

Modelo matemático para la degradación de
contaminantes orgánicos en agua por fotocatálisis
heterogénea con TiO_2 .

Por:

Cristóbal Santos Santos

Puerto Ángel, Oaxaca, 2006

Dedicatorias

A mis padres, hermanos y a mi esposa que siempre me apoyaron.

Agradecimientos

Agradezco de corazón:

- Al prof Héctor y a la prof Chayo por su inigualable paciencia que tuvieron conmigo.
- A mis revisores de Tesis: M.C. Carlos Rugerio, M.C. Epifanio Morales y el Dr. Miguel Velásquez el haber dedicado parte de su tiempo a la revisión de este trabajo.
- A la Dra. Judith Amador por las facilidades prestadas y los ánimos que siempre me dio.
- A todos los profesores que aportaron su granito de arena en mi formación.
- A mi camarada Cervantex por su compañía y paciencia.
- A los laboratorios de Ingeniería Ambiental por las facilidades prestadas.

También agradezco al msn messenger el cual ayudo a la terminación de este trabajo ¡ olvidando sus malos momentos !.

Índice general

Resumen	2
1. Introducción	4
2. Justificación	7
3. Objetivos	9
3.1. Objetivo general	9
3.1.1. Objetivos específicos	9
I Marco teórico	11
4. Generalidades	12
4.1. Antecedentes	12
4.2. Mecanismo de la fotocatalisis heterogénea con TiO_2	13
4.3. Aplicaciones	16
4.4. Características del TiO_2	17
4.5. Propiedades morfológicas del fotocatalizador que afectan la cinética de degradación de contaminantes en medio acuoso	18
4.5.1. Efectos de la estructura cristalina.	18
4.5.2. Efecto del tamaño de la partícula y área superficial	19

4.6. Parámetros de operación que afectan la cinética de degradación de contaminantes en medio acuoso	20
4.6.1. Efecto de la carga del catalizador	20
4.6.2. Efecto de la concentración y naturaleza del contaminante	22
4.6.3. Efecto de la adsorción del contaminante	24
4.6.4. Efecto de la intensidad de radiación	26
4.6.5. Efecto del pH y naturaleza del contaminante	27
4.6.6. Efecto de la concentración de oxígeno	28
5. Modelos matemáticos	30
5.1. Modelo cinético de Turchi & Ollis	30
5.2. Modelo cinético de Minero	33
5.3. Modelo cinético de Cassano y colaboradores	36
5.4. Modelado del proceso de adsorción y reacción	38
II Modelo matemático	40
6. Metodología	41
7. Modelo de generación de radicales *OH (MGR*OH)	45
7.1. Planteamiento	45
7.2. Consideraciones	46
7.3. Desarrollo del modelo del MGR *OH	47
7.4. Solución del modelo adimensional de generación de radicales *OH (MAGR *OH) .	52
7.5. Análisis paramétrico del MAGR *OH	54
7.6. Conclusiones	56
8. Modelo de degradación sin adsorción (MDSA)	58
8.1. Planteamiento	58
8.2. Consideraciones	59

ÍNDICE GENERAL

8.3. Balance de masa en el reactor	60
8.4. Desarrollo del MDSA	61
8.5. Solución del modelo de degradación sin adsorción (MADSA)	63
8.6. Análisis paramétrico	65
8.7. Conclusiones	70
9. Modelo de degradación con adsorción (MDCA)	71
9.1. Planteamiento	71
9.2. Consideraciones	72
9.3. Balance de masa en el reactor	72
9.4. Desarrollo del MDCA	74
9.5. Solución del modelo adimensional de degradación con adsorción (MADCA)	74
9.6. Análisis paramétrico del MADCA	77
9.7. Conclusiones	80
10. Modelo global	87
10.1. Análisis paramétrico	89
11. Conclusiones generales	94
Apéndice	96
A. Nomenclatura	96
B. Solución con GNU Octave para el MAGR*OH.	98
C. Solución con Mathematica 5.2 para el MADSA	100
D. Solución con Mathematica 5.2 para el MADCA	101
E. Solución con Mathematica 5.2 para el Modelo Global	103
F. Adimensionamiento del MGR*OH	105

ÍNDICE GENERAL

G. Adimensionamiento del MDSA	108
H. Adimensionamiento del MDCA	111
Bibliografía	114

Índice de tablas

4.1. Etapas en la evolución del proceso fotocatalítico.	13
4.2. Esquema de reacciones propuestas por Turchi & Ollis ([2]).	15
4.4. Aplicaciones de la fotocatálisis con TiO_2	16
4.5. Propiedades físicas del TiO_2	17
4.6. Efecto de la carga del catalizador sobre la cinética de degradación de contaminantes.	21
5.1. Expresiones cinéticas de velocidad ([2])	33
5.2. Casos límites para resolver la ecuación 5.11	36
7.1. Tiempos característicos de los procesos involucrados en las constantes adimensionales.	52
7.2. Esquema del arreglo de las gráficas y el orden de magnitud de los fenómenos involucrados en el MAGR^*OH	54
10.1. Sistema fotocatalítico en el cual el contaminante se encuentra adsorbido	89
10.2. Sistema fotocatalítico en el cual se cambia el tipo de contaminante	91

Índice de figuras

4.1. Mecanismo de activación del TiO_2	14
4.2. Efecto de la concentración inicial (C_o) sobre la velocidad de degradación inicial (r_o) ([38])	23
4.3. Efecto de la naturaleza del sustrato sobre la cinética de degradación ([11]).	24
4.4. Efecto de la intensidad de radiación (I) sobre la velocidad de degradación (r) ([31])	26
6.1. Esquema para la construcción del <i>Modelo matemático para la degradación de contaminantes orgánicos en agua por fotocatálisis heterogénea.</i>	42
7.1. Esquema del proceso de generación de $^*\text{OH}$	46
7.2. Esquema del mecanismo de degradación utilizado para generar el MGR^*OH	47
7.3. Representación del comportamiento de la variable adimensional $\rho(\tau)$ cuando se resuelve el MAGR^*OH a diferentes valores χ_1 , χ_2 y χ_3	56
8.1. Esquema del mecanismo de reacción del MDSA	59
8.2. Esquema del reactor "slurry"	60
8.3. Gráficas del MDSA para $\theta(\tau)$	67
8.4. Gráficas del MDSA para $\rho(\tau)$	68
9.1. Esquema del mecanismo de reacción del MDCA	71
9.2. Gráficas MADCA I, II y III	81
9.3. Gráficas MADCA II, V y VIII	82
9.4. Gráficas MADCA III, VI, IX	83

ÍNDICE DE FIGURAS

9.5. Gráficas MADCA I', IV' y VII'	84
9.6. Gráficas MADCA II', V' y VIII'	85
9.7. Gráficas MADCA III', VI' y IX'	86
10.1. Modelo Global, MADCA y MADSA	92
10.2. Modelo Global	93