

UNIVERSIDAD DE CIENCIAS Y ARTES DE CHIAPAS

**INSTITUTO DE INVESTIGACIÓN E INNOVACIÓN EN
ENERGÍAS RENOVABLES**

TESIS

**“SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE
NANOMATERIALES DE ZnO Y ZnO-Co
PARA LA FOTODEGRADACIÓN DE
TMP/SMX Y PARACETAMOL”**

**QUE PARA OBTENER EL GRADO DE:
MAESTRA EN MATERIALES Y
SISTEMAS ENERGÉTICOS
RENOVABLES**

**PRESENTA
ING. MARICRUZ JIMÉNEZ CERDA**

**DIRECTORA
DRA. EDNA IRIS RÍOS VALDOVINOS**

**CO-DIRECTOR
DR. ABUMALÉ CRUZ SALOMÓN**

**ASESOR
MTRO. KERVIN GABRIEL RINCÓN SOTO**



Tuxtla Gutiérrez, Chiapas.

Julio 2025



UNIVERSIDAD DE CIENCIAS Y ARTES DE CHIAPAS

SECRETARÍA ACADÉMICA

DIRECCIÓN DE INVESTIGACIÓN Y POSGRADO

Tuxtla Gutiérrez, Chiapas a 28 de mayo de 2025
Oficio No. SA/DIP/0496/2025
Asunto: Autorización de Impresión de Tesis

C. Maricruz Jiménez Cerda
CVU 1272300

Candidata al Grado de Maestra en Materiales y Sistemas Energéticos Renovables
Instituto de Investigación e Innovación en Energías Renovables
UNICACH
Presente

Con fundamento en la **opinión favorable** emitida por escrito por la Comisión Revisora que analizó el trabajo terminal presentado por usted, denominado **Síntesis y Caracterización de Nanomateriales de ZnO y ZnO-Co para la Fotodegradación de TMP/SMX y Paracetamol** cuya Directora de tesis es la Dra. Edna Iris Ríos Valdovinos (CVU 167429) y Co-Director el Dr. Abumalé Cruz Salomón (CVU: 441747) quienes avalan el cumplimiento de los criterios metodológicos y de contenido; esta Dirección a mi cargo **autoriza la impresión del documento en cita**, para la defensa oral del mismo, en el examen que habrá de sustentar para obtener el **Grado de Maestra en Materiales y Sistemas Energéticos Renovables**.

Es imprescindible observar las características normativas que debe guardar el documento impreso, así como realizar la entrega en esta Dirección de un ejemplar empastado.

Atentamente
"Por la Cultura de mi Raza"


Dra. Dulce Karol Ramírez López
DIRECTORA



C.c.p. Dr. José Francisco Pola Albores, Director del Instituto de Investigación e Innovación en Energías Renovables, UNICACH. Para su conocimiento.
Dr. Carlos Alonso Meza Avendaño, Coordinador del Posgrado, Instituto de Investigación e Innovación en Energías Renovables, UNICACH. Para su conocimiento.
Archivo/minutario.

EPL/DKRL/mvp/ljgp/gtr



2025, Año de la mujer indígena
Año de Rosario Castellanos

Ilustración: Noé Zenteno



Ciudad Universitaria, libramiento norte
poniente 1150, col. Lajas Maciel C.P. 29039.
Tuxtla Gutiérrez, Chiapas, México
investigacionyposgrado@unicach.mx

***“Vuela a tu manera, no a la de
los demás.”***

-Robot salvaje (2024)

AGRADECIMIENTOS

Deseo expresar mi más profundo agradecimiento a todas las personas e instituciones que brindaron su valiosa colaboración y apoyo durante la realización de este trabajo. También extendiendo mi gratitud a las instituciones que facilitaron los recursos necesarios para llevar a cabo esta investigación, así como a todas aquellas personas que, de manera directa o indirecta, contribuyeron a la culminación de este proyecto.

Universidad de Ciencias y Artes de Chiapas (UNICACH)

Instituto de Investigación e Innovación en Energías Renovables (IIIER)

Laboratorio de Materiales y Procesos Sustentables (LaMPSus) - IIIER - UNICACH

- Mtro. Didier Santiago Salazar

Instituto de Energías Renovables (IER) de la UNAM

- Ing. Rogelio Morán Elvira

Sección de Electrónica de Estado Sólido del CINVESTAV

- Dr. Odín Reyes Vallejo

Laboratorio de Caracterización de Materiales - IIIER - UNICACH

- Mtra. Berenice Arroyo Serena

Coordinación del programa MMySER- IIIER - UNICACH

- Dr. Carlos Alonso Meza Avendaño
- Ing. Adriana Flores Suárez

Facultad de Ciencias de la Nutrición y Alimentos - UNICACH

- Dra. María Emperatriz Domínguez Espinosa

Al proyecto “Desarrollo de materiales para remediación del agua contaminada y para aplicaciones energéticas renovables” con número 079-10-2022 UNICACH.

Agradezco al programa de posgrado de la Maestría en Materiales y Sistemas Energéticos Renovables por el apoyo brindado durante mi formación académica y por la beca otorgada.

Expreso mi más sincero agradecimiento a la Agencia Digital Tecnológica del Estado por haberme otorgado la Beca Tesis Posgrado 2025, un respaldo clave que hizo posible la culminación de este proyecto de investigación.

Secretaría de Ciencias, Humanidades, Tecnología e Innovación (Secihti) por la beca otorgada para el estudio de la Maestría en Materiales y Sistemas Energéticos Renovables (MMySER).

AGRADECIMIENTOS

Quiero expresar mi más sincero agradecimiento a la Dra. Edna Iris Ríos Valdovinos por su invaluable dedicación como directora de mi tesis. Su experiencia, orientación y constante apoyo fueron esenciales para lograr los objetivos de este trabajo. Trabajar bajo su dirección fue una oportunidad única que dejó una huella significativa en mi desarrollo académico y profesional, por lo que siempre estaré profundamente agradecida.

Dr. Abumalé Cruz Salomón, mi más profundo agradecimiento por su destacado apoyo y por haber sido un director de tesis ejemplar. Su experiencia, dedicación y constante disposición para guiar este proyecto fueron esenciales para su realización y éxito. Valoro el tiempo que dedicó a orientarme.

Mtro. Kervin Gabriel Rincón Soto por su valiosa asesoría durante el desarrollo de este proyecto. Su disposición para compartir su conocimiento fue fundamental para mi crecimiento académico y profesional. Aprecio profundamente el tiempo dedicado, su paciencia y las observaciones constructivas que contribuyeron significativamente a mejorar este trabajo. Su compromiso y guía fueron esenciales para alcanzar los objetivos de este proyecto.

Dr. José Francisco Pola Albores por sus valiosas observaciones y por el apoyo brindado a lo largo de la realización de esta tesis. Sus sugerencias me permitieron profundizar en aspectos clave de la investigación y lograr una mejor presentación de los resultados.

DEDICATORIA

Dedico este trabajo a aquellas personas que, con su amor, apoyo incondicional y confianza, hicieron posible que llegara hasta aquí:

A Janeth Jiménez, por ser mi compañera de vida, mi hermana, mi apoyo constante. Gracias por tu amor incondicional, por tus consejos sabios y por siempre estar a mi lado, compartiendo risas, desafíos y momentos especiales.

A Kervin Rincón por ser mi compañero incansable, por su apoyo constante y por hacer que cada desafío se sienta más liviano. Gracias por estar a mi lado en los momentos difíciles, por tu paciencia y por brindarme siempre tu confianza. Este logro es también gracias a ti, por motivarme. Agradezco todo lo que eres para mí.

A Araceli Cerda por su amor incondicional, valoro las lecciones que me has dejado y el papel que, en su momento, desempeñaste en mi desarrollo.

A Candelaria Cruz, por su amor, por ser una fuente constante de apoyo, cariño, por siempre estar ahí para mí y por tus abrazos llenos de ternura.

A Sergio Cerda, quien, a pesar del paso del tiempo, siempre sigue estando presente en mi vida. Tus consejos y las aventuras que compartimos dejaron una huella profunda en mí. Parte de lo que soy hoy es gracias a lo que me enseñaste. Te mando otro abrazo al cielo, te extraño.

A Agustín Cerda, por su apoyo incondicional, sus consejos y por motivarme en cada paso de este camino. Gracias por sus palabras de aliento.

A Sharit Velázquez, aunque la distancia nos separe, siempre estás cerca de mi corazón. Por tu apoyo incondicional, por motivarme a seguir adelante, incluso desde lejos. Tu amistad es un regalo invaluable, y te agradezco por ser una parte tan importante de mi vida.

A Johana Ascencio por ser mi compañera de salidas, tu amistad ha sido un apoyo fundamental y estoy agradecida por haberte encontrado en este camino.

A Rocio Sánchez que siempre está dispuesta a compartir y enseñarme de su conocimiento.

A Sheyla Mendoza y Jacqueline Gómez por su apoyo incondicional. Gracias por estar presentes, por su ánimo, incluso en los momentos en los que nuestras conversaciones son breves.

A los amigos del posgrado, por las experiencias compartidas y por las tardes de desestrés que hicieron más amena esta etapa académica.

ÍNDICE.

AGRADECIMIENTOS.....	4
DEDICATORIA	7
ÍNDICE DE FIGURAS Y TABLAS	13
Figuras.....	13
Tablas	16
NOMENCLATURA	17
RESUMEN	18
ABSTRACT	20
CAPÍTULO 1	22
GENERALIDADES.....	22
1.1. INTRODUCCIÓN.....	23
1.2. ESTADO DEL ARTE	25
1.2.1. Panorama de contaminantes presentes en el agua en México...	25
1.2.2. Degradación de contaminantes emergentes (CE) con nanomateriales mediante fotocátalisis heterogénea	30
1.2.3. Resumen de antecedentes	34
1.3. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA.....	36
1.4. JUSTIFICACIÓN	37
1.5. OBJETIVOS	38
1.6. HIPÓTESIS	39
CAPÍTULO 2	40
MARCO TEÓRICO	40
2.1. Procesos de oxidación avanzada (PAO)	41
2.2. Fotocátalisis heterogénea	41
2.3. Catalizador.....	42
2.4. Proceso fotocatalítico	44
2.4.1. Potencial de Hidrógeno (pH)	44
2.4.2. Temperatura	44
2.4.3. Intensidad de la luz	45
2.4.4. Radical hidroxilo.....	45

2.5. Semiconductores.....	46
2.6. Nanomateriales	47
2.7. Óxido de Zinc.....	48
2.8. Cobalto	49
2.9. Óxido de Zinc-Cobalto (ZnO-Co).....	50
2.10. Contaminantes emergentes	51
2.10.1. Fármacos	51
2.10.1.1. Paracetamol.....	53
2.10.1.2. Trimetoprima con sulfametoxazol	54
2.11. Síntesis de nanomateriales.....	55
2.11.1. Síntesis hidrotermal.....	55
2.12. Caracterización de materiales.....	56
2.12.1. Colorimetría	57
2.12.2. Difracción de rayos X (DRX).....	58
2.12.3. Espectroscopía UV-Visible (UV-Vis)	59
2.12.4. Microscopía electrónica de barrido (MEB).....	60
2.12.5. Fluorescencia de rayos X (FRX).....	61
2.12.6. Método BET (Brunauer-Emmett-Teller)	63
2.12.7. Espectroscopía Infrarroja por Transformada de Fourier (FT-IR).....	65
CAPÍTULO 3	67
METODOLOGÍA EXPERIMENTAL.....	67
3.1. Síntesis de ZnO y ZnO-Co.....	68
3.2. Reactivos y equipos para la síntesis hidrotermal de ZnO y ZnO-Co	68
3.3. Síntesis hidrotermal	69
3.3.1. Síntesis hidrotermal de ZnO	69
3.3.2. Síntesis hidrotermal para el dopaje de ZnO-Co	71
3.4. Diseño de experimentos ZnO y ZnO-Co	73
3.5. Caracterización de ZnO y ZnO-Co	74
3.5.1. Colorimetría	74
3.5.2. Difracción de Rayos X (DRX).....	75
3.5.3. Espectroscopía UV-Visible (UV-Vis)	77
3.5.4. Microscopía Electrónica de Barrido (MEB)	78
3.5.5. Fluorescencia de Rayos X (FRX).....	79

