

TLMC₂

Segundo Taller Latinoamericano de Materiales de Carbono

MATERIALES SUSTENTABLES A BASE DE GRAFENO
Termas de Chillán, Chile 16 al 18 de noviembre de 2016

LIBRO DE RESÚMENES

ORGANIZADORES



AUSPICIADOR



MEDIA PARTNER

Diario Concepción

ORGANIZACIÓN

Comité Organizador

- Dr. Juan Matos Lale, Unidad de Desarrollo Tecnológico, Universidad de Concepción, Chile. Presidente del Comité Organizador.
- Dr. Ximena García, Facultad de Ingeniería, Universidad de Concepción, Chile.
- Dr. Ljubisa Radovic, Facultad de Ingeniería, Universidad de Concepción, Chile.
- Dr. Alex Berg, Director de la Unidad de Desarrollo Tecnológico, Universidad de Concepción, Chile.

Comité Científico Local

- Dr. Juan Matos Lale. (Universidad de Concepción)
- Dr. Ximena García (Universidad de Concepción)
- Dr. Rafael García (Universidad de Concepción)
- Dr. Nestor Escalona (Universidad Católica de Chile)
- Dr. Alejandro Toro-Labbe (Universidad Católica de Chile)
- Dr. Gloria Cárdenas Jirón (Universidad de Santiago de Chile)
- Dr. María Soledad Ureta (Universidad de Santiago de Chile)
- Dr. María Jesús Aguirre (Universidad de Santiago de Chile).
- Dr. José Zagal (Universidad de Santiago de Chile)
- Dr. Rodrigo Navia (Universidad de La Frontera)
- Dr. Mara Cea Lemus (Universidad de La Frontera)
- Dr. María Eugenia González (Universidad Católica de Temuco)
- Dr. Rodrigo Segura del Río (Universidad de Valparaíso)
- Dr. Walter Orellana (Universidad Andrés Bello)
- Dr. Carolina Parra (Universidad Técnica Federico Santa María)
- Dr. Juan Arturo Squella Serrano (Universidad de Chile)
- Dr. Soledad Bollo (Universidad de Chile)
- Dr. Humberto Palza (Universidad de Chile)

Comité Científico Internacional

- Dr. Nestor Tancredi (Universidad de la República, Uruguay)
- Dr. Alejandro Amaya (Universidad de la República, Uruguay)
- Dr. Luiz Depine (Centro Tecnológico del Ejército, Brasil)
- Dr. Francisco Emmerich (Universidad Federal del Espíritu Santo, Brasil)
- Dr. Ado Jorio (Universidad Federal de Minas Gerais, Brasil)
- Dr. Diana López (Universidad de Antioquia, Colombia)
- Dr. Juan Carlos Moreno (Universidad de Los Andes, Colombia)
- Dr. José René Rangel-Méndez (IPICYT, México)
- Dr. Emilio Muñoz-Sandoval (IPICYT, México)
- Prof. María de la Paz Elizalde (Universidad Autónoma de Puebla).
- Dr. Karim Sapag (Universidad Nacional de San Luis, Argentina)
- Dr. María Concepción Ovín Ania (INCAR-CSIC, España).

INSTITUCIONES ORGANIZADORAS



AUSPICIADOR



MEDIA PARTNER

Diario Concepción

CONFERENCISTAS INVITADOS

Plenaria Inaugural

Dra. María Concepción Ovín Ania. CSIC, España

PERSPECTIVAS DE NANOMATERIALES A BASE DE GRAFENO: APLICACIONES EN CONVERSIÓN DE ENERGÍA Y REMEDIACIÓN AMBIENTAL

Plenaria de Clausura

Dra. Teresa J. Bandosz. Universidad de la Ciudad de Nueva York, USA

MÁS ALLÁ DE LA ADSORCIÓN: UNA NUEVA MIRADA EN LOS CARBONOS NANOPOROSOS

CONFERENCISTAS LATINOAMERICANOS

Dr. Ado Jorio. Universidad Federal de Minas Gerais, Brasil

NANOCARBONES: COMO NANO Y PARA NANO

Dr. José Zagal. Universidad de Santiago, Chile

ÍNDICES DE REACTIVIDAD DE CATALIZADORES MOLECULARES PARA REACCIONES ELECTROQUÍMICAS Y SU IMPACTO SOBRE DISPOSITIVOS DE CONVERSIÓN DE ENERGÍA

Dr. Emilio Muñoz-Sandoval. IPICYT, México
MATERIALES HÍBRIDOS DE NANOESTRUCTURAS DE CARBONO: GRAFENO Y NANOTUBOS DE CARBONO DOPADOS CON NITRÓGENO

Dr. Alejandro Toro-Labbe. Pontificia Universidad Católica, Chile

CARACTERIZACIÓN DE LA ACTIVIDAD ELECTRÓNICA EN ACTIVACIONES MOLECULARES SOBRE GRAFENO Y MATERIALES CARBONÁCEOS

Dr. Cesar Barbero. Universidad Nacional Río Cuarto, Argentina

DEL GRAFITO AL GRAFENO, DERIVADOS Y ANÁLOGOS. NUEVOS MATERIALES PARA APLICACIONES TECNOLÓGICAS

Dr. Juan Carlos Moreno-Pirajan. Universidad de Los Andes, Colombia

ESTUDIO CALORIMÉTRICO DE LA ADSORCIÓN DE ION NIQUEL SOBRE AEROGEL Y XEROGEL DE CARBÓN

Dr. Rodrigo Navia. Universidad de La Frontera, Chile

NUEVAS APLICACIONES DE BIOCARBONOS COMO UN MATERIAL RENOVABLE

CONTENIDOS

| | |
|-----|-------------------------------|
| 10 | CONFERENCIAS PLENARIAS |
| | ORAL |
| 22 | NT |
| 33 | ENE |
| 42 | ELEC |
| 43 | ENV |
| 58 | FOT |
| 63 | HYB |
| | POSTER |
| 70 | NT |
| 91 | ENE |
| 104 | ELEC |
| 106 | CAT |
| 113 | ENV |
| 123 | FOT |
| 126 | HYB |

PROGRAMA

MIÉRCOLES 16

12:00 Transporte en Bus:

Concepción - Termas de Chillán.

Lugar: Plaza de Armas (Independencia), Concepción. En frente de la Catedral.

16:00 ACREDITACIÓN

18:00 Ceremonia de Apertura.

- Dr. Nestor Tancredi, Presidente FLC.
- Dr. José Zagal, Presidente APMC.
- Dr. Carlos González, Vicerrector de Investigación y Desarrollo, UdeC
- Dr. Alex Berg, Director UDT, UdeC.
- Dr. Juan Matos, Presidente TLMC₂

18:30 Conferencia Invitada de Apertura.

PERSPECTIVAS DE NANOMATERIALES A BASE DE GRAFENO: APLICACIONES EN CONVERSIÓN DE ENERGÍA Y REMEDIACIÓN AMBIENTAL - DR. MARÍA CONCEPCIÓN OVÍN ANIA. INCAR-CSIC, ESPAÑA

19:30 Brindis de Bienvenida

GLOSARIO

NT: FIBRAS / NANOTUBOS / GRAFENO

ENE: ENERGÍA

ELEC: DISPOSITIVOS ELECTRÓNICOS

CAT: CATÁLISIS

ENV: AMBIENTE

FOT: FOTOCATÁLISIS

HYB: HÍBRIDOS

PROGRAMA

JUEVES 17

8:30 Conferencia Plenaria-1. NANOCARBONES: COMO NANO Y PARA NANO - DR. ADO JORIO. UFMG, BRASIL.

Sesión Oral-1.

NANOTUBOS, FIBRAS, GRAFITO Y GRAFENO

9:20 NT-6

PREPARACIÓN Y CARACTERIZACIÓN DE GRAFENO MEDIANTE EXFOLIACIÓN MECÁNICA DE GRAFITO EN SOLUCIÓN ACETONA/AGUA - ANDRÉS CUÑA

9:40 NT-7

UTILIZACIÓN DE GRAFENO COMO MATERIAL ANTIBIOPROTECTOR - FRANCISCO MONTERO

10:00 NT-15

INFLUENCE OF MECHANICAL EXFOLIATION PROCESS VARIABLES ON THE CHARACTERISTICS OF GRAPHENE OXIDE - CONSTANZA MELLADO

10:20 NT-18

GRAPHENE COATING TO ENHANCE WATER FLOW IN SILICA SLIT NANOCANNELS - HARVEY A. ZAMBRANO

10:40 NT-22

EFFECTO DEL PRECURSOR EN LA MODIFICACIÓN DE NANOESTRUCTURAS DE CARBONO CREADAS SOBRE SUSTRATOS DE COBALTO-COBRE - JUAN LUIS FAJARDO DIAZ

11:00 NT-23

SÍNTESIS DE RECUBRIMIENTOS DE RGO POR DEPOSICIÓN ELECTROFORÉTICA CATÓDICA Y SU APLICACIÓN PARA LA PROTECCIÓN DEL ACERO CONTRA LA CORROSIÓN - LUIS CHÁZARO

11:20 Coffee break

11:40 Conferencia Plenaria-2. ÍNDICES DE REACTIVIDAD DE CATALIZADORES MOLECULARES PARA REACCIONES ELECTROQUÍMICAS Y SU IMPACTO SOBRE DISPOSITIVOS DE CONVERSIÓN DE ENERGÍA - DR. JOSÉ ZAGAL. USACH, CHILE.

12:30 Almuerzo

14:00 Conferencia Plenaria-3. MATERIALES HÍBRIDOS DE NANOESTRUCTURAS DE CARBONO: GRAFENO Y NANOTUBOS DE CARBONO DOPADOS CON NITRÓGENO - DR. EMILIO MUÑOZ-SANDOVAL. IPICYT, MÉXICO.

Sesión Oral-3.

FOTOCATÁLISIS Y MATERIALES HÍBRIDOS

14:50 FOT-1

INFLUENCIA DE LA ESTRUCTURA NANOPOROSA EN LA FOTOACTIVIDAD DE MATERIALES DE CARBONO - ALICIA GOMIS BERENGUER

15:10 FOT-2

FOTOREACTORES SOLARES: POTENCIAL EN PROCESOS FOTOCATÁLITICOS Y SU ALCANCE EMPLEANDO CARBONES O MATERIALES HÍBRIDOS - SIXTO MALATO RODRIGUEZ

15:30 FOT-3

ESTUDIO DE LA ACTIVIDAD FOTOCATALÍTICA DE SEMICONDUCTORES Y MATERIALES CARBONOSOS COMO BASE DE PINTURAS AUTOLIMPIANTES - RAQUEL GARCÍA-GONZÁLEZ

15:50 FOT-4

USING LIGHT TO DESIGN THE POROSITY OF CARBON/METAL NANOASSEMBLIES - MARÍA COCINA FERNÁNDEZ DE CÓRDOBA

16:10 HYB-4

SYNTHESIS OF POROUS CARBON MATERIALS CONTAINING NANOSTRUCTURED IRON-PHOSPHORUS COMPOUNDS - JAIR C. C. FREITAS

16:30 HYB-6

NANOSTRUCTURED HYBRID TiO₂-C FOR THE PHOTOCATALYTIC CONVERSION OF PHENOL - CRISTIAN MIRANDA

16:50 Coffee break

17:10 Conferencia Plenaria-4. CARACTERIZACIÓN DE LA ACTIVIDAD ELECTRÓNICA EN ACTIVACIONES MOLECULARES SOBRE GRAFENO Y MATERIALES CARBONÁCEOS - DR. ALEJANDRO TORO-LABBE. PUC, CHILE.

18:00 Encuentro de la Asociación Chilena de Materiales Carbonosos (ACMC)

19:30 Sesión de Posters

Sesión Oral-2.

ENERGÍA Y DISPOSITIVOS ELECTRÓNICOS

9:20 ELEC-1

FIELD EMISSION IN NANOCARBONS: NANOTUBES, MICRO-ARRAYS AND GRAPHENE OXIDE - MARÍA LUISA GARCÍA BETANCOURT

9:40 ENE-4

FUNCTIONALIZATION OF LIGNOCELLULOSIC BIOMASS DERIVED BIOCHAR USING MICROWAVE TECHNOLOGY - MARÍA EUGENIA GONZÁLEZ

10:00 ENE-6

DEPENDENCIA DE FRACCIONES VOLÁTILES EN CARBÓN VEGETAL DE *Quercus laurina* A DIFERENTES NIVELES DE ENERGÍA TÉRMICA DE PIRÓLISIS - NOEL CARRILLO ÁVILA

10:20 ENE-7

PODER CALORÍFICO DEL CARBÓN DE *Quercus laurina* EN FUNCIÓN DE LAS TEMPERATURAS DE CARBONIZACIÓN - JOSÉ GUADALUPE RUTIAGA-QUIÑONES

10:40 ENE-8

STUDY OF GASIFICATION REACTIONS DURING OXY-COMBUSTION OF COAL/BIO MASS BLENDS USING ISOTOPIC LABELLED GASES (¹³C¹⁸O₂) - DIANA LÓPEZ LÓPEZ

11:00 ENE-14

CATALYTIC ACTIVITY OF Co AND Fe MN₂ CATALYSTS ADSORBED ON CARBON NANOTUBES AND ON PYRIDINE MODIFIED CARBON NANOTUBES TOWARDS O₂ REDUCTION - FEDERICO TASCA

Sesión Oral-4.

AMBIENTE, REMEDIACIÓN Y SALUD

14:50 ENV-1

EVALUACIÓN DE LAS PROPIEDADES INTRÍNSECAS DEL ÓXIDO DE GRAFENO EN LA TRANSFORMACIÓN QUÍMICA Y BIOLÓGICA DE IOPROMIDA - EDUARDO TORAL-SÁNCHEZ

15:10 ENV-2

CARBÓN Y COMPOSITE TiO₂/CARBÓN PARA ELIMINACIÓN DE UN CONTAMINANTE EMERGENTE: COMPLEJO DE GADOLINIO "DOTA" - LIDIA ESMERALDA GARCÍA DÍAZ

15:30 ENV-3

EFFECTO DE LA POROSIDAD, CONTENIDO DE HIERRO Y DISTRIBUCIÓN DE CARGA DE CARBONES ACTIVADOS EN LA REMOCIÓN DE ARSÉNICO DE SOLUCIÓN ACUOSA - JAVIER ANTONIO ARCÍBAR OROZCO

15:50 ENV-6

ANCLAJE DE (Oxi)HIDRÓXIDOS BIMETÁLICOS Fe-Mn SOBRE CARBÓN ACTIVADO PARA LA ADSORCIÓN DE As (V) EN AGUA POTABLE - JOEL DE JESÚS GUTIÉRREZ MARTÍNEZ

16:10 ENV-8

PREPARACIÓN Y CARACTERIZACIÓN TEXTURAL DE CARBONES ACTIVADOS OBTENIDOS A PARTIR DE YERBA MATE: APLICACIONES EN LA REMOCIÓN DE FENOL Y CROMO EN SOLUCIÓN ACUOSA - CECILIA DE PIANTE VICIN

16:30 ENV-9

PREPARACIÓN DE MATERIALES GRAFÍTICOS PARA ADSORBER TRIMETOPRIM EN SOLUCIÓN ACUOSA - ROBERTO LEYVA RAMOS

VIERNES 18

8:30 **Conferencia Plenaria-5. DEL GRAFITO AL GRAFENO, DERIVADOS Y ANÁLOGOS. NUEVOS MATERIALES PARA APLICACIONES TECNOLÓGICAS - DR. CÉSAR BARBERO. UNRC, ARGENTINA.**

Sesión Oral-5. HÍBRIDOS, FOTOCATÁLISIS Y AMBIENTE

9:20 **FOT-6**
COMPORTAMIENTO DEL CARBÓN ACTIVADO EN FUNCIÓN DEL TIPO DE RADIACIÓN APLICADA EN LOS PROCESOS AVANZADOS DE OXIDACIÓN Y REDUCCIÓN - INMACULADA VELO GALA

9:40 **HYB-5**
SÍNTESIS DE XEROGELES DE CARBÓN RESORCINOL-FORMALDEHIDO A BAJAS RELACIONES RESORCINOL/CATALIZADOR Y SU RELACIÓN CON LAS PROPIEDADES TEXTURALES, QUÍMICAS Y MORFOLÓGICAS - RAFAEL ALBERTO FONSECA CORREA

10:00 **HYB-7**
DISMINUCIÓN DE LA CITOTOXICIDAD DE NANOPARTÍCULAS DE PLATA MEDIANTE SU SOPORTE SOBRE ÓXIDO DE GRAFENO CON APLICACIONES ANTIMICROBIANAS - CAROLINA ANGULO PINEDA

10:20 **ENV-12**
FABRICATION AND CHARACTERIZATION OF AERO/HYDROGELS BASED ON REDUCED GRAPHENE OXIDE GROWN BY HYDROTHERMAL METHOD - CAMILO ACUÑA PORRAS

10:40 **ENV-13**
STUDY OF THE THERMAL TRANSFORMATION OF SILICON SPECIES IN CARBONIZED RICE HULLS BY RAMAN SPECTROSCOPY AND SCANNING ELECTRON MICROSCOPY - ENRIQUE RONALD YAPUCHURA OCARIS

11:00 **ENV-15**
INFLUENCIA DE LA RELACIÓN ENTRE LA CANTIDAD DE SACAROSA Y LA TEXTURA DE LAS MATRICES INORGÁNICAS EN LA OBTENCIÓN DE CARBONES MESOPOROSOS PARA LA CAPTURA DE CO₂ - DEICY BARRERA

11:20 **Coffee break**

11:40 **Conferencia Plenaria-6. ESTUDIO CALORIMÉTRICO DE LA ADSORCIÓN DE IÓN NÍQUEL SOBRE AEROGEL Y XEROGELES DE CARBÓN - DR. JUAN C. MORENO. ULA, COLOMBIA.**

12:30 **Almuerzo**

14:00 **Conferencia Plenaria-7. NUEVAS APLICACIONES DE BIOCARBONOS COMO UN MATERIAL RENOVABLE - DR. RODRIGO NAVIA. UNIVERSIDAD DE LA FRONTERA, CHILE.**

Sesión Oral-7. NANOTUBOS, FIBRAS, GRAFITO Y GRAFENO

14:50 **NT-24**
ANÁLISIS TERMOGRAVIMÉTRICOS DE LA PREPARACIÓN DE FIBRAS DE CARBÓN ACTIVADO A PARTIR DE LANA - ALEJANDRO AMAYA

15:10 **NT-28**
ENERGETIC AND DIFFUSION OF WATER MOLECULES AND IONS THROUGH NANOPORES IN GRAPHENE: FIRST-PRINCIPLES CALCULATIONS - WALTER ORELLANA

15:30 **NT-29**
ELECTROCHEMICAL BIOSENSING: CARBON NANOTUBES OR GRAPHENE - SOLEDAD BOLLO

15:50 **NT-30**
ESTUDIO DE LAS PROPIEDADES DE ADSORCIÓN DE GASES DE INTERÉS MEDIOAMBIENTAL EN MATERIALES NANOPOROSOS - VICTOR YELPO

16:10 **NT-31**
ESTUDIO DE LAS PROPIEDADES DE ADSORCIÓN EN SISTEMAS NANOPOROSOS POR MEDIO DE SIMULACIÓN MOLECULAR - VALERIA CORNETTE

16:50 **Coffee break**

17:10 **Conferencia Invitada de Clausura. MÁS ALLÁ DE LA ADSORCIÓN: UNA NUEVA MIRADA EN LOS CARBONOS NANOPOROSOS - DR. TERESA J. BANDOSZ. CUNY, USA.**

18:00 **Ceremonia de Clausura**

- Comentarios Finales
- Reunión Federación Latino-Americana de Carbono (FLC)
- Nuevo Comité de la FLC
- Sede del TLMC-3 en 2018

19:30 **Cena de Gala**

Sesión Oral-6. AMBIENTE, REMEDIACIÓN Y SALUD

9:20 **ENV-16**
EFECTO DE LA ACIDEZ SUPERFICIAL EN MATRICES INORGÁNICAS PARA LA OBTENCIÓN DE CARBONES MESOPOROSOS Y SU USO EN LA CAPTURA DE CO₂ - KARIM SAPAG

9:40 **ENV-17**
INFLUENCIA DE LAS CONDICIONES DE ACTIVACIÓN SOBRE LA POROSIDAD DE CARBONES ACTIVADOS A PARTIR DE BIOMASA RESIDUAL - ZULAMITA ZAPATA BENABITHE

10:00 **ENV-18**
CARBÓN ACTIVADO A PARTIR DE ENDOCARPOS DE *Butia odorata* - NESTOR TANCREDI

10:20 **ENV-20**
CARBON XEROGELS AS SENSORS FOR ELECTROCHEMICAL DETERMINATION OF LEAD IN WATER - NELSON OSWALDO BRICEÑO GAMBA

10:40 **ENV-21**
GRAVIMETRIC STUDY ON THE CO AND CO₂ ADSORPTION BEHAVIOUR OF GRAPHENE OXIDES - MARTÍN ROBLE

11:00 **ENV-24**
BIOCHAR USED AS SOIL AMENDMENT - CRISTINA MUÑOZ

Sesión Oral-8. ENERGÍA Y DISPOSITIVOS ELECTRÓNICOS

14:50 **ENE-15**
PREPARATION OF CARBON AEROGEL FROM CELLULOSE NANO AND MICROFIBRILS: ENHANCEMENT OF CARBON YIELD AND THERMAL RESISTANCE - ÓSCAR GÓMEZ CÁPIRO

15:10 **ENE-19**
FABRICACIÓN DE FOTOÁNODOS EN BASE A NANOMATERIALES DE CARBONO Y TiO₂ PARA LA DESCOMPOSICIÓN FOTOCATALÍTICA DE AGUA - RODRIGÓ SEGURA

15:30 **ENE-21**
FLOTACIÓN POR ESPUMADO DE CARBÓN DE LA CUENCA SABINAS, EN COAHUILA - NANCY VERÓNICA PÉREZ-AGUILAR

15:50 **ENE-22**
ESTUDIO DE LA ACTIVIDAD CATALÍTICA DE MATERIALES PIROLIZADOS TIPO C-N-M (M= Fe, Co) COMO CÁTODOS PARA PILAS DE COMBUSTIBLE - F. JAVIER RECIO

PROGRAMA

SESIÓN DE POSTERS (JUEVES 17)

Catálisis, Fotocatálisis e Híbridos

CAT-1

DESARROLLO DE BIOCHAR-ACTIVADO Y TERMORESISTENTE PARA SU USO COMO SOPORTE CATALÍTICO - AARON DELGADO

CAT-2

ECO-FRIENDLY SELECTIVE PHENOL HYDROGENATION ON Pd-BASED CATALYSTS SUPPORTED ON HYBRID C-TiO₂ MATERIALS - PO SHAN POON

CAT-3

DRY METHANE REFORMING ON Ce- AND La-BASED CATALYSTS SUPPORTED ON MESOPOROUS CARBON - JUAN MATOS

CAT-4

ETHYLENE CONVERSION ON ACTIVATED CARBON-SUPPORTED NiMO CATALYSTS: EFFECT OF CONFINING IN NANOPORES - JUAN MATOS

CAT-5

BIODIESEL SYNTHESIS USING ACTIVATED CARBON AS CATALYST SUPPORT - AIDA RAMÍREZ ARIAS

CAT-6

SÍNTESIS DE MATERIALES HÍBRIDOS Y SU ESTUDIO EN REACCIONES DE OXIDACIÓN SELECTIVAS - FRANKLIN GARCÍA

CAT-7

SÍNTESIS, CARACTERIZACIÓN Y APLICACIONES DE BIOCARBONOS COMO SOPORTE EN LA REACCIÓN DE METANACIÓN - PAULA MUÑOZ

FOT-5

PAPEL DE LA QUÍMICA SUPERFICIAL DE CARBÓN ACTIVADO EN SU ACTIVIDAD FOTOCATALÍTICA BAJO RADIACIÓN UV Y RADIACIÓN SOLAR SIMULADA - INMACULADA VELO GALA

FOT-7

IMPROVED PHOTOCATALYTIC ACTIVITY OF g-C₃N₄/TiO₂ COMPOSITES PREPARED BY A SIMPLE IMPREGNATION METHOD - CRISTIAN MIRANDA

FOT-8

EMERGING PHOTOCATALYTIC APPLICATIONS OF GRAPHITIC CARBON NITRIDE - IGOR KRIVTSOV

HYB-1

REMOVAL OF SULFUR MUSTARD GAS SURROGATE UNDER VISIBLE LIGHT ON THE SURFACE OF HYDROUS FERRIC OXIDE/GRAPHITE OXIDE COMPOSITES - JAVIER ANTONIO ARCIBAR OROZCO

HYB-2

HIERARCHY OF HYBRID COMPOSITES BASED ON CARBON NANOMATERIALS AND METALLIC NANOPARTICLES - MARÍA LUISA GARCÍA BETANCOURT

HYB-3

ESTUDIO DE LA OBTENCIÓN DE COMPOSITOS A BASE DE POLIMETILMETACRILATO CON DIFERENTES REFUERZOS: NTCPM, ZrO₂, y Al₂O₃ - JULIA MARIA ORTIZ REYES

HYB-8

FOTOACTIVIDAD DE TiO₂ PARA LA DEGRADACIÓN DE AZUL DE METILENO Y FENOL - FELIPE BARRA

HYB-9

ESTUDIO DE LA CARGA DE SACAROSA SOBRE LA FOTOACTIVIDAD CATALÍTICA DE TiO₂ DE MATERIALES HÍBRIDOS - VICTORIA BENÍTEZ

HYB-10

EFEECTO DE LA TEMPERATURA DE SÍNTESIS DE TiO₂-C SOBRE LA FOTODEGRADACIÓN DE COMPUESTOS AROMÁTICOS PRESENTES EN AGUAS RESIDUALES - GABRIEL CHURIO BARBOZA

Ambiente, Remediación y Salud

ENV-4

NANOTUBOS DE CARBONO COMO SOPORTE DE NANOPARTÍCULAS DE HIERRO EN FIBRAS DE BAGAZO DE AGAVE PARA ADSORBER ARSÉNICO EN AGUA - RENÉ RANGEL-MÉNDEZ

ENV-5

HIGH SURFACE AREA MICROPOROUS CARBONS AS PHOTOREACTORS FOR THE CATALYTIC PHOTODEGRADATION OF METHYLENE BLUE UNDER UV-VIS IRRADIATION - JUAN MATOS

ENV-7

ADSORBENTES A PARTIR DE RESIDUOS LIGNOCELULÓSICOS: SU APLICACIÓN A LA REMOCIÓN DE ARSÉNICO - MARIANELA GIMÉNEZ GUERRERO

ENV-10

REDES NEURONALES Y LA ADSORCIÓN ANTAGÓNICA DE METALES PESADOS EN CARBÓN DE HUESO - H. ELIZABETH REYNEL-ÁVILA

ENV-11

PIRÓLISIS DE POLÍMEROS SINTÉTICOS: RELACIÓN CINÉTICA / ESTRUCTURA QUÍMICA Y COMPARACIÓN CON POLÍMEROS NATURALES - JOSÉ TOMÁS LARRAÍN CORREA

ENV-14

INFLUENCE OF BIOCHAR CHARACTERISTICS UPON THE PHOTODEGRADATION OF METHYLENE BLUE UNDER UV-VISIBLE IRRADIATION - RICMARY MONTAÑA

ENV-19

ADSORCIÓN DE FENOL, P-NITROFENOL Y PIRIDINA EN SOLUCIÓN ACUOSA - NANCY VERÓNICA PÉREZ-AGUILAR

ENV-22

PIRÓLISIS DE RESIDUOS AVÍCOLA COMO ALTERNATIVA DE VALORIZACIÓN - CRISTINA SEGURA CASTILLO

ENV-23

UTILIZACIÓN DE UN COMPLEJO BIOCARBÓN-METANÓTROFO PARA LA MITIGACIÓN DE METANO EMITIDO DESDE SUELOS FERTILIZADOS CON PURINES DE LECHERÍA - CRISTINA MUÑOZ

ENV-25

BIOCHAR FROM PYROLYSIS OF DIFFERENT BIOMASSES AS POTENTIAL SOIL AMENDMENT: EVALUATION OF PHYTOXIC EFFECTS IN *Lactuca sativa* - ELIZABETH LAURA MOYANO

Energía y Dispositivos Electrónicos

ELEC-2

SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN OPTOELÉCTRICA DE NANOPARTÍCULAS DE NITRURO DE CARBONO - FERNANDO FUNGO

ELEC-3

ANÁLISIS A NIVEL DE DFT DE LA ESTABILIDAD DE LA RED CARBONOSA DE UNA BATERÍA OPRÓTICA DE LITIO-AIRE - ADOLFO SALGADO CASANOVA

ENE-1

STRUCTURAL, ELECTRONIC AND OPTICAL PROPERTIES OF BIPHENYLENE AND NITROGENATED HOLEY GRAPHENE NANOTUBES - WALTER ORELLANA

ENE-2

EVALUACIÓN FÍSICA Y QUÍMICA DE LOS RESÍDUOS MADERABLES DE PINO CON FINES DENDROENERGÉTICOS - JOSÉ GUADALUPE RUTIAGA-QUIÑONES

ENE-3

EVALUACIÓN FÍSICA Y QUÍMICA DE LOS RESÍDUOS MADERABLES DE ALNUS Y ENCINO CON FINES DENDROENERGÉTICOS - JOSÉ GUADALUPE RUTIAGA-QUIÑONES

ENE-5

EFEECTO DE LA OXIDACIÓN QUÍMICA DE BIOCARBONES PARA SU APLICACIÓN EN ELECTRODOS DE DEFCS Y SUPERCONDENSADORES - ELEN LEAL DA SILVA

ENE-9

PREPARACIÓN Y CARACTERIZACIÓN DE COMPUESTOS NiO/CARBÓN HIDROTHERMAL PARA SU USO COMO ELECTRODOS DE SUPERCONDENSADORES - CARMINA REYES PLASCENCIA

ENE-10

METHANE HYDRATE FORMATION IN MODEL CARBON MATERIALS - MIRIAN ELIZABETH CASCO

ENE-11

SUCCESSFUL APPLICATION OF A COMMERCIAL CATIONIC SURFACTANT MIXTURE (BENZALKONIUM CHLORIDE) AS POROSITY STABILIZER IN POROUS CARBONS FABRICATION - CÉSAR BARBERO

ENE-12

NITROGEN INCORPORATION ON LIGNIN XEROGELS WITH A REACTIVE TRIAZINE - CHRIS D. CASTRO

ENE-13

EFEECTO DE LAS CONDICIONES DE REACCIÓN EN LOS CARBONIZADOS DE LA PIRÓLISIS DE MADERA ACACIA EN UN HORNO IR - DIANA PATRICIA LÓPEZ LÓPEZ

ENE-16

EVALUACIÓN DE LA INCLUSIÓN DE LIGNINA EN LA PREPARACIÓN DE XEROGELES DE CARBONO POR EMULSIÓN INVERSA PARA ELECTRODOS DE SUPERCONDENSADORES - GIOVANNA DIOSSA GALLEGO

ENE-17

ADAPTACIÓN DE *Shewanella putrefaciens* EN ELECTRODOS DE CARBONO PARA ÁNODOS PARA CELDAS DE COMBUSTIBLE MICROBIANAS - ZULAMITA ZAPATA BENABITHE

ENE-18

TEMPLATED NANOPOROUS CARBONS: ACTIVATION, CHARACTERIZATION AND METHANE STORAGE STUDIES - DEICY BARRERA

ENE-20

EFEECTO DEL TAMAÑO Y LA DENSIDAD DE PARTÍCULA EN EL LAVADO DE CARBÓN MINERAL DE COAHUILA - NANCY VERÓNICA PÉREZ-AGUILAR

Nanotubos, Fibras, Grafito y Grafeno**NT-1**

NANOTUBOS DE CARBONO DOPADOS CON NITRÓGENO Y SU INTERACCIÓN CON LIPOSOMAS: NUEVOS COMPOSITOS PARA POSIBLES APLICACIONES - SARAÍ LUCÍA ROMO ÁVILA

NT-2

REACTIVIDAD DE NANOTUBOS DE CARBONO DE TIPO BUMPY QUE POSEEN ANILLOS DE 5 Y 7 MIEMBROS - M. LEONOR CONTRERAS

NT-3

OBTENCIÓN DE NANOMATERIALES VÍA POLIMERIZACIÓN RADICÁLICA CONTROLADA POR TRANSFERENCIA DE ÁTOMO: NTCPM/PMAC - LETICIA ARIZBETH RAMÍREZ MENDOZA

NT-4

EFEECTO DEL TRATAMIENTO TÉRMICO A BAJAS TEMPERATURAS EN NANOTUBOS DE CARBONO DOPADOS CON NITRÓGENO - MARÍA LUISA GARCÍA BETANCOURT

NT-5

PREPARACIÓN DE MATERIALES HÍBRIDOS DE ÓXIDO DE GRAFENO - LIGNINA Y SU EVALUACIÓN COMO ANTIBACTERIANOS - FERDINANDO TRISTÁN

NT-8

ROLE OF THE ACETONE IN THE CARBON SPONGE GROWTH - ALEJANDRO JAVIER CORTÉS LÓPEZ

NT-9

CONFIGURACIONES DE ENLACE DEL N, C, O EN LA SÍNTESIS DE NANOTUBOS DE CARBONO MULTICAPA DOPADOS CON NITRÓGENO (N-MWCNTS) EN CORRELACIÓN CON SU GRAFITIZACIÓN, MORFOLOGÍA Y PUNTO DE OXIDACIÓN - ROQUE SÁNCHEZ SALAS

NT-10

A STUDY OF OXYGEN TRANSFER DURING PREPARATION OF GRAPHENE OXIDE USING THE MODIFIED HUMMERS METHOD - CAMILA MORA VILCHES

NT-11

SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF NANOCOMPOSITES MADE OF GRAPHENE OXIDE AND POLYMERIC HYDROGELS - CÉSAR BARBERO

NT-12

NEAR-INFRARED LASER MODULATES THE ELECTRICAL RESISTANCE OF ELECTRODES MADE FROM MULTI WALLED CARBON NANOTUBES - JUAN BERNAL-MARTÍNEZ

NT-13

GALVANOTAXIS IN PARAMECIUM IS MODULATED BY FUNCTIONALIZED AND WATER-DISPERSABLE MULTI WALLED CARBON NANOTUBES - JUAN BERNAL-MARTÍNEZ

NT-14

MULTI-WALLED CARBON NANOTUBES BIND TO THE CELL MEMBRANE AND DID NOT AFFECT MUSCARINIC AND L-GLUTAMATE RECEPTORS OF IF HELIX ASPERSA NEURON - JUAN BERNAL-MARTÍNEZ

NT-16

ESTUDIO DEL MATERIAL RESIDUAL DE LA SÍNTESIS DE NANOTUBOS DE CARBONO MULTICAPA DOPADOS CON NITRÓGENO FABRICADOS POR EL METODO DE DEPOSICIÓN QUÍMICA DE VAPOR - GABRIELLA AZUARA-TUEXI

NT-17

DEGRADACIÓN ENZIMÁTICA DE NANOTUBOS DE CARBONO DOPADOS CON NITRÓGENO - GABRIELLA AZUARA-TUEXI

NT-19

CHARGE TRANSFER EXCITED STATES IN LIGHT-HARVESTING SYSTEMS BASED ON PORPHYRIN/SMARAGDYRIN AND FULLERENE/GRAPHENE - GLORIA I. CÁRDENAS-JIRÓN

NT-20

SYNTHESIS OF MULTIWALLED CARBON NANOTUBES USING A VERY LOW FERROCENE CONCENTRATION - ALEJANDRO JAVIER CORTÉS LÓPEZ

NT-21

TELAS DE CARBÓN ACTIVADO A PARTIR DE FIBRAS NATURALES DE YUTE Y HENEQUÉN - DULCE PARTIDA-GUTIÉRREZ

NT-25

ESTUDIO TEÓRICO Y EXPERIMENTAL DE LA ADSORCIÓN DE DIÓXIDO DE CARBONO SOBRE SWNT - KARIM SAPAG

NT-26

CONTROL DE LA ADHESION BACTERIANA A TRAVÉS DEL USO DE RECUBRIMIENTOS EN BASE A GRAFENO - ELSIE ZUROB

NT-27

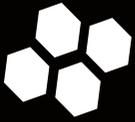
Ni-Mg/MWCNT AND Ni-Ca/MWCNT FROM THE CONTROLLED DRY METHANE REFORMING ON ACTIVATED CARBON-SUPPORTED Ni-BASED CATALYSTS IRRADIATION - JUAN MATOS

NT-32

A DFT STUDY OF NO₂ INTERACTION WITH ZIGZAG GRAPHENE EDGES: COMPARISON WITH NO AND NO₂ - ÁLVARO IGLESIAS CHÁVEZ

SÁBADO 19

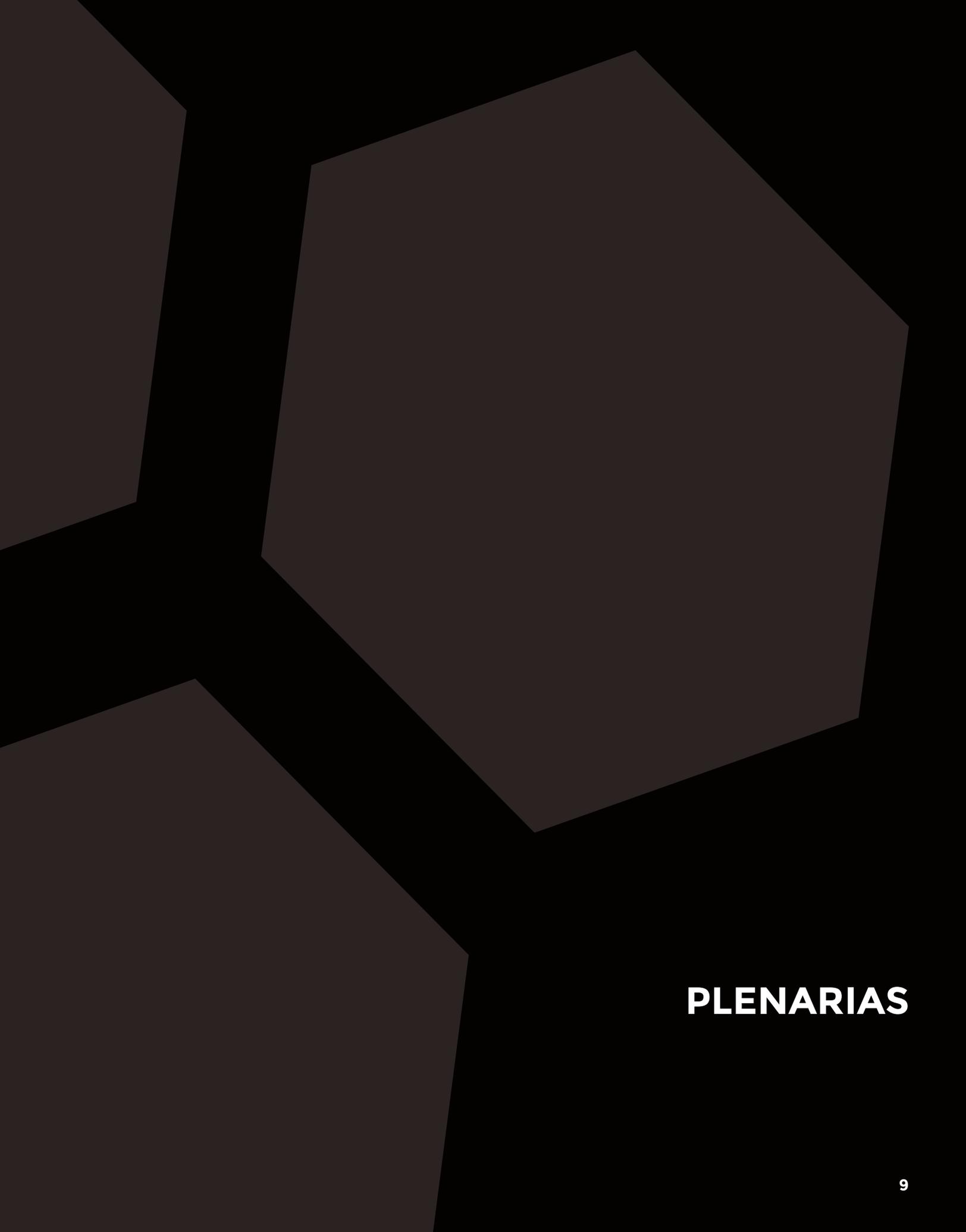
15:00 Transporte en Bus:
Termas de Chillán - Concepción.



TLMC₂

Segundo Taller
Latinoamericano
de Materiales de Carbono

MATERIALES SUSTENTABLES A BASE DE GRAFENO
Termas de Chillán, Chile 16 al 18 de noviembre de 2016



PLENARIAS

PLENARIA INAUGURAL

PROSPECTS OF GRAPHENE-BASED NANOMATERIALS: APPLICATIONS IN ENERGY CONVERSION AND ENVIRONMENTAL REMEDIATION

Alicia Gomis-Berenguer, Raquel García-González, Conchi O. Ania*

ADPOR Group, Instituto Nacional del Carbón (INCAR CSIC), 33011 Oviedo, Spain

*Corresponding author. E-mail: conchi.ania@incar.csic.es

Recent advances on material's chemistry have led to an unforeseen control in the physicochemical and structural properties contributing to develop highly featured carbon nanostructures that offer unexpected opportunities in multidisciplinary fields beyond traditional uses. The majority of these applications derives from the flexible coordination chemistry of carbon atoms and their ability to bind other heteroatoms either on the surface or inserted within the structural framework, resulting in a wide spectrum of materials and allotropic forms. At an atomic scale, most carbon materials have a sp^2 based structure with carbon atoms arranged in graphene layers with varied degree of planarity and dimensionality. Depending on the existence (or not) of a certain crystallographic order of the graphene layers in the z-axis, sp^2 -based carbons can display very different properties (conductivity, electron mobility, reactivity). Along structure, surface functionalization, doping and defect generation of the graphenic surface are interesting approaches to modify the electronic and chemical properties of carbon nanomaterials, as it has been demonstrated that doping with heteroatoms has an important effect on the hydrophobicity and wettability of the carbon materials.

Confinement in the nanopore voids is also critical; the possibility of developing carbon structures with multidimensional pore networks in the nanometric range (acting as nanoreactors), as well as hybrid materials introducing other photoactive species in the confined architectures is an interesting strategy in the design of smart and high performing carbon materials.

Nowadays, tailoring the features of carbon materials for an optimal performance is not enough: it also becomes essential to balance the environmental and economic cost. The idea is rather simple, as it relies on reducing the environmental impact associated with the materials' processing and implementation without sacrificing the performance. In this regard, the use renewable resources and wastes as precursors represent an important strategy in the design of sustainable carbon materials. This communication will explore the use of graphene-based materials in different applications related to energy conversion and environmental remediation (i.e., electrosynthesis, electrocatalysis, photochemistry, adsorption). We will provide an overview on the novel synthetic approaches to obtain high performing carbons with lower cost and greater design flexibility, the characterization techniques and the challenges and new perspectives towards emerging application fields.

