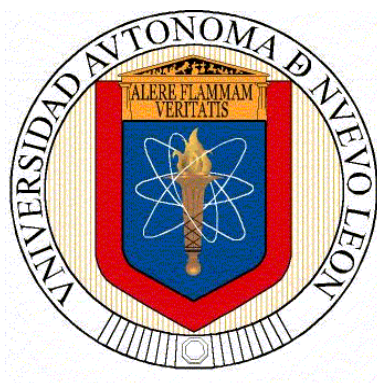


UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS



**DESARROLLO Y EVALUACIÓN DE UN REACTOR FOTOQUÍMICO PARA LA
DEGRADACIÓN DE CONTAMINANTES PRESENTES EN FASE ACUOSA**

Por

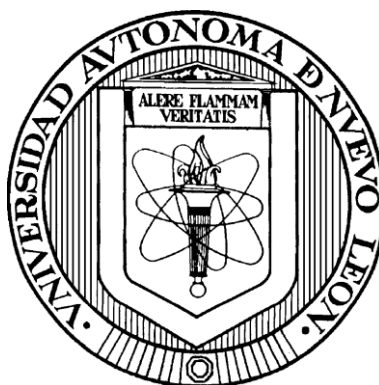
FRANCISCO JAVIER RUIZ CORREA

**Como requisito parcial para obtener el Grado de MAESTRÍA EN CIENCIAS
con Orientación en Procesos Sustentables**

Julio, 2026

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS



**DESARROLLO Y EVALUACIÓN DE UN REACTOR FOTOQUÍMICO PARA LA
DEGRADACIÓN DE CONTAMINANTES PRESENTES EN FASE ACUOSA**

Por

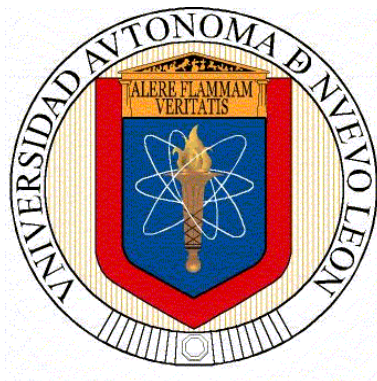
FRANCISCO JAVIER RUIZ CORREA

**Como requisito parcial para obtener el Grado de MAESTRÍA EN CIENCIAS
con Orientación en Procesos Sustentables**

Julio, 2026

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS



DESARROLLO Y EVALUACIÓN DE UN REACTOR FOTOQUÍMICO PARA LA DEGRADACIÓN DE CONTAMINANTES PRESENTES EN FASE ACUOSA

Por

FRANCISCO JAVIER RUIZ CORREA

**Como requisito parcial para obtener el Grado de MAESTRÍA EN CIENCIAS
con Orientación en Procesos Sustentables**

Dr. Jacob Josafat Salazar Rábago
Asesor de la Tesis

Julio, 2026

**DESARROLLO Y EVALUACIÓN DE UN REACTOR FOTOQUÍMICO PARA LA
DEGRADACIÓN DE CONTAMINANTES PRESENTES EN FASE ACUOSA**

Aprobación de la Tesis

Dr. Jacob Josafat Salazar Rábago
Asesor de la Tesis

Dr. Juan Manuel Hernández López
Co-asesor de la Tesis

Dr. Jorge Luis Guzmán Mar
Miembro del comité de tesis

Dra. Margarita Loredó Cancino
Miembro del comité de tesis

Dr. Salvador Tututi Ávila
Miembro del comité de tesis

Dr. Javier Rivera De La Rosa
Subdirector de Estudios de Posgrado

DEDICATORIA

A mis padres, mis abuelos y mis hermanos por todo su amor y apoyo incondicional en las metas, no sería la persona que soy hoy si no fuera por ustedes, los amo.

"Si he visto más lejos es porque estoy sentado sobre hombros de gigantes."

Issac Newton

AGRADECIMIENTOS ACADEMICOS

El autor expresa su agradecimiento a la Secretaría de Ciencia, Humanidades, Tecnología e Innovación (SECIHTI) por la beca de posgrado otorgada (Número de CVU: [2049967]), la cual permitió la realización de estos estudios y el desarrollo del presente trabajo de investigación.

A la Universidad Autónoma de Nuevo León, a la Facultad de Ciencias Químicas y a la Facultad de Ciencias de la Tierra, por las instalaciones, los materiales y el equipo de laboratorio proporcionados para la realización de este proyecto de tesis.

Al Dr. Carlos Gilberto Aguilar Madera, por el apoyo brindado durante la estancia de investigación.

Al Dr. Juan Manuel Hernández López, coasesor de tesis, por su orientación, asesoramiento y apoyo durante el desarrollo de este proyecto.

Al comité tutorial, integrado por el Dr. Salvador Tututi Ávila, la Dra. Margarita Loredó Cancino y el Dr. Jorge Luis Guzmán Mar, por sus valiosos consejos, observaciones y apoyo a lo largo de este proyecto de tesis.

A todos los profesores que contribuyeron a su formación académica, por sus enseñanzas, orientación y apoyo durante el transcurso de mis estudios.

AGRADECIMIENTOS PERSONALES

Quiero agradecer al Dr. Jacob Josafat Salazar Rábago mi asesor de tesis por todo su apoyo y consejos tanto académico como personal a lo largo de estos 2 años.

Al Dr. Luis Alfonso Cavazos Cuello por todo su apoyo, consejos y amistad durante esta etapa de mi formación.

A mis compañeros: Samuel, Luna, Heidi, Andriy, Julieta, Alan, Mike, Andrea, Ever, Diego y Jair por su compañía y amistad durante estos 2 años estudiando juntos.

A mis compañeros del grupo de trabajo de laboratorio: Abril Morales, Abril Juarez, Dana, Javier, Yoana, Victoria, Rodrigo, Juan, Giovani, Gerardo, Jorge, Heidi, Andrés, Hernan, Adrián, Laura, Johan, Rafa, Cindy, Portilla y Sebastián por su apoyo, compañerismo y amistad, así como por hacer del laboratorio un lugar agradable para aprender y crecer profesionalmente.

Finalmente, agradezco a mis padres, abuelos y hermanos por su amor, comprensión y apoyo incondicional, así como por la confianza que siempre han depositado en mí.

Tabla de contenido

Capítulo	Página
1. Introducción	1
2. Antecedentes	4
2.1 Contaminación del medio hídrico	4
2.1.1 Contaminantes orgánicos	5
2.1.2 Contaminantes fenólicos o con estructuras aromáticas.....	8
2.1.3 Fenol.....	10
2.2 Procesos de remoción.....	13
2.2.1 Limitaciones de los métodos actuales	14
2.3 Procesos Fotoquímicos	15
2.3.1 Principios fotoquímicos	15
2.3.2 Fotólisis	17
2.3.3 Fotocatálisis	18
2.3.4 El TiO_2 como fotocatalizador predominante.....	19
2.4 Fotorreactores.....	19
2.4.1 Clasificación por tipo de flujo.....	19
2.4.2 Clasificación por posición de la irradiancia	20
2.4.3 Clasificación por tipo de irradiación	23
2.5 Modelado de las reacciones fotoquímicas.....	25
2.5.1 Dependencia con la radiación	26
2.5.2 La Ecuación de Transferencia Radiativa (RTE).....	26
2.5.3 Ley de Beer-Lambert	27
2.5.4 LVREA (Local Volumetric Rate of Energy Absorption).....	27
2.5.5 Tasa Volumétrica Local de Absorción de Fotones (LVRPA)	28
2.5.6 Modelo de Langmuir-Hinshelwood (L-H) modificado.....	28
2.5.7 Cinética de pseudo-primer orden	29
3. Planteamiento del problema.....	31
3.1. Justificación.....	31

3.2.	Hipótesis.....	32
3.3.	Objetivos	32
3.3.1.	Objetivo general	32
3.3.2.	Objetivos específicos	32
4.	Metodología	34
4.1	Reactivos	34
4.2	Fotorreactor	35
4.3	Fuentes de irradiación	37
4.4	Sistema experimental de foto-degradación	38
4.5	Cinética de degradación	41
4.5.1	Preparación de la mezcla estándar del contaminante modelo	41
4.5.2	Fotólisis	41
4.5.3	Fotocatálisis	42
4.6	Métodos analíticos	42
4.6.1	Espectrofotometría UV-Vis	42
4.6.2	Demanda química de oxígeno	43
4.7	Disposición final de residuos	44
5.	Resultados y discusión	46
5.1	Caracterización de las lámparas	46
5.1.1	Espectro de emisión	46
5.1.2	Irradiación emitida	50
5.1.3	Propuesta semi-empírica para I_{of}	53
5.2	Fotólisis	57
5.2.1	Fotólisis mediante luz visible.....	57
5.2.2	Evolución del espectro de emisión ante la degradación del fenol por fotólisis	58
5.2.3	Cálculo de la tasa de absorción volumétrica de fotones	60
5.2.4	Resumen de resultados cinéticos de degradación por fotólisis	62
5.2.5	Resultados de la degradación del fenol mediante fotólisis	64
5.2.6	Resultados del análisis de DQO para fotólisis	71

5.3	Fotocatálisis	72
5.3.1	Caracterización del fotocatalizador (TiO ₂)	72
5.3.2	Adsorción del fotocatalizador	77
5.3.3	Evolución del espectro de emisión ante la degradación del fenol por fotocatálisis	78
5.3.4	Resumen de resultados cinéticos de degradación por fotólisis	79
5.3.5	Cálculo de la tasa de absorción volumétrica de fotones	80
5.3.6	Dosis del fotocatalizador.....	81
5.3.7	Cinética de degradación	82
5.3.8	Resultados del análisis de DQO para fotólisis	84
5.4	Propuesta de diseño para un reactor.....	85
5.4.1	Modelo cinético.....	85
5.4.2	Modelado del reactor.....	87
5.4.3	Modelo para sistema homogéneo.....	88
5.4.4	Modelo para sistema heterogéneo	91
6.	Conclusiones	94
7.	Bibliografía	97
	Apéndices.....	104
	Resumen autobiográfico.....	109

LISTA DE TABLAS

Tabla	Página
Tabla 1 Contaminantes encontrados en efluentes de agua.	7
Tabla 2 Fotorreactores utilizados en la literatura divididos por tipo de flujo.	21
Tabla 3 Fotorreactores utilizados en la literatura divididos por tipo de irradiación.	24
Tabla 4 Arreglo de las lámparas en el fotorreactor.	40
Tabla 5 Energía de enlace de cada enlace presente en el fenol. [33]	48
Tabla 6 Resultados del cálculo del factor de modulación fotónica propuesto.	56
Tabla 7 Resumen de resultados con fotólisis con las lámparas adelante.	62
Tabla 8 Resumen de los resultados del análisis de fisisorción de N ₂	74
Tabla 9 Resumen de resultados con fotólisis con las lámparas	79
Tabla 10 Datos de intensidad con diferente número de lámparas, diferente tipo de luz y utilizando diferente vaso de reacción.	104
Tabla 11 Cinéticas de degradación utilizando diferente numero de lámparas con reflectores.	105
Tabla 12 Cinéticas de degradación utilizando diferente número de lámparas sin reflectores	106
Tabla 13 Datos cinéticos de degradación por fotólisis mediante la técnica de DQO	107
Tabla 14 Datos cinéticos de degradación por fotocátalisis mediante la técnica de DQO	108

LISTA DE FIGURAS

Figura	Página
Figura 1 Molécula del fenol.	34
Figura 2 Fotorreactor de irradiación externa.....	36
Figura 3 Lámparas utilizadas para la experimentación: (a) lámparas de luz visible marca Exo Terra Repti-Glo de 120V y 13 W, (b) lámparas sanitizantes de luz UVC de 25 W y 110 V marca BAIMNOCM.	38
Figura 4 A la izquierda se muestra un radiómetro de la marca GENERAL y a la derecha de la figura un espectrofotómetro de la marca ocean optics modelo USB2000, ambos equipos utilizados para este trabajo.....	38
Figura 5 Espectro de emisión de luz de las lámparas de luz UV.....	46
Figura 6 Espectro de emisión de luz de las lámparas de luz visible.	47
Figura 7 Aportación energética de cada pico de emisión (a) luz visible (b) luz UV	49
Figura 8 Variación de la intensidad lumínica con respecto al número de lámparas con reflectores CR y sin reflectores SR con diferente material de reactor, (a) utilizando lámparas de luz visible y (b) lámparas de luz UV.....	51
Figura 9 Cambio en la irradiancia emitida por un mismo número de lámparas utilizando diferente arreglo espacial utilizando lámparas UV (a) con reflectores a una distancia de 7 cm del vaso de reacción (b) con reflectores a 17 cm de distancia, (c) sin reflectores a 7 cm de distancia y (d) sin reflectores a 17 cm de distancia.	52
Figura 10 Relación entre la intensidad y la distancia entre la lámpara y el reactor de cuarzo	54
Figura 11 Relación del número de lámparas con la intensidad lumínica.....	54
Figura 12 Comparación de la relación entre el número de lámparas con la intensidad lumínica, con y sin reflectores y a 2 distancias distintas, adelante (7 cm entre el reactor y la lámpara) y atrás (17 cm entre el reactor y la lámpara).....	56
Figura 13 Evaluación de la fotodegradación de fenol utilizando 6 lámparas utilizando diferente tipo de luz.....	57
Figura 14 Evolución del espectro a (a) 6 lámparas, (b) 3 lámparas y (c) 1 lámpara para el sistema homogéneo	59
Figura 15 Tasa volumétrica local de absorción de fotones en fotólisis.....	60
Figura 16 Porcentaje de degradación con fotólisis después de cierto tiempo (a) con reflectores y (b) sin reflectores.....	65
Figura 17 Influencia del uso de reflectores en la tasa de reacción.....	65
Figura 18 Influencia del número de lámparas en la tasa de reacción utilizando reflectores.....	67
Figura 19 Influencia del posicionamiento en la velocidad de reacción utilizando 6 lámparas con y sin reflectores.	68

Figura 20 Cinéticas de degradación fotolítica con las lámparas adelante con reflectores	68
Figura 21 Comparación del uso de las lámparas delanteras frente a las traseras con 6 lámparas	69
Figura 22 Comparación del uso de las lámparas Adelante vs atrás con 1 lámpara.....	70
Figura 23 Tasa de reacción de pseudo primer orden a diferente número de lámparas en fotólisis.....	71
Figura 24 Análisis de DQO para los experimentos con fotólisis utilizando reflectores (solo confiable hasta 3 mg/L).....	71
Figura 25 Tasa de reacción de pseudo primer orden a diferente número de lámparas en fotólisis calculado en base a datos experimentales del análisis DQO.....	72
Figura 26 Resultados del análisis difracción de rayos X del TiO_2	73
Figura 27 Análisis XPS del dióxido de titanio, donde podemos observar en la figura (a) la región del Ti y en la figura (b) la región del O.....	75
Figura 28 Grafica del band gap	76
Figura 29 Adsorción del fenol en el fotocatalizador (TiO_2).....	77
Figura 30 Evolución del espectro a (a) 6 lámparas, (b) 3 lámparas y (c) 1 lámpara para el sistema heterogéneo	79
Figura 31 Tasa volumétrica local de absorción de fotones en fotocatalisis	80
Figura 32 Influencia de la concentración de fotocatalizador en la tasa de degradación fotoquímica del fenol	81
Figura 33 Influencia del número de lámparas en la tasa de reacción fotocatalítica.....	82
Figura 34 Influencia del número de lámparas en la tasa de degradación fotocatalítica utilizando el modelo de pseudo primer orden.	83
Figura 35 Análisis de DQO para los experimentos con fotólisis utilizando reflectores (solo confiable hasta 3 mg/L).....	84
Figura 36 Influencia del número de lámparas en la tasa de degradación fotocatalítica utilizando el modelo de pseudo primer orden midiendo mediante el análisis de DQO ...	85
Figura 37 Regiones evaluadas de intensidad	86
Figura 38 Perfiles de degradación por fotólisis, experimentales vs calculados.....	90
Figura 39 Perfiles de degradación por fotólisis, experimentales vs calculados.....	92
Figura 40 Perfiles de degradación por fotólisis, experimentales vs calculados.....	93

Nomenclatura

Símbolo / abreviatura	Significado	Símbolo equivalente latino
•OH	Radical hidroxilo	OH radical
α	Coeficiente de absorción	Alpha
c	Velocidad de la luz	C
C_A	Concentración del contaminante	CA
C_{cat}	concentración del fotocatalizador	CCAT
CB	Banda de conducción	CB
COD	Carbono orgánico disuelto	COD
CPC	Colector parabólico compuesto	CPC
CSTR	Reactor continuo de tanque agitado	CSTR
DQO	Demanda química de oxígeno	DQO
e_{CB}^-	Electrón en la banda de conducción	e_{CB}^-
E	Energía del fotón	E
E_g	Energía de banda prohibida (band gap)	E _g
LVRPA / e_a	Tasa volumétrica local de absorción de fotones / energía absorbida local	LVRPA / e_a
h_{altura}	Altura	h altura
h_p	Constante de Planck	hp
h_{VB}^+	Hueco en la banda de valencia	h_{VB}^+
I	Intensidad radiactiva	I
κ	Coeficiente de absorción volumétrica del medio	Kappa
κ_λ	Coeficiente de absorción volumétrica del medio a una longitud de onda determinada	Kappa lambda
k'	Coeficiente cinético aparente	k'
k	Coeficiente cinético	k
L	Longitud	L
Λ	Longitud de onda	Lambda
L-H	Modelo de Langmuir-Hinshelwood	L-H
n	Número de lámparas	n
$O_2^{\bullet -}$	Radical superóxido	$O_2^{\bullet -}$
Ω	Ángulo sólido	Omega
PAO	Proceso de oxidación avanzada	PAO
P(s'→s)	Función de fase de dispersión	P(s'→s)
PBR	Reactor de lecho empacado	PBR
PFR	Reactor de flujo pistón	PFR
PTAR	Planta tratadora de aguas residuales	PTAR
ϕ	Eficiencia o rendimiento cuántico	Phi
ϕ_{mf}	Factor de modulación fotónica	Phi mf
r_A	Tasa de reacción	ra
r_{LR}	Radio entre el reactor y la lámpara	rLR

Nomenclatura

Símbolo / abreviatura	Significado	Símbolo equivalente latino
s	Dirección de propagación / coordenada de trayectoria del fotón	s
SC	Semiconductor	SC
σ_λ	Coeficiente de dispersión volumétrica	Sigma lambda
t	Tiempo	t
TiO₂	Dióxido de titanio	TiO ₂
UV	Radiación ultravioleta	UV
UV-A	Radiación ultravioleta A	UV-A
VB	Banda de valencia	VB
ν	Frecuencia de la radiación	s ⁻¹
V_R	Volumen del reactor	VR
VB	Banda de valencia	VB
W_{cat}	Peso del catalizador	Wcat
X_A	Fracción de conversión	XA

1. Introducción

El agua es el recurso natural más importante para la vida y un elemento esencial para el desarrollo social, económico e industrial. Aunque el volumen total de agua en la Tierra es elevado, la fracción disponible como agua dulce accesible para uso humano es limitada: la mayor parte se encuentra en océanos o inmovilizada en glaciares y casquetes polares, por lo que menos del 1% se localiza en ríos, lagos y acuíferos accesibles. Esta disponibilidad restringida, aunada al crecimiento poblacional, la expansión industrial y la intensificación agrícola, ha incrementado la presión sobre los recursos hídricos, provocando una degradación progresiva en la calidad del agua superficial y subterránea [1,2,3].

La contaminación del medio hídrico se define como la alteración de las propiedades físicas, químicas o biológicas del agua por la incorporación de sustancias externas que modifican su composición natural. Estas alteraciones se reflejan en parámetros como la demanda química de oxígeno (DQO), el carbono orgánico disuelto (COD), la turbidez, la presencia de metales pesados y la detección de microcontaminantes orgánicos. Las principales fuentes de contaminación son antropogénicas e incluyen descargas industriales sin tratamiento, efluentes urbanos, escurrimientos agrícolas con fertilizantes y pesticidas, actividades minero-metalúrgicas y la disposición inadecuada de residuos sólidos y farmacéuticos [3].

Entre los contaminantes más relevantes destacan los compuestos orgánicos, que abarcan fenoles, pesticidas, herbicidas, hidrocarburos aromáticos, surfactantes, colorantes y compuestos farmacéuticos. Se han reportado más de 1,500 compuestos orgánicos en aguas

23 residuales industriales y municipales, muchos de los cuales presentan baja
24 biodegradabilidad y elevada estabilidad química, favoreciendo su persistencia ambiental.
25 En este contexto, los contaminantes emergentes como fármacos, metabolitos, hormonas y
26 productos de cuidado personal cobran especial importancia por detectarse en
27 concentraciones traza (ng/L a µg/L), pero con potencial bioacumulativo y efectos crónicos
28 sobre organismos acuáticos y, potencialmente, sobre la salud humana. El problema se
29 agrava debido a que las plantas tratadoras de aguas residuales (PTAR) convencionales,
30 basadas principalmente en tratamientos primarios y secundarios, no fueron diseñadas para
31 eliminar completamente moléculas orgánicas complejas y estructuras aromáticas
32 recalcitrantes; por ello, estos compuestos pueden atravesar los sistemas de tratamiento y
33 llegar a cuerpos receptores [1,4].

34 Dentro de los contaminantes orgánicos, los compuestos fenólicos y aromáticos poseen un
35 papel crítico debido a su estabilidad asociada al anillo bencénico, su baja
36 biodegradabilidad y su toxicidad incluso a bajas concentraciones. Entre ellos, el fenol
37 (C_6H_5OH) destaca por su alta relevancia industrial y ambiental, además de ser una
38 molécula modelo ampliamente utilizada para estudiar mecanismos de degradación
39 avanzada. Sus propiedades fisicoquímicas (como su especiación dependiente del pH,
40 solubilidad y capacidad de formar enlaces de hidrógeno) influyen en su comportamiento
41 en el medio acuático y en su interacción con catalizadores. Asimismo, su degradación
42 puede generar intermediarios aromáticos (p. ej., catecol, hidroquinona y benzoquinona),
43 por lo que resulta indispensable evaluar no solo la disminución de concentración, sino
44 también la mineralización global del carbono orgánico [5].

45 Ante las limitaciones de los métodos convencionales, los Procesos de Oxidación
46 Avanzada (PAO), en particular los procesos fotoquímicos se presentan como alternativas

47 viables para la degradación de contaminantes recalcitrantes mediante la generación de
48 especies altamente reactivas capaces de romper estructuras aromáticas y conducir a
49 productos menos nocivos. En este marco, el desarrollo, evaluación y modelado
50 matemático de fotorreactores resulta esencial, ya que el desempeño del sistema depende
51 de fenómenos acoplados de transferencia radiativa, absorción de fotones y cinética de
52 reacción. Por tanto, esta tesis se orienta a contribuir al análisis del arreglo espacial de un
53 reactor fotoquímico para la degradación de contaminantes en fase acuosa, utilizando el
54 fenol como compuesto modelo y considerando el papel clave de la radiación y de los
55 modelos cinéticos y reactivos para optimizar el proceso.

56 2. Antecedentes

57 2.1 Contaminación del medio hídrico

58 El agua es el recurso natural más importante para la vida en el planeta y constituye el eje
59 central del desarrollo social, económico e industrial. Desde el punto de vista
60 fisicoquímico, es el solvente universal en el que se desarrollan la mayoría de los procesos
61 biológicos y ambientales [1]. Se estima que el volumen total de agua en la Tierra es de
62 aproximadamente 1,386 millones de km³; sin embargo, cerca del 97.5% corresponde a
63 agua salina presente en océanos y mares. Del pequeño porcentaje restante de agua dulce,
64 la mayor parte se encuentra confinada en glaciares y casquetes polares, por lo que menos
65 del 1% del total mundial es directamente accesible para consumo humano, agricultura e
66 industria [2].

67 A pesar de su aparente abundancia, el recurso hídrico se encuentra sometido a una presión
68 creciente debido al incremento poblacional, la expansión industrial y el desarrollo agrícola
69 intensivo. Las descargas continuas de aguas residuales municipales e industriales han
70 provocado una degradación progresiva de la calidad de ríos, lagos y acuíferos,
71 comprometiendo la disponibilidad de agua potable y generando impactos ecológicos
72 significativos [3].

73 La contaminación del medio hídrico puede definirse como la alteración negativa de las
74 características físicas, químicas o biológicas del agua debido a la incorporación de
75 sustancias externas que modifican su composición natural. Estas alteraciones pueden
76 manifestarse como cambios en parámetros como la demanda química de oxígeno (DQO),

77 el carbono orgánico disuelto (COD), la turbidez, la concentración de metales pesados o la
78 presencia de microcontaminantes orgánicos [3,4].

79 Las principales fuentes de contaminación son de origen antropogénico e incluyen:

- 80 • Descargas industriales sin tratamiento adecuado.
- 81 • Efluentes urbanos provenientes de sistemas de alcantarillado.
- 82 • Escurrimientos agrícolas cargados de fertilizantes y pesticidas.
- 83 • Actividades mineras y metalúrgicas.
- 84 • Disposición inadecuada de residuos sólidos y farmacéuticos.

85 En las plantas tratadoras de aguas residuales (PTAR), los tratamientos convencionales se
86 dividen en etapas primarias (remoción física), secundarias (degradación biológica) y, en
87 algunos casos, terciarias (pulimento del efluente). Sin embargo, múltiples investigaciones
88 han demostrado que los procesos primarios y secundarios no son suficientes para eliminar
89 completamente contaminantes orgánicos complejos, compuestos aromáticos
90 recalcitrantes y contaminantes emergentes presentes en concentraciones traza. Esta
91 situación ha generado la necesidad de desarrollar tecnologías avanzadas capaces de lograr
92 no solo la transferencia de fase del contaminante, sino su transformación química o
93 mineralización completa [5].

94 2.1.1 Contaminantes orgánicos

95 Los contaminantes orgánicos representan una de las categorías más amplias y complejas
96 dentro de la contaminación hídrica. Comprenden miles de compuestos de origen natural o
97 sintético, entre los que se incluyen [3]:

- 98 • Fenoles y derivados fenólicos
- 99 • Hidrocarburos aromáticos policíclicos
- 100 • Pesticidas y herbicidas
- 101 • Colorantes industriales

- 102 • Surfactantes
- 103 • Compuestos nitrogenados y organofosforados
- 104 • Fármacos y productos de cuidado personal

105 Se estima que existen más de 1,500 compuestos orgánicos detectados en aguas residuales
106 industriales y municipales. Muchos de ellos poseen características estructurales que les
107 confieren estabilidad química y resistencia a la biodegradación, lo que favorece su
108 persistencia en el ambiente acuático [6].

109 Dentro de esta categoría, los contaminantes emergentes (CE) han cobrado especial
110 relevancia en las últimas décadas. Estos compuestos, que incluyen fármacos, metabolitos
111 farmacéuticos, hormonas sintéticas, productos cosméticos y microplásticos, se encuentran
112 típicamente en concentraciones del orden de ng L^{-1} a $\mu\text{g L}^{-1}$. Aunque estas
113 concentraciones son bajas, su continua descarga y su posible bioacumulación generan
114 preocupación debido a los efectos crónicos que pueden inducir en organismos acuáticos
115 [2].

116 El problema principal radica en que los sistemas de tratamiento biológico convencionales
117 no fueron diseñados para degradar moléculas orgánicas complejas con estructuras
118 aromáticas estables. Como resultado, estos compuestos pueden atravesar las PTAR y ser
119 liberados en cuerpos receptores, donde afectan la biodiversidad, alteran cadenas tróficas
120 y generan riesgos potenciales para la salud humana [8].