3.5.6. Método BET (Brunauer-Emmett-Teller)	80
3.6. Evaluación fotocatalítica de ZnO y ZnO-Co	82
3.6.1. Preparación de solución de contaminantes emergentes	82
3.6.2. Descripción del sistema para la evaluación de fotocatalizadores	83
3.6.3. Mediciones de absorbancia	84
3.6.4. Degradación de TMP/SMX y Paracetamol	85
3.6.5. Evaluación de fotólisis, fotocatálisis y adsorción de ZnO y ZnO-Co	86
3.6.6. Degradación por ciclos	86
3.7. Análisis de la solución TMP/SMX y paracetamol mediante espectroscopía Infrarroja por Transformada de Fourier (FT-IR).....	87
CAPÍTULO 4	89
ANÁLISIS Y DISCUSIÓN DE RESULTADOS	89
4.1. Síntesis hidrotermal de ZnO y ZnO-Co	90
4.2. Colorimetría.....	90
4.3. Difracción de Rayos X (DRX)	92
4.3.1. Difractograma ZnO y ZnO-Co.....	92
4.3.2. Tamaño de cristal ZnO y ZnO-Co	94
4.4. Espectroscopía UV-Visible (UV-Vis).....	95
4.4.1. Reflectancia difusa.....	95
4.4.2. Ancho de banda (Kubelka-Munk)	97
4.5. Microscopia electrónica de barrido (MEB)	100
4.5.1. Micrografías ZnO	100
4.5.2. Micrografías ZnO-Co-2%.....	102
4.5.3. Micrografías ZnO-Co-4%.....	103
4.5.4. Micrografías ZnO-Co-6%.....	104
4.6. Fluorescencia de rayos X (FRX)	106
4.7. Método BET (Brunauer-Emmett-Teller).....	107
4.7.1. ZnO	107
4.7.2. ZnO-Co-2%	108
4.7.3. ZnO-Co-4%	108
4.7.4. ZnO-Co-6%	109
4.7.5. Isoterma de adsorción	110
4.8. Evaluación fotocatalítica	111

4.8.1. Degradación de Paracetamol.....	111
4.8.2. Degradación de TMP/SMX.....	113
4.8.3. Evaluación de fotólisis, fotocátalisis y adsorción de ZnO y ZnO-Co	114
4.8.4. Eficiencia de ZnO y ZnO-Co mediante ciclos	116
4.9. Análisis de la solución TMP/SMX y paracetamol mediante espectroscopía Infrarroja por Transformada de Fourier (FT-IR).....	118
4.9.1. Espectro TMP/SMX y Paracetamol.....	118
4.9.2. ZnO TMP/SMX	120
4.9.3. ZnO Paracetamol.....	122
4.9.4. ZnO-Co-4% TMP/SMX.....	123
4.9.5. ZnO-Co-4% Paracetamol	124
CAPÍTULO 5	125
CONCLUSIONES.....	125
TRABAJOS A FUTURO	129
ACTIVIDADES ACADÉMICAS.....	130
REFERENCIAS.....	133
ANEXOS.....	144
Anexo 1	144
Anexo 2	145
Anexo 3	146
Anexo 4.....	147

ÍNDICE DE FIGURAS Y TABLAS

Figuras

Figura 1. Degradación fotocatalítica mediante el uso de TiO_2 dopado con metal [13].....	31
Figura 2. Estructura química de (1) atenolol, (2) acetaminofén, (3) enalapril, (4) metformina, (5) sulfametoxazol [14].	32
Figura 3. Proceso fotocatalítico mediante irradiación de $h\nu$	42
Figura 4. Energía requerida para que ocurra la reacción en procesos catalizados y no catalizados [25].....	43
Figura 5. Tipos de bandas de energías de los materiales: a) aislante, b) semiconductor y c) conductor [32].	46
Figura 6. Clasificación de los nanomateriales: (a) C_{60} : Buckminsterfullereno; (b) fullerenos gigantes anidados o cebollas gráficas; (c) nanotubo de carbono; (d) nanoconos; (e) nanotóroides; (f) superficie del grafeno; (g) cristal 3D de grafito; (h) superficie de Haeckelita; (i) nano-ribones de grafeno; (j) grupos de grafeno; (k) nanotubo de carbono helicoidal; (l) cadenas cortas de carbono; (m) cristales 3D de Schwarzite; (n) nanoesferas de carbono; (o) redes de nanotubos 3D, y (p) redes 2D de nanobarras [34].	47
Figura 7. Estructuras cristalinas ZnO [36].....	49
Figura 8. Productos farmacéuticos encontrados en el medio ambiente [42]. .	52
Figura 9. Estructura química paracetamol [43].	54
Figura 10. Estructura química TMP/SMX [18].....	55
Figura 11. Espacio CIELab; espectro de colores visibles por el ojo humano [49].	57
Figura 12. Interacción de los rayos X con la estructura cristalina [53].	58
Figura 13. Esquema de un espectrofotómetro UV-Vis [57].	60
Figura 14. Microscopio electrónico de barrido [59].	61
Figura 15. Análisis de la fluorescencia de rayos X [63].....	62
Figura 16. Superficie de área. 1) la superficie se desgasifica para eliminar especies adsorbidas, 2) se forma un recubrimiento llamado monocapa, 3) al aumentar la presión se adsorben múltiples capas de moléculas de gas y 4) Este punto marca la finalización de la isoterma de adsorción [66].	64
Figura 17. Espectroscopía Infrarroja por Transformada de Fourier (FT-IR) [69].	66

Figura 18. Síntesis de ZnO por el método hidrotermal.	70
Figura 19. Síntesis hidrotermal de ZnO-Co.....	72
Figura 20. Espectrofotómetro medidor de color de mano.	75
Figura 21. Difractómetro de Rayos X-IIIER.	76
Figura 22. Espectrofotómetro UV-Vis-IIIER.	77
Figura 23. Microscopio electrónico de barrido - Hitachi FE-SEM S-5500.....	79
Figura 24. Espectrómetro de fluorescencia de rayos-X, Supermini 200 (Rigaku).	79
Figura 25. Analizador de área de superficie y tamaño de poro.	81
Figura 26. Diagrama del sistema de evaluación.	84
Figura 27. Punto de abs para TMP/SMX y Paracetamol.....	85
Figura 28. Espectrómetro de Mediano Infrarrojo por Transformada de Fourier marca Thermo Scientific modelo Nicolet iS50.	88
Figura 29. Difractograma de ZnO por el método hidrotermal.	92
Figura 30. Difractograma de ZnO y ZnO-Co.	93
Figura 31. Medición de reflectancia % de ZnO y ZnO-Co.	96
Figura 32. Ancho de banda ZnO.	97
Figura 33. Ancho de banda ZnO-Co 2%.	98
Figura 34. Ancho de banda ZnO-Co 4%.	98
Figura 35. Ancho de banda ZnO-Co 6%.	99
Figura 36. Ancho de banda ZnO y ZnO-Co.	100
Figura 37. Micrografía de ZnO a pH 9. Ampl. a) 10,000 X, b) 2,000 X y c) 1,000 X.	101
Figura 38. Micrografía de ZnO-Co-2%. Ampl. a) 10,000 X, b) 2,000 X y c) 1,000 X.	102
Figura 39. Micrografía de ZnO-Co-4%. Ampl. a) 10,000 X, b) 2,000 X y c) 1,000 X.	104
Figura 40. Micrografía de ZnO-Co-6%. Ampl. a) 10,000 X, b) 2,000 X y c) 1,000 X.	105
Figura 41. Isotermas ZnO y ZnO-Co.....	110
Figura 42. Evaluación fotocatalítica para la degradación de Paracetamol. ...	112
Figura 43. Evaluación fotocatalítica para la degradación de TMP/SMX.....	113
Figura 44. Fotocatálisis, adsorción y fotólisis ZnO.....	115
Figura 45. Fotocatálisis, adsorción y fotólisis ZnO-Co-4%.	116

Figura 46. Número de ciclos para la degradación de TMP/SMX usando como fotocatalizador ZnO y ZnO-Co.....	117
Figura 47. Número de ciclos para la degradación de Paracetamol usando como fotocatalizador ZnO y ZnO-Co.....	118
Figura 48. Espectro infrarrojo TMP/SMX solución a 10 ppm.	119
Figura 49. Espectro infrarrojo Paracetamol solución a 10 ppm.	120
Figura 50. Espectro infrarrojo TMP/SMX ZnO. a) solución inicial, b) 30 min oscuridad, c) 150 min expuesto a luz UV y d) 300 min expuesto a luz UV.	121
Figura 51. Espectro infrarrojo Paracetamol ZnO. a) solución inicial, b) 30 min oscuridad, c) 150 min expuesto a luz UV y d) 300 min expuesto a luz UV.	122
Figura 52. Espectro infrarrojo TMP/SMX ZnO-Co-4%. a) solución inicial, b) 30 min oscuridad, c) 150 min expuesto a luz UV y d) 300 min expuesto a luz UV.	123
Figura 53. Espectro infrarrojo Paracetamol ZnO-Co-4%. a) solución inicial, b) 30 min oscuridad, c) 150 min expuesto a luz UV y d) 300 min expuesto a luz UV.	124
Figura 54. Ancho de banda ZnO y ZnO-Co 2%.....	145
Figura 55. Ancho de banda ZnO-Co 4% y ZnO-Co 6%.	145
Figura 56. Isoterma ZnO.	146
Figura 57. Isoterma ZnO-Co-2%.	146
Figura 58. Isoterma ZnO-Co-4%.	146
Figura 59. Isoterma ZnO-Co-6%.	147
Figura 60. Degradación de TMP/SMX usando como fotocatalizador ZnO y ZnO-Co.....	147
Figura 61. Degradación de Paracetamol usando como fotocatalizador ZnO y ZnO-Co.....	148

Tablas

Tabla 1. Panorama de CE en México [10].....	27
Tabla 2. Resumen de antecedentes.	34
Tabla 3. Reactivos y solventes para la síntesis hidrotermal de ZnO y ZnO-Co.	68
Tabla 4. Equipos utilizados para el desarrollo de la síntesis hidrotermal ZnO y ZnO-Co.	69
Tabla 5. Diseño experimental de la síntesis hidrotermal y dopaje.	73
Tabla 6. Condiciones de medición para DRX-Rigaku.	76
Tabla 7. Parámetros de medición de reflectancia (R%).	78
Tabla 8. Parámetros para desgasificar el fotocatalizador.	80
Tabla 9. Descripción de los fármacos.....	82
Tabla 10. Parámetros experimentales.	90
Tabla 11. Determinación de colores.	91
Tabla 12. Tamaño de cristal.	94
Tabla 13. Resultados de composición de % masa del ZnO y ZnO-Co.	106
Tabla 14. Análisis BET ZnO.	107
Tabla 15. Análisis BET ZnO-Co-2%.	108
Tabla 16. Análisis BET ZnO-Co-4%.	109
Tabla 17. Análisis BET ZnO-Co-6%.	109

NOMENCLATURA

Abreviatura	Significado
BC	Banda de conducción
BV	Banda de valencia
CE	Contaminantes emergentes
CNA	Comisión Nacional del Agua
Co	Cobalto
DBO	Demanda Bioquímica de Oxígeno
DQO	Demanda Química de Oxígeno
DRX	Difracción de rayos X
Eg	Energía de banda prohibida
eV	Electrón-Volt
FRX	Fluorescencia de rayos X
MEB	Microscopía electrónica de barrido
NaOH	Hidróxido de sodio
nm	Nanómetros
Np	Nanopartículas
O	Oxígeno
pH	Potencial de Hidrógeno
PAO	Procesos de oxidación avanzada
ppm	Partes por millón
TMP/SMX	Trimetoprima con sulfametoxazol
UV-Vis	Ultra violeta-visible
Zn	Zinc
ZnO	Óxido de zinc

RESUMEN

El objetivo de este estudio es sintetizar y caracterizar nanomateriales de ZnO puro y ZnO dopado con Co a concentraciones de 2%, 4% y 6% en relación peso. Estos materiales tienen aplicaciones como fotocatalizadores en tratamientos de agua, específicamente para eliminar contaminantes emergentes como los fármacos TMP/SMX y paracetamol. Se presenta un proceso de elaboración sencillo para la producción de nanopartículas de ZnO y ZnO-Co mediante el método hidrotermal a baja temperatura (90 °C), con ajuste de pH 9 y calcinación a 600 °C. Los resultados de caracterización microestructural por DRX confirmaron la presencia de ZnO en forma pura, con estructura hexagonal tipo Wurtzita. La morfología superficial observada en imágenes de MEB ilustró que el pH y la temperatura de calcinación afectan la morfología de las nanoestructuras de ZnO, obteniendo morfologías en forma de nanobarras alargados, nanobarras aglomerados y nanobarras porosos. Los resultados del dopaje con Co mostraron una morfología irregular en las nanopartículas. Se observaron nanobarras con fracturas y la presencia de granos con tendencia a formar aglomeraciones. Los resultados de FRX confirmaron las concentraciones para el dopaje de ZnO-Co. Utilizando análisis de reflectancia difusa y la función de Kubelka-Munk, se determinaron las energías de banda prohibida (E_g) para todas las muestras, y los valores de E_g calculados oscilaron entre 3.25 eV para ZnO y 3.25 eV a 3.21 eV para ZnO-Co. La actividad fotocatalítica de los nanomateriales de ZnO y ZnO-Co se evaluó en un fotorreactor para la degradación de contaminantes emergentes. Los resultados obtenidos para la degradación de TMP/SMX muestran eficiencias del 97% con ZnO puro, 78% con ZnO-Co-2%, 87% con ZnO-Co-4% y 82% con ZnO-Co-6%. Para la degradación de paracetamol, las eficiencias fueron del 99% con ZnO puro, 48% con ZnO-Co-2%, 57% con ZnO-Co-4% y 51% con ZnO-Co-6%. Estos

resultados destacan que el carácter poroso del ZnO puro favorece una mayor interacción con los contaminantes durante el proceso, lo que contribuye a una mayor eficiencia en el tiempo de tratamiento.