BEYOND ADSORPTION: A NEW LOOK AT NANOPOROUS CARBONS

Teresa J. Bandosz^{1,*}

¹Department of Chemistry, The City College of New York, New York, NY 10031, USA.

*Corresponding author. E-mail: tbandosz@ccny.cuny.edu

Short Abstract

In this talk we would like to provide an insight into our perspectives on the new applications of nanoporous carbons that were inspired by the graphene features and its presence in these carbonaceous materials. A significant advancement to the “new” science of the “old” nanoporous carbons is in their application as photocatalysts for water splitting and as gas sensors. In these applications both surface chemistry and porosity are crucial factors determining the specific performance. We will show an excellent gas sensing capability of carbons and their response selectivity. Photoactivity in electrochemical water splitting and oxidation reactions will also be addressed. The mechanism of the observed processes will be proposed.

Our inspiration in the science of graphene combined with the comprehensive knowledge of activated carbons surface chemistry, texture, morphology and adsorptive/reactive adsorptive properties directed us to look at carbons from another perspective; from the perspective of nanotechnology. The results obtained by us and briefly addressed here are very new and many questions have arisen, and are left unanswered, and many approaches need improvements. One has to take into account that explaining the complex phenomena on nanoporous carbons is not easy owing to the combination of the porosity and surface chemistry effects. Practically either one cannot exist without another and they add up to that's specific and unique synergy provided only by these materials. One thing is certainly true: “adventurous” graphene features can be found in nanoporous carbons and they deserve to be explored and used to their full extent.

PLENARIAS

NANOCARBONS AS NANO AND FOR NANO

Ado Jorio^{1,*}

¹Physics Department, Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, Brazil.

*Corresponding author. E-mail: adojorio@fisica.ufmg.br

Short Abstract

Here I will discuss the use of nanotools to study nanocarbons, and the use nanocarbons to study nanotools. The main focus within the nanocarbons are graphene and carbon nanotubes, as prototypes for one- and two-dimensional systems, although other materials, such as biochar will be addressed as well. Within the nanotools the main focusses are the inelastic light scattering and scanning probe microscopies (SPM), although electron microscopy will also appear. The special *in situ* combination of Raman scattering with SPM generates the tip enhanced Raman spectroscopy, which is able to deliver optical information with resolution below the diffraction limit. The unique optical, mechanical and electronic structure of these nanocarbons will be addressed, trying to properly point to why these carbon materials became the prototypes for the development of nanometrology.

REACTIVITY INDEXES OF MOLECULAR CATALYSTS FOR ELECTROCHEMICAL REACTIONS AND THEIR IMPACT IN ENERGY CONVERSION DEVICES

José H. Zagal

Department of Chemistry of Materials, Faculty of Chemistry & Biology, University of Santiago de Chile, Casilla 40, Correo 33, Santiago Chile 9170022

*Corresponding author email address: jose.zagal@usach.cl.

The search for non-noble metal catalytic materials for the oxygen cathode of fuel cells is extremely important for lowering the cost of these energy conversion devices. Over the years we have investigated molecular catalysts like metal porphyrins, phthalocyanines and penanthrolines anchored on graphite and gold for the reduction of O₂ and many other reactions in order to establish reactivity indexes for these materials and design better catalyst. We have used the concept (1) of intermolecular molecular hardness of Parr and Pearson to explain the reactivity trends of metal phthalocyanines for several reactions. Essentially the intermolecular hardness is one-half the energy gap between the energy of the HOMO of the donor and the energy of the LUMO of the acceptor. We found that the smaller the gap the higher the reactivity and this agrees with Parr and Pearson's Principle.

In electrocatalysis, the catalytic activity of a given surface is related to the binding energy of the reacting molecule to the active sites. This has been extensively discussed in the literature but for metallic electrodes but much less work has been published concerning molecular catalysts like metal complexes (2). Over the years we have found linear and non-linear (volcano) correlations between the catalytic activity (measured as log *i* at constant *E*) versus the M⁺ⁿ/M⁺⁽ⁿ⁻¹⁾, the formal potential of the catalyst. In many cases, the catalytic currents start to appear at potentials very close to the redox pair of the central metal. We have demonstrated that to optimize the catalytic activity of a given metal complex it is necessary to "tune" the redox potential of the complex to a given value in order to achieve the maximum activity. The redox potential of the catalyst can be tuned by manipulating its structure using appropriate substituents on the ligand in order to change the electronegativity of the ligand and/or using axial ligands that can also serve as anchors to attach the complex to electrode surfaces. All these features will be discussed, with emphasis on the implications in energy conversion devices.

Acknowledgements

This work was funded by Fondecyt Projects 1140199 and by Project RC120001 of the Iniciativa Científica Milenio (ICM) del Ministerio de Economía, Fomento y Turismo del Gobierno de Chile.

References

1. J. H. Zagal, S. Griveau, J. Silva, T. Nyokong, F. Bedioui, *Coord.Chem. Revs* 254 (2010) 2755.
2. M.T.M. Koper, *J. Sol. State Electrochem.*(2015) in press

PLENARIAS

MATERIALES HÍBRIDOS DE NANOESTRUCTURAS DE CARBONO: GRAFENO Y NANOTUBOS DE CARBONO DOPADOS CON NITRÓGENO

Emilio Muñoz-Sandoval^{1,*}

¹División de Materiales Avanzados, IPICYT, México.

*Corresponding author. E-mail: ems@ipicyt.edu.mx

Short Abstract

Un material híbrido de nanotubos de carbono dopados con nitrógeno (NTC-DN) y grafeno de pocas capas es fabricado mediante un método de deposición química de vapor modificado. El montaje experimental consiste en dos vasos nebulizadores, un tubo de cuarzo dentro de dos hornos horizontales, sistemas de enfriamiento y una zona de liberación de residuos. Para la producción del grafeno de pocas capas se utiliza la técnica de Campos-Delgado, et al. [1], la cual emplea como fuente de carbono etanol. Las películas de cobre necesarias para este proceso se obtienen mediante depósitos en sustratos de cuarzo, los cuales son fabricados mediante la técnica de pulverización catódica con magnetrón. Una vez crecido el grafeno, se inicia el crecimiento de los NTC-DN. En este caso se utiliza una solución de bencilamina y ferroceno; la bencilamina como fuente de carbono y nitrógeno y el ferroceno como precursor de las nanopartículas catalizadoras. El producto híbrido se caracteriza mediante microscopía electrónica de barrido y de transmisión, difracción de rayos X, espectroscopia Raman, análisis termogravimétrico y espectroscopia de electrones fotoemitidos. Adicionalmente, se presentan sus propiedades magnéticas y electrónicas. Se discute también su aplicación para almacenamiento de hidrógeno.

[1] J. Campos-Delgado, et al. CVD synthesis of mono- and few-layer graphene using alcohols at low hydrogen concentration and atmospheric pressure. *Chem. Phys. Lett.* 584 (2013) 142-6.

CHARACTERIZATION OF THE ELECTRONIC ACTIVITY IN MOLECULAR ACTIVATIONS ON GRAPHENE AND CARBONACEOUS MATERIALS

Alejandro TORO-LABBE

Laboratorio de Química Teórica Computacional (QTC), Núcleo Milenio Chemical Processes and Catalysis (CPC). Facultad de Química, Pontificia Universidad Católica de Chile. Santiago, Chile.

*Corresponding author. E-mail: atola@puc.cl

Short Abstract

In this conference the electronic structure of different types of carbonaceous material will be analyzed on the light of DFT reactivity descriptors. The reaction force and reaction electronic flux concepts will be introduced and used to characterize of the mechanism of activation processes taking place in carbon nanostructures and surfaces. It is shown that the reaction force enabled us to define reaction regions where different reaction mechanisms might be operating and gives a physical interpretation of the nature of activation energies. On the other hand, the reaction electronic flux allows a complete and detailed description of the electronic activity taking place during the activation processes.

References

1. S. Giri, E. Echegaray, P.W. Ayers, A.S. Núñez, F. Lund, A. Toro-Labbé, J. Phys. Chem. A., 116 (2012) 10015.
2. M.L. Cerón, E. Echegaray, S. Gutiérrez-Oliva, B. Herrera, A. Toro-Labbé, Sci. China Chem., 54 (2011) 1982.
3. D. Cortés-Arriagada, S. Gutiérrez-Oliva, B. Herrera, K. Soto, A. Toro-Labbé, J. Chem. Phys., 141 (2014) 134701.

PLENARIAS

FROM GRAPHITE TO GRAPHENE, DERIVATIVES AND ANALOGS. NEW MATERIALS FOR TECHNOLOGICAL APPLICATIONS

Yanina Pereyra¹, Maximiliano Zensich¹, Rebeca Rivero¹, Nelson Gustavo Cotella¹,
Gustavo Morales¹, Diego F. Acevedo¹, Claudia Rivarola¹,
Horacio J. Salavagione², Cesar A. Barbero^{1,*}

¹Universidad Nacional de Río Cuarto, Río Cuarto, Argentina

²Instituto de Ciencia y Tecnología de Polímeros, Madrid, España

*Corresponding author. E-mail: cesarbarbero@gmail.com

Although it is possible to make graphene by direct synthesis (e.g. CVD), the most practical method for technological applications is the separation of monolayers of graphite. An electrochemical method for exfoliating graphite intercalation reductive providing a material with a minimum number of defects is described. Moreover, studies on the oxidation of graphite are described to produce “graphene oxide” as a starting material for functionalized graphenes. The materials used in the manufacture of polymer matrix nanocomposites application in sensors and three-dimensional electrodes. Finally, preliminary results described in the formation of graphene analogs (molybdenum disulfide, tungsten disulfide, etc.) that can provide superior properties to graphene.

ESTUDIO CALORIMÉTRICO DE LA ADSORCIÓN DE IÓN NÍQUEL SOBRE AEROGEL Y XEROGEL DE CARBÓN

Juan Carlos MORENO-PIRAJÁN^{1,*}, Liliana GIRALDO², Rafael FONSECA-CORREA¹

¹Facultad de Ciencias, Departamento de Química, Grupo de Investigación en Sólidos Porosos y Calorimetría, Universidad de Los Andes (Bogotá, Colombia).

²Facultad de Ciencias, Departamento de Química, Universidad Nacional de Colombia (Bogotá, Colombia)

*Corresponding author. E-mail: Prof. Dr. J.C. Moreno-Piraján: jumoreno@uniandes.edu.co

Resumen

La contaminación por iones metálicos en las fuentes de agua se manifiesta por la presencia de estos en cantidades que no estarían en forma normal sin la intervención del hombre, o por un aumento o descenso en el contenido de las sustancias existentes en el agua por la acción humana. Uno de los iones metálicos potencialmente tóxicos y que se considera contaminante prioritario es el Ni^{2+} , que suele encontrarse en las corrientes de agua.

El establecimiento de leyes rigurosas que regulan las emisiones de residuos metálicos a sistemas hídricos, obliga al uso de distintos tratamientos que permitan disminuir la concentración de estos contaminantes en las fuentes de agua. En esta dirección, el uso de sólidos porosos para la adsorción de metales tóxicos presentes en medios acuosos es una de las técnicas que se usa como alternativa a los procesos convencionales de descontaminación de aguas residuales y fuentes de agua, por lo anterior se continua en la búsqueda de adsorbentes adecuados para retirarlos de soluciones acuosas.

Dentro de los sólidos porosos, los aerogel y xerogel han demostrado ser eficaces en este tipo de aplicaciones, debido a la posibilidad de modificar y/o diseñar sus propiedades físicas y químicas de superficie, mediante tratamientos pre- o post- síntesis, permiten desarrollar selectividad en estos materiales frente al soluto que se desea remover, considerando que su capacidad de adsorción no depende únicamente de las propiedades texturales sino también la química superficial.

Se preparan xerogel y aerogel de carbón activado a partir de los componentes tradicionales resorcinol y formaldehído a composición constante y con bajas y altas relaciones entre los reactivos. Para el caso de los xerogel se realiza un secado a baja presión con el objetivo de evitar, al máximo el colapso de la estructura y para los aerogel el secado se realiza con CO_2 en condiciones supercríticas. Se lleva a cabo una modificación al método de preparación de los gels de carbón activado mediante una activación térmica con CO_2 para obtener sólidos adecuados para la adsorción desde fase acuosa de los iones Ni^{2+} .

Los aerogel y xerogel de carbono se caracterizan texturalmente por la adsorción de N_2 y se obtienen valores de área superficial entre 170 y 750 m^2g^{-1} , con una distribución de poro entre microporos y mesoporos, que favorece la adsorción del ion Ni^{2+} .

Se determinan las entalpías de inmersión de los sólidos en benceno, agua, soluciones de NaOH y HCl 0,1 M y soluciones de diferente concentración de Ni^{2+} y los valores de las entalpías de inmersión se relacionan con otras propiedades de los carbones activados como el área superficial B.E.T., el volumen de microporo, el contenido de grupos ácidos y básicos superficiales.

PLENARIAS

NOVEL APPLICATIONS OF BIOCHAR AS A RENEWABLE MATERIAL

Rodrigo NAVIA^{1,2,*}, María Eugenia GONZÁLEZ³, Diego REYES²,
Luis ROMERO-HERMOSO² & Mara CEA^{1,2}

¹Department of Chemical Engineering, University of La Frontera, Temuco, Chile.

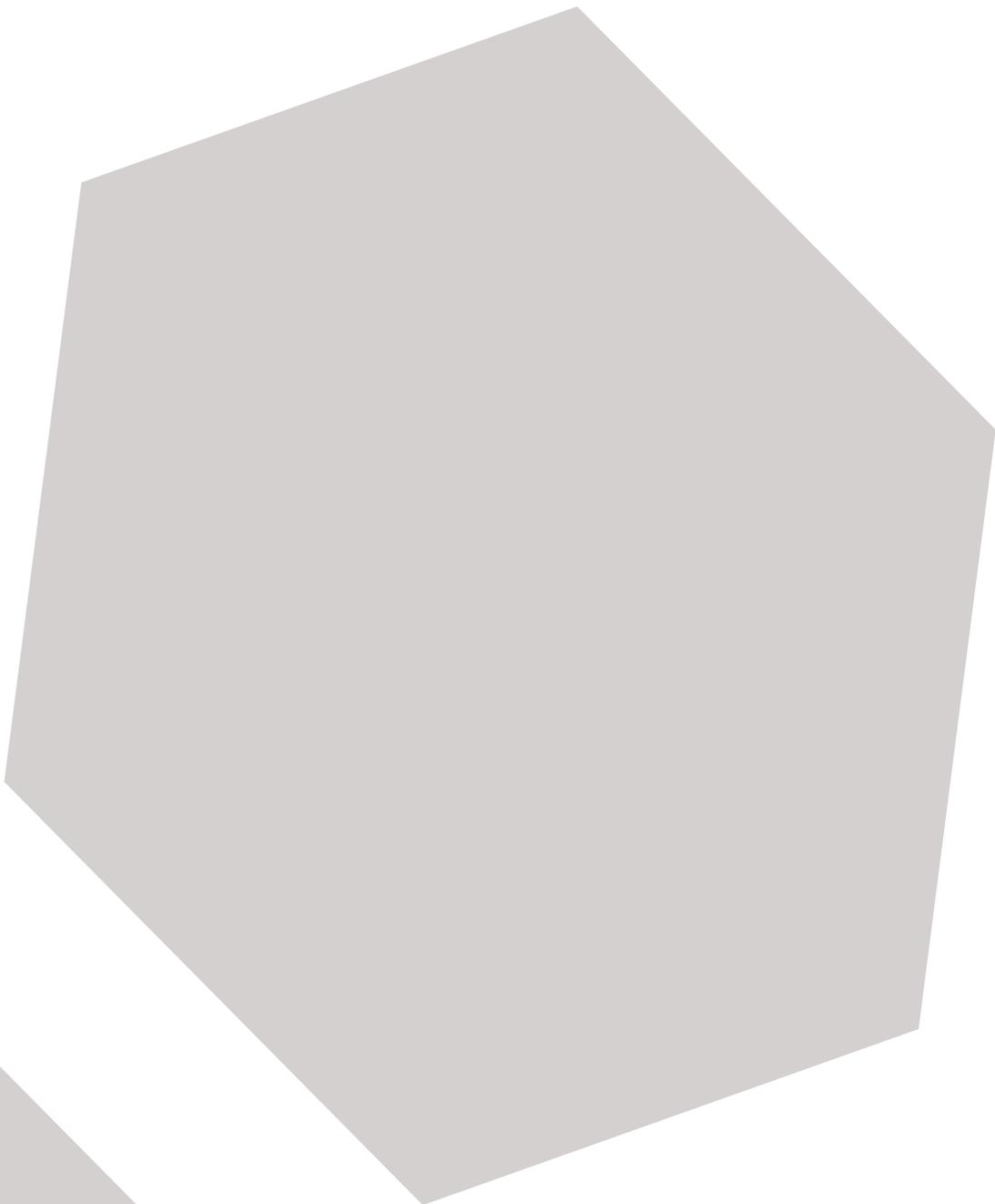
²Scientific and Technological Bioresource Nucleus (BIOREN); University of La Frontera, Temuco, Chile.

³Núcleo de Investigación en Energías Renovables, Dirección de Investigación, Universidad Católica de Temuco, Temuco, Chile

*Corresponding author. E-mail: rodrigo.navia@ufrontera.cl

Short Abstract

The use of biochar has traditionally been focused on agronomic applications, mainly as soil amendment. This practice is positioned as a new approach to establish, in long-term, a significant sink for CO₂ in terrestrial ecosystems. However, today it is possible to find a wide range of research devoted to the use of biochar in the most varied fields as a novel biomaterial. This new fields of applications are mainly related to biochar properties and can be obtained from a diversity of materials mainly including waste-derived biomass such as agricultural and forestry wastes, as well as sludge from wastewater treatment plants and animal manure. Moreover, biomass pyrolysis conditions can be easily modified to obtain a product with the desired features for a given application. Basically, the thermal decomposition of agro-forestry biomass occurs in three main stages. Thermo-gravimetric analyses (TGA) have shown that a first weight loss occurs up to a maximum of 200°C, being this stage also called pre-heating phase mainly producing a moisture loss. After this stage, primary devolatilization (stage 2) occurs which is characterized by the degradation of cellulose and hemicellulose. Weight loss occurs here as volatiles are being displaced and decomposed between 200 and 370°C. The decomposition range of hemicellulose varies between 273 and 285°C, whereas cellulose decomposition varies between 312 and 332°C. Secondary devolatilization (stage 3) corresponding to lignin degradation is related to more heavy volatiles and is therefore relatively more thermally stable than hemicellulose and cellulose, being the degradation temperature range between 150 and 900°C. Consequently, this work explores the different biochar properties depending on pyrolysis conditions, also including polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) presence, and the possible applications of biochar in different industrial fields of interest, including nitrogen controlled release fertilizers, bioproducts immobilization, as well as specific functionalization even by microwave processes to develop novel catalysts for the chemical industry.





TLMC₂

Segundo Taller
Latinoamericano
de Materiales de Carbono

MATERIALES SUSTENTABLES A BASE DE GRAFENO
Termas de Chillán, Chile 16 al 18 de noviembre de 2016



ORAL



PREPARACIÓN Y CARACTERIZACIÓN DE GRAFENO MEDIANTE EXFOLIACIÓN MECÁNICA DE GRAFITO EN SOLUCIÓN ACETONA/AGUA

Martín Bragança¹, Santiago PÉREZ¹, Mauricio VIQUE¹, Álvaro OLIVERA²,
Laura FORNARO², Andrés CUÑA¹

¹Cátedra de Físicoquímica, DETEMA, Facultad de Química, Universidad de la República, Uruguay.

²Grupo de Desarrollo de Materiales y Estudios Ambientales, Departamento de Desarrollo Tecnológico, CURE-ROCHA, Universidad de la República, Uruguay.

*Corresponding author E-mail: acuna@fq.edu.uy

Short Abstract

El grafeno es un tipo de material de carbono nanoestructurado, el cual puede considerarse como la unidad básica de distintas estructuras de carbono, tales como el grafito o los nanotubos de carbono. Este material ha despertado un gran interés en la comunidad científica debido a sus extraordinarias propiedades fisicoquímicas y a su prometedora aplicación en diversas áreas, tales como el almacenamiento y conversión de energía, materiales estructurales, biológicas, etc. [1]. Los esfuerzos de la actual investigación se centran en el estudio de la optimización y alternativas para la preparación de grafenos de calidad adecuada y en cantidades adecuadas para las diversas aplicaciones. La exfoliación mecánica de grafito es una de las vías más estudiadas. Esta consiste en la separación, por medios mecánicos, de las láminas de grafeno que constituyen la estructura del grafito.

En el presente trabajo se preparó y caracterizó grafeno mediante la exfoliación mecánica de grafito suspendido en solución acetona/agua. El trabajo se basó en los resultados obtenidos por Yi y col. [2]. Para la preparación de los grafenos, una suspensión de grafito en solución acetona/agua (75:25 % m/m) se sometió a un tratamiento de ultrasonido durante 4 horas. La suspensión resultante se centrifugó durante 30 min a 3000 rpm. El grafeno se obtuvo filtrando el sobrenadante del centrifugado utilizando un filtro de membrana reconstituida con un tamaño de poro igual a 0.2 μm . Este procedimiento se repitió para diferentes cantidades de grafito en un mismo volumen de solución (3, 5, 10 y 20 mg de grafito por mL de solución). La calidad de los materiales obtenidos se evaluó mediante espectroscopía Raman, microscopía electrónica de barrido (SEM) y microscopía electrónica de transmisión de alta resolución (HRTEM). Parámetros tales como la distancia promedio entre defectos (LD) y la densidad de defectos fueron obtenidos a partir de la espectroscopía Raman y aplicando ecuaciones propuestas por Lucchese y col. [3].

A partir de los espectros Raman se pudo concluir que el grafeno de mejor calidad (pocas capas y baja cantidad de defectos) correspondió al obtenido a partir de la suspensión de concentración 3 mg/mL, obteniéndose un rendimiento máximo de 3.3 % respecto a la cantidad de grafito inicial.

Referencias

[1] Graphene Chemistry. Theoretical Perspectives. John Wiley & Sons, Ltd (2013).

[2] Yi, M.; Shen, Z; et al. J. Phys. D: Appl. Phys. 2013, 46, 025301.

[3] M.M. Lucchese et al. Carbon 48 (2010) 1592-1597.

UTILIZACIÓN DE GRAFENO COMO MATERIAL ANTIBIOCORROSIVO

Francisco Montero-Silva^{1,*}, Ricardo Henríquez¹, Michael Seeger²,
Patricio Häberle¹ y Carolina Parra¹

*Corresponding author E-mail: francisco.montero@postgrado.usm.cl

En este trabajo mostramos la utilización de grafeno como material antibiocorrosivo. El proceso de biocorrosión se define como el desgaste del material debido a la presencia de microorganismos. Este proceso implica gastos de cientos de millones de dólares para las industrias de construcción, metalurgia, transporte marítimo, entre otras [1]. Actualmente las estrategias de protección de superficies incluyen el recubrimiento con compuestos biocidas y pinturas epóxicas. La primera estrategia produce daños al medio ambiente, mientras que la segunda es una solución costosa y con breves tiempos de vida media.

Motivados por la búsqueda de soluciones alternativas a esta problemática es que estudiamos el rol de recubrimientos de grafeno en la protección de materiales metálicos frente al ataque biocorrosivo. Los experimentos iniciales de interacción entre bacterias y superficies metálicas de Cu y Ni sin recubrimientos nanoestructurados de grafeno permitieron entender el fenómeno de la biocorrosión en estos sistemas. La cantidad de átomos liberados, medidos por ICP, fue proporcional a la densidad bacteriana, indicando que la corrosión del metal se debe a la biomasa bacteriana. Posteriormente las superficies metálicas fueron recubiertas con grafeno utilizando el método de deposición química en fase vapor (CVD). Estas muestras fueron caracterizadas por SEM y espectroscopía Raman, comprobándose su alta calidad gráfitica. Al someter las muestras metálicas recubiertas con grafeno (crecido y transferido) a experimentos de biocorrosión se observó que este nanomaterial, de espesor de una capa atómica, es capaz de suprimir la interacción entre bacterias y las superficies metálicas, y así evitar su biocorrosión [2].

[1] K. Lia, M. Whitfielda, et al. Corros. Rev. 31(3), 73 (2013)

[2] C. Parra, F. Montero-Silva, et al. ACS Appl. Mater. Interfaces 7(12), 6430 (2015)

INFLUENCE OF MECHANICAL EXFOLIATION PROCESS VARIABLES ON THE CHARACTERISTICS OF GRAPHENE OXIDE

Constanza Mellado C.*, Katherina Fernández E.

Laboratorio de Bioingeniería, Departamento de Ingeniería Química, Universidad de Concepción. Departamento de Ingeniería Química, Edificio Gustavo Pizarro Castro, Barrio Universitario S/N°, Universidad de Concepción, Concepción, Chile.

*Corresponding author. E-mail: constanzmellado@udec.cl

The strong cavitation induced by sonication is known to help separate the layers of Graphite Oxide (GpO), but it also fractures the sheets, which may to be an advantage for applications that need small dimensions of Graphene Oxide (GO) sheets. In chemical exfoliation of graphite, strong oxidizers are used to make GpO and allow the separation the carbon layers of graphite. However, a following mechanical exfoliation step allows to separate the oxidized carbon layers of GpO, that failed to be exfoliated by simple oxidation, and so get GO sheets.

We compare the characteristics of the extent exfoliation of GO, when coupling an oxidation approach such as the classical Hummers method (H_2SO_4 , $NaNO_3$ and $KMnO_4$) [1] with an exfoliation step via mechanical media (see scheme). The extent of exfoliation for obtain variety of GO sheets was achieved by varying the intensity (power) and time of sonication. For that, the samples of GpO was sonicated for 5, 15 and 30 minutes using a Probe sonicator (p-5, p-15 and p-30) or 1, 3 and 5 hours using a Bath sonicator (b-1, b-3 and b-5). The particle hydrodynamic size, morphology, exfoliation extent, oxygen content, and surface charge of GpO and GOs were characterized by elementary analysis (EA), X-ray diffraction (XRD), Fourier transform infrared spectroscopy (FTIR), dynamic light scattering (DLL), zeta-potential, Raman spectroscopy (Raman) and Atomic force microscopy (AFM).

Starting with 44 μm graphite flakes (GF), the protocol of oxidation and mechanical exfoliation left to GpO sheets with an average hydrodynamic size of 13 μm , and GOs with sizes between 280-680 nm. The influence of the exfoliation degree on the properties of GO was evaluated by DLL, which showed decrease in the hydrodynamic size with increasing exfoliation levels. The long periods of sonication for both bath and probe ultrasound caused the hydrodynamic size of GO sheets decreases exponentially as a function of time, without influence in their chemical composition. The intensity sonication showed more effect in hydrodynamic size than time sonication. Furthermore, the ultrasound helped to homogenize the distribution of hydrodynamic sizes of all samples of GO. FTIR analysis revealed the formation of hydroxyl, epoxy and carboxyl groups in GOs. GO stability samples were evaluated by zeta potential analysis, which showed negative

superficial charges and similar zeta potential among them, indicating comparable oxygen content. However, zeta potential potentials were higher in Mili-Q water pH 5.5 (average -50 mV) than in PBS (phosphate buffer saline), pH 7.4 (average -23 mV). The samples had high stability in Mili-Q water but reversible aggregation in PBS, which have been also observed by others authors [2]. XRD analysis revealed an increase of separation layers in GpO and GOs by oxidation effect, and the increased exfoliation levels resulted in decrease of signal around $11,3^\circ$ (2θ angle) in GOs, due to decreased of lateral size.

The structure of GO was highly influenced by the variation in the degree exfoliation. Our results suggest that the properties of GO can be tuned by varying the exfoliation degree, which may help in the GO-based applications.

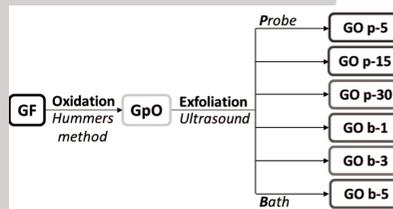


Fig. 1. - Scheme of procedures followed starting with Graphite Flakes (GF) for preparation of Graphite Oxide (GpO) by methods describe in the literature [1] and subsequent exfoliation to obtain Graphene Oxide sheets (GO) with different characteristic.

References

- [1] Hummers Jr. William S., Offeman Richard E. (1958) Preparation of graphitic oxide. *Journal of the American Chemical Society*, 80 (6) 1339.
- [2] Liao K. H., Lin Y. S., Macosko C. W., Haynes C. L. (2011) Cytotoxicity of graphene oxide and graphene in human erythrocytes and skin fibroblasts. *ACS Applied Materials and Interfaces*, 3, 2607-2615.

GRAPHENE COATING TO ENHANCE WATER FLOW IN SILICA SLIT NANOCHANNELS

Enrique WAGEMANN¹, Oyarzua ELTON¹, Jens H. WALTHER^{2,3} and Harvey A. Zambrano^{1,*}

¹Department of Chemical Engineering, University of Concepcion.

²Chair of Computational Science, ETH Zurich, Zurich, Switzerland.

³Department of Mechanical Engineering, Technical University of Denmark, Denmark.

*Corresponding author. E-mail: harveyzambrano@udec.cl

Short Abstract

Water flow in nanoconfined geometries exhibits a significant viscous drag; therefore the hydrodynamic efficiency in nanoscale channels is a key concern in nanotechnology. Graphene, a sheet of carbon atoms uniformly arranged in a hexagonal honeycomb lattice, has attracted massive attention in science and engineering due to its unusual mechanical, electronic, thermal and hydrodynamic properties. In particular, recent studies have revealed ultrafast water flow in graphene and carbon nanotube conduits. Moreover, experimental studies of the wettability of graphene layers supported on silica substrates, have reported that graphene is partially transparent to wetting which suggests the possibility to implement graphene layers as channel wall coatings in order to mitigate the typically large hydrodynamic losses in nanoconfined fluid flows. In this study, we perform large-scale and long-time non-equilibrium molecular dynamics simulations of pressure-driven flow of water in nanoscale silica channels with heights of 2 to 6 nm, with and without graphene coatings. In addition, we performed a detailed study of water slippage in pristine graphene channels of 2 to 6 nm. Our results show that the slip length on pristine graphene has a constant value of ca. 60 nm only for a particular range of shear rates which vary with the height of the channel. Therefore, we find that the slip divergence is size dependent in graphene conduits. Moreover, we explore the effect of the graphene chirality on the slip length and the results reveal a significant effect on the flow rates only in the slip divergence regime, suggesting that, at high shear rates, the arm chair orientation displays a considerable lower resistance to the water flow. In the silica channels with graphene coated walls, we compute a slip length of ca. 5nm and a flow enhancement ($Q_{\text{comp}}/Q_{\text{Poiseuille}}$) of c.a. 10 as compared to water flow in bare silica channels (Poiseuille flow). In conclusion, we report that bilayer graphene could be used as a wall coating in silica nanochannels in order to reduce the viscous drag. Moreover, in this study, we demonstrate that the slip velocity and length on graphene are constant values only within a range of specific shear rates wherein the graphene chirality does not affect the flow. Nevertheless, for very high values of the shear rate, the graphene chirality has a significant effect on the flow which should not be neglected. We believe that the results of the present study provide new insights into utilization of graphene in nanofluidic devices and are a step forward in the understanding of pressure-driven flows confined inside graphene walls.



EFFECTO DEL PRECURSOR EN LA MODIFICACIÓN DE NANOESTRUCTURAS DE CARBONO CRECIDAS SOBRE SUSTRATOS DE COBALTO-COBRE

Juan FAJARDO¹, Beatriz FLORES¹, Juan ESPARZA^{1,2}, Florentino LÓPEZ¹, Emilio MUÑOZ^{1*}

¹División de Materiales Avanzados, IPICYT, México

²Instituto Tecnológico de Zacatecas, México

*Corresponding author. E-mail: ems@ipicyt.edu.mx

Resumen

Novedosas nanoestructuras de carbono fueron sintetizadas mediante deposición química de vapor por medio catalítico (CCVD) empleando un sistema nebulizador con dos hornos tubulares a 750 °C y 850 °C, con precursores como bencilamina, etanol y tiofeno (y mezclas de estos); y metal catalítico depositado en forma de películas delgadas de Co-Cu preparadas sobre sustratos de SiO₂ mediante plasma de Argón usando una fuente de corriente directa en deposición física (PVD). El material colectado se caracterizó mediante microscopía electrónica de barrido (SEM), microscopía electrónica de transmisión (TEM), espectroscopia RAMAN y difracción de rayos X. Los resultados muestran como el contenido de nitrógeno y de azufre modifican considerablemente el crecimiento de las nanoestructuras de carbono pasando de nanotubos “tipo resorte” usando 100% bencilamina hasta la formación de estructuras deformadas y corrugadas de carbono “tipo papel corrugado” con partículas facetadas de Co@Cu en la punta al emplear la mezcla de los tres solventes. Resultados de RAMAN muestran un incremento en el desorden de las capas gráficas de carbón conforme se integra tiofeno en las mezclas por lo que se presume la formación de islas CuS que se corrobora mediante caracterización de rayos X. Imágenes SEM y TEM nos revelan el cambio estructural debido al efecto bi-metálico ocurrido por el cambio de temperatura en que el cobalto promueve la formación de estructuras verticales tipo nanotubos y el cobre de láminas gráficas en forma nanoalambres de carbono. Estudios preliminares sobre las propiedades físicas de estos materiales muestran un cambio de hidrofobicidad al cambiar el tipo de precursor empleado, pasando de estructuras superhidrofóbicas con ángulos de contacto < 41 °, hasta materiales completamente hidrofílicos que al interactuar con las gotas de agua cubren completamente el sustrato.

SÍNTESIS DE RECUBRIMIENTOS DE RGO POR DEPOSICIÓN ELECTROFORÉTICA CATÓDICA Y SU APLICACIÓN PARA LA PROTECCIÓN DEL ACERO CONTRA LA CORROSIÓN

Alan QUEZADA, José RANGEL, Luis CHÁZARO*

Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica, IPICYT, México

*Corresponding author. E-mail: luis.chazaro@ipicyt.edu.mx

Short Abstract

Debido a sus propiedades, los materiales con base en grafeno se han abierto camino en un gran número de aplicaciones; a pesar de esto, su uso se ve afectado debido a la dificultad de producir, manejar o ensamblar el nanomaterial. La deposición electroforética (EPD) se ha propuesto como una técnica viable para la síntesis de recubrimientos de óxido de grafeno (GO), el cual, gracias a la carga negativa que le confieren sus grupos ácidos superficiales, es capaz de migrar fácilmente hacia el ánodo bajo la acción de un campo eléctrico. Adicionalmente, estos recubrimientos sufren un proceso de oxidación electroquímica en donde algunos de los grupos oxigenados son removidos en forma de CO_2 , proceso que trae consigo la formación de huecos en las láminas. Debido a lo anterior, y a que la mayoría de los metales sufren oxidación al ser utilizados como ánodos en el proceso de EPD anódica, los recubrimientos de óxido de grafeno reducido (rGO) sintetizados por esta técnica no han podido ser empleados efectivamente como barreras que protejan al acero de la corrosión. Una opción para evitar los inconvenientes de la EPD anódica es la deposición del nanomaterial en el cátodo, donde sufrirá un proceso de reducción electroquímica, el cual presenta un mecanismo diferente para la remoción de los grupos oxigenados, en el cual no se generan huecos en la estructura, dando lugar a películas de rGO con propiedades diferentes a las obtenidas por EDP anódica y aptas para un gran número de aplicaciones diferentes. Para lograr lo anterior se han empleado agentes surfactantes, los cuales alteran la carga de las láminas de GO; sin embargo, este enfoque termina en la formación de películas compuesto que no permiten evaluar las propiedades del rGO. En este trabajo se plantea un enfoque en donde la carga de las láminas de GO es controlada mediante la naturaleza química, fuerza iónica y pH de la suspensión, logrando que estas migren hacia el cátodo mediante la imposición de un campo eléctrico. Los recubrimientos resultantes fueron evaluados como barreras que protegen al acero de la corrosión mediante técnicas electroquímicas como las curvas de polarización y espectroscopia de impedancia electroquímica, lo cual se discutirá durante la presentación de este trabajo.



ANÁLISIS TERMOGRAVIMÉTRICOS DE LA PREPARACIÓN DE FIBRAS DE CARBÓN ACTIVADO A PARTIR DE LANA

Laura GARCÍA, Ana Claudia PINA, Nestor TANCREDI, Alejandro AMAYA*

Cátedra de Físicoquímica y Laboratorio de Físicoquímica de Superficies, DETEMA, Facultad de Química, Universidad de la República.
General Flores 2124, 11800, Montevideo, Uruguay

*Corresponding author. E-mail: aamaya@fq.edu.uy

Short Abstract

La obtención de fibras de carbón activado es un proceso complejo que involucra varias etapas: estabilización, carbonización y activación. En cada etapa se emplean diferentes atmósferas y temperaturas de trabajo.

La etapa de estabilización es necesaria para lograr que las características de resistencia mecánica propias de las fibras se mantengan en las etapas posteriores. Suele tener lugar en atmósfera oxidante (oxígeno). Durante la carbonización las fibras son transformadas en un material carbonoso por efecto de la temperatura y tiene lugar en atmósfera inerte (nitrógeno). La activación es la etapa en que las fibras ricas en carbono se transforman en fibras de carbón activado y en este trabajo se llevó a cabo mediante el método físico (tratamiento térmico en presencia de dióxido de carbono).

En este trabajo se estudia el efecto de las variables temperatura y tiempo sobre las diferentes etapas de la obtención de fibras de carbón activado obtenidas a partir de lana de oveja. El método elegido para el estudio es la termogravimetría.

Para el estudio de la estabilización se sometieron las muestras a incremento controlado de temperatura en atmósfera de oxígeno, se registraron las temperaturas a las que tuvieron lugar cambios de masa importantes, evidenciados por picos en la derivada del perfil termogravimétrico (DTG) y se buscó diferencias significativas entre tratamientos en diferentes condiciones (temperaturas de 200 a 400 °C y tiempos de hasta 6 horas). Las fibras sometidas a diferentes condiciones de estabilización se analizaron también por termogravimetría pero en atmósfera de nitrógeno para analizar los cambios ocurridos durante la carbonización. Finalmente, sobre fibras carbonizadas con diferentes condiciones de estabilización se estudió el efecto de la activación con dióxido de carbono, en particular, se determinó la temperatura a la que este gas se comporta como reactivo (en todos los casos superior a los 750 °C). La información es complementada con determinaciones de composición elemental de las fibras estabilizadas, carbonizadas y activadas.

ENERGETIC AND DIFFUSION OF WATER MOLECULES AND IONS THROUGH NANOPORES IN GRAPHENE: FIRST-PRINCIPLES CALCULATIONS

Walter ORELLANA^{1,*}, Raúl GUERRERO¹

¹Departamento de Ciencias Físicas, Universidad Andrés Bello.

*Corresponding author. E-mail: worellana@unab.cl

Short Abstract

The increasing scarcity of fresh water in the world and the search for low-cost mechanisms for seawater desalination have attracted a lot of attention recently toward nanoporous graphene as the ultimate membrane material for selective molecular sieving and salt rejection. Indeed, recent experimental works of porous graphene with pore size in the range of 0.5-1.0 nm created by oxygen plasma etching, have shown salt rejection rates of nearly 100% as well as water flux reaching tremendously high values of three molecules per picosecond. However, the role of pore size and chemical functionalization of pore edge in the water-transport and salt-rejection processes is not clear enough. In this work, we study water molecules and ions (Na⁺, Cl⁻) passing through nanopores in graphene by using dispersion-corrected density functional theory (DFT) calculations together with *ab-initio* molecular dynamic (MD) simulations. We investigate the potential energy surfaces and the interactions involved in the transport of these species through the pores as a function of the pore size and pore-edge functionalization. Three pore sizes of about 0.3, 0.8, and 1.2 nm in diameter were considered. According to successful techniques to create subnanometer pores in graphene: by ion bombardment subsequently enlarged by oxygen plasma etching and by oxygen plasma etching processes, the most probable saturation of the undercoordinated carbons at the pore edge would be with O atoms. In addition, hydrogen plasma has been also used to stabilize pores in graphitic carbon. Therefore, in this study we consider the chemical functionalization of dangling bonds with only H atoms and with both O and H atoms. Our DFT results indicate that H atoms induces a positive character at the pore edge, whereas the incorporation of O atoms shows the opposite behavior, suggesting that the pore functionalization would play a key role in the water transport and ions rejections. We also investigate that water flux through 0.8-nm pores functionalized with H and OH atoms through MD simulations. We find water flux of about 1 molecule per picosecond for the H-saturated pore, whereas for the OH-saturated pores, the flux is about five times lower. We also demonstrate that pore-edge functionalization with both H and OH atoms is highly stable in the presence of water, preserving the pore structure at room temperatures throughout the simulation time of 5~ps.



ELECTROCHEMICAL BIOSENSING: CARBON NANOTUBES OR GRAPHENE

Soledad BOLLO*, Daniela F. BAEZ, Claudia YÁÑEZ

Centro de Investigación de Procesos Redox (CiPRex) and Advanced Center for Chronic Diseases (ACCDiS). Universidad de Chile, Sergio Livingstone Polhammer 1007, Independencia, Santiago-Chile

*Corresponding author. E-mail: sbollo@ciq.uchile.cl

Short Abstract

Carbon nanomaterials (CNM) such as nanotubes and graphene are widely used in the electrochemical field due to their favorable properties, such as enhanced detection sensitivity, electrocatalytic effects and reduced fouling. Moreover, CNMs have proven to be good modifiers as electrode materials, mainly because of their chemical stability, wide electrochemical potential window, and biocompatibility. In the present work the focus will be done in three points: (a) synthesis of CNMs and its characterization with classical techniques such as XPS, Raman and IR spectroscopies (b) the use of electrochemical techniques such as cyclic voltammetry (CV) and Scanning Electrochemical Microscopy (SECM) to characterize the electron transfer properties and the topography of glassy carbon electrodes (GCE) modified with CNMs. (b) a comparison about the analytical performance of the resulting electrodes using carbon nanotubes and materials based on graphene against analytes such as dsDNA and NADH. Our results show that the electrochemical performance of CNMs modified electrodes is strongly determined by the chemical characteristic of the surface such as oxygen content and surface morphology determined by nanomaterials size which that finally induce different electroactive performance.

Acknowledgements to Grants FONDECYT 1161225 and FONDAP N° 15130011

ESTUDIO DE LAS PROPIEDADES DE ADSORCIÓN DE GASES DE INTERÉS MEDIOAMBIENTAL EN MATERIALES NANOPOROSOS

Víctor YELPO, Valeria CORNETTE*, Deicy BARRERA, Raúl LOPEZ

Instituto de Física Aplicada (INFAP), CONICET-Universidad Nacional de San Luis, San Luis, Argentina.

