorción en la monocapa (am).
- Los compuestos BTX, al poseer diámetros cinéticos mayores requieren de materiales con mayor mesoporosidad, tal es el caso de la muestra Cu-SiO₂ 10% que obtuvo una mayor AS_{BET} (521 m²/g) y una distribución trimodal.
- Se acepta parcialmente la hipótesis para tolueno y xileno en la muestra Cu-SiO₂ 10%, al aumentar la capacidad de adsorción de estos compuestos respecto a la concentración de Cu en la sílice.
- Los q_{st} reflejan fuertes interacciones molécula – superficie por encima de su calor de vaporización lo que sugiere que se trata de un proceso de quimisorción.
- El empleo de materiales porosos para el problema de la contaminación puede funcionar creando estrategias adecuadas para su aplicación. En el caso de la captura de COVs en especial alcanos la Cu-SiO₂ 2% es un material viable, mientras que para tolueno y xileno Cu-SiO₂ 10% y para benceno solo la SiO₂ sin dopaje.



REFERENCIAS

- [1] Consejería de medio ambiente y ordenamiento territorial, «Efectos de los COVs sobre la salud y el medio ambiente,» Junta de Andalucía, 2018.
- [2] M. Magaña Reyes, B. Cárdenas González, A. L. Hernández Flores y S. Gonzáles Vargas, «Evaluación de Compuestos Orgánicos Volátiles en la Zona Metropolitana del Valle de México.,» Instituto Nacional de Ecología y Cambio Climático (INECC), México., 2015.
- [3] A. I. Gonzáles Rivera, Adsorción De Compuestos Orgánicos Volátiles (benceno, tolueno, p-xileno, n-alcanos, Compuestos Clorados) En Sílices Microporosas, Puebla, 2009.
- [4] M. A. Hernández, A. I. González , F. Rojas, M. Asomoza, S. Solis, V. H. Lara, M. A. Salgado, R. Portillo y V. Petranosvskii, «Adsorción de hidrocarburos clorados en sustratos con microporos: clinoptilolitas desaluminizadas y SiO₂,» *Revista Internacional de Contaminación Ambiental*, vol. 21, nº 4, pp. 183-191, 2005.
- [5] J. G. Henry y G. W. Heinke , Ingeniería Ambiental, 2 ed., México: Prentice Hall, 1999.
- [6] Instituto Nacional de Ecología y Cambio Climático (INECC)., «Informe Nacional de Calidad del Aire 2016, México.,» Coordinación General de Contaminación y Salud Ambiental, Dirección de Investigación sobre la Calidad del Aire y los Contaminantes Climáticos., Ciudad de México., Diciembre 2017..
- [7] J. Strauss W. y S. Mainwaring, contaminación del aire: causas, efectos y soluciones, Mexico: Trillas, 1990.
- [8] Á. Sampieri Croda, «Prevención y control de contaminación de aire,» 2018. [En línea]. Available: <https://sites.google.com/site/prevctrlycontaire/>. [Último acceso: 27 03 2019].
- [9] World Health Organization, «Ambiental air pollution: a global assessment of exposure and burden of disease,» WHO library Cataloguing-in-Publication Data, 2016.
- [10] EPA, «Technical Overview of Volatile Organic Compounds,» EUA, 2017.