Palabras clave: Fotocatálisis, ZnO, Contaminantes emergentes, Co.

ABSTRACT

The objective of this study is to synthesize and characterize pure ZnO and Co-doped ZnO nanomaterials at concentrations of 2%, 4%, and 6% by weight. These materials have applications as photocatalysts in water treatment, specifically for the removal of emerging contaminants such as TMP/SMX and paracetamol. A simple production process is presented for the synthesis of ZnO and ZnO-Co nanoparticles using the hydrothermal method at low temperature (90 °C), with a pH adjustment to 9 and calcination at 600 °C.

Microstructural characterization results by XRD confirmed the presence of pure ZnO with a hexagonal Wurtzite structure. Surface morphology observed in SEM images showed that the pH and calcination temperature influence the morphology of ZnO nanostructures, resulting in elongated nanorods, agglomerated nanorods, and porous nanorods. The Co doping results revealed an irregular morphology in the nanoparticles, where fractured nanorods and grains with a tendency to form agglomerates were observed. XRF results confirmed the doping concentrations of ZnO-Co. Using diffuse reflectance analysis and the Kubelka-Munk function, the bandgap energies (E_g) of all samples were determined, with calculated E_g values ranging from 3.25 eV for pure ZnO to 3.25 eV to 3.21 eV for ZnO-Co.

The photocatalytic activity of ZnO and ZnO-Co nanomaterials was evaluated in a photoreactor for the degradation of emerging contaminants. The results for TMP/SMX degradation showed efficiencies of 97% for pure ZnO, 78% for ZnO-Co-2%, 87% for ZnO-Co-4%, and 82% for ZnO-Co-6%. For paracetamol degradation, the efficiencies were 99% for pure ZnO, 48% for ZnO-Co-2%, 57% for ZnO-Co-4%, and 51% for ZnO-Co-6%. These results highlight that the porous nature of pure ZnO enhances its interaction with contaminants during the process, contributing to greater efficiency over the treatment time.

Keywords: Photocatalysis, ZnO, Emerging contaminants, Co.

CAPÍTULO 1

GENERALIDADES

En este capítulo, se exponen los elementos clave para situar el contexto del actual proyecto de investigación. De igual forma, se ofrece una introducción que sienta las bases del tema a tratar, seguida por el estado del arte que ilustran el camino recorrido hasta el momento en este campo de estudio. Después, se detalla la problemática central que da origen a esta investigación, así como los objetivos que guían el propósito de este estudio. Además, se desglosa la justificación, subrayando la relevancia y contribución del trabajo, y se presentan la hipótesis que se propone validar a lo largo de la investigación.

1.1. INTRODUCCIÓN

A principios del siglo XIX, se evidenció la creciente preocupación por la contaminación, debido a la escasez de recursos. Este problema ha alcanzado dimensiones alarmantes, esto debido al cambio climático y la progresiva desertificación del planeta. El agua tiene gran relevancia en este problema, al ser un recurso vital para la supervivencia humana y el equilibrio de los ecosistemas, se enfrenta a una situación crítica, debido al incremento poblacional y económico. Durante años, grandes cantidades de compuestos biológicamente activos, utilizados en la agricultura, industrias, medicina, entre otros, han sido liberados en el medio ambiente. En consecuencia a esto ha sido alarmante, debido al deterioro de la calidad en el agua lo que ha generado una crisis ambiental [1] [2]. Por tal motivo, la presencia de productos químicos farmacéuticos en cuerpos de agua ha producido una gran preocupación de índole ambiental. Los principales medios por los cuales los productos farmacéuticos ingresan al medio ambiente incluyen la excreción humana, la eliminación de medicamentos no utilizados y su uso en la agricultura. La presencia de ciertos fármacos, como el ibuprofeno, el diclofenaco, la carbamazepina y el ácido clofibrico, ha sido alarmante debido a que son suministrados en el agua potable [3] [4]. Los procesos de oxidación avanzada (PAO), son tratamientos utilizados para descontaminar las aguas. Se aplican cuando los métodos convencionales pierden eficiencia. Los POA emplean métodos fisicoquímicos que provocan cambios en la estructura química del contaminante. Se logra mediante la generación y aplicación de especies altamente reactivas, como lo es el radical hidroxilo ($\text{OH}\cdot$). Se generan a partir de oxígeno, peróxido de hidrógeno y fotocatalizadores específicos, lo que da como resultado la transformación de contaminantes en productos inofensivos, como agua y dióxido de carbono [5]. El proceso fotocatalítico inicia cuando los

fotones inciden con el fotocatalizador, en este caso es un semiconductor, lo que provoca una excitación de electrones en las capas exteriores. Lo que genera transiciones de energía desde la banda de valencia hacia la banda de conducción, dejando un espacio positivo en la banda de valencia [6].

Un fotocatalizador es desarrollado para la eliminación de contaminantes orgánicos presentes en los cuerpos de agua, aprovechando principalmente fuentes de energía como la solar y la UV para su activación. Tienen la capacidad de purificar el agua y eliminar la mayoría de los contaminantes orgánicos presentes en ella [7].

1.2. ESTADO DEL ARTE

1.2.1. Panorama de contaminantes presentes en el agua en México

En 2007 B. Jiménez Cisneros analizó la información y calidad de agua en México. Desde 1990 México cuenta con datos públicos sobre la calidad del agua, debido al manejo que ha llevado el gobierno estos datos han variado, lo que provocó una dificultad para analizar el cambio de la calidad del agua. Desde 2005 la CNA (Comisión Nacional del Agua) mencionó que solo el 8% del agua superficial en México tiene una calidad excelente según la medición de DBO (Demanda Bioquímica de Oxígeno), y el 19% midiendo DQO (Demanda Química de Oxígeno). Caso contrario, el 72% del agua esta contaminada medido por DBO, y el 69% según DQO. Como resultado, con el paso de los años se han implementado normas como la NOM-001 para adecuar las condiciones del país, lo que tuvo como consecuencia duplicar la cantidad de agua tratada en los siguientes siete años. [8].

En 2022 García Barrios *et al.* mencionan los problemas del agua en México. En las cuencas y acuíferos de México, el deterioro es avanzado, debido al uso de suelo, actividades económicas y urbanización. El agua, siendo un recurso limitado y esencial para la vida humana y los ecosistemas, genera disputas por su uso, distribución y conservación. Por ello, es fundamental comprender los diversos intereses de los factores sociales para buscar acuerdos y construir una relación basada en objetivos comunes que promuevan la preservación del agua. Lo que ha llevado a diversos problemas en el agua; como son las industrias, que contaminan los cuerpos de agua y, aún así, continúan sus operaciones impunemente. Del agua que se distribuye para la ciudades es agua limpia de los ecocistemas y el resultado que se tiene despues de su uso es agua sucia con diferentes contaminantes. No se tiene un buen manejo o cuidado del agua en la

vida cotidiana. Se busca desarrollar métodos efectivos para eliminar los contaminantes presentes en el agua y permitir su reutilización, garantizando la protección del ecosistema acuático. Esto no solo contribuye a la preservación de los recursos hídricos, sino que también promueve un uso sostenible del agua, esencial para enfrentar los desafíos ambientales y satisfacer las necesidades crecientes de las futuras generaciones [9].

En 2024 Torres Alina *et al.* realizaron un estudio sobre contaminantes emergentes en México: panorama actual, retos y una posible solución biotecnológica. Donde se menciona que la demanda para satisfacer necesidades sociales ha impulsado avances tecnológicos y científicos en diversas áreas, promoviendo la síntesis de compuestos químicos. Lo que ha incrementado las descargas de sustancias al medio ambiente. Causando daños ambientales y riesgos en la salud humana y otros seres vivos. Son compuestos químicos, como orgánicos e inorgánicos que se liberan en el entorno sin regulación, estos se conocen como contaminantes emergentes (CE). Los CE se componen por diferentes productos como lo son: farmacéuticos, cuidado personal, pesticidas, detergentes, etc. Incluso a niveles como ng/L o µg/L presentes en las corrientes de agua presenta un riesgo significativo para la salud de los seres vivos [10].

En México en los últimos años se han detectado la presencia de compuestos estrogénicos, disruptores endócrinos y fármacos de venta libres en efluentes de plantas de tratamiento de agua. En la siguiente tabla se presenta el monitoreo de CE en México

Tabla 1. Panorama de CE en México [10].

Lugar	Compuestos identificados
ng/L	
Agua de pozos para consumo en la zona metropolitana de la Ciudad de México	• Ácido salicílico • Bisfenol A • Butilbencil ftalato • Diclofenaco • Di-2-etilhexil ftalato • 4-nonilfenol • Triclosán
Agua de presas para consumo en la zona metropolitana de la Ciudad de México	• Ácido salicílico • Bisfenol A • Butilbencil ftalato • Diclofenaco • Di-2-etilhexil ftalato • 4-nonilfenol • Triclosán • Gemfibrozil • Ibuprofeno • Ketoprofeno • Naproxeno
Plantas de tratamiento en la frontera de Cd. Juárez-El Paso, Texas EUA	• BDE-47 • BDE-99 BDE-100
Plantas de tratamiento en Cd. Juárez, Chihuahua	• BDE-47 • BDE-99 • BDE-100
Planta de tratamiento de aguas residuales: Cerro de la Estrella, Ciudad de México	• Estradiol • Estrona • Triclosán • Bisfenol A • Pentaclorofenol
Zona lacustre (diferentes puntos de muestreo), Xochimilco, Ciudad de México	• Estradiol • Estrona • Triclosán • Bisfenol A • Pentaclorofenol

Aguas residuales (emisor central y gran canal del desagüe), Ciudad de México	• Estrona • Estradiol • 17α-etinilestradiol
$\mu\text{g/L}$	
Cauce de dos ríos (Coatán y Texcuyuapan), Tapachula, Chiapas	• Naproxeno • Ketoprofeno • Ibuprofeno
Planta de tratamiento de aguas residuales en CU, Zona Metropolitana, Ciudad de México (influyente)	• Ibuprofeno • Naproxeno • Clorofeno • Triclosán • Bisfenol A
Planta de tratamiento de aguas residuales en Coyoacán, Zona Metropolitana, Ciudad de México	• Ibuprofeno • Naproxeno • Clorofeno • Triclosán • Bisfenol A
Planta de tratamiento de aguas residuales en Cerro de la Estrella, Zona Metropolitana, Ciudad de México	• Ibuprofeno • Naproxeno • Clorofeno • Triclosán • Bisfenol A
Planta de tratamiento en Morelia, Michoacán	• Tetraciclina • Cefaclor • Cefadroxilo • Ampicilina • Clonazepam • Lormetazepam • Secobarbital • Maprotilina • Levotiroxina • Cis-androsterona
Planta de tratamiento en Morelia, Michoacán	• Paracetamol • Lidocaína • Bromfeniramina • Fexofenadina • Anfetamina

	• Morfina • Benzoilecgonina • 11-nor-Δ^9-THC-9-COOH • Dimetilanfetamina • Fenciclidina • Metadona • Polietilenglicol
Planta de tratamiento Acapatzingo, Cuernavaca, Morelos	• Ácido salicílico • Acetaminofen • Atenolol • Bezafibrato • Carbamacepina • Diclofenaco • Gemfibrozil • Ibuprofeno • Indometacina • Naproxeno • Sulfametoxazol • Trimetopima
Agua superficial del río Apatlaco, Cuernavaca Morelos	• Ácido salicílico • Acetaminofen • Atenolol • Bezafibrato • Carbamacepina • Diclofenaco • Gemfibrozil • Ibuprofeno • Indometacina • Naproxeno • Sulfametoxazol • Trimetopim
Río Apatlaco, diferentes puntos de muestreo en Cuernavaca, Temixco y Jiutepec, Morelos	• Bisfenol A • 4-nonilfenol • Estradiol • 17α-etinilestradiol

En México, uno de los desafíos importantes es tratar mayor volumen de aguas residuales, se estima que el 65% recolectada reciben tratamiento, mientras que el resto se descarga sin procesar en cuerpos de agua, suelos o canales de riego.

1.2.2. Degradación de contaminantes emergentes (CE) con nanomateriales mediante fotocátalisis heterogénea

En 2022 Gallardo Monroy X. *et al.* realizaron el estudio de la degradación de fármacos mediante fotoctálisis con nanopartículas de ZnO. El consumo de fármacos son excretados a través de la orina y heces, estos desechos tiene como consecuencia ser incorporados a mantos acuíferos. Debido a esto genera gran preocupación por los riesgos a la salud silvestre y así también a la del ser humano. Algunos de estos fármacos son: bezafibrato (BZF), gemfibrozil (GFZ), sulfametoxazol (SMX) y diclofenaco (DCF). En la actualidad existe proceso para la remoción de fármacos hasta un 100% en agua, dentro de estos procesos de oxidación avanzada se encuentra la electroincineración, la ozonación y el Fenton, entre otros. Con el paso del tiempo ha adquirido mayor relevancia la fotocátalisis heterogénea, destacando por sus ventajas en el proceso, no consume reactivos durante el proceso, es de fácil operación, y los materiales con mayor actividad fotocatalítica son accesibles y fáciles de sintetizar [11].