*Corresponding author. E-mail: valecorn@gmail.com

Short Abstract

Los problemas energéticos y ambientales han creado la necesidad de diseñar nuevos materiales, los cuales puedan ser usados en forma más eficiente y con mayor selectividad. Los carbones nanoestructurados han atraído el interés debido a sus propiedades fisicoquímicas útiles en muchas aplicaciones: Almacenamiento de gases (CH_4 y H_2), captura de gases (CO_2), procesos de separación, etc. En este trabajo caracterizamos la adsorción de N_2 , CH_4 y CO_2 en el carbón nanoestructurado CMK-3 por medio de simulación de Monte Carlo, utilizando diferentes modelos geométricos. Los resultados son contrastados con datos experimentales.



ESTUDIO DE LAS PROPIEDADES DE ADSORCIÓN EN MATERIALES CARBONOSOS POR MEDIO DE SIMULACIÓN MOLECULAR

Valeria CORNETTE*, Rodrigo DELGADO MONS, Víctor YELPO, Raúl LÓPEZ

Instituto de Física Aplicada (INFAP), CONICET-Universidad Nacional de San Luis, San Luis, Argentina.

*Corresponding author. E-mail: valecorn@gmail.com

Short Abstract

El estudio de la química de superficie, forma y tamaño de poros depende del conocimiento previo del material en consideración. Teniendo en cuenta estas consideraciones específicas abordaremos el estudio de modelos de geometrías de poro simples como slit, cilíndrica y triangular para la caracterización de la adsorción en materiales carbonosos.

Estudiaremos en detalle los efectos de asumir un potencial pseudo esférico para modelar el adsorbato, y como una alternativa usaremos un modelo de potencial que tenga en cuenta la correcta forma molecular, ya que es esperado que la forma pueda jugar un rol significativo en los procesos de adsorción en espacios confinados, especialmente poros pequeños.

FUNCTIONALIZATION OF LIGNOCELLULOSIC BIOMASS DERIVED BIOCHAR USING MICROWAVE TECHNOLOGY

M.E. González^{1,2}, D. Reyes², L. Romero-Hermoso², M. Cea^{2,3} and R. Navia^{2,3}

¹Núcleo de Energías Renovables, Universidad Católica de Temuco, Temuco, Chile

²Scientific and Technological Bioresource Nucleus (BIOREN), Universidad de La Frontera, Casilla 54-D, Temuco, Chile

³Department of Chemical Engineering, Universidad de La Frontera, Casilla 54-D, Temuco, Chile

Novel carbon based acid catalysts have been only little explored so far in biodiesel production. These type of catalysts have some advantages, as they are stable in both basic and acidic conditions, and due to their nonpolar nature they can reduce the adsorption of polar molecules (water or glycerol) onto their surface, therefore enhancing their useful lifetime. In this context, the functionalization of biochar derived from slow pyrolysis of lignocellulosic biomass at 600°C was evaluated. Sulfonation of biochar and oils transesterification reaction using the functionalized material for biodiesel production were carried out in a microwave reactor. The conditions evaluated for the sulfonation were biochar/sulfuric acid ratio 1:10, temperature (100 and 140 °C) and reaction time (10 and 30 min). The physico-chemical characterization of the developed materials included functional groups, elemental analysis, specific surface area, SEM and TGA. The transesterification of waste cooking oils was also carried out in a microwave reactor. The conditions evaluated for biodiesel production were: reaction time (10 - 30 min), temperature (100 - 140°C), catalyst concentration (previously developed) was fixed at 10% wt of oil and methanol/oil molar ratio was 10:1.

The results obtained showed that an increase in the temperature and reaction time during biochar sulfonation increased the content of sulfonic groups (SO_3). These results were corroborated through FT-IR spectra and elemental analysis. In addition, these SO_3 groups are responsible for transesterification of oils into fatty acid methyl esters (FAME, or biodiesel). However, a decrease in the surface area of biochar was observed (from 49 m^2/g to 20 m^2/g) during the sulfonation process.

The maximum of FAME conversion was 80%, when the reaction was carried out at 140 °C for 30 min.

Acknowledgements

This work was supported by FONDECYT Project N° 3140630 and 1150707.



DEPENDENCIA DE FRACCIONES VOLÁTILES EN CARBÓN VEGETAL DE *Quercus laurina* A DIFERENTES NIVELES DE ENERGÍA TÉRMICA DE PIRÓLISIS

Consuelo BLANCAS-HERNÁNDEZ¹, Noel CARRILLO-ÁVILA^{2,*},
Edna Elena SUÁREZ-PATLÁN², José Guadalupe RUTIAGA-QUIÑONES¹, Fabiola Eugenia
PEDRAZA-BUCIO¹, José René RANGEL-MÉNDEZ³

¹Facultad de Ingeniería en Tecnología de la Madera, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, México.

²Instituto Nacional de Investigaciones Forestales, Agrícolas y Pecuarias, México.

³Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica, A. C., México.

*Corresponding author. E-mail: carrillo.noel@inifap.gob.mx

Short Abstract

El proceso termoquímico de pirólisis libera principalmente compuestos volátiles cuando es aplicado a maderas o materiales lignocelulósicos. El grado de pureza del residuo carbonoso resultante está en función de la drasticidad en la aplicación de temperaturas y por consiguiente a la presencia de dichas sustancias volátiles que impactan en el rendimiento al convertir madera a carbón, así como para cumplir con estándares sanitarios si el carbón se usa para preparar alimentos a fuego directo. La presencia de hidrocarburos aromáticos policíclicos (PAH por sus siglas en la lengua inglesa) en el humo de los asados puede influir en riesgos a la salud cuando rebasan algunos parámetros de sanidad. Hay referencias que indican relación directa entre presencia de PAH's en humos provenientes de fibras con alto contenido de lignina, por lo tanto, el medir el grado de remoción de la sustancias volátiles y los parámetros proximales durante la pirólisis, es muy importante. El presente trabajo tuvo como objetivo medir la relación entre la temperatura de carbonización y la presencia de sustancias volátiles, carbono fijo y cenizas residuales. Se sometió madera de *Quercus laurina* a condiciones de pirólisis lenta (5 °C min⁻¹) bajo un experimento que probó un modelo de clasificación en bloques completos al azar con ocho tratamientos equidistantes a cada 100 °C de temperatura (300-1,000 °C) además de un modelo de regresión, con la finalidad de determinar la dependencia de la calidad química con la temperatura aplicada. Los resultados mostraron que la aplicación de temperatura a madera en condiciones de pirólisis lenta generó una relación polinómica entre la intensidad de la energía térmica aplicada y las variables de la fracción volátil y su contraparte carbono fijo, no así para las cenizas. El modelo para evaluar la relación de fracción volátil (FV) se ajustó a la siguiente ecuación: $FV(\%) = 0.0001(°C)^2 - 0.148(°C) + 53.548$ ($R^2 = 0.9886$), mientras que para carbono fijo (CF), el modelo fue el siguiente: $CF(\%) = -0.0001(°C)^2 + 0.141(°C) + 44.545$ ($R^2 = 0.9886$). El modelo de clasificación no mostró significancia en la diferencia de fracción volátil y carbono fijo a partir del tratamiento de 700 °C, aunque la tendencia de no diferenciación sobre estas variables se muestran desde los 600 °C en la curva del modelo. A partir de esta temperatura y para la especie evaluada, se considera pérdida de rendimiento en el carbón sin ganar sustancialmente pureza en el residuo sólido obtenido. Respecto al contenido de cenizas se encontró una diferencia significativa de 2% entre los tratamientos de 300 a 700 °C, a partir de esta temperatura hasta 1,000 °C el contenido de cenizas decrece hasta en un 0.4% obedeciendo al límite marcado por la norma utilizada ASTM D 1762-84 (2013) donde indica 750 °C como límite para combustionar los compuestos orgánicos en la madera. Las curvas de regresión para evaluar fracciones de sustancias del carbón probablemente afectantes cuando éstas se incrustan en alimentos, son útiles para determinar parámetros óptimos en proceso de carbonización y prevenir riesgos en la salud humana.

PODER CALORÍFICO DEL CARBÓN DE *Quercus laurina* EN FUNCIÓN DE LAS TEMPERATURAS DE CARBONIZACIÓN

Consuelo BLANCAS-HERNÁNDEZ¹, José Guadalupe RUTIAGA-QUIÑONES¹,
Fabiola Eugenia PEDRAZA-BUCIO¹, José René RANGEL-MÉNDEZ³,
Edna Elena SUÁREZ PATLÁN², Noel CARRILLO ÁVILA²

¹Facultad de Ingeniería en Tecnología de la Madera, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, México.

²Instituto Nacional de Investigaciones Forestales, Agrícolas y Pecuarias, México.

³Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica, A. C., México.

*Autor de correspondencia. E-mail:rutiaga@umich.mx

Short Abstract

Con el creciente interés en la biomasa como fuente limpia y renovable de energía, más y más estudios se están centrando en los procesos de pirólisis de biomasa en la producción de biocombustibles y gas de síntesis para la producción de calor y electricidad, y el carbón vegetal para uso industrial. Hay por tanto, muchos estudios que apuntan a mejorar el rendimiento y la calidad del carbón como un producto final de pirólisis. El carbón vegetal es el producto de la combustión incompleta de la madera. La diferencia entre la madera y el carbón vegetal, es que éste último tiene mayor contenido en carbono que la madera, por lo que su poder calorífico es mayor y es mejor combustible que la madera. Cuando el carbón vegetal se produce de manera regulada y sustentable y su uso final ocurre bajo condiciones controladas, su producción puede representar tanto una fuente de trabajo e ingresos como una alternativa energética para el sector residencial y comercial. El objetivo del presente trabajo fue obtener carbón vegetal de la madera de *Quercus laurina* y calcular su poder calorífico en función de las temperaturas de carbonización. El carbón vegetal de *Q. laurina* se elaboró a ocho diferentes temperaturas (300, 400, 500, 600, 700, 800, 900 y 1,000°C) con una tasa de calor de 5 °C min⁻¹ con un tiempo de residencia de 30 minutos. El análisis químico se realizó en base a la norma ASTM D 1762-84 (2013) y se determinó contenido de humedad, materia volátil, contenido de cenizas y carbono fijo. Las cenizas de cada carbón obtenido se analizaron mediante espectroscopía de emisión atómica acoplada a plasma y también se determina el área superficial y volumen de poro. Para determinar el poder calorífico se utilizó la siguiente ecuación: $PC = 354.3 CF + 170.8 MV$ (kJ/kg). Los resultados preliminares obtenidos en el presente estudio indican diferencias estadísticas significativas entre los procesos térmicos. El contenido de materia volátil mostró una disminución importante de 40.8% en 300°C hasta 7.5% a 800°C, manteniéndose alrededor de este promedio en las temperaturas más altas de carbonización. El contenido de carbono fijo aumentó considerablemente al aumentar la temperatura, de 55.6% con 300°C hasta 86.6% con 1,000°C. Por otro lado se observó un aumento considerable en los valores de poder calorífico con un valor de 27,054.48 KJ/kg⁻¹ con 300°C hasta 32,351.60 KJ/kg⁻¹ con 1000°C. El microanálisis de las cenizas revela la presencia de 30 elementos químicos, encontrando diferencias estadísticas significativas entre las temperaturas de carbonización. Los elementos mayoritarios fueron el calcio, magnesio y fósforo.



STUDY OF GASIFICATION REACTIONS DURING OXY-COMBUSTION OF COAL/BIOMASS BLENDS USING ISOTOPIC LABELLED GASES (¹³C¹⁸O₂)

Yuli Betancur¹, Astrid Sánchez², Agustín Bueno³ and Diana López^{1*}

¹Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Química de Recursos Energéticos y Medio Ambiente, Instituto de Química, Universidad de Antioquia, Calle 70 No. 52-21, Medellín, Colombia.

²Escuela de Química, Universidad Nacional de Colombia - Sede Medellín, Calle 59A No. 63-20, Medellín, Colombia.

³Departamento de Química Inorgánica, Universidad de Alicante, Carretera de San Vicente s/n E03080, Alicante, España.

*Corresponding author. E-mail: diana.lopez@udea.edu.co

Short Abstract

Nowadays, coal/biomass blends are gaining importance as energy sources, since it results in the reduction of fossil fuels consumption and hence CO₂ emissions, particularly if it is used under the oxy combustion process.

Oxy-combustion involves fuels combustion in a mixture of oxygen (instead of air) and recycled flue gas, which mainly consists of CO₂ and H₂O; thereby, a highly concentrated CO₂ (95 %) flue gas is produced. Thus, if steam is condensed before recirculation, the reaction atmosphere will be held in O₂/CO₂ instead of O₂/N₂ as is the case of conventional combustion.

Replacing N₂ by CO₂ as balance gas in oxy-combustion process induce some changes in the combustion characteristics, not only due to the difference in physical properties of both gases, also gasification reactions could be promoted inducing changes in the particle consumption mechanism.

In the present study, wood biomass and sub-bituminous coal were oven-dried at 110 °C for 24 h, grounded and sieved into particle sizes of 400–600 μm. Finally, biomass was blended with coal in a ratio of 20:80 wt % by mechanical mixing in a planetary mill and heat-treated in N₂ or CO₂ at 900 °C. The oxy-combustion of these blends was studied at 300, 400 and 500 °C using a quartz microreactor connected to a mass spectrometer using pulse experiments with isotopic labelled gas (¹³C¹⁸O₂).

Obtained results confirm the participation of CO₂ gasification under oxy-combustion conditions at temperatures as low as 300 °C. The preparation atmosphere (N₂ or CO₂) has higher effect than oxy-combustion temperature on CO₂ gasification. Blends pretreated in inert gas yielded less ¹²C¹⁸O than those pretreated in CO₂. On the other hand, the production of recombination products suggests that gasification mechanism is not occurring by a direct pathway.

Acknowledgements

The authors thank the “Departamento Administrativo de Ciencia, Tecnología e Innovación”- COLCIENCIAS (Administrative Department of Science, Technology and Innovation from Colombia) through the program “Research and innovation on advanced combustion in Industrial use”, code N° 1115-543-31906 contract N° 0852-2012.

The authors thank the financial support from “Ministerio de Economía y Competitividad” through the project (MAT2014-61992-EXP).

Y. B. appreciate the financial support from the University of Antioquia.

CATALYTIC ACTIVITY OF Co AND Fe MN₄ CATALYSTS ADSORBED ON CARBON NANOTUBES AND ON PYRIDINE MODIFIED CARBON NANOTUBES TOWARDS O₂ REDUCTION

Federico TASCA^{1*}, F. Javier RECIO², Jorge RIQUELME¹, Marco VIERA¹, César ZUÑIGA², Ricardo VENEGAS², José H. ZAGAL¹

¹Faculty of Chemistry and Biology, Department of Chemistry of Materials, Santiago, Chile.

²Faculty of Chemistry, Pontific Catholic University of Chile, Santiago, Chile.

*Corresponding author. E-mail: Federico.tasca@usach.cl

It has been verified for metal phthalocyanines and metal porphyrins (MN₄) adsorbed on graphite electrodes that the formal redox potential of the metal centre involved into the redox reactions is a good reactivity index toward the oxygen reduction reaction (ORR). In alkaline pH the results lead to semi-volcano correlations that indicates that the catalytic activity of the complex increases when the potential of the redox couple associated to the catalytic process surge. In the present study we compare results for the electrocatalytic reduction of molecular oxygen in acidic, neutral, and basic media catalysed by various CoMN₄ and FeMN₄, that present different redox potentials, and which were either adsorbed on double wall carbon nanotubes (CNTs) or coordinated on pyridine modified CNTs (Pyr-CNTs). In the first set of experiments CNTs were dispersed in solutions of either CoMN₄ or FeMN₄ by sonication. The suspension was then adsorbed on graphite electrodes. In the second set of experiments CNTs were modified with aryl diazonium salts generated in situ from p-aminopyridine. The modified CNTs solution was then dispersed in oxygen-free solutions of either CoMN₄ or FeMN₄. The results show an increase of the catalytic activity towards the ORR when CNTs are employed. However, when non-modified CNTs are employed, the increment is due to the larger surface area and to a larger amount of catalyst present on the top of the surface and not significant changes in the mechanism towards the oxygen reduction are observed. When Pyr-CNTs are employed the redox potentials of the catalysts are shifted towards more positive potentials, and much higher catalytic activities are detected. Semi-volcano correlations with highest activity corresponding to the complex with the highest redox potential are obtained for CoMN₄ and FeMN₄ adsorbed on CNTs or coordinated to Pyr-CNTs in acidic, neutral, and basic media, that indicates that the catalytic activity of the complex increases when the potential of the redox couple associated to the catalytic process increases.

Acknowledgements

Fondecyt 11130167 y 1140199. Dicyt.



PREPARATION OF CARBON AEROGEL FROM CELLULOSE NANO AND MICROFIBRILS: ENHANCEMENT OF CARBON YIELD AND THERMAL RESISTANCE

Óscar GÓMEZ CAPIRO^{1,2,*}, Aaron M. DELGADO¹, Romel JIMÉNEZ¹, Luis E. ARTEAGA²

¹University of Concepcion, Chemical Engineering Department, Victor Lamas s/n, CHILE

²University of Concepcion, Technological Development Unit, Av Cordillera 2634. Coronel. CHILE

*Corresponding author. E-mail: ogomez@udec.cl

Short Abstract

During the last years, the interest for developing carbon-based structures has been renewed. Among several candidates, carbon aerogels (CAGs) have demonstrated potential for several applications such as catalysts support, adsorbents, electrodes and supercapacitors for secondary batteries. This work focuses on the production of carbon structures obtained from cellulose nanofibers for its use as support of catalyst with high activity for the elimination of tars and ammonia from biomass-derived syngas. The main drawbacks in preparing CAGs from cellulose are the low mass yields (<15%) reached during carbonization and the reactivity of carbon structure when it is used for applications involving high-temperature oxidant atmospheres. Here, we report the thermal behavior of cellulose nanofibers that were pre-treated with a flame retardant ($(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$) and describe the mechanism that explains the effect of the flame retardant on the nanofiber treatment. The CAGs precursor is freeze-dried nanocellulose fibers provided by the University of Maine. The presence of $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$ reduces the production of tars during carbonization by promoting inter and intra-molecular dehydration and by the inhibition of Levoglucosan formation. Furthermore, the concentration of $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$ affects the activation energy of pyrolysis as well as the final carbon yield, which is mostly associated to crosslinking, scission and cracking of bonds. The compositional, morphological and textural characterization of the CAGs precursor was carried out by Elemental Analysis, TGA-MS, ICP-OES, FT-IR, XRD, SEM and nitrogen adsorption.

FABRICACIÓN DE FOTOÁNODOS EN BASE A NANOMATERIALES DE CARBONO Y TiO_2 PARA LA DESCOMPOSICIÓN FOTOCATALÍTICA DE AGUA

Rodrigo SEGURA^{1,*}, Jenniffer VERA^{1,2}, Fernanda OLIVARES^{1,2},
Ricardo HENRÍQUEZ³, Pedro ÁLVAREZ⁴, Samuel HEVIA⁴

¹Instituto de Química y Bioquímica, Universidad de Valparaíso. Chile.

²Programa Conjunto de Doctorado en Química, UV-USM, Chile.

³Departamento de Física, Universidad Técnica Federico Santa María, Chile.

⁴Instituto de Física, Pontificia Universidad Católica de Chile, Chile.

*Corresponding author. E-mail: rodrigo.segura@uv.cl

En nuestra investigación estudiamos diferentes parámetros en la síntesis del TiO_2 mediante la técnica de deposición química en fase vapor (CVD) y hemos empleado diversos tipos de nanoestructuras de carbono para la formación de foto-ánodos compuestos que colecten las cargas de manera más eficiente y aplicarlos para la foto-conversión de la molécula de agua en oxígeno e hidrógeno molecular, este último de gran interés como combustible. Estudiamos específicamente la combinación de nanotubos de carbono y grafeno con TiO_2 en diferentes configuraciones. Lo anterior se basa en que estas formas alotrópicas nanoestructuradas del carbono poseen una alta movilidad electrónica a temperatura ambiente y además presentan altas áreas superficiales lo que aportaría mayores sitios activos a la hora de combinarse con el TiO_2 .

Dentro de los resultados más relevantes se destaca una configuración en la cual empleamos una plantilla porosa de aluminio anodizado soportada en silicio en la cual hemos sintetizado nanotubos de carbono por descomposición de acetileno y posteriormente una capa de TiO_2 por descomposición de tetraisopropóxido de titanio. Este material compuesto $\text{TiO}_2/\text{CNT}/\text{AAO}/\text{Si}$ de gran área superficial debido a su estructura porosa presentó altas densidades de fotocorriente y eficiencias de fotoconversión para la escisión de la molécula de agua cercana al 1%. Otro sistema interesante resultó de la deposición de nanotubos de carbonos altamente grafíticos (CNT-graf) sobre un sustrato de silicio, al cual posteriormente se le depositó mediante CVD una capa de TiO_2 . Debido a la alta cristalinidad de estos CNTs, lo cual se logró con un tratamiento previo a 2600 °C, estos presentaron una elevada foto-respuesta respecto a CNTs sin grafitar. Con esta última configuración se lograron eficiencias cercanas al 0.4%.

Los autores agradecen el apoyo financiero del proyecto FONDECYT 1161614.



FLOTACIÓN POR ESPUMADO DE CARBÓN DE LA CUENCA SABINAS, EN COAHUILA

Antonio Humberto GÓMEZ-GUTIÉRREZ¹, Nancy Verónica PÉREZ-AGUILAR^{1*},
Jesús Edgardo HERNÁNDEZ-CHAVERO¹, José Luis MUÑOZ-GARCÍA¹,
César NIETO-DELGADO², Carmen BARRIOCANAL-RUEDA³

¹Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Autónoma de Coahuila, MÉXICO.

²División de Ciencias Ambientales, Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica, MÉXICO.

³Instituto Nacional del Carbón, Departamento de carbón, energía y medio ambiente, ESPAÑA.

*Corresponding author. E-mail: nancyperez@uadec.edu.mx

Short Abstract

En esta contribución se presentan resultados preliminares de la cinética de flotación por espumado, así como la reducción en el contenido de cenizas y azufre en carbón de los tajos la Conquista (MG1) y la Lavadora (MG2), localizados en la Cuenca Sabinas en Coahuila, México. Las muestras se molieron para reducir el tamaño de partícula a $\sim 210 \mu\text{m}$; para la flotación se utilizaron dos colectores orgánicos, diésel (C1) y aceite de soja (C2). La flotación se realizó en una celda Denver de 1L a 1200rpm, a pH 8, el pH natural de la pulpa de carbón. La concentración de carbón en la pulpa fue de 5% en peso y la del colector fue de 22 Ton/lb de carbón seco. La mezcla de agua destilada y carbón se acondicionó durante 5 min en la celda de flotación, posteriormente se alimentó el colector y se dejó acondicionar la pulpa durante 2 min. Finalmente, se abrió la válvula de aire de la celda para recibir el carbón flotado y drenarlo sobre un tamiz con aperturas de $74 \mu\text{m}$. El carbón flotado se colocó en una bandeja de aluminio y se secó a $105 \pm 5^\circ\text{C}$ durante 12 h. Para las cinéticas de flotación, se colectaron muestras de la pulpa a tiempos de 5, 25, 50, 75, 100 y 150 min. El comportamiento cinético de la flotación fue evaluado con los modelos de Meyer y Kimpler, Kelsall y Huber-Panu. El contenido de azufre, ceniza, materia volátil y carbón fijo antes de la flotación fue de 0.85%, 32%, 16% y 61%, respectivamente, para MG1 y 0.9%, 37%, 18% y 61%, respectivamente, para MG2. Se encontró que la muestra MG1 tuvo mejores resultados usando diésel como colector, en tanto que la muestra MG2 tuvo mejor afinidad con aceite de soja. Se logró reducir la ceniza hasta 15% en MG1 y 18% en MG2; no se observó una reducción considerable en el azufre. Para mejorar los resultados, se propone incluir inhibidores para reducir el contenido de azufre. Del comportamiento cinético se observó que tanto el modelo de Kelsall como el de Huber-Panu describieron adecuadamente los datos experimentales.

ESTUDIO DE LA ACTIVIDAD CATALÍTICA DE MATERIALES PIROLIZADOS TIPO C-N-M (M= Fe, Co) COMO CÁTODOS PARA PILAS DE COMBUSTIBLE

César ZÚÑIGA^{1,2}, Ricardo VENEGAS^{1,2}, Karina MUÑOZ^{1,2}, José MARCO³,
José ZAGAL⁴, F. Javier RECIO^{1,2*}

¹Departamento de Química Inorgánica Pontificia Universidad Católica de Chile.

²Centro de Investigación en Nanotecnología y Materiales Avanzados, CIEN-UC.

³Instituto de Química Física "Rocasolano". Consejo Superior de Investigaciones Científicas. España.

⁴Departamento de los Materiales, Universidad de Santiago de Chile.

*Corresponding author. E-mail: javier.recio@uc.cl

El diseño de catalizadores baratos, eficientes y durables para la reacción de reducción de oxígeno en pilas de combustible de membrana polimérica, es uno de los principales retos dentro del campo de la conversión de energía. La presencia de catalizadores de base platino en las pilas de combustible (principalmente en el cátodo, donde ocurra la reducción de oxígeno) es el principal obstáculo de este tipo de tecnología debido al alto precio y escasez del platino. Desde la última década, los materiales pirolizados de base carbón tipo C-N-M han mostrado ser una alternativa real para la sustitución del platino, alcanzando valores de actividad catalítica similares a éste. Sin embargo, el estudio de estos catalizadores sigue en constante desarrollo debido a la controversia sobre la naturaleza del sitio activo.

En anteriores trabajos con compuestos tipo MN₄, hemos establecido que el potencial formal de éstos es un descriptor de la actividad catalítica frente a la reacción de reducción de oxígeno. El presente trabajo explora la relación del potencial formal de los catalizadores pirolizados con su actividad catalítica. Los catalizadores se han sintetizando utilizando diferentes complejos MN₄ (M= Fe, Co) adsorbidos sobre carbón Vulcan y pirolizados en un rango de temperaturas entre 600-900°C. La caracterización se llevó a cabo mediante XPS y TEM. Los resultados obtenidos muestran como el potencial formal de los catalizadores pirolizados también se relaciona con su actividad catalítica frente a la reacción de reducción de oxígeno. Esta tendencia implica que: (i) el potencial formal de los catalizadores MN₄ y de los catalizadores pirolizados actúa como índice de reactividad para predecir su actividad catalítica; y, (ii) el sitio activo de los catalizadores pirolizados contienen un metal (Fe, Co) en su estructura.

Agradecimientos

Proyecto Fondecyt 1161117 y 1140199.



FIELD EMISSION IN NANOCARBONS: NANOTUBES, MICRO-ARRAYS AND GRAPHENE OXIDE

María Luisa GARCÍA-BETANCOURT^{1,*} Néstor PÉREA-LÓPEZ²,
Ferdinando TRISTÁN³, Sofía VEGA-DÍAZ⁴, Ana Laura ELIAS², Florentino LÓPEZ-URÍAS⁵,
Emilio MUÑOZ-SANDOVAL⁵, Mauricio TERRONES^{2,6,7}

¹Centro de Investigaciones Químicas, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Av. Universidad 1001, Col. Chamilpa, 62209 Cuernavaca, Mor., México.

²Department of Physics and Center for 2-Dimensional and Layered Materials, Pennsylvania State University, University Park, PA, United States;

³Departamento de Ciencias Naturales - DCNI, Universidad Autónoma Metropolitana Unidad Cuajimalpa, Av. Vasco de Quiroga 4871, Cuajimalpa, Santa Fe, México D. F., México;

⁴Instituto Tecnológico de Celaya, Departamento de Ingeniería Química, Avenida Tecnológico esq. A. García Cubas S/N, C.P. 38010, Celaya, Guanajuato, México.

⁵Departamento de Materiales Avanzados, IPICYT, Camino A Presa San José 2055, Col. Lomas 4a Sección, San Luis Potosí, México

⁶Department of Chemistry and Department of Materials Science and Engineering, Pennsylvania State University, University Park, PA, United States;

⁷Carbon Institute of Science and Technology, Shinshu University, Nagano, 4-17-1 Wakasato, Japan

*Corresponding author. E-mail: luisa.maria.betan@gmail.com

Short Abstract

In this work, we present field emission properties of carbon nanotubes and graphene oxide. We have studied field emission in i) bundles of multi-walled carbon nanotubes with defects, ii) nitrogen doped multi-walled carbon nanotubes microarrays with pine-three like morphology, iii) graphene oxide and iv) hybrid materials based on carbon nanotubes (undoped and N-doped)/graphene oxide. The carbon nanotubes were synthesized by a chemical vapor deposition method while graphene oxide was produced following Hummer's methodology. Scanning and transmission electron microscopy characterization was carried out, followed by field emission measurements in a high vacuum chamber (5×10^{-8} Torr) which includes a linear actuator for work distance control between sample and anode. Our results demonstrated that: i) Defects affect field emission properties, improving the performance of carbon nanotubes, ii) the pine three-like microstructure enhanced the field emission parameters such as turn-on voltage and beta factor as compared with uniform forest of carbon nanotubes, iii) the graphene oxide/carbon nanotubes hybrid exhibited better field emission characteristics than those obtained for single graphene oxide. Furthermore, nitrogen doping in carbon nanostructures improves conduction properties, consequently field emission characteristics.

EVALUACIÓN DE LAS PROPIEDADES INTRÍNECAS DEL ÓXIDO DE GRAFENO EN LA TRANSFORMACIÓN QUÍMICA Y BIOLÓGICA DE IOPROMIDA

E. TORAL-SÁNCHEZ¹, Juan A. ASCACIO², Cristóbal N. AGUILAR²,
F.J. CERVANTES^{1,*}, J.R. RANGEL-MÉNDEZ^{1,*}

¹División de Ciencias Ambientales, Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica, A.C., Camino a la Presa San José 2055, Col. Lomas 4^a. Sección, C.P.78216, San Luis Potosí, S.L.P., México.

²Facultad de Ciencias Químicas. Departamento de Investigación en Alimentos (DIA-UAdeC), Universidad Autónoma de Coahuila. Saltillo, 25280, Coahuila, México.

*Corresponding author. E-mail: rene@ipicyt.edu.mx y fjcervantes@ipicyt.edu.mx

En este estudio se reporta, por primera vez, el efecto de las propiedades intrínsecas del óxido de grafeno (GO) y del GO parcialmente reducido (rGO), y sus usos como mediadores redox (MR) en la transformación química y biológica de la iopromida (IOP), un medio de contraste yodado, bajo condiciones anaerobias y utilizando Na_2S y etanol/lactato como donadores de electrones en sistemas químico y biológico, respectivamente.

Las propiedades estructurales y fisicoquímicas del GO antes y después de su reducción parcial fueron analizadas mediante titulaciones Boehm, punto de carga cero, distribución de pKa's, microscopía electrónica de barrido (SEM), voltamperometría cíclica, así como por espectroscopía UV-Vis, Raman, infrarrojo por transformada de Fourier y de energía dispersiva.

La caracterización completa del GO y rGO reveló la remoción de diferentes grupos oxigenados de este último, como los epoxi e hidroxilo, además de la transición de una estructura amorfa a más cristalina en los GO parcialmente reducidos. Los experimentos de reducción química y en sistemas biológicos incubados bajo condiciones metanogénicas demostraron que los materiales a base de GO pueden actuar como MR en la reducción de la IOP, observándose una mayor y más rápida transformación química y biológica de hasta 5.2 y 5.5 veces, respectivamente, con respecto al control sin GO o rGO. Asimismo, los resultados indicaron una correlación entre el grado de reducción del GO y su habilidad para actuar como MR, lo cual se reflejó en el grado de transformación química y biológica de la IOP. Finalmente, se propuso un mecanismo de transformación química de la IOP mediante el análisis de HPLC-MS, donde se observó que la molécula de IOP sufre procesos de deshalogenación, deshidratación, desmetilación y descarboxilación, formando sub productos de transformación con pesos moleculares menores al contaminante modelo.



CARBÓN Y COMPOSITE TiO₂/CARBÓN PARA ELIMINACIÓN DE UN CONTAMINANTE EMERGENTE: COMPLEJO DE GADOLINIO “DOTA”

M.P. Elizalde-González¹, E. García-Díaz^{1,*} M.A. Guerrero-Morales¹, J. Mattusch²

¹Centro de Química - ICUAP, Universidad Autónoma de Puebla, Puebla, México.

²Department of Analytical Chemistry, UFZ, Leipzig, Germany.

*Corresponding author. E-mail:esmeralda.garcia.uap@gmail.com

Desde que la imagenología de resonancia magnética (IMR) se utiliza como un método de diagnóstico clínico, la contaminación por agentes de contraste ha aumentado considerablemente, pues estos son excretados en la orina y van a las aguas residuales municipales, en donde los tratamientos actuales no son capaces de eliminarlos [1]. En este trabajo de investigación se estudió la adsorción y fotocatalisis del gadoterato de meglumina (DOTA) en orina sintética usando carbón activado y un composite titania-carbón obtenidos de residuos agroindustriales. Los residuos fueron activados, modificados químicamente y carbonizados a una temperatura máxima de 900 °C en un horno tubular. El composite TiO₂/carbón se obtuvo mediante la síntesis *in situ* de TiO₂ durante la carbonización [2] y en la fotocatalisis se aplicó radiación solar artificial. Se obtuvieron carbones con superficie específica desarrollada de más de 1000 m² g⁻¹ y con diversidad en los grupos funcionales, de los cuales se eligió un pH_{pcc} ácido. Los resultados muestran que el equilibrio de adsorción se alcanza después de 24 h de contacto y la capacidad máxima en sistema batch es de 10 mg g⁻¹. En un sistema de tanque agitado el tiempo de equilibrio se redujo a la mitad. En la fotocatalisis se degradó más del 90% de DOTA cuando éste se encuentra en disolución acuosa. Se demostró que se produce gadolinio libre y que el composite es capaz de adsorberlo. Se identificaron productos de la fotodegradación de DOTA con cambios en la estructura del complejo. Sin embargo, en la matriz de orina sintética el compuesto no se degradó en las condiciones estudiadas. En la caracterización de los materiales, cuantificación de DOTA e identificación de productos de fotodegradación se emplearon las siguientes técnicas: adsorción de N₂, titulación, espectroscopía IR, LC-ICP-MS, LC-QTOF-MS, LC-ICP-MS.

[1] P. Verlicchi, A. Galletti, M. Petrovic, D. Barceló, 2010. Hospital effluents as a source of emerging pollutants: An overview of micropollutants and sustainable options. *J. Hydrology*. 389, 416-428.

[2] M.P. Elizalde-González, E. García-Díaz, S.A. Sabinas-Hernández, Novel preparation of carbón-TiO₂ composites, *J. Hazard. Mater.* 263P (2013) 73-83.

EFFECTO DE LA POROSIDAD, CONTENIDO DE HIERRO Y DISTRIBUCIÓN DE CARGA DE CARBONES ACTIVADOS EN LA REMOCIÓN DE ARSÉNICO DE SOLUCIÓN ACUOSA

Javier A. Arcíbar-Orozco^{*1,2} y René Rangel-Mendez¹

¹Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica A.C., San Luis Potosí, San Luis Potosí, México.

²Centro de Innovación Aplicada en Tecnologías Competitivas A.C., León, Guanajuato, México.

*Corresponding author. E-mail: jarcibar@ciatec.mx

Resumen Corto

La presencia de arsénico(V) en recursos hídricos se ha convertido en un problema mayor de salud pública debido a la enorme cantidad de problemas toxicológicos asociados a su consumo. Dentro de las metodologías disponibles para la remoción de arsénico, adsorción en diversos materiales tiene el potencial de purificar el agua de forma sencilla y económica. El adsorbente típico por excelencia es el carbón activado. Lamentablemente su capacidad para la remoción de arsénico es baja y no selectiva. Se ha demostrado que la introducción de hidróxidos de hierro en la matriz de carbón activado incrementa su capacidad de remoción de arsénico de forma importante. Este fenómeno se ha asociado a la formación de interacciones específicas entre los hidróxidos de hierro y el arsénico de solución acuosa. Sin embargo, los cambios en las propiedades fisicoquímicas del carbón activado al modificarse con hierro, también tienen un efecto sobre su capacidad de remoción de arsénico(V). Por lo tanto existe la cuestión de ¿cuál es la contribución de cada una de estas características en la remoción de arsénico de los carbones activados modificados con hierro? Para contestar dicha pregunta, 28 carbones activados con diferentes porosidades, contenido de hierro y química superficial fueron confeccionados, caracterizados y utilizados como adsorbentes de arsénico(V) de solución acuosa. Los resultados demostraron que el parámetro más importante durante la remoción de arsénico(V) es el punto de carga cero (52.5% de contribución). Sin embargo, la presencia de los hidróxidos de hierro es indispensable para mejorar la capacidad de remoción en un 36.5%. Un modelo empírico indicó que la máxima capacidad de remoción se obtiene en materiales con 1% de hierro. Una mayor cantidad de hierro provoca el colapso de los poros y consigo una disminución en la capacidad de adsorción. Las isotermas de adsorción de arsénico(V) a condiciones normales, demostraron el potencial de los mejores materiales para la purificación de agua. Finalmente, se sugirió que la adsorción de arseniatos ocurre por dos mecanismos simultáneos: intercambio de ligandos con las partículas de hidróxidos de hierro, y atracción electrostática con los grupos básicos del carbón activado.



ANCLAJE DE (OXI) HIDRÓXIDOS BIMETÁLICOS Fe-Mn SOBRE CARBÓN ACTIVADO PARA LA ADSORCIÓN DE As (V) EN AGUA POTABLE

Joel Gutiérrez Martínez, René Rangel Méndez

División de Ciencias Ambientales, Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica, A.C., Camino a la Presa San José ´ 2055, Col. Lomas 4ta Sección, C.P. 78216, San Luis Potosí ´ , S.L.P., México.

*Corresponding author. E-mail: joel.gutierrez@ipicyt.edu.mx

Abstract

La presencia de arsénico en el agua, su toxicidad y daños a la salud es un problema que afecta a más de 200 millones de personas en el mundo, desarrollando severas enfermedades como arsenicosis, cáncer, problemas cardiovasculares, pulmonares, entre otros. Para disminuir esta problemática la organización mundial de la salud ha recomendado un límite máximo permisible de 10 µg/L en agua potable. Para lograr esto se requiere implementar el uso de tecnologías de remoción eficientes: siendo el proceso de adsorción con carbón activado la más utilizada por su bajo costo de operación, simple aplicación y disponibilidad de materiales. Sin embargo, la adsorción de As(V) con carbón activado es limitada debido a su baja selectividad. El estudio de la química superficial del carbón activado ha permitido modificarlo con (oxi)hidróxidos metálicos para incrementar su capacidad de adsorción, siendo los (oxi)hidróxidos de hierro los más reportados debido a su bajo costo y elevada selectividad por As(V) en agua. En los últimos años se ha reportado la incorporación de óxidos de La(III), Ce(IV), y Zr(IV), así como MnO₂ en la estructura reticular de los (oxi)hidróxidos de hierro (III), llamados (oxi)hidróxidos bimetálicos, con el objetivo de incrementar la densidad de grupos hidroxilo y con ello su selectividad hacia As(V). Estudios recientes atribuyen el aumento en su selectividad a la distorsión de la red cristalográfica del hierro al introducir un átomo de un metal como los antes mencionados, provocando una contracción de la celda unitaria. En la actualidad, hasta lo que hemos revisado en la literatura, no existen estudios que reporten la modificación del carbón activado con (oxi)hidróxidos bimetálicos. En el presente trabajo, el carbón activado granular fue modificado con (oxi)hidróxidos bimetálicos de Fe-Mn por medio de una síntesis hidrotermal asistida por microondas para remover As(V) del agua. Este nuevo material adsorbente fue caracterizado por difracción de rayos X (XRD), espectroscopia de infrarrojo por transformada de Fourier (FTIR), y Microscopía electrónica de barrido (SEM). Además, este material fue evaluado mediante experimentos de adsorción en batch a pH=7. Los resultados obtenidos indican un aumento en la máxima capacidad de adsorción de As(V) de estos (oxi)hidróxidos bimetálicos de Fe-Mn de 3.85 mg/g, cuando únicamente tenemos Fe, a 6.2 mg/g, lo cual demuestra la sinergia que presenta este nuevo material. La alta capacidad de adsorción puede ser atribuida a la alta densidad de grupos superficiales hidroxilo, lo cual favorece el intercambio de ligandos entre el ion arseniato y los sitios de adsorción.

PREPARACIÓN Y CARACTERIZACIÓN TEXTURAL DE CARBONES ACTIVADOS OBTENIDOS A PARTIR DE YERBA MATE: APLICACIONES EN LA REMOCIÓN DE FENOL Y CROMO EN SOLUCIÓN ACUOSA

Cecilia DE PIANTE VICIN^{1,*}, Pablo HÚMPOLA¹, Héctor ODETTI¹, Rafael FONSECA CORREA², Juan Carlos MORENO PIRAJÁN², Liliana GIRALDO GUTIÉRREZ³

¹Laboratorio de Investigación de Química General e Inorgánica. Facultad de Bioquímica y Ciencias Biológicas-UNL- Paraje el pozo C.C. 242, Santa Fe, 3000, Argentina.

²Laboratorio de Sólidos Porosos y Calorimetría, Facultad de Ciencias- UNIANDES- Carrera 1a No. 18-A-10 Bogotá, 11001000, Colombia.

³Departamento de Química. Universidad Nacional de Colombia. Carrera 30, calle 45, Bogotá, 11001000, Colombia.

*Corresponding author. E-mail: cecilia.dpv@gmail.com

Short Abstract

En este trabajo, se utilizaron carbones obtenidos a partir de yerba mate con distintos tratamientos químicos y físicos, para la remoción de fenol y Cr(III) en soluciones acuosas. Se sintetizaron carbones activados partiendo de yerba mate con tamaños de partículas en el orden de 2 mm. El precursor empleado fue caracterizado por análisis termogravimétrico (TG/DTG) y posteriormente se impregnó con ácido fosfórico al 40% v/v durante 24 horas, a 353 K y se eliminó el exceso por lavado con filtración al vacío, hasta pH constante igual o superior a 4.50. Se carbonizó 100 g. de material seco a 723 K con velocidad de calentamiento de 275 K.min⁻¹ y temperatura final de 3 horas, en horno tubular Carbolite™ bajo flujo de N₂ de 80 mL.min⁻¹. La activación física se realizó con CO₂ a 1123 K y flujo de 100 mL.min⁻¹, con una velocidad de calentamiento de 275 K.min⁻¹, durante 2 horas. Las muestras obtenidas fueron: carbonizado de yerba mate (CYM), carbonizado de yerba mate con activación física (CYMF), carbonizado de yerba mate con activación química (CYMQ) y carbonizado de yerba mate con activación física y química (CYMFQ) [1].