- [11] J. M. Sánchez Montero y A. R. Alcántara León, «Compuestos orgánicos volátiles en el medio ambiente,» Madrid, 2007.
- [12] Conantec, «nonopinturas,» Comercio y Aplicación de Nanotecnología, S.L., 18 febrero 2018. [En línea]. Available: <https://www.co-nantec.com/post/sabes-que-son-los-covs>. [Último acceso: Enero 2019].
- [13] Organización Mundial de la Salud , «Calidad del aire (exteriores),» 2018.
- [14] A. R. Gonzales Riveros, «Compuestos orgánicos volátiles (covs) en la industria de pinturas y sus disolventes en Perú-análisis de caso y estrategias de gestión ambiental ocupacional,» Pontifica Universidad Catolica de Peru, Lima, Peru, 2017.
- [15] Communications and Public Outreach Department of the CEC Secretariat, «Long-Range Transport of Ground-Level ozone and its precursors,» Secretariat of Commissions for Envirmental Cooperation, Montreal, Canada, 1997.
- [16] P. Matus y R. Lucero, «“Norma Primaria de calidad del aire”. Revista chilena de enfermedades respiratorias,» *Revista chilena de enfermedades respiratorias*, vol. 18, nº 2, 2002.
- [17] S. Z. Hernández Villaseñor, «Insuficiencia de la regulación de los compuestos orgánicos volátiles en México,» INECC, México, 2017.
- [18] L. G. Wade, Química Organica, 7 ed., vol. 1, México: Pearson, 2011.
- [19] L. G. Wade, Química Orgánica, 7 ed., vol. 2, México: Pearson, 2012.
- [20] Pemex, productos y servicios, «Tolueno,» México.
- [21] División de Toxicología y Medicina Ambiental ToxFAQs, «Xileno,» Agency for Toxy Substances and Disease Registry, Atlanta, 2007.
- [22] International Agency for Research on Cancer (IARC), «IARC Monographs on the Evaluation of Carcinogenic Risks to Humans,» Word Health Organization, 1987.
- [23] Comité consultivo nacional de normalización de medio ambiente y recursos naturales, comité consultivo nacional de normalización para la proteccion ambiental (ECOL)., «NOM-121-SEMARNAT-1997,» Secretaria de medio ambiente y recursos naturales, secretaria de medio ambiente, recursos naturales y pesca, México, 1998.



- [24] Comité consultivo nacional de normalización de medio ambiente y recursos naturales, comité consultivo nacional de normalización para la protección ambiental (ECOL)., «NOM-123-SEMARNAT-1998,» Secretaría de medio ambiente y recursos naturales, secretaria de medio ambiente, recursos naturales y pesca, México, 1999.
- [25] Comisionado Federal para la Protección contra Riesgos Sanitarios y Presidente del Comité Consultivo Nacional de Normalización de Regulación y Fomento Sanitario, «NORMA Oficial Mexicana NOM-020-SSA1-2014, Salud ambiental. Valor límite permisible para la concentración de ozono (O₃) en el aire ambiente y criterios para su evaluación.,» México, 2014.
- [26] F. Rouquerol, J. Rouquerol y K. Sing, Adsorption by Powders and Porous Solids, Principles, Methodology and Applications, London, 1999.
- [27] T. L. Avalos R. y F. F. Chalé L., «Adsorción de moléculas en superficies,» UAM, México, 2006.
- [28] G. Aguilar, Adsorción y catálisis, U. A. d. Puebla, Ed., México, 1985, p. 311.
- [29] R. H. Perry y D. W. Green, Manual del Ingeniero Químico, Séptima ed., vol. III, McGraw-Hill/interamericana de España, 2010.
- [30] V. A. Hernández Salgado, Evaluación de la distribución de tamaño de poro por curvas diferenciales de adsorción de zeolitas tipo clinoptilolita, México, 2016.
- [31] A. V. Neimark, J. P. Olivier, F. Rodríguez R., J. Rouquerol, S. W. Sing y M. T. Katsumi K., «Fisiorción de gases, con referencia especial a la evaluación de área superficial y distribución de tamaño de poro (Reporte Técnico IUPAC,» *Pure Appl. Chem*, 2015.
- [32] I. Langmuir, The adsorption of gases on plane surfaces of glass, mica and platinum, vol. 40, Journal of the American Chemical Society, 1918.
- [33] D. W. Breck, Zeolite molecular sieves: structure, chemistry, and use., New York: John Wiley & Sons, Inc., 1974.
- [34] J. M. Martín Martínez, Adsorción Física de Gases y Vapores por Carbones, Alicante: Espagráfic, 1990.
- [35] A. Vaccari, «Clays and catalysis: a promising future,» *Applied Clay Science*, vol. 14, pp. 161-198, 1999.