En el año de 2020 Soma Majumder *et al.* investigaron a los Nanomateriales basados en ZnO para la degradación fotocatalítica de soluciones acuosas de residuos farmacéuticos. La principal liberación de los fármacos mediante contaminantes son: pacientes de hospitales, desechos veterinarios, agrícolas y las industrias de fabricación de medicamentos. Dentro de estos residuos se encuentran otros tipos de contaminantes tales como antibióticos, antinoplásicos de platino, medicamentos antiinflamatorios, inhibidores de la neuroamidasa entre otros. Al ser vertidos estos fármacos al medio ambiente son nocivos para

los seres humanos y otras especies, por lo que se busca un tratamiento que permita la mineralización de su estructura molecular. El uso de nanoestructuras como ZnO, ZnO dopado con metal, heteroestructuras de ZnO-MOF, ha servido como alternativa para poder mitigar la crisis de contaminación en el agua por fármacos. Tomando en cuenta en la síntesis los parámetros importantes como el pH del medio de reacción, la naturaleza del disolvente, temperatura, etc [12].

En el 2020 Kiran S. Varma *et al.* desarrollaron el estudio de la degradación fotocatalítica de compuestos farmacéuticos y pesticidas (PPC) utilizando nanomateriales de TiO₂ dopados. En la actualidad se buscan tecnologías avanzadas para el tratamiento de aguas residuales para eliminar los contaminantes, principalmente los compuestos farmacéuticos y pesticidas [13].

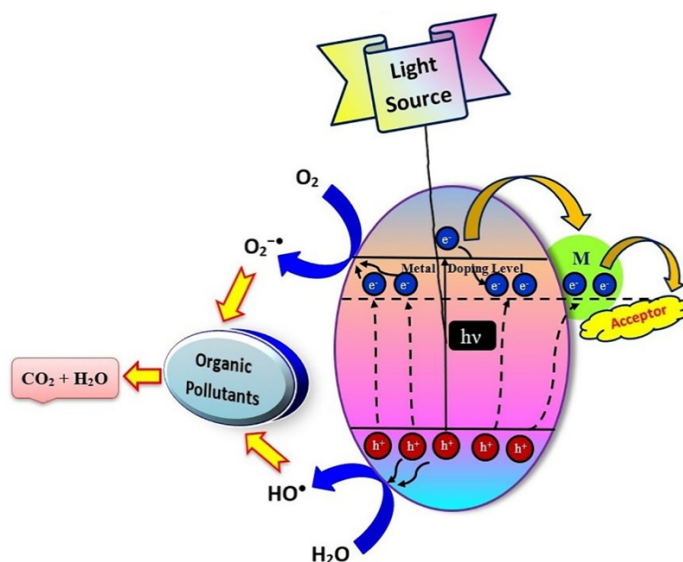


Figura 1. Degradación fotocatalítica mediante el uso de TiO₂ dopado con metal [13].

El uso de nanomateriales dopados para la degradación fotocatalítica de aguas residuales, ha mostrado gran eficiencia para la eliminación de estos contaminantes orgánicos complejos. Teniendo así una mejoría en los nanomateriales dopados, como es el caso de TiO₂, dio lugar al uso de la luz

visible y la luz solar como una fuente de luz. Mostrando un gran potencial para eliminar contaminantes que persisten en la naturaleza. Este tipo de nanomaterial se destacan parámetros como son estabilidad física y química, reutilización, actividad de amplio espectro bajo una variedad de fuentes de luz, incluidas la solar y la visible, y muchas otras [13].

En 2018 Alejandro Pino. Determinó los fármacos en agua residual hospitalaria y su aplicación del proceso de fotocátalisis heterogénea solar para su degradación. Identificó los fármacos en agua residual de un hospital ubicado en el área metropolitana de Monterrey, usando cromatografía líquida de alta resolución acoplada a espectrometría de masas (LC-MS/MS). Para la aplicación de fotocátalisis heterogénea en la degradación y mineralización, con el uso de fotocatalizadores comerciales a base de dióxido de titanio (TiO_2) bajo radiación solar, con variaciones de fotocatalizador. En México se ha reportado el estudio donde cuantificaron cuatro fármacos hasta el año 2018.

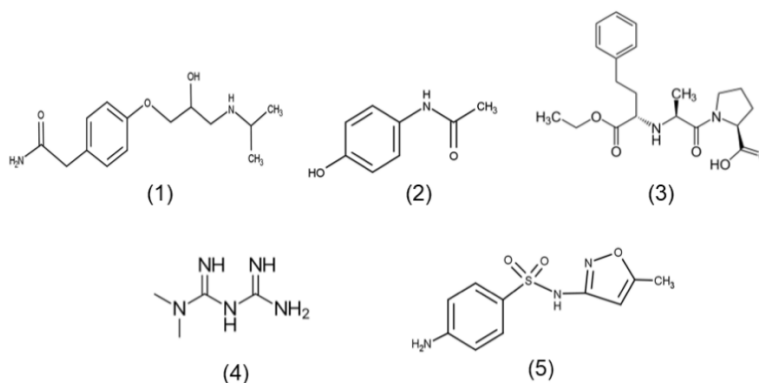


Figura 2. Estructura química de (1) atenolol, (2) acetaminofén, (3) enalapril, (4) metformina, (5) sulfametoxazol [14].

En donde las concentraciones van de 5.1, 6.4, 14.9 $\mu\text{g/L}$, entre otros. Estas concentraciones van desde los fármacos como ibuprofeno, diclofenaco, acetaminofén, naproxeno y ácido salicílico [14].

En el año 2019 Blanca L. Martínez *et al.* realizaron la síntesis en un solo recipiente de materiales nanohíbridos ZnO-Ag y ZnO-Co para aplicaciones fotocatalíticas.

Grandes volúmenes de aguas residuales contienen alta concentración de contaminantes. La aplicación fotocatalítica puede ayudar en la eliminación completa de contaminantes, que persisten a una temperatura y presión ambiente. Dentro de esto se destacan los fotocatalizadores más utilizados son el TiO_2 y ZnO , que tienen como ventaja su fotosensibilidad, estabilidad química, bajo costo y no toxicidad. Como desventaja de estos materiales es que la fotoactividad está restringida en el espectro UV-Visible.

Los colorantes sintéticos constituyen un grupo de contaminantes comúnmente vertidos en aguas residuales de las industrias textil, farmacéutica, alimentaria y curtiduría, entre otras. En particular, las industrias textil y de curtiduría vierten grandes volúmenes de aguas residuales con una alta concentración de colorantes sintéticos. Estos contaminantes son muy estables y muy persistentes en el medio acuático. La descarga de aguas residuales coloreadas en cuerpos de agua puede tener un impacto ambiental, como la producción de problemas estéticos en la coloración del agua y el bloqueo de la penetración de la luz, lo que puede provocar agotamiento del oxígeno y eutrofización [15]. Se han probado varias tecnologías de tratamiento de aguas residuales. Remediar efluentes de las industrias textil; sin embargo, la adsorción, los tratamientos biológicos y los procesos fisicoquímicos son todos ellos métodos ineficientes para la remediación de aguas residuales. Para evitar los efectos ambientales de la descarga de estos desechos, se requieren métodos de oxidación potentes para la degradación efectiva de estos tintes y sus subproductos en las aguas residuales [15].

1.2.3. Resumen de antecedentes

A continuación se presenta una tabla con el título, autores, año de publicación y referencias de los antecedentes previamente descritos.

Tabla 2. Resumen de antecedentes.

Autores	Título	Año de publicación
B. E. J. Cisneros.	Información y calidad del agua en México.	2007
Francisco Javier Aguirre Cedillo.	Estudio de fotocatalizadores nanoestructurados [SrAl ₂ O ₄ :LnX y TiO ₂] para la posible eliminación de Cr ⁶⁺ en efluentes de tenería.	2018
S. Monge, A. Torres Pinto, R. Ribeiro, A. Silva y C. Bengoa.	Manual técnico sobre procesos de oxidación avanzada aplicados al tratamiento de aguas residuales industriales.	2018
Diego Alejandro Pino Sandoval.	Determinación de fármacos en agua residual hospitalaria y aplicación del proceso de fotocátalisis heterogénea solar para su degradación.	2018
B. L. Martínez Vargas, S. M. Durón Torres, D. Bahena, J. L. Rodríguez López, J. M. Peralta Hernández y A. Picos.	Síntesis en un solo recipiente de materiales nanohíbridos ZnO-Ag y ZnO-Co para aplicaciones fotocatalíticas.	2019
S. V. Kiran, T. Rajesh J., S. Kinjal J., J. Pradyuman A.	Degradación fotocatalítica de compuestos farmacéuticos y pesticidas (PPC) utilizando	2020

, S. Atindra D. y G. Vimal G.	nanomateriales de TiO_2 dopados.	
M. Soma, C. Somenath, B. Parita y M. Jaya.	Nanomateriales basados en ZnO para la degradación fotocatalítica de soluciones acuosas de residuos farmacéuticos.	2020
X. Gallardo Monroy, H. F. Olivares Rubio, Á. d. J. Morales Ramírez y J. Hernández Fernández.	Degradación de fármacos mediante fotocatálisis con nanopartículas de ZnO .	2022
J. R. García Barrios y S. Mozka Estrada.	Problemas del agua en México ¿Cómo abordarlos?.	2022
A. Torres, H. A. Rogríguez y M. Ayala.	Contaminantes emergentes en México: panorama actual, retos y una posible solución biotecnológica.	2024

1.3. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

La creciente contaminación en los cuerpos de agua por CE como son: fármacos, pesticidas, productos de cuidado personal, colorantes, etc., es una preocupación que ha captado la atención de la comunidad científica y los encargados de la gestión ambiental, ya que en la mayoría de los casos estos contaminantes no están regulados [16]. Una de las formas de contaminación, es mediante el consumo de fármacos y ser expulsados mediante la orina o heces, así también por la eliminación inadecuada de medicamentos que caducaron o no fueron utilizados. Entre los diversos fármacos, los antibióticos destacan por su impacto, ya que su presencia en el medio ambiente contribuye al desarrollo de resistencia bacteriana, un problema de gran preocupación a nivel global [17]. La presencia de fármacos en los efluentes tiene como consecuencia el deterioro de los ecosistemas acuáticos, afectando la flora y fauna [18]. La aportación a este problema se realiza mediante la investigación a escala laboratorio, ya que la síntesis y aplicación de nanomateriales como fotocatalizadores en el tratamiento de aguas residuales presenta desafíos significativos a nivel laboratorio. La producción de nanomateriales a escala nanométrica con propiedades controladas es compleja, lo que requiere de síntesis precisas. El dopaje de materiales se realiza con el fin de mejorar su eficiencia en la degradación de contaminantes farmacéuticos. La demanda de nanomateriales para la degradación de contaminantes también ha crecido. Sin embargo, la eficacia por sí sola no es suficiente. La búsqueda de tecnologías se ha llevado al estudio de diferentes tipos de nanomateriales para la remoción de fármacos.

1.4. JUSTIFICACIÓN

Por ello, se han desarrollado métodos innovadores y altamente eficaces para la degradación de fármacos en los procesos de tratamiento de aguas, contribuyendo a mitigar su impacto ambiental. A nivel laboratorio se destaca el uso de nanomateriales para abordar la contaminación de fármacos en los efluentes de agua. Esto representa una oportunidad significativa para abordar este problema ambiental, destacando métodos avanzados como la fotocatalisis heterogénea y el uso de nanomateriales, los cuales han demostrado un gran potencial en la eliminación de fármacos presentes en el agua. El dopaje de nanomateriales es una alternativa para mejorar significativamente la eficiencia en los procesos de remoción de fármacos. Lo que provoca la modificación en la propiedades físicas y químicas de manera significativa en los nanomateriales. Al realizar el dopaje es posible mejorar la capacidad de adsorción, oxidación, entre otros. Existen diferentes tipos de nanomateriales eficientes para la remoción de CE, como el dióxido de titanio (TiO_2), óxido de zinc (ZnO) [11]. El ZnO se destaca como nanomaterial y objeto de estudio debido a sus características favorables para este proceso, como su bajo costo, no toxicidad y un ancho de banda de 3.37 eV [19]. Además, el Co se resalta como material dopante ideal, ya que aporta una notable estabilidad y durabilidad, mejorando las propiedades estructurales y ópticas del ZnO , lo que lo hace especialmente efectivo para aplicaciones en la remoción de contaminantes. Lo que beneficiará en el proceso debido a que estos nanomateriales en conjunto mejoran la transferencia de carga, inhiben la recombinación de cargas generadas por el ZnO , aumento en las vacancias de oxígeno. El proceso de síntesis empleado para obtener este nanomaterial dopado es la síntesis hidrotermal, un método ampliamente reconocido por su eficiencia y versatilidad. Este enfoque no solo permite un control preciso sobre la morfología y las propiedades estructurales

del material, sino que también destaca por su economía, ya que utiliza materiales accesibles y de bajo costo. Además, la síntesis hidrotermal es ideal para producir nanomateriales de alta pureza y calidad, lo que la convierte en una opción óptima para aplicaciones avanzadas en la remoción de contaminantes.