121 Algunos de estos contaminantes se muestran en la Tabla 1.

122

123

Fármaco contaminante	Fórmula molecular	Concentración ng/L	MM (g/mol)	Ref.
1,4-dioxano	C ₄ H ₈ O ₂	100 – 1,011	88.11	[1]
17β-estradiol (E2)	C ₁₈ H ₂₄ O ₂	80 – 9,770	272.38	[1]
Ácido 1-naftalensulfónico	C ₁₀ H ₈ O ₃ S	100 – 500	208.23	[12]
Ácido acetilsalicílico	C ₉ H ₈ O ₄	10.0 – 47,600	180.15	[16]
Atenolol	C ₁₄ H ₂₂ N ₂ O ₃	20.1	266.34	[12]
Azul de metileno	C ₁₆ H ₁₈ N ₃ ClS	2.3– 85	319.85	[26]
Benzafibrato	C ₁₈ H ₁₈ ClNO ₄	1.9 – 190	361.8	[14]
Ciprofloxacino	C ₁₇ H ₁₈ FN ₃ O ₃	35 – 3,353	331.34	[24]
Clorfenamina	C ₁₆ H ₁₉ ClN ₂	0.29 – 9.53	274.79	[20]
Clorofeno	C ₁₃ H ₁₁ ClO	0.55 – 2.1	218.68	[5]
Clortetraciclina	C ₂₂ H ₂₃ ClN ₂ O ₈	5.0 – 690.0	478.88	[23]
Codeína	C ₁₈ H ₂₁ NO ₃	53 – 83.2	299.36	[10]
Diazepam	C ₁₆ H ₁₃ ClN ₂ O	55.5	284.74	[9]
Diclofenaco	C ₁₄ H ₁₁ Cl ₂ NO ₂	48.08 – 70,000	296.15	[9]
Diurón	C ₉ H ₁₀ Cl ₂ N ₂ O	0.2	233.09	[23]
Estriol (E3)	C ₁₈ H ₂₄ O ₃	5 – 15	288.38	[1]
Estrona (E1)	C ₁₈ H ₂₂ O ₂	9 – 34	270.37	[9]
Fenantreno	C ₁₄ H ₁₀	2.12	178.23	[6]
Fenol	C ₆ H ₆ O	0.45 – 100,000	94.11	[9]
Gemfibrozil	C ₁₅ H ₂₂ O ₃	7.78 – 300	250.33	[30]
Glibenclamida	C ₂₃ H ₂₈ ClN ₃ O ₅ S	1,920	494	[8]
Ibuprofeno	C ₁₃ H ₁₈ O ₂	4 – 2,370	206.29	[17]
Loratadina	C ₂₂ H ₂₃ ClN ₂ O ₂	1.4 – 43	382.88	[29]
Metformina	C ₄ H ₁₁ N ₅	15.2	129.16	[10]
Metilparabeno	C ₈ H ₈ O ₃	71.6	152.15	[10]
Naproxeno	C ₁₄ H ₁₄ O ₃	<10 – 70.33	230.26	[13]
Paracetamol	C ₈ H ₉ NO ₂	38.9 – 436.75	151.16	[30]

126 *Tabla 1 continuación*

Fármaco contaminante	Fórmula molecular	Concentración ng/L	MM (g/mol)	Ref.
Penicilina G	C ₁₆ H ₁₈ N ₂ O ₄ S	3,770	334.4	[15]
Pentaclorofenol	C ₆ HCl ₅ O	1,900	266.34	[14]
Piridina	C ₅ H ₅ N	0.001 – 160	79.1	[15]
Propranolol	C ₁₆ H ₂₁ NO ₂	13.0 – 590.0	259.34	[15]
Ranitidina	C ₁₃ H ₂₂ N ₄ O ₃ S	10 – 160,000	314.41	[3]
Sulfametoxazol	C ₁₀ H ₁₁ N ₃ O ₃ S	7 – 965	253.28	[7]
Triclosán	C ₁₂ H ₇ Cl ₃ O ₂	0.81 – 5.1	289.54	[8]
Bisfenol A	C ₁₅ H ₁₆ O ₂	0.36 – 1.4	228.29	[1]
Carbamazepina	C ₁₅ H ₁₂ N ₂ O	21.3 – 305	236.27	[26]

127

128 En la tabla 1 vimos que la mayoría de los contaminantes encontrados en efluentes son
 129 fenólicos o sustancias con una estructura aromática similar a la del fenol, por ello se eligió
 130 este compuesto como contaminante modelo más adelante en el capítulo 4.

131 2.1.2 Contaminantes fenólicos o con estructuras aromáticas

132 Dentro del grupo de contaminantes orgánicos, los compuestos fenólicos y aquellos que
 133 contienen estructuras aromáticas ocupan un lugar de especial importancia. Su relevancia
 134 ambiental se debe a tres factores principales [2]:

- 135 1. Alta estabilidad química derivada del anillo bencénico.
- 136 2. Baja biodegradabilidad en sistemas convencionales.
- 137 3. Elevada toxicidad incluso a bajas concentraciones.

138 La estructura aromática está basada en el anillo bencénico, una configuración cíclica de
 139 seis carbonos con electrones π deslocalizados, lo que le confiere estabilidad

140 termodinámica. Esta característica hace que muchos compuestos aromáticos sean
141 resistentes a la oxidación biológica y a la degradación por procesos convencionales [7].

142 Los compuestos fenólicos son ampliamente utilizados en:

- 143 • Industria petroquímica
- 144 • Producción de resinas fenólicas y epóxicas
- 145 • Fabricación de plásticos
- 146 • Industria farmacéutica
- 147 • Producción de pesticidas y herbicidas
- 148 • Procesos siderúrgicos

149 Debido a su uso masivo, grandes cantidades de estos compuestos pueden llegar a los
150 efluentes industriales. En el medio acuático, pueden provocar [3]:

- 151 • Inhibición del crecimiento microbiano en lodos activados.
- 152 • Toxicidad aguda en organismos acuáticos.
- 153 • Alteraciones endocrinas.
- 154 • Daño oxidativo celular.

155 La naturaleza recalcitrante de estos compuestos explica por qué se consideran moléculas
156 modelo en estudios de degradación avanzada. Su resistencia representa un desafío ideal
157 para evaluar la eficiencia de nuevos procesos, especialmente aquellos basados en
158 oxidación avanzada o fotocátalisis [9].

159 Además, muchos contaminantes emergentes comparten la presencia de estructuras
160 aromáticas en su configuración molecular. Antibióticos, antihistamínicos y
161 antiinflamatorios poseen anillos aromáticos que dificultan su degradación, lo que refuerza

la importancia de estudiar mecanismos de ruptura del anillo bencénico como paso crítico hacia la mineralización [2].

2.1.3 Fenol

El fenol ($\text{C}_6\text{H}_5\text{OH}$) es el compuesto fenólico más simple y constituye la unidad estructural base de una amplia familia de contaminantes aromáticos. Su molécula está formada por un anillo bencénico unido a un grupo hidroxilo, cuya interacción electrónica modifica significativamente las propiedades del sistema aromático. La presencia del grupo $-\text{OH}$ genera un efecto activador por resonancia, aumentando la densidad electrónica del anillo y haciéndolo más susceptible a reacciones de sustitución electrofílica y procesos de oxidación [8].

Desde el punto de vista fisicoquímico, el fenol presenta características que condicionan su comportamiento ambiental [6]:

- **pKa $\approx$ 9.9–10.0 (a 25 °C)**, lo que indica que en medios acuosos con pH inferior a este valor predomina en su forma molecular neutra, mientras que en condiciones alcalinas se ioniza formando el ion fenolato ($\text{C}_6\text{H}_5\text{O}^-$). Esta especiación influye directamente en su solubilidad, movilidad y reactividad.
- **Solubilidad en agua moderada-alta** (aproximadamente 80–90 g L^{-1} a 25 °C), favoreciendo su dispersión en cuerpos hídricos.
- **Presión de vapor relativamente baja**, lo que limita su volatilización desde superficies acuosas.
- Capacidad de formar **enlaces de hidrógeno**, tanto como donador como aceptor, afectando su interacción con matrices acuosas y superficies catalíticas.

184 Estas propiedades determinan que el fenol tenga una movilidad significativa en medios
185 acuáticos y que pueda persistir en sistemas naturales si no es transformado químicamente
186 [6].

187 En el ámbito industrial, el fenol es un intermediario clave en la síntesis de resinas
188 fenólicas, bisfenol A, caprolactama (precursor del nylon), adhesivos estructurales y
189 plásticos de alto desempeño. Debido a su producción a gran escala, es común encontrarlo
190 en efluentes de refinerías, industrias petroquímicas, procesos de coquización del carbón,
191 manufactura de resinas y plantas farmacéuticas [7].

192 Desde el punto de vista toxicológico, el fenol es considerado un contaminante prioritario
193 debido a su elevada reactividad biológica. Puede ingresar al organismo por vía dérmica,
194 inhalatoria u oral. Una vez absorbido, se metaboliza principalmente en el hígado, pero
195 exposiciones agudas o crónicas pueden provocar [6]:

- 196 • Irritación severa de piel y mucosas.
- 197 • Daño hepático y renal.
- 198 • Alteraciones en el sistema nervioso central.
- 199 • Estrés oxidativo celular debido a la formación de especies reactivas intermedias.
- 200 • Posibles efectos mutagénicos y genotóxicos bajo exposiciones prolongadas.

201 En organismos acuáticos, concentraciones relativamente bajas pueden generar efectos
202 subletales como alteraciones en el crecimiento, reproducción y comportamiento, además
203 de toxicidad aguda en peces e invertebrados [8].

204 Un aspecto crítico es que el fenol puede interferir con los procesos biológicos en sistemas
205 de lodos activados. A concentraciones elevadas actúa como inhibidor enzimático,
206 reduciendo la actividad microbiana y comprometiendo la eficiencia de tratamientos
207 secundarios convencionales. Esta característica lo clasifica como compuesto recalcitrante
208 bajo ciertas condiciones operativas [6].

209 Desde la perspectiva de la ingeniería de procesos, el fenol es ampliamente utilizado como
210 molécula modelo en estudios de degradación avanzada por varias razones [6]:

- 211 1. Representa el núcleo estructural de numerosos contaminantes aromáticos más
212 complejos.
- 213 2. Su oxidación implica la ruptura del anillo bencénico, paso fundamental hacia la
214 mineralización.
- 215 3. Permite evaluar mecanismos radicalarios, particularmente aquellos mediados por
216 radicales hidroxilos ($\bullet\text{OH}$).
- 217 4. Facilita el estudio de la influencia del pH, la radiación UV y la absorción fotónica
218 en sistemas fotoquímicos.
- 219 5. Presenta una cinética bien documentada, lo que permite validar modelos
220 matemáticos y simulaciones.

221 La degradación del fenol mediante procesos de oxidación avanzada no solo transforma la
222 molécula original, sino que puede generar intermediarios como catecol, hidroquinona y
223 benzoquinona, cuya posterior oxidación conduce finalmente a CO_2 y H_2O . Por ello, su
224 estudio es particularmente útil para analizar rutas de reacción, formación de subproductos
225 y eficiencia global del proceso [7].

226 En el contexto del presente trabajo, el fenol se selecciona como contaminante modelo
227 debido a su relevancia industrial, su impacto ambiental y su representatividad estructural
228 dentro de los compuestos aromáticos persistentes. El análisis de su degradación en un
229 reactor fotoquímico permitirá evaluar fenómenos acoplados de transferencia radiativa,
230 absorción de fotones y cinética de reacción heterogénea, proporcionando una base sólida
231 para la posterior extrapolación a contaminantes emergentes de mayor complejidad
232 molecular.

233 2.2 Procesos de remoción

234 Las plantas tratadoras de aguas residuales (PTAR) tienen como objetivo principal prevenir
235 la contaminación del medio ambiente y alcanzar los estándares de calidad del agua
236 necesarios para su reincorporación a la naturaleza o para su aprovechamiento en diversas
237 actividades humanas. Para lograr esto, las PTAR operan mediante trenes de tratamiento
238 que se dividen habitualmente en cuatro etapas fundamentales [12]:

- 239 • **Pretratamiento:** Consiste en la eliminación de fragmentos de gran tamaño, como
240 ramas o basura sólida, mediante rejillas o tamices para evitar que estos interfieran
241 en los procesos posteriores o dañen la maquinaria [13].
- 242 • **Tratamiento primario:** Se enfoca en la remoción de sólidos suspendidos, arenas,
243 grasas y aceites. Este proceso emplea métodos fisicoquímicos como la
244 coagulación-floculación, la sedimentación y la filtración [13].
- 245 • **Tratamiento secundario:** Su finalidad es la eliminación de la materia orgánica
246 biodegradable. En regiones como Latinoamérica, se estima que el 80% del agua
247 residual tratada se procesa mediante tecnologías de lodos activados, fosas de
248 estabilización o tratamiento primario mejorado. El método de lodos activados es

249 un proceso biológico donde un consorcio de microorganismos en condiciones
250 aerobias degrada la carga orgánica, aglomerándose en lodos que posteriormente
251 son sedimentados y removidos [13].

252 • **Tratamiento terciario:** Se utiliza para eliminar agentes patógenos, materia
253 orgánica residual o materiales disueltos que no pudieron ser removidos en las
254 etapas previas. Entre los procesos más comunes se encuentran la adsorción
255 (frecuentemente sobre carbón activado), la ósmosis inversa, el intercambio iónico
256 y la desinfección mediante cloro u ozono [13].

257 2.2.1 Limitaciones de los métodos actuales

258 A pesar de la consolidación de estas tecnologías, se ha demostrado que los métodos
259 primarios y secundarios no son lo suficientemente efectivos para eliminar compuestos
260 orgánicos recalcitrantes, metales pesados o contaminantes emergentes (como los
261 compuestos aromáticos y fármacos). Por ejemplo, mientras que sustancias como el
262 ibuprofeno pueden ser removidas en gran medida, los antibióticos suelen presentar tasas
263 de eliminación inferiores al 65% tras un tratamiento secundario convencional [3].

264 Además, la implementación de tratamientos terciarios avanzados en la mayoría de las
265 PTAR es limitada debido a los altos costos operativos que representan. Esta incapacidad
266 de los sistemas convencionales para mineralizar completamente las moléculas orgánicas
267 complejas justifica la necesidad de integrar Procesos de Oxidación Avanzada (PAO),
268 como los procesos fotoquímicos, que logran degradar los contaminantes mediante la
269 generación de especies radicalarias altamente reactivas [4].

270 2.3 Procesos Fotoquímicos

271 Los procesos fotoquímicos comprenden el conjunto de transformaciones químicas
272 inducidas por la absorción de radiación electromagnética. A diferencia de las reacciones
273 térmicas convencionales, cuya activación depende exclusivamente de la temperatura, en
274 los sistemas fotoquímicos la energía necesaria para superar la barrera energética proviene
275 de fotones cuya energía está definida por su frecuencia o longitud de onda. Este principio
276 permite activar reacciones bajo condiciones donde la activación térmica sería insuficiente
277 o energéticamente ineficiente [25].

278 Desde una perspectiva ingenieril, los procesos fotoquímicos pueden clasificarse en tres
279 grandes categorías aplicadas al tratamiento ambiental:

280 1. **Fotólisis directa**

281 Degradación de un compuesto por absorción directa de radiación.

282 2. **Fotocatálisis heterogénea**

283 Transformación química mediada por un semiconductor fotoactivado.

284 3. **Sistemas fotoasistidos o fotosensibilizados**

285 Donde una especie absorbente transfiere energía o carga a otra.

286 En el tratamiento de aguas contaminadas con compuestos aromáticos recalcitrantes (como
287 fenoles), la fotocatalisis heterogénea se ha consolidado como una de las tecnologías más
288 estudiadas debido a su capacidad de generar especies altamente oxidantes capaces de
289 mineralizar contaminantes hasta CO_2 y H_2O [17].

290 2.3.1 Principios fotoquímicos

291 La fotoquímica se fundamenta en la interacción entre radiación electromagnética y
292 materia. Cuando un átomo o molécula absorbe un fotón cuya energía es igual o superior a

293 la diferencia energética entre su estado basal y un estado excitado, ocurre una transición
294 electrónica [29]:

$$E = h_p \nu = \frac{h_p c}{\lambda} \quad 1$$

295 donde:

h Es la constante de Planck

c La velocidad de la luz

λ La longitud de onda

296

297 **Leyes fundamentales**

298 **Ley de Stark-Einstein (equivalencia fotoquímica)**

299 Cada molécula activada absorbe un solo cuanto de energía.

300 Estas leyes establecen que la eficiencia de un proceso fotoquímico depende tanto de la
301 capacidad de absorción espectral del sistema como de la intensidad de radiación incidente
302 [38].

303 **Estados excitados y destinos energéticos**

304 Tras la absorción del fotón, una molécula puede:

- 305 • Emitir energía como fluorescencia
- 306 • Emitir energía como fosforescencia
- 307 • Sufrir conversión interna
- 308 • Iniciar una reacción química (disociación o transferencia electrónica)

309 En sistemas ambientales, la vía de interés es aquella que conduce a la generación de
310 especies reactivas [25].

311 **Cinética fotoquímica**

312 La velocidad de una reacción fotoquímica primaria depende de la intensidad de luz
313 absorbida:

$$r \propto I_a \quad 2$$

314 En muchos casos se aplica el concepto de estado estacionario para especies excitadas,
315 permitiendo modelar sistemas donde la activación fotoquímica es seguida por reacciones
316 térmicas en cadena [24].

317 La eficiencia cuántica (ϕ) se define como:

$$\phi = \frac{\text{moléculas transformadas}}{\text{fotones absorbidos}} \quad 3$$

318 En procesos ambientales complejos, ϕ puede ser menor que 1 debido a recombinación y
319 procesos disipativos [29].

320 2.3.2 Fotólisis

321 La fotólisis es la descomposición directa de una molécula por acción de la luz. Para que
322 ocurra, deben cumplirse tres condiciones:

- 323 1. La molécula debe absorber la radiación incidente.
- 324 2. La energía del fotón debe superar la energía de disociación del enlace.
- 325 3. La ruta fotoquímica debe competir favorablemente con rutas no reactivas.

326 En el tratamiento de agua, la fotólisis directa puede degradar ciertos compuestos
327 aromáticos que absorben en UV, pero presenta limitaciones importantes:

- 328 • Baja absorción de muchos contaminantes en UV-A
- 329 • Baja eficiencia cuántica
- 330 • Dependencia fuerte de la longitud de onda
- 331 • Competencia con procesos de recombinación

Además, la ley de Beer-Lambert establece que la intensidad transmitida decrece exponencialmente con la concentración y el espesor del medio, lo cual genera gradientes radiactivos en reactores fotoquímicos. Debido a estas limitaciones, la fotólisis directa rara vez logra mineralización completa en sistemas reales [31].

2.3.3 Fotocatálisis

La fotocatálisis heterogénea es un proceso en el que un semiconductor absorbe fotones y genera pares electrón-hueco (e^-/h^+), capaces de inducir reacciones redox en su superficie [32].

Fotoexcitación en semiconductores

Cuando la energía del fotón es mayor o igual al band gap (E_g):



El electrón es promovido de la banda de valencia (VB) a la banda de conducción (CB), dejando un hueco en la VB [26].

Procesos fundamentales

1. Generación del par electrón-hueco
2. Separación y transporte de carga
3. Transferencia interfacial de carga
4. Formación de especies reactivas

Las especies generadas incluyen:



Estas especies son responsables de la degradación oxidativa de contaminantes orgánicos [25].

2.3.4 El TiO_2 como fotocatalizador predominante

El dióxido de titanio es el fotocatalizador más estudiado y utilizado industrialmente debido a una combinación única de propiedades [18]:

El material se caracteriza por su alta estabilidad química y fotocorrosiva, manteniéndose inerte en distintos pH y bajo irradiación UV prolongada. Además, es de bajo costo, abundante y no tóxico, lo que lo hace adecuado para aplicaciones ambientales. Presenta propiedades electrónicas favorables, como un band gap de aproximadamente 3.2 eV y un alto potencial oxidante, que favorecen su actividad fotocatalítica. Se encuentra en varias fases cristalinas, siendo la anatasa la más activa, seguida del rutilo y la brookita. La anatasa presenta menor recombinación y mayor área superficial [19].

2.4 Fotorreactores

Un fotorreactor es un dispositivo diseñado para llevar a cabo reacciones químicas activadas por la absorción de energía radiante. A diferencia de los reactores convencionales, su diseño debe optimizar la captura de fotones y garantizar una distribución uniforme de la luz en el medio de reacción [16].

2.4.1 Clasificación por tipo de flujo

Los fotorreactores analizados en las fuentes se dividen principalmente en tres regímenes de operación:

- **Operación en Lote (Batch):** Es la configuración más común para estudios a escala de laboratorio y determinación de cinéticas. Se utilizan tubos de cuarzo o recipientes de vidrio (beakers) colocados dentro de cámaras de irradiación, donde la solución permanece estática o con agitación magnética individual hasta completar el tiempo de tratamiento [47].

- 375 • **Recirculación (Semi-batch):** Muchos sistemas de escala piloto (como el
376 fotorreactor Photo-CREC o los reactores de colector parabólico compuesto - CPC)
377 operan mediante un tanque de mezcla externo desde el cual la solución se bombea
378 continuamente hacia la zona irradiada y regresa al tanque. Este modo permite tratar
379 volúmenes mayores y asegurar una mezcla homogénea de las especies y el
380 catalizador en suspensión (slurry) [47].
- 381 • **Flujo Continuo (PFR / Microreactores):** Se emplean para procesos
382 intensificados donde se requiere un control preciso de los parámetros. Destacan
383 los reactores de película descendente (falling film), donde el líquido fluye como
384 una lámina delgada, optimizando la penetración de los fotones, y los
385 microreactores de canales milimétricos que eliminan las limitaciones de
386 transferencia de masa [47].
- 387 • **Lecho Empacado (PBR):** En este caso, el catalizador está inmovilizado sobre
388 soportes sólidos, como anillos de vidrio o perlas de sílice, a través de los cuales
389 fluye la fase acuosa. Esta configuración evita la necesidad de una etapa posterior
390 de separación del catalizador [47].

391 2.4.2 Clasificación por posición de la irradiancia

392 La ubicación de la fuente de luz respecto al volumen de control define el campo radiante:

- 393 • **Irradiación interna (Inmersión):** La lámpara se coloca en el centro del reactor,
394 generalmente protegida por una camisa de cuarzo o vidrio, y está rodeada por el
395 fluido de reacción (configuración anular). Esta disposición es altamente eficiente
396 ya que aprovecha los fotones emitidos en todas las direcciones (360°) [34].

- **Irradiación externa:** Las fuentes de luz se ubican fuera del espacio de reacción. Pueden ser lámparas dispuestas en la periferia de un tubo de reacción o sistemas que utilizan reflectores parabólicos o elípticos para concentrar la luz hacia el reactor. En los reactores solares, la irradiancia es inherentemente externa y a menudo se potencia con espejos de aluminio pulido para maximizar la absorción en toda la circunferencia del tubo [36].

Tabla 2 Fotorreactores utilizados en la literatura divididos por tipo de flujo.

Flujo	Irradiación	Geometría del Reactor	Tipo de Luz	Contaminante	Porcentaje de degradación	Ref.
	Interna	Anular, Placa con fuente interna	UV	Tolueno, Ácido oxálico, Carbaril Hexacianoferrato (III) de potasio	50% - 90%	[23]
Batch	Externa	Placa plana, Tubular, CPCs, Anular empacado, Tanque agitado	UV, Solar	Ácido dicloroacético, 4-clorofenol, Ácido oxálico, estrógenos disruptores hormonales, propanal,	20-95%	[30]
	Interna	Anular, Tubular, Múltiples tubos, Fibra óptica	UV	TCE, Benceno, Acetona	20-70%	[18], [29]
PFR	Externa	Placa plana, Tubular CPC, Canal, Reflector cilíndrico	Solar	1,4-dioxano, estrógenos disruptores hormonales, propanal,	30-95%	[25, 31]

407 *Tabla 2 Continuación.*

Flujo	Irradiación	Geometría del Reactor	Tipo de Luz	Contaminante	Porcentaje de degradación	Ref.
PBR	Interna/Externa	Lecho empacado	UV	TCE, Tetracloroetileno	20-75%	[17]
		tubular o general				
CSTR	Interna	ODPR,	UV	Carbaril de potasio, 1,4- dioxano	20-80%	[15], [22],
		Anular agitado				

408

409 Al evaluar de manera comparativa las configuraciones recopiladas en la Tabla 2, se
 410 evidencia que los mayores porcentajes de degradación (alcanzando hasta un 95%) se
 411 concentran en los reactores operados en lote (batch) con esquemas de irradiación
 412 interna/externa, así como en los reactores de flujo pistón (PFR) de irradiación externa.
 413 Este comportamiento analítico sugiere que, en sistemas batch, el elevado porcentaje de
 414 remoción está fuertemente condicionado por los prolongados tiempos de tratamiento
 415 aplicados a escala de laboratorio, más que por una eficiencia cinética intrínseca. Por otro
 416 lado, el alto rendimiento en los sistemas PFR de irradiación externa demuestra la
 417 viabilidad de la optimización óptica a través de colectores para compensar la dilución del
 418 flujo fotónico, posicionando a los sistemas de flujo continuo como la alternativa óptima
 419 para el escalamiento e intensificación del proceso de fotodegradación de contaminantes
 420 orgánicos.

421

422 2.4.3 Clasificación por tipo de irradiación

423 La fuente de energía determina el rango espectral de activación del proceso:

- 424 • **Lámparas UV Artificiales:** Son las más utilizadas en investigación debido a su
425 emisión constante. Incluyen lámparas de mercurio de baja presión (emisión
426 principal a 254 nm), de media presión (espectro más amplio) y lámparas de "luz
427 negra" (UVA, 315-400 nm). También se reporta el uso de lámparas germicidas
428 para procesos de fotólisis directa [37].
- 429 • **Lámparas LED:** Representan una tecnología emergente más eficiente y versátil,
430 permitiendo seleccionar longitudes de onda específicas (como 365 nm) y
431 ofreciendo una mayor vida útil que las lámparas de mercurio [35].
- 432 • **Luz Solar y Simuladores de luz solar:** Los simuladores solares emplean
433 lámparas de xenón para replicar el espectro solar terrestre. Los reactores solares
434 directos aprovechan la radiación natural, siendo los reactores CPC los más
435 eficientes para captar tanto la radiación directa como la difusa sin necesidad de
436 sistemas de seguimiento solar [39].

437

438

439

440

441

442

443 *Tabla 3 Fotorreactores utilizados en la literatura divididos por tipo de irradiación.*

Tipo de Luz	Tipo de Lámpara	de Onda	Longitud de Onda	Intensidad	Contaminante	Porcentaje de degradación	Ref.
UV	Mercurio	(baja, media, presión)	185–435.5 nm (varios picos: 254, 312.5, 364.5, 404, 435.5)	No especificada	H ₂ S, tetracloroetileno	20-90%	[22], [31], [17]
	Lámparas fluorescentes		Corte a 400 nm	8-11 W, 4-8 W	4-Clorofenol, acetaldehído, rhodamina 6G (rh6G), metileno azul (MB), ácido dicloroacético	30-95%	[19], [26]
	Lámparas UV-LEDs		No especificada	13 W/m ² ; 3–13 W/m ²	Hexacianoferrato (III), S-metolacoloro, Tolueno	55-79%	[27]
	Luz (Black UVA)	negra	300–400 nm (pico 350 nm)	4 W, 40 W	Tricloroetileno	20-80%	[30], [21],
	Actínicas (UVA)	Light /					
Visible	Tungsteno	/	400–650 nm /	300 W / 500 W	Methylene Blue	10-90%	[30]
	Halógeno-tungsteno		Corte a 420 nm		(MB), Rhodamine B (rhB), Naranja II (OII), ácido ftálico (Fa), Cr (VI), 4-n-alquilfenoles, X3B		
	LEDs visibles		550 ± 50 nm	5.28 mW/cm ²	Rhodamine (rh6G)	40-90%	[20]

444 *Tabla 3 Continuación.*

Tipo de Luz	Tipo de Lámpara	Longitud de Onda	Intensidad	Contaminante	Porcentaje de degradación	Ref.
Solar	Colectores parabólicos compuestos (CPCs)	Espectro solar completo	No especificada	Carbaril	50-95%	[15], [22]
	Luz solar natural (directa y difusa)	Espectro solar completo	No especificada	DDT	20-80%	[15]

445

446 A partir del análisis comparativo de las tecnologías de emisión recopiladas en la Tabla 3,
 447 se evidencia que los mayores porcentajes de degradación (alcanzando bandas superiores
 448 del 90% al 95%) se distribuyen entre sistemas que operan bajo radiación ultravioleta
 449 (lámparas de descarga de mercurio y fluorescentes), luz visible de alta potencia
 450 (tungsteno) y radiación solar asistida por concentración óptica (CPCs). No obstante, el
 451 rendimiento fotocatalítico reportado no puede atribuirse a un único factor, sino a un
 452 balance crítico entre la longitud de onda de emisión, la intensidad radiante y los
 453 mecanismos de activación electrónica del catalizador.

454 2.5 Modelado de las reacciones fotoquímicas

455 El modelado matemático de fotorreactores es una tarea compleja que requiere la
 456 resolución simultánea de los fenómenos de transporte de cantidad de movimiento
 457 (hidrodinámica), transporte de masa de las especies químicas y, de manera crítica, el
 458 transporte de energía radiante (flujo de fotones). A diferencia de los reactores
 459 convencionales, en un fotorreactor la velocidad de reacción no es uniforme en todo el

460 volumen, sino que depende localmente de la cantidad de energía absorbida por el
461 catalizador o el contaminante [28].