- [36] N. G. Connelly, T. Damhus, R. M. Hartshorn y A. T. Hutton, Nomenclature of Inorganic Chemistry IUPAC recommendations, T. R. S. o. Chemistry, Ed., cambridge: International Union of Pure and Applied Chemistry, 2005.
- [37] G. A. Somorja, Fundamentos de la química de superficies, México: Alambra.
- [38] F. Prieto García, A. J. Gordillo Martínez y S. S. Serrano López, «Síntesis y caracterización de sílice dopada con óxidos de hierro ,» *Revista Latinoamericana de Metalurgia y Materiales*, p. 25, 2005.
- [39] Center, Clean Air Technology, «Information Transfer and Program Integration Division Office of Air Quality Planning and Standards (OAQPS);,» Environmental Protection Agency (EPA), EUA, 1999.
- [40] . J. A. Perry, «Introduction to Analytical Gas Chromatography: History, Principles and Practice.,» *Chromatographic Science Series. Marcel Dekker*, vol. 14, 1981.
- [41] M. C. Sáenz, C. A. Báez Quintero, J. J. Díaz Velásquez y G. Rodríguez Niño, «Estudio de las variables de reacción en la síntesis de sílica gel adsorbente,» *Ing. Investig. [online]*, vol. 27, nº 2, pp. pp.44-50., Mayo/Agosto 2007.
- [42] R. K. Vyas, S. y S. Kumar, «Determination of micropore volume and surface of zeolite molecular sieves by D-R and D-A equations: A comparative study,» *Indian Journal of Chemical Technology*, vol. 11, pp. 704-709, 2004.
- [43] E. P. Barrett, L. G. Joyner y P. P. Helenda, «The Determination of Pore Volume and Area Distributions in Porous Substances. Computations from Nitrogen Isotherms,» *The Volume And Area Distributions in Porous Substances*, vol. 73, pp. 373-380, 1951.
- [44] F. Vallejos Burgos, «Modelos de cálculo para distribución de tamaños de poros mediante adsorción de gases,» Chile, 2008.
- [45] A. Bárbara Toledo, «Aerogeles: Nuevas rutas de síntesis,» 2014.
- [46] A. Sampieri, G. Pérez O., M. A. Hernández E., I. I. Ruiz L., M. Ruiz R., J. Arriola M. and R. I. Narváez F., "Sorption of BTEX on a nanoporous composite of SBA-15 and a calcined hydrotalcite," *Nano Convergence*, vol. 5, no. 21, Agosto 2018.
- [47] M. Á. Hernández, J. A. Velasco, F. Rojas, E. Campos Reales, V. H. Lara, J. A. Torres y M. A. Salgado, «Adsorción de compuestos orgánicos volátiles en arcillas del estado de Puebla, México,» *Revista Internacional de*



Contaminación Ambiental, vol. 19, nº 4, pp. 191-196, 2003.

- [48] S. Glasstone, Tratado de química física, madrid: Aguilar, 1953.
- [49] S. Ruiz Salgado, «Adsorción selectiva de gases con efecto invernadero en zeolitas de poro angosto: erionita natural y modificada,» Puebla, 2017.
- [50] J. Riddick, W. Bunger y K. Sakano, Organic solvents physical proprieties and methods of purification, cuarta ed., vol. II, John Wiley & Sons, 1986.
- [51] D. Kennedy, M. Mujcin, E. Trudeau y H. Tezel , «Pure and binary adsorption equilibria of methane and nitrogen on activated carbons, desiccants, and zeolites at different pressures,» *Journal of chemical and engineering data*, vol. 61, p. 3163–3176, 2016.
- [52] M. L. Cervantes Rojas, Diseño y síntesis de materiales "a medida" mediante el método SOL-GEL, 188, 1012.
- [53] T. Siemieniewska, K. Tomkbn, K. Jan y A. Albiniaak, «Application of the Dubinin-Astakhov Equation to Evaluation of Benzene and Cyclohexane Adsorption Isotherms on Steam Gasified Humic Acid Chars from Brown Coal,» *Energy & Fuels*, vol. 4, pp. 61-70, 1990.



Symposium of
Nanoscience and
Nanomaterials
2019

Universidad Nacional Autónoma de México
Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada

The Organizing Committee of SNN 2019 certifies that

**D. León, C. A. García, M. A. Hernández, M.
Diana Asomoza, S. Solis**

Presented the following Postercontribution

" Adsorption of chlorinated compounds, alkanes and BTX in nanoporous

Cu/SiO₂, Fe/SiO₂ and Ag/SiO₂ "

April 1st - 5th, 2019, Ensenada, B.C., México

Dr. Ernesto Cota Araiza
UNAM - CNYN - CICESE