1.5. OBJETIVOS

Objetivo general:

- Sintetizar, caracterizar y evaluar nanomateriales de ZnO y ZnO-Co mediante el proceso de fotocátalisis heterogénea para la degradación de los fármacos TMP/SMX y Paracetamol.

Objetivos particulares:

- Sintetizar nanomateriales de ZnO mediante el método hidrotermal.
- Sintetizar ZnO y dopar con Co a concentraciones 2,4 y 6% en relación peso.
- Caracterizar los nanomateriales obtenidos mediante microscopía electrónica de barrido (MEB), difracción de rayos X (DRX), espectroscopia UV-Vis, fluorescencia de rayos X (XRF), espectrofotómetro medidor de color de mano y analizador de área de superficie y tamaño de poro.
- Evaluar la actividad fotocatalítica de los nanomateriales del ZnO y ZnO-Co en la degradación de TMP/SMX y Paracetamol.

1.6. HIPÓTESIS

El uso de ZnO puro se espera que sea efectivo para la remoción de TMP/SMX y paracetamol, sin embargo, el ZnO dopado con cobalto debería mejorar la eficiencia y la actividad fotocatalítica en la degradación de estos fármacos. Este dopaje incrementa la transferencia de carga, favorece la formación de vacancias de oxígeno y promueve una mayor generación de pares electrón-hueco, lo cual aumenta la eficacia en la eliminación de los contaminantes.

CAPÍTULO 2

MARCO TEÓRICO

En este segmento del trabajo, se estructura, ordenan y enlistan los conceptos centrales como aquellos más particulares y especializados que se han tratado a lo largo del proceso investigativo. Estos conceptos han sido meticulosamente organizados, articulados de manera clara y lógica, con la intención de ofrecer una exposición comprensible y fluida para el lector.

2.1. Procesos de oxidación avanzada (PAO)

Los procesos de oxidación avanzada (PAO) se fundamentan en la producción del radical hidroxilo ($\cdot\text{OH}$), debido a su especie altamente reactiva, ya que su eficiencia a la hora de atacar las moléculas orgánicas, puede promover la oxidación de la materia orgánica a alta velocidad de reacción, logrando así la mineralización total de contaminantes recalcitrantes hasta CO_2 , H_2O y iones inorgánicos. Su enfoque es la degradación parcial de los compuestos que puedan ser mayor recalcitrantes, esto para la reducción de la toxicidad y poder incrementar la biodegradabilidad del efluente [14].

Dentro de estos procesos utilizados se encuentran los que utilizan radiación UV (UV, UV/ H_2O_2 , UV/ TiO_2 , fotocátalisis solar, etc.), los que emplean ozono, los que se basan en electron-oxidación y los que se basan en las reacciones Fenton. En ellas destaca la fotocátalisis heterogénea, debido al uso de radiación UV o visibles, ya que ha podido alcanzar la degradación completa de los fármacos [14].

2.2. Fotocátalisis heterogénea

La fotocátalisis es definida como la aceleración de una reacción fotoquímica mediante el uso de un fotocatalizador. Este proceso emplea semiconductores, ya sea en suspensión acuosa o en fase gaseosa, y ocurre cuando el fotocatalizador es irradiado con energía igual o superior a su ancho de banda. Esto acelera la reacción e interactúa con la sustancia a degradar, ya sea a través de un estado excitado o mediante la generación de pares electrón-hueco, lo que produce radicales hidroxilo ($\cdot\text{OH}$) que contribuyen a la destrucción del contaminante [20]. La fotocátalisis heterogénea se basa en la generación de radicales hidroxilo mediante la reacción de óxido-reducción que ocurren en la superficie de un fotocatalizador. Estas reacciones se activan mediante el uso de

UV y la presencia de un agente oxidante, como el oxígeno del aire o el peróxido de hidrógeno [21].

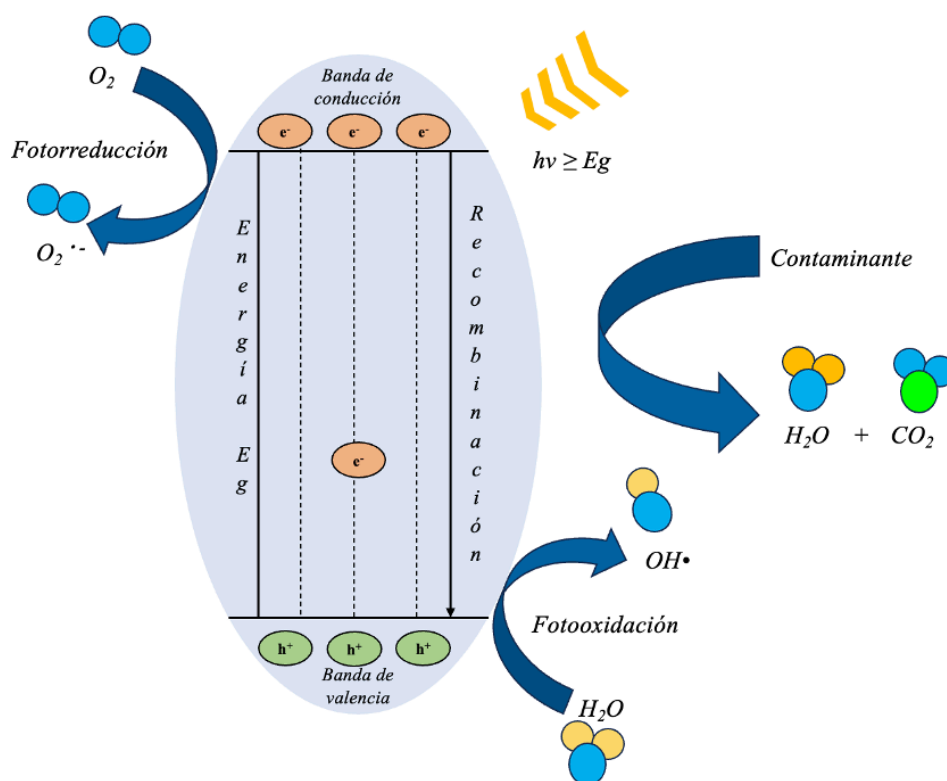


Figura 3. Proceso fotocatalítico mediante irradiación de $h\nu$.

La efectividad en la degradación de contaminantes está influenciada por diversos factores. Entre ellos, destacan el tipo y propiedades del fotocatalizador, tipo y concentración del contaminante, carga del fotocatalizador, pH, temperatura, espectro e intensidad de la irradiación, concentración de oxígeno disuelto y la presencia de sustancias adicionales (materia en suspensión, captadores, etc) [22].

2.3. Catalizador

La Unión Internacional de Química Pura y Aplicada (IUPAC) definió a los catalizadores como “sustancia que aumentan la velocidad de un reacción química sin modificar el cambio en energía libre de Gibbs”. La catálisis

homogénea se define cuando el catalizador se encuentra en la misma fase que lo reactivos, en cambio, en la catálisis heterogénea el catalizador esta en una fase diferente a los reactivos. En la catálisis heterogénea el catalizador es sólido lo que facilita su recuperación [23]. El uso de los catalizadores en la síntesis química de materiales es facilitar los procesos de reacción con energías de activación más bajas y prevenir la formación de subproductos indeseados [24].

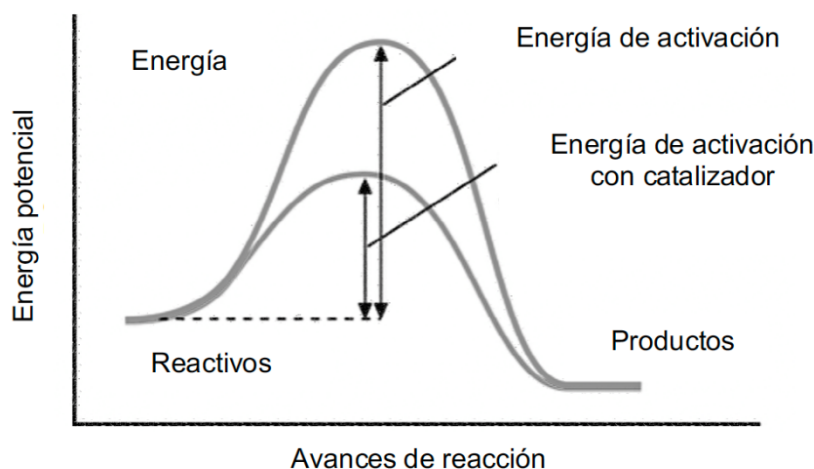


Figura 4. Energía requerida para que ocurra la reacción en procesos catalizados y no catalizados [25].

Como se presenta en la figura 4 el catalizador tiene la función de reducir la energía de activación. En una reacción sin catalizador, la energía potencial necesaria es más alta que cuando se utiliza un catalizador. Los procesos sin catalizador requieren una mayor energía de activación para que la reacción química ocurra, lo que implica la necesidad de temperaturas o presiones más elevadas. En cambio, al emplear un catalizador, el nivel de energía es menor. La energía de activación representa el estado intermedio entre los reactivos y los productos [25].

2.4. Proceso fotocatalítico

A continuación, se describen los principales factores que intervienen e influyen en el proceso fotocatalítico, los cuales desempeñan un papel clave en la eficiencia de la degradación de contaminantes.

2.4.1. Potencial de Hidrógeno (pH)

El pH conocido como potencial de hidrógeno, es una escala numérica que se utiliza para especificar la acidez o alcalinidad de una solución acuosa. Las soluciones ácidas son aquellas con un pH menor a 7, en cambio, las soluciones alcalinas o básicas el pH es mayor a 7 [26]. Las mediciones de pH se utilizan en diferentes ramas como son: científico, medicina, química, agricultura, silvicultura, síntesis de materiales, entre otras. Para medir el pH de las reacciones, se utiliza un pH-metro. Este dispositivo consta de un electrodo que cambia sus propiedades eléctricas (fuerza electromotriz) en función de la concentración de iones H^+ . Al conectar este electrodo a un medidor de fuerza electromotriz o a un circuito eléctrico, es posible determinar indirectamente la concentración de cationes de hidrógeno y, por lo tanto, el pH de la solución. El pH de las soluciones acuosas se puede medir utilizando un electrodo de vidrio, un medidor de pH, o mediante un indicador [27].

2.4.2. Temperatura

Algunas reacciones químicas ocurren casi de inmediato a temperatura ambiente, mientras que otras avanzan lentamente bajo las mismas condiciones. El incremento de la temperatura en una reacción química resulta en una mayor velocidad de reacción. Al aumentar la temperatura estas partículas reactivas se mueven más rápido, esto provoca una mayor frecuencia de encuentros. Así, el aumento de la temperatura no solo incrementa la frecuencia de los encuentros,

sino también el porcentaje de aquellos que son efectivos, lo que lleva a una mayor velocidad de reacción [28].

2.4.3. Intensidad de la luz

Desde la perspectiva microscópica, la interacción de la materia con la luz es un proceso en el que la materia absorbe un fotón, dando lugar a la creación de un par electrón-hueco, o también a la emisión o destrucción de un fotón, lo que produce las excitaciones. De acuerdo a estas interacciones pueden ocurrir en un amplio rango de longitudes de onda y se pueden inducir varios cambios en la estructura de las moléculas. Dependiendo del fotocatalizador se utilizarán radiaciones cercanas al espectro visible o ultravioleta (240-700 nm) ya que son especialmente relevantes en términos ambientales, debido a que interactúan con los electrones de las moléculas [29].

2.4.4. Radical hidroxilo

El radical hidroxilo, $\bullet\text{OH}$, también conocido como radical libre, se refiere a una molécula que cuenta con al menos un electrón desapareado en su orbital más externo. Debido a la presencia del electrón desapareado, estos radicales presentan una alta reactividad. Los radicales están compuestos por un átomo de hidrógeno unido a un átomo de oxígeno, haciéndolos reactivos, lo que les permite sustraer átomos de hidrógeno de otras moléculas para formar moléculas de agua. Es uno de los agentes oxidantes más fuertes [30]. Alguno de los métodos para producir los radicales $\bullet\text{OH}$ son: vía H_2O_2 , vía Ozono, fotocatálisis, electrofotocatálisis, proceso electroquímico, ultrasonido y radiaciones ionizantes [30].

2.5. Semiconductores

Los semiconductores son aquellos materiales con una conductividad eléctrica, en el cual su comportamiento es que a bajas temperaturas son aislantes, caso contrario que cuando aumenta la temperatura estos se comportan como conductores. Esto debido a que los electrones de valencia están ligeramente unidos a sus respectivos núcleos atómicos, pero no lo suficientemente fuerte, por lo que al añadir energía elevando la temperatura se puede abandonar al átomo y moverse a través de la red atómica del material. Se compone por la banda de valencia (BV) y la banda de conducción (BC) existe una banda prohibida de energía; este salto energético no es muy grande, permitiendo que los electrones reciban la suficiente energía para moverse de la BV a la BC. Este salto es posible en materiales con un banda prohibida inferior a 5 [20].