462 2.5.1 Dependencia con la radiación

463 En procesos fotoquímicos, la velocidad de reacción depende de la radiación absorbida
464 [25]:

$$r = \phi I_a \quad 4$$

465 donde:

- 466 • ϕ = rendimiento cuántico
- 467 • I_a = intensidad de radiación absorbida

468 El rendimiento cuántico representa el número de moléculas transformadas por cada fotón
469 absorbido [25].

470 2.5.2 La Ecuación de Transferencia Radiativa (RTE)

471 La base fundamental para describir el campo radiante en un medio que absorbe emite y
472 dispersa radiación es la RTE. Para radiación monocromática en un sistema en estado
473 estacionario y sin emisión térmica (dado que los procesos fotoquímicos suelen ocurrir a
474 temperatura ambiente), la ecuación se expresa como [34]:

$$\frac{dI_\lambda(r, s)}{ds} = -\kappa_\lambda I_\lambda(r, s) - \sigma_\lambda I_\lambda(r, s) + \frac{\sigma_\lambda}{4\pi} \int P(s' \rightarrow s) I_\lambda(r, s') d\Omega' \quad 5$$

475 donde:

- 476 • $I_\lambda(r, s)$: Intensidad específica de la radiación en la posición r y dirección s ($\text{W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{sr}^{-1} \cdot \text{nm}^{-1}$).
- 477
- 478 • s : Coordenada de trayectoria o longitud del camino del fotón (m).
- 479 • κ_λ : Coeficiente de absorción volumétrica del medio (m^{-1}).

- 480 • σ_λ : Coeficiente de dispersión (scattering) volumétrica (m^{-1}).
- 481 • $P(s' \rightarrow s)I_\lambda$: Función de fase de dispersión, que describe la probabilidad de que
- 482 un fotón que viaja en la dirección s' sea dispersado hacia la dirección s .
- 483 • Ω : Ángulo sólido medido en estereorradián (sr).

484 2.5.3 Ley de Beer-Lambert

485 En medios donde no existe dispersión significativa (soluciones acuosas claras sin
 486 partículas sólidas) y para geometrías de iluminación unidireccional, la RTE se simplifica
 487 drásticamente a la ley de Beer-Lambert [41]:

$$I = I_0 e^{-\alpha L} \quad 6$$

488 donde:

- 489 • I = intensidad transmitida
- 490 • I_0 = intensidad incidente
- 491 • α = coeficiente de absorción
- 492 • L = distancia recorrida

493 Esta ley describe cómo la radiación se atenúa al atravesar un medio absorbente.

494 2.5.4 LVREA (Local Volumetric Rate of Energy Absorption)

495 Un parámetro clave en fotocatalisis es la tasa volumétrica local de absorción de energía
 496 [31]:

$$LVREA = \int \kappa_\lambda I_\lambda d\lambda \quad (\text{W}/\text{m}^3) \quad 7$$

497 donde:

- 498 • κ_λ = coeficiente de absorción espectral
- 499 • G_λ = irradiancia espectral

500 El LVREA representa la cantidad de energía absorbida por unidad de volumen y es
501 fundamental para relacionar radiación con velocidad de reacción [31].

502 2.5.5 Tasa Volumétrica Local de Absorción de Fotones (LVRPA)

503 Sin embargo, en fotocátalisis interesa más la cantidad de fotones absorbidos que la energía
504 absorbida.

505 Esta se define:

$$LVRPA = \int \frac{\kappa_{\lambda} I_{\lambda}}{h\nu} d\lambda \quad 8$$

506

507 o equivalentemente:

$$LVRPA = \int \frac{\lambda \kappa_{\lambda} I_{\lambda}}{hc} d\lambda \text{ (Einsteinin } m^{-3}s^{-1}) \quad 9$$

508

509 La LVRPA indica, cuántos moles de fotones son absorbidos localmente, es el parámetro
510 más importante de la ingeniería fotocatalítica, la mayoría de los modelos modernos
511 utilizan LVRPA en lugar de intensidad luminosa.

512 2.5.6 Modelo de Langmuir-Hinshelwood (L-H) modificado

513 El modelo de L-H es el más aceptado en fotocátalisis heterogénea, asumiendo que la
514 degradación ocurre en la superficie del catalizador tras la adsorción de la molécula. Su
515 forma básica para la velocidad de reacción (r) es [47]:

$$r = \frac{kKC}{1 + KC} \quad 10$$

516 Sin embargo, para que este modelo sea útil en el escalamiento de fotorreactores, debe
 517 incluir explícitamente el efecto de la intensidad de la luz (LVRPA). Una de las variantes
 518 más robustas es la propuesta por el grupo de Cassano y Alfano:

$$r = k_{int}(e^a)^n \frac{KC}{1 + KC} \quad 11$$

519 *Explicación de términos:*

- 520 • k_{int} : Coeficiente cinético intrínseca, independiente del campo radiante y la
 521 geometría ($\text{mol} * \text{m}^{-2} * \text{s}^{-1} * (\text{Einstein} * \text{m}^{-3} * \text{s}^{-1})^{-n}$).
- 522 • e^a : LVRPA local determinada en la sección correspondiente del modelado
 523 radiativo.
- 524 • n : Exponente del flujo de fotones. Típicamente, $n = 1$ para intensidades bajas de
 525 luz (donde la velocidad es proporcional al flujo de fotones) y $n = 0.5$ para
 526 intensidades altas (donde la recombinación de pares electrón-hueco domina el
 527 proceso).
- 528 • K : Constante de equilibrio de adsorción ($\text{m}^3 * \text{mol}^{-1}$).
- 529 • C : Concentración local del contaminante ($\text{mol} * \text{m}^{-3}$).

530 2.5.7 Cinética de pseudo-primer orden

531 Cuando la concentración del contaminante es muy baja ($KC \ll 1$), el modelo de L-H se
 532 simplifica a una cinética de pseudo-primer orden [47]:

$$-\frac{dC}{dt} = k_{app}C \quad 12$$

533 donde k_{app} es el coeficiente cinético aparente (min^{-1}) que engloba factores como la
 534 intensidad luminosa y la carga de catalizador. Aunque es útil para análisis rápidos en

535 laboratorio, carece de valor predictivo para el escalamiento si no se normaliza con el
536 campo radiante.

537 3. Planteamiento del problema

538 3.1. Justificación

539 Esta tesis se justifica por la necesidad de desarrollar tecnologías que permitan mejorar la
540 calidad del agua ante la presencia de contaminantes orgánicos recalcitrantes que no son
541 eliminados eficientemente por los sistemas convencionales de tratamiento. El estudio y el
542 modelado de un reactor fotoquímico para la degradación de compuestos aromáticos,
543 utilizando fenol como contaminante modelo, contribuye al desarrollo de tratamiento
544 avanzado de aguas o procesos de tratamiento avanzado capaces de transformar o
545 mineralizar estos contaminantes. De esta manera, la investigación aporta herramientas
546 para optimizar tecnologías de remoción y mejorar la eficiencia de los sistemas de
547 saneamiento.

548 La importancia de este proyecto radica en que la caracterización del fotorreactor es el paso
549 fundamental para garantizar la eficiencia y escalabilidad de los procesos de fotocátalisis.
550 Sin un conocimiento preciso de los parámetros hidrodinámicos y ópticos del sistema, no
551 es posible optimizar la degradación de contaminantes.

552 Bajo este enfoque, el presente proyecto se alinea con diversos Objetivos de Desarrollo
553 Sostenible (ODS). Al proporcionar una base tecnológica sólida para el tratamiento de
554 aguas, se contribuye al ODS 6 (Agua limpia y saneamiento); asimismo, la optimización
555 de estos sistemas favorece la gestión de efluentes en el marco del ODS 11 (Ciudades y
556 comunidades sostenibles) y promueve el uso de tecnologías de remediación más eficientes
557 vinculadas al ODS 12 (Producción y consumo responsables). Finalmente, una

558 caracterización rigurosa asegura que las descargas tratadas minimicen el impacto en
559 ecosistemas acuáticos, lo que contribuye positivamente al ODS 14 (Vida submarina).

560

561 3.2. Hipótesis

562 La consideración integral de las variables espaciales del reactor permitirá proponer un
563 modelo para predecir adecuadamente la contribución de la irradiancia en la degradación
564 de contaminantes en fase acuosa dentro del fotorreactor.

565

566 3.3. Objetivos

567 3.3.1. Objetivo general

568 Evaluar en base a los datos experimentales de degradación fotoquímica la influencia de la
569 intensidad lumínica, la disposición de las lámparas del reactor y la concentración del
570 fotocatalizador sobre la tasa de degradación de un contaminante modelo.

571

572 3.3.2. Objetivos específicos

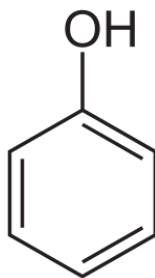
- 573 ○ Caracterizar el fotorreactor bajo distintos tipos de irradiación y arreglos
574 experimentales.
- 575 ○ Cuantificar la contribución energética de la refracción de los fotones en las paredes
576 de un reactor fotoquímico y cómo esta contribución afecta la eficiencia de la
577 reacción de degradación de los contaminantes.
- 578 ○ Dar seguimiento a la degradación de un contaminante modelo.

- 579 ○ Proponer un modelo que describa con precisión la influencia de la intensidad
580 lumínica incidente sobre un fotorreactor en los mecanismos de reacción
581 fotoquímica.

582 4. Metodología

583 4.1 Reactivos

584 Para la realización de las pruebas cinéticas y de degradación fotoquímica se empleó fenol
585 (C_6H_6O) de la marca CTR scientific >99.0% y libre de turbidez y residuos insolubles como
586 contaminante modelo.



587

588 *Figura 1 Molécula del fenol.*

589 Para los experimentos de fotocatálisis heterogénea, se empleó dióxido de titanio (TiO_2)
590 como fotocatalizador de la marca Fermont. Este material fue seleccionado debido a que
591 es uno de los semiconductores más utilizados en aplicaciones de fotocatálisis ambiental,
592 principalmente por su alta estabilidad química, baja toxicidad, elevada actividad
593 fotocatalítica y costo relativamente bajo.

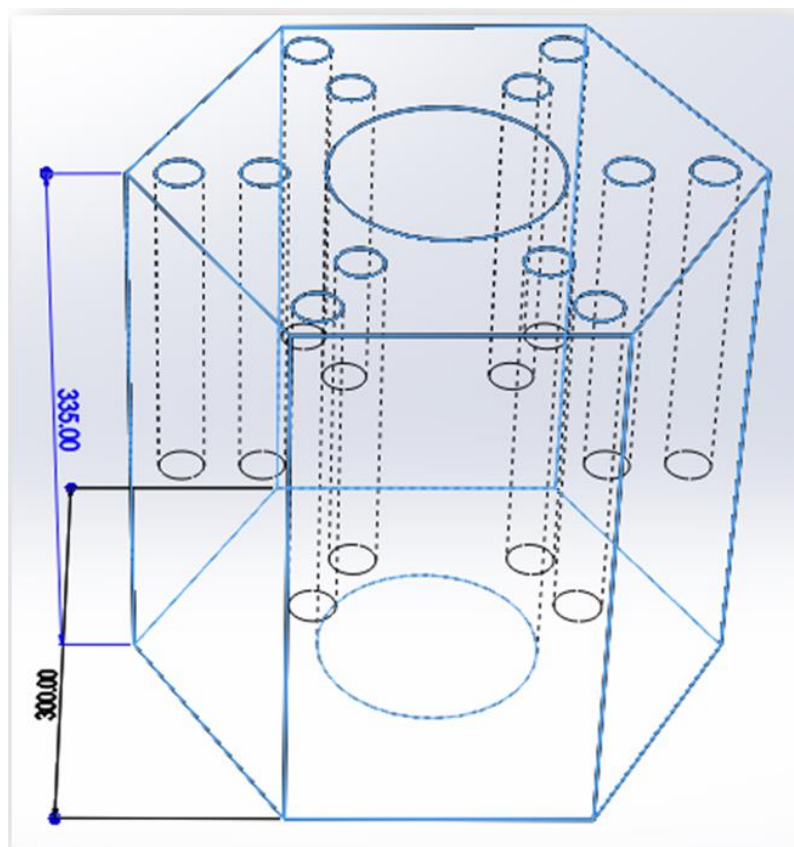
594 Por otro lado, para el control y ajuste del pH de las soluciones durante los experimentos
595 se prepararon soluciones de hidróxido de potasio (KOH) y ácido clorhídrico (HCl). Estas
596 soluciones permitieron mantener condiciones de pH constantes en el sistema
597 experimental, lo cual resulta fundamental para asegurar la reproducibilidad de los
598 resultados y evitar que las variaciones en el pH influyan en los procesos de degradación
599 fotoquímica.

600 Finalmente, como técnica analítica complementaria se realizó una determinación de la
601 Demanda Química de Oxígeno (DQO), esto debido a la posible interferencia de
602 compuestos intermediarios que podrían aportar interferencias en la medición por
603 espectrofotometría, para esta técnica se utilizaron soluciones comerciales contenidas en
604 viales de digestión que incluían una mezcla de ácido sulfúrico (H_2SO_4), dicromato de
605 potasio ($\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$) y sulfato de plata (Ag_2SO_4). Estos reactivos permiten oxidar
606 químicamente la materia orgánica presente en las muestras, lo cual hace posible
607 cuantificar indirectamente el contenido de carbono orgánico en la solución.

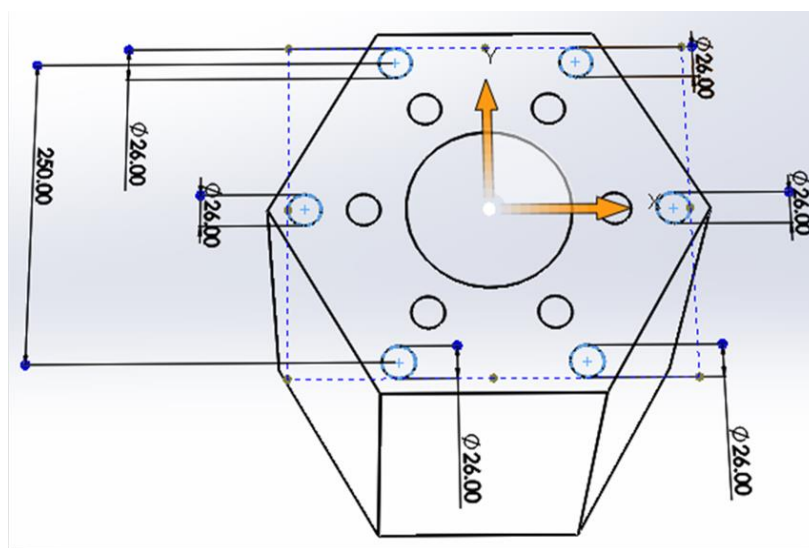
608

609 4.2 Fotorreactor

610 Los experimentos se llevaron a cabo en un fotorreactor, el cual presenta una geometría
611 hexagonal y un sistema de irradiación externa mediante lámparas ultravioleta. El diseño
612 del equipo permite la colocación de hasta seis lámparas UV distribuidas alrededor del
613 reactor, lo que facilita la evaluación de diferentes configuraciones de irradiación.



614



615

616 *Figura 2 Fotorreactor de irradiación externa.*

617 En el centro del fotorreactor se colocó un reactor batch de cuarzo, dentro del cual se
 618 dispuso una solución de 500 mL de agua contaminada con el compuesto modelo (fenol).

619 El uso de cuarzo como material del reactor se debe a su alta transmitancia en la región
620 ultravioleta del espectro electromagnético, lo que permite que la radiación emitida por las
621 lámparas atraviese el material con mínimas pérdidas energéticas.

622 Con el objetivo de analizar la influencia de las superficies reflectantes del reactor en la
623 distribución de la radiación, se realizaron pruebas experimentales en ausencia de agua.

624 Durante estas pruebas se colocaron en el sistema tanto el reactor de cuarzo como un vaso
625 de precipitados de vidrio Pyrex, con la finalidad de comparar la cantidad de radiación
626 transmitida o absorbida por cada material. Esto permitió estimar el porcentaje de
627 irradiancia efectiva disponible para el proceso de fotodegradación cuando se trabaja con
628 reactores por lotes fabricados con diferentes materiales.

629

630 4.3 Fuentes de irradiación

631 Se evaluaron dos tipos de lámparas: de luz visible y de luz UVC esto con el fin de
632 cuantificar la intensidad con la que emiten luz e identificar las longitudes de ondas a las
633 que emiten con mayor intensidad y conocer si las lámparas utilizadas aportarán la energía
634 suficiente para llevar a cabo los experimentos de foto degradación del fenol.



(a)



(b)

Figura 3 Lámparas utilizadas para la experimentación: (a) lámparas de luz visible marca Exo Terra Repti-Glo de 120V y 13 W, (b) lámparas sanitizantes de luz UVC de 25 W y 110 V marca BAIMNOCM.

Para la caracterización del sistema de irradiación se emplearon dos equipos de medición:



A la izquierda se muestra un radiómetro de la marca GENERAL y a la derecha de la figura un espectrofotómetro de la marca ocean optics modelo USB2000, ambos equipos utilizados para este trabajo.

Mediante el uso del espectrómetro fue posible analizar la distribución espectral de la radiación emitida por las lámparas, lo cual permitió identificar las longitudes de onda predominantes en el sistema. Por su parte, el radiómetro se utilizó para medir la intensidad de radiación incidente en diferentes puntos del reactor, así como para evaluar la cantidad de radiación reflejada por las paredes internas del fotorreactor.

4.4 Sistema experimental de foto-degradación

Los experimentos de degradación fotoquímica se realizaron evaluando diferentes configuraciones del fotorreactor con el objetivo de analizar cómo las variables geométricas y espaciales influyen en la distribución de la radiación y, en consecuencia, en la eficiencia del proceso de degradación.

653 Entre las variables evaluadas se incluyeron:

- 654 • Número de lámparas utilizadas
- 655 • Distribución espacial de las lámparas
- 656 • Distancia entre las lámparas y el reactor batch
- 657 • Presencia o ausencia de superficies reflectantes

658 Para este estudio se definieron dos tipos principales de configuraciones de irradiación. El
659 arreglo 1 correspondió a una distribución espacialmente equilibrada de las lámparas
660 alrededor del reactor, mientras que el arreglo 2 se diseñó para evaluar el efecto de una
661 irradiación asimétrica, concentrando la radiación principalmente en un solo lado del
662 reactor batch.

663

664

665

666

667

668

669

670

671

672

673

674 *Tabla 4 Arreglo de las lámparas en el fotorreactor.*

Numero de lámparas	r = 6 cm Arreglo simétrico	r = 6 cm Arreglo asimétrico	r = 16 cm Arreglo disperso	r = 16 cm Arreglo asimétrico
1				
	1		1	
2				
	2a	2b	2a	2b
3				
	3a	3b	3a	3b
4				
	4a	4b	4a	4b
5				
	5		5	
6				
	6		6	

675

676 Además del arreglo espacial de las lámparas, se evaluó el efecto de la distancia entre las
677 lámparas y el reactor. El sistema experimental permitía trabajar con dos distancias
678 diferentes:

- 679 • Distancia cercana: 6 cm entre el centro de la lámpara y el centro del reactor batch.
680 • Distancia lejana: 16 cm entre el centro de la lámpara y el centro del reactor batch.

681 La evaluación de estas distancias permitió analizar cómo la intensidad de radiación
682 incidente disminuye con la distancia, fenómeno que se encuentra relacionado con la ley
683 del inverso del cuadrado de la distancia.

684 Finalmente, con el fin de determinar la contribución de las superficies reflectantes del
685 reactor a la irradiancia total recibida por el sistema, se realizaron experimentos adicionales
686 en los cuales las paredes reflectantes del fotorreactor fueron opacadas. De esta manera se
687 pudo comparar la irradiancia generada únicamente por las lámparas con la irradiancia total
688 resultante de la combinación de radiación directa y radiación reflejada.

689 4.5 Cinética de degradación

690 4.5.1 Preparación de la mezcla estándar del contaminante modelo

691 Todos los experimentos realizados en este trabajo se llevaron a cabo utilizando una
692 concentración inicial de fenol de 50 μM . Esta concentración fue seleccionada con base en
693 estudios reportados en la literatura científica relacionados con procesos de degradación
694 fotoquímica de compuestos fenólicos.

695 La solución experimental de 50 μM fue preparada a partir de una solución patrón de fenol
696 de 1000 μM , la cual se utilizó como solución madre para preparar las diluciones
697 necesarias. Posteriormente, el pH de las soluciones se ajustó a pH 7, con el objetivo de
698 trabajar en condiciones cercanas a la neutralidad.

699 4.5.2 Fotólisis

700 Los experimentos de fotólisis se realizaron utilizando 500 mL de la solución contaminada
701 con fenol previamente preparada. Durante estos experimentos, la solución se mantuvo

702 bajo irradiación ultravioleta sin la presencia de ningún catalizador, con el objetivo de
703 evaluar la degradación del contaminante únicamente por efecto de la radiación.
704 Las pruebas se realizaron a temperatura constante de 25 °C, con el fin de evitar que
705 variaciones térmicas influyeran en los resultados obtenidos.

706 4.5.3 Fotocatálisis

707 Los experimentos de fotocatálisis se llevaron a cabo siguiendo un procedimiento similar
708 al utilizado en los experimentos de fotólisis, con la diferencia de que en este caso se agregó
709 dióxido de titanio (TiO₂) como fotocatalizador.

710 Se evaluaron tres concentraciones diferentes de catalizador:

- 711 • 0.2 g/L
- 712 • 0.4 g/L
- 713 • 0.8 g/L

714 El objetivo de evaluar estas concentraciones fue determinar cuál de ellas proporcionaba
715 las condiciones más adecuadas para el estudio de la cinética de degradación.
716 Posteriormente, una vez seleccionada la concentración óptima de catalizador, se realizaron
717 los experimentos utilizando las diferentes configuraciones de lámparas descritas en la
718 sección 4.4 Sistema experimental de fotodegradación.

719 4.6 Métodos analíticos

720 4.6.1 Espectrofotometría UV-Vis

721 El seguimiento de la degradación del fenol se realizó mediante un espectrofotómetro UV-
722 Vis de la marca Thermo modelo Genesys 10S, técnica que permite determinar la

723 concentración de un compuesto a partir de su absorbancia en una determinada longitud de
724 onda.

725 Para ello, se elaboró una curva de calibración utilizando soluciones patrón de fenol con
726 concentraciones conocidas de 1 μM a 50 μM .

727 A partir de esta curva fue posible establecer una relación entre la absorbancia medida por
728 el espectrofotómetro y la concentración del contaminante presente en la solución.

729 Durante los experimentos se tomaron muestras en diferentes intervalos de tiempo de 15
730 minutos durante la primera hora y, posteriormente, cada 30 min hasta alcanzar la
731 estabilidad.

732 Posteriormente se continuó tomando una muestra cada 30 minutos, con el fin de evaluar
733 la evolución de la concentración del contaminante a lo largo del tiempo.

734 Sin embargo, es importante señalar que esta técnica únicamente permite determinar la
735 disminución de la concentración del fenol en solución, pero no confirmar si el carbono
736 orgánico ha sido completamente mineralizado a CO_2 y H_2O o si simplemente se han
737 generado productos intermedios de degradación.

738 4.6.2 Demanda química de oxígeno

739 Para complementar el análisis realizado mediante espectrofotometría UV-Vis, se
740 determinó la Demanda Química de Oxígeno (DQO) de las muestras.

741 Para esta técnica se utilizaron viales de digestión de la marca HACH, diseñados
742 específicamente para la determinación de DQO en el rango de 3 a 150 mg/L. Estos viales
743 contienen una mezcla reactiva de ácido sulfúrico, dicromato de potasio y sulfato de plata,
744 la cual permite oxidar químicamente la materia orgánica presente en la muestra.

745 De manera similar al procedimiento utilizado en la espectrofotometría, fue necesario
746 elaborar una curva de calibración utilizando biftalato de potasio como estándar.

747 Inicialmente se prepararon soluciones patrón de:

- 748 • 50 mg/L
- 749 • 100 mg/L
- 750 • 150 mg/L

751 Sin embargo, debido a que la concentración de fenol utilizada en los experimentos
752 corresponde aproximadamente a 11.25 mg/L de DQO, fue necesario incluir en la curva de
753 calibración concentraciones adicionales de:

- 754 • 25 mg/L
- 755 • 12 mg/L
- 756 • 1 mg/L

757 Con esta curva fue posible evaluar la disminución del contenido de materia orgánica
758 presente en la solución.

759 Debido a la limitada disponibilidad de viales y al tiempo requerido para realizar el proceso
760 de digestión, el número de muestras analizadas mediante esta técnica fue menor en
761 comparación con las analizadas por espectrofotometría.

762 4.7 Disposición final de residuos

763 Los residuos generados durante el desarrollo experimental de esta investigación
764 estuvieron constituidos, principalmente, por el dióxido de titanio TiO_2 utilizado como
765 fotocatalizador, los compuestos intermedios y finales provenientes de la degradación
766 fotocatalítica del fenol, así como los residuos derivados de los análisis de Demanda

767 Química de Oxígeno (DQO). Todos estos desechos se segregaron y depositaron en sus
768 respectivos colectores, de acuerdo con el sistema de clasificación y manejo de residuos
769 implementado por la Facultad de Ciencias Químicas de la UANL y con la normativa
770 ambiental vigente: la NOM-052-SEMARNAT-2005 y la NOM-054-SEMARNAT-
771 1993. Los efluentes líquidos de la degradación del fenol se recolectaron en los envases
772 correspondientes para sustancias tóxicas e inflamables, aminas y solventes orgánicos no
773 halogenados, en el colector (C). Por su parte, los residuos sólidos que contenían TiO_2 se
774 depositaron en contenedores destinados a sólidos y sales inorgánicas, en el colector (B).
775 En el caso de los residuos del análisis de DQO, al tratarse de una mezcla de ácido sulfúrico
776 con sustancias orgánicas y trazas de metales, sus características no coincidían con las
777 especificaciones de ninguno de los colectores designados por la facultad; por lo tanto, se
778 neutralizaron inicialmente con hidróxido de calcio para disminuir su acidez y,
779 posteriormente, se entregaron al departamento ambiental de la facultad para su manejo
780 adecuado. Finalmente, la totalidad de los residuos se trasladó al almacén temporal de
781 residuos peligrosos para su gestión integral, conforme a la Ley General para la Prevención
782 y Gestión Integral de los Residuos (LGPGIR) y su Reglamento (RLGPGIR), y se entregó
783 a una empresa autorizada por la Secretaría de Medio Ambiente y Recursos Naturales
784 (SEMARNAT) para su tratamiento y disposición final, garantizando así la protección de
785 la salud humana y del medio ambiente.

5. Resultados y discusión

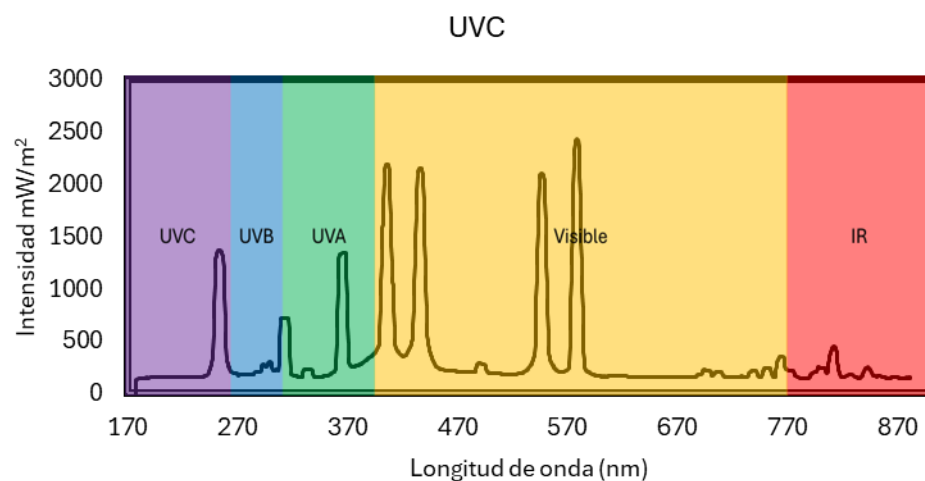
5.1 Caracterización de las lámparas

Antes de evaluar la cinética de degradación del fenol, se procedió con la caracterización espectral y energética de las fuentes de iluminación del fotorreactor. Esta etapa preliminar permitió cuantificar la potencia radiante y la energía disponible en el proceso. El diseño experimental original consideró dos tipos de fuentes fluorescentes de 25 W: lámparas de luz visible y lámparas de radiación UV, caracterizadas por poseer un menor y mayor nivel energético, respectivamente.

5.1.1 Espectro de emisión

La determinación del espectro de emisión de estos dispositivos resultó indispensable para correlacionar la energía alimentada con la eficiencia del sistema.

Los resultados de esto se muestran a continuación en las figuras 5 y 6.