La caracterización textural preliminar de los materiales carbonosos se realizó mediante adsorción física de N₂ a 77.4 K en un sortómetro empleando un IQ2 Quantachrome Instruments. El análisis de los datos, fue realizado en diferentes rangos de presiones y se calculó área específica BET; volumen, tamaño y distribución tamaños de poros y posibles heterogeneidades de la superficie, empleando modelos de Dubinin-Astakhov (DA), Barrett, Joyner y Halenda (BJH) y teoría de funcionales de densidad (NL/QSDFT). Se determinó el tipo y cantidad de grupos oxigenados superficiales por el método de Boehm y punto de carga cero. Los datos experimentales de la adsorción de fenol y Cr(III) en solución acuosa fueron interpretados empleando modelo de Sips de tres parámetros [2].

La curva de TG/DTG muestra una pérdida de masa de aproximadamente 6% en el rango 292–488 K producto de la deshidratación de la muestra. La mayor pérdida de masa (52%) se observa en el rango de 488–616 K, lo que indica la descomposición térmica de los componentes lignocelulósicos: celulosa, hemicelulosas y lignina. Por encima de 616 K la pérdida de masa es menor (18%), indicando que la estructura fundamental del carbonizado se generó aproximadamente a 616 K; por lo tanto esta sería la temperatura mínima de carbonización/activación para la producción de carbones activados a partir de yerba mate. La mayor área superficial corresponde a la muestra CYMFQ con 454 m².g⁻¹. Los valores de máxima capacidad de adsorción de fenol que se deducen de las muestras CYM, CYMF, y CYMFQ fueron 0.0027 mol.g⁻¹, 0.0040 mol.g⁻¹ y 0.0015 mol.g⁻¹ respectivamente, siendo CYMF la más adecuada para la remoción de fenol. Los valores de máxima capacidad de adsorción de Cr(III) que se deducen de las muestras CYMQ y CYMFQ fueron 8.23 mg.g⁻¹ y 9.66 mg.g⁻¹ respectivamente, siendo CYMFQ la más adecuada para la remoción de cromo.

Referencias

1. Giraldo L, et. al. (2012). E-J. Chem 9 (2), 938–48
2. Húmpola, P., et al. (2016) Adsorption 22, (1), 23-31



PREPARACIÓN DE MATERIALES GRAFÍTICOS PARA ADSORBER TRIMETOPRIM EN SOLUCIÓN ACUOSA

D.H. Carrales-Alvarado¹, R. Leyva-Ramos^{1,*},
R. Ocampo-Pérez¹, I. Rodríguez-Ramos²

¹Centro de Investigación y Estudios de Posgrado, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Autónoma de San Luis Potosí, México.

²Instituto de Catálisis y Petroleoquímica CSIC, Madrid, España.

*Corresponding author. E-mail: rlr@uaslp.mx

Abstract

La síntesis del óxido de grafito (GO) se ha efectuado por diversos métodos químicos destacando los métodos de Brodie, Staudenmaier y Hummers. En estos métodos se realiza una severa oxidación química al grafito usando un oxidante fuerte (KClO_3 o KMnO_4) y un ácido fuerte (HNO_3 fumante o H_2SO_4 concentrado). La oxidación genera grupos funcionales oxigenados en la superficie del grafeno. La gran cantidad de grupos oxigenados confiere al material un elevado carácter hidrófilo, lo que adicionalmente permite la incorporación de moléculas orgánicas en el espaciado interlaminar por intercambio iónico y/o enlaces covalentes. Las láminas de grafeno del GO se pueden dopar químicamente con el objeto de introducir heteroátomos, como el nitrógeno. La técnica de exfoliación-reducción de GO cumple con este objetivo y además, se incrementa el área específica entre $700\text{-}1500\text{ m}^2/\text{g}$.

El objetivo de este trabajo fue preparar GO empleando el método de Brodie y tratarlo por el proceso de expansión/exfoliación en medio inerte y en amoníaco. Estos materiales carbonosos se designaron como rGO y N-rGO, respectivamente, y se utilizaron como adsorbentes con propiedades de textura y naturaleza química adecuadas para la adsorción de fármacos. El compuesto farmacéutico utilizado como compuesto modelo es el trimetoprim (TMP). Las capacidades de adsorción de GO, rGO y N-rGO se compararon con la de grafito de alta superficie (HSAG).

Los materiales HSAG se distinguen por no contener grupos oxigenados a comparación con el GO, este último presenta un alto contenido de sitios ácidos. Las áreas específicas de N-rGO y rGO muestran el efecto del tratamiento de reducción (expansión/exfoliación). Dicho fenómeno logró incrementar el área específica 33.4 y 72 veces para N-rGO y rGO, respectivamente, con respecto al GO original. El recorrimiento del pico $2\theta = 26^\circ$ correspondiente al plano (0 0 2) característico del grafito, está asociado a la incorporación de grupos funcionales a la estructura gráfica, produciendo un incremento en la distancia interlaminar (d_{hkl}) de 0.342 a 0.553 nm. Por otra parte, la muestra N-rGO presentó un porcentaje en peso de nitrógeno de 3.27 %, corroborando que con el proceso de reducción en NH_3 se logra la incorporación de éste a la superficie de este material. Los resultados de adsorción de TMP sobre GO a diferente pH señalan que la adsorción de TMP es altamente favorecida a medida que se aumenta el pH. Por otra parte, en la serie de materiales HSAG se encontró que la capacidad de adsorción es directamente proporcional al área específica de los materiales ya que el mecanismo de adsorción se debe a las interacciones dispersivas $\pi\text{-}\pi$.

FABRICATION AND CHARACTERIZATION OF AERO/HYDROGELS BASED ON REDUCED GRAPHENE OXIDE GROWN BY HYDROTHERMAL METHOD

Camilo Acuña^{1,*}, Khris Cancino², Martín Roble¹,
Donovan Diaz-Droguett¹, Gustavo M. Morales³

¹Facultad de Física, Instituto de Física, Pontificia Universidad Católica de Chile.

²Departamento de Física, Facultad de Ciencias, Universidad de Chile.

³Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas Físico-Químicas y Naturales, Universidad Nacional de Río Cuarto, Córdoba, Argentina.

*Corresponding author. E-mail: cacuna2@uc.cl

Materials based in graphene and reduced graphene oxides have potential applications in capacitors, water filters, and gas sensors due to their good electric conductivity and large area per unit volume, and also, because of the possibility of modification of their surface chemical properties. Using a starting solution of graphene oxide and temperature is possible to grow 3-D porous macroscopic structures with certain mechanical strength via different physicochemical routes. One of these routes is the hydrothermal method, which allows controlling the size, the porous morphology, and the chemical properties of the grown structure varying, for example, the time and temperature of preparation. On the other hand, the final 3-D shape and size of the aero/hydrogel will depend on the container used in the hydrothermal synthesis.

In this work, 3-D porous structures of reduced graphene oxide were grown through a simple hydrothermal method without the addition of reduction agents or later processing. The synthesis temperatures and times used were between 120o and 180° C and 1 and 15 hours, respectively. Furthermore, to determinate the influence of synthesis parameters on the morphological and chemical properties of the structures obtained, characterization techniques such as scanning electron microscopy, energy dispersive X-Ray spectroscopy, Raman spectroscopy and IR spectroscopy were used. For other hand, the specific surface area of these 3-d structures was determined using BET method to study the dependence of porous morphology with synthesis parameters.



STUDY OF THE THERMAL TRANSFORMATION OF SILICON SPECIES IN CARBONIZED RICE HULLS BY RAMAN SPECTROSCOPY AND SCANNING ELECTRON MICROSCOPY

Enrique R. Yapuchura*, Rodolfo T. Souza, Francisco G. Emmerich
Alfredo G. Cunha, and Jair C. C. Freitas

Laboratory of Carbon and Ceramic Materials, Department of Physics, Federal University of Espirito Santo, 29075-910 Vitoria-ES, Brazil

*Corresponding author. E-mail: enrique.r.yapuchura@gmail.com

The occurrence of silicon in rice hulls (RH) subjected to heat treatments at different temperatures is studied in this work. This biomass material exhibits high silicon content in its mineral matter, which typically accounts for ca. 20 wt. % of the material. RH chars produced at temperatures close to 1400 °C can exhibit large amounts of silicon carbide (SiC) and other silicon compounds, depending on the atmosphere and other conditions used in the heat treatments. This work describes a study about the presence of silicon compounds in RH chars by Raman spectroscopy (using a confocal Raman microscope) and scanning electron microscopy (SEM) coupled to energy dispersive X-ray spectroscopy (EDS). SEM images of the RH chars allowed the identification of the presence of silicon species (silica and SiC particles and whiskers) embedded in a carbon-rich matrix; the use of EDS was essential in determining the chemical composition of the studied regions. Raman spectra showed that silicon is present in this material in two distinct forms silica and SiC, with the relative amounts of these two phases changing with the increase in the heat treatment temperature.

INFLUENCIA DE LA RELACIÓN ENTRE LA CANTIDAD DE SACAROSA Y LA TEXTURA DE LAS MATRICES INORGÁNICAS EN LA OBTENCIÓN DE CARBONES MESOPOROSOS PARA LA CAPTURA DE CO₂

Cristian DIAZ¹, Deicy BARRERA¹, Jhonny VILLARROEL-ROCHA¹, Karim SAPAG^{1,*}

¹Instituto de Física Aplicada, Universidad Nacional de San Luis, CONICET, CP 5700, San Luis, Argentina.

*Corresponding author. E-mail: sapag@unsl.edu.ar

Los carbones mesoporosos obtenidos a partir de diferentes matrices inorgánicas han generado un gran interés en el ámbito científico debido principalmente a sus interesantes propiedades texturales, estructurales y morfológicas que los hacen atractivos para diversas aplicaciones medioambientales, energéticas, entre otras. En este trabajo se sintetizaron diferentes carbones mesoporosos utilizando como matrices inorgánicas las sílices mesoporosas ordenadas SBA-15 y KIT-6, y sacarosa como fuente de carbón. Se realizó un estudio para establecer la relación óptima entre la cantidad de sacarosa y el volumen de mesoporos de las plantillas. A partir de los datos "estándar" reportados en la bibliografía con respecto a la cantidad de sacarosa necesaria para la obtención de materiales de carbón ordenados, se llevó a cabo la optimización ampliando el rango de esta relación (sacarosa vs volumen de poros) a valores inferiores y superiores, ya que se ha demostrado que el comportamiento de todo el sistema es diferente para cada tipo de plantilla en función de sus propiedades texturales. El objetivo de este estudio es establecer unos parámetros de síntesis adecuados para cada plantilla utilizada, independiente de su naturaleza, considerando exclusivamente sus propiedades texturales y buscando obtener materiales con una estructura porosa ordenada. Estos materiales se caracterizaron mediante análisis termogravimétrico, difracción de rayos X a bajo y alto ángulo, adsorción - desorción de N₂ a 77 K y adsorción de CO₂ a 273 K. Finalmente, los materiales obtenidos evaluaron en la captura de CO₂ a 298 K hasta 10 atm y los resultados obtenidos se correlacionaron con las propiedades texturales de los carbones nanoestructurados.



EFFECTO DE LA ACIDEZ SUPERFICIAL EN MATRICES INORGÁNICAS PARA LA OBTENCIÓN DE CARBONES MESOPOROSOS Y SU USO EN LA CAPTURA DE CO₂

Eduardo RIGOTI¹, Deicy BARRERA², Jhonny VILLARROEL-ROCHA², Sibebe B.C. PERGHER¹,
Karim SAPAG^{2,*}

¹Programa de pós-graduação em Ciências e Engenharia de Materiais. Universidade Federal do Rio Grande Norte, Av. Salgado Filho, Lagoa Nova. Natal, RN, Brasil.

²Instituto de Física Aplicada, Universidad Nacional de San Luis, CONICET, CP 5700, San Luis, Argentina.

*Corresponding author. E-mail: sapag@unsl.edu.ar

Los carbones mesoporosos tipo CMK han atraído una gran atención para su uso como adsorbentes, soportes catalíticos y materiales de electrodos, entre otras aplicaciones. El proceso de síntesis de este tipo de materiales involucra cuatro etapas principales: i) incorporación de la fuente de carbón en la estructura porosa de la plantilla o matriz inorgánica, ii) polimerización, iii) carbonización (pirólisis) y iv) retiro de la plantilla. Es muy importante controlar la etapa de polimerización para que después del proceso de carbonización el carbón se encuentre dentro de los mesoporos de la plantilla y no fuera de la misma. Cuando se agrega una cantidad extra de fuente de carbón puede ocurrir una polimerización fuera de la mesoestructura de la plantilla antes que los poros hayan sido homogéneamente llenados, debido al calor generado a partir de la polimerización exotérmica. Es ahí donde se forman materiales con bajo grado de ordenamiento, ya que no sólo se estarían formando *nanorods* sino que paralelamente se formaría carbón amorfo y sin porosidad. Con el fin de evitar este problema en la obtención de los materiales de carbón, se realizó una impregnación previa a las matrices inorgánicas (SBA-15 y KIT-6) con ácido fosfórico para proporcionar el tiempo suficiente para la infiltración de la fuente de carbón dentro de los mesoporos de la plantilla antes de la polimerización y prevenir la generación de materiales de carbón que no obedezcan a la réplica de sus matrices durante el proceso de carbonización. Con este propósito se impregnaron dos matrices inorgánicas, SBA-15 y KIT-6 con ácido fosfórico y se utilizó sacarosa como fuente de carbón para obtener carbones nanoporosos y evaluar su desempeño en la captura de dióxido de carbono. Estos materiales se caracterizaron por adsorción-desorción de N₂ a 77 K, adsorción de CO₂ a 273 K, microscopía electrónica de barrido, microscopía electrónica de transmisión, difracción de rayos X a bajo y alto ángulo, FTIR y titulación potenciométrica. Las propiedades de los materiales obtenidos se correlacionaron con su desempeño como adsorbentes en la captura del CO₂.

INFLUENCIA DE LAS CONDICIONES DE ACTIVACIÓN SOBRE LA POROSIDAD DE CARBONES ACTIVADOS A PARTIR DE BIOMASA RESIDUAL

Erika ARENAS¹, Zulamita ZAPATA-BENABITHE^{1,*}, Daniel I. ARANGO¹, Mike VÁSQUEZ¹

¹Grupo de Energía y Termodinámica, Facultad de Ingeniería Química, Universidad Pontificia Bolivariana, Medellín, Colombia

*Corresponding author. E-mail: zulamita.zapata@upb.edu.co

La biomasa residual es un sub-producto del sector agrícola y forestal que se produce en grandes cantidades lo que en algunas ocasiones conlleva a problemas de contaminación. Una alternativa para el aprovechamiento de ésta puede ser el uso a través de diferentes procesos industriales. Uno de éstos es la obtención de materiales carbonosos para diferentes aplicaciones. De esta forma se puede contribuir a la reducción de emisiones de gases, la disminución de los costos de disposición final de residuos agrícolas y al aumento de la relación beneficio/costo de nuevas tecnologías en las cuales pueden ser implementados estos materiales carbonosos.

Entre los materiales carbonosos se encuentran los carbones activados (AC), los cuales son obtenidos a partir de diferentes métodos de producción, proporcionando a los AC una gran variedad de propiedades fisicoquímicas que permite su uso en aplicaciones industriales como almacenamiento de energía, soportes catalíticos y separación, purificación y tratamiento de sustancias.

En este trabajo se realizó una revisión de los diferentes tipos de AC preparados a partir de residuos agrícolas teniendo en cuenta la influencia de las condiciones de activación tales como temperatura de activación, agente activante (AA) y relación másica de impregnación Agente Activante/Biomasa (RI). Dentro de los AA más utilizados en el proceso se encuentran el KOH y el ZnCl₂, los cuales se usan con RI y rango de temperatura según la funcionalidad del AC.

Para conocer los valores de estas condiciones se correlacionaron datos de área superficial específica (AS), volumen total de poro, volumen de microporosidad, volumen de mesoporosidad y relación $V_{\text{Microporosidad}}/V_{\text{Mesoporosidad}}$ como funciones de RI, parametrizados a diferentes temperaturas, estos datos se tomaron para los dos AA mencionados, con diferentes precursores. A partir de esto se determinó que para el ZnCl₂, las RI oscilan entre 0.28/1 y 5/1 y el rango de temperatura está entre 500-900°C. Dentro de todo el rango de RI se encontró que para una temperatura de 800°C los AC presentan mayor desarrollo de AS (aprox. 2000 m²/g) en comparación a una temperatura de 900°C, esto se debe a la excesiva volatilización de la sal de Zinc que promueve la contracción del poro disminuyendo el AS del AC. Además se observó que a bajas RI (0.28/1 a 1/1) se favorece el desarrollo de la Microporosidad en relación a la Mesoporosidad, debido a que hay menor cantidad de AA en los poros lo que evita el ensanchamiento de éstos.

En el caso del KOH, se obtuvo que a medida que aumentaba la RI (2/1 a 4/1) el AS incrementaba en 1000 m²/g para una temperatura de 800°C, debido a que se promueve la reacción de intercalación entre el Potasio y el carbón, favoreciendo el desarrollo de la porosidad. Para las otras propiedades no se encontró un comportamiento tendencial que permitiera concluir la influencia de las condiciones en la formación del AC.

Esta revisión permite limitar las condiciones de activación en función de las relaciones de impregnación, los principales agentes activantes y las propiedades texturales que se desean obtener en los carbones activados.



CARBÓN ACTIVADO A PARTIR DE ENDOCARPOS DE *Butia odorata*

Matías BANFI, Silvana FLECCHIA, Ana Claudia PINA, Alejandro AMAYA, Nestor TANCREDI*

Cátedra de Físicoquímica y Laboratorio de Físicoquímica de Superficies, DETEMA, Facultad de Química, Universidad de la República.
General Flores 2124, 11800, Montevideo, Uruguay

*Corresponding author. E-mail: nestor@fq.edu.uy

Short Abstract

El carbón activado es un material carbonoso predominantemente amorfo, que presenta gran porosidad y elevada superficie específica, lo que le confiere gran capacidad de adsorción. Es un adsorbente de uso comercial con múltiples aplicaciones, en especial en la descontaminación de agua y aire, decoloración, purificación, recuperación de solventes y otras sustancias y protección contra gases tóxicos. Una propiedad de interés para una gran variedad de usos comerciales es la capacidad de obtenerlo como gránulos de alta dureza, por lo que el carbón activado obtenido a partir de cáscara de coco tiene amplia demanda. En este trabajo se plantea la posibilidad de obtener carbón activado a partir de endocarpos de los frutos de la palmera *Butia odorata*. Los endocarpos se clasificaron, se molieron y se activaron mediante método físico usando CO₂ como agente activante. El proceso se estudió a temperaturas de 900°C, 925°C y 950°C con tiempos de activación de 30 y 90 minutos. Las materias primas se caracterizaron mediante análisis termogravimétrico (TGA) empleando atmósferas de nitrógeno y aire. Los productos se caracterizaron como adsorbentes mediante la determinación de isoterms de adsorción-desorción de N₂ a 77 K y se ensayaron en la adsorción de azul de metileno y paracetamol. Se obtuvieron áreas BET equivalentes de entre 500 y 1000 m² g⁻¹. Para ambas especies se observaron velocidades de adsorción lentas y capacidades de adsorción comparables a las reportadas en bibliografía.

CARBON XEROGELS AS SENSORS FOR ELECTROCHEMICAL DETERMINATION OF LEAD IN WATER

Nelson BRICEÑO-GAMBA^{1,*}, Helena GARCÍA-ROSERO², Francisco CARRASCO-MARÍN²

¹Facultad de Ciencias Básicas e Ingeniería, Universidad de los Llanos, Colombia.

²Departamento de Química Inorgánica, Universidad de Granada, España.

*Corresponding author. E-mail: nbriceno@unillanos.edu.co

Short Abstract

Anodic stripping voltammetry (ASV) is a very sensitive technique that allows simultaneous detection of heavy metals in water at levels under 1 ppm. The technique sensitivity is due to the preconcentration step, which consists in the electrolytic deposition of the heavy metals on the inert electrode surface. The performance of the ASV is strongly influenced by the properties of the working electrode like morphology and surface area. The use of carbon xerogels as electrodes or suitable substrates for plating thin film electrodes have been studied in this work.

Carbon xerogels characterized by different textural, structural and chemical properties were synthesized and used as electrode and substrates for plating bismuth film electrodes for electrochemical determination of lead in water. Two series of carbon xerogels were synthesized following the sol-gel method, varying the catalyst concentration (resorcinol/catalyst ratio) and type (sodium hydrogenphosphate (PX series) or sodium glycerophosphate (GPX series)). The texture and morphology of materials were analysed by adsorption isotherms of N₂ and CO₂, SEM and TEM. The surface chemistry was characterised by XPS and TPD of CO and CO₂. The performance of carbon xerogels in the electrochemical determination of lead in water was monitored by anodic stripping voltammetry (ASV).

The use of phosphorous compounds are suitable catalysts for the synthesis process of carbon xerogels. Catalyst concentration is a key factor to design the textural characteristics of carbon xerogels, for the PX series low concentrations produce materials with low surface area and microporosity, meanwhile for the GPX series all the materials have well-developed porosity in all the interval of catalysts concentrations worked. The use of sodium glicerophosphate increases the oxygen content, with a R/C ratio of 50 the concentration of carboxylic oxygen groups is significate higher than the other R/C ratios worked. Carbon xerogels were suitable as working electrodes in the determination of lead in water by ASV, the analytical performance of the working electrode enhances with the increase of surface area. For the bismuth film electrode (BFE) plated in the carbon xerogel the analytical performance was better than that observed for the bare carbon xerogel electrode, and also showed improved analytical performance with the increase of surface area.



GRAVIMETRIC STUDY ON THE CO AND CO₂ ADSORPTION BEHAVIOUR OF GRAPHENE OXIDES

Martín Roble^{1,*}, Maximiliano A. Zensich², Gustavo M. Morales², D.E. Diaz-Droguett¹

¹Instituto de Física, Facultad de Física, Pontificia Universidad Católica de Chile, Santiago, Chile.

²Departamento de Química, Facultad de Ciencias. Exactas Físico-Químicas y Naturales, Universidad Nacional de Río Cuarto, Córdoba, Argentina.

*Corresponding author. E-mail: mroble@uc.cl

Global warming, as a consequence of high emission of greenhouse gases, especially CO and CO₂, has turned in the last years on a subject of general concern. Even though many new technologies have been proposed for CO₂ capture, it's nowadays believed that chemical absorption/adsorption is the most suited for industrial scale applications. Recently, nanomaterials based on carbon -fullerenes, nanotubes and graphene- have appeared as possible solutions to many technological problems, due to their high specific surface area, excellent mechanical and optical properties and good electrical and thermal conductivity. Particularly, graphene oxide (GO), a material derived from graphene, has a great potential to capture CO and CO₂ if its surface chemistry is modified or functionalized. In this work, CO and CO₂ adsorption by sheets of GO and reduced graphene oxide (rGO) with different degrees of reduction, is evaluated by means of a crystal quartz microbalance (QCM). This technique is based on the relation between the resonance frequency of a flat crystal quartz (QC) and the gas mass adsorbed by the sample deposited on one side of the quartz crystal. The gas adsorption measurements are carried inside a vacuum chamber keeping the crystal temperature constant around 20°C to minimize thermal noise on QC resonance frequency. Under these conditions, a gas pressure (CO or CO₂) between 3 and 100 torr is injected into the chamber recording the QC resonance frequency changes in real time. Gas adsorption capacities of GO and rGO were studied as a function of the gas exposure pressure (CO or CO₂). The GO and rGO samples were characterized by scanning electron microscopy and atomic force microscopy for morphological information, and by infrared and Raman spectroscopies for structural information. Results showed that the surface chemical characteristics of the graphene oxides plays a fundamental role on the CO and CO₂ adsorption properties, and therefore, their control, modification or functionalization of their surface chemistry is of great importance on their gas adsorption performance and capacity.

BIOCHAR USED AS SOIL AMENDMENT

Cristina MUÑOZ*, Erick ZAGAL

Department of Soils and Natural Resources, Faculty of Agronomy, Universidad de Concepción, Chillán, Chile.

*Corresponding author. E-mail: cristinamunoz@udec.cl

Abstract

Soil degradation is defined as the loss of present or potential productivity as the result of natural or antropogenic factors, causing strong impacts on agricultural sustainability, environmental quality, and social (poverty) and political aspects of human society. In Chile, eroded surface currently reaches 36.8 million hectares, representing 49.1% of the total national territory. Recuperation of degraded soils could be reversed through the promotion of improved land use systems and land management practices. These would provide win-win effects in terms of economic gains and environmental benefits: greater agro-biodiversity, improved conservation and environmental management and increased carbon sequestration.

Application of by-products produced by environmentally-friendly agricultural systems can be considered as soil amendment materials. However, labile organic matter contained in these organic materials produce an intensive C mineralization and low N use efficiency. Because of this, the use of more stable C-applications could be considered as an alternative to decrease the risk of pollution in the ecosystems. In this sense, thermal decomposition of organic material under limited supply of oxygen (O₂) combined with relatively low temperatures (less than 700°C) produce a carbon-rich product named biochar. However, few studies are found in the literature that investigate degraded soils of volcanic origin and the effect biochar additions on soil properties and/or their influence on C sequestration, and reduction on greenhouse gas emissions (GHG) from soils.

Through this study we expect to contribute to finding answers about interactions of different types of biochar with soil matrix (volcanic and no volcanic soils) to ameliorate degraded soils in Chile; evaluating environmental benefits as the contribution in C sequestration and GHG emissions.

ACKNOWLEDGEMENTS

Proyect Fondecyt N° 1160795



INFLUENCIA DE LA ESTRUCTURA NANOPOROSA EN LA FOTOACTIVIDAD DE MATERIALES DE CARBONO

Alicia GOMIS-BERENGUER^{1,*}, Jesus INIESTA², Joao C. LIMA³, Conchi O. Ania¹

¹Instituto Nacional del Carbón (INCAR, CSIC), 33011 Oviedo, España.

²Dpt. Química Física e Instituto de Electroquímica, Universidad de Alicante, E-03080 Alicante, España.

³Dept. Chemistry, Universidade Nova de Lisboa, 2829-516 Lisboa, Portugal.

*Corresponding author. E-mail: alicia.gomis@incar.csic.es

Recientes investigaciones de nuestro grupo de investigación han demostrado la fotoactividad de materiales de carbono nanoporosos bajo irradiación con luz policromática [1,2], así como su capacidad de fotogenerar radicales hidroxilo y superóxido en medio acuoso [3,4], los cuales son capaces de reaccionar de manera eficiente con compuestos orgánicos dando lugar a reacciones radicalarias de interés energético y medioambiental (por ejemplo, fotooxidación de fenol en disolución, descomposición fotoasistida de agua).

El objetivo de este trabajo ha sido estudiar la relación entre la fotoactividad del material de carbono y el confinamiento del contaminante a degradar en el interior de la estructura nanoporosa del material, así como su dependencia con la fuente de irradiación (longitud de onda y potencia). Para ello se ha estudiado la degradación de fenol en el interior de la porosidad del material de carbono, utilizando una serie de carbones con distinto tamaño de poro [5].

Para este estudio se utilizó como fuente de irradiación luz monocromática para permitir establecer una relación entre la longitud de onda y la fotoactividad del material de carbono nanoporoso y como reacción fotoquímica modelo se eligió la fotooxidación de fenol. Se irradiaron suspensiones acuosas del material de carbono sobre el cual previamente se adsorbió una determinada cantidad de fenol; permitiendo así evitar reacciones secundarias como la adsorción/desorción y la fotólisis directa del contaminante, siendo posible asignar la degradación de fenol exclusivamente a la interacción entre la luz y el material de carbono [1,2]. Se eligió un material de carbono nanoporoso cuya microporosidad fue modificada mediante activación física con CO₂, para obtener una serie de materiales con tamaño de poro creciente.

Los resultados han demostrado que se obtienen mayores rendimientos fotoquímicos bajo nanoconfinamiento del contaminante (en comparación con la fotooxidación en disolución), en la porosidad del material de carbono. La dependencia del tamaño medio de poros con la conversión pone de manifiesto la importancia de modular la porosidad del catalizador a las dimensiones del contaminante. Asimismo, empleando luz monocromática se ha observado que la conversión de fotones de baja energía aumenta significativamente por encima de 450 nm, alcanzándose rendimientos cuánticos para la fotooxidación de fenol cercanos a los obtenidos con fotones de alta energía.

[1] Velasco LF, Fonseca IM, Parra JB, Lima JC, Ania CO. Photochemical behaviour of activated carbons under UV irradiation, *Carbon* 2012; 50: 249.

[2] Velasco LF, Lima JC, Ania CO. Visible light photochemical activity of nanoporous carbons under monochromatic light, *Angew. Chem.Int. Ed.* 2014; 5:4146.

[3] Velasco LF, Maurino V, Laurenti E, Fonseca IM, Lima JC, Ania CO. Photoinduced reactions occurring on activated carbons. A combined photooxidation and ESR study, *Appl Catal A: Gen* 2013; 452:1.

[4] Velasco LF, Gomis-Berenguer A, Lima JC, Ania CO, Tuning the surface chemistry of nanoporous carbons for an enhanced nanoconfined photochemical activity, *ChemCatChem* 2015;7: 3012.

[5] Gomis-Berenguer A, Iniesta J, Maurino V, Lima JC, Ania CO, Nanoconfinement and wavelength dependence of the photochemistry of nanoporous carbons, *Carbon* 2016;96:98.

FOTOREACTORES SOLARES: POTENCIAL EN PROCESOS FOTOCATALÍTICOS Y SU ALCANCE EMPLEANDO CARBONES O MATERIALES HÍBRIDOS

S. Malato, P. Fernández-Ibáñez, M.I. Maldonado, I. Oller, I. Polo

Plataforma Solar de Almería. Carretera Senes, km. 4. Tabernas, 04200-Almería

*Corresponding author. E-mail: sixto.malato@psa.es

Short Abstract

Los Procesos Avanzados de Oxidación pueden definirse de como técnicas de tratamiento basados en la acción de especies altamente reactivas, los radicales hidroxilo, que conducen a la oxidación completa de los contaminantes. En los últimos 30 años, se ha desarrollado mucho conocimiento sobre los PAOs debido a la variedad de tecnologías disponibles y el amplio campo de aplicaciones posibles. Entre los PAOs se incluyen, entre otros, la fotocatalisis homogénea y heterogénea en presencia de radiación solar ultravioleta (UV) o radiación visible. Los PAOs tienen como principal aplicación el tratamiento de aguas residuales industriales conteniendo contaminantes tóxicos o no biodegradables pero también se pueden aplicar en aguas subterráneas o bien como tratamiento terciario en EDARs, producción de agua ultrapura, tratamiento de compuestos orgánicos volátiles, etc. La instalación y operación de los PAOs supone un coste relativamente alto y por tanto se considera el uso de energía solar como una de las principales características que los pueden hacer sostenibles. Los primeros fotorreactores solares utilizados para aplicaciones fotocatalíticas se desarrollaron alrededor de 1990 y desde entonces se ha impulsado el diseño de fotorreactores capaces de emplear no sólo radiación solar directa sino también la difusa, y de elevada eficiencia óptica y cuántica.

Para diseñar un captador solar para aplicaciones fotocatalíticas se deben tener en cuenta diferentes aspectos como la captación específica de la radiación solar UV, que la temperatura de operación debe ser lo más próxima posible a la temperatura ambiente, tener en cuenta que la eficiencia fotocatalítica disminuye si la concentración fotónica es elevada, que un captador solar es capaz de aprovechar la radiación difusa de manera inversamente proporcional a su factor de concentración, etc. Además, al tratarse de procesos que tienen como principal objetivo la protección ambiental, deben tener poco impacto en su construcción, precisar poca energía para su operación y un coste reducido. Esta conferencia versará sobre todos estos aspectos, mostrando el estado actual de la técnica en cuanto a la construcción de fotorreactores solares y plantas de tratamiento basadas en fotocatalisis solar.



ESTUDIO DE LA ACTIVIDAD FOTOCATALÍTICA DE SEMICONDUCTORES Y MATERIALES CARBONOSOS COMO BASE DE PINTURAS AUTOLIMPIANTES

Raquel GARCÍA-GONZÁLEZ*, María COCINA FERNÁNDEZ DE CÓRDOBA, Conchi O. ANIA

Grupo ADPOR, Instituto Nacional del Carbón (INCAR-CSIC) Oviedo (33011) España

*Corresponding author. E-mail: garcia.raquel@incar.csic.es

Una de las principales preocupaciones hoy en día es la calidad del aire de interior, que debe ser estrictamente controlada para evitar problemas de salud. Desde su aparición, las pinturas fotocatalíticas suponen un modo de eliminación de agentes contaminantes en espacios de interior como garajes o túneles. La acción de auto-limpieza que estas pinturas poseen consigue, gracias a la radiación solar, la mineralización completa de los contaminantes para convertirlos en productos inocuos.

Dentro de este contexto, el objetivo del presente trabajo ha sido estudiar la actividad fotocatalítica de mezclas de semiconductores / materiales carbonosos y de mezclas de semiconductores / materiales carbonosos contenidas en pinturas, bajo diferentes condiciones de iluminación para su posterior aplicación tanto en medios abiertos como cerrados. La incorporación de aditivos, tal como materiales de carbono nanoporosos con actividad fotocatalítica intrínseca, permite conocer el efecto de la eficiencia del mismo para la fotodegradación de los contaminantes.

Con el fin de evaluar las propiedades fotocatalíticas reales, se han realizado comparaciones entre estas pinturas y las comerciales utilizadas en aplicaciones de interior (con contenido en TiO_2) y han sido probadas bajo diferentes condiciones experimentales (humedad, naturaleza del semiconductor, contaminantes de naturaleza orgánica) y bajo diferentes condiciones de iluminación.

USING LIGHT TO DESIGN THE POROSITY OF CARBON/METAL NANOASSEMBLIES

María C. FERNÁNDEZ DE CÓRDOBA^{1,*}, Mohamed ZAHER²,
Lavinia BALAN² and Conchi O. ANIA¹

¹ADPOR Group, Instituto Nacional del Carbón (INCAR, CSIC), 33011 Oviedo, Spain

²Institut de Sciences des Matériaux de Mulhouse (IS2M, CNRS), rue Jean Starcky, 68057 Mulhouse Cedex, France

*Corresponding author. E-mail: m.fernandezdecordoba@incar.csic.es

Short Abstract

Modern carbons are emerging as promising materials in many science and engineering fields (i.e., catalysis, sensing, adsorption, energy conversion, pharmacy, environmental chemistry) due to an unforeseen control in the physicochemical and structural properties (particle size and shapes, uniformity in porous void, flexibility) during the synthesis. The majority of these applications derives from the flexible coordination chemistry of carbon atoms and their ability to bind other heteroatoms either on the surface or inserted within the structural framework. In this regard, the synthesis of carbon/metal nanoporous materials has received much attention as they are considered to have advanced functional applications.

The objective of this work was to explore the synthesis of Ag/Au-decorated nanoporous carbons using photochemical reactions. At first we synthesized the metal-polymer nanoassemblies. To avoid the usually long reaction times of sol-gel polycondensation methods (that limit the large-scale implementation of these processes), we set to explore the potentialities of the use of light activation to promote the cross-linking of polymer precursors. We have employed various polymer organic precursors as carbon sources, and we have incorporated either silver or gold nanoparticles (using AgNO₃ or AuBr₄ salts). The textural, structural and chemical characterization of the resulting Ag/Au-functionalized nanoporous carbons have been carried out and discussed in terms of the experimental conditions (e.g., light source, pH, electrolyte, chromophores).



COMPORTAMIENTO DEL CARBÓN ACTIVADO EN FUNCIÓN DEL TIPO DE RADIACIÓN APLICADA EN LOS PROCESOS AVANZADOS DE OXIDACIÓN Y REDUCCIÓN

Inmaculada VELO GALA^{1,*}, Conchi O. ANIA¹, Jesús J. LÓPEZ PEÑALVER²,
Manuel SÁNCHEZ POLO², José RIVERA UTRILLA²

¹ADPOR Group, Instituto Nacional del Carbón (INCAR, CSIC), Oviedo, España

²Departamento de Química Inorgánica, Facultad de Farmacia, Universidad de Granada, España

*Corresponding author. E-mail: i.velo@incar.csic.es

Los Procesos de Oxidación Avanzada (POAs) constituyen un grupo prometedor de sistemas de tratamientos para la eliminación de contaminantes orgánicos que resisten los tratamientos convencionales de las estaciones de depuración y de potabilización de aguas. La presencia del carbón activado mejora dichos procesos en los que interviene la radiación. Los sistemas fotocatalíticos pertenecen a los POAs que requieren el uso de radiación luminosa capaz de producir la activación electrónica del material catalizador. La presencia de carbón activado incrementa su rendimiento gracias a sus propiedades físicas y químicas. Esta mejora suele atribuirse al aumento de la superficie de contacto entre el catalizador y el contaminante, favorecido por la actuación del carbón activado como soporte poroso. Sin embargo, en investigaciones recientes demostramos que el carbón activado es un material que puede presentar actividad fotoquímica por sí mismo.

Para los casos en los que la degradación de los contaminantes por vía oxidante no es efectiva, la aplicación de tecnologías que generan simultáneamente especies oxidantes y reductoras constituyen una opción muy interesante a considerar para la eliminación de este tipo de compuestos tan resistentes. Actualmente, la radiación ionizante se aplica para el tratamiento de agua contaminada pero la investigación sobre los efectos de la presencia de materiales catalizadores durante el proceso de irradiación es muy escasa. En este sentido, hemos observado que el carbón activado tiene un efecto potenciador en los resultados de eliminación de los compuestos por radiolisis.

Dichas mejoras mostradas por el carbón activado bajo estos dos tipos de radiación, se fundamenta en dos mecanismos de actuación diferentes. Cuando en el sistema de tratamiento de aguas se utilizan radiaciones no ionizantes (radiación UV o solar), el carbón activado se comporta como un material semiconductor, presentando fotoactividad bajo las diferentes fuentes de luz aplicadas. Demostramos la generación de radicales hidroxilo y superóxido como resultado de la actuación del carbón activado como material fotocatalizador, poniéndose de manifiesto que son estas especies las responsables del aumento observado en los procesos de fotodegradación. Además, observamos que las concentraciones de los compuestos intermedios de degradación dependen de las características de los carbones utilizados. Con la evaluación del grado de fotodegradación del contaminante previamente adsorbido en diferentes carbones tras incidir sobre ellos radiación UV, se detectaron diferentes cantidades del contaminante y sus intermedios lo que es debido a la existencia de fotodegradación en el interior de los poros de los carbones.

En relación con el mecanismo de actuación del carbón activado cuando interacciona con radiación gamma, los resultados obtenidos ponen de manifiesto que es necesaria la existencia de interacciones electrostáticas adsorbato-adsorbente para que mejoren los porcentajes de degradación del contaminante. El carbón activado actúa como estabilizador de los radicales formados, favoreciendo la interacción del compuesto con las especies radicalarias responsables de su eliminación. Se forman zonas de alta reactividad porque los electrones solvatados y los radicales hidrógeno formados en el proceso de radiolisis del agua pueden actuar con la superficie del carbón, estabilizándose en los grupos quinona y en los anillos aromáticos del material, respectivamente.

Velasco LF, Fonseca IM, Parra JB, Lima JC, Ania CO. Photochemical behaviour of activated carbons under UV irradiation. *Carbon* 2012; 50: 249.

Velasco LF, Lima JC, Ania CO. Visible light photochemical activity of nanoporous carbons under monochromatic light. *Angew. Chem.Int. Ed.* 2014; 5:4146.

Velasco LF, Maurino V, Laurenti E, Fonseca IM, Lima JC, Ania CO. Photoinduced reactions occurring on activated carbons. A combined photooxidation and ESR study. *Appl Catal A: Gen* 2013; 452:1.

Velo Gala I, López Peñalver J.J, Sánchez Polo M, Rivera Utrilla J. Activated carbon as photocatalyst of reactions in aqueous phase. *Applied Catalysis B: Environmental* 2013; 142-143: 694-704.

Velo Gala I, López Peñalver J.J, Sánchez Polo M, Rivera Utrilla J. Role of activated carbon on micropollutants degradation by ionizing radiation. *Carbon* 2014; 67: 288-299.

SYNTHESIS OF POROUS CARBON MATERIALS CONTAINING NANOSTRUCTURED IRON-PHOSPHORUS COMPOUNDS

Gustavo R. GONÇALVES, Gustavo L. VIALI, Vinicius PICCOLI, Mayara S. SANTOS, Miguel A. SCHETTINO Jr., Alfredo G. CUNHA, Francisco G. EMMERICH, Edson C. PASSAMANI, Jair C. C. FREITAS*

Department of Physics, Federal University of Espírito Santo, Vitória, ES, Brazil

*Corresponding author. E-mail: jairccfreitas@yahoo.com.br

Short Abstract

Nanocomposites containing nanostructured iron compounds dispersed in porous carbon supports are relevant for many applications such as water purification, magnetic separation and catalytic processes. This work described the synthesis of nanocomposites consisting of iron and phosphorus compounds dispersed in a porous carbon material, with special emphasis on the physical and chemical transformations caused by heat treatments and on their potential for use in liquid phase adsorption. The chosen support was an activated carbon derived from the endocarp of babassu coconut by chemical activation with H_3PO_4 . The synthesis of the nanocomposites was conducted by aqueous impregnation, using $Fe(NO_3)_3 \cdot 9H_2O$ and NH_4OH as the source of iron and the precipitating agent, respectively. After the synthesis at room temperature, the material was submitted to heat treatments under N_2 flow at predetermined temperatures from 700 to 1000 °C. The as-prepared material contained nanoparticles of iron oxides homogeneously dispersed in the porous carbon support, as identified by X-ray diffraction, Mössbauer spectroscopy and scanning electron microscopy, exhibiting superparamagnetic behaviour at room temperature. The thermal treatments caused the formation of new phases due to the chemical reactions involving the iron oxide nanoparticles dispersed in the phosphorus-containing carbon support. Noticeably, nanostructured iron phosphates and iron phosphides were produced at high temperatures (900-1000 °C). The nanocomposites containing these Fe-P compounds exhibited enhanced performance in the removal of methylene blue from aqueous solution by a Fenton-like process, pointing to a promising application of these materials. The results of this study showed that the method employed enables the synthesis of nanocomposites with diverse chemical and structural characteristics, depending on the conditions of preparation and on the subsequent execution of heat treatments.