Los semiconductores a escala nanométrica (nanogrupos de semiconductores) tienen el potencial de transformar los campos de la fotooxidación y la fotocatalisis gracias a los efectos combinados del confinamiento cuántico y sus morfologías superficiales únicas [31].

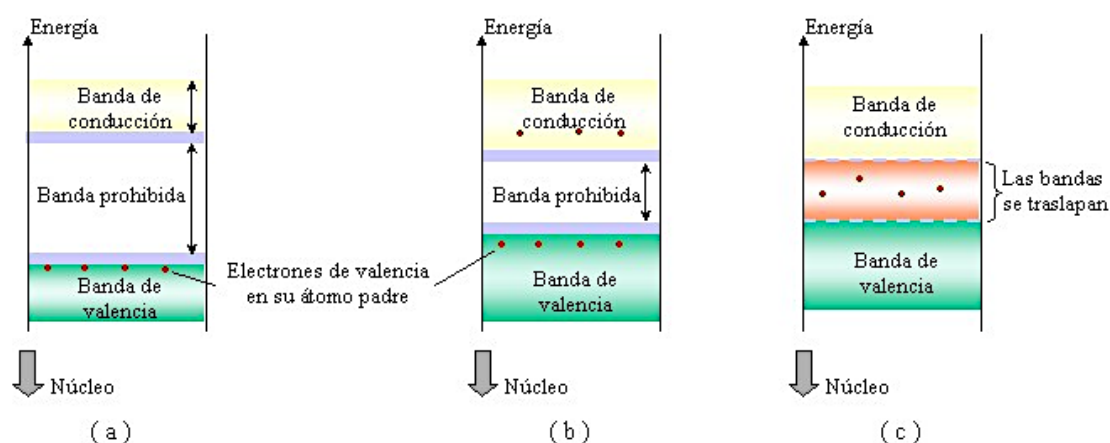


Figura 5. Tipos de bandas de energías de los materiales: a) aislante, b) semiconductor y c) conductor [32].

2.6. Nanomateriales

El término "nanómetro" fue usado por primera vez en 1914 por Richard Adolf Zsigmondy. Más tarde, en 1959, el físico y premio Nobel Richard Feynman presentó el concepto de nanotecnología durante un discurso en la reunión anual de la American Physical Society [33].

Los nanomateriales son materiales con gran demanda debido a sus numerosas aplicaciones prácticas. El tamaño nanómetro se puede interpretar como cinco átomos de silicio o diez átomos de hidrógeno alineados, lo que equivale a un nanómetro. Se considera nanomaterial cuando su tamaño o al menos una de sus dimensiones está entre 1 y 100 nanómetros (nm). Hoy en día, los nanomateriales se usan comercialmente en pinturas, recubrimientos, electrónica, cosméticos, limpieza ambiental, equipos deportivos, sensores y almacenamiento de energía [33].

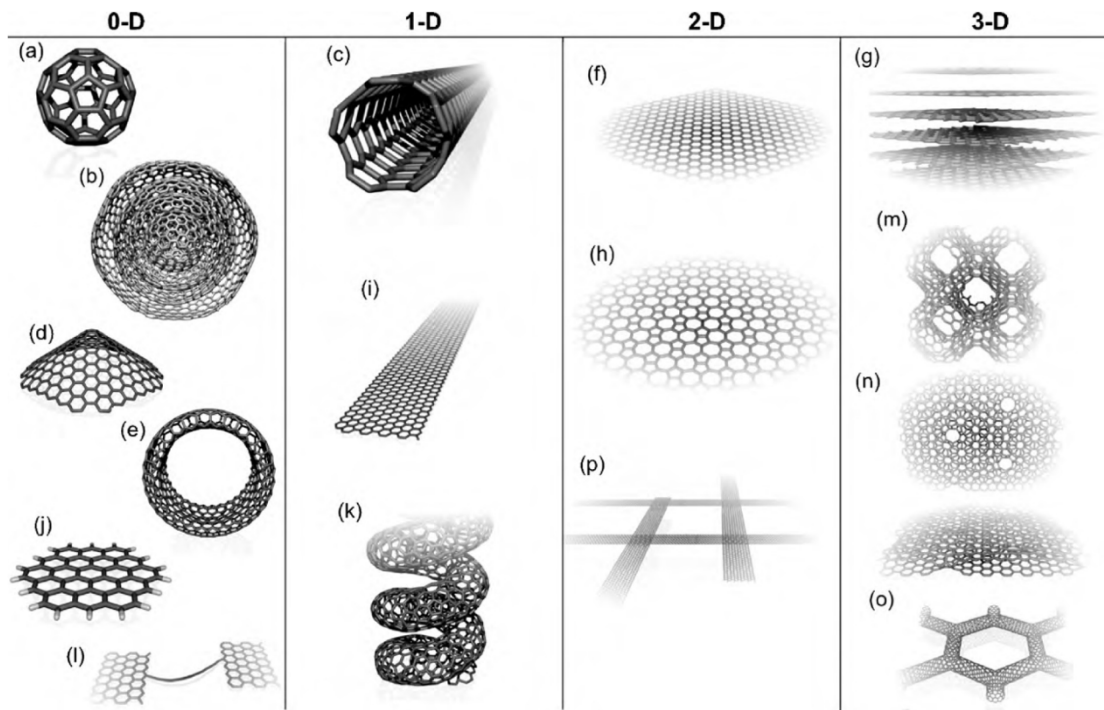


Figura 6. Clasificación de los nanomateriales: (a) C60: Buckminsterfullereno; (b) fullerenos gigantes anidados o cebollas gráficas; (c) nanotubo de

carbono; (d) nanoconos; (e) nanotóroides; (f) superficie del grafeno; (g) cristal 3D de grafito; (h) superficie de Haeckelita; (i) nano-ribones de grafeno; (j) grupos de grafeno; (k) nanotubo de carbono helicoidal; (l) cadenas cortas de carbono; (m) cristales 3D de Schwarzite; (n) nanoesferas de carbono; (o) redes de nanotubos 3D, y (p) redes 2D de nanobarras [34].

2.7. Óxido de Zinc

Las nanopartículas de óxido de zinc (ZnO) han emergido como materiales innovadores en el área de nanociencia y nanotecnología, gracias a sus propiedades físicas y químicas. El ZnO se destaca por ser un semiconductor con una amplia banda prohibida (3.37 eV), alta resistencia de enlace y una gran energía de enlace de excitón a temperatura ambiente de 60 meV. Otras características que posee es un producto económico, relativamente abundante, químicamente estable y no tóxico. Al tener un tamaño nano, la nanoestructuras de ZnO ofrecen ventajas que benefician al material, como su estabilidad química, actividad electroquímica y sus características de alta conductividad electrónica [19] [35]. Las aplicaciones que ha tenido las nanoestructuras de ZnO han sido en biotecnológicas e industriales, como sensores químicos, biosensores, cosméticos, dispositivos ópticos y eléctricos. Debido al ancho de banda del ZnO se utiliza en optoelectrónica de estado sólido, desde el azul hasta el ultravioleta (UV). Las morfologías que ha presentado el ZnO son nanocables, nanobarras, nanocombs, nanoloops y nanohélices. Es insoluble en agua, pero se disuelve en ácidos y bases diluidas; además, su biocompatibilidad y biodegradabilidad lo convierten en un material de interés para sistemas biomédicos y aplicaciones ambientales [19] [20].

El ZnO se puede presentar con 3 estructuras cristalinas, a) Wurtzita hexagonal, b) Blenda de Zinc y c) Sal de Roca (Rocksalt) [20]. A continuación se muestran sus tres estructuras cristalinas. La fase considerada más estable en condiciones ambientales normales es la Wurtzita hexagonal. Para obtener la estructura de

Rocksalt, es necesario trabajar a altas presiones, mientras que la Zincblenda se puede lograr haciendo crecer ZnO sobre sustratos con una estructura cristalina cúbica [20].

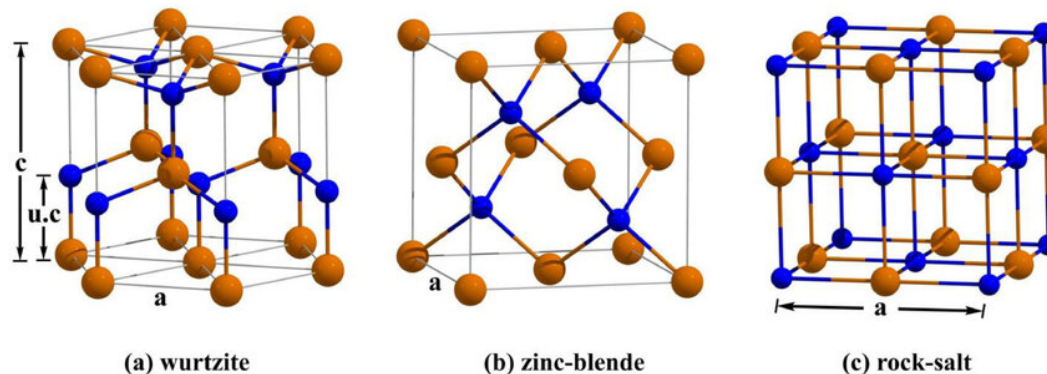


Figura 7. Estructuras cristalinas ZnO [36].

2.8. Cobalto

El cobalto (Co) es un metal perteneciente a la primera serie de transición, se encuentra en el grupo 9 de la tabla periódica. Su número atómico es $Z=27$ y su configuración electrónica es $[\text{Ar}] 3d^7 4s^2$. Este metal tiene un solo isótopo natural estable (α -Co) y un peso atómico de 58.93. El radio metálico que posee es de 1.25 Å, su densidad es de 8.9 g/cm³. A temperatura ambiente adopta una estructura de empaquetamiento hexagonal compacto (α -Co), mientras que por encima de 417°C, la estructura es cúbica compacta (β -Co) [37] [38].

En las soluciones acuosas de sales de Co en agua torna el color rosa y contiene la especie octaédrica $[\text{Co}(\text{H}_2\text{O}_6)]^{+2}$. El cobalto se ha usado en este campo de la fotocatalisis debido a las reacciones de óxido-reducción [37]. El cobalto se emplea en diversas aplicaciones, incluyendo aleaciones y superaleaciones para la fabricación de piezas en motores de aeronaves, turbinas de gas, aceros de alta velocidad, aleaciones resistentes a la corrosión y carburos cementados. También se utiliza en imanes y medios de grabación magnéticos. Las nanopartículas de cobalto destacan por sus sobresalientes propiedades magnéticas, eléctricas y

catalíticas, lo que las convierte en un foco de interés tanto científico como tecnológico en diversos ámbitos. En la industria petrolera y química, se emplea como catalizador, mientras que en pinturas y tintas actúa como agente secante [37] [39].

2.9. Óxido de Zinc-Cobalto (ZnO-Co)

El ZnO es un semiconductor con una energía de banda prohibida de aproximadamente 3.3 eV a temperatura ambiente. Es un recurso abundante en la naturaleza y puede ser sintetizado fácilmente mediante técnicas de crecimiento económico y escalables, lo que lo convierte en una opción atractiva para aplicaciones industriales. En los últimos años, el dopaje de ZnO con metales de transición ha despertado un gran interés científico, debido a su capacidad para incorporar propiedades magnéticas al material a temperatura ambiente. El dopaje del metal de transición como el Co es realmente interesante, ya que combina propiedades magnéticas con la capacidad de modificar sus características optoelectrónicas, lo que permite mayor adsorción de luz en la región visible [40]. El ZnO tiene una estructura cristalina estable llamada wurtzita. En su estructura los átomos de Zinc (Zn) y O (oxígeno) están organizados de forma que los electrones en el material forman bandas. La BV (se encuentran los electrones menos energéticos) está denominada por lo electrones del oxígeno, mientras que la BC (donde están los electrones más energéticos) está formada por los electrones del zinc. Cuando se dopa el ZnO con Co, los iones de Co^{2+} reemplazan algunos de los iones de Zn^{2+} en la estructura. Lo que causa una interacción especial entre los electrones de Co y los electrones de ZnO. Como resultado, la energía que separa la BV y la BC se reduce, haciendo que el material absorba luz con menos energía. Esto se debe a

la interacción entre los electrones de los orbitales de Co y los electrones de las bandas del ZnO [40].

2.10. Contaminantes emergentes

Los contaminantes emergentes (CE) son principalmente sustancias químicas derivadas de actividades humanas que no están reguladas. Estos contaminantes se encuentran en bajas concentraciones en diversos entornos, como el aire, agua, suelo, alimentos e incluso en los tejidos de humanos y animales. Dentro de los principales CE se incluyen compuestos orgánicos como farmacéuticos, artículos de cuidado personal, hormonas, aditivos alimenticios, pesticidas, plásticos, conservantes de madera, detergentes, desinfectantes, surfactantes, retardantes de llama y otros compuestos generados por la actividad humana y presentes en el agua [41].