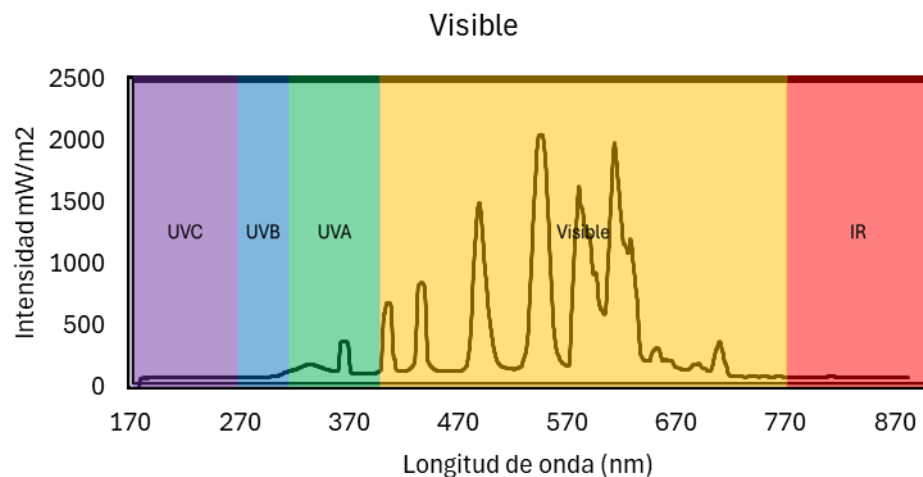
798

799 *Figura 5 Espectro de emisión de luz de las lámparas de luz UV.*

800 En la figura 5 se observan los picos de emisión obtenidos de las lámparas UV, estas
801 presentan picos de energía en prácticamente todas las longitudes de onda de interés, desde
802 la infrarroja hasta las longitudes de onda más energizadas como lo son las UVC, estos son
803 los rangos de emisión:

- 804 • Infrarrojo: 700 nm – 1 mm
- 805 • Visible: 380 – 750 nm
- 806 • UVA: 315 – 400 nm
- 807 • UVB: 280 – 315 nm
- 808 • UVC: 100 – 280 nm

809 Se observa que los picos de emisión en la zona de luz visible son los más altos, sin
810 embargo, como se muestra en la figura 5 el pico de emisión cuya aportación energética es
811 superior es el que se encuentra en la zona UVC que va desde los 280 nm hasta las
812 longitudes más energizadas de 100 nm, más específicamente cerca de los 250 nm de
813 longitud de onda.



814

815 *Figura 6 Espectro de emisión de luz de las lámparas de luz visible.*

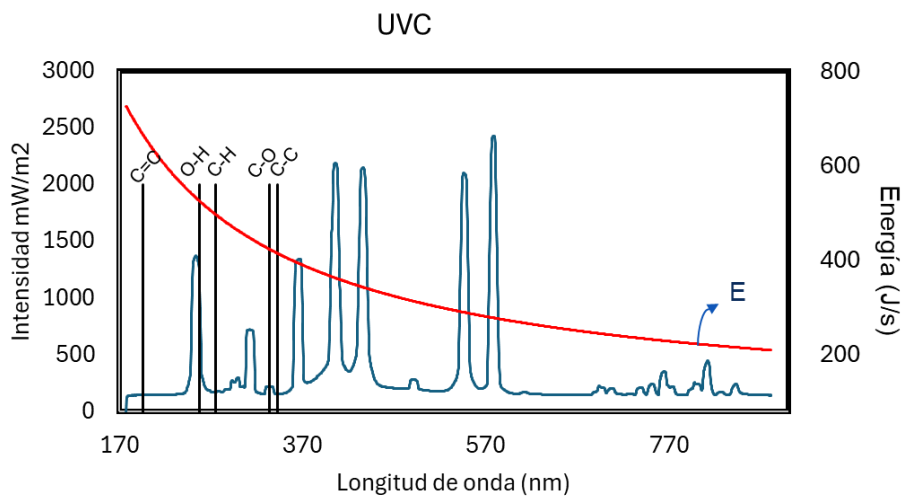
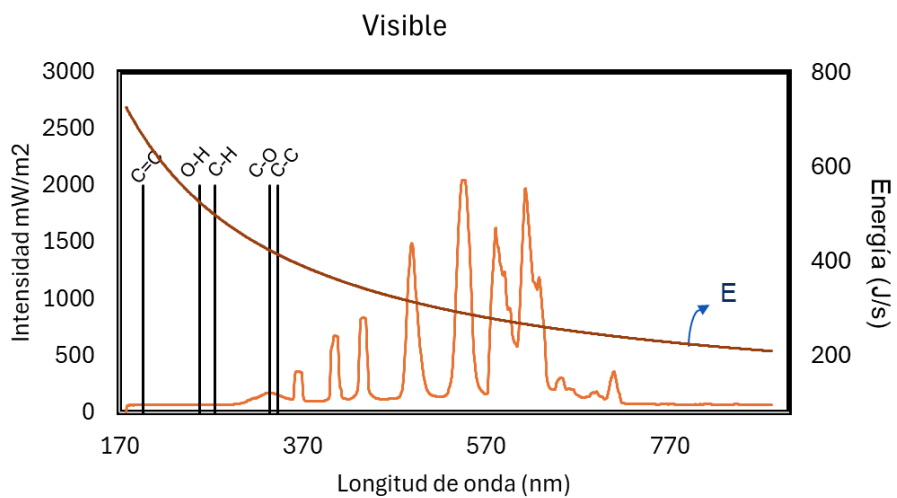
816 En la figura 6 se observa el espectro de emisión de las lámparas de luz visible, estas a
 817 diferencia de las lámparas que emiten luz UV, solamente tienen picos de emisión en la
 818 zona de luz visible y un pequeño pico en la zona de luz UVA, por lo que cabría esperar
 819 que no irradiara tanto como las lámparas UV.

820 En la literatura encontramos la cantidad de energía que poseen algunos enlaces de
 821 compuestos orgánicos, comparando estos datos podemos observar que las lámparas UV
 822 utilizadas, emiten a longitudes de onda lo suficientemente energizadas como para poder
 823 romper la mayoría de enlaces orgánicos presentes en la molécula del fenol, por lo que
 824 cabría espera la degradación de este compuesto solamente por acción de la luz, sin
 825 embargo, el espectro de emisión de las lámparas de luz visible difícilmente podríamos
 826 esperar la degradación del fenol por medio de fotólisis.

827 *Tabla 5 Energía de enlace de cada enlace presente en el fenol. [33]*

Enlace químico	Energía de enlace (kJ/mol)	Longitud de onda necesaria (nm)
C=C	611	196
O-H	463	258
C-H	435	275
C-O	358	334
C-C	348	343

828 En la tabla 5 se observan las energías de enlace que contiene el contaminante modelo el
 829 fenol, en la figura 7 se observa la comparación con los espectros de lámpara para observar
 830 cuales enlaces pueden romperse debido a la energía irradiada por las lámparas.



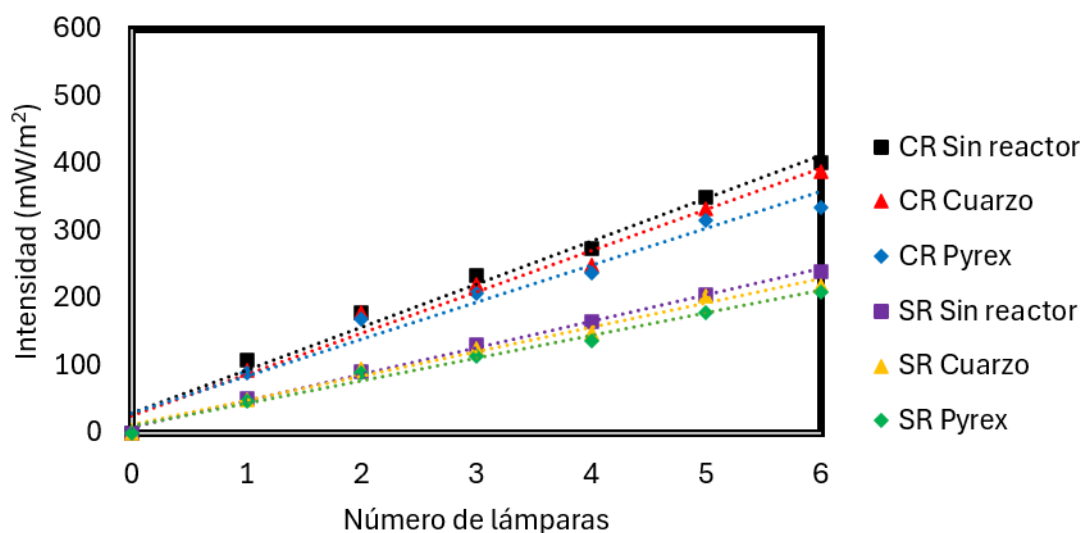
835 *Figura 7 Aportación energética de cada pico de emisión (a) luz visible (b) luz UV*

836 Como se observa en la figura 9 las lámparas UV emiten luz en la longitud de onda
 837 necesaria para romper la mayor parte de los enlaces presente en el contaminante modelo

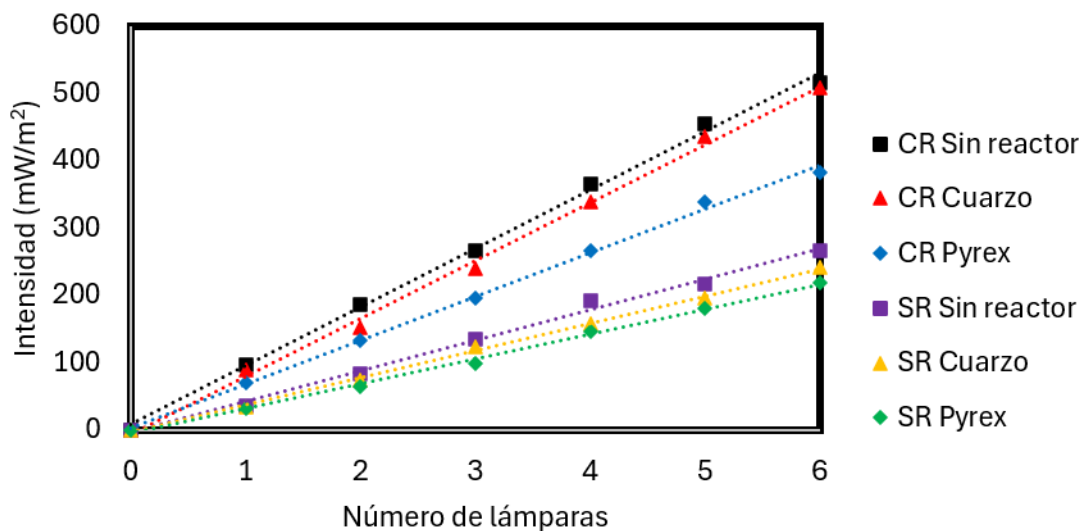
838 que elegimos. Debido a esto se espera que las lámparas logren degradar el compuesto
 839 puramente por acción fotolítica, sin embargo, las lámparas de luz visible apenas logran
 840 que un pequeño pico alcance a romper los enlaces C-C y C-O, además de ser un pico con
 841 una intensidad muy baja por lo que se espera que no logre romper los enlaces por medio
 842 de fotólisis.

843 5.1.2 Irradiación emitida

844 Se estudio también la intensidad de irradiación emitida por las lámparas, variamos el
 845 número de lámparas utilizadas para evaluar la influencia y evaluamos el material del que
 846 debería ser el reactor batch, comparamos la cantidad de irradiación emitida solamente por
 847 las lámparas contra la cantidad de irradiación que llega al utilizar un reactor de pyrex y
 848 uno de cuarzo con y sin reflectores con ambos tipos de lámparas, en la figura 8 se observan
 849 los resultados de este estudio.



(a)

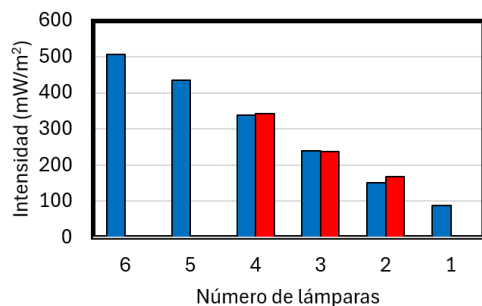


(b)

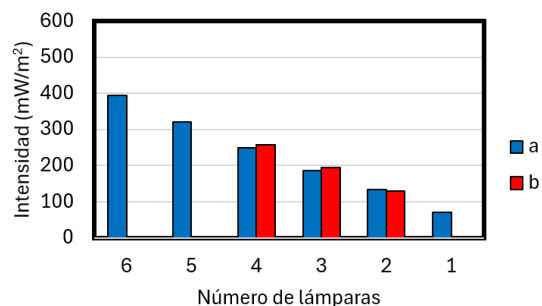
Figura 8 Variación de la intensidad lumínica con respecto al número de lámparas con reflectores CR y sin reflectores SR con diferente material de reactor, (a) utilizando lámparas de luz visible y (b) lámparas de luz UV.

Como pudimos observar en la figura 8 el uso de reflectores aumenta en casi el doble la intensidad de la irradiancia que llega a al reactor que si no se utilizaran reflectores, además se observó que el reactor de cuarzo solamente absorbe entre un 2 y 9% de la radiación de las lámparas comparado a ca cantidad de irradiancia que se recibió sin el reactor, en contraste el reactor de pyrex absorbió casi un 30% de la irradiancia en el caso da las lámparas UV y alrededor de un 15 % en el de las de luz visible, por esta razón se decidió utilizar un reactor de cuarzo para evitar la mayor cantidad de perdidas energéticas.

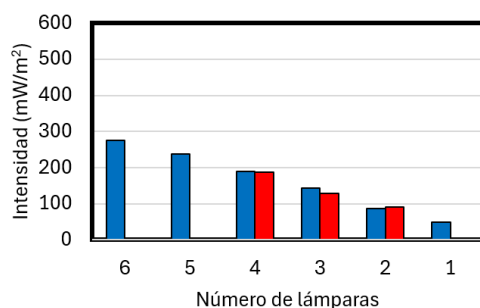
También evaluamos la contribución del arreglo espacial en el caso de utilizar 4, 3 y 2 lámparas ya que este es el número de lámparas con las que existe más de 1 tipo de acomodo como se muestra en la tabla 4 en la sección de metodología, en la figura 8 se muestran los resultados.



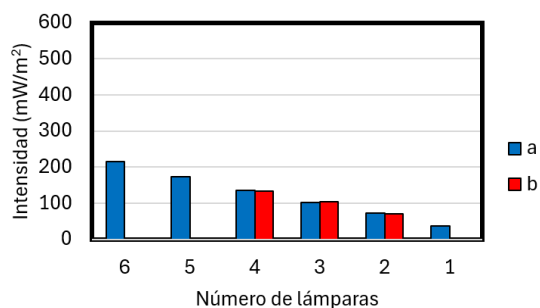
(a)



(b)



(c)



(d)

868 *Figura 9 Cambio en la irradiancia emitida por un mismo número de lámparas utilizando*
 869 *diferente arreglo espacial utilizando lámparas UV (a) con reflectores a una distancia de*
 870 *7 cm del vaso de reacción (b) con reflectores a 17 cm de distancia, (c) sin reflectores a 7*
 871 *cm de distancia y (d) sin reflectores a 17 cm de distancia.*

872 Como podemos observar hay una ligera variación en la cantidad de radiación recibida por
 873 el reactor batch, sin embargo, consideramos que no es significativa debido a que la
 874 diferencia es muy pequeña en comparación a la diferencia que se obtiene al variar el
 875 número de lámparas, el uso de reflectores o el posicionamiento de las lámparas adelante
 876 o atrás.

877 5.1.3 Propuesta semi-empírica para I_{of}

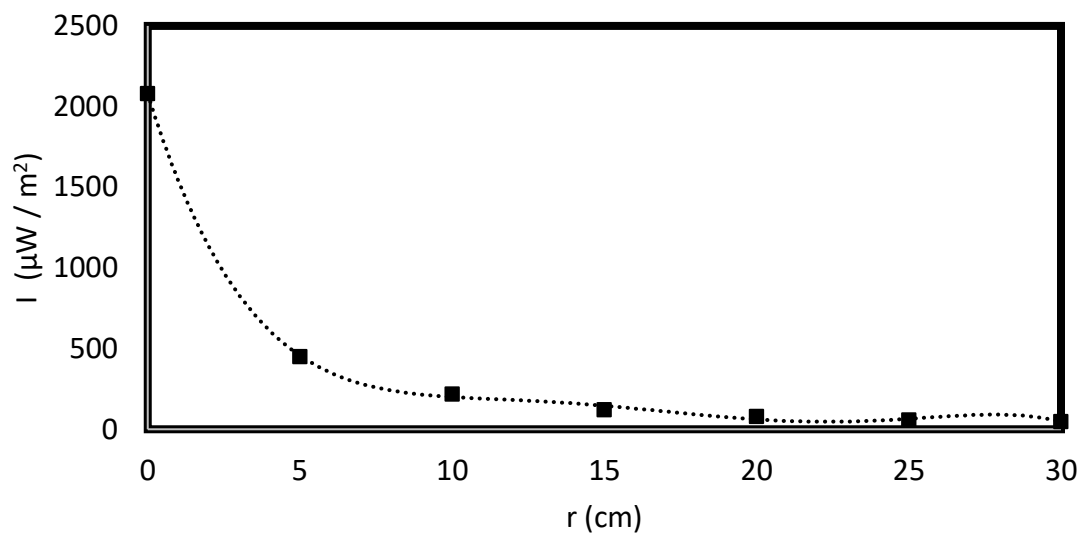
878 En base a los datos obtenidos experimentalmente sobre las variables de diseño del reactor
879 y como afectan estas a la intensidad con la que es irradiada la zona de reacción dentro del
880 reactor batch de cuarzo, se hizo una propuesta de modelo semiempirico para evaluar esta
881 cantidad de irradiación.

882 Primeramente, sabemos que la intensidad es por definición directamente proporcional a
883 la potencia con la que es alimentada

$$I \left(\frac{W}{m^2} \right) = \frac{P (W)}{A (m^2)} \quad 13$$

884 Donde P es la potencia de la lámpara y A es el área de emisión de la lámpara.

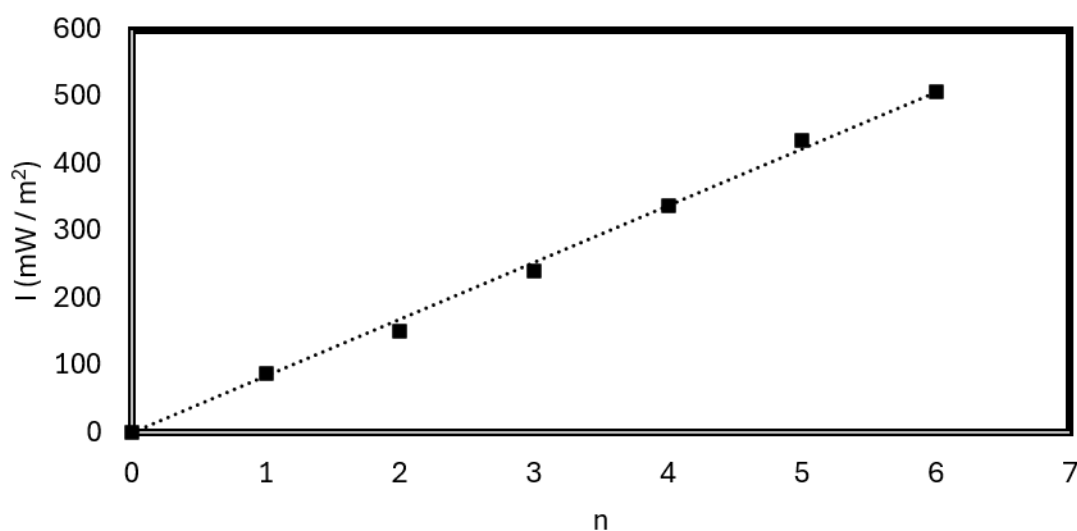
885 Sin embargo, esta área de emisión se refiere al área total que recibe el impacto de la luz
886 emitida por esta lámpara, la cual se comprobó experimentalmente que, dependiendo del
887 radio de emisión, afecta de forma inversamente proporcional a la intensidad recibida por
888 el reactor, en la figura 10 se puede apreciar la comprobación experimental de este hecho.



889

890 *Figura 10 Relación entre la intensidad y la distancia entre la lámpara y el reactor de*
 891 *cuarzo*

892 Después en base los datos de la intensidad con respecto al número de lámparas se observó
 893 un crecimiento lineal, por lo que se hizo la propuesta de que el número de lámparas es
 894 directamente proporcional a la intensidad emitida, en la figura 12 se observa dicha
 895 correlación.



896

897 *Figura 11 Relación del número de lámparas con la intensidad lumínica.*

898 Finalmente, con los datos obtenidos anteriormente, se obtuvo una correlación que
 899 relaciona la intensidad con estos 3 factores, la cual es la siguiente:

$$I_{OR} \propto \frac{nP}{Area} \quad 14$$

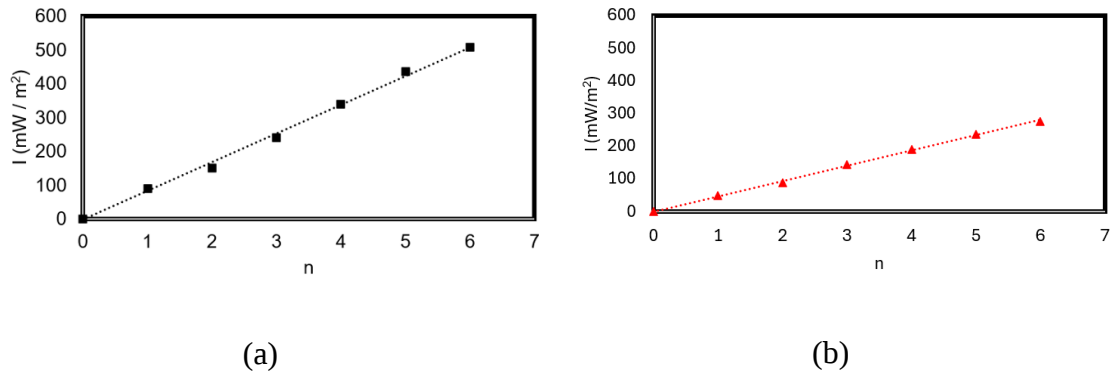
900 A esta correlación le son necesarios de agregar factores como el uso de reflectores, el
 901 efecto de la geometría de las paredes del reactor, las perdidas por la absorbancia de la luz
 902 por parte de las paredes del reactor, estos factores y muchos otros fueron englobados en
 903 la propuesta de una constante para el reactor en particular, la cual llamamos
 904 provisionalmente como factor de modulación fotónica, φ_{mf} .

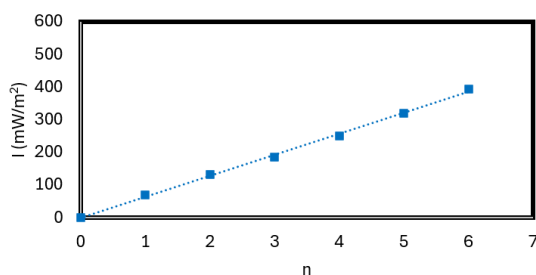
$$I_{OR} = \frac{\varphi_{mf}nP}{Area} \Rightarrow I_{OR} = \frac{\varphi_{mf}nP}{2\pi h_{altura}r_{LR}} \quad 15$$

905 Este factor se calculó graficando I_{OR} contra n , donde la pendiente sería igual a:

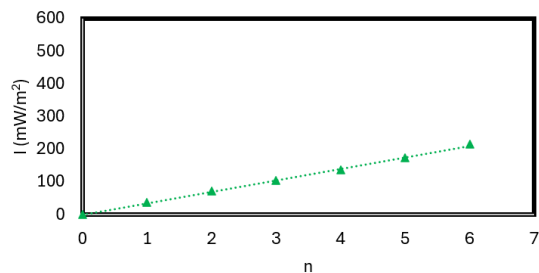
$$m = \frac{\varphi_{mf}P}{2\pi h_{altura}r_{LR}} \quad 16$$

906 Dando como resultado las gráficas de la figura 15.





(c)



(d)

907 *Figura 12 Comparación de la relación entre el número de lámparas con la intensidad*
 908 *lumínica, con y sin reflectores y a 2 distancias distintas, adelante (7 cm entre el reactor y*
 909 *la lámpara) y atrás (17 cm entre el reactor y la lámpara).*

910 De estas pendientes se despejo el valor de φ_{mf} dando como resultado los valores de la
 911 tabla 6 donde se puede apreciar que el valor del factor de modulación lumínica aumenta
 912 en su valor casi el triple gracias a la utilización de los reflectores y su aporte lumínico.

913 *Tabla 6 Resultados del cálculo del factor de modulación fotónica propuesto.*

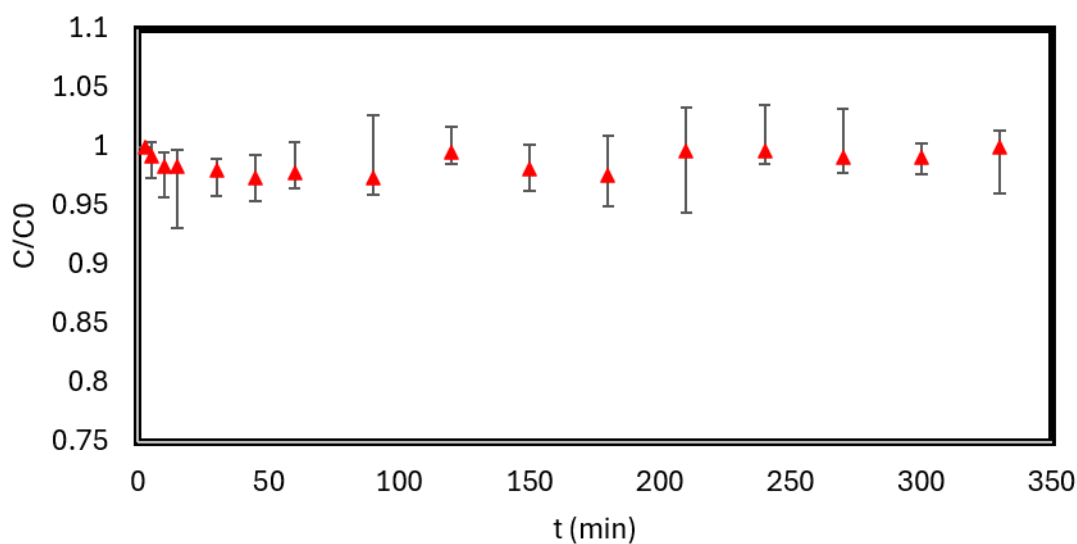
	Adelante		Atrás	
	CR	SR	CR	SR
6	0.16	0.06	0.09	0.03
5	0.17	0.06	0.09	0.03
4	0.16	0.06	0.09	0.03
3	0.16	0.06	0.09	0.03
2	0.15	0.06	0.09	0.03
1	0.17	0.07	0.09	0.04
PROMEDIO	0.16	0.06	0.09	0.03

914 Con esta propuesta se evaluarán posteriormente los valores de intensidad y más adelante
915 en los resultados los perfiles de degradación del reactor.

916 5.2 Fotólisis

917 5.2.1 Fotólisis mediante luz visible

918 Concluida la etapa de caracterización del fotorreactor, se determinó el efecto de la
919 intensidad de irradiancia en el comportamiento cinético del proceso de fotodegradación
920 del fenol, cuyos hallazgos se exponen a continuación.



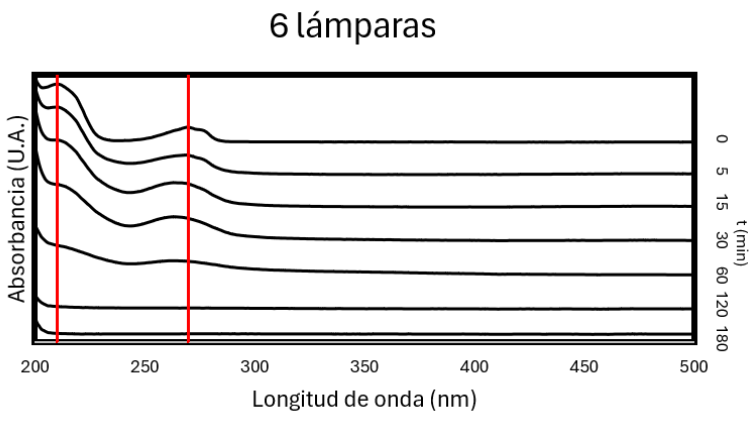
921

922 *Figura 13 Evaluación de la fotodegradación de fenol utilizando 6 lámparas utilizando*
923 *diferente tipo de luz.*

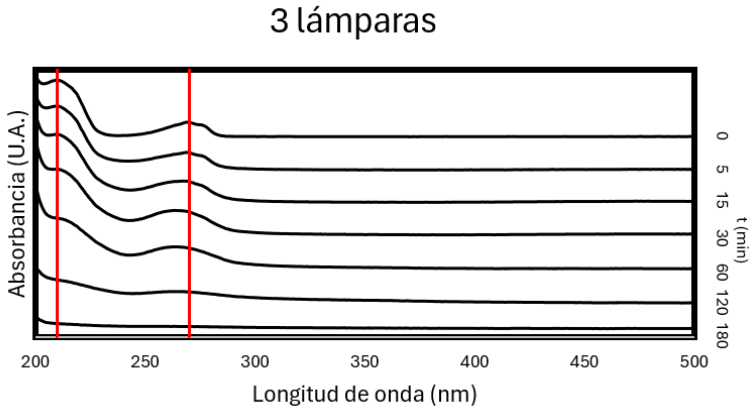
924 Como podemos observar en la figura 14 observamos una ligera caída al inicio de la
925 cinética con lámparas de luz visible, sin embargo, esta caída solamente degrada menos del
926 5 por ciento del contaminante y después permanece estancada en esa concentración, en
927 contraste, las lámparas UV mediante el mismo proceso de fotólisis degradan hasta un 98%

928 del contaminante en 90 min, por lo que se decidió utilizar solamente lámparas UV para
929 evaluar la cinética de degradación del fenol en el reactor fotoquímico.
930 Este experimento, al igual que la mayoría de los experimentos de degradación realizador
931 en este trabajo, se realizo 3 veces para poder calcular un porcentaje de desviación en los
932 resultados obtenidos, este resultado se muestra grafica mente en las barras de error, las
933 cuales muestran un error general menor al 5% para estos experimentos.