SÍNTESIS DE XEROGELES DE CARBÓN RESORCINOL-FORMALDEHÍDO A BAJAS RELACIONES RESORCINOL/CATALIZADOR Y SU RELACIÓN CON LAS PROPIEDADES TEXTURALES, QUÍMICAS Y MORFOLÓGICAS

Rafael A. FONSECA¹, Liliana GIRALDO², Juan Carlos MORENO-PIRAJAN^{1,*}

¹Facultad de Ciencias, Departamento de Química, Grupo de Sólidos Porosos y Calorimetría, Universidad de los Andes, Carrera 1 N° 18^a-10, Bogotá, Código postal: 11001000, Colombia

²Facultad de Ciencias, Departamento de Química, Universidad Nacional de Colombia, Carrera 30 calle 45, Bogotá, Código postal: 11001000, Colombia

*Corresponding author. E-mail: jumoreno@uniandes.edu.co

En esta investigación se presenta la preparación de xerogeles de carbón mediante reacciones de policondensación utilizando como sistema polimérico: resorcinol (R)-formaldehído(F), utilizando como variable de control la relación de los reactivos de polimerización y el efecto sobre las propiedades texturales y la química superficial de los xerogeles de carbón resultantes.

El generar un diseño particular de un xerogel de carbón durante el proceso sol-gel y que suele considerarse importante [1], es tener en cuenta el monómero que se elige para utilizarlo durante la reacción de polimerización que posteriormente formarán las diversas estructuras porosas [2], para obtener tres tipos de muestras utilizando como catalizador de carácter básico el carbonato de sodio (C) a diferentes relaciones (R/C): 25, 50 y 100. El resultado final de las reacciones es una dispersión coloidal de partículas extremadamente pequeñas que forman finalmente una red tridimensional entrecruzada. Estos materiales se caracterizan texturalmente mediante isoterms de nitrógeno a 298 K. Se aplican los métodos de DA para determinar: V_m [$\text{cm}^3 \cdot \text{g}^{-1}$], E_0 [$\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$], n y L [Å], el método BJH para determinar: V_{meso} [$\text{cm}^3 \cdot \text{g}^{-1}$] y L [Å] ver Tabla N°1.

Tabla 1. Caracterización textural de los xerogeles de carbón sintetizados

| MUESTRA | D-A | | | | | B-J-H | |
|---------|--|---|--|-----|--------------------|--|--------------------|
| | S_{BET} [$\text{m}^2 \cdot \text{g}^{-1}$] | V_{micro} [$\text{cm}^3 \cdot \text{g}^{-1}$] | E_0 [$\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$] | n | L [Å] | V_{meso} [$\text{cm}^3 \cdot \text{g}^{-1}$] | L [Å] |
| Xe25 | 173 | 0.06 | 5.97 | 2.1 | 7.7 | 0.16 | 17.1 |
| Xe50 | 263 | 0.10 | 7.23 | 2.3 | 7.3 | 0.05 | 17.0 |
| Xe100 | 427 | 0.28 | 4.64 | 3.4 | 8.5 | 0.02 | 17.0 |

Los resultados muestran la presencia y desarrollo de microporos comparados con la generación de mesoporos en función del incremento de la relación R/C, lo que es interesante, pues en principio éstos materiales son fundamentalmente mesoporosos, lo que demuestra que la relación R/C tiene una influencia en el desarrollo del tipo de porosidad de los xerogeles sintetizados bajo las condiciones experimentales de ésta investigación, los sólidos muestran un desarrollo interesante en la microporosidad con un incremento en el área superficial en la medida que aumenta la relación (R/C), Xe25 (173 m^2/g), Xe50 (263 m^2/g) y Xe100 (427 m^2/g). De otra parte se realizaron estudios sobre la química superficial, resultados que estuvieron en buen acuerdo con los estudios previamente obtenidos en la parte textural, donde al aumentar la relación R/C se generan mayor cantidad de grupos oxigenados sobre la superficie lo que favorece la formación de enlaces de hidrógeno y así favorece la adsorción de compuestos iónicos. Finalmente se tomaron microfotografías SEM observándose formación de aglomerados característicos de este tipo de materiales.

Agradecimientos

Los autores desean agradecer al Fondo de Ciencias Básicas de la Facultad de Ciencias y a la Vicerrectoría de Investigaciones de la Universidad de los Andes (Colombia), al Proyecto Semilla convocatoria 2016-1 (Colombia) por la financiación parcial de esta investigación. Adicionalmente un especial agradecimiento al convenio Marco establecido entre la Universidad Nacional de Colombia y la Universidad de los Andes (Colombia) bajo el cual se desarrolló de este trabajo.

Referencias

- [1] S.A.C. Carabineiro, T. Thavorn-amornsri, M.F.R. Pereira, P. Serp, J.L. Figueiredo. *Catalysis today*, 2012, 186, 29-34.
[2] Al-Muhtaseb S.A., Ritter J.A. *Advanced materials*, 2003; 15, 101-115

NANOSTRUCTURED HYBRID TiO₂-C FOR THE PHOTOCATALYTIC CONVERSION OF PHENOL

Cristian MIRANDA^{1*}, Juan MATOS¹, Po S. Poon², Héctor D. Mansilla³

¹Biomaterials Department, Development Technological Unit (UDT), University of Concepcion, Concepción, Chile

²Laboratory of Natural Products, Chemistry Centre, Venezuelan Institute of Scientific Research (IVIC), Caracas, Venezuela

³Department of Organic Chemistry, Faculty of Chemical Science, University of Concepción. Concepción, Chile.

*Corresponding author. E-mail: c.miranda@udt.cl

Short Abstract

The photocatalytic activity of hybrid TiO₂-C materials prepared by solvothermal synthesis was studied using phenol as test molecule. The influence of furfural, chitosan and saccharose as carbon precursors was verified. Characterization was performed by N₂ adsorption isotherms, XRD, DR/UV-vis and SEM. The carbon precursor affects the surface area and the XRD patterns of TiO₂-C. First and second order reaction rates approaches were used to estimate the photocatalytic activity. TiO₂-C materials showed an increase up to 4.4 higher photoactivity than commercial TiO₂. The present results suggest that hybrid TiO₂-C nanostructured materials can be potentially used as eco-friendly and low-cost heterogeneous photocatalysts under UV-vis irradiation.



DISMINUCIÓN DE LA CITOTOXICIDAD DE NANOPARTÍCULAS DE PLATA MEDIANTE SU SOPORTE SOBRE ÓXIDO DE GRAFENO CON APLICACIONES ANTIMICROBIANAS

C. Angulo-Pineda^{1,*}, P. Palma² y H. Palza¹

¹Depto. de Ingeniería Química y Biotecnología, FCFM, Universidad de Chile.

²Depto. Patología y Medicina Oral, Facultad de Odontología, Universidad de Chile

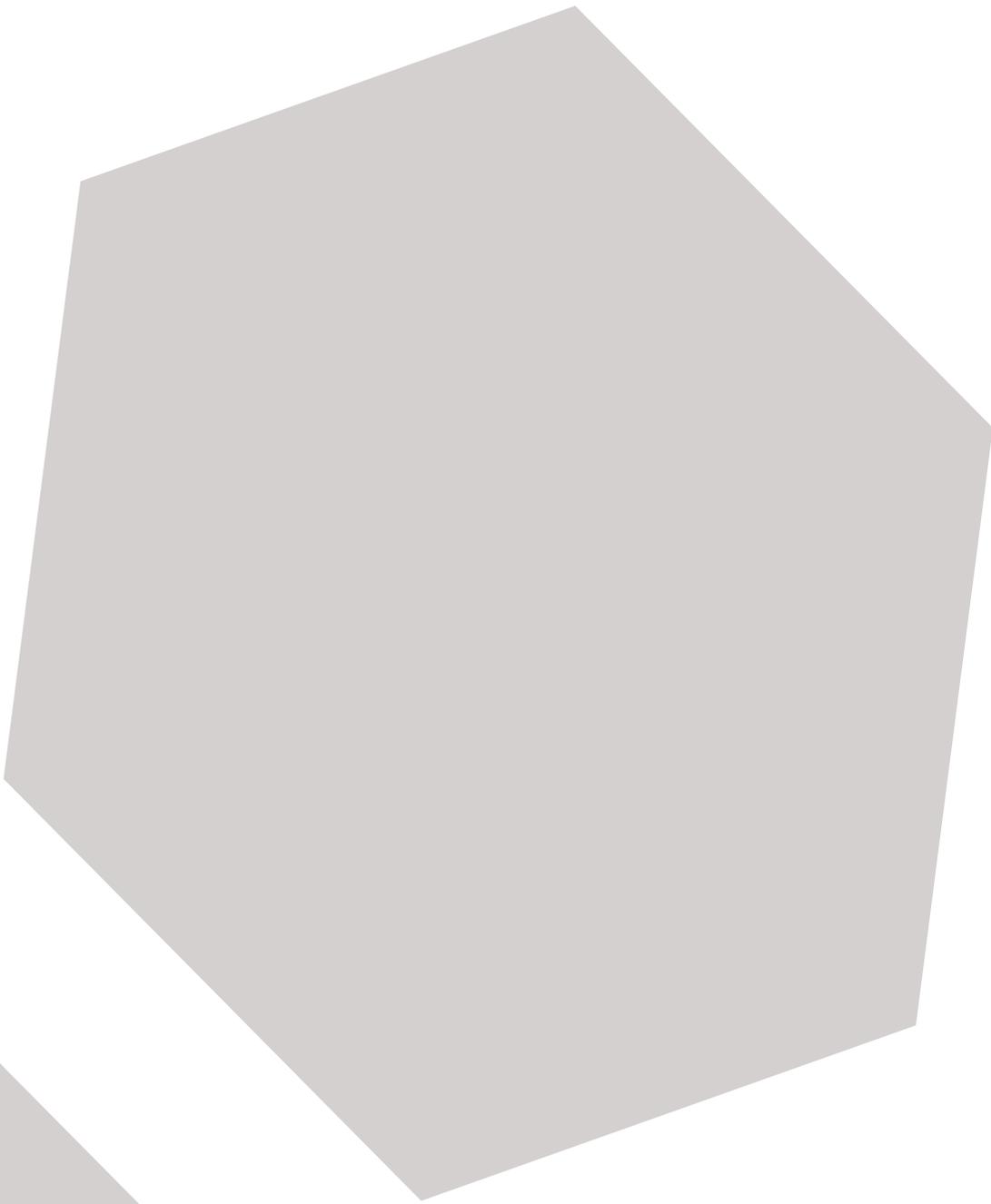
*Corresponding author. E-mail: cangulo@u.uchile.cl

Resumen corto

Está reportada la acción de las nanopartículas de plata (NPs-Ag) frente a un amplio rango de bacterias [1]. Sin embargo, dichas nanopartículas, presentan una elevada respuesta citotóxica, por lo que es necesario disminuir las concentraciones de NPs-Ag presentes en los nanomateriales [1,2,3]. En base a esto, se comenzó la búsqueda de alternativas para el diseño de nanomateriales antibacteriales que sean menos citotóxicos y biocompatibles. Estudios experimentales han mostrado interacciones entre derivados del grafito y metales de transición como por ejemplo plata [4]. Este tipo de interacciones podría disminuir la toxicidad de estas nanopartículas. Además, tanto grafeno (G) y óxido de grafeno (GO) pueden penetrar y extraer moléculas de lípidos de las membranas de bacterias, provocando la pérdida de la integridad celular [4,5,6]. El GO otorga una amplia área superficial para la interacción celular [4] mostrando biocompatibilidad y sus grupos oxigenados sirven como sitios de nucleación para el crecimiento o anclaje de NPs [7]. Así, NPs-Ag han sido preparadas con GO, las cuales permiten la inhibición del crecimiento bacteriano [6]. En este trabajo se presentarán materiales híbridos con propiedades antimicrobianas obtenidas mediante síntesis *in situ* de NPs-Ag en presencia de GO. El objetivo es demostrar que la presencia de GO disminuye la citotoxicidad de las NPs de Ag manteniendo sus propiedades antimicrobianas. Las partículas serán caracterizadas por espectroscopia de fotoelectrones emitidos por rayos X (XPS), espectroscopia UV-visible y microscopía electrónica de transmisión (TEM). Por otra parte, se presentarán los resultados del test de citotoxicidad (MTT) y además los principales resultados de los ensayos microbiológicos de contacto, por los cuales se evaluará la actividad antimicrobiana de los materiales híbridos obtenidos.

Referencias

- [1] A.F de Faria et al, Colloid Surface B, 113, (2014).
- [2] E.Tegeou et al, Biomaterials, 89, (2016).
- [3] S.W. Chook et al, Nanoscale Res Lett, 7, 1, (2012).
- [4] W.Zhongying et al, Chem Soc Rev, 45, 6, (2016).
- [5] J.Chen et al, Nanoscale, 6, 3, (2014).
- [6] S.Liu et al, ACS nano, 5, 9, (2011).
- [7] Zhao, G., et al, Environmental science & technology, 45,24, (2011).

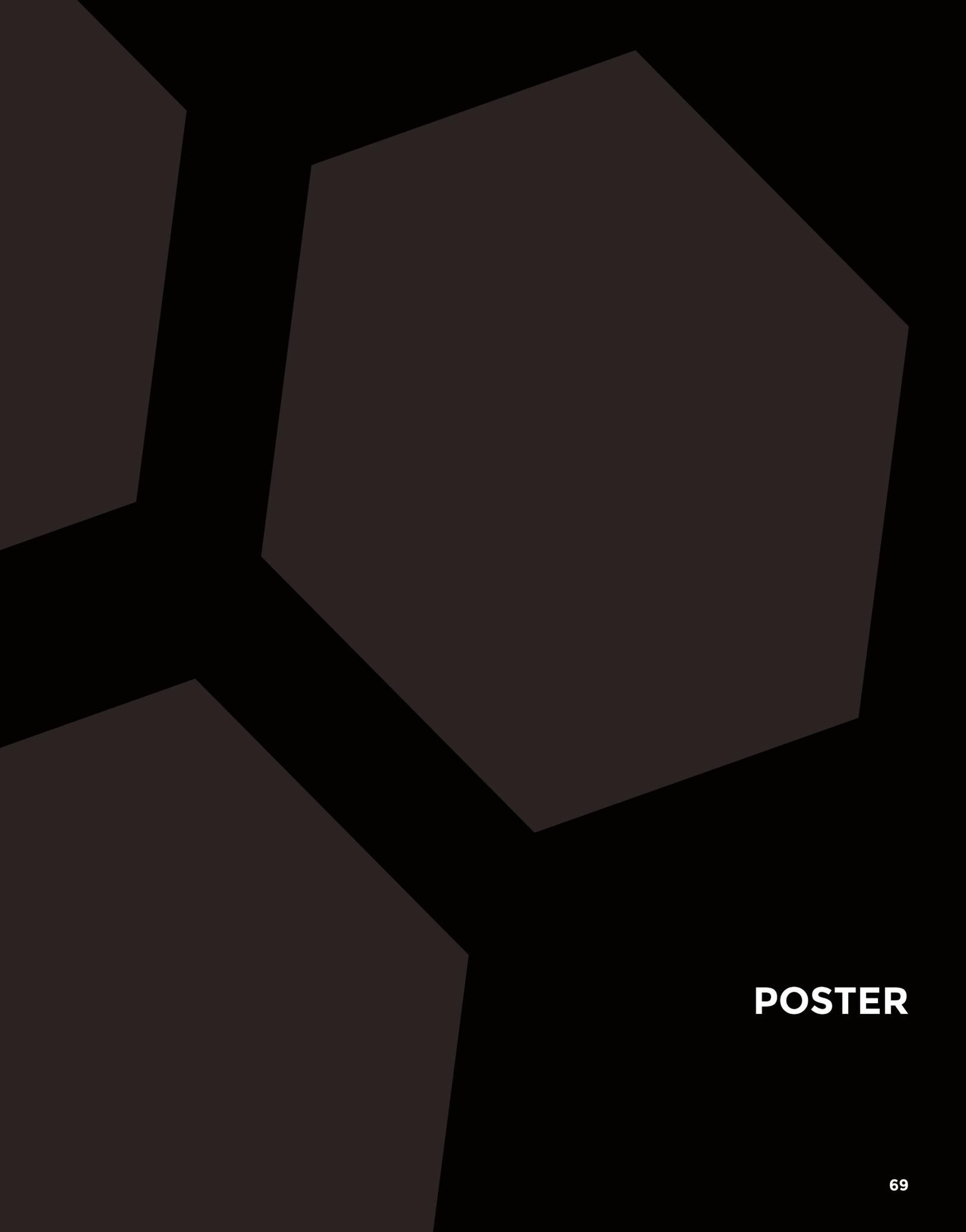




TLMC₂

Segundo Taller
Latinoamericano
de Materiales de Carbono

MATERIALES SUSTENTABLES A BASE DE GRAFENO
Termas de Chillán, Chile 16 al 18 de noviembre de 2016



POSTER



NANOTUBOS DE CARBONO DOPADOS CON NITRÓGENO Y SU INTERACCIÓN CON LIPOSOMAS: NUEVOS COMPOSITOS PARA POSIBLES APLICACIONES

S. L. Romo-Ávila¹, E. Muñoz Sandoval², R. A. Guirado-López³

¹Facultad de Ciencias. Universidad Autónoma de San Luis Potosí, Lateral Av. Salvador Nava s/n C.P. 78290 Col. Lomas, San Luis Potosí, SLP.

²Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica, Camino a La Presa de San José 2055, San Luis Potosí, SLP.

³Instituto de Física "Manuel Sandoval Vallarta", Universidad Autónoma de San Luis Potosí, Alvaro Obregón 64, CP 78000, San Luis Potosí, SLP.

Corresponding author. E-mail: lerols912@gmail.com

En este proyecto se realizó un estudio experimental para analizar los procesos de crecimiento, estructuración y caracterización de nanotubos de carbono de capa múltiple dopados con nitrógeno (CN_x). La fabricación de los tubos se llevó a cabo mediante la técnica de CVD, usando como precursores a las moléculas de bencilamina y ferroceno. Las imágenes de SEM muestran la formación de nanotubos de carbono con diferentes longitudes, diámetros, y morfologías. Además nuestras imágenes de HRTEM revelan la existencia de nanotubos de carbono con configuraciones tipo bamboo que contienen además nanopartículas de hierro en su superficie, generando materiales conocidos como nanobuds. Los resultados de XPS revelan un contenido de N hasta de 2.4% y la existencia de diferentes configuraciones de adsorción para las especies de nitrógeno (e.g., pirrólico, cuaternario, piridínico, molecular y piridínico oxidado). Los nanotubos aquí reportados son muy estables y la existencia de diferentes dopajes puede generar aplicaciones prometedoras como materiales catalíticos. Finalmente, presentamos resultados preliminares relacionados con la interacción de nuestros nanotubos con estructuras tipo liposoma. Para este fin utilizamos una variante del método de electroformación, contaminando la película delgada constituida a base de la molécula DMPC con nuestras nanoestructuras. Encontramos por medio de microscopía óptica que es posible obtener la formación de complejos del tipo nanotubo/liposoma, los cuales podrían ser utilizados para el diseño de transportadores biológicos novedosos.

REACTIVIDAD DE NANOTUBOS DE CARBONO DE TIPO BUMPY QUE POSEEN ANILLOS DE 5 Y 7 MIEMBROS

M. Leonor CONTRERAS^{1,*}, Ignacio VILLARROEL², Roberto ROZAS¹

¹Universidad de Santiago de Chile, Facultad de Química y Biología, Departamento de Ciencias del Ambiente, Lab. Química Computacional y Propiedad Intelectual.

²Facultad de Ingeniería, Departamento de Computación e Informática

*Corresponding author. E-mail: leonor.contreras@usach.cl

Short Abstract

Los nanotubos de carbono (NTC) regulares^{1,2}; es decir aquellos que poseen sólo anillos de 6 miembros, han sido considerados como uno de los materiales del futuro debido a su amplia variedad de aplicaciones en diversos campos tales como medicina, electrónica, catálisis. Sin embargo la existencia de nanotubos con anillos de 5, 7 y 8 miembros, llamados nanotubos con defectos, ha mostrado algunas ventajas remarcables. Por ejemplo, los nanotubos tipo bumpy, que poseen anillos de 5 y 7 miembros, tienen mayor capacidad de adsorber físicamente hidrógeno que los nanotubos regulares, con energías de adsorción en el rango de 0,3-0,4 eV/molécula adsorbida, considerado ideal para la adsorción reversible de hidrógeno a temperatura ambiente y bajas presiones³ y por lo tanto favorable para su uso como fuente de energía limpia.

Estudios sistemáticos de las propiedades de los nanotubos con defectos no se conocen en la literatura y por lo tanto resulta interesante conocer de qué manera la estructura afecta su reactividad.

En este trabajo se optimizan NTC de tipo bumpy (finitos, abiertos, terminados con hidrógeno) y se estudia el efecto de la hidrogenación, la presencia de nitrógeno, el largo y diámetro de los nanotubos, además de su quiralidad, sobre la conductividad y la reactividad⁴, a partir de la determinación de los orbitales frontera, a través de métodos de la teoría del funcional densidad (DFT) al nivel 6-31G(d), encontrándose frecuencias reales en todos los casos (Programa Jaguar 7.8 de Schrodinger). Se determinan el band-gap (ELUMO - EHOMO), el potencial químico, la dureza, el índice electrofílico, y la blandura de cada nanoestructura.

Los resultados muestran que las estructuras no-hidrogenadas (hibridación sp^2) poseen los menores band-gaps (menores de 0.8 eV), indicando mejores propiedades conductoras que los nanotubos hidrogenados, en el orden *quiral*>*zigzag*>*armchair*. Este también es el orden de reactividad, de acuerdo a su dureza. La presencia de nitrógeno disminuye levemente la conductividad y reactividad en esas moléculas, salvo en los NTC *armchair* de menor diámetro. El índice electrofílico³ indica que los nanotubos *quirales* tienen mayor tendencia a ser reducidos que los *zigzag* y *armchair*. También se encontró que los nanotubos más largos aumentan su conductividad y tendencia a reducirse. Por su parte, las nanoestructuras hidrogenadas (hibridación sp^3) poseen durezas, potenciales químicos e índices electrofílicos que dan cuenta de una menor reactividad que sus análogos no-hidrogenados. Los nanotubos saturados más largos y aquellos con nitrógeno, presentan mayor reactividad.

Agradecimientos: Proyecto DICYT USACH 061642CF; Proyecto SDT CIA 2981, facilidades de cálculo en el cluster Facultad.

Referencias:

1. Contreras ML, Villarroel I, Rozas R. (2015) Struct Chem DOI 10.1007/s11224-014-0535-y
2. Contreras ML, Avila D, Alvarez J, Rozas R. (2010) Struct Chem DOI 10.1007/s11224-010-9587-9
3. Singh AK, Yacobson BI (2012) J Mater Sci 47:7356
4. Zeballos J., Toro-Labbé A. (2003) J. Chil. Chem. Soc. 48(4):39-47.



OBTENCIÓN DE NANOMATERIALES VÍA POLIMERIZACIÓN RADICÁLICA CONTROLADA POR TRANSFERENCIA DE ÁTOMO: NTCPM/PMAG

Leticia RAMÍREZ^{1*}, Aide SÁENZ^{1*}, Lluvia LÓPEZ¹, Pablo GONZÁLEZ²

¹Doctorado en Ciencia y Tecnología de Materiales, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Autónoma de Coahuila, Blvd. V. Carranza esq. José Cárdenas Valdés, C.P. 25280, Tel. (844)4169213. Saltillo, Coah., México

²Centro de Investigación y de Química Aplicada, Departamento de Materiales Avanzados. Blvd. Enrique Reyna 140. Saltillo, Coah., México.

*Corresponding author. E-mail: arizbeth.ramirez@uadec.edu.mx, aidesaenz@uadec.edu.mx

Short Abstract

En el presente trabajo de investigación, se llevó a cabo la obtención de un nanomaterial mediante polimerización radicalica controlada por transferencia de átomo (ATRP), compuesto con polimetacrilato de glicidilo (PMAG) y nanotubos de carbono de pared múltiple (NTCPM), modificados superficialmente con grupos polares.

De los resultados obtenidos se realizó un estudio preliminar cinético del proceso de polimerización la cual fue llevada a cabo en presencia de oxígeno, encontrando que a un tiempo de 5 minutos, se obtuvo una conversión de 92% lo que nos indica que pese a trabajar en presencia de oxígeno, se pudo lograr la obtención del nanomaterial. Una vez obtenidos los nanomateriales se caracterizaron mediante espectroscopía de infrarrojo (FT-IR), encontrando las bandas características del PMAG, grupo carbonilo en 1705 cm⁻¹, grupo éster; así mismo se caracterizó mediante SEM donde se observa la interacción de los NTCPM con la matriz polimérica.

EFFECTO DEL TRATAMIENTO TÉRMICO A BAJAS TEMPERATURAS EN NANOTUBOS DE CARBONO DOPADOS CON NITRÓGENO

María Luisa GARCÍA-BETANCOURT,^{1*} Héctor Gabriel SILVA PEREIRA²,
Emilio MUÑOZ-SANDOVAL²

¹Centro de Investigaciones Químicas, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Avenida Universidad 1001, Col. Chamilpa, 62209 Cuernavaca, Morelos, México.

²Departamento de Materiales Avanzados, IPICYT, Camino A Presa San José 2055, Col. Lomas 4a Sección, San Luis Potosí, México

*Corresponding author. E-mail: luisa.maria.betan@gmail.com

Resumen Corto

Se presentan resultados de caracterización de microscopía electrónica y de transmisión del efecto de tratamientos térmicos (TT) en aire a bajas temperaturas. Los nanotubos de carbono dopados con nitrógeno (NTC-N) fueron fabricados mediante deposición química de vapor asistida por un nebulizador usando bencilamina y ferroceno como precursores. Estos NTC-N fueron sometidos a largos periodos de TT a una temperatura de 330 °C. Nuestros resultados muestran que después de 20 horas los NTC-N presentan drásticas modificaciones morfológicas. Dentro de las transformaciones más significativas se encuentra la formación de huecos distribuidos a lo largo del NTC-N. Esto abre la posibilidad de incrementar el área superficial de estos nanomateriales ya que los huecos aparentemente se formaron en los compartimentos característicos de este tipo de nanotubos. Esto permitirá posiblemente una mejor funcionalización para usarlos en aplicaciones tales como transporte de biomoléculas ancladas en su superficie o para almacenamiento de CO₂ o H₂.



PREPARACIÓN DE MATERIALES HÍBRIDOS DE ÓXIDO DE GRAFENO - LIGNINA Y SU EVALUACIÓN COMO ANTIBACTERIANOS

Susana S. ISLAS GUTIÉRREZ¹, Jorge L. MENCHACA ARREDONDO²,
Ferdinando TRISTÁN^{1*}, Maribel HERNÁNDEZ GUERRERO^{1*}

¹Departamento de Procesos y Tecnología, División de Ciencias Naturales e Ingeniería. Universidad Autónoma Metropolitana Unidad Cuajimalpa

²Centro de Investigación en Ciencias Físico Matemáticas (CICFIM), Facultad de Ciencias Físico-Matemáticas, Universidad Autónoma de Nuevo León

*Corresponding author. E-mail: ftristan@correo.cua.uam.mx, mhernandez@correo.cua.uam.mx

Resumen

La búsqueda de agentes novedosos con actividad antimicrobiana responde a la creciente necesidad de controlar la proliferación microbiana sin generar resistencia. La preparación de materiales híbridos con óxido de grafeno (GO) como soporte funcionalizados con lignina (LIG), busca aprovechar las propiedades bactericidas o antibacterianas de ambos materiales para posteriormente desarrollar productos de valor agregado.

En la actualidad no existen reportes de investigación de materiales híbridos GO-LIG, y en este trabajo se reporta una ruta de síntesis efectiva para su obtención a través de funcionalización covalente y supramolecular del GO con LIG. La caracterización de estos materiales híbridos es clave para determinar si existe una sinergia entre el óxido de grafeno y lignina. Las técnicas utilizadas para la caracterización de los materiales fueron espectroscopía RAMAN, espectroscopía de infrarrojo (FTIR), microscopía electrónica de barrido (SEM), microscopía de fuerza atómica (AFM) y técnicas microbiológicas para determinar la actividad antibacteriana de los compuestos.

Los resultados obtenidos por AFM y espectroscopía RAMAN parecen indicar la obtención favorable de un material híbrido formado por GO-LIG. Se lograron optimizar algunos parámetros que permitirán continuar con la síntesis y caracterización de estos materiales. Los resultados también parecen indicar que en las condiciones utilizadas de formación de los materiales híbridos, la lignina se encuentra en un amplio exceso.

Las pruebas microbiológicas preliminares, permitieron determinar que el material híbrido GO-LIG presenta una mayor actividad antibacteriana que el GO o la LIG en forma individual. Esto permite soportar la posible sinergia entre el GO y la LIG para mejorar el desempeño antibacteriano.

ROLE OF THE ACETONE IN THE CARBON SPONGE GROWTH

Alejandro CORTÉS¹, Juan FAJARDO¹, Juan ESPARZA¹, Florentino LÓPEZ¹, Emilio MUÑOZ¹

¹Advanced Materials Department, San Luis Potosi Institute of Scientific and Technological Research, México.

*Corresponding author: E-mail: ems@ipicyt.edu.mx

Short Abstract

Carbon nanotube sponges are synthesized at 1020 °C by using chemical vapor deposition (CVD) method. Our CVD experimental setup consists of two independent sprayers feeding the reactor. One of the sprayers (sprayer A) contains a benzylamine solution while the other (sprayer B) contains a mixture of ethanol-acetone solution. Both sprayers contain ferrocene and thiophene. Several experiments are presented by varying the acetone concentration. The samples are characterized by X-ray diffraction (DRX), scanning electron microscopy (SEM), transmission electron microscopy (TEM), Raman spectroscopy, X-ray photoelectron spectroscopy (XPS) and thermogravimetric analysis (TGA). SEM and TEM images revealed that carbon nanotube sponges are formed by axial fibers morphologies (diameter of 40-300 nm) which contain well graphite nanotubes inside surrounded by disordered graphite materials. It was also observed the presence of metallic particles decorating the surface of carbon fibers and embedded in the disordered graphite material. Furthermore, inside carbon nanotubes with triangular cross section were identified. TGA demonstrated that the carbon fibers exhibit an onset temperature from 500 to 530 °C. This fact could be due to the presence of 5- or 7-membered carbon rings, dangling bonds and metallic particles. The super hydrophobicity and growth mechanism are also investigated. These samples are proposed to be used for oil absorption.



CONFIGURACIONES DE ENLACE DEL N, C, O EN LA SÍNTESIS DE NANOTUBOS DE CARBONO MULTICAPA DOPADOS CON NITRÓGENO (N-MWCNTS) EN CORRELACIÓN CON SU GRAFITIZACIÓN, MORFOLOGÍA Y PUNTO DE OXIDACIÓN

Roque Sánchez-Salas^{1*}, Florentino López-Urías¹, Beatriz Flores-Gómez¹, Emilio Muñoz-Sandoval¹

¹Departamento de Materiales Avanzados, IPICYT, Camino a presa San José 2055, Lomas 4a sección, San Luis Potosí 78216, México.

*Corresponding author: E-mail: s.s_roque@icloud.com

Short Abstract

En la síntesis de nanotubos de carbono por CVD son muy pocos los trabajos que buscan explicar desde un enfoque sistemático la caracterización del material sintetizado en diferentes zonas del reactor, por otro lado, comúnmente se emplea la llamada “hot zone” como el lugar idóneo de crecimiento de nanoestructuras sobre sustratos. En la primera parte de este estudio se sintetizó y caracterizó más de 50 muestras de nanotubos de carbono multicapa dopados con nitrógeno (N-MWCNT_x) vía CVD correspondientes a diferentes regiones de 1 cm de longitud a lo largo del reactor, después, se clasificaron y analizaron exhaustivamente por las técnicas SEM, XRD, TEM y HRTEM. Nuestros resultados muestran un perfil de evolución y los cambios de crecimiento del material en diferentes zonas del reactor. Se realiza un análisis de la variación de la masa, morfología, grafitización y cambios de fase de nanopartículas metálicas (Fe₃C, α-Fe, γ-Fe) encontradas en los nanotubos, además, se discute la relación del perfil del reactor posición-temperatura de la zona donde las muestras son sintetizadas [1, 2]

Siguiendo nuestro estudio sistemático de síntesis y caracterización de N-MWCNTs lo largo del reactor, ahora presentamos la segunda parte de la investigación teniendo como objetivo poder correlacionar los diferentes tipos de configuración de enlace del nitrógeno y sus porcentajes en cada muestra obtenidas en diferentes zonas a lo largo del reactor a fin de estudiar las propiedades electrónicas para eficientizar los procesos de catálisis a sabiendas que el tipo cuaternario y piridinico son más eficientes en las reacciones de óxido reducción (ORR) [3], se realizan análisis XPS en diferentes zonas del reactor, mostrando los tipos de configuraciones de enlace químico para el dopante nitrógeno, oxígeno y carbono en los nanotubos de carbono multicapa dopados con nitrógeno (N-MWCNT). Por otro lado, presentamos los resultados los análisis termogravimétricos en cada muestra recolectada y se elaboran mapas a lo largo del reactor que concatenan los diferentes resultados, este mapa puede tener una profunda influencia para aclarar el rol evolutivo de los elementos presentes que afectan directamente la morfología, nivel de grafitización, tipo de dopaje en función del perfil posición-temperatura del sistema.

[1] R. Sánchez-Salas, F. López-Urías, E. Muñoz-Sandoval, «Nitrogen-doped multiwalled carbon nanotubes: a study across the reactor,» 4th Nano Today Conference, vol. Dubai, p. NANO 2015_0833, December 6-10, 2015.

[2] R. Sánchez-Salas, F. López-Urías, E. Muñoz-Sandoval, «Nitrogen-doped multiwalled carbon nanotubes fabricated by chemical vapor deposition method: A study across the reactor, 15th International Conference on the Science and Applications of Nanotubes,» 15th International Conference on the Science and Applications of Nanotubes, Vols. 1 de %2Nagoya, Japan, pp. P-59, June 29-July 03, 2015.

[3] Kuanping Gong, Feng Du, Zhenhai Xia, Michael Durstock, Liming Dai, «Nitrogen-Doped Carbon Nanotube Arrays with High Electrocatalytic Activity for Oxygen Reduction,» Science, vol. 323, pp. 760-4, 2009.

A STUDY OF OXYGEN TRANSFER DURING PREPARATION OF GRAPHENE OXIDE USING THE MODIFIED HUMMERS METHOD

Camila Mora^{1*}, Ximena García¹, Ljubisa R. Radovic^{1,2}

¹Department of Chemical Engineering, University of Concepción, Concepción, Chile

²Department of Energy & Mineral Engineering, Penn State University, USA

*Corresponding author: camimora@udec.cl

The critical steps that involve oxygen transfer during the production of aqueous graphene oxide from graphite have not been analyzed systematically. Most studies focus on the effectiveness of the method used, and do not consider its mechanistic aspects. The popular Hummers method has been subjected to a series of experimental modifications, the proposal by Tour and coworkers [1] being the most notable one. It is based on a time-consuming utilization of a mixture of sulfuric and phosphoric acids, with potassium permanganate as an additional oxidizing agent: it takes ca. 1 h to mix all the reactants with graphite, plus an additional hour (at least) of reaction time, measured from the point when 35 °C is reached. We had found no significant differences in the amount of oxygen added for reaction times in the range 0.5-2 h. Furthermore, XRD results suggested that the graphene layers are completely separated because of the presence of oxygen functionalities between them, since acid is intercalated into the graphite layers facilitating oxidation and oxygen transfer. In the present study we report on the influence of potassium permanganate, because its addition appears to be crucial for the effectiveness of oxygen transfer.

Permanganate is added dropwise for controlled oxidant addition and surface functionalization. Two particle sizes of graphite (5 and 50 µm on average) are used and the oxygen transfer process is followed for different amounts of added permanganate (1-5 mass equivalents). The samples are analyzed using a battery of complementary techniques, including Raman spectroscopy, XRD, TGA, and SEM.

The results of this ongoing study indicate that significant amounts of oxygen are incorporated during the addition of permanganate, and confirm the importance of this step and its control for large-scale graphene oxide (and graphene) preparation. The progressive separation of graphene layers was confirmed. We also found that small amounts of permanganate react immediately upon contact with the carbonaceous surface. The particle-size-dependent evolution of functional group formation suggests also the importance of exposed surface area of the graphite particles.

[1] Marcano, D. C., D. V. Kosynkin, J. M. Berlin, A. Sinitskii, Z. Sun, A. Slesarev, L. B., Alemany, W. Lu and J. M. Tour (2010). "Improved Synthesis of Graphene Oxide." ACS Nano 4(8): 4806-4814.



SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF NANOCOMPOSITES MADE OF GRAPHENE OXIDE AND POLYMERIC HYDROGELS

Yesica PEREYRA¹, Horacio SALAVAGIONE², Rusbel CONEO RODRÍGUEZ¹,
Diego ACEVEDO¹, César BARBERO^{1,*}

¹Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas, Físicoquímicas y Naturales, Universidad Nacional de Río Cuarto, 5800, Río Cuarto, Argentina.

²Dept. Polymer Physics, Elastomers & Energy. CSIC-ICTP, C/ Juan de la Cierva. 3. 28006. Madrid, SPAIN.

*Corresponding author. E-mail: cbarbero@exa.unrc.edu.ar

Abstract

Here we present the preparation of new hydrogel nanocomposites containing graphene oxide (GO) in the polymer network. Nanocomposites of homopolymers from N-isopropyl acrylamide, acrylamide and from acrylamide and 2-hydroxyethylmethacrylate (HEMA) copolymers with 1%, 5% and 10% molar ratios are produced. The simplest nanocomposites preparation procedure includes a single step of GO dispersion in the monomers solution and the subsequent polymerization starting by the incorporation of a redox initiator. The texture of the nanocomposites was studied using scanning electron microscopy (SEM). The SEM images show that the surface was very compact, indicating that GO sheets were dispersed homogeneously in the polymer matrix. Characterization experiments demonstrated that the GO inside of the polymer network dismissed the swelling values. The incorporation of GO clearly increased the elasticity module, for all the synthesized nanocomposites. Also, the electrical conductivity of the materials increased as the applied compression force increased, and achieve a maximum value at 35.1mN. Moreover, the electrochemical properties of the hydrogels were evaluated by cyclic voltammetry and a rectangular shape of the curves at a scan rate of 50 mV/s was observed, indicating that the electrical charge and discharge response is highly reversible.

NEAR-INFRARED LASER MODULATES THE ELECTRICAL RESISTANCE OF ELECTRODES MADE FROM MULTI WALLED CARBON NANOTUBES

Juan BERNAL-MARTÍNEZ^{1*}, Rafael GODÍNEZ-FERNÁNDEZ¹, Manuel ROMÁN²
and Alfredo AGUILAR-ELGUEZABAL²

¹Biophysical Laboratory. Electrical Engineering Department, Universidad Autónoma Metropolitana Iztapalapa, C.P.09340, D.F., México

²Department of Engineering and Chemistry of Materials, Centro de Investigación y Materiales Avanzados S.C. CIMAV, C.P. 31109, Chihuahua, México.

*Corresponding author. E-mail: drjuanbernal@hotmail.com

Short Abstract

In this paper we provide experimental evidence to demonstrate that multi walled carbon nanotubes (MWCNTs) are sensitive to laser irradiation and this stimulus reduces systematically their intrinsic electrical resistance of these nanomaterials. MWCNTs were obtained by spray pyrolysis, functionalised by acidic treatment, dispersed in water solution and deposited on different surface materials such as polyvinylidene fluoride (PVDF) filters, bond papers and glass-coverslips. Scanning electron microscopy and confocal microscopy studies were done to evaluate the dispersion and topographic distribution of MWCNTs deposited on PVDF filters and on glass-coverslips, respectively. In addition, we measured the electrical resistance of MWCNTs in control conditions and when a continuous near infrared (nIR) laser beam at 650 nm was applied. MWCNTs showed a consistent value of electrical resistance depending on the amount of nanotubes applied. The average resistance of the MWCNTs on PVDF filter was as follows (in ohms): 23.78, 307.55 and 22750 at 1, 1:10 and 1:100 dilutions of stock solution (5mg/ml), respectively. After the application of nIR-laser, the electrode resistance was transiently reduced by approximately 10% to 45%. In addition, a small increase of temperature of (from 0.20 to 3.20 °C) was observed during laser irradiation. Because carbon nanotubes can be used for focalized hyperthermia and cancer-tumor ablation, we propose that it is necessary to study the sensitivity of MWCNTs to laser irradiation before they were synergistically applied in the biomedical field.



GALVANOTAXIS IN PARAMECIUM IS MODULATED BY FUNCTIONALIZED AND WATER-DISPERSABLE MULTI WALLED CARBON NANOTUBES

Juan BERNAL-MARTÍNEZ^{1*}, Rafael GODÍNEZ-FERNÁNDEZ¹,
and Alfredo AGUILAR-ELGUEZABAL²

¹Biophysical Laboratory. Electrical Engineering Department, Universidad Autónoma Metropolitana Iztapalapa, C.P.09340, D.F., México

²Department of Engineering and Chemistry of Materials, Centro de Investigación y Materiales Avanzados S.C. CIMAV, C.P. 31109, Chihuahua, México.

*Corresponding author. E-mail: drjuanbernal@hotmail.com

Short Abstract

Carbon nanomaterials, such as multi-walled carbon nanotubes (MWCNTs) may have low biocompatibility and toxic effect on living organisms from protozoan to mammalian. In this work we tested the possible toxic effects of MWCNTs on the living unicellular organism *Paramecium tetraurelia*. MWCNTs were obtained by spray pyrolysis, functionalised by acidic treatment and dispersed in water solution such as *Paramecium* extracellular solution made as follows: (in mM) KCl, 4, CaCl₂, 1, Tris-HCl, 1. First, we found that *Paramecium* survived after extracellular application of MWCNTs (from 0.01 to 0.5 mg/ml and from 3 min to 36 hrs). Second, it was observed that MWCNTs were incorporated inside the *Paramecium* in an identified food vacuole immediately they were applied in the extracellular bath. Finally, we observed that the physiological galvanotaxis response in *Paramecium* (cells are swimming forward to cathode after voltage application), it was inhibited in a time and a dose-dependent manner by MWCNTs. Our results suggest that *Paramecium* is a useful biological preparation for testing cytotoxicity of nanomaterials at unicellular level.

MULTI-WALLED CARBON NANOTUBES BIND TO THE CELL MEMBRANE AND DID NOT AFFECT MUSCARINIC AND L-GLUTAMATE RECEPTORS OF 1F HELIX ASPERSA NEURON

Juan BERNAL-MARTÍNEZ^{1*}, Rafael GODÍNEZ-FERNÁNDEZ¹,
and Alfredo AGUILAR-ELGUEZABAL²

¹Biophysical Laboratory. Electrical Engineering Department, Universidad Autónoma Metropolitana Iztapalapa, C.P.09340, D.F., México

²Department of Engineering and Chemistry of Materials, Centro de Investigación y Materiales Avanzados S.C. CIMAV, C.P. 31109, Chihuahua, México.