La regulación internacional sobre los contaminantes emergentes (CE) en el agua es liderada por organismos como la Agencia de Protección Ambiental de los Estados Unidos (US EPA), la Organización Mundial de la Salud (OMS) y la Directiva sobre Agua Potable (DWD). de la Unión Europea. Sin embargo, los tratamientos y la gestión de aguas residuales dependen de las condiciones específicas de cada región, por lo que las normativas ambientales varían según el territorio donde se realiza el tratamiento [41].

2.10.1. Fármacos

En todo el mundo, los productos farmacéuticos son compuestos complejos utilizados ampliamente. Cada año, se sintetizan cientos de nuevos productos para reemplazar a los que han quedado obsoletos. Actualmente, se emplean miles de moléculas activas diferentes para tratar o prevenir enfermedades. Los fármacos han sido detectados en aguas subterráneas, superficiales e incluso en el agua potable. Un proveniente de la contaminación son las excreciones

humanas, que eliminan una parte del fármaco sin metabolizar, sino también de la producción y eliminación inadecuada de estos productos. Se ha informado que, independientemente del cuerpo del agua analizado, se pueden encontrar de 30 a 60 productos farmacéuticos [42].



Figura 8. Productos farmacéuticos encontrados en el medio ambiente [42].

La concentración de los compuestos en el agua es del orden de partes por billón, similar a los pesticidas. Los medicamentos están diseñados para tener ciertas características; aproximadamente el 30% son lipofílicos, lo que significa que se disuelven en grasa, pero no en agua. Esta propiedad les permite atravesar las membranas celulares y actuar dentro de ellas. Esto también implica que, una vez que ingresan a los cuerpos de agua, pueden entrar en la cadena alimentaria [42].

2.10.1.1. Paracetamol

El paracetamol está recomendado para pacientes con úlcera gástrica y duodenal, gastritis, hernia hiatal, alergia a los salicilatos y aquellos con hemofilia o que están en tratamiento con anticoagulantes. Se ha informado que dosis tóxicas de paracetamol pueden causar daños en el hígado, riñones, corazón y sistema nervioso central (SNC). En particular, el daño hepático puede desarrollarse en cuestión de horas debido a procesos de oxidación.

El paracetamol es un analgésico, antipirético seguro y eficaz, ampliamente disponible de uso común. Anualmente se producen 145,000 toneladas de paracetamol en el mundo. Su liberación en el medio ambiente es preocupante, ya que los procesos de tratamiento de aguas residuales pueden transformarse en metabolitos tóxicos, que ingresan a la cadena alimentaria. Su principal vía de contaminación es su excreción inalterada en la orina y en las heces, también por descargas accidentales, eliminación doméstica a través de los baños y actividades de las plantas de tratamiento de aguas residuales [43].

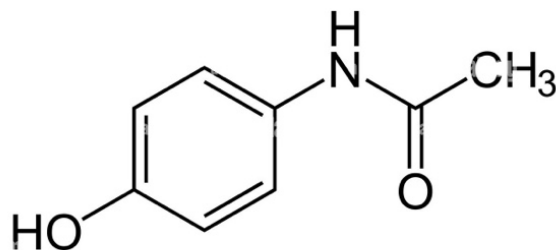


Figura 9. Estructura química paracetamol [43].

2.10.1.2. Trimetoprima con sulfametoxazol

La trimetoprima con sulfametoxazol (TMP/SMX) corresponde a la familia de antibióticos. Estos antibióticos son medicamentos empleados para tratar infecciones bacterianas. Además de su uso en humanos, se aplican en pequeños animales como perros y gatos, en la industria ganadera como promotores de crecimiento y en granjas de peces como aditivos alimentarios. Su uso intensivo ha contribuido significativamente al desarrollo de bacterias resistentes a los antibióticos. Estas sustancias ingresan a las aguas residuales principalmente a través de la orina y las heces, pero también pueden llegar a los sistemas de aguas residuales debido a la eliminación inadecuada de medicamentos vencidos o no consumidos. Actualmente, los antibióticos se consideran contaminantes emergentes, ya que son difíciles de degradar con métodos convencionales y sus efectos ambientales no están completamente comprendidos. Desafortunadamente, las plantas de tratamiento de aguas residuales (PTAR) no eliminan eficazmente los antibióticos, ya que los sistemas biológicos como los lodos activados son ineficientes para su degradación [18].

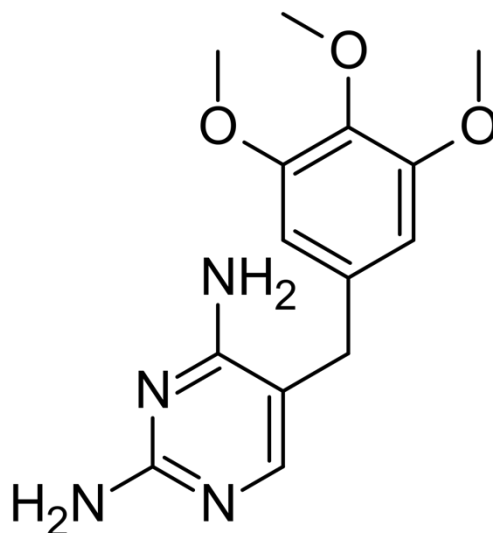


Figura 10. Estructura química TMP/SMX [18].

2.11. Síntesis de nanomateriales

La síntesis de materiales energéticos ha sido un tema de gran interés debido a su potencial para ser mejorados y adaptados. Diversos métodos han sido desarrollados para modificar la síntesis de estos materiales, los cuales pueden almacenar y transformar energía. Sin embargo, se ha observado que su funcionalidad y aplicaciones dependen en gran medida de propiedades como la superficie, la morfología y el tamaño. Estas características están determinadas por el método de síntesis empleado, incluyendo los procesos químicos y las etapas específicas del procedimiento [44] [45].

2.11.1. Síntesis hidrotermal

La síntesis hidrotermal es una técnica efectiva para ajustar la morfología de los materiales modificando las condiciones de síntesis. Se ha demostrado que distintas morfologías pueden mejorar de manera significativa las propiedades específicas necesarias para aplicaciones concretas. Esta técnica se ha utilizado para fabricar diversas estructuras o morfologías de ZnO, como nanopartículas mesoporosas, nanobarras, nanocables, esferas huecas, nanocintas y nanotubos.

El mecanismo general de la síntesis hidrotermal consta de dos etapas principales: primero, el precursor se disuelve en un solvente adecuado, descomponiéndose en iones individuales. Luego, en la segunda etapa, ocurre la cristalización en condiciones de sobresaturación (cuando se alcanza la máxima solubilidad del precursor), lo que facilita la nucleación y el crecimiento de partículas hasta obtener el producto final. La formación de nanopartículas mediante el método hidrotermal es sencilla y rentable, ya que no requiere un alto consumo de recursos energéticos [46] [25].

2.12. Caracterización de materiales

La importancia de la caracterización de nanomateriales radica en que cada uno posee propiedades físicas y químicas específicas, como su dimensión, geometría, estructura, morfología superficial, peso molecular, características térmicas y de conductividad eléctrica. Actualmente, existen técnicas avanzadas de caracterización que permiten identificar estas propiedades de manera detallada y nos permite comprender los cambios físicos o químicos antes y después de su fabricación. Esta evaluación es esencial para determinar la eficiencia de los nanomateriales en diversas aplicaciones. Por lo tanto, la caracterización de nanoestructuras es crucial para garantizar la confiabilidad y seguridad de los nanomateriales [47] [48]. Algunas de las caracterizaciones aplicadas a los nanomateriales son: Microscopía Electrónica de Barrido (MEB), Microscopía de Transmisión de Electrones (MET), Espectroscopía de Energía Dispersa de Rayos-X (EDS), Microscopía de Fuerza Atómica, Difracción de Rayos-X (DRX), Espectroscopía UV-Vis, etcétera [25] [20].

2.12.1. Colorimetría

La medición de colorimetría se realiza mediante un espectrofotómetro portátil o un medidor de color que permite una evaluación precisa y rápida de las características cromáticas de las muestras. Estos dispositivos inteligentes cuentan con tecnología avanzada que proporciona mediciones de color basadas en la luz reflejada por la muestra. La medición se realiza de acuerdo con las especificaciones del instrumento y siguiendo los estándares de la escala CIE de colorimetría, que permite representar los colores en un sistema cuantificable. Los instrumentos de medición de color inteligentes pueden ofrecer resultados en formatos como:

- CIE $L^* a^* b^*$ representan: Proporciona tres parámetros, donde L^* mide la luminosidad, a^* y b^* los componentes cromáticos en los ejes verde-rojo y azul-amarrillo, respectivamente.
- CIE $L^* C^* h^*$: Ofrece valores de luminosidad (L^*), saturación (C^*) y matiz (h^*), que describen la intensidad del color y el tono específico.

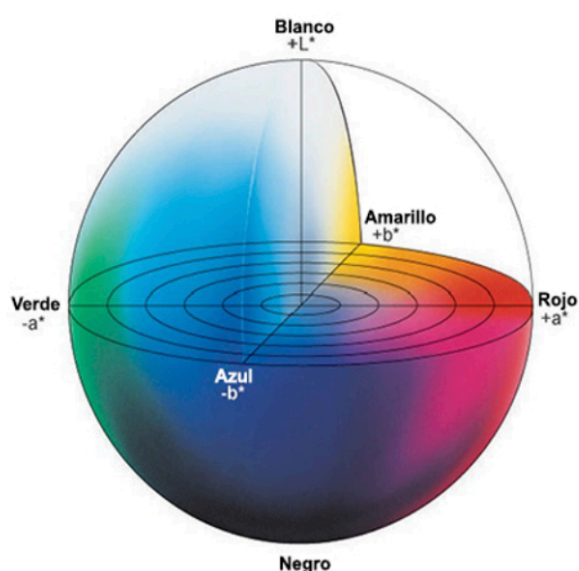


Figura 11. Espacio CIELab; espectro de colores visibles por el ojo humano [49].

Estos instrumentos son capaces de proporcionar lecturas rápidas y precisas, que se pueden correlacionar con la escala CIE para obtener un análisis detallado del color. La relación con la escala CIE es fundamental, ya que permite a los medidores de color inteligentes interpretar el color de la muestra en términos estandarizados y comparables con otros colores o muestras de referencia [50] [51].

2.12.2. Difracción de rayos X (DRX)

La caracterización por difracción de rayos X es una técnica no destructiva utilizada para analizar las estructuras, fases, orientaciones cristalina, tamaño medio de grano, tensión, defectos cristalinos y otros aspectos estructurales de materiales cristalinos. Se emplea específicamente en caracterizar y determinar la cristalinidad de las nanopartículas sintetizadas. En los análisis de resultados se obtienen picos de difracción, donde se puede identificar si las nanopartículas presentan una estructura cristalina o amorfa [52].

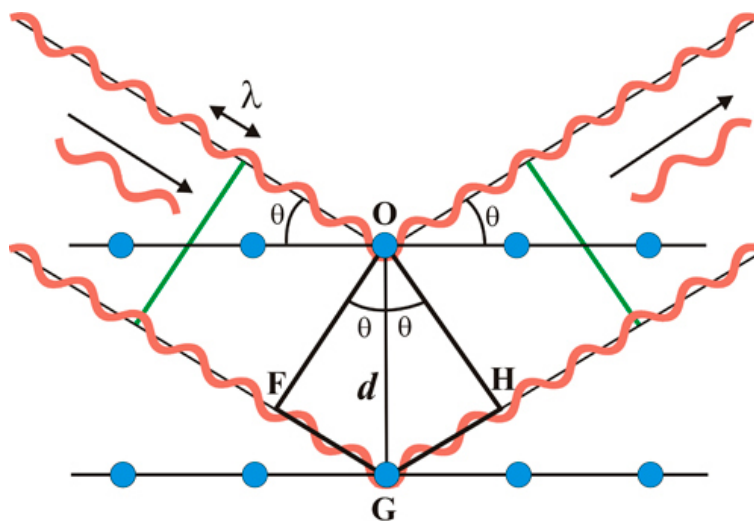


Figura 12. Interacción de los rayos X con la estructura cristalina [53].

Como se presenta en la figura 12 los rayos X interactúan con un átomo, en el material cristalino, sus electrones se convierten en una fuente que dispersa ondas electromagnéticas en todas las direcciones con una longitud de onda (λ)

de la radiación incidente. Los planos que se describen por los índices de Miller (hkl), orientados con el haz incidente, siguen la ecuación de Bragg (ecuación 1).

$$2d\sin\theta = n\lambda \quad \text{Ecuación 1}$$

Donde λ es la longitud de onda de la radiación incidente, d es la distancia interplanar, θ es el ángulo formado entre el haz incidente y el haz difractado, en grados ($^{\circ}$), y n es el orden de difracción, que es un número entero [54].