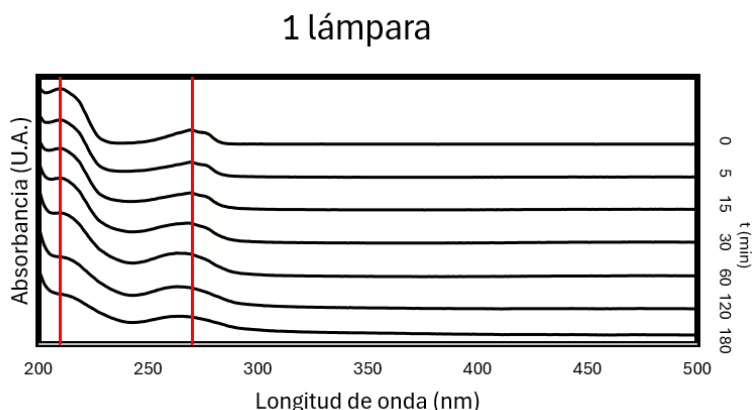
934 5.2.2 Evolución del espectro de emisión ante la degradación del fenol por fotólisis



(a)



(b)



939

940

(c)

941 *Figura 14 Evolución del espectro a (a) 6 lámparas, (b) 3 lámparas y (c) 1 lámpara para*
 942 *el sistema homogéneo*

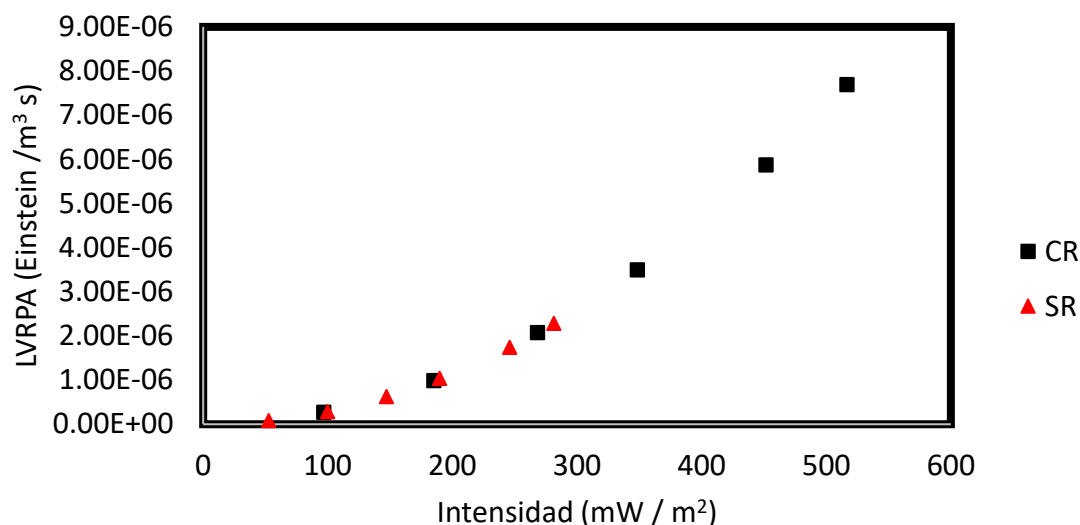
943 En la Figura 15 se presenta la evolución del espectro de absorción UV-Vis del fenol a lo
 944 largo del proceso fotolítico. El perfil espectral de este compuesto exhibe tres bandas de
 945 absorbancia características: la primera a 195 nm, asociada al anillo bencénico; la segunda
 946 a 210 nm, correspondiente al grupo funcional -OH; y la tercera a 270 nm, que representa
 947 una transición de baja energía, asociada al anillo característico de los compuestos
 948 aromáticos. Al ser esta última la banda distintiva y de menor interferencia para el fenol,
 949 se seleccionó como la longitud de onda de referencia para el seguimiento cinético de la
 950 degradación.

951 Asimismo, la Figura 12 permite contrastar el decremento de dichas bandas de absorción
 952 en función del tiempo bajo diferentes intensidades de irradiación (configuraciones de 6, 3
 953 y 1 lámpara). Al emplear 6 lámparas, se observa una remoción completa de los tres picos
 954 característicos tras un periodo de 2 horas de reacción. Por el contrario, la configuración
 955 de 3 lámparas requiere un tiempo de tratamiento mayor, prolongándose a casi 3 horas,

956 mientras que con el uso de una sola lámpara las señales de absorbancia persisten de manera
957 significativa incluso después de las 3 horas de experimentación.

958 5.2.3 Cálculo de la tasa de absorción volumétrica de fotones

959 Con estos resultados y los obtenidos del calculamos la cantidad el LVERA para conocer
960 la tasa de absorción de los fotones emitidos.



961

962 *Figura 15 Tasa volumétrica local de absorción de fotones en fotólisis*

963 Los resultados de absorbancia obtenidos, utilizando la ecuación 7 y la metodología del
964 apartado [III] de los apéndices se calculó la tasa de absorción de fotones del sistema, lo
965 resultados de este cálculo se muestran en la figura 16 donde se aprecia que la tasa de
966 absorción de energía en el reactor es muy baja.

967 Los valores de LVRPA obtenidos fueron del orden de 10^{-6} Einstein·m⁻³·s⁻¹, alcanzando
968 un máximo cercano a 7.7×10^{-6} Einstein·m⁻³·s⁻¹ cuando se utilizaron reflectores (CR) y
969 una intensidad de radiación aproximada de 520 mW/m². En ausencia de reflectores (SR),
970 los valores máximos fueron considerablemente menores, alrededor de 2.2×10^{-6}

971 $\text{Einstein}\cdot\text{m}^{-3}\cdot\text{s}^{-1}$, lo que confirma que el uso de reflectores incrementa la cantidad de
972 energía luminosa absorbida por el sistema.

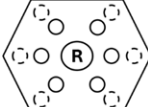
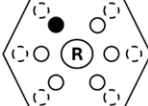
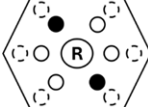
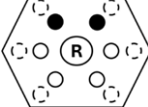
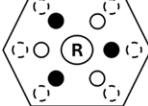
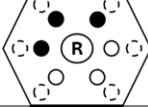
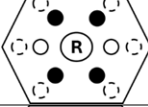
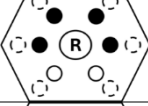
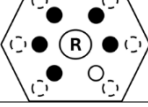
973 Al comparar estos resultados con los reportados por Domínguez-Arvizu et al (2017).,
974 quienes calcularon valores de LVRPA comprendidos entre 2.22×10^{-4} y 1.57
975 $\text{Einstein}\cdot\text{m}^{-3}\cdot\text{s}^{-1}$ para suspensiones de NiFe_2O_4 irradiadas con una lámpara de 150 W, se
976 observa que los valores obtenidos en el presente estudio son entre dos y seis órdenes de
977 magnitud inferiores. Esta diferencia puede atribuirse a varios factores, entre ellos las
978 características ópticas del sistema, la potencia de la fuente de radiación, la geometría del
979 reactor, la concentración de especies absorbentes y, principalmente, la metodología
980 empleada para estimar la absorción fotónica. Mientras que Domínguez-Arvizu et al
981 (2017). resolvieron la ecuación de transferencia radiativa considerando coeficientes de
982 absorción y dispersión del fotocatalizador, en este trabajo el LVRPA fue estimado a partir
983 de la ley de Beer-Lambert y la constante de absorción molar del fenol, lo que representa
984 una aproximación simplificada del fenómeno de transporte radiativo.

985 A pesar de los bajos valores de LVRPA obtenidos, el sistema experimental alcanzó
986 porcentajes de degradación de fenol superiores al 90 %, indicando que la cantidad de
987 energía absorbida fue suficiente para promover la reacción fotocatalítica. Este
988 comportamiento sugiere que la eficiencia global del proceso no depende únicamente de la
989 magnitud absoluta del LVRPA, sino también de la capacidad del fotocatalizador para
990 utilizar eficazmente los fotones absorbidos. En consecuencia, el empleo de materiales
991 fotocatalíticos con una mayor eficiencia cuántica o mejores propiedades ópticas podría
992 permitir alcanzar conversiones similares en tiempos de reacción más cortos,
993 incrementando el aprovechamiento energético del sistema.

994 Evaluamos la cinética de degradación utilizando diferentes configuraciones del
 995 fotorreactor, la tabla 7 muestra un resumen de los resultados.

996 5.2.4 Resumen de resultados cinéticos de degradación por fotólisis

997 *Tabla 7 Resumen de resultados con fotólisis con las lámparas adelante.*

Número de lámparas	Arreglo	I_{CR} mW/m ²	%Deg _{CR,90}	k'_{CR}	I_{SR} mW/m ²	%Deg _{SR,90}	k'_{SR}
6		516.7	97.7	0.017	271.7	63.7	0.010
5		451.7	86.7	0.015	220	56.7	0.009
4a		348.3	76.1	0.011	176.7	69.8	0.009
4b		348.3	74.2	0.008	174.5	70.1	0.005
3a		268.3	47.6	0.009	138.3	36.1	0.004
3b		256.7	37.4	0.005	143.2	4.1	0.002
2a		185	22.2	0.017	83.3	4.6	0.010
2b		168.3	20.8	0.015	82.5	4.5	0.009
1		96.7	0	0.011	38.3	0	0.009

998

999

1000

1001

1002 Donde:

I_{CR} y I_{SR}	Irradiancia recibida por la zona de reacción con reflectores (CR) y sin reflectores (SR) respectivamente
$\%Deg_{CR,90}$ y $\%Deg_{SR,90}$	% de degradación del fenol después de 90 minutos con reflectores (CR) y sin reflectores (SR) respectivamente
k'_{CR} y k'_{SR}	Coefficiente cinético aparente
	Lámpara encendida
	Enchufe sin lámpara
	Lámpara apagada
	Reactor batch

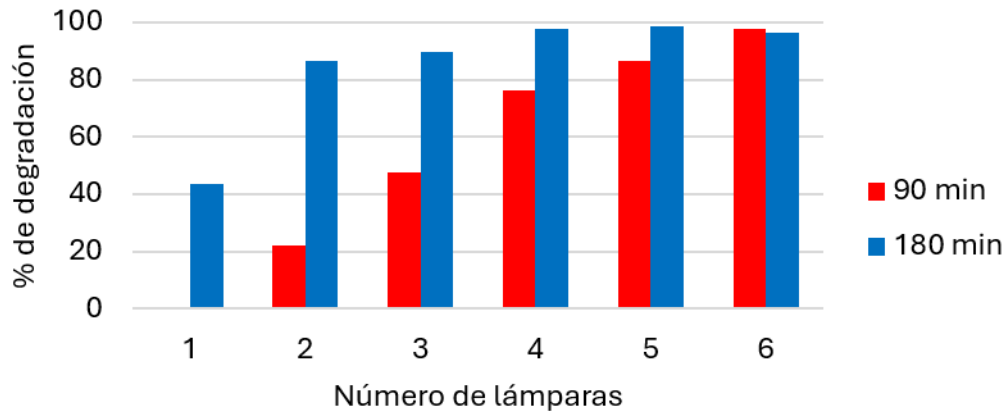
1003

1004 Los resultados muestran que la eficiencia de degradación del fenol está directamente
1005 relacionada con la intensidad radiativa incidente, la cual depende principalmente del
1006 número de lámparas y de la presencia de reflectores. La configuración con seis lámparas
1007 y reflectores alcanzó la mayor intensidad (516.7 mW/m²), porcentaje de degradación (97.7
1008 %) y coeficiente cinético aparente (0.017 min⁻¹), mientras que la reducción del número de
1009 lámparas provocó una disminución progresiva de estos parámetros. La incorporación de
1010 reflectores incrementó la intensidad recibida aproximadamente entre 1.8 y 2.2 veces
1011 respecto a las configuraciones sin reflectores, lo que se tradujo en mayores porcentajes de
1012 degradación, confirmando que la radiación retrodispersada contribuye significativamente
1013 al aprovechamiento de los fotones emitidos. Asimismo, los arreglos simétricos
1014 presentaron un desempeño ligeramente superior al de los asimétricos, particularmente en
1015 configuraciones con pocas lámparas, debido a una distribución más homogénea de la

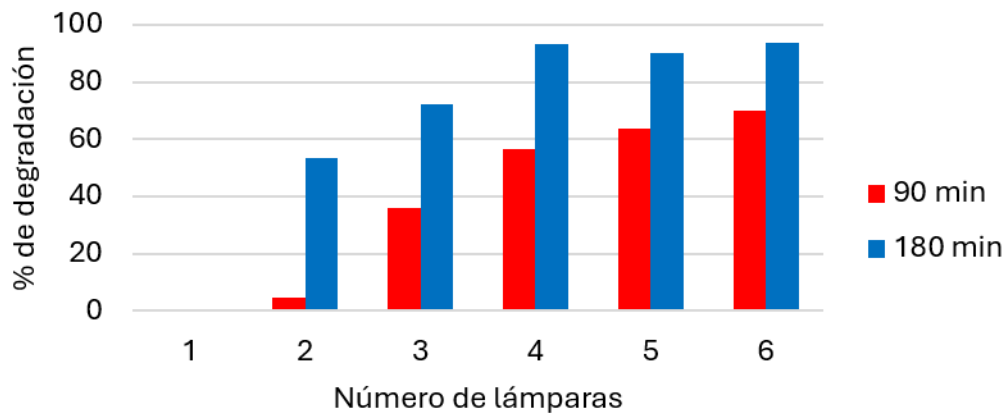
1016 radiación y una menor formación de zonas de sombra. En general, los resultados indican
1017 que el número de lámparas y el uso de reflectores son los factores más importantes para
1018 maximizar la degradación fotolítica del fenol, mientras que la disposición espacial de las
1019 lámparas ejerce una influencia secundaria, aunque apreciable cuando la intensidad
1020 radiativa disponible es limitada.

1021 **5.2.5 Resultados de la degradación del fenol mediante fotólisis**

1022 A continuación, se muestran estos resultados de forma gráfica en la figura 17.



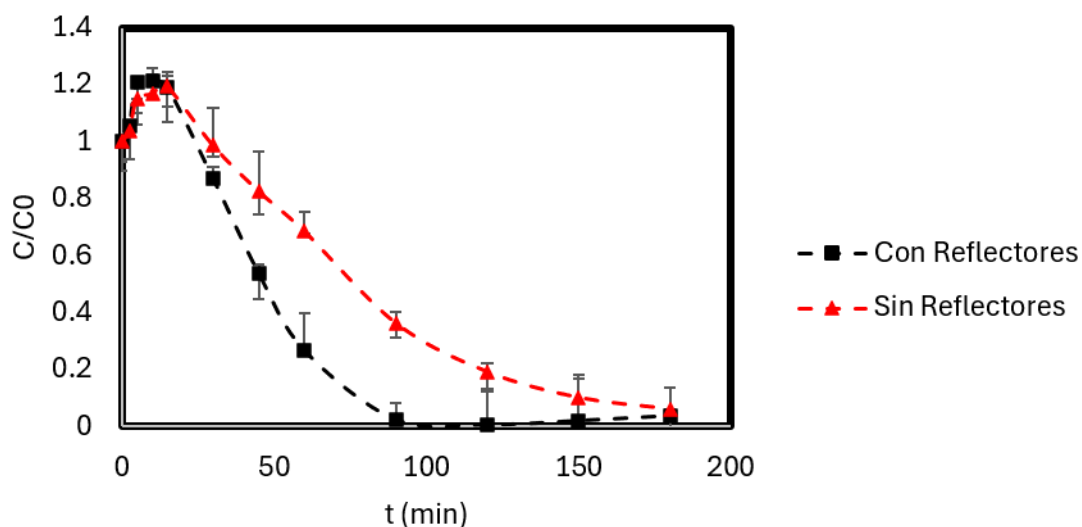
(a)



(b)

1027 *Figura 16 Porcentaje de degradación con fotólisis después de cierto tiempo (a) con*
1028 *reflectores y (b) sin reflectores*

1029 En la figura 17 se observa que después de 180 minutos ya no es necesario seguir
1030 aumentando el número de lámparas pues se ha alcanzado el porcentaje máximo de
1031 degradación con 4, 5 y 6 lámparas de igual manera.



1032

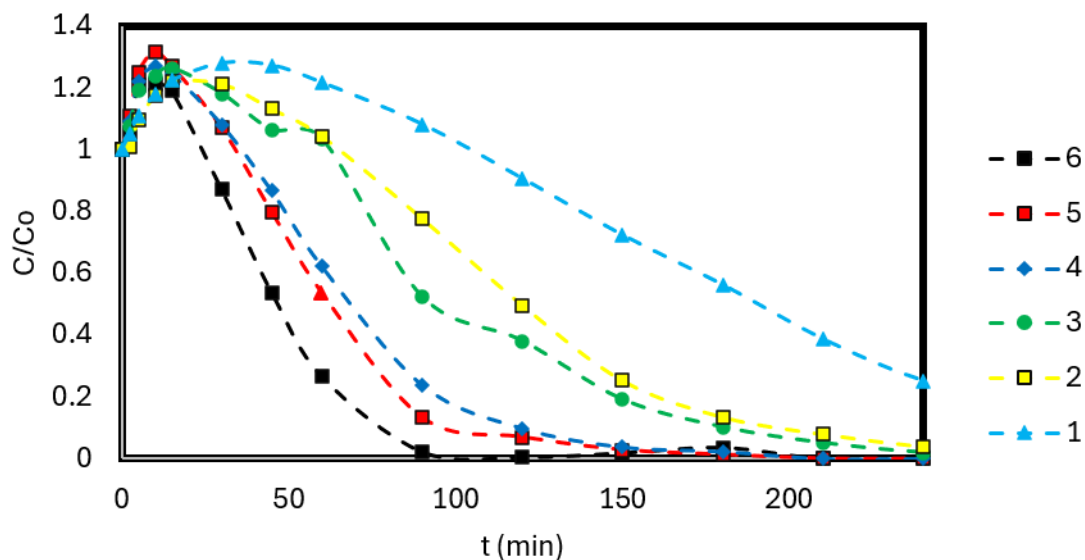
1033 *Figura 17 Influencia del uso de reflectores en la tasa de reacción*

1034 En la Figura 18 se observa que el uso de reflectores incrementa significativamente la
1035 velocidad de degradación del fenol, reduciendo aproximadamente a la mitad el tiempo
1036 requerido para alcanzar niveles de degradación similares respecto a la configuración sin
1037 reflectores. Este comportamiento puede atribuirse al aumento de la intensidad radiativa
1038 dentro del reactor ocasionado por la reflexión de los fotones que, de otra manera,
1039 abandonarían el sistema, favoreciendo así la generación de especies reactivas y acelerando
1040 la degradación del contaminante.

1041 Asimismo, se aprecia un incremento inicial aparente de la concentración de fenol durante
1042 los primeros minutos de reacción ($C/C_0 > 1$). Dado que físicamente no es posible que la

1043 concentración del contaminante aumente durante un proceso de degradación, este
1044 comportamiento se atribuye a una interferencia aditiva asociada a la técnica
1045 espectrofotométrica empleada. Se sospecha que dicha interferencia es consecuencia de la
1046 formación de compuestos orgánicos intermedios generados durante la degradación del
1047 fenol, tales como catecol, hidroquinona o benzoquinona, reportados previamente en la
1048 literatura [6]. Estos compuestos pueden absorber radiación en longitudes de onda cercanas
1049 a la utilizada para la cuantificación del fenol, produciendo una señal adicional que
1050 sobreestima temporalmente la concentración medida.

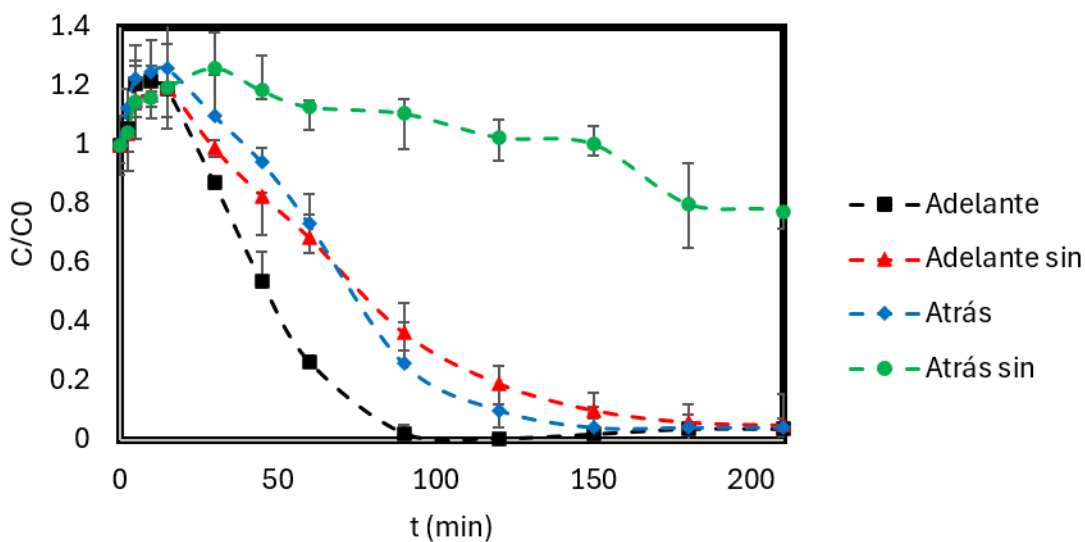
1051 A pesar de esta interferencia, la espectrofotometría continuó utilizándose para evaluar la
1052 influencia de las variables de diseño del reactor, debido a que la tendencia observada fue
1053 consistente en todos los experimentos y permitió realizar comparaciones relativas entre
1054 las diferentes configuraciones evaluadas. De esta manera, fue posible determinar el efecto
1055 de parámetros como el uso de reflectores, el número de lámparas o la intensidad radiativa
1056 sobre la velocidad de reacción. Sin embargo, con el fin de obtener una evaluación más
1057 representativa de la eliminación total de materia orgánica y evitar las limitaciones
1058 asociadas a la medición selectiva del fenol, posteriormente, como veremos más adelante,
1059 se empleó la técnica de Demanda Química de Oxígeno (DQO), la cual considera la
1060 contribución de todos los compuestos orgánicos presentes en la solución, incluyendo los
1061 productos intermedios de degradación.



1062

1063 *Figura 18 Influencia del número de lámparas en la tasa de reacción utilizando reflectores.*

1064 En la figura 19 observamos como el número de lámparas afecta a la velocidad de
 1065 degradación del fenol, siendo que conforme disminuimos la cantidad de irradiación
 1066 aumenta el tiempo necesario para degradar el fenol, por cuestiones de espacio en la figura
 1067 18 no se añadieron las barras de error.



1068

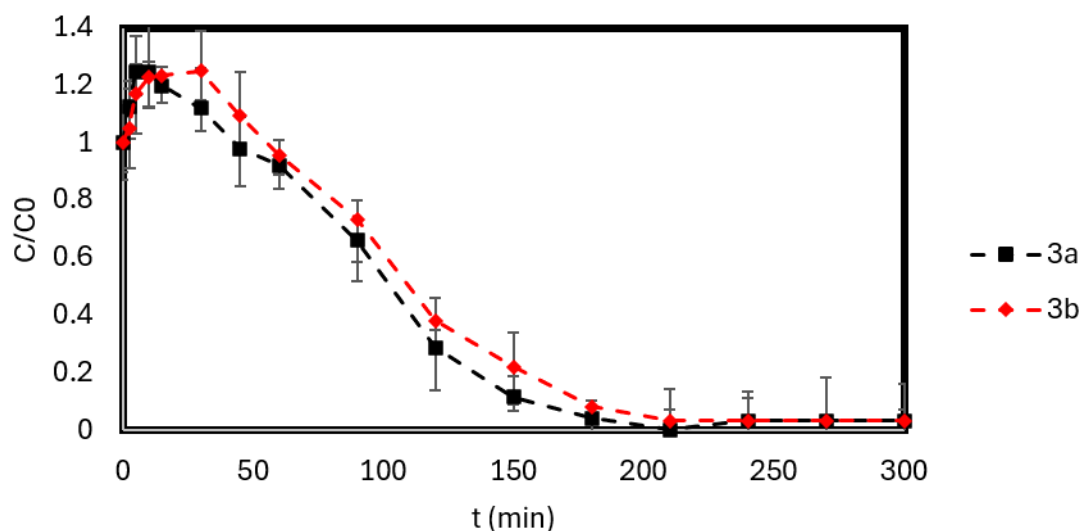
1069 *Figura 19 Influencia del posicionamiento en la velocidad de reacción utilizando 6*
1070 *lámparas con y sin reflectores.*

1071 En la figura 20 se observa la influencia del posicionamiento de las lámparas con y sin
1072 reflectores en la velocidad de degradación, se observa que, mientras que al posicionar las
1073 lámparas en la parte delantera los reflectores incrementan aproximadamente al doble de
1074 la velocidad de degradación, al posicionarlas atrás no se alcanzaron porcentajes de
1075 degradación similares al no utilizar reflect

1076 578

1077 ores en comparación con el caso en que se utilizaran ni siquiera después de 4 horas, por
1078 lo que la irradiancia con el uso de reflectores se ve enormemente influenciada por la
1079 distancia de las lámparas del reactor batch.

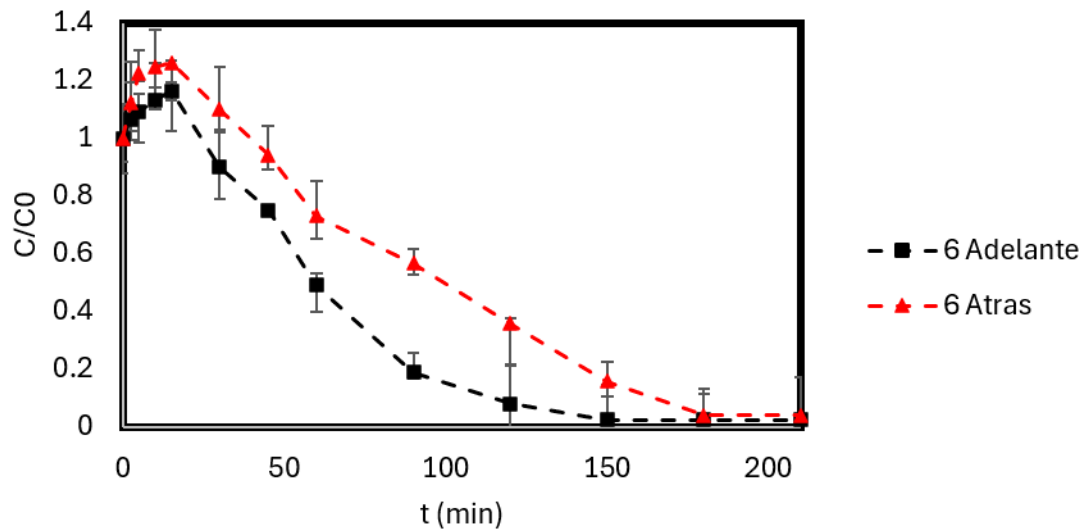
1080 También se evaluó la influencia del tipo de arreglo en la velocidad de degradación. En la
1081 Figura 21 se muestra dicho comportamiento.



1082

1083 *Figura 20 Cinéticas de degradación fotolítica con las lámparas adelante con reflectores*

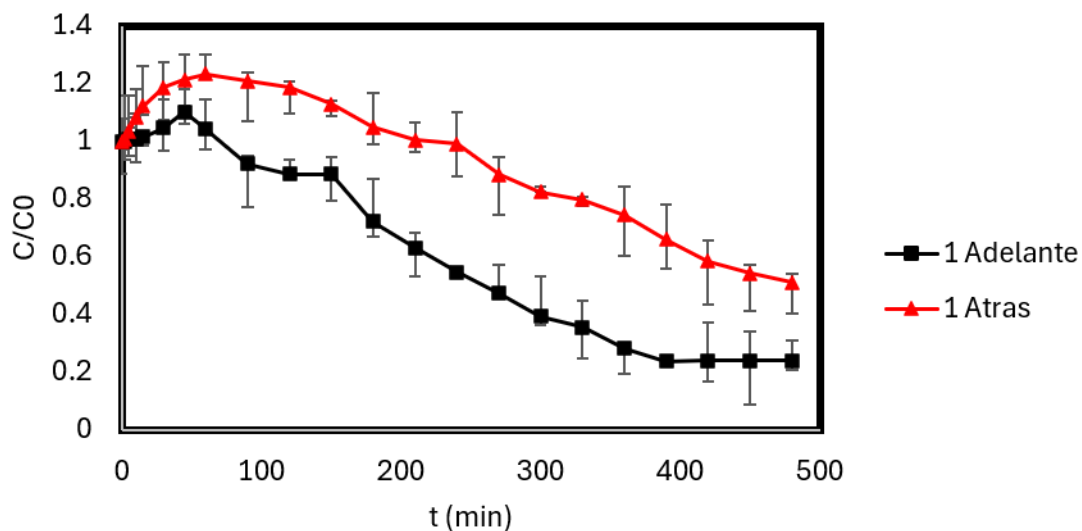
1084 En la figura 21 se observa que el cambio en el tipo de arreglo de 3 lámparas no afecta de
1085 forma significativa a la cinética de degradación, teniendo un porcentaje de desviación de
1086 5.4%, por lo que a diferencia del efecto de la distancia entre las lámparas y el reactor.