*Corresponding author. E-mail: drjuanbernal@hotmail.com

Short Abstract

In this paper we tested the cytotoxicity of multi walled carbon nanotubes (MWCNTs) on the ligand-gated ion channels present in invertebrate neurons of the garden snail *Helix aspersa*. MWCNTs were obtained and synthesized by spray pyrolysis and dispersed in water solution by using polyvinylpyrrolidone (PVP). First, we performed scanning electron microscopy studies to demonstrate that MWCNTs were totally dispersed in the aqueous Snail Ringer Solution (SRS). Then, these MWCNTs were applied to the cerebral ganglia of *Helix aspersa* and we observed that the nanotubes bind to the cell membrane of *Helix aspersa* neurons. Second, Intracellular electrophysiological experiments in the current clamp configuration, demonstrated that 1F *Helix aspersa* neuron responds to Carbachol and L-glutamate (L-glut) with a slow depolarization, associated with an increase of membrane conductance. Carbachol response correlates with the activation of M1-M3-like muscarinic ligand-gated membrane receptor whereas L-glut, is like a ionotropic L-glutamate receptor. Finally, we observed that MWCNTs applied on the extra cellular bath, at concentration up to 100 ug/ml, did not modify the depolarization activated by carbachol neither by L-glut. We conclude that the MWCNTs obtained by spray pyrolysis and tested in this work, are not toxic for nerve cells and did not affect the L-glut and muscarinic-ligand gated ion channels in excitable cells. Based on this, MWCNTs can be used as biocompatible scaffolds for cell growing and tissue engineering.



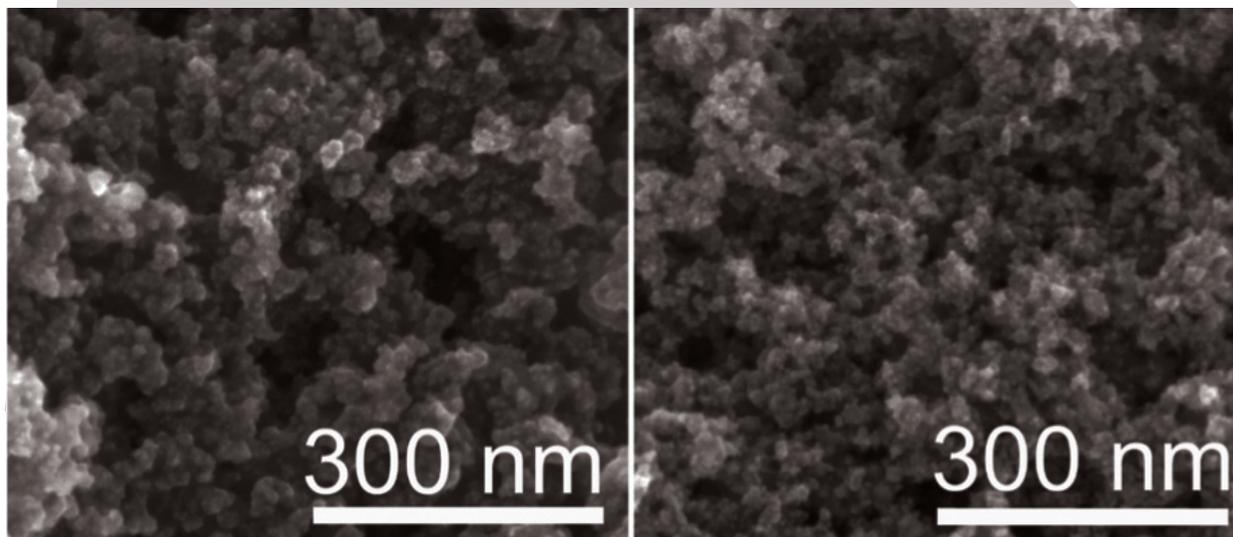
ESTUDIO DEL MATERIAL RESIDUAL DE LA SÍNTESIS DE NANOTUBOS DE CARBONO MULTICAPA DOPADOS CON NITRÓGENO FABRICADOS POR EL METODO DE DEPOSICIÓN QUÍMICA DE VAPOR

Gabriella Azuara-Tuexi¹, Juan Antonio Esparza Barraza¹, Beatriz Flores-Gómez¹, Florentino López-Urías¹, Emilio Muñoz-Sandoval^{1*}

¹División de Materiales Avanzados, IPICYT, Camino a presa San José 2055, Lomas 4a sección, San Luis Potosí 78216, México.

*Corresponding author. E-mail: ems@ipicyt.edu.mx

El método de deposición química de vapor que usamos en esta investigación se compone principalmente de tres partes: la parte en la cual las soluciones precursoras son nebulizadas; la parte en que la reacción química se efectúa para producir las nanoestructuras de carbono y la parte final donde los residuos se colectan. En este trabajo se realizaron 10 síntesis de nanotubos de carbono dopados con nitrógeno (NTC-DN) mediante el método de CVD y los materiales residuales se recogieron de cada una de las síntesis de tres lugares diferentes, a saber: i) de la parte final del tubo que está inmediatamente después del tubo de cuarzo donde se lleva a cabo la reacción química para el crecimiento de los NTC-DN; ii) del tubo refrigerante; y iii) de la trampa de acetona. Estas muestras se analizaron por difracción de rayos X, microscopía electrónica de barrido, microscopía electrónica de transmisión, espectroscopia Raman, espectroscopia de fotoelectrones de rayos X y análisis termogravimétrico (TGA). Las imágenes SEM (ver figura abajo) muestran que en la parte final del tubo de cuarzo se encontraron pequeñas estructuras con morfología esférica (figura izquierda). En esta parte, el diámetro de las nanoestructuras es de alrededor de 7 nm. Las muestras obtenidas en la trampa de acetona son también esféricas (figura derecha) y sus diámetros son aproximadamente de 5 nm. Estas estructuras contienen aproximadamente 30 y 40% de hierro, respectivamente. El contenido de nitrógeno es de alrededor de 4% en ambos casos, que es relativamente más grande que el contenido que se encuentra en el caso de NTC-DN. El uso de estas estructuras en procesos catalíticos podría ser muy importante debido a su tamaño y los elementos que la constituyen.



DEGRADACIÓN ENZIMÁTICA DE NANOTUBOS DE CARBONO DOPADOS CON NITRÓGENO

Gabriella Azuara-Tuexi^{1,2}, Florentino López-Urías², Mildred Quintana¹,
Emilio Muñoz-Sandoval^{2*}

¹Instituto de Física, Universidad Autónoma de San Luis Potosí, UASLP, Av. Manuel Nava #6, Zona Universitaria, C.P. 78290, San Luis Potosí, S.L.P. México

²División de Materiales Avanzados, IPICYT, Camino a presa San José 2055, Lomas 4a sección, San Luis Potosí 78216, México

*Corresponding author. E-mail: ems@ipicyt.edu.mx

En este trabajo se presenta el estudio de la respuesta de nanotubos de carbono dopados con nitrógeno (NTC-DN) y la enzima peroxidasa de rábano picante (PRP). Los NTC-DN fueron sintetizados por el método de deposición química de vapor (CVD) usando bencilamina como precursor de nitrógeno y carbono y ferroceno como precursor de las nanopartículas catalizadoras. Los NTC-DN se funcionalizaron mediante un procedimiento con ácidos. La PRP se activó usando un mediador fosfato salino y se añadió peróxido para mantenerla viva. Los NTC-DN se mezclaron con esta sustancia y se colectaron muestras cada 2 horas hasta un total de 24 horas. Las muestras de NTC-DN, antes y durante el tratamiento enzimático, se estudiaron mediante microscopía electrónica de transmisión, microscopía electrónica de barrido, espectroscopia Raman y espectroscopia de electrones fotoemitidos por rayos X. Los daños en los NTC-DN son evidentes desde las primeras 4 horas y se manifiestan al reducir el diámetro de los nanotubos y produciendo huecos en los tubos. Se observa que la degradación de los nanotubos aumenta con las horas de contacto con la HRP. Adicionalmente, se discuten los mecanismos de degradación.



CHARGE TRANSFER EXCITED STATES IN LIGHT-HARVESTING SYSTEMS BASED ON PORPHYRIN/SMARAGDYRIN AND FULLERENE/GRAPHENE

Tunna BARUAH, Rajendra R. ZOPE¹, Ember SIKORSKI¹,
Merlys BORGES-MARTÍNEZ², Gloria I. CÁRDENAS-JIRÓN^{2,*}

¹University of Texas at El Paso, USA.

²University of Santiago de Chile (USACH), CHILE.

*Corresponding author. E-mail: gloria.cardenas@usach.cl

The building of artificial light-harvesting systems for energy conversion constitutes an alternative for the generation of clean energies. Porphyrin and expanded porphyrin like smaragdyrin are compounds able to absorb at the visible light region, which allow the excitation of the more external electrons to higher energy levels and the charge transfer toward other systems. The latter giving account of the electron donor ability of these species. On the other hand, the nanocarbon structures like fullerene C₆₀ and graphene oxide are electron acceptor compounds due to their extended π -electron network.

Taking the qualities of both types of species, we studied the charge transfer excited states of porphyrin (smaragdyrin)-fullerene (graphene oxide) complexes. The calculations are performed using density functional theory (DFT) at the all-electron level using the Perdew-Burke-Ernzerhof exchange correlation functional. The charge transfer excited states are obtained by using the perturbative delta-SCF method. We also studied the characteristic excited states of porphyrin and smaragdyrin in the visible light region corresponding to Soret and Q bands by using time-dependent DFT.

The results predict that fullerene has a little effect on the absorption properties (Soret and Q band) of porphyrin/smaragdyrin, whereas graphene oxide shows an important rise in the intensity of the bands. The charge transfer in the excited states is favoured at longer wavelength for smaragdyrin-C₆₀ with respect to porphyrin-C₆₀. The replacement of C₆₀ for graphene oxide leads to charge transfer at shorter wavelength for both smaragdyrin/porphyrin but still occurs in the visible light region. The results suggest that all of the complexes show an energy conversion to charge transfer in the excited states.

Acknowledgements

GICJ thanks the financial support of CONICYT/Project FONDECYT 1131002 and USACH/DICYT for computational time provided. MBM thanks to CONICYT for providing a Doctorate fellowship.

SYNTHESIS OF MULTIWALLED CARBON NANOTUBES USING A VERY LOW FERROCENE CONCENTRATION

Grecia MARTÍNEZ^{1,4}, Haydee PACHECO^{2,4}, Rocío MORALES^{3,4},
Alejandro CORTÉS⁴, Florentino LÓPEZ⁴, Emilio MUÑOZ^{4*}

¹Universidad Tecnológica de Tulancingo Hidalgo, México.

²Universidad de las Américas Puebla, México.

³Instituto Tecnológico de Celaya, México.

⁴Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica, A.C., México

*Corresponding author. E-mail: ems@ipicyt.edu.mx

Short Abstract

In this work nitrogen-doped multiwall carbon nanotubes (N-MWCNTs) were synthesized by spray pyrolysis of solutions of ferrocene and benzylamine and using aerosol assisted chemical vapor deposition (AACVD) method. Three different solutions with 0.01, 0.1 and 0.5 wt% of ferrocene content in benzylamine were used. Several temperatures to N-MWCNTs growth were set, covering a temperature range of 700 – 900°C. Time of growth for carbon nanostructures was set of 40 min. Finally, N-MWCNTs synthesized were scraped from specific areas along-side the quartz tube. Thus, samples collected were characterized by scanning electron microscopy (SEM), transmission electron microscopy (TEM), X-ray diffraction (XRD) and Raman spectroscopy (RS). SEM images show N-MWCNTs with diameters of 64 – 300 nm. TEM images exhibits N-MWCNTs of coaxial-like shape and inside of carbon nanotubes it is possible to observe a bamboo shape with attached compartments. Analysis of XRD pattern exhibit the presence of graphite, iron carbide and alpha iron phases. In RS are observed the following bands: i) the D band placed around at a wave number of 1345 cm⁻¹, this band is related with the disorder in sp² hybridized carbon nanostructure and probably due to incorporation of nitrogen in the carbon network of nanotube, ii) the G band (1590 cm⁻¹) which is related with the graphitic order and the sp² hybridization make more intensity this peak; iii) the intensity of 2D structure (or G'-band) placed in 2698 cm⁻¹ correspond to second order vibration modes and it is associated to the purity of the carbon materials and iv) the D+G band also is a contribution from second order vibration modes.



TELAS DE CARBÓN ACTIVADO A PARTIR DE FIBRAS NATURALES DE YUTE Y HENEQUÉN

Dulce PARTIDA-GUTIÉRREZ¹, César NIETO-DELGADO¹, René RANGEL-MÉNDEZ^{1,*}

¹División de Ciencias Ambientales, Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica. Camino a la Presa San José 2055. Col. Lomas 4a sección CP. 78216. San Luis Potosí, México.

*Corresponding author. E-mail: rene@ipicyt.edu.mx

Las telas de carbón activado son un material adsorbente versátil, que presenta ventajas respecto a los materiales granulares, principalmente en una cinética de adsorción más rápida. Los materiales precursores utilizados para la formación de telas de carbón activado, generalmente son fibras de origen sintético, las cuales son activadas mediante metodologías estándar. Como una alternativa a dichos precursores, en este trabajo se propone por primera vez el uso de fibras naturales derivadas de plantas de henequén (*Agave fourcroydes*) y de yute blanco (*Corchorus capsularis*) para la generación de telas de carbón activado; las cuales tienen el potencial de ser utilizadas en procesos de tratamiento de efluentes líquidos y gaseosos. Para este estudio, telas prefabricadas a partir del tejido de fibras de yute y henequén fueron obtenidas a partir de productores nacionales. Las telas fueron seccionadas y activadas térmicamente en un horno rotatorio, explorando variables como la temperatura (400 - 800 °C), tiempo de activación (20 - 60 min) y naturaleza del agente activante (CO₂ y vapor de agua). Resultados preliminares, muestran que es posible generar telas de carbón activado con alta área específica a partir de ambos precursores, logrando obtener telas de hasta 800 m²/g. En pruebas representativas, las telas fueron evaluadas como adsorbente de compuestos orgánicos e inorgánicos en fase acuosa, obteniéndose capacidades de adsorción similares a la de materiales comerciales

ESTUDIO TEÓRICO Y EXPERIMENTAL DE LA ADSORCIÓN DE DIÓXIDO DE CARBONO SOBRE SWNT

Andrés A. GARCÍA BLANCO¹, Alberto G. ALBESA², Débora A. SOARES MAIA³,
Jhonny VILLARROEL-ROCHA¹, José L. VICENTE², and Karim SAPAG^{1*}

¹Laboratorio de Sólidos Porosos, INFAP, CONICET-Universidad Nacional de San Luis, Argentina

²INIFTA (Depto. de Química, Fac. Cs. Exactas, UNLP, CIC, CONICET), Argentina

³Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal do Ceará

*Corresponding author. E-mail: sapag@unsl.edu.ar

Short Abstract

Los nanotubos de carbono son materiales de amplio interés para el desarrollo de nuevas aplicaciones tecnológicas. Sus características dependen en gran medida de sus propiedades superficiales, que a su vez pueden ser modificadas mediante tratamientos químicos y térmicos. En este trabajo se estudió el efecto de tratamientos oxidativos con ácido nítrico y de un posterior tratamiento térmico, sobre las propiedades texturales de SWNT. Los materiales fueron caracterizados mediante adsorción de gases (N_2 , Ar y CO_2), análisis termo-gravimétrico, descomposición térmica programada (DTP) y calorimetría de adsorción de dióxido de carbono.

Se puso especial énfasis en el estudio de la adsorción de CO_2 sobre los materiales mencionados. Para ello, se complementaron los resultados experimentales con simulaciones de Monte Carlo en el Gran Canónico. De esta forma se pudo caracterizar el efecto que tienen los diferentes sitios de adsorción de los SWNT y la influencia de los grupos oxigenados superficiales en la adsorción de CO_2 sobre SWNT y SWNT funcionalizados.



CONTROL DE LA ADHESIÓN BACTERIANA A TRAVÉS DEL USO DE RECUBRIMIENTOS EN BASE A GRAFENO

Elsie Zurob¹, Marcela Wilkens¹, Francisco Montero²,
Ricardo Henríquez², Carolina Parra².

¹Laboratorio de Microbiología Básica y Aplicada, Universidad de Santiago de Chile.

²Departamento de Física, Universidad Técnica Federico Santa María, Avenida España 1680, Valparaíso, Chile.

La acumulación progresiva de microorganismos (biopelículas) sobre superficies sumergidas en ambientes acuáticos genera altos costos en diversos sectores productivos, tales como el naviero, el de generación de energía y el de la piscicultura. Actualmente, los métodos utilizados para prevenir la formación de estas biopelículas están basados en biocidas que causan un impacto negativo en el medio ambiente. Una solución alternativa para controlar la formación indeseada de estas biopelículas consiste en modificar la interacción superficie-microorganismo a la misma escala (nanoescala) en que ésta se produce [1].

En este trabajo, presentamos resultados sobre el efecto de recubrimientos de grafeno en la adhesión de bacterias obtenidas desde redes de cultivo acuícola en Chile. Se tomaron muestras de suspensiones bacterianas obtenidas en redes sumergidas frente a las costas de la ciudad de Castro, Región de Los Lagos. La formación de biofilm de cada una de estas muestras fue cuantificada mediante la técnica de tinción con cristal violeta para luego aislar las bacterias predominantes y evaluar su capacidad de producción de biopelículas. Mediante batería bioquímica tradicional, amplificación y secuenciación del gen 16SrDNA se identificó la cepa que presentó mejores resultados de adherencia (*Enterobacter Cloacae*), con la que se procedió a realizar estudios de adhesión sobre superficies de distintos materiales (vidrio y plástico) con y sin recubrimientos de grafeno. El nanomaterial fue crecido por deposición química en fase vapor (CVD), transferido sobre los materiales escogidos y caracterizado por microscopía de barrido electrónica (SEM) y espectroscopía Raman. Análisis preliminares de SEM y epifluorescencia mostraron evidencia de la modificación en la adhesión bacteriana a los materiales recubiertos con grafeno, cuyo origen podría ser atribuido al cambio en las propiedades electrostáticas y de energía de superficie introducido por el recubrimiento nanoestructurado.

[1] C. Parra et al. Journal of Nanobiotechnology 13, 82 (2015)

Ni-Mg/MWCNT AND Ni-Ca/MWCNT FROM THE CONTROLLED DRY METHANE REFORMING ON ACTIVATED CARBON-SUPPORTED Ni-BASED CATALYSTS IRRADIATION

Juan Matos^{1,*}, José R. Rangel-Méndez², Javier A. Arcibar-Orozco³

¹Biomaterials Department, Technological Development Unit, University of Concepción, Av. Cordillera, 2634, Parque Industrial Coronel, Concepción, Chile.

²Division of Environmental Sciences, Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica, C.P. 78216, San Luís Potosí, S.L.P., México

³Centro de Innovación Aplicada en Tecnologías Competitivas (CIATEC), Omega 201, Fracc. Ind. Delta, 37545 León, Guanajuato, México.

*Corresponding author. E-mail: j.matos@udt.cl

Short Abstract

Ultramicroporous activated carbon (AC) can be efficiently used as catalytic support for the homogeneous design of Ni-Mg/MWCNT and Ni-Ca/MWCNT from the dry methane reforming (DMR) under mild experimental conditions (650°C, 1atm) on AC-supported Ni-based catalysts. It was found that Ni-Mg catalyst showed the highest initial catalytic activity followed by Ni-Ca/AC catalyst. As expected, catalysts promoted with the most basic oxides such as MgO or CaO showed moderate deactivation after 24h reaction ascribed to the basic Lewis behavior which stabilizes Ni-based catalysts. It was found that AC plays a template role for the production of highly homogeneous diameter of the multi-walled carbon nanotubes (MW-CNT) with a mean diameter of about 15nm. The evolution of the MW-CNT from the inside of the activated carbon framework to the external surface was also verified and the stability of Ni-Mg/AC catalyst was attributed to an efficient distribution of Ni nanoparticles. By contrast, Ni-Ca/MWCNT showed preferentially a nanoribbon shape. In both composites, an increase in the BET surface area was verified after several hours of reaction indicating both a clean-up of the pores of the AC-support and an additional contribution to the surface area by means of the CNT formed during reaction.



A DFT STUDY OF NO₂ INTERACTION WITH ZIGZAG GRAPHENE EDGES: COMPARISON WITH NO AND O₂.

Álvaro IGLESIAS^{1,*}, Ljubisa RADOVIC^{1,2}

¹Departamento de Ingeniería Química, University of Concepcion.

²PennState University, USA.

*Corresponding author. E-mail: alvaroiglesiaschavez@gmail.com

Short Abstract

Carbon reactions are subjects of relevance in the nowadays interests; its properties as catalyst, support, adsorbent and particularly atmospheric-related issues are reasons to make it a central subject of study.

NO₂ has centered the attention of investigators due to his harmful consequences for environment. At this point, the decomposition of NO₂ over carbon has been the focus of several studies [1]. The present work studies the reaction between carbon with NO₂ and make comparison with O₂ and NO. Gaussian 03 software was used for determining intermediates and transition states via optimization of molecular geometry in the SCF energy surface of the carbon reactions. Carbon was simulated as a graphene cluster: with one zigzag, and two adjacent zigzag active sites. The method was B3LYP/6-31g(d), which is highly used in graphitic-like carbon studies. When single site is considered, the reaction proceeds in a different fashion for the three oxidants: while O₂ adsorbs in the form of C(O₂) and monomer NO irreversibly adsorbs in the N-down configuration, NO₂ can react whether to produce a C=O functional group in a practically barrierless way, leaving a desorbed NO, which is the typical result in the interaction of NO₂ with carbon at even low temperatures, or to produce a C-NO₂ complex. When two single sites are available, the different structures studied conduce all to the formation of C-NO and C=O, leaving the same fate of those sites occupied by a single NO molecule and dual zigzag site with oxygen. Then, there is a necessity of a second order reaction to explain the formation of C(O₂) reported by authors is studied [2], and efforts were made to replicate some of them [3]. The reaction of C=O with NO₂ results in the formation of C(O₂) molecular group, same as O₂ and NO-dimer reactions; however, the Gibbs free energy of the reaction indicates close equilibrium -1.0 kcal/mol, while the adsorption Gibbs energy barrier is a function of the nature of the carbon attacked.

When two adjacent C=O functional groups are present in the carbon edge, the adsorption activation energy is highly reduced to 23,6 kcal/mol, while the reaction energy decreases only to -1,7 kcal/mol. An exploratory topic is analysed in order to understand the fate of the C-NO_x species: the interaction of the absorbed species with adjacent C-H carbon atom. We have found that the most stable species are those in which H atom migrates to the carbon atom between C=X and C=O resulting species, where X is NO and O atoms from the respective oxidants. Even more, adsorption of O₂ over a single zigzag site results in a more exergonic and less demanding process than the rearrangement to a 7-Oxygenated ring [4].

Though more insights have been made in the reactions of graphene edges with O₂, NO and NO₂, the question is still present in the study: Why is NO₂ more reactive than O₂ and NO and how they are related in the experimental evidence of C(O₂) formation?

[1] B. R. Stanmore, V. Tschamber y J.-F. Brilhac, «Oxidation of carbon by NO_x, with particular reference to NO₂ and N₂O» Fuel, n° 87, pp. 131-146, 2008.

[2] Xiang Gao, Shaojun Liu, Yang Zhang, Zhongyang Luo, Mingjiang Ni, Kefa Cen, «Adsorption and reduction of NO₂ over activated carbon at low temperature» Fuel Processing Technology, n°92, 139-146, 2011.

[3] H. Muckenhuber y H. Grothe, «A DRIFTS study of the heterogeneous reaction of NO₂ with carbonaceous materials at elevated temperature» Carbon, n° 45, pp. 321-329, 2007.

[4] A. M. Oyarzún, A. J. A. Salgado-Casanova, X. A. García-Carmona y L. R. Radovic, «Kinetics of oxygen transfer reactions on the graphene surface: Part I. NO vs. O₂» Carbon, n° 99, pp. 472-484, 2016

STRUCTURAL ELECTRONIC AND OPTICAL PROPERTIES OF BIPHENYLENE AND NITROGENATED HOLEY GRAPHENE NANOTUBES

Raúl GUERRERO, Walter ORELLANA*

Departamento de Ciencias Físicas, Universidad Andres Bello, Santiago, Chile.

*Corresponding author. E-mail: worellana@unab.cl

Graphene is a single-atom-thick array of hexagonal units of sp^2 -bonded carbon atoms with C-C bond distance of about 0.142 nm, which exhibits superior electronic and thermal conductivity as well as extraordinary strength. In its pristine form, graphene is a gap-zero semiconductor, imposing limitation for its use in electronic devices like transistors. Many approaches have tried to create nonzero bandgap graphene-like materials that preserve the structural strength. Indeed, a new class of these materials have been recently proposed, namely biphenylene carbon (BPC) sheets, which is predicted to be a semiconductor with a bandgap energy $E_g = 1.2$ eV [1,2]. In Addition, Mahmood *et al.* have synthesized nitrogenated holey graphene (NHG) [3,4], which is also a two-dimensional structure that can be efficiently synthesized via simple wet-chemical reactions, as confirmed with various characterization techniques, including scanning tunneling microscopy. NHG shows an experimental bandgap of $E_g = 1.96$ eV.

In this work we investigate the stability, electronic and optical properties of BPC and NHG nanotubes (constructed by rolling up a single sheet), using *ab-initio* calculation based on the density functional theory and time-depending density matrix perturbation theory [5]. Our results show that BPC and NHG nanotubes are stable, preserving the semiconducting properties. The NHG nanotube spectrum shows a large optical absorption between 400 to 800 nm, that is, in the entire visible range. On the other hand, the BPC spectrum shows a good absorption in near UV and blue region (250 to 400 nm), however, with a much lower intensity. The electronic band structure of BPC and NHG nanotubes shows bandgap energies of 0.52 and 1.60 eV, respectively. According to our results, these nanotubes would exhibit good optical absorption properties with promising application as light harvesting materials for photovoltaic.

[1] G. Brunneto *et al.* J. Phys. Chem. C 116, 12810 (2011).

[2] M. De La Pierre, P. Karamanis, J. Baima, J. Phys. Chem. C 117, 2222 (2013).

[3] J. Mahmood *et al.*, Nat. Commun, 6, 6486 (2015).

[4] J. Kang, S. Horzum, F. M. Peeters, Phys. Rev. B 92,195419 (2015).

[5] D. Rocca *et al.*, Chem. Phys. Lett. 475, 49 (2009).



EVALUACIÓN FÍSICA Y QUÍMICA DE LOS RESÍDUOS MADERABLES DE PINO CON FINES DENDROENERGÉTICOS

Rocío ORIHUELA-EQUIHUA¹, Jesús Salvador AYALA-TORRES², Artemio CARRILLO-PARRA³,
Francisco MÁRQUEZ-MONTESINO⁴, José René RANGEL-MÉNDEZ⁵,
Fermín CORREA-MÉNDEZ⁶, José Guadalupe RUTIAGA-QUIÑONES¹

¹Facultad de Ingeniería en Tecnología de la Madera, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, México.

²Departamento de Ingenierías Química y Bioquímica, Instituto Tecnológico de Durango, México.

³Facultad de Ciencias Forestales, Universidad Autónoma de Nuevo León, México.

⁴Facultad de Ciencias Técnicas, Universidad de Pinar del Río, Cuba.

⁵Institutot Potosino de Investigación Científica y Aplicada, A. C., México.

⁶Desarrollo Sustentable, Tecnologías Alternativas, Universidad Intercultural Indígena de Michoacán, México.

*Corresponding author. E-mail: rutiaga@umich.mx

Short Abstract

En el complejo industrial de la Comunidad Indígena de Nuevo San Juan Parangaricutiro, ubicada en el estado en Michoacán, México, se procesan maderas de coníferas y de latifoliadas y se ha estimado que por año se generan aproximadamente 7,063 m³ de subproductos forestales. Localmente estos residuos generados se usan como fuente de energía directa, tanto en ladrilleras de la región, como en la planta resinera de la misma empresa. Además, también se usan para la producción de composta y como fertilizantes en huertas de aguacate de esa zona. Sin embargo, es necesario realizar estudios para caracterizar estos residuos con la finalidad de determinar si cumplen con las características y propiedades para ser usados en la elaboración de biocombustibles densificados. Así, el objetivo del presente trabajo es la evaluación física y química de los residuos maderables de *Pinus spp* generados en el aserradero, astilladora y taller de secundarios de la empresa y elaborar briquetas. Los materiales de estudio se recolectaron en el Complejo Industrial de la Comunidad Indígena de Nuevo San Juan Parangaricutiro, en el estado de Michoacán. Los residuos se tomaron del aserradero, de la astilladora y del taller de secundarios. Se determinó la humedad inicial del material al salir del proceso y después de haberse dejado secar al aire libre. En el material lignocelulósico seco al aire libre se determinó su densidad a granel, granulometría, pH, contenido de cenizas, el contenido de sustancias extraíbles, mediante extracción sucesiva con solventes de polaridad creciente, y en el material libre de extraíbles, se determinó el contenido de lignina y de holocelulosa. Las cenizas de cada material se analizaron mediante espectroscopía de emisión atómica acoplada a plasma. Las briquetas se elaboraron probando tres temperaturas (60, 80 y 100°C), con 30 segundos de prensado y 15 MPa. En las briquetas se determinó la densidad, resistencia a la compresión longitudinal y horizontal. Los resultados obtenidos muestran la posibilidad de utilizar los diferentes residuos maderables obtenidos de los tres procesos de transformación mecánica para la elaboración de biocombustibles densificados y para carbón activado.

EVALUACIÓN FÍSICA Y QUÍMICA DE LOS RESÍDUOS MADERABLES DE ALNUS Y ENCINO CON FINES DENDROENERGÉTICOS

Rocío ORIHUELA-EQUIHUA¹, Jesús Salvador AYALA-TORRES², Artemio CARRILLO-PARRA³, Francisco MÁRQUEZ-MONTESINO⁴, José René RANGEL-MÉNDEZ⁵, Fermín CORREA-MÉNDEZ⁶, José Guadalupe RUTIAGA-QUIÑONES¹

¹Facultad de Ingeniería en Tecnología de la Madera, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, México.

²Departamento de Ingenierías Química y Bioquímica, Instituto Tecnológico de Durango, México.

³Facultad de Ciencias Forestales, Universidad Autónoma de Nuevo León, México.

⁴Facultad de Ciencias Técnicas, Universidad de Pinar del Río, Cuba.

⁵Institutot Potosino de Investigación Científica y Aplicada, A. C., México.

⁶Desarrollo Sustentable, Tecnologías Alternativas, Universidad Intercultural Indígena de Michoacán, México.

*Corresponding author. E-mail: rutiaga@umich.mx

Short Abstract

En las actividades relacionadas con los procesos de extracción de madera del bosque y su transformación mecánica, se generan grandes volúmenes de residuos. Una estimación indica que esta industria forestal de transformación y elaboración secundaria de la madera genera de 20 a 30% de subproductos, partiendo de la materia prima originalmente procesada. En el estado de Michoacán, México, la Comunidad Indígena de Nuevo San Juan Parangaricutiro, procesa maderas de latifoliadas y de coníferas, generando alrededor de 7,063 m³ por año de subproductos forestales. Si bien es cierto que parte de estos sub productos se utilizan en la región para producir compostas para las huertas de aguacate de esa zona y que la misma comunidad indígena los utiliza para generar energía calorífica en su planta resinera, y que también se usan como fuente de energía directa en ladrilleras de la región, es necesario llevar a cabo estudios tendiente a caracterizar estos materiales lignocelulósicos para conocer sus características y propiedades y poder definir su posible uso como biocombustibles densificados. De esta manera, el objetivo planteado en el presente trabajo es la evaluación física y química de los residuos maderables de *Alnus acuminata* y de *Quercus* spp generados en la astilladora del complejo industrial de dicha comunidad indígena y elaborar briquetas. Los subproductos maderables se recolectaron en el Complejo Industrial de la Comunidad Indígena de Nuevo San Juan Parangaricutiro, en el estado de Michoacán. Los residuos se tomaron de la astilladora. Se determinó la humedad inicial de los materiales al salir del proceso y después de haberse dejado secar al aire libre. En los subproductos maderables secos al aire libre se determinó su densidad a granel, granulometría, pH, contenido de cenizas, el contenido de sustancias extraíbles, mediante extracción sucesiva con solventes de polaridad creciente, y en el material libre de extraíbles, se determinó el contenido de holocelulosa y de lignina. Las cenizas de cada madera se analizaron mediante espectroscopía de emisión atómica acoplada a plasma. Las briquetas se elaboraron probando tres temperaturas (60, 80 y 100°C), con 30 segundos de prensado y 15 MPa. En las briquetas se determinó la densidad, resistencia a la compresión longitudinal y horizontal. Los resultados obtenidos indican la posibilidad de utilizar los diferentes residuos maderables obtenidos de la astilladora para la elaboración de biocombustibles densificados, sin embargo, por la proporción de corteza presente en los materiales, su uso para la obtención de carbón activado pudiera estar limitado.



EFFECTO DE LA OXIDACIÓN QUÍMICA DE BIOCARBONES PARA SU APLICACIÓN EN ELECTRODOS DE DEFCS Y SUPERCONDENSADORES

Elen LEAL DA SILVA^{1,*}, Andrés CUÑA^{1,2}, Nestor TANCREDI²,
Sandro CAMPOS AMICO³, Célia MALFATTI¹

¹LAPEC/PPGE3M, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Brasil.

²Cátedra de Fisicoquímica, DETEMA, Facultad de Química, Universidad de la República, Uruguay.

³LAPOL/DEMAT, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Brasil.

*Corresponding author. E-mail: elenlealdasilva@gmail.com

Short Abstract

Las celdas de combustible de etanol directo (DEFCS) basadas en la electro-oxidación constituyen un sistema alternativo de conversión de energía. Por otro lado, los supercondensadores son dispositivos electroquímicos con gran potencial para uso en el almacenamiento de energía eléctrica. Los materiales de carbono, son los materiales más utilizados para electrodos de supercondensadores y como soportes de catalizadores en ánodos de las DEFCS, ya que pueden satisfacer muchos de los requisitos para estas aplicaciones: alta superficie específica, porosidad abierta, alta conductividad, estabilidad electroquímica y costo moderado. En los últimos años, ha sido reportado el uso de biomasa como precursor para la obtención de carbones (biocarbones) con aplicación en supercondensadores y DEFCS, mostrando buenos resultados. Al igual que con otros tipos de carbones, la química superficial de los biocarbones puede ser modificada, por ejemplo mediante tratamiento oxidativo con ácido nítrico, con el fin de introducir grupos funcionales oxigenados y/o nitrogenados. Algunos de estos grupos funcionales pueden contribuir a aumentar la capacidad eléctrica total del electrodo en un supercondensador mediante reacciones pseudocapacitivas. Estos grupos funcionales pueden tener además, diferentes efectos en el grado de dispersión y/o aglomeración de las nanopartículas de catalizador cuando se utiliza este material de carbono como soporte en la síntesis de electrocatalizadores.

En este trabajo se preparó un carbón activado a partir de madera de *E. grandis* utilizando $ZnCl_2$ como agente activante (aBC). Con el fin de aumentar el contenido de grupos funcionales superficiales se preparó la muestra ox-aBC a partir de la muestra aBC mediante oxidación química con una solución de ácido nítrico. Los materiales de carbono preparados fueron analizados químicamente mediante análisis elemental y espectroscopía infrarroja con transformada de Fourier (FTIR), y análisis textural mediante isoterma de adsorción/desorción de nitrógeno a 77 K. Ambos materiales fueron utilizados como soporte de nanopartículas de Pt en electrocatalizadores para la electro-oxidación de etanol. También fueron utilizados como materiales de electrodos para supercondensadores. Las características químicas, texturales, estructurales y morfológicas de los materiales preparados fueron correlacionadas con el comportamiento electroquímico de estos en las aplicaciones mencionadas.

Los biocarbones aBC y ox-aBC mostraron similares superficies específicas asociadas a microporosidad, alcanzando un valor de hasta $831 \text{ m}^2 \text{ g}^{-1}$ para la muestra aBC. El tratamiento oxidativo con ácido nítrico aumentó el contenido de los grupos funcionales oxigenados y nitrogenados superficiales tales como grupos quinona, carboxílicos y nitro. Este tratamiento no modificó apreciablemente las características texturales del biocarbón tratado. A partir de las imágenes obtenidas mediante microscopía electrónica de transmisión (TEM) de los electrocatalizadores preparados, pudo comprobarse que estos grupos funcionales tienen un claro efecto sobre el grado de dispersión y la aglomeración de las nanopartículas de Pt sobre el soporte carbonoso.

El contenido de grupos funcionales oxigenados también tiene un marcado efecto sobre el comportamiento del biocarbón como electrodo de supercondensadores, aumentando la capacidad eléctrica total mediante fenómenos pseudocapacitivos, pero con un efecto negativo en la resistencia total y el tiempo de respuesta de la célula electroquímica.

PREPARACIÓN Y CARACTERIZACIÓN DE COMPUESTOS NiO/ CARBÓN HIDROTHERMAL PARA SU USO COMO ELECTRODOS DE SUPERCONDENSADORES

Carmina REYES PLASCENCIA^{1,2*}, Nestor TANCREDI^{1,2}, Jossano S. MARCUZZO³,
Mauricio R. BALDAN³, Andrés CUÑA^{1,2}

¹Cátedra de Fisicoquímica, DETEMA, Facultad de Química, Universidad de la República, Uruguay.

²Área de Energías Renovables, Instituto Polo Tecnológico de Pando, Facultad de Química, Universidad de la República, Uruguay.

³Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais (INEP), Brasil.

*Corresponding author. E-mail: carmina@fq.edu.uy

Short Abstract

La demanda de dispositivos para almacenamiento de energía, ha impulsado el desarrollo de nuevos materiales para su aplicación como electrodos de supercondensadores. En la actualidad, uno de los principales desafíos es aumentar la densidad de energía acumulable por los electrodos, manteniendo una elevada potencia de carga y descarga del dispositivo. En este sentido, publicaciones científicas recientes han demostrado que los materiales compuestos del tipo óxido metal de transición/carbón, por ejemplo el NiO/carbón, son una alternativa prometedora como electrodos de supercondensadores.

Una técnica reciente para la transformación de biomasa es la licuefacción hidrotérmica (LHT). La LHT es un proceso en medio acuoso a temperatura moderada (250 - 550 °C) y alta presión (5 - 20 MPa) usado para la producción de biocombustible líquido conocido como biocrudo. En este proceso también se produce una fase gaseosa compuesta de hidrocarburos de bajo peso molecular, H₂, CO y CO₂ y una fase sólida rica en carbono llamada carbón hidrotermal (CHT).

En este trabajo se preparó un compuesto óxido de níquel/carbón hidrotermal (NiO/CHT) para su uso como electrodo de supercondensadores. La preparación del compuesto NiO/CHT se realizó en un reactor por lotes Parr 4575 con agitación constante, a partir de madera *E. Globulus* y una sal de níquel. El NiO/CHT fue caracterizado mediante análisis elemental, espectroscopía de fotoelectrones emitidos por rayos X (XPS), difracción de rayos X (DRX), análisis termogravimétrico (TG), y análisis textural mediante isoterma de adsorción-desorción de nitrógeno a 77 K.

Para la caracterización de los compuestos en cuanto a su performance como electrodos de supercondensadores, se prepararon electrodos a partir de una mezcla del compuesto NiO/CHT con un agente aglomerante. Esta mezcla fue depositada sobre una barra cilíndrica de grafito con un área de 0.26 cm². Con este electrodo se realizaron medidas electroquímicas (ciclovoltametrías y curvas galvanostáticas de carga-descarga) en tres electrodos, utilizando una solución acuosa de KOH 6 mol L⁻¹ como electrolito.

Los resultados de DRX, TG y análisis textural, demuestran que mediante licuefacción hidrotérmica de madera se consiguió preparar un compuesto NiO/CHT con carga de óxido metálico y área superficial específica adecuadas. Las medidas electroquímicas demostraron un aumento significativo de la capacidad eléctrica específica del material debido a reacciones pseudocapacitivas que involucran al NiO. En base a estos resultados, se concluye que el NiO/CHT preparado en este trabajo tiene un futuro prometedor en cuanto a su uso como electrodo de supercondensadores.



METHANE HYDRATE FORMATION IN MODEL CARBON MATERIALS

Mirian Elizabeth CASCO^{1,*}, Lars BORCHARDT², Joaquín SILVESTRE-ALBERO¹

¹Laboratorio de Materiales Avanzados, Universidad de Alicante, España.

²Institute for Inorganic Chemistry, Technische Universität Dresden, Germany.

*Corresponding author. E-mail: mirian.casco@ua.es

Short Abstract

Methane hydrate nucleation and growth in porous model carbon materials illuminates the way towards the design of an optimized methane storage technology. High-pressure methane adsorption studies on pre-humidified carbons with well-defined and uniform porosity show that methane hydrate formation in confined nanospace can take place at relatively low pressures, even below 3 MPa CH₄, depending on the pore size and the adsorption temperature. Methane hydrate nucleation and growth is highly promoted at temperatures below the water freezing point, due to the promoted methane diffusion in ice. Water-to-hydrate yield increases with an increase in the pore size up to an optimum methane storage capacity for the 25 nm pore size model-carbon, with a 173% improvement in the adsorption capacity as compared to the dry sample. Synchrotron X-ray powder diffraction measurements (SXRPD) confirm the presence of methane hydrates with a SI structure, in close agreement with natural hydrates.

Acknowledges

Federal Ministry of Education and Research (Bundesministerium für Bildung und Forschung, BMBF) for support of the Mechanocarb project (award number 03SF0498). MINECO (project MAT-2013-45008-p) and Generalitat Valenciana (PROMETEOII/2014/004).

SUCCESSFUL APPLICATION OF A COMMERCIAL CATIONIC SURFACTANT MIXTURE (BENZALKONIUM CHLORIDE) AS POROSITY STABILIZER IN POROUS CARBONS FABRICATION

Luciano TAMBORINI¹, Miriam CASCO², Paula. MILITELLO¹,
Joaquín SILVESTRE-ALBERO², Cesar BARBERO^{1,*}, Diego ACEVEDO¹

¹Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas, Físicoquímicas y Naturales, Universidad Nacional de Río Cuarto, 5800, Río Cuarto, Argentina.

²Laboratorio de Materiales Avanzados, Departamento de Química Inorgánica, Universidad de Alicante, Apartado 99, E-03080 Alicante, España.