1087

1088 *Figura 21 Comparación del uso de las lámparas delanteras frente a las traseras con 6*
1089 *lámparas*

1090 Se compararon las cinéticas de degradación obtenidas con seis lámparas colocadas en la
1091 parte delantera frente a las obtenidas con las lámparas ubicadas en la parte trasera y
1092 observamos la diferencia en las velocidades de degradación.



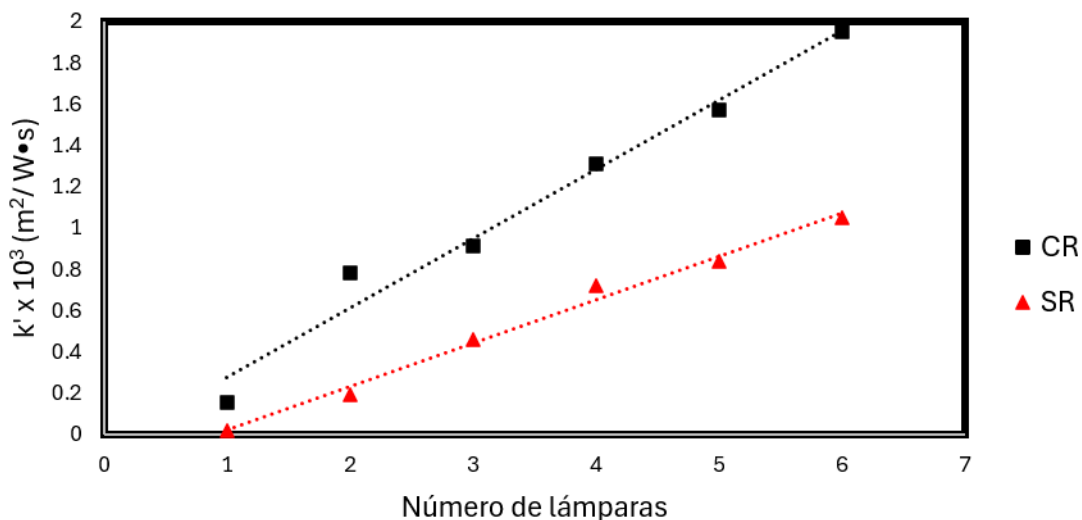
1093

1094 *Figura 22 Comparación del uso de las lámparas Adelante vs atrás con 1 lámpara.*

1095 Se hizo la misma comparativa con 1 lámpara y vimos que conforme disminuye el número
1096 de lámparas aumenta la diferencia en las velocidades de degradación.

1097 Finalmente, se avalúo mediante la técnica de DQO si el proceso realmente eliminaba todo
1098 rastro del contaminante modelo hasta conseguir la mineralización de este o si solamente
1099 formó nuevos compuestos a partir de la degradación del fenol.

1100

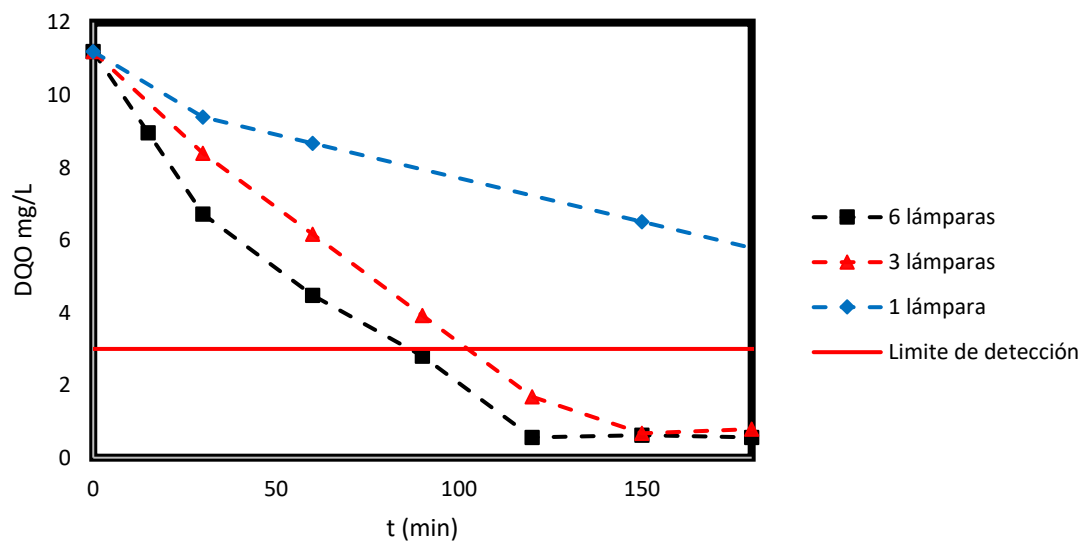


1101

1102 *Figura 23 Tasa de reacción de pseudo primer orden a diferente número de lámparas en*
1103 *fotólisis*

1104 En la figura 24 podemos observar el aumento del coeficiente cinético de 1er orden
1105 conforme aumentamos el número de lámparas, se aprecia que sigue una tendencia casi
1106 lineal.

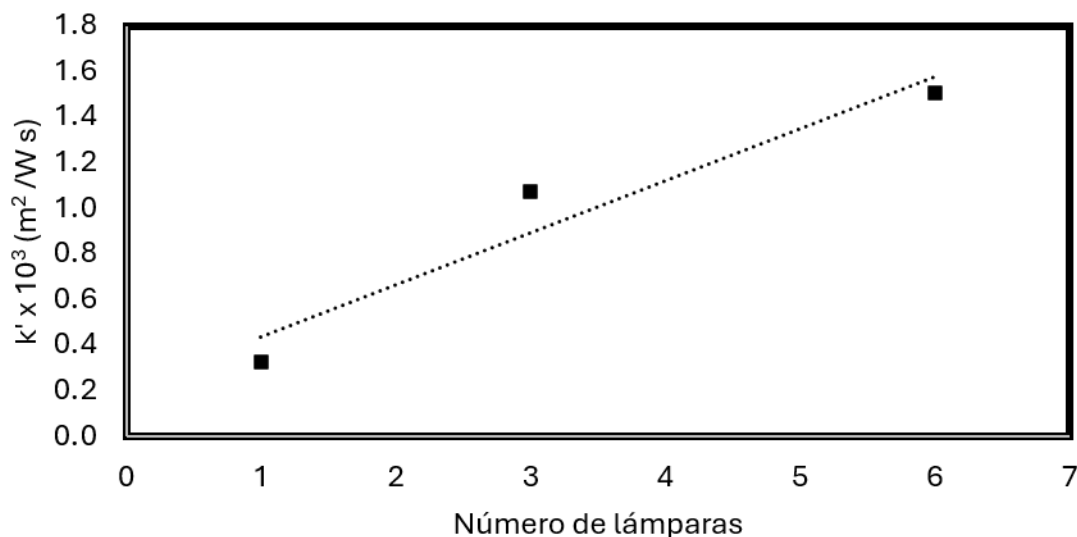
1107 5.2.6 Resultados del análisis de DQO para fotólisis



1108

1109 *Figura 24 Análisis de DQO para los experimentos con fotólisis utilizando reflectores (solo*
1110 *confiable hasta 3 mg/L)*

1111 En la figura 25 se puede observar la caída en la concentración de O_2 equivalente y por
1112 tanto una caída en la concentración de sustancias orgánicas en el reactor, no solamente
1113 fenol sino todos los subproductos generados durante su degradación fotoquímica, se tiene
1114 entonces que dicha concentración alcanza valores inferiores al límite de detección de la
1115 técnica después de 90 minutos, por lo que se asume que la concentración de contaminantes
1116 por debajo de ese límite es 0.



1117

1118 *Figura 25 Tasa de reacción de pseudo primer orden a diferente número de lámparas en*
 1119 *fotoólisis calculado en base a datos experimentales del análisis DQO*

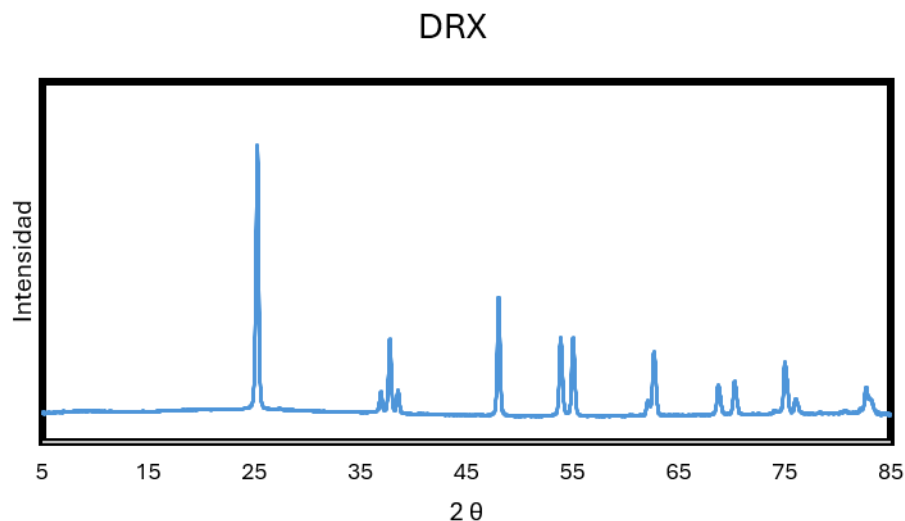
1120 Se calculo el valor de la k aparente y se observó que a diferencia de los resultados
 1121 obtenidos mediante espectrofotometría los resultados fueron ligeramente menores para 6
 1122 y 3 lámparas, sin embargo, para 1 lámpara el valor de la velocidad aumento a casi el doble.

1123 5.3 Fotocatálisis

1124 Para los experimentos con fotocatálisis primero se analizó el fotocatalizador a utilizar, en
 1125 este caso TiO_2 de la marca FERMONT.

1126 5.3.1 Caracterización del fotocatalizador (TiO_2)

1127 Primeramente, se realizó un análisis DRX para identificar la composición del
 1128 fotocatalizador y la fase cristalina en la que se encontraba, pudiendo ser fase anatasa la
 1129 cual se activa al ser irradiada con luz UV, y la fase rutilo la cual se activa a por luz visible.



1130

1131 *Figura 26 Resultados del análisis difracción de rayos X del TiO₂*

1132 El difractograma de rayos X presenta picos de difracción bien definidos localizados en 2θ
1133 $\approx 25.3^\circ$, 37.8° , 48.0° , 53.9° , 55.1° y 62.7° , los cuales corresponden a los planos
1134 cristalográficos (101), (004), (200), (105), (211) y (204) característicos de la fase anatasa
1135 del dióxido de titanio (TiO₂). El pico de mayor intensidad se observa a 25.3° , asociado al
1136 plano (101), considerado la reflexión principal de esta fase cristalina. La ausencia de
1137 señales significativas en 27.4° indica que la contribución de la fase rutilo es despreciable
1138 o inexistente. Asimismo, la elevada intensidad y definición de los picos observados
1139 sugieren un alto grado de cristalinidad y una baja fracción amorfa. Los resultados
1140 obtenidos permiten concluir que la muestra analizada está constituida predominantemente
1141 por TiO₂ en fase anatasa, con una estructura cristalina bien desarrollada y sin evidencia
1142 significativa de fases secundarias.

1143 También se realizó un análisis de fisisorción de N₂ para conocer sus propiedades
1144 adsorptivas, las cuales se muestran resumidas en la tabla 8.

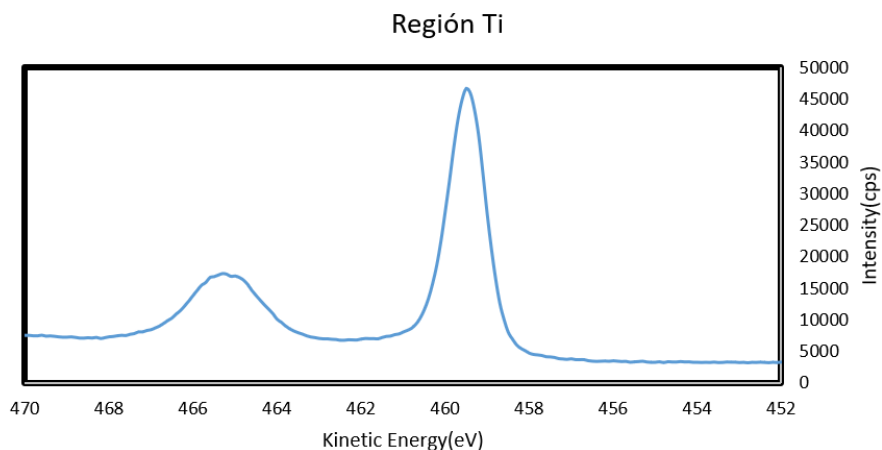
1145 *Tabla 8 Resumen de los resultados del análisis de fisisorción de N₂.*

Propiedad	Valor	Unidades
Área superficial BET	30.83	m ² /g
Volumen total de poro	0.02347	cm ³ /g
Diámetro promedio de poro	2.01	Nm
Constante BET (C)	65.35	
Coefficiente de correlación BET	0.9948	

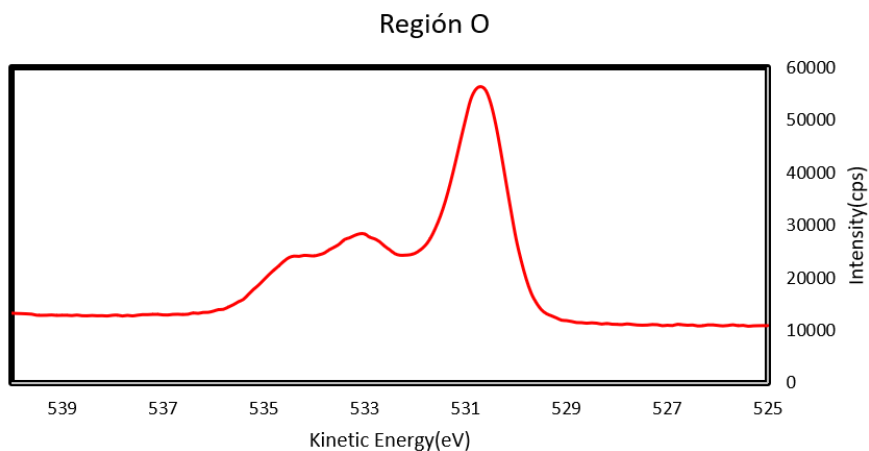
1146

1147 El análisis de fisisorción de N₂ mostró que el TiO₂ posee un área superficial BET de 30.83
1148 m²/g y un volumen total de poro de 0.02347 cm³/g, indicando una superficie
1149 moderadamente desarrollada y una estructura porosa relativamente compacta. El diámetro
1150 promedio de poro de 2.01 nm sitúa al material en la transición entre las regiones
1151 microporosa y mesoporosa, favoreciendo la adsorción y difusión de contaminantes hacia
1152 los sitios activos. Además, la constante BET (C = 65.35) evidencia una buena interacción
1153 entre el nitrógeno y la superficie del sólido, mientras que el elevado coeficiente de
1154 correlación ($R^2 = 0.9948$) confirma la confiabilidad de los parámetros obtenidos. En
1155 conjunto, estas características texturales resultan adecuadas para aplicaciones
1156 fotocatalíticas y procesos de degradación de contaminantes en fase acuosa.

1157 Después del análisis de fisisorción se realizó un análisis XPS el cual se puede observar en
1158 la figura 27.



(a)

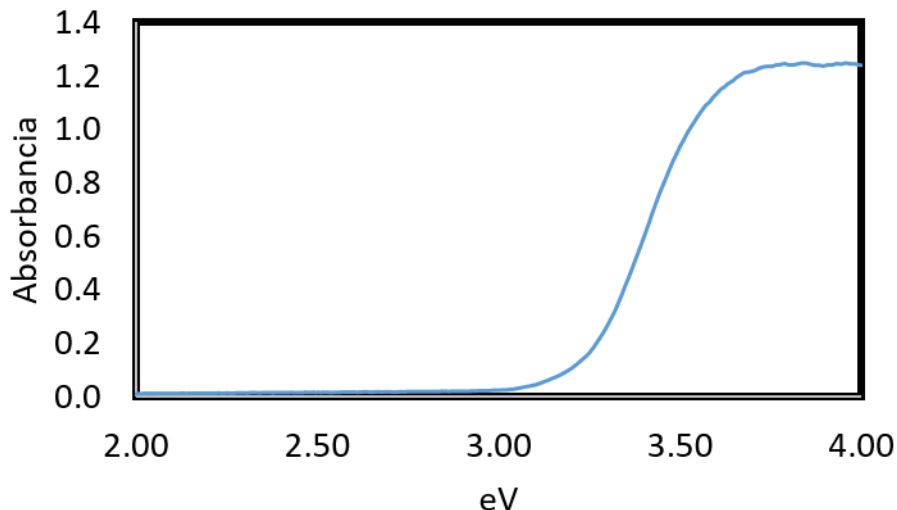


(b)

Figura 27 Análisis XPS del dióxido de titanio, donde podemos observar en la figura (a) la región del Ti y en la figura (b) la región del O.

El análisis XPS confirmó la presencia de dióxido de titanio en la superficie de la muestra mediante la identificación de las señales características Ti 2p y O 1s. La región Ti 2p presentó un doblete localizado aproximadamente a 459 y 465 eV, correspondiente a las contribuciones Ti 2p_{3/2} y Ti 2p_{1/2} propias del estado de oxidación Ti⁴⁺ característico del TiO₂. La ausencia de señales atribuibles a Ti metálico o Ti³⁺ indica una superficie

1170 altamente oxidada y una baja concentración de defectos asociados a vacancias de oxígeno.
1171 La región O 1s mostró un pico principal alrededor de 530.5 eV asociado al oxígeno de red
1172 Ti–O–Ti y una contribución secundaria a mayores energías atribuida a grupos hidroxilo
1173 superficiales. Estos grupos son particularmente importantes para aplicaciones
1174 fotocatalíticas debido a su participación en la generación de radicales hidroxilos durante
1175 la irradiación UV. En conjunto, los resultados evidencian la obtención de un TiO₂
1176 superficialmente limpio, predominantemente estequiométrico, altamente oxidado y
1177 adecuado para aplicaciones fotocatalíticas en la degradación de contaminantes orgánicos.



1178

1179 *Figura 28 Grafica del band gap*

1180 El esquema de bandas obtenido para el TiO₂ muestra una energía de banda prohibida de
1181 aproximadamente 3.2 eV, valor característico de la fase anatasa y consistente con los
1182 resultados de DRUV-Vis. Esta energía corresponde a una longitud de onda de activación
1183 cercana a 388 nm, lo que indica que el material puede ser excitado mediante radiación
1184 UV. Bajo esta irradiación, los electrones son promovidos desde la banda de valencia hacia

la banda de conducción, generando pares electrón-hueco capaces de participar en reacciones de oxidación y reducción.

5.3.2 Adsorción del fotocatalizador

Posterior a la caracterización del fotocatalizador se realizaron pruebas para conocer la cantidad de fenol que es absorbida por el TiO_2 sin la utilización de luz

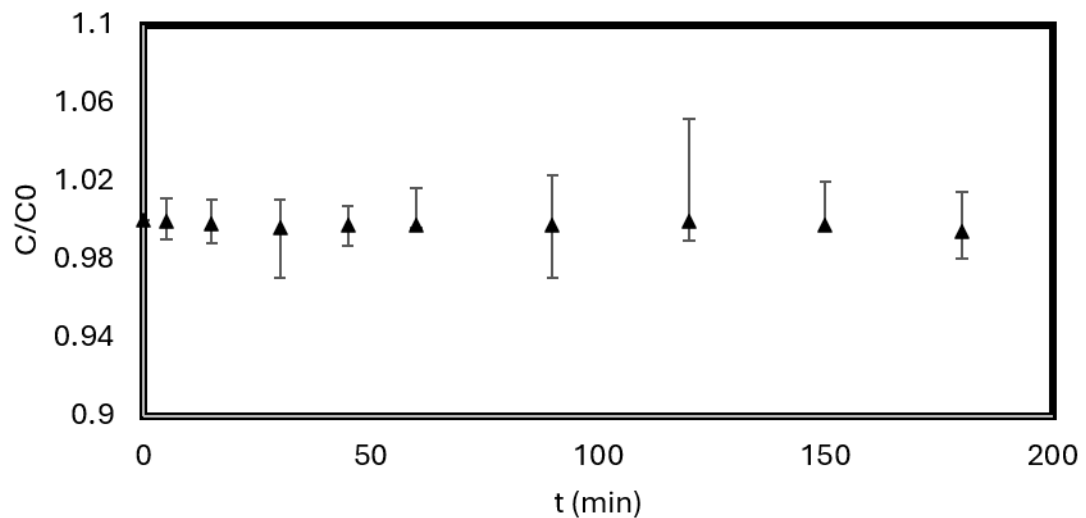
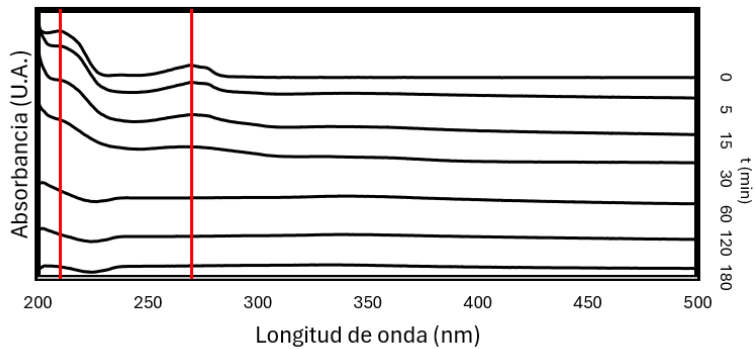


Figura 29 Adsorción del fenol en el fotocatalizador (TiO_2)

Como se puede observar en la figura 28 después de 3 horas no se observaron cambios significativos en la concentración por lo que se puede considerar que el fotocatalizador no adsorbe fracción significativa del fenol y que la degradación se llevará a cabo solo por parte del efecto fotoquímico.

1197 5.3.3 Evolución del espectro de emisión ante la degradación del fenol por fotocatalisis

6 lámparas

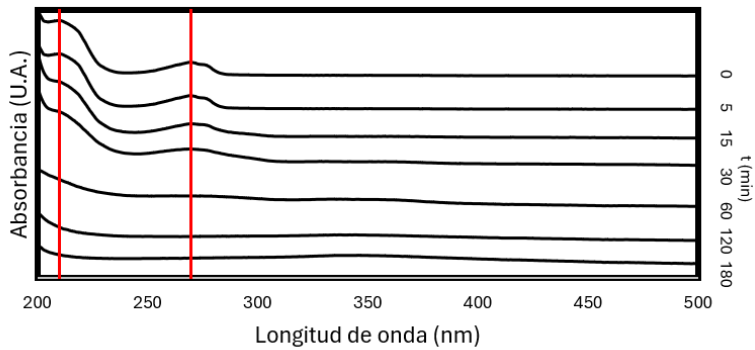


1198

1199

(a)

3 lámparas

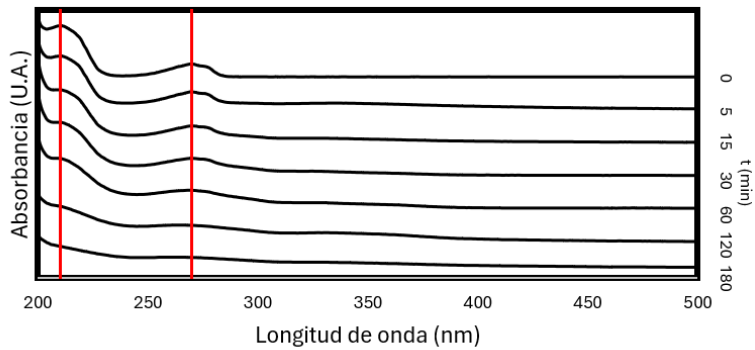


1200

1201

(b)

1 lámpara



1202

1203

(c)

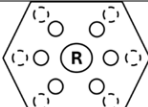
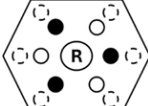
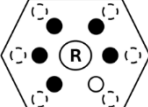
Figura 30 Evolución del espectro a (a) 6 lámparas, (b) 3 lámparas y (c) 1 lámpara para el sistema heterogéneo

A diferencia de lo observado en los espectros de fotólisis, en la figura 29, se observa que después de 60 minutos tanto con 6 como con 3 lámparas ya no es apreciable el pico característico de 270 nm, lo que indica que posiblemente el proceso mediante fotocátalisis se llevó a cabo de forma más rápida, se observa incluso que en el espectro de una lámpara después de 3 horas es apreciable una caída en la absorbancia de la muestra en contraparte con el espectro del proceso fotocatalítico de la figura 15.

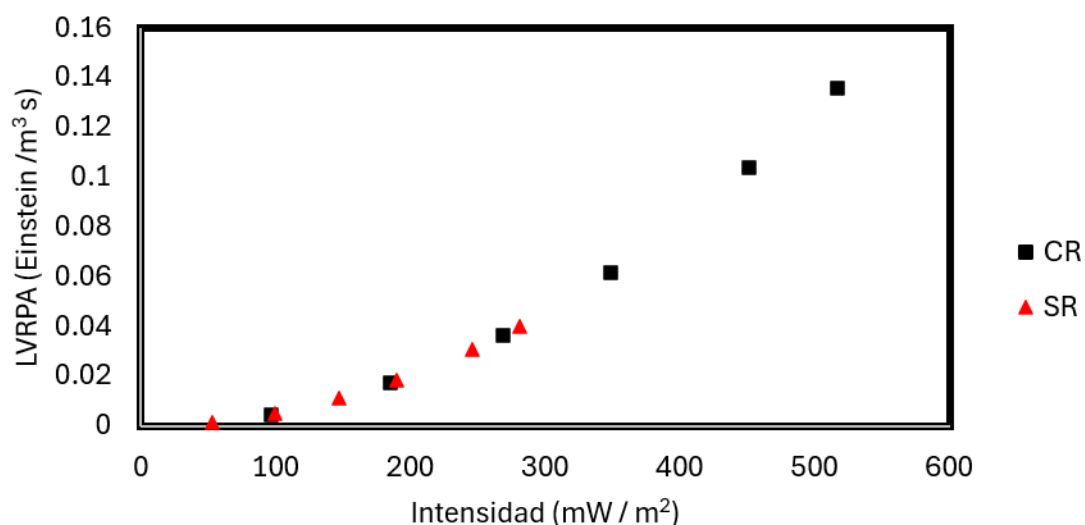
Posterior mente se evaluó la cantidad idónea de fotocatalizador para realizar los experimentos.

5.3.4 Resumen de resultados cinéticos de degradación por fotólisis

Tabla 9 Resumen de resultados con fotólisis con las lámparas

Número de lámparas	Arreglo	I_{CR} mW/m^2	%Deg _{CR,90}	k'_{CR}	I_{SR} mW/m^2	%Deg _{SR,90}	k'_{SR}
6		516	95.13	2.78	271	1.5	89.12
3		238	85.89	1.98	138	1.3	51.70
1		96	54.08	1.93	38	1.1	19.89

1218 5.3.5 Cálculo de la tasa de absorción volumétrica de fotones



1219

1220 *Figura 31 Tasa volumétrica local de absorción de fotones en fotocatalisis*

1221 De los datos de absorbancia de luz obtenidos a partir de los espectros se calculó, al igual
 1222 que en la sección de fotólisis, la LVRPA para fotocatalisis utilizando la ecuación 7. Los
 1223 resultados muestran una tendencia similar a la observada previamente, donde el uso de
 1224 reflectores incrementa aproximadamente al doble la cantidad de fotones absorbidos por el
 1225 sistema. Asimismo, los valores obtenidos son considerablemente mayores que los
 1226 registrados durante la fotólisis, debido a la presencia de dióxido de titanio en suspensión
 1227 acuosa, el cual presenta una elevada capacidad de absorción de radiación y favorece el
 1228 aprovechamiento de la energía luminosa incidente. Esto indica un aumento de la
 1229 irradiancia interna del reactor y, en consecuencia, un posible incremento en la velocidad
 1230 de degradación del contaminante.

1231 Al comparar estos resultados con los reportados por Domínguez-Arvizu et al. para
 1232 suspensiones de NiFe_2O_4 irradiadas con luz visible, se observa que los valores de LVRPA
 1233 obtenidos en este trabajo, con máximos cercanos a $0.14 \text{ Einstein} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$, se encuentran

dentro del mismo orden de magnitud que los reportados por dichos autores, quienes obtuvieron valores comprendidos entre 2.22×10^{-4} y $1.57 \text{ Einstein} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$. Aunque los valores máximos calculados para el sistema con TiO_2 son aproximadamente un orden de magnitud inferiores al máximo reportado para NiFe_2O_4 , ambos estudios evidencian que la distribución y absorción de la radiación dentro del reactor constituyen factores determinantes en el desempeño fotocatalítico. Adicionalmente, los resultados obtenidos sugieren que el empleo de reflectores representa una estrategia efectiva para incrementar el aprovechamiento de los fotones incidentes y acercar el comportamiento radiativo del sistema a los valores reportados en la literatura para reactores fotocatalíticos optimizados.

5.3.6 Dosis del fotocatalizador

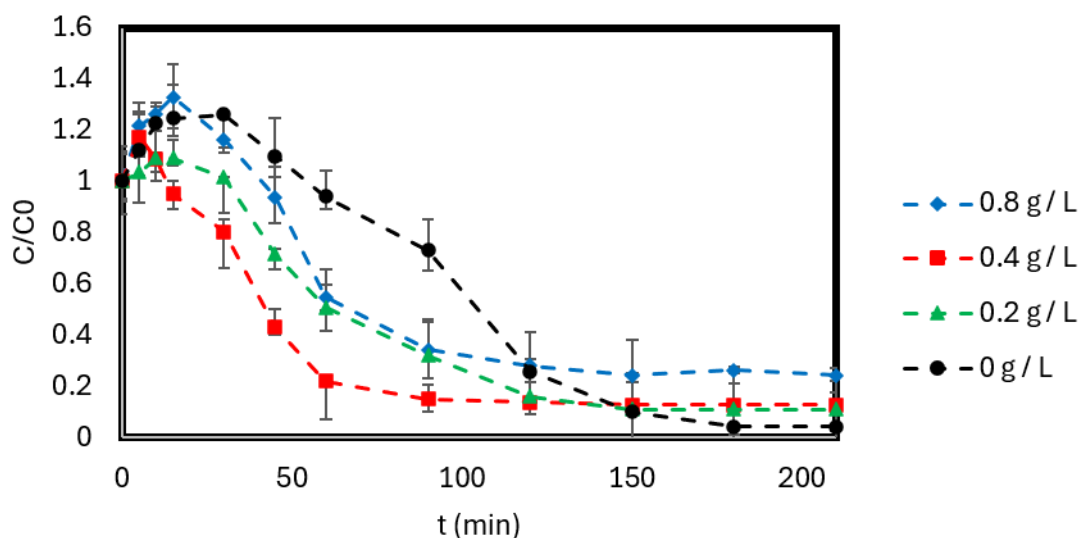
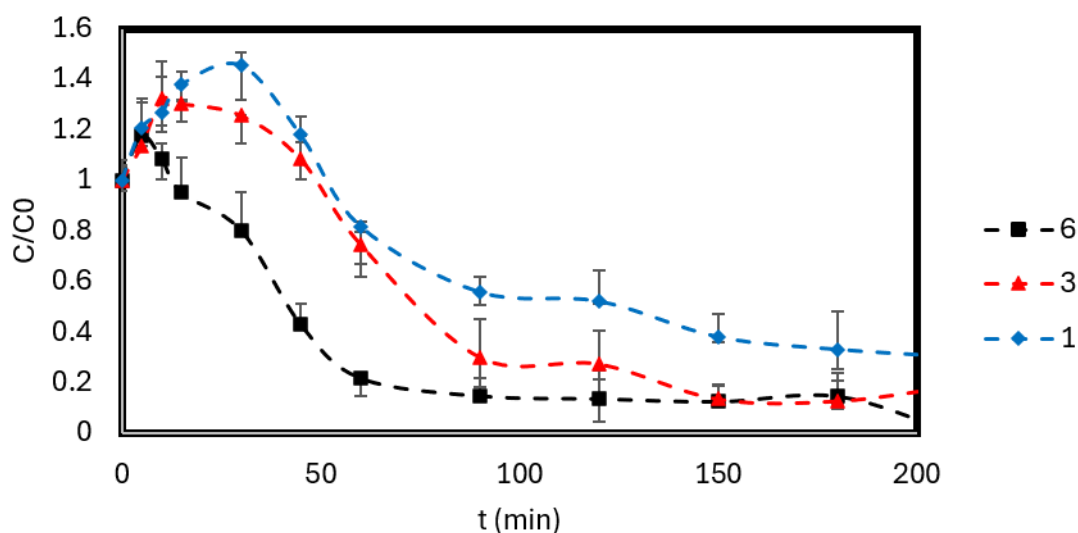


Figura 32 Influencia de la concentración de fotocatalizador en la tasa de degradación fotoquímica del fenol

Se puede observar en la figura 30 que conforme aumentamos la dosis de fotocatalizador aumentamos también la velocidad de degradación del fenol, sin embargo, después de 0.4

1249 g/L de TiO_2 dejamos de ver este aumento de velocidad y por el contrario se observa que
1250 ahora tarda más de degradar con 0.8 g/L, esto probablemente se debe a una
1251 sobresaturación de fotocatalizador, lo cual provoca que las mismas partículas de TiO_2
1252 obstruyan el paso de la luz evitando que todo el TiO_2 presente en la solución se active.

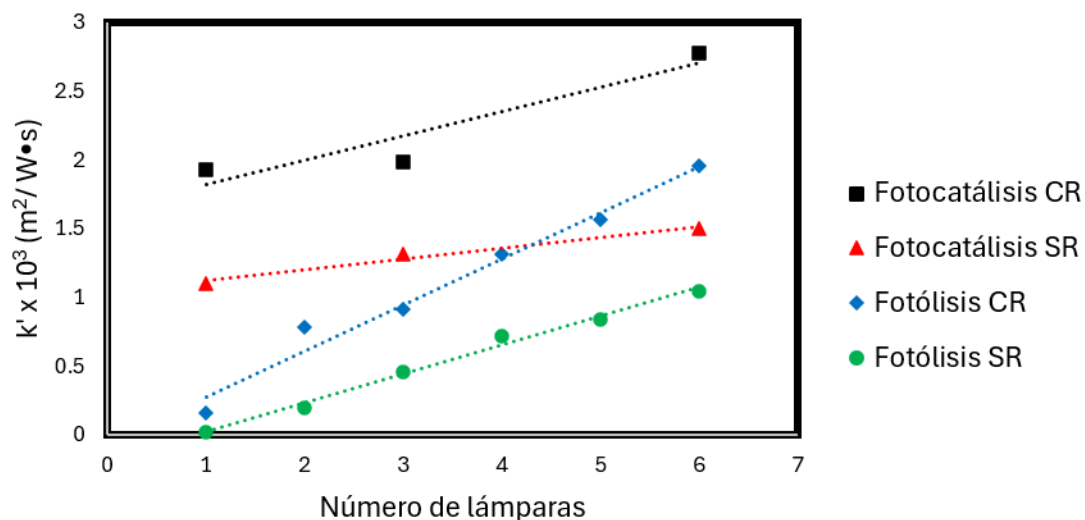
1253 5.3.7 Cinética de degradación



1254

1255 *Figura 33 Influencia del número de lámparas en la tasa de reacción fotocatalítica*

1256 Finalmente, la velocidad de degradación por fotocatálisis con diferente número de
1257 lámparas y que los tiempos de degradación al contrario que con fotólisis, no difieren
1258 demasiado y consiguen es estancamiento antes que, en fotólisis, sin embargo, que dicho
1259 estancamiento está un poco por encima de los resultados con fotólisis, esto podría deberse
1260 a residuos del propio fotocatalizador en la muestra, los cuales absorben parte de la propia
1261 luz.

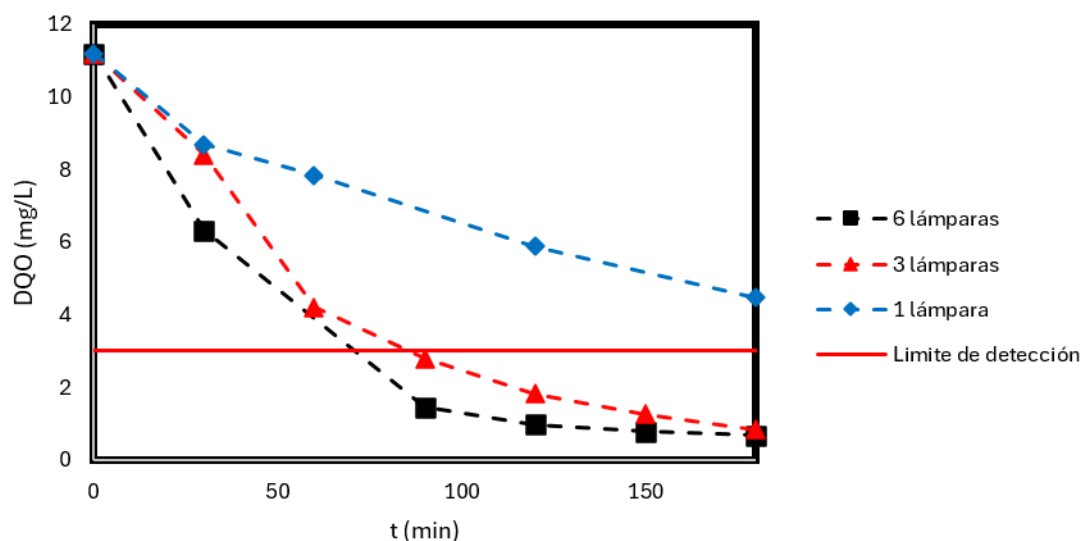


1262

1263 *Figura 34 Influencia del número de lámparas en la tasa de degradación fotocatalítica*
 1264 *utilizando el modelo de pseudo primer orden.*

1265 Finalmente, se observa en la figura 32 los coeficientes cinéticos a diferente número de
 1266 lámparas por fotocátalisis y por fotólisis, observamos que el uso de un fotocatalizador
 1267 influye en mayor medida al valor del coeficiente cinético que el número de lámparas pues
 1268 incluso al no utilizar reflectores y usar solo una lámpara los experimentos con fotocátalisis
 1269 mostraron tasas de remoción superiores a la de 4 con reflectores con fotólisis, cabe resaltar
 1270 que el porcentaje de desviación estándar de estos coeficientes calculadas fue inferior al
 1271 5%, justificando así el uso del pseudo primer orden como modelo base para la cinética del
 1272 reactor.

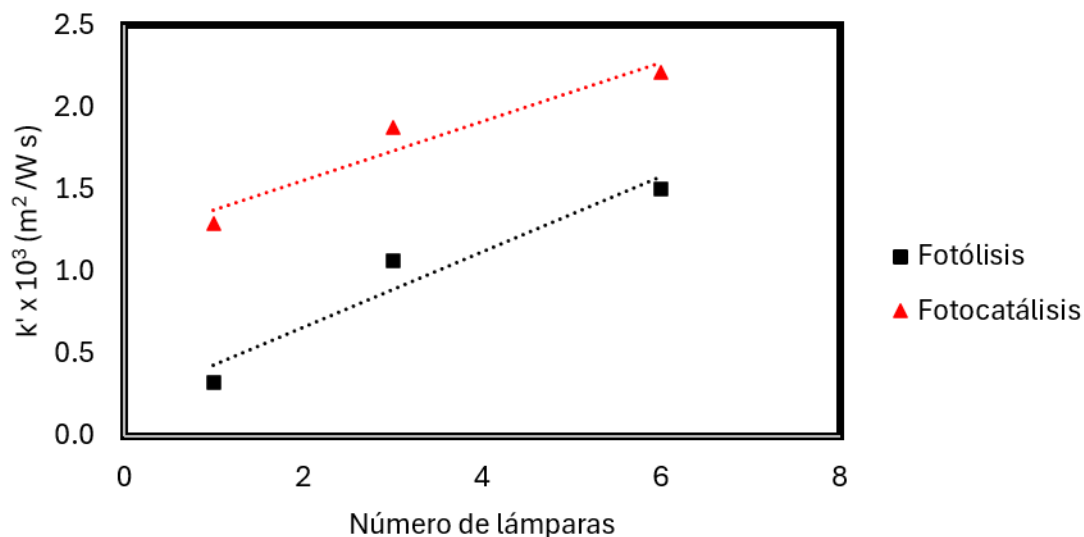
1273 5.3.8 Resultados del análisis de DQO para fotólisis



1274

1275 *Figura 35 Análisis de DQO para los experimentos con fotólisis utilizando reflectores (solo*
 1276 *confiable hasta 3 mg/L)*

1277 Al igual que para el proceso por fotólisis se estudió la velocidad de degradación, pero esta
 1278 vez siguiendo la caída de la concentración por análisis de DQO para evaluar la remoción
 1279 de todos los contaminantes orgánicos, se observa que las concentraciones cayeron más
 1280 rápido que para fotólisis, aunque cabe resaltar que, a diferencia del análisis por
 1281 espectrofotometría, no se observa un gran cambio en las cinéticas al comparlas con las
 1282 de fotólisis.



1283

1284 *Figura 36 Influencia del número de lámparas en la tasa de degradación fotocatalítica*
 1285 *utilizando el modelo de pseudo primer orden midiendo mediante el análisis de DQO*

1286 Finalmente se evaluó utilizando el modelo de pseudo primer orden el coeficiente cinético
 1287 aparente de dichas cinéticas, se puede apreciar que nuevamente los coeficientes cinéticos
 1288 de la fotocatalisis están por encima de las de la fotólisis,

1289 5.4 Propuesta de diseño para un reactor

1290 Finalmente, con los resultados experimentales y con la propuesta de modelo, se procedió
 1291 a hacer una propuesta de ecuación de diseño para un reactor fotoquímico,

1292 5.4.1 Modelo cinético

1293 Primeramente, hablaremos del modelo cinético para para calcular la tasa de reacción del
 1294 reactor, para la cual se utilizó el modelo de pseudo primer orden para ambos casos

$$-r_A = k' C_A \quad 17$$

1295

1296 Sin embargo, este modelo contempla en su coeficiente cinético aparente muchos otros
 1297 factores como la contribución por la intensidad radiativa fuera del sistema, la intensidad
 1298 absorbida dentro del sistema, y el rendimiento cuántico del sistema homogéneo

$$-r_A = \phi k C_A I_{IR} I_{OR} \quad 18$$

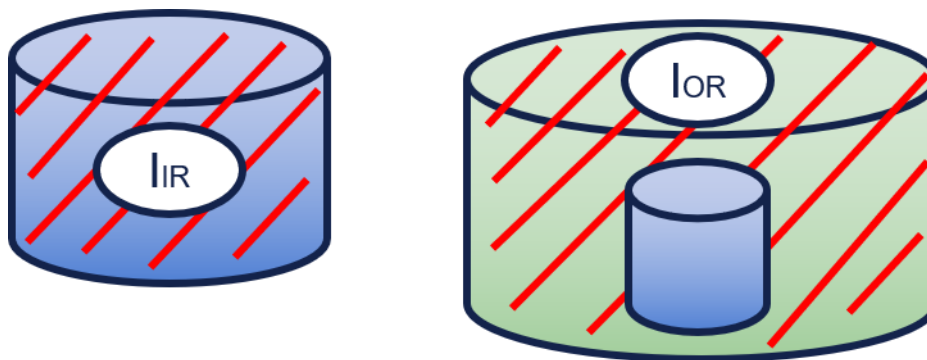
1299

1300 Para el sistema heterogéneo será necesario también contemplar las variables de
 1301 concentración de catalizador, por lo que se agrega este factor a la ecuación

$$-r_A = \phi k C_A C_{cat} I_{IR} I_{OR} \quad 19$$

1302

1303 Como podemos observar en la ecuación 19, trabajaremos contemplando 2 regiones de
 1304 intensidad debido a la utilización de un reactor de irradiancia externa, estas 2 regiones se
 1305 muestran en la figura 37



1306

1307 *Figura 37 Regiones evaluadas de intensidad*

1308 Donde el cálculo de la intensidad dentro I_{IR} del reactor se trabajará utilizando un modelo
 1309 ya conocido, el cálculo de la tasa de absorbanza de fotones LVRPA, de la ecuación 7,
 1310 mientras que el cálculo de la intensidad fuera del reactor I_{OR} se llevó a cabo utilizando la
 1311 ecuación propuesta, la ecuación 14, de tal forma que al sustituirlas en las leyes de
 1312 velocidad darán como resultado la ecuación 20 para el sistema homogéneo

$$-r_A = k \frac{\varphi_{mf} n P}{2\pi h_{altura} r_{LR}} \frac{\Phi}{h_p v} C_A \int \kappa_\lambda I_\lambda d\lambda \quad 20$$

1313 Y la ecuación 21 para el sistema heterogéneo.

$$-r_A = k \frac{\varphi_{mf} n P}{2\pi h_{altura} r_{LR}} \frac{\Phi}{h_p v} \frac{W_{cat}}{V_R} C_A \int \kappa_\lambda I_\lambda d\lambda \quad 21$$

1314 5.4.2 Modelado del reactor

1315 Para el modelado del reactor partimos del balance de materia dentro del reactor batch

$$1316 \quad \text{Entrada} - \text{Salida} + \text{Generación} = \text{Acumulación}$$

1317 Puesto que el reactor batch es un reactor por lotes que no presenta entradas ni salidas el

1318 balance termina de la siguiente forma:

$$1319 \quad \text{Entrada} = 0$$

$$1320 \quad \text{Salida} = 0$$

$$1321 \quad \text{Generación} = \text{Acumulación}$$

1322 De esto se puede intuir que el cambio en los moles formados con respecto al tiempo es

1323 igual a la tasa de reacción multiplicada por el volumen del reactor como se muestra en la

1324 ecuación 22:

$$\frac{dN_A}{dt} = r_A V \quad 22$$

1325 Donde:

1326 $N_A = \text{moles de } A$

1327 $r_A = \text{velocidad de reacción de } A$

1328 $V = \text{volumen del reactor}$

1329 Sustituimos los moles por la concentración de la siguiente forma:

$$N_A = C_A V \quad 23$$

1330 De tal forma que la ecuación # resulta en la ecuación #

$$\frac{d(C_A V)}{dt} = r_A V \quad 24$$

$$\frac{dC_A}{dt} = r_A \quad 25$$

1331 La ecuación 25 es una ecuación diferencial la cual debe ser resuelta mediante una
1332 integración:

$$t = \int_{C_A}^{C_{A0}} \frac{dC_A}{-r_A} \quad 26$$

1333 Donde sustituimos el valor de la concentración por la fracción de conversión
1334

$$X_A = \frac{C_{A0} - C_A}{C_{A0}} \quad 27$$

$$C_A = C_{A0}(1 - X_A) \quad 28$$

1335

1336 Dando como resultado la ecuación 29

$$t = C_{A0} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{-r_A} \quad 29$$

1337

1338 Para resolver esta ecuación de diseño es necesario evaluar el valor de la tasa de reacción
1339 de tal forma que sustituimos la $-r_A$ por la ecuación para el modelo cinético propuesto que
1340 mejor se adecue al sistema estudiado, sea homogénea la ecuación 20 o heterogénea con la
1341 ecuación 21.

1342 5.4.3 Modelo para sistema homogéneo

1343 Para el sistema homogéneo utilizaremos la ecuación 20

$$-r_A = k \frac{\varphi_{mf} n P}{2\pi h_{altura} r_{LR}} \frac{\Phi}{h_p v} C_A \int \kappa_\lambda I_\lambda d\lambda \quad 20$$

1344

1345 Que al sustituirla en la ecuación de diseño del reactor batch se obtiene:

$$t = C_{A0} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{-r_A} \quad 26$$

$$t = C_{A0} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{\frac{\varphi_{mf} n P}{2\pi h_{altura} r_{LR}} \frac{\Phi k}{h_p v} (1 - X_A) C_{A0} LVRPA} \quad 30$$

$$t = \frac{1}{k} \frac{2\pi h_{altura} r}{\varphi P n} \frac{\Phi h_p v}{LVRPA} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{(1 - X_A)} \quad 31$$

1346

1347 Una vez obtenida la ecuación de diseño integramos

$$t = -\frac{1}{k} \frac{2\pi h_{altura} r_{LR}}{\varphi_{mf} P n} \frac{\Phi h v}{LVRPA} \ln(1 - X_A) \quad 32$$

1348 Finalmente despejamos el valor de la fracción de conversión

$$kt \frac{\varphi_{mf} P n}{2\pi h_{altura} r_{LR}} \frac{LVRPA}{\Phi h v} = -\ln(1 - X_A) \quad 33$$

$$X_A = 1 - e^{-kt \frac{\varphi_{mf} P n}{2\pi h_{altura} r_{LR}} \frac{LVRPA}{\Phi h v}} \quad 34$$

1349

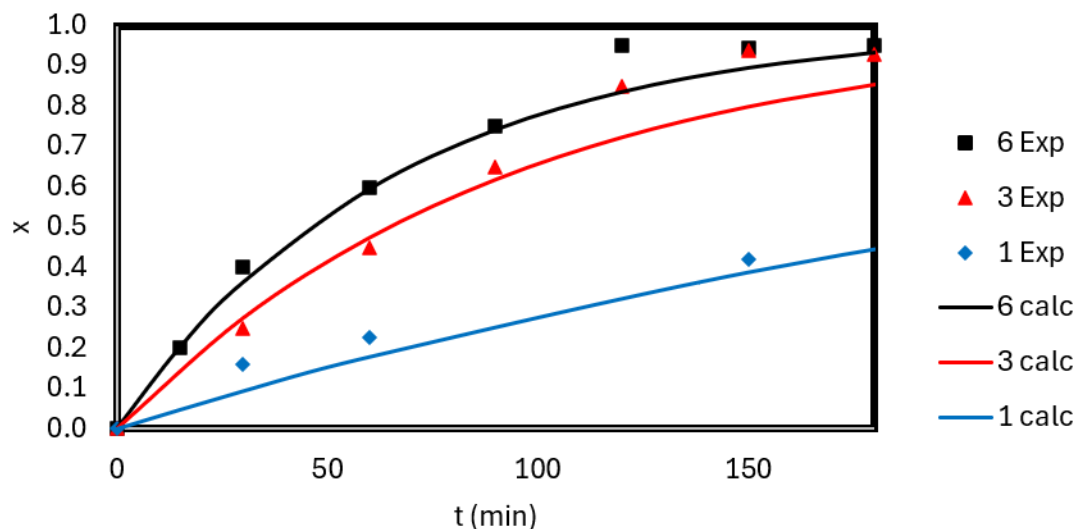
1350 Y con la ecuación resultante podemos trabajar en el cálculo de los perfiles de degradación

1351 del reactor al trabajar con fotólisis y comparar los resultados con los valores obtenidos

1352 experimentalmente.

1353 En la figura 34 se muestran los resultados obtenidos para fotólisis comparados con el valor

1354 experimental.



1355

1356 *Figura 38 Perfiles de degradación por fotólisis, experimentales vs calculados.*

1357 En la Figura 34 se observa que el modelo reproduce adecuadamente la evolución temporal
 1358 de la conversión para las tres configuraciones evaluadas (1, 3 y 6 lámparas). Los datos
 1359 muestran un incremento progresivo de la degradación conforme avanza el tiempo de
 1360 reacción, así como un aumento de la conversión al incrementar el número de lámparas, tal
 1361 y como se confirmó en la se secciones de resultados anteriores.

1362 Las desviaciones promedio obtenidas entre los valores experimentales y calculados fueron
 1363 de 3.64 %, 4.03 % y 5.08 % para 6, 3 y 1 lámpara, respectivamente. Estos resultados
 1364 indican una buena concordancia entre el modelo y los datos experimentales, ya que las
 1365 diferencias permanecen por debajo del 10 % en todos los casos. Asimismo, se observa que
 1366 la precisión del modelo disminuye ligeramente al reducir el número de lámparas, lo cual
 1367 puede atribuirse a que, bajo condiciones de menor intensidad radiativa, pequeñas
 1368 variaciones experimentales tienen un efecto más significativo sobre la conversión

1369 observada. No obstante, el modelo logra describir correctamente la tendencia general y la
1370 magnitud de la degradación durante todo el periodo de reacción.

1371 5.4.4 Modelo para sistema heterogéneo

1372 Para el sistema heterogéneo se realiza una metodología similar a la del sistema
1373 homogéneo, esta vez utilizaremos la ecuación 21

$$-r_A = k \frac{\varphi_{mf} n P}{2\pi h_{altura} r_{LR}} \frac{\phi}{h_p v} \frac{W_{cat}}{V_R} C_A \int \kappa_\lambda I_\lambda d\lambda \quad 21$$

1374 Que al sustituirla en la ecuación de diseño del reactor batch se obtiene:

$$t = C_{A0} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{-r_A} \quad 26$$

$$t = C_{A0} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{\frac{\varphi_{mf} n P}{2\pi h_{altura} r_{LR}} \frac{\phi k}{h_p v} \frac{W_{cat}}{V_R} (1 - X_A) C_{A0} LVRPA} \quad 35$$

$$t = \frac{1}{k} \frac{2\pi h_{altura} r}{\varphi P n} \frac{\phi h_p v}{LVRPA} \frac{V_R}{W_{cat}} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{(1 - X_A)} \quad 36$$

1375 Una vez obtenida la ecuación de diseño integramos

$$t = -\frac{1}{k} \frac{2\pi h_{altura} r_{LR}}{\varphi_{mf} P n} \frac{\phi h v}{LVRPA} \frac{V_R}{W_{cat}} \ln(1 - X_A) \quad 37$$

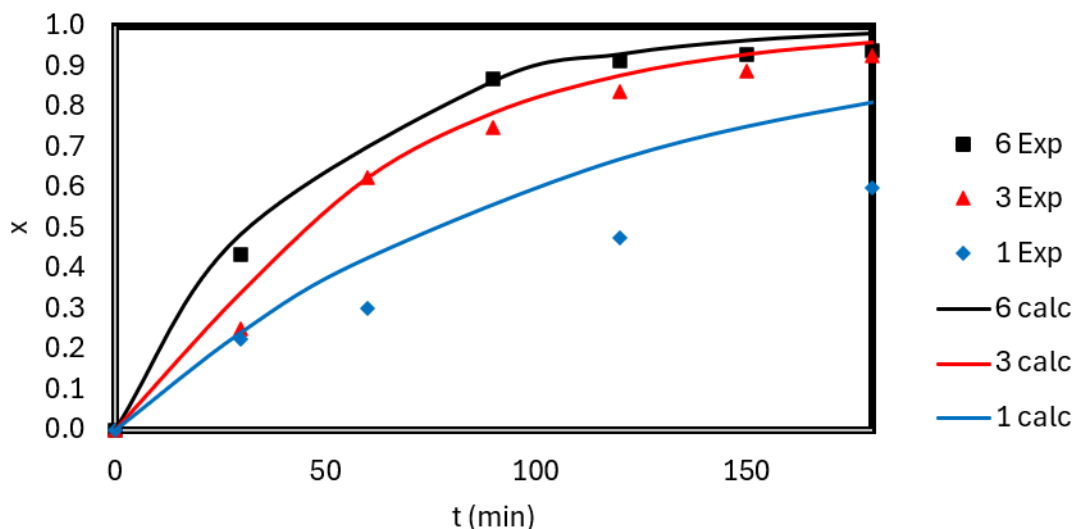
1376 Finalmente despejamos el valor de la fracción de conversión y obtenemos una ecuación
1377 de diseño que permitirá proponer valores de conversión para predecir los resultados
1378 experimentales

$$kt \frac{\varphi_{mf} P n}{2\pi h_{altura} r_{LR}} \frac{LVRPA}{\phi h v} \frac{W_{cat}}{V_R} = -\ln(1 - X_A) \quad 38$$

$$X_A = 1 - e^{-kt \frac{\varphi_{mf} P n}{2\pi h_{altura} r_{LR}} \frac{LVRPA}{\phi h v} \frac{W_{cat}}{V_R}} \quad 39$$

1379

1380 Esta ecuación contempla también la concentración del catalizador en el sistema, podemos
 1381 observar los resultados obtenidos en la figura 35



1382

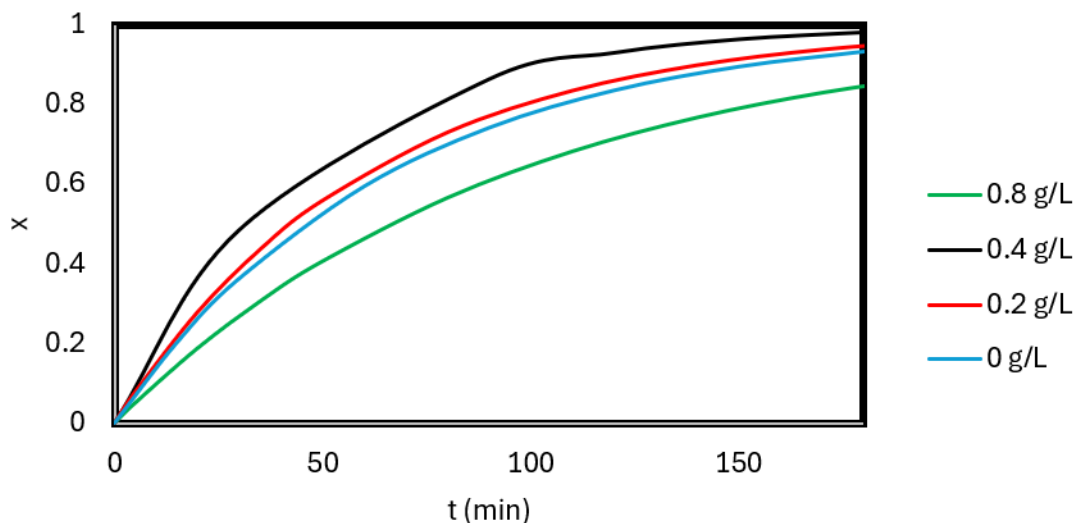
1383 *Figura 39 Perfiles de degradación por fotólisis, experimentales vs calculados*

1384 La Figura 35 muestra la comparación entre los perfiles experimentales y calculados para
 1385 el proceso fotocatalítico. De manera similar al caso de la fotólisis, el modelo reproduce
 1386 satisfactoriamente la evolución temporal de la conversión y la influencia del número de
 1387 lámparas sobre el proceso de degradación. Se aprecia que la presencia de TiO_2 incrementa
 1388 significativamente la conversión respecto a la obtenida por fotólisis, particularmente en
 1389 las configuraciones de baja intensidad radiativa, debido a la generación de especies
 1390 reactivas capaces de promover la oxidación del contaminante.