*Corresponding author. E-mail: cbarbero@exa.unrc.edu.ar

Abstract

Porous carbons (BSPCs) were obtained by carbonization of resorcinol-formaldehyde gels prepared in the presence of a mixture of cationic surfactants (benzalkonium chloride) which act as porosity stabilizer. The stabilizing effect of a cationic surfactant on the sol-gel nanostructure allows maintaining the porosity of the gels during conventional air drying. The stabilizing effect simplifies the production of porous carbon by making unnecessary the use complex drying procedures (e.g. supercritical drying), cumbersome solvent exchanges, and long curing times. The application of an inexpensive industrial grade surfactant mixture (benzalkonium chloride) as porosity stabilizer allows obtaining porous carbons with well-developed micro and mesoporosity at low cost. The morphological and textural properties of the BSPCs were studied by scanning electron microscopy and nitrogen physisorption isotherms. The BSPCs present large specific surface areas (up to 645 m²/g) containing mesopores and micropores. The pore distribution and morphology depends on the monomer (resorcinol) to stabilizer (benzalkonium chloride) ratio. The carbonization process of BSPCs was evaluated by TGA analysis. The stabilizer and non-carbon elements (hydrogen and oxygen) are only eliminated during pyrolysis at temperature above 600 °C. Cyclic voltammetry and electrochemical impedance spectroscopy were employed to understand the role of pore size and distribution on the electrochemical performance of BSPCs. The BSPCs exhibit a large specific capacitance (up to 165 F/g) with low charge transfer resistance due to the pores, making it suitable as an active material for fast supercapacitor applications.



NITROGEN INCORPORATION ON LIGNIN XEROGELS WITH A REACTIVE TRIAZINE

Chris D. Castro^{1,*}, German Quintana¹, María T. Izquierdo²

¹Grupo Pulpa y Papel, Facultad de Ingeniería Química, Universidad Pontificia Bolivariana, Circular 1No 70-01, Medellín 050031, Colombia

²Instituto de Carboquímica, ICB-CSIC. c/Miguel Luesma, 4. 50018 Zaragoza, España.

*Corresponding author. E-mail: chrisd.castrog@upb.edu.co

Short Abstract

Carbon gels have been widely studied for their interesting properties such as high surface area, controlled porous structure, low bulk density, electric conductivity, etc., which make them suitable for several applications such as catalyst support, insulator, electrode for supercapacitors, fuel cells, etc. Currently it has been demonstrated that new, cheaper precursors, as lignin, can be used keeping their textural properties, also normal convection drying, and chemical activation helps to reduce costs. Cyanuric chloride is a reactive triazine employed in organic synthesis, but rarely used as nitrogen source in doping carbon materials. The objective of this work is to evaluate nitrogen incorporation with cyanuric chloride on lignin xerogels and investigate the effect of phosphoric acid activation on porosity and surface functionalities.

Xerogels were prepared replacing Resorcinol for Lignin at certain percentages (0, 13 and 27 %) and changing catalyst doses (RL/C from 90 to 197). Nitrogen was introduced onto the samples before activation by immersing organic gels into a cyanuric chloride saturated solution. Activation was carried out with phosphoric acid with an acid: xerogel mass ratio of 1:1. All materials were characterized by N₂ adsorption at -196 °C, temperature programmed desorption (TPD-MS) in an argon flow rate of 30 ml/min and with a heating rate of 10 °C/min up to 1100 °C, elemental and proximate analysis. X-ray photoelectron spectroscopy was used to characterize one of the samples.

N₂ isotherms for lignin xerogels are type IV and type II depending on lignin and catalyst amounts. When N-doping process with cyanuric chloride was carried out, the pore blocking is high causing the decrease on S_{BET}. After phosphoric acid activation, all N₂ isotherms were type I; in most cases, lignin addition increases micropore and mesopore volume. In general, the doped samples have lower S_{BET} and micropore volume, V_{mic} DR, but mesopore volume, V_{meso} BJH increases. Nitrogen incorporation was promoted when lignin was added, especially when lignin organic xerogels have pores larger than 20 nm, reaching values up to 7.3 % of nitrogen. The quantification of nitrogen by XPS was 7.1 % with similar distribution among pyridonic-N or pyrrolic-N (N5), pyridinic-N (N6) and quaternary-N (NQ) groups.

EFFECTO DE LAS CONDICIONES DE REACCIÓN EN LOS CARBONIZADOS DE LA PIRÓLISIS DE MADERA ACACIA EN UN HORNO IR

Hernández Andrés Camilo¹, Buitrago-Sierra Robison², López Diana^{1*}

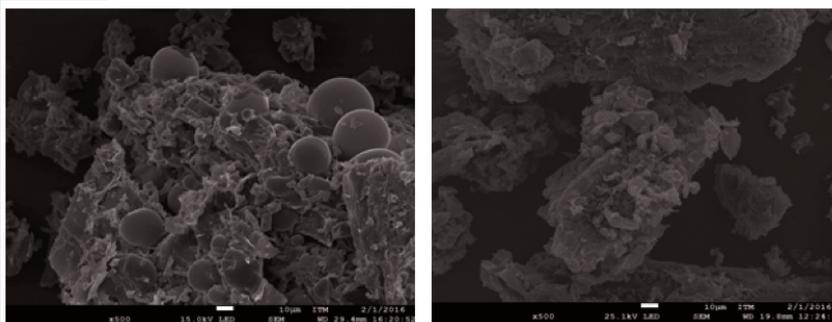
1. Química de Recursos Energéticos y Medio Ambiente, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Instituto de Química, Universidad de Antioquia, Calle 70 No. 52-21, Medellín, Colombia

2. Instituto Tecnológico Metropolitano (ITM), Medellín, Colombia

*Corresponding author. E-mail: diana.lopez@udea.edu.co

Resumen

La optimización de los procesos enfocados a la eficiencia energética para la conversión de biomasa, son de máximo interés para hacer frente a los problemas principalmente medioambientales, relacionados con el uso de combustibles fósiles en todo el mundo. Dentro de los procesos termoquímicos para la conversión de biomasa, se encuentra la pirólisis que es una descomposición térmica que se realiza bajo una atmósfera inerte o no oxidante, para producir una fracción líquida (bio-aceite), una fracción gaseosa y otra sólida. El control de las condiciones de pirólisis es de gran importancia debido a que la distribución de los productos dependerá de variables como la velocidad de calentamiento, temperatura de isoterma, tamaño de partícula, etc. De esta manera, se desarrollaron experimentos basados en el estudio de los carbonizados, que evidenciarán la importancia del control de los parámetros de reacción. En este trabajo, los experimentos de pirólisis se realizaron en un horno infrarrojo ULVAC-RIKO RHL-E44VHT a tres temperaturas de isoterma, 400°C, 500°C y 600°C; bajo dos tipos de atmósfera, N₂, CO₂ y tres diferentes velocidades de calentamiento, 8000°C/min, 100°C/min y 10°C/min. Los carbonizados obtenidos fueron caracterizados por análisis elemental (CHNO), área superficial BET y microscopía electrónica de barrido (SEM). De acuerdo a los resultados de la composición elemental de los carbonizados, no hay una variación significativa de esta con respecto a la velocidad de calentamiento, temperatura de isoterma y tipo de atmósfera empleada para realizar la pirólisis; sin embargo, al examinar la morfología y los resultados de las medidas de área superficial, puede evidenciarse que hay cambios relevantes en la porosidad y morfología de los carbonizados de acuerdo a la variación de las condiciones de pirólisis. Así, a una mayor velocidad de calentamiento hay un aumento del área superficial y al modificar el tipo de atmósfera puede evidenciarse cambios significativos en la apariencia de los carbonizados (ver micrografías). Esta variación en la morfología de los carbonizados, puede deberse a la mayor capacidad calorífica (C_p) que tiene el CO₂ frente al N₂, ocasionando que en el intermedio pseudo-plástico que se forma durante la reacción de pirólisis en el carbonizado se presente un efecto de enfriamiento ocasionando que no se formen las cenizas-esferas, las cuales se observaron cuando se trabajó en atmósfera de N₂.



Micrografía SEM de dos carbonizado obtenidos a 500°C con N₂(izquierda) y CO₂(derecha) a una misma velocidad de calentamiento

AGRADECIMIENTOS

- Los autores agradecen al "Departamento Administrativo de Ciencia, Tecnología e Innovación"- COLCIENCIAS a través del programa "Investigación e Innovación en Combustión Avanzada de Uso Industrial", código N° 1115-543-31906 contrato N° 0852-2012.
- Los autores agradecen al laboratorio de microscopía del Instituto Tecnológico Metropolitano ITM.



EVALUACIÓN DE LA INCLUSIÓN DE LIGNINA EN LA PREPARACIÓN DE XEROGELES DE CARBONO POR EMULSIÓN INVERSA PARA ELECTRODOS DE SUPERCONDENSADORES

Giovanna DIOSSA^{1,2}, Sara RUIZ¹, Chris D. CASTRO², Zulamita ZAPATA-BENABITHE^{1*}, Germán QUINTANA²

¹Grupo de Energía y Termodinámica, Facultad de Ingeniería Química, Universidad Pontificia Bolivariana, Circular 1 No 70-01, Medellín 050031, Colombia.

²Grupo Pulpa y Papel, Facultad de Ingeniería Química, Universidad Pontificia Bolivariana, Circular 1 No 70-01, Medellín 050031, Colombia.

* Corresponding author. E-mail address: zulamita.zapata@upb.edu.co

Resumen Corto

La lignina es conocida por ser un excelente precursor de carbón activado y bio-adsorbente gracias a su compleja estructura polimérica de alto peso molecular y a la presencia de diferentes grupos funcionales de alta densidad electrónica.

En este proyecto se prepararon xerogeles de carbono orgánicos (XCO) a partir de resorcinol (R) y formaldehído (F) funcionalizados con lignina (L), los cuales posteriormente se activaron química y físicamente y se evaluó su desempeño como electrodos de supercondensadores. Los XCO se prepararon por emulsión inversa, ya que es una alternativa para la preparación de materiales de baja densidad a nivel industrial, debido a que se pueden producir mediante un proceso semi-continuo, tiempos más cortos de síntesis, equipos de bajo costo, obtención de polvos sueltos y moldeado rentable.

Los XCO se prepararon con 0, 22 y 27 %wt/wt de L/(L+R), 60 °C y 400 rpm, utilizando como solvente ciclohexano y surfactante Span 80 y secadas al vacío. Los XCO0 y XCO22 presentaron una forma microesférica con formación de clusters, mientras que el sol-gel XCO27 no se dispersó completamente en la emulsión formando una macroagregación sólida, no porosa y compacta, lo que indica que la sustitución de L por R no debe superar el 22 %wt/wt. La muestra XCO27 se redujo hasta un tamaño de partícula entre 0.5 y 1 mm con el propósito de continuar con la etapa de activación.

Los XCO se activaron con H₃PO₄ durante 1 h a 450 °C (XCA) y con CO₂ a 900 °C, 150 ml/min por 1 h (XCB). Los XCA y XCB se caracterizaron mediante microscopía electrónica de barrido y por adsorción de N₂ a -196 °C. La capacidad de almacenamiento de energía se determinó utilizando cronopotenciometría, CCP, a 0.125 F/g entre 0 y 0.6 V en una configuración de tres electrodos en H₂SO₄ 1 M.

Los XCA preservaron la morfología de los XCO, sin embargo presentaron una superficie resquebrajada, evidenciando la agresividad del método de activación para este tipo de materiales. Los XCB preservaron la estructura de los XCO y sobre la superficie se observó un material particulado adherido posiblemente relacionado con la eliminación del surfactante a las temperaturas de activación.

El área superficial específica, S_{BET}, de las muestras activadas varió entre 364 y 940 m²/g, presentado los valores más altos las activadas físicamente. Los XCA presentaron un valor de C_{CP} entre 152 y 252 F/g y los XCB entre 165 y 247 F/g, los valores más altos corresponden a las muestras XCA0 y XCB22.

Las muestras funcionalizadas con lignina y activadas físicamente presentaron un mayor valor de C_{CP} que las activadas químicamente, lo cual puede estar relacionado con el incremento de la S_{BET} y del volumen de microporos y la presencia de mesoporos.

La muestra XCB22 presentó un desempeño electroquímico similar que el xerogel sin lignina XCA0, comportamiento que sería apropiado para el desarrollo y viabilidad de la conformación de materiales verdes al sustituir parcialmente el resorcinol para la aplicación de almacenamiento de energía.

ADAPTACIÓN DE SHEWANELLA PUTREFACIENS EN ELECTRODOS DE CARBONO PARA ÁNODOS PARA CELDAS DE COMBUSTIBLE MICROBIANAS

Stephanie ARIAS¹, Eileen AGUIRRE¹, Giovanna DIOSSA^{1,2}, Mónica CARDONA³,
Diana Marcela VANEGAS², Zulamita ZAPATA-BENABITHE^{1,*}

¹Semillero de Termofluidos y Conversión de la Energía. Grupo de Energía y Termodinámica, Universidad Pontificia Bolivariana.

²Grupo Pulpa y Papel, Universidad Pontificia Bolivariana.

³Grupo de Investigaciones Agroindustriales, Universidad Pontificia Bolivariana.

*Corresponding author. E-mail: zulamita.zapata@upb.edu.co

Short Abstract

Las celdas de combustible microbianas (MFC, Microbial Fuel Cell), son una biotecnología emergente que podría contribuir a afrontar los problemas energéticos actuales, mediante el uso de microorganismos que convierten la energía química presente en un sustrato en energía eléctrica. Los microorganismos transfieren los electrones producidos en su actividad metabólica a un electrodo (ánodo) en lugar de a un aceptor natural de electrones (como oxígeno).

Shewanella putrefaciens ATCC® 8071 es un microorganismo bacteriano que promueve la oxidación de los compuestos orgánicos como parte de su metabolismo y durante este proceso generan electrones y protones. Los protones generados en la reacción atraviesan una membrana permeable a protones o un puente salino y una vez en la cámara catódica se unen con el oxígeno. El material del ánodo y su composición pueden alterar directamente la carga bacteriana y la transferencia de electrones, influyendo en la densidad de potencia de la MFC y de la velocidad de transferencia de electrones.

En este trabajo se evaluó la adaptación del microorganismo bacteriano *S. Putrefaciens* sobre materiales carbonosos como de electrodos de la cámara anódica. En el ánodo se utilizan generalmente materiales conductivos, biocompatibles y químicamente estables, por tal motivo se seleccionaron dos tipos de materiales carbonosos, un carbón activado comercial y un xerogel de carbono, los cuales se depositaron sobre una superficie conductora (papel de grafito), con el fin de proporcionar una nanoestructura estable con alta área superficial específica y altamente biocompatible con el microorganismo bacteriano.

Los electrodos se prepararon mezclando el material carbonoso con negro de humo y un aglutinante a una proporción de 80:10:10 %wt/wt. Inicialmente se utilizó como aglutinante polivinil acetato (PVA), sin embargo no se logró la formación de un electrodo estable debido a un alto desprendimiento del material carbonoso de la superficie del papel de grafito al poner el contacto el electrodo con el medio microbiano. El crecimiento bacteriano sobre la superficie de los electrodos fue determinado mediante microscopía electrónica de barrido (SEM). Las microfotografías de los dos materiales carbonosos con PVA mostraron una adaptación uniforme del microorganismo sobre la superficie.

Posteriormente se prepararon otros electrodos sustituyendo el aglutinante PVA por Politetrafluoroetileno (PTFE, 60 %wt. disuelto en agua), con el fin de aumentar el área superficial de contacto con el microorganismo. Al utilizar el PTFE se observó que la estabilidad de los electrodos mejoró considerablemente, sin embargo en las microfotografías SEM no se observaba presencia del microorganismo sobre la superficie carbonosa, posiblemente debido a la presencia del Flúor en el aglutinante.

Finalmente, se consideró la preparación de un aglutinante híbrido PVA/PTFE, preparado en mayor proporción con PVA (97/3 %wt/wt), con el propósito de promover la adaptación del microorganismo y mejorar la estabilidad del material carbonoso sobre el papel de grafito. Al implementar el aglutinante híbrido se aumentó el área superficial expuesta adherida al papel del grafito y se observó una buena adaptación y crecimiento del microorganismo sobre la superficie carbonosa en ambos materiales, obteniendo electrodos de trabajo estables y favorecedores para su implementación en una celda de combustible microbiana.



TEMPLATED NANOPOROUS CARBONS: ACTIVATION, CHARACTERIZATION AND METHANE STORAGE STUDIES

Deicy BARRERA^{1,*}, Miriam CASCO², Jhonny VILLARROEL-ROCHA¹,
Carlos CUADRADO², Joaquín SILVESTRE-ALBERO², Karim SAPAG¹

¹Instituto de Física Aplicada, Universidad Nacional de San Luis, CONICET, San Luis, Argentina.

²Advances Materials Laboratory (LMA), Department of Inorganic Chemistry, University of Alicante.

*Corresponding author. E-mail: sapag@unsl.edu.ar

Carbon porous materials are of great scientific and technological interest due primarily to its ability to interact with atoms, ions and molecules not only in the external surface but also in the internal surface of the material. Different methods of synthesis and a wide range of precursors have been studied to obtain different carbon materials with interesting textural properties. Among these, nanoporous templated carbons materials have acquired great interest because of their hydrophobic nature and high chemical inertness. However, one of the most attractive properties is that they are hierarchical materials with porosity well-defined in both microporous and mesoporous region. In addition, they frequently present high specific surface areas and pore volumes making of them suitable materials for applications in adsorption. By means of the nanocasting technique it is possible to improve the level of structural ordering using an inorganic matrix (template) to guide the formation of pores and producing novel materials with a broad control of the porosity.

In this work, two inorganic porous materials, SBA-15 and KIT-6 were selected as template and they were impregnated with sucrose as carbon precursor. After polymerization and pyrolysis steps, the template were removed using HF, and finally washing and dry steps were carried out, obtaining the hierarchical porous carbon materials (CMK-3 and CMK-8 from SBA-15 and KIT-6, respectively) which are a negative replica of the porous structure of the templates. These carbon materials were chemically activated with KOH in order to increase its micropore volume. Finally, all the materials (*SBA-15*, *KIT-6*, *CMK-3*, *CMK-8*, *CMK-3_a* and *CMK-8_a*) were characterized by N₂ adsorption-desorption at 77 K, CO₂ adsorption at 273 K, nonane pre-adsorption, immersion calorimetry, X-ray diffraction, SEM and TEM. All the materials (templates, carbons and activated carbons) were evaluated in the methane storage at high pressures.

EFFECTO DEL TAMAÑO Y LA DENSIDAD DE PARTÍCULA EN EL LAVADO DE CARBÓN MINERAL DE COAHUILA

Antonio Humberto GÓMEZ-GUTIÉRREZ¹, Nancy Verónica PÉREZ-AGUILAR^{1*},
Jesús Edgardo HERNÁNDEZ-CHAVERO¹, Aurora RODRÍGUEZ-MONREAL,
César NIETO-DELGADO², Carmen BARRIOCANAL-RUEDA³

¹Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Autónoma de Coahuila, MÉXICO.

²División de Ciencias Ambientales, Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica, MÉXICO.

³Instituto Nacional del Carbón, Departamento de Carbon, Energía y Medio Ambiente, ESPAÑA.

*Corresponding author. E-mail: nancyperez@uadec.edu.mx

Short Abstract

En Coahuila, la Cuenca Sabinas posee los yacimientos de carbón más abundantes de México. El carbón de tipo sub-bituminoso clase C es apropiado para la fabricación de coque metalúrgico, aunque el mercado local también demanda coque de fundición. Algunas características requeridas de un coque de fundición son: poder calorífico de 7,250 Kcal/Kg, tamaño mínimo de 15 cm, 90% mínimo de carbón fijo y contenido máximo de azufre, ceniza y materia volátil de 0.8, 8 y 2%, respectivamente. El carbón de la región no es apropiado para la producción de coque de fundición porque el azufre y cenizas alcanza hasta 1.5% y 32%, respectivamente, se considera que estos valores pueden reducirse modificando el lavado del mineral.

En esta investigación se evalúa la reducción del contenido de cenizas de una muestra de carbón del tajo La Conquista, de la Cuenca Sabinas. Los experimentos de lavado del mineral se diseñaron para evaluar los efectos del tamaño de partícula del carbón y la densidad de las soluciones de nitrato de calcio. Para el efecto del tamaño de partícula la muestra se trituró y separó en las siguientes fracciones: (a) -1000 +841 μm ; (b) -841 +595 μm ; (c) -595 +420 μm ; (d) -420 +297 μm ; (e) -297 +210 μm y (f) -210 +149 μm . Para evaluar el efecto de la densidad se prepararon soluciones de nitrato de calcio de 1.3, 1.4 y 1.5 kg/L. Los experimentos se realizaron en viales de 30 ml, con 4 g de muestra en 25 ml de solución a temperatura ambiente durante 30 min. Las fracciones separadas del flotado y hundido se lavaron con agua destilada y se secaron en un horno convencional a 105 \pm 5 °C, posteriormente se pesaron para analizar el contenido de cenizas.

Los tamaños de partícula de carbón con menor contenido de ceniza fueron los de 420 y 210 μm , con cerca de 8% para las soluciones de 1.4 y 1.5 g/ml, que además mostraron la mejor recuperación de carbón (aprox. 80%).



SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN OPTOELÉCTRICA DE NANOPARTÍCULAS DE NITRURO DE CARBONO

María. V. CAPPELLARI, Gustavo M. MORALES, Fernando G. FUNGO*

Departamento de Química, Universidad Nacional de Río Cuarto, Ruta Nac. 36 - Km. 601 - Código Postal X5804BYA, Río Cuarto, Córdoba, Argentina.

*Corresponding author. E-mail: ffungo@exa.unrc.edu.ar

Resumen

Los nanomateriales han motivado un gran interés en el campo de la optoelectrónica y bioaplicaciones, esto se debe a sus propiedades físico químicas únicas. En este sentido en las últimas décadas, a través de la utilización de nanomateriales se han logrado avances sin precedentes, prácticamente en todos los campos de la ciencia. La mayor parte de la extensa investigación se ha realizado con nanopartículas inorgánicas derivadas de metales y semiconductores, mientras que el estudio de nanopartículas derivadas de materiales orgánicos se encuentra en una fase muy temprana de desarrollo. En este sentido, los principios fundamentales que gobiernan la síntesis y propiedades de las nanopartículas orgánicas no han sido todavía bien establecidos y son difíciles de generalizar. Uno de los desafíos en la investigación con nanopartículas orgánicas es controlar su tamaño-forma y comprender cómo las propiedades electro-ópticas dependen de sus parámetros morfológicos y estructurales.

En este marco, el nitruro de carbono es un material, que al igual que otros materiales derivados del carbono, poseen propiedades generales que prometen aplicaciones en campos tan diversos como la optoelectrónica, catálisis, baterías y bioimágenes. Por lo tanto, la obtención de nanomateriales derivados del nitruro de carbono que permita modular o potenciar sus propiedades es de gran interés. En general, y al igual que con otros materiales, la síntesis de nano estructuras de nitruro de carbono se puede alcanzar por estrategias “de abajo arriba” o *bottom-up* y “de arriba a abajo” o *top-down*.

En este trabajo se busca realizar un estudio comparativo de nanoestructuras de nitruro de carbono (CNNP) sintetizada por ambos métodos (*bottom-up* y *top-down*) con el objetivo de estudiar posibles efectos producidos por el método de síntesis en las propiedades morfológicas y optoeléctricas de las partículas obtenidas. Se sintetizó nitruro de carbono grafitico a partir de precursores moleculares, del material sólido obtenido, se obtuvieron nanopartículas derivadas del nitruro de carbono utilizando dos estrategias. La primera consiste de una combinación de extracción con distintos solventes y cromatografía en columna (estrategia *bottom-up*). La segunda, involucra la ruptura por ultrasonido del nitruro de carbono grafitico (estrategia *top-down*). Ambas nanoestructuras han sido caracterizadas desde el punto de vista estructural y morfológico.

ANÁLISIS A NIVEL DFT DE LA ESTABILIDAD DE LA RED CARBONOSA DE UNA BATERÍA APRÓTICA DE LITIO-AIRE

Adolfo J. A. SALGADO-CASANOVA^{1,*}, Ljubisa R. RADOVIC^{1,2}

¹Universidad de Concepción, Chile.

²PennState University, USA.

*Corresponding author. E-mail: adsalgado@udec.cl

Short Abstract

Las baterías de litio-aire son, teóricamente, capaces de equiparar el rendimiento de las gasolinas. Su alta densidad electrónica y energía específica les permite almacenar 500-800 Wh/kg; cantidad lo suficientemente alta como para mantener la autonomía en un automóvil por sobre los 550 km [1]. Para un adecuado funcionamiento la batería debe poder recargarse. En la reacción de evolución de oxígeno ($\text{Li}_2\text{O}_2 \rightarrow 2\text{Li}^+ + \text{O}_2$), idealmente los iones cargados vuelven al ánodo, mientras que el O_2 es liberado a la atmósfera [2]. Uno de los principales problemas de este ciclo en las baterías no acuosas (apróticas), es que existe la formación de otros productos sobre la matriz carbonosa que no son reversibles, como el Li_2CO_3 . Este producto sólido se forma a partir de la combinación de CO_2 con Li_2O_2 y su presencia genera una disminución rotunda en el rendimiento y en la durabilidad de la batería [3].

Una forma de analizar la estabilidad de la matriz carbonosa en el cátodo es analizando la factibilidad de que se descomponga y libere CO_2 y CO en la presencia de los diferentes productos generados durante la descarga de la batería. Simulando a nivel DFT los bordes reactivos (zigzag y armchair) de una matriz porosa de carbono se buscó esclarecer la factibilidad de utilizar o no el carbono como cátodo de una batería de litio-aire. Los resultados muestran que se favorece la descomposición y formación de CO_2 y CO en la presencia de los productos o intermediarios de la descarga de una batería (Li_2O_2 , Li_2O , LiO_2 y LiO). De esta forma, el diseño de nuevos materiales, entre ellos matrices carbonosas que cuenten con mayores áreas superficiales y con menor concentración de bordes reactivos, serán la clave para la creación de las nuevas generaciones de almacenamiento de energía en base a las baterías de litio-aire.

[1] Bruce, P.G., et al., *Nature Materials*, 2012, 11(1): p. 19-29.

[2] Ogasawara, T., et al., *J. Am. Chem. Soc.* 2006, 128: p. 1390-1393

[3] McCloskey, B. D., et al., *J. Phys. Chem. Lett.*, 2012, 3 (8): p 997-1001



DESARROLLO DE BIOCHAR-ACTIVADO Y TERMORESISTENTE PARA SU USO COMO SOPORTE CATALÍTICO

Aaron DELGADO¹ Óscar GÓMEZ¹, Mauricio FLORES²,
Romel JIMÉNEZ¹, Luis ARTEAGA^{2,*}

¹Departamento de Ingeniería Química, Universidad de Concepción.

²Unidad de Desarrollo Tecnológico, Universidad de Concepción.

*Corresponding author. E-mail: l.arteaga@udt.cl

Resumen

Se estudió el efecto de la impregnación de aserrín de *Pinus radiata* con un agente retardante de la combustión ((NH₄)₂SO₄) -previo a la pirólisis y posterior activación- para su uso como soporte catalítico. Se evaluó, específicamente el efecto del (NH₄)₂SO₄ (0%-15% m/m) sobre el rendimiento a carbón, composición elemental, propiedades texturales (BET, BJH), morfología (SEM) y estructura cristalina del biochar (XRD, FTIR). El estudio se efectuó para tamaños de partícula ente 0.5 y 1mm, temperaturas de pirólisis de 600°C-900°C y tiempos de residencia entre 0 y 5 h. La activación del biochar impregnado se llevó a cabo en flujo continuo de CO₂ (70mL/min) a 800°C durante 8.5h. Como criterio de selección del material para soporte catalítico, se estableció un área superficial mínima de 400 m²/g, un burn-off entre 50-80% y una distribución de tamaño de poros correspondiente a la de un sólido mesoporoso (2-50 nm).

El material obtenido resultó en un alto contenido de carbono (~90%) y con una estructura grafitica defectuosa, típica de biochar. Los patrones de rayos X de los diferentes carbones sugieren un incremento de la distancias inter-planares con la activación. Las imágenes SEM muestran una morfología relativamente uniforme con regiones de porosidad variable y fibras de carbón de tamaño medio. La impregnación con (NH₄)₂SO₄ seguida de activación permitió obtener carbones con superficie específica de 700 m²/g, tamaño promedio de poro entre 2-3 nm, volumen medio de poro de 0.37 cm³/g y un burn-off de 50%. El material resultó térmicamente resistente, sin embargo su aplicación está restringida a atmósferas con bajo contenido de oxígeno (e.g. gases de gasificación).

ECO-FRIENDLY SELECTIVE PHENOL HYDROGENATION ON Pd-BASED CATALYSTS SUPPORTED ON HYBRID C-TiO₂ MATERIALS

Po. S. Poon^{1,*}, Juan Matos^{1,*}

¹Biomaterials Department, Technological Development Unit, University of Concepción, Av. Cordillera, 2634, Parque Industrial Coronel, Concepción, Chile.

*Corresponding authors. E-mails: ppoonng@gmail.com; j.matos@udt.cl

Short Abstract

The catalytic activity and selectivity of Pd-based catalysts supported on C-TiO₂ hybrid materials has been studied in the phenol hydrogenation reaction. Hybrid supports were prepared by solvothermal and slurry synthesis and the influence of texture and surface pH on the activity and selectivity was verified under eco-friendly experimental conditions such as aqueous phase, low H₂ pressure and low temperature. Preliminary results on Pd-based catalysts showed that the chemical nature (hydrophobic/hydrophilic) of the support direct the reaction mechanism either to cyclohexanol or to cyclohexanone. Selectivity to cyclohexanone is obtained on more polar C-TiO₂ supports, while catalyst becomes selective to cyclohexanol on hydrophobic C-TiO₂ hybrid materials. A mechanism explaining difference in selectivity is proposed. It can be concluded that product distribution during the selective phenol hydrogenation under eco-friendly conditions is easily controlled by controlling the functionalization of the hybrid support which can be extrapolated to the study of other types of hybrid materials as catalytic supports.



DRY METHANE REFORMING ON Ce- AND La-BASED CATALYSTS SUPPORTED ON MESOPOROUS CARBON

Juan MATOS^{1*}, Joanna GOSCIANSKA², Robert PIETRZAK²

¹Biomaterials Department, Technological Development Unit, University of Concepción, Av. Cordillera, 2634, Parque Industrial Coronel, Concepción, Chile.

²Faculty of Chemistry, Adam Mickiewicz University, Umultowska 89b, 61-614 Poznań, Poland.

*Corresponding author. E-mail: j.matos@udt.cl

Short Abstract

The catalytic activity of Ce- and La-based catalysts supported on mesoporous carbon was investigated in dry methane reforming reaction. Mesoporous carbons were prepared by hard template method using ordered silica (SBA-15 and KIT-6) as templates and sucrose as carbon precursor. After sucrose pyrolysis samples were washed with 5 wt % hydrofluoric acid at room temperature to remove the silica template. Catalysts and supports were characterized by small- and high-angle X-ray diffraction (XRD), scanning (SEM) and transmission electron microscopy (TEM), acid-basic surface oxygen functional groups according to Boehm method, and nitrogen adsorption-desorption isotherms. Catalytic tests were performed at 1:1 molar ratio of methane and carbon dioxide at continuous flow in a bed-fix stainless-steel reactor under atmospheric pressure and 650°C. Catalysts were pretreated in situ under hydrogen flow from ambient to temperature of reaction. Preliminary results showed that Ce- and La-based catalysts supported on mesoporous carbon exhibit higher activity at long time of reaction with a higher production of hydrogen in comparison of analogous catalysts supported on SBA-15 and KIT-16 without modification with carbon. It can be suggested that Ce- and La-based catalysts develop active phases with mesoporous carbon during the pretreatment under hydrogen flow. A further study of optimization of pretreatment conditions and characterization after pretreatments as well further catalytic and photocatalytic reactions are being performed to better characterize these materials.

ETHYLENE CONVERSION ON ACTIVATED CARBON-SUPPORTED NiMo CATALYSTS: EFFECT OF CONFINING IN NANOPORES

Juan MATOS^{1,*}

¹Biomaterials Department, Technological Development Unit, University of Concepción, Av. Cordillera, 2634, Parque Industrial Coronel, Concepción, Chile.

*Corresponding author. E-mail: j.matos@udt.cl

Short Abstract

The present work has been led to verify the influence of some physicochemical properties of carbon supports on the catalytic behaviour of hydrotreatment catalysts. The catalytic conversion of ethylene in presence of hydrogen was carried out at 300°C on Mo, Ni and NiMo catalysts supported on two different activated carbons (AC). The results were interpreted in terms of the hydrogenating/hydrogenolytic activity, catalytic stability and coking functions of catalysts as a function of the confining effect in nanopores. Changes observed both in activity and evolution of products as function of the final temperature of two reducing pretreatments indicate that H-type carbon-supported NiMo catalysts has much more tolerance to coke deposition and therefore they are less prone to suffer deactivations than catalysts based on L-type AC. The apparent rate constants and the initial rates of coke formation were estimated indirectly as an attempt to provide a better understanding the influence of chemical surface functionalities and of textural properties of AC. A correlation was found between these kinetic parameters of coke formation and the catalytic behaviour of catalysts. The results were compared with respect to a conventional alumina-supported NiMo catalyst indicating that using H-type AC as a support of hydrotreatment Ni-consisting catalysts we can be able to maintain high activities over longer periods of operation, at least, for the hydrogenation of simple insaturated hydrocarbons such as ethylene.



BIODIESEL SYNTHESIS USING ACTIVATED CARBON AS CATALYST SUPPORT

Aida RAMÍREZ¹, Liliana GIRALDO², Juan Carlos MORENO^{1*}

¹Departamento de Química, Facultad de Ciencias, Grupo de Investigación de Sólidos Porosos y Calorimetría, Universidad de los Andes (Bogotá, COLOMBIA).

²Departamento de Química, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Colombia (Sede Bogotá, COLOMBIA)

*Corresponding author. E-mail: jumoreno@uniandes.edu.co

Short Abstract

The human population confronts a problem due to the increment of the energy demand, exhaustion of the fossil fuels and environmental contamination for the gases of effect hothouse taken place in great measure for burns it of the fossil fuels. Therefore, is necessary to look for alternating sources of energy based on renewable processes, as is biodiesel [1].

The study of the synthesis of biodiesel is made from soybean oil and palm oil, using homogeneous, heterogeneous catalysis and bio-catalysis. Where for the heterogeneous catalysis KOH was supported and the bio-catalysis the lipasa of porcine, is used like support granular activated carbon (GAC) and pelletized activated carbon (PAC), obtained of coconut shell. The triglyceride is characterized by TGA and to FT-IR and the catalysts by FT-IR, BET and SEM. The characteristics of fuel were determined according to ASTM and EN standards.

The textural characteristics of support were determined where the largest surface area and pore volume presents the pelletized activated carbon (PAC) (1131m²/g y 0.59 cm³/g) and then the granular activated carbon (GAC) (842m²/g y 0.34 cm³/g).

The rate of chemical reactions can be modified due various reasons, five factors which affect performance alkylesters analyzed: time, catalyst, molar ratio of alcohol: oil temperature and oil type.

The greatest percent yield in the production of biodiesel was reached at 90 minutes with two catalytic systems, both homogeneous and heterogeneous. The homogeneous system has higher yields using soybean oil (SO) and crude palm oil (OP) compared to the heterogeneous system. In the heterogeneous system prepared using different catalysts (KOH/GAC and KOH/PAC), higher yields were presented for KOH/PAC; these results are associated with the surface area catalysts. When the molar ratio of methanol:oil was increased to 9:1, 91 and 89% for soybean oil and crude palm oil on GAC; and finally 92 and 91% for soybean oil (SO) and crude palm oil (OP) on PAC. Beyond the molar ratio of 9:1, the excess amount of methanol has a negative effect on performance, which makes the amount of biodiesel decrease [2]. Is evident that when there is an insufficient amount of catalyst, biodiesel yields are low; for example, when the amount of catalyst in the reaction was 1%, the following yields were obtained: 83% and 79% when soybean oil and crude palm oil, respectively, on GAC, and 85% and 82% for SO and OP, respectively, when PAC is used. By increasing the catalyst amount up to 3% by weight, the biodiesel performance for all systems increased. Above 3%, the reagent mixture became too viscous, resulting in emulsification, promoting salt formation, and creating problems on mass transfer. With regard to the temperature, no yields were recorded at 30°C for cases where palm oil was used as it is still in the solid phase at temperatures below 40°C.

Finally, in the bio-catalysis, is a method that generates significant returns, and as a selective method is a huge draw for the production of biodiesel. Optimal conditions for bio-catalysis are: molar ratio of methanol:oil of 6:1, 6.0% lipase by weight of oil, a temperature of 40°C and 300 rpm.

References

- [1] Cadena agroindustrial Etanol. *Inter-americano para la Cooperación en la Agricultura IICA*. Nicaragua, 2004,2,3.
[2] Kim, H.; Kang, B.; Kim, M.; Park, Y.; Kim, D. *Catalysis Today*. 2004,93-95:315-20.

SÍNTESIS DE MATERIALES HÍBRIDOS Y SU ESTUDIO EN REACCIONES DE OXIDACIÓN SELECTIVAS

Franklin GARCÍA^{1,*}, Juan MATOS², Po Shan POON¹

¹Instituto Venezolano de Investigaciones Científicas. Caracas, Venezuela.

²Unidad de Desarrollo Tecnológico, Chile.

*Corresponding author. E-mail: franklingarcia2009@gmail.com

Short Abstract

El impulso hacia una mayor eficiencia económica y medio ambiental en la fabricación de productos químicos ha conducido a una creciente necesidad de los procesos que producen un mínimo de desperdicio y evitar, en lo posible, el uso de reactivos y disolventes tóxicos y peligrosos. Esto ha llevado a una reevaluación de muchas tecnologías existentes y la implementación de alternativos catalíticos más limpios en la química fina, particularmente en el área de síntesis orgánica de productos naturales y sus derivados bioactivos. Recientemente, Matos y colaboradores han desarrollado diversos catalizadores redox sólidos que induce selectividad en reacciones de oxidación/reducción en fase líquida y libre de residuos tóxicos, de los cuales destacan los catalizadores: Pd-TiO₂/AC, Au-TiO₂/AC, Pt-Ru/C.

En el 2010, Matos y colaboradores reportaron que la nueva aleación de nanopartículas de Pt-Ru soportado en carbón hidrotérmico es un catalizador estable en la reformación de metano y en la oxidación parcial de metano (*Appl. Catal. A: Gen.* 2010, 386, 140). Asimismo, reportaron diversos carbonos nanoporosos que funcionan como fotocatalizadores selectivos en la fotooxidación de 4-clorofenol a 4-clorocatecol (*J Mater Sci.* 2010, 45, 4934). En el 2011 los autores (*Appl. Catal. A: Gen.* 2011, 404, 103) estudiaron el comportamiento de catalizadores de Pd soportados en TiO₂-AC y demostraron que mediante el control de la funcionalización del soporte híbrido se puede definir la distribución de del producto durante la hidrogenación selectiva de fenol en fase acuosa. Se reporta que cuando se emplea Pd soportado en TiO₂-C hidrofílicos se obtiene como producto la ciclohexanona, mientras que con soportes hidrofóbicos de TiO₂-C el producto es el ciclohexanol.

El desarrollo de nuevos métodos sintéticos que permitan acceder de forma eficaz y elegante a moléculas con interés estructural y/o biológico, es un objetivo prioritario de la síntesis orgánica moderna y tiene un enorme impacto en Biología y en Medicina.



SÍNTESIS, CARACTERIZACIÓN Y APLICACIONES DE BIOCARBONOS COMO SOPORTE EN LA REACCIÓN DE METANACIÓN

Paula Muñoz^{1, 2,*}, Ximena García^{2,*}, Juan Matos^{1,*}

¹Área Biomateriales, Unidad de Desarrollo Tecnológico, Universidad de Concepción, Av. Cordillera, 2634, Parque Industrial Coronel, Concepción, Chile.

²Departamento de Ingeniería Química, Facultad de Ingeniería, Universidad de Concepción, Concepción Región del Biobío, Chile.

*Autores correspondientes. E-mail: paulamunozf@udec.cl, xgarcia@udec.cl, j.matos@udt.cl.

Los biocarbonos son utilizados como soporte catalítico principalmente debido a sus beneficios como gran área superficial y amplio rango en los tamaños de los poros, lo que permite mejorar la eficiencia de los catalizadores. El objetivo de este trabajo es estudiar el efecto de las propiedades fisicoquímicas de biocarbonos sobre la actividad catalítica del Fe. Los biocarbonos fueron preparados mediante corteza de pino utilizando distintos métodos de activación. Los métodos empleados fueron: activación física con CO₂ denotado BC_{PB-CO2} y activación química con H₃PO₄ indicado como BC_{PB-P-35}.

Los catalizadores fueron preparados empleando distintas concentraciones en peso de nitrato de hierro nonahidratado. Finalmente se determinó la actividad catalítica de los catalizadores en la reacción de metanación.

Como resultado se obtuvo un catalizador de bajo costo para la metanación de CO, que ofrezca una adecuada actividad y selectividad hacia la formación de metano, sustituto del gas natural. Asimismo se establecerán relaciones entre la actividad catalítica y las propiedades del biocarbono.

NANOTUBOS DE CARBONO COMO SOPORTE DE NANOPARTÍCULAS DE HIERRO EN FIBRAS DE BAGAZO DE AGAVE PARA ADSORBER ARSÉNICO EN AGUA

César NIETO-DELGADO¹, René RANGEL-MÉNDEZ^{1,*}

¹División de Ciencias Ambientales, Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica. Camino a la Presa San José 2055. Col. Lomas 4a sección CP. 78216. San Luis Potosí, México.

*Corresponding author. E-mail: rene@ipicyt.edu.mx

El arsénico es un contaminante prioritario que puede estar presente en cuerpos de agua que son utilizados para consumo humano. Debido a su bajo costo y fácil operación, los procesos de adsorción son los más utilizados para el tratamiento de ésta agua, siendo los adsorbentes basados en óxidos de hierro los de mayor eficiencia. Con la finalidad de potenciar la capacidad de adsorción de éstos adsorbentes, partículas de óxido de hierro de tamaño nanométrico son depositados en la superficie de soportes granulares, generando materiales con propiedades físicas adecuadas para ser utilizadas en columnas empacadas. Bajo este esquema, es importante asegurar una fuerte interacción entre el soporte y los óxidos de hierro, para evitar que nanopartículas cargadas de arsénico sean liberadas en el efluente.