1391 Las desviaciones promedio obtenidas fueron de 2.68 %, 3.32 % y 4.93 % para 6, 3 y 1
 1392 lámpara, respectivamente. Estos valores son ligeramente inferiores a los obtenidos para la
 1393 fotólisis, lo que indica una mejor capacidad predictiva del modelo bajo condiciones
 1394 fotocatalíticas. La cercanía entre las curvas experimentales y calculadas demuestra que las
 1395 ecuaciones empleadas describen adecuadamente los fenómenos dominantes del sistema,

1396 permitiendo predecir con precisión el comportamiento de la degradación para diferentes
1397 niveles de irradiación.

1398 En términos generales, los resultados obtenidos validan la capacidad del modelo para
1399 representar tanto la fotólisis como la fotocatalísis del fenol, con errores relativamente
1400 bajos y una adecuada reproducción de las tendencias experimentales observadas.



1401

1402 *Figura 40 Perfiles de degradación por fotólisis, experimentales vs calculados*

1403 A partir del modelo propuesto para el proceso fotocatalítico, se evaluó el efecto de la
1404 concentración del fotocatalizador mediante la simulación de los perfiles de degradación
1405 esperados en el reactor al emplear diferentes cantidades de dióxido de titanio. Los perfiles
1406 predichos exhibieron una desviación estándar global del 6.75% en comparación con los
1407 datos experimentales, lo cual valida la capacidad predictiva del modelo.

1408

6. Conclusiones

1409 Tras el desarrollo experimental y el análisis de los procesos de degradación del fenol en
1410 el fotorreactor, se obtuvieron las siguientes conclusiones:

- 1411 • La caracterización de las lámparas demostró que únicamente la radiación UV
1412 posee la energía necesaria, en particular la correspondiente a la banda UVC
1413 cercana a 250 nm, para romper los enlaces químicos del fenol (C-C, C-O, O-H,
1414 entre otros). Las lámparas de luz visible resultaron ineficaces para la fotólisis
1415 directa debido a su baja aportación energética.
- 1416 • El uso de reflectores duplicó la intensidad de la irradiancia recibida, y la selección
1417 de un reactor de cuarzo fue crítica, ya que este material solo absorbe entre el 2% y
1418 9% de la radiación, frente a la pérdida del 30% que presentó el Pyrex en el rango
1419 UV.
- 1420 • Se logró una degradación del 98% del fenol en 90 minutos utilizando seis lámparas
1421 UV. Se determinó que la velocidad de reacción sigue una cinética de pseudo-
1422 primer orden, la cual es altamente sensible al número de lámparas y a la distancia
1423 de estas respecto al reactor (posición delantera frente a trasera).
- 1424 • Mediante el análisis de DQO, se confirmó que el proceso de fotólisis con seis
1425 lámparas no solo transforma la molécula, sino que permite inferir una
1426 mineralización muy avanzada del contaminante en un tiempo de 90 minutos,
1427 reduciendo la carga orgánica a niveles inferiores a 3 mg/L de O₂.
- 1428 • La adición de TiO₂ como fotocatalizador incrementó los coeficientes cinéticos de
1429 degradación en comparación con la fotólisis simple. Se estableció una dosis óptima
1430 de 0.4 g/L; concentraciones superiores (0.8 g/L) provocaron un efecto de

1431 apantallamiento, lo que redujo la eficiencia del proceso al obstruir el paso de la
1432 luz.

- 1433 • La fotocatalisis demostró ser menos dependiente del número de lámparas
1434 encendidas que la fotólisis, sugiriendo que la presencia del catalizador optimiza el
1435 aprovechamiento de los fotones incluso a menores intensidades de irradiación, lo
1436 que representa una ventaja para el ahorro energético del sistema.
- 1437 • El modelo semiempírico propuesto interpretó coherentemente los resultados de la
1438 intensidad lumínica bajo las condiciones estudiadas de los experimentos de
1439 degradación en el reactor de geometría hexagonal.
- 1440 • El acoplamiento del modelo radiativo propuesto al modelo cinético permite valorar
1441 la contribución de la intensidad en función de las variables de diseño a través de
1442 un cálculo simplificado de las posibles pérdidas o contribuciones de la absorbancia
1443 y reflexión de la luz en las paredes y las variables que aporta la geometría del
1444 reactor hexagonal.
- 1445 • Los sistemas fotolítico y fotocatalítico heterogéneo analizados fueron
1446 interpretados adecuadamente por las leyes de velocidad propuestas con
1447 porcentajes de desviación globales del 4.25% y 3.64%, respectivamente.
- 1448 • La elucidación de una ecuación de diseño del fotorreactor trabajado permite la
1449 simplificación de cálculos necesarios por otros modelos propuestos por otros
1450 autores como el RTE sin sobrepasar el 5% de desviación estándar del resultado
1451 experimental.

- 1452 • Desde la perspectiva de la sustentabilidad este trabajo contribuye en la valoración
1453 de la cantidad de energía requerida para suministrar a un sistema fotoquímico,
1454 proveyendo alternativas de diseño con un menor impacto energético.

1455

7. Bibliografía

1456

[1].K. López-Velázquez, J. L. Guzmán-Mar, H. A. Saldarriaga-Noreña, M. A. Murillo- Tovar, L. Hinojosa-Reyes, and M. Villanueva-Rodríguez, “Occurrence and seasonal distribution of five selected endocrine-disrupting compounds in wastewater treatment plants of the Metropolitan Area of Monterrey, Mexico: The role of water quality parameters,” *Environmental Pollution*, vol. 269, 2021, doi: 10.1016/j.envpol.2020.116223.

1462

[2].Rizzo, L., Lofrano, G., Gago, C., Bredneva, T., Iannece, P., Pazos, M., Krasnogorskaya, N., & Carotenuto, M. (2018). Antibiotic contaminated water treated by photo driven advanced oxidation processes: Ultraviolet/H₂O₂ vs ultraviolet/peracetic acid. *Journal of Cleaner Production*.

1466

[3].Ni, Y., Zhou, C., Xing, M., & Zhou, Y. (2023). Oxidation of emerging organic contaminants by in-situ H₂O₂ Fenton system. *Green Energy & Environment*, 9, 417–434.

1469

[4].Ortega Méndez, J. A., Herrera Melián, J. A., Arana, J., Rodríguez, J. M. D., González Díaz, O., & Pérez Peña, J. (2015). Detoxification of waters contaminated with phenol, formaldehyde and phenol–formaldehyde mixtures using a combination of biological treatments and advanced oxidation techniques. *Applied Catalysis B: Environmental*, 163, 63–73.

1474

[5].Vázquez-Tapia, I., Salazar-Martínez, T., Acosta-Castro, M., Meléndez-Castolo, K. A., Mahlknecht, J., Cervantes-Avilés, P., Capparelli, M. V., & Mora, A. (2022).

1475

1476 *Occurrence of emerging organic contaminants and endocrine disruptors in*
1477 *different water compartments in Mexico – A review.* Chemosphere, 308, 136285.

1478 [6].Dang, T. T. T., Le, S. T. T., Channei, D., Khanitchaidecha, W., & Nakaruk, A.
1479 (2016). Photodegradation mechanisms of phenol in the photocatalytic process.
1480 Research on Chemical Intermediates, 42, 5961–5974.

1481 [7].S.-Y., & Kim, J.-H. (2023). Degradation of phenol by perborate in the presence of
1482 iron-bearing and carbonaceous materials. RSC Advances, 13, 32833–32841.

1483 [8].Nickheslat, A., Amin, M. M., Izanloo, H., Fatehizadeh, A., & Mousavi, S. M.
1484 (2013). Phenol photocatalytic degradation by advanced oxidation process under
1485 ultraviolet radiation using titanium dioxide. Journal of Environmental and Public
1486 Health, 2013, 815310.

1487 [9].Poerschmann, J., & Trommler, U. (2009). Pathways of advanced oxidation of
1488 phenol by Fenton’s reagent—Identification of oxidative coupling intermediates by
1489 extractive acetylation. Journal of Chromatography A, 1216(29), 5570–5579.

1490 [10]. Akbal, F., & Onar, A. N. (2003). Photocatalytic degradation of phenol.
1491 Environmental Monitoring and Assessment, 83, 295–302.

1492 [11]. Mearns, A. J., Reish, D. J., Oshida, P. S., Morrison, A. M., Rempel-Hester,
1493 M. A., Arthur, C., Rutherford, N., & Pryor, R. (2017). *Effects of pollution on*
1494 *marine organisms.* Water Environment Research, 89(10), 1704–1798.

1495 [12]. Medina-Esparza, W. N., Aguilar-Juárez, O., Gómez-Salazar, S., Morán-
1496 Salazar, R., López-Covarrubias, M., Leal-Quezada, L. O., Del Real-Olvera, J., &
1497 Reyes-Gómez, V. M. (2025). *Efficiency of a new biochar made from agave*
1498 *bagasse to remove conventional pollutants and pharmaceutical derivatives.*
1499 Processes, 13(6), 1861.

- 1500 [13]. Robledo Zacarías, V. H., Velázquez Machuca, M. A., Montañez Soto, J.
1501 L., Pimentel Equihua, J. L., Vallejo Cardona, A. A., López Calvillo, M. D., &
1502 Venegas González, J. (2017). *Hidroquímica y contaminantes emergentes en aguas*
1503 *residuales urbano-industriales de Morelia, Michoacán, México*. Revista
1504 Internacional de Contaminación Ambiental, 33(2), 221–235.
- 1505 [14]. Otálvaro-Marín, H. L., Mueses, M. A., Crittenden, J. C., & Machuca-
1506 Martinez, F. (2017). Solar photoreactor design by the photon path length and
1507 optimization of the radiant field in a TiO₂-based CPC reactor. *Chemical*
1508 *Engineering Journal*, 315, 283–295.
- 1509 [15]. Valadés-Pelayo, P. J., Serrano, B., & de Lasa, H. (2015). Photocatalytic
1510 reactor under different external irradiance conditions: Validation of a fully
1511 predictive radiation absorption model. *Chemical Engineering Science*, 126, 42–
1512 54.
- 1513 [16]. Martín-Sómer, M., Pablos, C., van Grieken, R., & Marugán, J. (2017).
1514 Influence of light distribution on the performance of photocatalytic reactors: LED
1515 vs mercury lamps. *Applied Catalysis B: Environmental*, 215, 1–7.
- 1516 [17]. Legrand, J., Artu, A., & Pruvost, J. (2021). A review on photobioreactor
1517 design and modelling for microalgae production. *Reaction Chemistry &*
1518 *Engineering*, 6(7), 1134–1151.
- 1519 [18]. Gusarov, S. (2024). Advances in Computational Methods for Modeling
1520 Photocatalytic Reactions: A Review of Recent Developments. *Materials*, 17(9),
1521 2119.
- 1522 [19]. Montoya, J. F., Peral, J., & Salvador, P. (2013). Comprehensive kinetic and
1523 mechanistic analysis of TiO₂ photocatalytic reactions according to the direct-

indirect model: (I) Theoretical approach. *The Journal of Physical Chemistry C*,
 117(16), 8316–8326.

[20]. Sannino, D., et al. (2013). Mathematical modeling of the photocatalytic
 degradation of pollutants. *Journal of Environmental Chemical Engineering*, 1, 56–
 60.

[21]. Mai, H., Le, T. C., Chen, D., Winkler, D. A., & Caruso, R. A. (2022).
 Machine Learning for electrocatalyst and photocatalyst design and discovery.
Chemical Reviews, 122(16), 13478–13515.

[22]. Das, S., Moon, S., Kaur, R., Sharma, G., Kumar, P., & Štangard, U. L.
 (2024). Artificial neural network modeling of photocatalytic degradation of
 pollutants: a review of photocatalyst, optimum parameters and model topology.
RSC Advances, 14, 16915-16943.

[23]. Mueses, M. A., Colina-Márquez, J., Machuca-Martínez, F., & Li-Puma, G.
 (2021). *Recent advances on modeling of solar heterogeneous photocatalytic
 reactors applied for degradation of pharmaceuticals and emerging organic
 contaminants in water*. Loughborough University Repository.

[24]. Serrano, B., & de Lasa, H. (2019). Photocatalytic degradation of water
 organic pollutants. Kinetic modeling and energy efficiency. *The Canadian Journal
 of Chemical Engineering*, 97(7), 2026-2037.

[25]. Mueses, M. A., Machuca-Martinez, F., & Li Puma, G. (2012). Effective
 quantum yield and reaction rate model for evaluation of photocatalytic degradation
 of water contaminants in heterogeneous pilot-scale solar photoreactors. *Chemical
 Engineering Journal*, 215–216, 937–947.

- 1547 [26]. Becerra-Moreno, D., Machuca-Martínez, F., Maturana, A. Y., Villamizar,
1548 S., Soto-Verjel, J., & Soto-Vergel, Á. (2023). Leachate treatment via TiO₂/UV
1549 heterogeneous photocatalysis: A multiple polynomial regression model.
1550 *Ingeniería e Investigación*, 43(3), e101497.
- 1551 [27]. Manassero, A., Alfano, O. M., & Satuf, M. L. (2021). Degradation of
1552 emerging pollutants by photocatalysis: Radiation modeling and kinetics in packed-
1553 bed reactors. *Water*, 13(17), 2340.
- 1554 [28]. Ritacco, I., Caporaso, L., Farnesi Camellone, M., & Gatta, G. (2024).
1555 Mechanism of the photodegradation of pharmaceutical compounds on TiO₂.
1556 *ChemPhysChem*, 25(5), e202300768.
- 1557 [29]. Yao, Y., Wang, Y., Lu, T., Zhang, J., Zhang, H., Hu, K., ... & Wang, S.
1558 (2024). Photocatalytic degradation of recalcitrant pharmaceuticals in water.
1559 *Applied Catalysis B: Environmental*, 342, 123363.
- 1560 [30]. Xu, C., Xu, F., Chen, X., Li, Z., Luan, Z., Wang, X., Guo, Q., & Yang, X.
1561 (2014). Wavelength-dependent water oxidation on rutile TiO₂(110). *The Journal*
1562 *of Physical Chemistry Letters*, 5(21), 3653–3658.
- 1563 [31]. Saggiaro, E. M., Oliveira, A. S., Pavesi, T., Maia, C. G., Vieira Ferreira, L.
1564 F., & Moreira, J. C. (2011). Use of titanium dioxide photocatalysis on the
1565 remediation of model textile wastewaters containing azo dyes. *Molecules*, 16(12),
1566 10370-10386.
- 1567 [32]. Nchikou, C., Loredó-Medrano, J. Á., Hernández-Ramírez, A., Colina-
1568 Marquez, J. Á., Mueses, M. Á., & Li Puma, G. (2024). Novel six flux model two-
1569 dimensional (SFM-2D) approach for evaluation of radiation field in slurry

1570 photocatalytic reactors with rectangular flat slab geometries. *Chemical*
 1571 *Engineering Journal*, 481, 148560.

1572 [33]. Engel, T., & Reid, P. (2007). Introducción a la fisicoquímica:
 1573 Termodinámica (1.^a ed.). Pearson Educación.

1574 [34]. Verderío Junior, S., Scalón, L. W., Avallone, E., & Mioralli, P. C. (2018).
 1575 Numerical validation of viewFactor and FVDOM radiation models of the
 1576 OpenFOAM software. *Ingeniare. Revista chilena de ingeniería*, 26(4), 603-614.

1577 [35]. Abunima, H., Teh, J., & Jabir, H. J. (2019). A new solar radiation model
 1578 for a power system reliability study. *IEEE Access*, 7, 64758-64771.

1579 [36]. Ahmad, M. J., & Tiwari, G. N. (2011). Solar radiation models—A review.
 1580 *International Journal of Energy Research*, 35(4), 271–290.

1581 [37]. Mashhadimoslem, H., Ghaemi, A., & Palacios, A. (2021). Computational
 1582 analysis of thermal radiation features. *Heliyon*, 7(6), e07261.

1583 [38]. Piovani, D., Arcaute, E., Uchoa, G., Wilson, A., & Batty, M. (2018).
 1584 Measuring accessibility through distance dependent exponential functions. *Royal*
 1585 *Society Open Science*, 5(8), 171532.

1586 [39]. Alfano, O. M., & Cassano, A. E. (2009). Scaling-Up of Photoreactors:
 1587 Applications to Advanced Oxidation Processes. *Advances in Chemical*
 1588 *Engineering*, 36, 225-288.

1589 [40]. Litter, M. I. (2009). Treatment of Chromium, Mercury, Lead, Uranium, and
 1590 Arsenic in Water by Heterogeneous Photocatalysis. *Advances in Chemical*
 1591 *Engineering*, 36, 37-68.

- 1592 [41]. Wang, D., et al. (2021). A systematic review on the photocatalysis of
1593 organic contaminants: Reactor design, photocatalysts, and economics. *Water*
1594 *Research*, 202, 117421.
- 1595 [42]. Grčić, I., et al. (2024). Immobilized TiO₂ for solar driven degradation of
1596 enrofloxacin, 17 β -estradiol and 1H-benzotriazole in a falling film plate collector:
1597 Experimental and modeling. *Journal of Hazardous Materials*, 461, 132589.
- 1598 [43]. Khataee, A., et al. (2015). Advanced oxidation processes for
1599 pharmaceuticals and personal care products removal: A review. *Elsevier B.V.*
- 1600 [44]. Rioja, N., et al. (2016). Effect of water matrix nature on photocatalytic
1601 degradation of clofibric acid. *Applied Catalysis B: Environmental*, 180, 330–335.
- 1602 [45]. Zhong, L., Haghighat, F., Blondeau, P., & Kozinski, J. (2003). Modeling
1603 and physical interpretation of photocatalytic oxidation efficiency in indoor air
1604 applications. *Building and Environment*, 38(11), 3395–3399.
- 1605 [46]. Azimian, A., & Jiao, J. (2019). A new solar radiation model for a power
1606 system reliability study. *IEEE Access*, 7, 64758-64771.
- 1607 [47]. Engel, T., & Reid, P. J. (2007). Introducción a la fisicoquímica:
1608 Termodinámica (1.^a ed.). Pearson Educación.
- 1609 [48]. Fogler, H. S. (2008). *Elementos de ingeniería de las reacciones químicas*
1610 (4^a ed.). Pearson Educación.

1611

1612

Apéndices

I. Datos crudos de Intensidad

Tabla 10 Datos de intensidad con diferente número de lámparas, diferente tipo de luz y utilizando diferente vaso de reacción

Luz		UVC						Visible				
Refl		SI			NO			SI			NO	
Rea	Sin	Cuarz	Pyre	Sin	Cuarz	Pyre	Sin	Cuarz	Pyre	Sin	Cuarz	Pyre
c	reactor	o	x	reactor	o	x	reactor	o	x	reactor	o	x
6	516	507	383	267	242	218	402	389	336	240	218	210
5	454	436	338	217	196	180	350	332	316	206	203	179
4	365	338	267	191	157	147	274	249	239	165	148	137
3	267	240	196	135	123	99	234	221	207	131	126	115
2	187	151	134	83	74	65	179	178	169	90	95	90
1	98	89	71	37	34	32	108	93	89	52	50	47
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

1627 II. Datos crudos de Absorbancia

1628 *Tabla 11 Cinéticas de degradación utilizando diferente numero de lámparas con*
1629 *reflectores*

Tiempo (min)	6	5	4	3	2	1
0	1	1	1	1	1	1
2.5	1.06	1.11	1.09	1.08	1.01	1.05
5	1.21	1.25	1.22	1.19	1.10	1.11
10	1.22	1.32	1.27	1.24	1.18	1.18
15	1.19	1.27	1.25	1.26	1.22	1.22
30	0.87	1.07	1.08	1.18	1.21	1.28
45	0.54	0.80	0.87	1.06	1.13	1.27
60	0.27	0.54	0.62	1.04	1.04	1.22
90	0.02	0.13	0.24	0.52	0.78	1.08
120	0.01	0.07	0.10	0.38	0.50	0.91
150	0.02	0.03	0.04	0.19	0.25	0.72
180	0.04	0.01	0.02	0.10	0.13	0.56
210	-	-	-	0.05	0.08	0.39
240	-	-	-	0.02	0.04	0.25
270	-	-	-	0.01	0.01	0.19
300	-	-	-	0.01	0.01	0.13
330	-	-	-	0.01	0.01	0.11

1630

1631

1632

1633

1634

1635

1636

1637 *Tabla 12 Cinéticas de degradación utilizando diferente número de lámparas sin reflectores*

Tiempo (min)	6	5	4	3	2	1
0	1	1	1	1	1	1
2.5	1.04	1.09	1.08	1.06	1.00	1.04
5	1.15	1.21	1.18	1.16	1.09	1.10
10	1.17	1.25	1.21	1.18	1.13	1.13
15	1.19	1.27	1.23	1.22	1.19	1.19
30	0.99	1.09	1.11	1.17	1.19	1.26
45	0.83	0.91	0.91	1.09	1.14	1.28
60	0.69	0.77	0.66	1.06	1.08	1.24
90	0.36	0.43	0.30	0.64	0.95	1.24
120	0.19	0.24	0.16	0.52	0.75	1.24
150	0.10	0.13	0.09	0.40	0.58	1.24
180	0.06	0.10	0.07	0.28	0.47	1.14
210	0.05	0.08	0.06	0.21	0.40	1.00
240	0.04	0.08	0.05	0.14	0.34	0.91
270	-	0.07	0.05	0.12	0.29	0.81
300	-	0.07	0.05	0.10	0.26	0.74
330	-	0.06	0.05	0.08	0.24	0.70

1638

1639 III. Método del trapecio para LVREA

1640 El cálculo del LVRPA se realizó tal y como lo plantea la ecuación 7

$$LVREA = \int \kappa_{\lambda} I_{\lambda} d\lambda \left(\frac{W}{m^3} \right) \quad 8$$

1641 Donde kappa (κ) fue calculada a partir del espectro de absorbancia de fenol para fotólisis
 1642 y del fenol y el dióxido de titanio para fotocátalisis

$$\kappa = 2.303\epsilon C \quad 99$$

1643 Para el cálculo de la integral se trabajó con Excel utilizando el método del trapecio el cual
 1644 calcula el área bajo la curva de una integral a base de medir el área de pequeños trapecios
 1645 dentro de esta.

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{2} \left[f(a) + 2 \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(b) \right] \quad 99$$

1646 Donde

$$h = \frac{b - a}{n} \quad 99$$

1647 III. Datos crudos DQO

1648 *Tabla 13 Datos cinéticos de degradación por fotólisis mediante la técnica de DQO*

Fotólisis			
t	DQO (mg/L) por cada número de lámparas		
	6	3	1
0	11.19	11.19	11.20
15	8.96	9.62	10.65
30	6.72	8.40	9.39
60	4.48	6.16	8.67
90	2.80	3.92	8.02
120	0.56	1.68	7.84
150	0.62	0.67	6.50
180	0.56	0.78	5.65
240	-	-	4.34
330	-	-	3.97
420	-	-	2.53
450	-	-	2.17

1649

1650

1651

1652

1653

1654 *Tabla 14 Datos cinéticos de degradación por fotocátalisis mediante la técnica de DQO*

Fotocatálisis			
t	DQO (mg/L) por cada número de lámparas		
	6	3	1
0	11.21	11.2	11.19
30	6.33	8.4	8.68
60	3.63	4.2	7.84
90	1.95	2.8	6.68
120	0.97	1.82	5.88
150	0.78	1.26	5.34
180	0.68	0.84	4.48
240			4.76
300			2.8
330			0.42

1655

1656

1657 **Resumen autobiográfico**

1658 Francisco Javier Ruiz Correa

1659 Candidato para Grado de Maestro en Ciencias con Orientación en Procesos Sustentables

1660 Tesis: DESARROLLO Y EVALUACIÓN DE UN REACTOR FOTOQUÍMICO PARA
1661 LA DEGRADACIÓN DE CONTAMINANTES PRESENTES EN FASE ACUOSA

1662 Campo de estudio: Ciencias Naturales e Ingeniería

1663 Bibliografía: Nacido en Monterrey Nuevo León el 20 de Marzo del 2000, hijo de
1664 Francisco Javier Ruiz Guajardo y Georgina Correa Valladares.

1665 Educación: Egresado de la Universidad Autónoma de Nuevo León en la Facultad de
1666 Ciencias químicas como Ingeniero Químico en 2023.

1667

1668 **Divulgación**

1669 Este trabajo fue publicado en múltiples foros científicos, a continuación, se presenta la
1670 constancia de cada uno de ellos.



1671

1672 *Figura 41 Constancia de participación en el IV Día de los Procesos Sustentables*



**La Facultad de Ciencias Químicas de la
Universidad Autónoma de Nuevo León**

otorga el presente

Reconocimiento a:

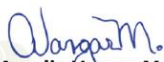
**Ing. Francisco Ruiz Correa, Dr. Juan Hernandez Lopez, Dr. Jorge Guzman Mar,
Dra. Margarita Loreda Cancino, Dr. Jacob Salazar Rabago**

por su participación como ponentes con el trabajo:

**EVALUACIÓN FOTÓNICA DE UN REACTOR FOTOQUÍMICO DESDE UNA PERSPECTIVA
SUSTENTABLE.**

**VIII CONGRESO INTERNACIONAL DE
QUÍMICA E INGENIERÍA VERDE**

Llevado a cabo el 2 y 3 de octubre de 2025 en
Monterrey, Nuevo León, México.


Dra. Argelia Vargas Moreno
DIRECTORA

1673

1674 *Figura 42 Constancia de participación en el VII Congreso Internacional de Química e*

1675 *Ingeniería Verde*

AMIDIQ

Academia Mexicana de Investigación y Docencia en Ingeniería Química A.C.

La Academia Mexicana de Investigación y Docencia en Ingeniería Química (AMIDIQ)
Otorga el presente

Reconocimiento

a:

Francisco Javier Ruiz Correa, Juan Manuel Hernández Lopez, Jorge Guzmán Mar, Margarita Loredo Cancino, Salvador Tututi Avila, Jacob Josafat Salazar Rabago

Por la presentación del trabajo

EFFECTO DE LA CONFIGURACIÓN Y FLUJO RADIATIVO EN LA FOTODEGRADACIÓN DE CONTAMINANTES PRESENTES EN FASE ACUOSA

En el área de Catálisis e Ingeniería de las Reacciones, en la modalidad CARTEL
ID: 771

Presentado en el XLVII Encuentro Nacional de la AMIDIQ, "La Ingeniería Química Nacional y los Retos Globales del Siglo XXI" Realizado en Riviera Maya, Quintana Roo, México del 12 al 15 de mayo de 2026



Dr. Fernando Israel Gómez Castro
Presidente
Consejo Directivo de la AMIDIQ
y Comité Organizador



Dr. Jesús Alberto Ochoa Tapia
Presidente
Comité Técnico

Riviera Maya, Quintana Roo, del 12 al 15 de mayo de 2026.

1676

1677 *Figura 43 Constancia de participación en el XLVII Encuentro de la AMIDIQ*



1678

1679 *Figura 44 Constancia de participación en el Seminario Científico General de la Facultad*
1680 *de Ciencias Químicas*