Con la finalidad de generar una metodología para anclar covalentemente las nanopartículas de hierro a soportes carbonosos, en este trabajo se exploran la formación de nanotubos de carbono en la interfase soporte-nanopartícula, como método de anclaje. El soporte utilizado fueron fibras de bagazo de agave, que al carbonizarse presentan una estructura macroporosa que facilita los procesos de difusión durante su modificación. El carbón de bagazo fue modificado con nanopartículas de hierro mediante dos metodologías: hidrólisis térmica e impregnación de nanopartículas de hierro cubiertas de carboximetil celulosa. Posteriormente, nanotubos de carbono fueron formados mediante deposición química de vapor (DQV), en donde las nanopartículas de hierro pre depositadas en el carbón de bagazo fungieron como catalizador. Resultados preliminares muestran que bajo condiciones específicas es posible generar un material con una distribución homogénea de nanopartículas ancladas al carbón de bagazo mediante nanotubos de carbono. Las condiciones de DQV determinan en gran medida las características físicas de los nanotubos formados. El desempeño de este material para remover arsénico es de 0.1 - 0.5 mg As/g, evaluado a una concentración al equilibrio de 1ppm As y pH de 7. Sin embargo, después de una oxidación térmica, la capacidad de adsorción aumenta hasta 1.2 mg As/g, presumiblemente debido a la gasificación de carbón amorfo depositado en la superficie de las partículas de hierro.



HIGH SURFACE AREA MICROPOROUS CARBONS AS PHOTOREACTORS FOR THE CATALYTIC PHOTODEGRADATION OF METHYLENE BLUE UNDER UV-VIS IRRADIATION

Juan Matos^{1,*}, Vanessa Fierro^{2,*}, Ricmary Montaña¹, Eiram Rivero³, Alicia Martínez de Yuso², Weigang Zhao^{2,4}, Alain Celzard²

¹Biomaterials Department, Technological Development Unit, University of Concepción, Av. Cordillera, 2634, Parque Industrial Coronel, Concepción, Chile.

²Institut Jean Lamour, UMR Université de Lorraine - CNRS 7198. ENSTIB, 27 rue Philippe Séguin, CS 60036, 88026 Epinal cedex, France

³Venezuelan Institute for Scientific Research (IVIC), 20632, Caracas 1020-A, Venezuela

⁴College of Material Engineering, Fujian Agriculture & Forestry University, Fuzhou, Fujian 350002, China

*Corresponding authors. E-mails: j.matos@udt.cl; vanessa.fierro@univ-lorraine.fr.

Short Abstract

The High surface area (ca. 1700-3400 m² g⁻¹) activated carbons (ACs) were prepared from Chinese anthracite by chemical activation with KOH using KOH/Anthracite weight ratios ($W_{\text{KOH}}/W_{\text{Anthracite}}$) ranging from 1.6 to 5. The photocatalytic degradation of methylene blue (MB) at high concentration conditions up to 25 ppm under UV-vis irradiation was performed on AC and on TiO₂-AC mixtures prepared by slurry methodology. The highest values of both BET surface area and of micropore volume to total pore volume ratio were found with a $W_{\text{KOH}}/W_{\text{Anthracite}}$ ratio of 4. It was found that ACs developed photocatalytic activity and an important synergistic effect with TiO₂. TiO₂-AC mixtures showed enhancements in the photocatalytic activity up to 6 times higher than commercial TiO₂. The photocatalytic activity of ACs and binary materials was discussed with respect to textural properties and surface functional groups of carbons. The ratio of micropore volume to total pore volume and the surface pH of the ACs play important roles upon the photocatalytic activity of TiO₂-AC, and the combination of adsorption followed by photodegradation clearly contributed to the treatment of highly concentrated methylene blue. It was concluded that photochemical reactive microporous ACs have a beneficial influence upon the photocatalytic activity of TiO₂.

ADSORBENTES A PARTIR DE RESIDUOS LIGNOCELULÓSICOS: SU APLICACIÓN A LA REMOCIÓN DE ARSÉNICO

Marianela GIMENEZ^{1,*}, Adán QUIROGA¹, Fabiana SARDELLA¹,
Cristina DEIANA¹, Karim SAPAG²

¹Universidad Nacional de San Juan, Facultad de Ingeniería, Instituto de Ingeniería Química, Argentina

²Universidad Nacional de San Luis, INFAP-CONICET, Argentina

*Corresponding author. E-mail: mgimenez@unsj.edu.ar

Short Abstract

Argentina posee una de las áreas más extensas del mundo afectadas por altos contenidos de As en el agua, afectando la calidad de vida de gran cantidad de personas. La adsorción en fase líquida es una alternativa tecnológica para el tratamiento de estas aguas. El carbón activado es uno de los adsorbentes más utilizados para aplicaciones de este tipo debido a su alta versatilidad y eficacia. Puede prepararse a partir de materias primas lignocelulósicas de muy bajo costo, tales como los residuos de la agroindustria, resultando una alternativa de valorización de los mismos y contribuyendo a solucionar el problema de su disposición final.

La industrialización de la uva es una de las principales actividades económicas de la Región de Cuyo, Argentina, produciéndose vinos, mostos concentrados, pasas, alcoholes y aceites. En el año 2015, cerca de 2.500 millones de kilogramos de uva han sido destinados a industrialización, entre las provincias de San Juan y Mendoza (INV, 2016). Como consecuencia de estas actividades se generan grandes volúmenes de residuos sólidos, entre los que se encuentra el lex de uva.

Este trabajo presenta resultados de la evaluación de la capacidad de retención de arsénico en carbones activados obtenidos a partir de lex de uva. Los adsorbentes, conformados en briquetas, fueron obtenidos mediante activación con vapor de agua. Posteriormente se impregnaron con tres concentraciones distintas de FeCl_3 a fin de comparar el efecto de este tratamiento en la eficiencia de remoción del ión metálico estudiado. Estos adsorbentes fueron posteriormente caracterizados mediante área BET y distribución de tamaño de poros.

El estudio de la capacidad de retención se realizó a través de ensayos batch a temperatura constante, cinéticos y en equilibrio, colocando masas de adsorbente con un volumen de solución en una relación de 3/5. Las isotermas de Freundlich y Langmuir se utilizaron para describir la adsorción del contaminante sobre los carbones activados obtenidos.

Con el fin de evaluar el aporte de hierro a las soluciones acuosas por parte de los adsorbentes impregnados, se determinó la concentración de este metal en las muestras de agua tratadas.

Las concentraciones de arsénico y hierro fueron determinadas por Espectrometría de Masas con Plasma Acoplado Inductivamente (ICPMS) en un equipo de Perkin Elmer SCIEX, ELANRDC -e (Thornhill, Canada).

Se observó que la impregnación de los adsorbentes mejoró notablemente la retención de arsénico respecto del carbón activado sin modificar, alcanzando una capacidad de remoción alrededor de 700 μg por cada gramo de adsorbente. El aumento de la concentración de la solución de impregnación condujo a mayores cantidades de hierro depositadas en el adsorbente, aunque esto no se tradujo en una mejora significativa de su comportamiento. Las cantidades de hierro liberado a la solución en ningún caso supero el 1% de la carga inicial.

Referencias

INV, 2016. Instituto Nacional de Vitivinicultura. Disponible, enero de 2016, en: <http://www.inv.gov.ar/index.php/informes-anales>



REDES NEURONALES Y LA ADSORCIÓN ANTAGÓNICA DE METALES PESADOS EN CARBÓN DE HUESO

H. Elizabeth REYNEL-ÁVILA^{1,2,*}, Didilia I. MENDOZA-CASTILLO^{1,2},
Adrián BONILLA-PETRICIOLET¹

¹Instituto Tecnológico de Aguascalientes, México

²Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología, Cátedras CONACYT, México

*Autor de correspondencia. E-mail: helizabeth_00@hotmail.com

Short Abstract

En este trabajo se presenta el uso de redes neuronales de lógica difusa (*dynamic fuzzy neural network* (DFNN)) como herramienta alternativa para la simulación del proceso de adsorción en sistemas dinámicos, ya que el diseño de columnas empacadas es fundamental para lograr una mayor eficacia de los procesos de adsorción y así reducir costos de tratamiento. Específicamente, se realizaron experimentos en régimen continuo utilizando micro-columnas empacadas con carbón de hueso y soluciones monocomponentes y binarias de Cd²⁺, Ni²⁺ y Zn²⁺ bajo diferentes condiciones de operación. Con la información obtenida experimentalmente se calcularon diversos parámetros de diseño tales como capacidad de adsorción, tiempos de ruptura, saturación y retardo y se realizó el ajuste de los datos empleando las redes DFNN. Los resultados de los experimentos de columnas de adsorción mostraron que las curvas de ruptura tienen la forma "S" característica pero con diferentes grados de asimetría dependiendo del metal presente en la solución. Los parámetros de ingeniería de las curvas de ruptura y las capacidades de adsorción para las mezclas binarias disminuyeron con respecto a los obtenidos para las soluciones monocomponentes, indicando un antagonismo entre los metales evaluados. La afinidad del carbón de hueso en la adsorción multicomponente fue Cd²⁺ > Zn²⁺ > Ni²⁺ bajo las condiciones de estudio. Por otra parte, el modelo de DFNN propuesto fue capaz de representar el comportamiento altamente asimétrico de las curvas de ruptura en soluciones tanto monocomponentes como binarias, con coeficientes de correlación de 0.93-0.99. Cabe mencionar que este tipo de curvas de ruptura no podrían ser descritos adecuadamente por los modelos tradicionales para columnas empacadas. Por tanto, se concluye que el modelo DFNN es capaz de representar las características clave en el comportamiento de curvas de ruptura asimétricas de adsorción de metales pesados empleando columnas empacadas con carbón de hueso.

PIRÓLISIS DE POLÍMEROS SINTÉTICOS: RELACIÓN CINÉTICA/ESTRUCTURA QUÍMICA Y COMPARACIÓN CON POLÍMEROS NATURALES

Tomás LARRAÍN^{1,*}, Marion CARRIER^{1,†}, Ljubisa RADOVIC^{1,2}

¹Development Technological Unit, University of Concepcion, Chile.

²Penn State University, USA

[†]EBRI, Bioenergy Research group, Aston University, UK

*Corresponding author. E-mail: t.larrain@udt.cl

La obtención de coque y *biochar* del carbón y la biomasa (polímeros naturales), al igual que de combustibles y ceras a partir de los plásticos (polímeros sintéticos), han sido durante siglos de gran interés tanto para la industria como para la comunidad científica. Se ha ahondado tanto en la química de las reacciones como el diseño de procesos, profundamente en el caso del carbón y la biomasa, pero de modo superficial cuando se trata de pirólisis de plásticos. Los polímeros naturales tienen diferencias importantes con respecto a los sintéticos (por ejemplo, en su estructura química); pero lo mucho que se sabe sobre su carbonización debería dar luces importantes para esclarecer la pirólisis de plásticos, especialmente en el estudio de la cinética. Amplios rangos de energías de activación y diferentes modelos de conversión para un mismo polímero (bajo condiciones idénticas) que se encuentran en la literatura han conducido a mecanismos de reacción disímiles. Se hace necesario, por lo tanto, buscar una relación entre la cinética del proceso y la estructura química del polímero, para verificar si los parámetros cinéticos reflejan la realidad esencial del proceso. Se debe reconocer que en la pirólisis ocurren múltiples reacciones radicalarias en cadena, gatilladas por el rompimiento de enlaces más débiles, siguiendo el ejemplo de las moléculas de metano vs. etano, para las cuales el paso limitante es el rompimiento del enlace C-H vs. C-C [1]. Queda por comprobar si esto es válido también para la degradación de moléculas más grandes y complejas como los plásticos y la biomasa o el carbón.

En este trabajo experimental y teórico, estamos utilizando métodos isoconversionales de análisis de la pirólisis de polímeros sintéticos (PE, PMMA y PET) y naturales (*Pinus radiata* y carbón sub-bituminoso), mediante los cuales se pretende relacionar la energía de activación del proceso con el grado de conversión, sin la necesidad de postular un modelo [2]. Se reportan resultados que ilustran la relación entre la cinética del proceso de pirólisis y la estructura química del polímero. Se comparan las energías de activación distribuidas en el tiempo con las energías de los principales enlaces del polímero y/o de las reacciones ocurridas en el proceso de su pirólisis.

[1] Rice, F. O., "The Thermal Decomposition of Organic Compounds from the standpoint of Free Radicals. I. Saturated hydrocarbons", *Free Radical in Thermal Decomposition*, May 1931, Contribution from The Chemical Laboratory of Johns Hopkins University.

[2] Vyazovkin, S., Burnham, A., Criado, J. M., Pérez-Maqueda, L. A., Popescu, C., Sbirrazzuoli, N., "ICTAC Kinetics Committee recommendations for performing kinetic computations on thermal analysis data", *Thermochimica Acta* 520 (2011), p. 1-19



INFLUENCE OF BIOCHAR CHARACTERISTICS UPON THE PHOTODEGRADATION OF METHYLENE BLUE UNDER UV-VISIBLE IRRADIATION

Ricmary Montaña¹, Juan Matos^{1,*}

¹Biomaterials Department, Technological Development Unit, University of Concepción, Av. Cordillera, 2634, Parque Industrial Coronel, Concepción, Chile.

*Corresponding author. E-mail: j.matos@udt.cl

Short Abstract

The photochemical activity of different nanoporous biochars prepared from the sawdust of a soft wood (*Apamate, tabebuia pentaphylla*) was studied under UV-Vis irradiation conditions. Biochars were prepared by physical activation under CO₂ flow (800°C, 1h), by pyrolysis under N₂ flow (1000°C, 1h), and by chemical activation after impregnation with ZnCl₂ and H₃PO₄ (5% wt.%) following carbonization/activation under N₂ flow (450°C, 1h). The methylene blue (MB) was selected as dye-model and the kinetics of adsorption in the dark following photodegradation were studied on biochars. P-25 TiO₂ was used as commercial photocatalyst for comparative purposes and to verify synergistic effects between both solids. The kinetics of MB photodegradation was performed under UV-Visible irradiation to verify the scaling-up to real solar irradiation conditions of Biochar-TiO₂ binary materials. It was verified that biochars were intrinsically photoactive, and a synergy effect between both solids was detected and estimated from the pseudo first-order apparent rate constants in the photodegradation of MB. This effect enhances the photoactivity of TiO₂ up to a factor about 9 under visible irradiation and it was associated to the surface properties of carbons mainly by the formation of photochemically oxygen-containing reactive species. It can be concluded that heteroatoms-doped biochars are photochemically active under UV-Visible irradiation.

ADSORCIÓN DE FENOL, P-NITROFENOL Y PIRIDINA EN SOLUCIÓN ACUOSA

Antonio Humberto GÓMEZ-GUTIÉRREZ¹, Paola Elizabeth DÍAZ-FLORES², Eunice Elizabeth VILLANUEVA³, Nancy Verónica PÉREZ-AGUILAR^{1,*}

¹Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Autónoma de Coahuila, MÉXICO.

²Facultad de Agronomía, Universidad Autónoma de San Luis Potosí, MÉXICO.

³Coordinación Académica Región Altiplano, Universidad Autónoma de San Luis Potosí, MÉXICO.

*Corresponding author. E-mail: nancyperez@uadec.edu.mx

Short Abstract

Los nanotubos de carbono son materiales avanzados que se han investigado extensamente en la remoción de compuestos tóxicos del agua. En la literatura hay algunos estudios relacionados con la remoción de compuestos orgánicos en solución acuosa con nanotubos de carbono, son escasos los que reportan la competencia de dos o más adsorbatos. En esta investigación, se presenta el equilibrio de adsorción de fenol, *p*-nitrofenol y piridina, en soluciones simples, binarias y ternarias, sobre nanotubos de carbono de pared múltiple (MWCNTS) y nanotubos de carbono dopados con nitrógeno (CNx). Las dimensiones aproximadas de MWCNTS fueron 6 - 8 μm de longitud y diámetros de 50 - 100 nm. Por su parte, CNx tenían longitudes de 5 μm y diámetros de 50 - 90 nm. Las pruebas de adsorción se realizaron en lote con la relación m/V de 1 mg/ml. La concentración de cada uno de los compuestos en el equilibrio, se determinó en un equipo de absorción UV-Visible con las longitudes de onda de 269 nm para el fenol, 254 para piridina y 318 nm para el *p*-nitrofenol. La capacidad de adsorción de CNx y MWCNTS a pH 7 o 10, presentó el siguiente orden: *p*-nitrofenol > fenol > piridina. Los sistemas de adsorción binaria fenol-piridina y *p*-nitrofenol-piridina, sobre MWCNTS y CNx a pH 7, presentaron la misma tendencia de la capacidad de adsorción descrita por las isothermas de adsorción para un solo componente. Sin embargo para el sistema binario fenol- *p*-nitrofenol, solo la adsorción sobre MWCNTS presentó el mismo orden antes mencionado, mientras que CNx mostró mayor capacidad de adsorción de fenol en relación con *p*-nitrofenol. Los resultados de la adsorción competitiva sobre CNx y MWCNTS para el sistema ternario fenol- *p*-nitrofenol-piridina mostraron que la capacidad de adsorción de fenol a pH 7 presentó menor impedimento para adsorberse sobre los nanotubos. El nitrógeno dopante en CNx juega un papel importante en la selectividad de la adsorción con los compuestos estudiados.



PIRÓLISIS DE RESIDUOS AVÍCOLA COMO ALTERNATIVA DE VALORIZACIÓN

Cristina SEGURA^{1,*}, Lilian SUAREZ¹, Mauricio ESCOBAR^{1,2}

¹Unidad de Desarrollo Tecnológico, Universidad de Concepción.

²Cementos Bio Bio S.A.

*Corresponding author. E-mail: c.segura@udt.cl

Short Abstract

El presente estudio tiene por objetivo evaluar la producción simultánea de un biocarbón y energía térmica como mecanismo para la valorización de residuos sólidos provenientes de planteles avícolas. En particular, se estudió la conversión termoquímica de guanos de aves en un material carbonoso con características aptas para ser usado como enmendador de suelos, utilizando un proceso de pirólisis lenta. Los productos de la pirólisis lenta son un sólido denominado biocarbón (producto principal) y una mezcla combustible de gases condensables (bio-oil) y gases permanentes (gas pobre).

Para simular un proceso de pirólisis lenta, a escala de laboratorio, se usó un reactor de lecho fijo de 1½' OD, calefaccionado por un horno eléctrico tubular y operado bajo un flujo constante de nitrógeno. Los vapores fueron condensados en un sistema compuesto por un condensador y un precipitador electrostático dispuestos en forma secuencial. El rendimiento de las diferentes fracciones de producto fue determinado por balance de masa. Los ensayos fueron realizados a diferentes temperaturas de pirólisis (400 a 600°C) usando una velocidad de calentamiento de 20°C/min y tiempos de reacción entre 10 y 30 minutos. La fracción de bio-oil fue caracterizada mediante análisis elemental (C, H, N y S), poder calorífico, contenido de agua y análisis GC/MS. A los biocarbones se les determinó el CaCO₃ equivalente, pH-H₂O, fósforo extraíble y conductividad eléctrica en agua como función de la temperatura de pirólisis. Una muestra de biocarbón obtenida bajo condiciones de pirólisis más favorable, se caracterizó mediante área BET, análisis elemental, contenido de cenizas y determinación de elementos inorgánicos mayoritarios y minoritarios.

Los resultados mostraron que el biocarbón obtenido de pirólisis lenta de guanos de gallinas tiene una excelente capacidad de acción como encalante de suelos. Por su parte, el contenido de fósforo extraíble presente en el biocarbón incrementó considerablemente respecto a la materia prima. Se observó que el nitrógeno contenido en la materia prima se distribuyó en los productos de pirólisis, mientras que el azufre quedó retenido casi en su totalidad en el biocarbón.

UTILIZACIÓN DE UN COMPLEJO BIOCARBÓN-METANÓTROFO PARA LA MITIGACIÓN DE METANO EMITIDO DESDE SUELOS FERTILIZADOS CON PURINES DE LECHERÍA

Valentina GARCÍA¹, Homero URRUTIA², Erick ZAGAL¹, Cristina MUÑOZ^{1,*}

¹Departamento de Suelos y Recursos Naturales, Facultad de Agronomía, Universidad de Concepción, Campus Chillán.

²Centro de Biotecnología, Universidad de Concepción, Concepción.

*Corresponding author. E-mail: cristinamunoz@udec.cl

Resumen

El cambio climático que afecta el planeta, producto de la alteración en la composición de los gases que conforman la atmósfera, perjudica la actividad agropecuaria de Chile afectando directamente su economía. El metano (CH_4), uno de los gases de efecto invernadero, luego de su emisión permanece en la atmósfera aproximadamente de 9 a 15 años, siendo su poder de retención de calor 25 veces mayor que el de dióxido de carbono (CO_2). Dicho gas es emitido principalmente en procesos de fermentación entérica y manejo de estiércol (purines). El purín, mezcla de fecas, orina y aguas residuales producto de lavados y aguas lluvia en la industria lechera, es rico en nitrógeno, óxido de potasio y óxido de fósforo, por lo que es ampliamente usado como fertilizante orgánico. En su manejo y principalmente durante su almacenamiento, en pozos purineros, se restringe la aireación lo que conduce a productos de fermentación como CH_4 . Los microorganismos metanótrofos se presentan como una alternativa a la mitigación de este gas, pues son bacterias oxidantes de CH_4 , metilotróficos, que utilizan éste y otros compuestos pequeños de carbono como fuente de energía, debido a la acción de la enzima metano monooxigenasa. Estos microorganismos, presentes en lodos, pantanos, ríos, arrozales, suelos de prado, etc. podrían también ser encontrados en purines, siendo un desafío la identificación de los microorganismos y una búsqueda de mecanismos para potenciar su acción en el purín y así disminuir la emisión de CH_4 en la agricultura. El biocarbón es otra alternativa a la mitigación de emisiones de CH_4 , un producto de la pirólisis de biomasa por sobre 250°C . Debido a la estructura porosa del biocarbón, su alta superficie interna y su capacidad para absorber la materia orgánica soluble, gases y nutrientes inorgánicos, ha sido utilizado como portador para inocular microorganismos en el suelo, pues proporciona un hábitat adecuado para ellos, incluso mejorando la biosorción de compuestos contaminantes, propiciando que sea una buena alternativa para ser usada como matriz para inocular bacterias metanótrofas en pozos purineros y así disminuir las emisiones de metano desde suelos fertilizados o enmendados con purines.

Agradecimientos

Proyecto Fondecyt N° 1160795



BIOCHAR FROM PYROLYSIS OF DIFFERENT BIOMASSES AS POTENTIAL SOIL AMENDMENT: EVALUATION OF PHYTOTOXIC EFFECTS IN LACTUCA SATIVA.

Mariana SILVA¹, Roxana PILONI², María Luz NIEVA LOBOS²,
Ana SCOPEL¹, Elizabeth MOYANO^{2,*}

¹INBA - CONICET / Facultad de Agronomía, Universidad de Buenos Aires.

²INFIQC- Departamento de Química Orgánica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba.

*Corresponding author. E-mail: lauramoy@fcq.edu.ar

Short Abstract

Intensive agricultural systems have resulted in a depletion of soil organic matter stocks and nutrient content. In the last two decades agronomic systems have shifted towards more sustainable agronomic practices, including those aimed at recovering and maintaining soil health. In this sense, the addition of biochar -a porous, carbonaceous material- to the soil has been shown to be an effective method to enhance carbon sequestration and soil fertility.

Pyrolysis is one of the technologies available for biomass conversion which is receiving worldwide attention as a promising pathway to sustainability, as it allows for the complete utilization of the biomass yielding bio-oil, bio-syngas and biochar. In this process, organic material undergoes rapid thermal decomposition in the absence of oxygen, and the yields of products are influenced by feedstock properties and operation parameters.

In this study we prepared biochars from different biomass feedstocks: a) leaves and stems of *Flourensia oolepis* (FO), which is an endemic species of the arid central region of Argentina; b) peanut shells (PS), a waste product of peanut industries produced in large amounts in Córdoba province and c) *Phitophora sp.* algae (PhA), a freshwater species of algae that grow profusely in local rivers. Biochars were produced from the fast pyrolysis of starting biomasses between 280-350 °C under vacuum (0.1 -0.05 Torr) in a nitrogen atmosphere. The bioactivity of biochar aqueous extracts was evaluated on seeds of lettuce (*Lactuca sativa*) at 10, 7.5, 5, 2.5 and 1.5 % (w/v). Seed germination was assessed at 24 h interval during three days.

FO leaves-derived biochar water extracts exhibited a hormetic type of response, and only a transient inhibition of germination occurred at higher doses (10% w/v). Water extracts between 1.5 and 5 % (w/v) stimulated root and shoot growth up to 225 %. In the case of FO stems, bio-char water extracts did not affect seed germination at any of the concentrations tested; all the seeds germinated producing seedlings with normal morphology. The growth promoting effect of these extracts was even more dramatic than those found in the biochar water extracts derived from leaves. Shoot and root growth was stimulated at all concentrations tested; values ranged from 150 % to as much as 330 % promotion of growth at concentrations between 5 and 7.5 %, relative to the controls. The bio-char water extracts of PS did not affect germination, but seedlings exhibited abnormal morphology (small and dark apices). Root growth was inhibited at 5 and 7,5 % (w/v) , while shoot growth inhibition occurred only at 5 % (w/v). Bioassays carried out with leachates of PhA biochar showed the presence of fungi and germination was nil. Results show that FO could be considered a promissory species for the production of biochar, and the extremely high promoting effect of water extracts on seedling growth deserves to be investigated in depth. Although results with PS biochar water extracts were not promissory, further testing should be performed to assess if seedlings can attain normal growth.

PAPEL DE LA QUÍMICA SUPERFICIAL DE CARBÓN ACTIVADO EN SU ACTIVIDAD FOTOCATALÍTICA BAJO RADIACIÓN UV Y RADIACIÓN SOLAR SIMULADA

Inmaculada VELO GALA^{1,2,*}, Jesús J. LÓPEZ PEÑALVER¹,
Manuel SÁNCHEZ POLO¹, José RIVERA UTRILLA¹

¹Departamento de Química Inorgánica, Facultad de Farmacia. Universidad de Granada. Granada, Spain.

²ADPOR Group, Instituto Nacional del Carbón (INCAR, CSIC), Oviedo, Spain.

*Corresponding author. E-mail: i.velo@incarcsic.es

Los sistemas de tratamiento basados en la fotocatalisis heterogénea constituyen una de las tecnologías a tener en cuenta en el tratamiento de aguas contaminadas por compuestos orgánicos resistentes a los tratamientos convencionales. En ellos es necesario el uso de radiación luminosa que provoque en el catalizador su activación electrónica para la formación de especies radicalarias muy reactivas que intervendrán en la degradación del contaminante. Recientemente se ha llegado a la conclusión de que los carbones activados juegan un papel mayor que el de mero soporte, pudiendo actuar como material fotoactivo bajo la incidencia de la radiación con una longitud de onda adecuada.

El objetivo principal de este trabajo es identificar el origen del comportamiento fotocatalítico de los carbones activados en presencia de luz UV y radiación solar. El modelo de contaminante emergente seleccionado para evaluar la capacidad de degradación fotocatalítica fue el diatrizoato sódico (DTZ), medio de contraste utilizado en los hospitales en las pruebas de radiodiagnóstico. Los objetivos específicos fueron: (i) comprobar la existencia de las especies radicalarias que se pueden generar en el proceso de fotocatalisis; (ii) cuantificar los radicales generados por los carbones activados bajo luz UV y simulación solar; (iii) analizar la relación entre los radicales generados y las propiedades de los carbones. La presencia del carbón activado durante el proceso de fotodegradación del contaminante incrementa considerablemente su velocidad de eliminación tanto con luz UV como en el simulador solar. Los valores del band-gap (E_g) de los carbones activados obtenidos demostró que estos materiales se comportan como materiales semiconductores y, por tanto, como materiales fotoactivos. La determinación de la presencia del radical hidroxilo y el anión superóxido en los sistemas UV/AC y Solar/AC demuestra que el carbón activado actúa como un material fotocatalizador, y que las especies reactivas fotoinducidas son las responsables de que se alcancen valores de eliminación del contaminante modelo muy superiores a las obtenidas cuando sólo se emplea radiación.

La concentración de anión superóxido y de radical hidroxilo fotogenerados depende de la química superficial de los carbones activados, observándose que se ve favorecida la formación del radical hidroxilo cuando el valor de E_g es más bajo.

Se ha demostrado que el oxígeno disuelto en el medio juega un papel transcendental en el comportamiento fotoactivo del carbón activado, de manera que su retirada del medio favorece la recombinación de los pares electrón-hueco, impidiendo la formación del anión superóxido y, por tanto, de la generación de radicales hidroxilo. También se ha demostrado que la presencia de oxígeno en la superficie del carbón activado favorece la formación de las especies radicalarias, por lo que carbones con un alto contenido de oxígeno superficial podrían dar lugar a materiales con un mayor carácter fotoactivo.

Por último, hay que resaltar que el papel fotocatalizador de los carbones activados está favorecido por la presencia de grupos éster/anhídrido en su superficie, así como por un mayor porcentaje de átomos de carbono con hibridación sp^2 .



IMPROVED PHOTOCATALYTIC ACTIVITY OF g-C₃N₄/TiO₂ COMPOSITES PREPARED BY A SIMPLE IMPREGNATION METHOD

Cristian MIRANDA^{1,3,*}, Héctor D. MANSILLA², Jorge YÁÑEZ²,
Sergio OBREGÓN³, Gerardo COLÓN³

¹Biomaterials Department, Development Technological Unit (UDT), University of Concepcion, Concepción, Chile.

²Department of Organic Chemistry, Faculty of Chemical Science, University of Concepción, Concepción, Chile.

³Institute of Materials Science of Seville, Seville University Joint Center, CSIC, Seville, Spain.

*Corresponding author. E-mail: c.miranda@udt.cl

Short Abstract

g-C₃N₄ and TiO₂ hybrid structures are synthesized by means of a simple impregnation method having good photoactivities for the degradation of phenol under UV irradiation. From the wide structural and surface characterization we have stated that the presence of g-C₃N₄ notably affect the surface feature of TiO₂ (surface area and pore size distribution). Enhanced photoactivities have been obtained for composites systems. The best result was obtained for 2 wt% loading of g-C₃N₄ leading to a 70% of improvement with respect to bare TiO₂ in the reaction rate. The effective charge carrier separation was proposed as the responsible of such improved photoactivity.

EMERGING PHOTOCATALYTIC APPLICATIONS OF GRAPHITIC CARBON NITRIDE

Igor KRIVTSOV^{1,*}, Elisa GARCÍA-LÓPEZ², Giuseppe MARCI², Leonardo PALMISANO², José R. GARCÍA¹, Eva DÍAZ³, Salvador ORDÓÑEZ³

¹University of Oviedo-CINN, Department of Organic and Inorganic Chemistry, Oviedo, Spain.

²University of Palermo, DEIM, Palermo, Italy.

³University of Oviedo, Department of Chemical Engineering and Environmental Technology, Oviedo, Spain.

*Corresponding author. E-mail: uo247495@uniovi.es

Short Abstract

The unique electronic structure of C_3N_4 -type materials permits them to be successfully utilized for various photocatalytic applications such as CO_2 reduction, H_2 production or organic pollutants photo-assisted degradation. Band gap values observed for the pristine or doped g- C_3N_4 lie within the range of 2.5-2.8 eV, thus favoring the photocatalyst activation under visible light. However, a low specific surface area of carbon nitrides reduces their efficiency in a number of light-initiated processes. There are many exfoliation procedures known to tackle this drawback, but they inevitably cause certain structure rearrangements or functionalization of the material's surface, which modify the way of reaction compare to the pristine photocatalyst. In the present work we explore the effect exfoliation treatment has on the photocatalytic performance of C_3N_4 in the liquid-phase reactions with a special attention to the selective photo-assisted oxidation.



REMOVAL OF SULFUR MUSTARD GAS SURROGATE UNDER VISIBLE LIGHT ON THE SURFACE OF HYDROUS FERRIC OXIDE/GRAPHITE OXIDE COMPOSITES

Javier A. Arcíbar-Orozco^{1,2} and Teresa J. Bandoz^{1,*}

¹Department of Chemistry, The City College of New York, New York, NY 10031, USA.

²Centro de Innovación Aplicada en Tecnologías Competitivas A.C. (CIATEC), León, Guanajuato, México.

*Corresponding author. E-mail: tbandosz@ccny.cuny.edu

Short Abstract

Nowadays, owing to various military conflicts, an extensive research is needed to create multifunctional materials for protection against chemical attacks. 2-Chloroethyl ethyl sulfide (CEES) is a surrogate of mustard gas Bis(2-chloroethyl)sulfide (HD), better known as mustard gas, that is a toxic compound used in the past as a chemical warfare (CWA) agent. Understanding the principles of the destruction of the surrogate is a key factor for developing efficient protection media for the actual CWA decontamination. The iron (III) (hydr)oxides are known as excellent oxidizing agents with tunable properties. Due to their porosity and relatively high surface area, they have been proven to be excellent adsorbents. On the other hand, a great interest has emerged in the study of graphene-based materials. Owing to their unique properties they can provide beneficial features to their composites with metal oxides. The objective of this work is to evaluate the decontamination efficiency of a mustard gas surrogate (CEES) on the iron(hydr)oxides/graphite oxide composites. An extensive surface characterization of the materials was conducted, and the physicochemical properties of the materials were linked to their capacity for the CEES reactive adsorption.

Several crystal structures of the iron (hydr)oxides were studied and the ones with the best features were selected for preparing composites with GO. All composites have a high surface area and a high volume of mesopores in which the decontamination reactions can take place. The surface area is affected for the presence of graphite oxide. The addition of graphite oxide increases the number of terminal hydroxyl groups, which are reactive centers. The E_g of the materials ranged from low to medium (1-1.8 eV). GO affects the E_g depending on the chemical nature of the GO groups. The composites have high CEES adsorption capacities and depending on the crystal phase they outperform the iron hydroxides. Visible light enhances CEES removal owing to the photocatalytic properties. The CEES degradation products migrate to very small pores of the composites releasing the adsorption centers for further adsorption of CEES molecules. While mesopores enhance diffusion of large molecules, the lattice imperfections have a positive effect on the uptake and transformation of the toxic chemicals. Several degradation products (hydrolysis and oxidation) were identified on the surface of the materials and in the gas phase.

HIERARCHY OF HYBRID COMPOSITES BASED ON CARBON NANOMATERIALS AND METALLIC NANOPARTICLES

María Luisa GARCÍA-BETANCOURT*

Centro de Investigaciones Químicas, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Avenida Universidad 1001, Col. Chamilpa, 62209 Cuernavaca, Morelos, México.

*Corresponding author. E-mail: luisa.maria.betan@gmail.com

Short Abstract

The essential purpose of this work is to describe the characteristics of hybrid composites based in carbon nanostructures and metallic nanoparticles. One of the most important factors that determine the multi-functionality of hybrid composites is hierarchy, in which at the nanoscale, it is possible to exploit the physicochemical properties of nanostructures. This report is focused in the analysis of hybrid composites in the three scales: nanostructures (carbon nanotubes, metallic nanoparticles, and graphene oxide) composing a determinate micro-structure synthesized over a support with millimetric dimensions. The use of supports allowed the characterization, easy handle, and applications tests for spintronics, field emission, optoelectronics.

Carbon Nanotubes were directly growth perpendicularly over a substrate by Chemical Vapor Deposition; graphene oxide was produced by Hummer's method, and metallic nanoparticles were synthesized by ion implantation process. The morphology of hybrid composites was observed by Scanning Electron Microscopy and revealed the structure at the three levels.

The results and perspectives may be considered in each case: i) It was possible to synthesize a variety of morphologies with vertically aligned carbon nanotubes (VACNTs) growth over a support by only varying the condition of synthesis. A particularity of such VACNTs is that they contain metallic magnetic nanoparticles of iron, located at different sites of its structure; they could be at the center or at the walls. This hybrid composite exhibited high performance in magnetic and field emission measurements. ii) In other cases, carbon nanotubes were mixed with graphene oxide, improving physical properties of the system. iii) The main advantage of the synthesis of metallic nanoparticles by ion implantation is the control of distribution near the surface, as well as the separation, avoiding agglomeration. The fundamental interest over this kind of nanoparticles is the possibility of anchoring carbon nanostructures with sulfurated or nitrogenated molecules at specific sites of support.



ESTUDIO DE LA OBTENCIÓN DE COMPOSITOS A BASE DE POLIMETILMETACRILATO CON DIFERENTES REFUERZOS: NTCPM, ZrO₂, y Al₂O₃

Julia M. Ortiz^{1,*}, Aidé Saézn^{1,*}, Antonia Martínez¹, Leticia Barajas¹

¹Departamento de Química Orgánica. Facultad de Ciencias Químicas. Doctorado en Ciencia y Tecnología de Materiales. Blvd. V. Carranza esq. José Cárdenas Valdés, C.P. 25280, Tel. (844) 4169213. Universidad Autónoma de Coahuila. Saltillo Coahuila. México.

*Corresponding author. E-mail: juliaortizreyes@uadec.edu.mx, aidesaenz@uadec.edu.mx

Resumen

En el presente trabajo de investigación, se estudió la correlación de las propiedades estructurales en función de la dispersión de los refuerzos así como el método de obtención en la estabilidad térmica de los compositos obtenidos. Se trabajó con tres diferentes refuerzos NTCPM, ZrO₂ y Al₂O₃, empleando una concentración de 1% en peso y el método de obtención fue por polimerización radicalica *in situ*. Para la polimerización radicalica se utilizó como iniciador el peróxido de benzoílo, se agregaron los refuerzos en el medio de reacción a una temperatura de 90°C. Se llevo a cabo un estudio de estabilidad térmica (TGA) encontrando que la polimerización *in situ* presentó tres caídas, una a 180°C otra a 270°C y la tercera a 340°C, donde el Al₂O₃ fue el que obtuvo la mejor estabilidad térmica; así mismo se llevó a cabo la caracterización mediante espectroscopía de infrarrojo FT-IR (ATR), encontrando las bandas características de la función carbonilo en 1700 cm⁻¹ y 1100 cm⁻¹ del grupo C-O correspondiente al polimetilmetacrilato PMMA.

FOTOACTIVIDAD DE TiO_2 PARA LA DEGRADACIÓN DE AZUL DE METILENO Y FENOL

Felipe Barra¹, Ricmary Montaña¹, Juan Matos^{1,*}

¹Area Biomateriales, Unidad de Desarrollo Tecnológico, Universidad de Concepción, Av. Cordillera, 2634, Parque Industrial Coronel, Concepción, Chile.

*Corresponding author. E-mail: j.matos@udt.cl

RESUMEN

La fotoactividad del TiO_2 para degradar diversos contaminantes de alto peso molecular es una de los compuestos más utilizados en fotocatalisis. El TiO_2 un material barato, inofensivo, química y térmicamente estable, respetuoso del medio ambiente y no tóxico. El objetivo de este trabajo fue preparar $\text{Fu-TiO}_2\text{-C}$ y utilizarlo como un catalizador para la fotodegradación catalítica de fenol y Azul de metileno bajo irradiación UV-Vis. Los materiales híbridos se prepararon a través de síntesis solvotérmica con 0.5 g de Furfural y 0.5 g de Isopropóxido de Titanio IV disueltos en etanol absoluto por medio de agitación en un vaso de teflón dentro de un autoclave. El precursor orgánico utilizado es el Furfural ya que se verificó su potencial de fotoactividad en otros trabajos realizados alcanzando hasta 4 veces más que un TiO_2 comercial. Mismas concentraciones de azul de metileno (MB) y fenol (Ph) fueron seleccionados como compuestos modelos, así se compara el comportamiento de la cinética de degradación en función del tiempo. Los resultados indican que los materiales híbridos son una alternativa económicamente más viable y asimismo amigable con el medio ambiente, posicionándola como una tecnología potencial en el ámbito de la fotocatalisis heterogénea bajo irradiación UV-vis.



ESTUDIO DE LA CARGA DE SACAROSA SOBRE LA FOTOACTIVIDAD CATALÍTICA DE TiO₂ DE MATERIALES HÍBRIDOS

Victoria Benítez¹, Ricmary Montaña¹, Juan Matos^{1,*}

¹Area Biomateriales, Unidad de Desarrollo Tecnológico, Universidad de Concepción, Av. Cordillera, 2634, Parque Industrial Coronel, Concepción, Chile.

*Corresponding author. E-mail: j.matos@udt.cl

RESUMEN

El desarrollo de nuevas tecnologías que permitan un correcto saneamiento de aguas residuales y que sean amigables con el medio ambiente, se ha vuelto un desafío para el mundo científico. La contaminación producida por colorantes provenientes de la industria textil genera compuestos tóxicos tanto orgánicos como inorgánicos, los cuales han sido tratados con diferentes técnicas como degradación catalítica o biológica. El objetivo de este trabajo se centra en desarrollar un catalizador de TiO₂ dopado en carbono preparado por síntesis solvotermal, en donde se estudiará la variación de carga del precursor orgánico, que en este caso será sacarosa. Como sustancia contaminante, se utilizará azul de metileno (MB) y se evaluará la cinética de degradación fotocatalítica en función del tiempo. Resultados de trabajos anteriores indican que estos materiales híbridos nanoestructurados presentan bajo luz visible una fotoactividad superior a la de un catalizador de TiO₂ comercial en la fotodegradación de azul de metileno.

EFFECTO DE LA TEMPERATURA DE SÍNTESIS DE TiO_2 -C SOBRE LA FOTODEGRADACIÓN DE COMPUESTOS AROMÁTICOS PRESENTES EN AGUAS RESIDUALES

Gabriel CHURIO¹, Ricmary MONTAÑA¹, Po S. POON¹, Juan MATOS^{1,*}

¹Departamento de Biomateriales, Unidad de Desarrollo Tecnológico, Universidad de Concepción, Av. Cordillera, 2634, Parque Industrial Coronel, Concepción, Chile.

*Autor correspondiente. E-mail: j.matos@udt.cl

Short Abstract

La fotocatalisis es un proceso altamente eficaz dentro de los denominados Procesos Avanzados de Oxidación para la remediación del agua. Esta se basa en la degradación de los contaminantes por acción de radicales hidroxilos producidos en reacciones de óxido-reducción que suceden en la superficie de un fotocatalizador al ser irradiado con luz. El dióxido de titanio (TiO_2) ha sido ampliamente utilizado como fotocatalizador, sin embargo, la actividad de este compuesto está restringida al rango UV del espectro electromagnético, lo cual puede modificarse mediante el dopaje con diversos elementos.

En este trabajo, empleamos quitosano como fuente de carbono para preparar materiales híbridos mesoporosos y nanoestructurados de TiO_2 -C mediante síntesis solvotérmica. Se estudió la influencia de la temperatura (180, 200 y 220 °C) sobre las propiedades fisicoquímicas de los materiales. La actividad fotocatalítica de estos sólidos fue evaluada en la fotodegradación de la cafeína, estimulante frecuentemente encontrado en el café, té, y bebidas gaseosas. Igualmente, se estudió la degradación de la amoxicilina, un antibiótico semisintético derivado de la penicilina de uso frecuente en el tratamiento de diversas infecciones, como ejemplos de moléculas presentes en las aguas residuales domésticas.





TLMC₂

MATERIALES SUSTENTABLES A BASE DE GRAFENO
Termas de Chillán, Chile 16 al 18 de noviembre de 2016

www.tlmc2.cl
www.udt.cl