2.12.3. Espectroscopía UV-Visible (UV-Vis)

La espectroscopía UV-Vis (Ultravioleta-Visible) es una técnica analítica, no destructiva, versátil, sencilla y rentable que resulta adecuada para un amplio espectro de compuestos orgánicos y algunas especies inorgánicas. Es una técnica de caracterización económica, rápida y fácil de usar, ampliamente empleada en el análisis de nanomateriales. Esta caracterización se utiliza en muchas áreas de investigación, como análisis de nanomateriales, agricultura, industria alimentaria, etc. Esta técnica se lleva a cabo mediante los espectrofotómetros UV-Vis, es un instrumento que mide como un material absorbe o transmite la luz en función de su longitud de onda. Principalmente, envía luz ultravioleta o visible a través de una muestra y registra cuánta luz pasa (transmisión) o es absorbida [55] [56]. Muchos nanomateriales poseen propiedades ópticas que dependen de factores como su forma, tamaño, grado de aglomeración, concentración y el índice de refracción en su superficie. Estas características hacen que la espectroscopia UV-Vis sea una herramienta clave para estudiar y caracterizar este tipo de materiales [56].

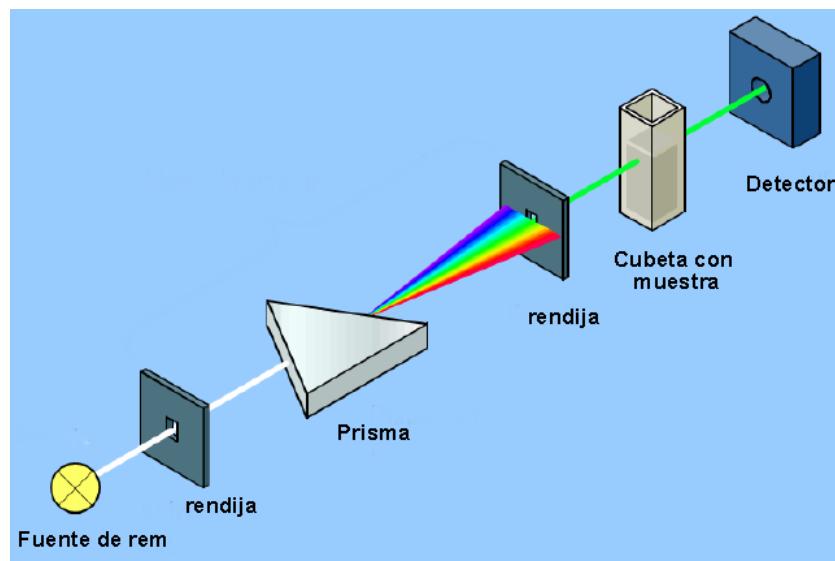


Figura 13. Esquema de un espectrofotómetro UV-Vis [57].

2.12.4. Microscopía electrónica de barrido (MEB)

La microscopía electrónica de barrido es una técnica avanzada, que consiste en el uso de un microscopio electrónico de barrido, que se encarga de generar imágenes mediante la detección, procesamiento y visualización de las señales producidas por la interacción de un haz de electrones de alta energía en la materia. Mediante esta caracterización se permite obtener información detallada sobre la topografía, estructura y composición de la muestra en tres dimensiones (ejes X, Y y Z), con la posibilidad de variar la orientación mediante dos ejes de rotación. El microscopio consta de un haz de electrones de alta energía, con un rango de entre 5 y 30 kV, este es generado por un cañón electrónico ubicado en una columna de alto vacío. Este se origina en un filamento emisor, cuyos electrones son acelerados por un ánodo polarizado positivamente. Después, el haz es colimado y enfocado sobre la superficie de la muestra mediante lentes electrónicas. Una vez que el haz de electrones interactúa con la muestra, genera señales que contienen información específica del material [58].

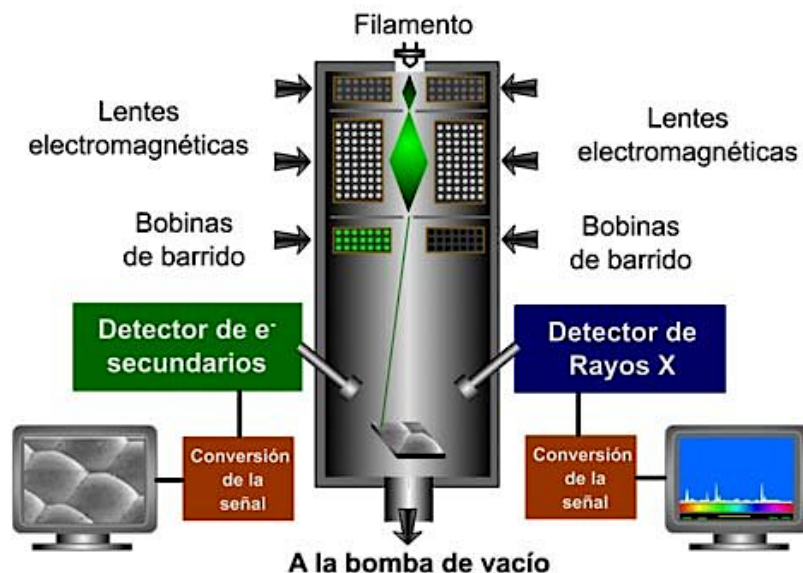


Figura 14. Microscopio electrónico de barrido [59].

Las imágenes se obtienen escaneando la superficie de la muestra línea por línea en un movimiento de barrido sobre una zona rectangular. Cuando el haz se va desplazando, las señales emitidas varían en intensidad dependiendo del punto a analizar. Las señales son detectadas, amplificadas y procesadas, tanto de manera analógica como digital, para ser visualizadas en el monitor. Esta caracterización se utiliza ampliamente debido a su capacidad para proporcionar imágenes amplificadas con alta resolución y detalle, siendo así una herramienta fundamental para analizar materiales en diversas disciplinas tecnológicas y científicas [58] [60].

2.12.5. Fluorescencia de rayos X (FRX)

La espectroscopía de fluorescencia de rayos X (FRX) es una técnica que se utiliza para identificar los elementos presentes en un material, su concentración, es empleada para analizar cualitativa y cuantitativamente muestras en forma de polvo. Funciona enviando un haz de rayos X al material, lo que excita a los átomos y hace que emitan una luz especial llamada fluorescencia secundaria. La

cantidad de luz fluorescente que emite cada elemento depende directamente de su concentración en el material. Al analizar los espectros (los patrones de luz emitidos), se puede identificar qué elementos están presentes en la muestra y en qué cantidad [61] [62].

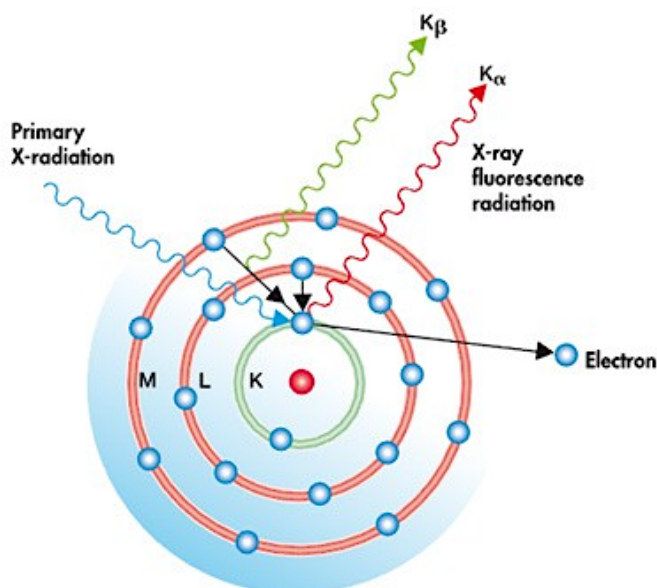


Figura 15. Análisis de la fluorescencia de rayos X [63].

Como se muestra en la figura 15 se basa en la capacidad de átomos para absorber rayos X de longitud de onda corta o rayos gamma, con fotones que tienen suficiente energía para expulsar electrones de las capas internas del átomo. Esto genera vacíos electrónicos en el núcleo. Para llenar estos vacíos, los electrones de las capas externas caen a las capas más internas, liberando el exceso de energía en forma de fotones de rayos X, conocidos como fluorescencia. La energía de las fotografías emitidas está determinada por las diferencias de energía entre los niveles electrónicos involucrados, lo que da lugar a la emisión de rayos X características para cada elemento (como las líneas $K\alpha$ y $K\beta$). Esta emisión depende directamente de las características del núcleo del elemento analizado, lo que permite identificar la composición elemental de la muestra [61] [63].

2.12.6. Método BET (Brunauer-Emmett-Teller)

La teoría de BET se centra en el proceso de adsorción de un gas sobre la superficie de un material, el cual es influenciado por la fuerza de van der Waals. Estas fuerzas generan una capa de adsorbato, compuesta por átomos, iones o moléculas que se adhieren a la superficie del material. La adsorción puede ser física o química: la adsorción física se basa en las fuerzas de van der Waals, mientras que la adsorción química resulta de una interacción química entre el gas y el sólido. La cantidad de gas adsorbido está directamente relacionada con el área superficial del material. La teoría BET está vinculada a la teoría de Langmuir, que plantea que las moléculas de gas se adsorben en una sola capa sobre la superficie, lo que se considera una situación ideal. En este caso, todas las moléculas adsorbidas están en contacto directo con la superficie del material. Esta adsorción puede ocurrir de manera ordenada, con las moléculas estrechamente empaquetadas, o dispersas sobre la superficie. En el caso de la adsorción multicapa, más de una capa de moléculas de gas se adhiere al material, lo que significa que no todas las moléculas están en contacto con la superficie. Esto genera interacciones entre las moléculas de gas, similares a las interacciones entre gas y sólido, lo que da lugar a la adsorción de gas en las capas superiores [64] [65]. Como resultado, el gas se condensa en una fase líquida. Este fenómeno de adsorción multicapa es común cuando la temperatura de la superficie es más baja que la temperatura crítica de las moléculas de gas. A medida que se forman más capas de moléculas de gas, la presión aumenta hasta alcanzar la presión de vapor de saturación, provocando la condensación del gas. Tras la adsorción monocapa y multicapa en las paredes de los poros, se produce la condensación capilar, llenando los poros con gas condensado. Este fenómeno ocurre por debajo de la presión de vapor de saturación, debido a la mayor interacción entre las moléculas de gas en el espacio confinado del poro.

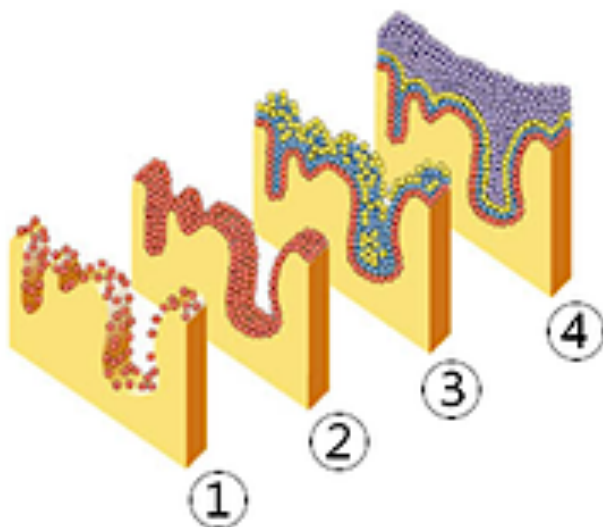


Figura 16. Supercifre de área. 1) la superficie se desgasifica para eliminar especies adsorbidas, 2) se forma un recubrimiento llamado monocapa, 3) al aumentar la presión se adsorben múltiples capas de moléculas de gas y 4) Este punto marca la finalización de la isoterma de adsorción [66].

En la teoría BET, supone que la adsorción multicapa está en equilibrio, y no hay interacción entre las capas, lo que permite usar la ecuación de Langmuir para cada capa. Las moléculas de las capas inferiores actúan como sitios de adsorción para las moléculas de las capas superiores [65]. La ecuación BET se define de la siguiente manera:

$$\frac{\frac{P}{P_0}}{n\left(1-\frac{P}{P_0}\right)} = \frac{1}{n_m C} + \frac{C-1}{n_m C} \left(\frac{P}{P_0}\right) \quad \text{Ecuación 2}$$

donde n es la cantidad específica del gas adsorbido a la presión relativa P / P_0 , n_m es la capacidad de monocapa del gas adsorbido, P es la presión, P_0 es la presión de saturación de una sustancia que se adsorbe a la temperatura de adsorción y C es la constante BET que está relacionada exponencialmente con la energía de adsorción de la monocapa. A partir del parámetro C , se puede obtener la forma de una isoterma en el rango BET [65].

2.12.7. Espectroscopía Infrarroja por Transformada de Fourier (FT-IR)

La espectroscopía infrarroja es una tecnología utilizada para adquirir espectros de emisión o absorción infrarroja de muestras sólidas, líquidas o gaseosas. Esta técnica permite obtener la huella dactilar molecular de una muestra biológica, ya que las moléculas absorben la radiación infrarroja de acuerdo con sus enlaces químicos y estructuras específicas. Esta absorción genera diferentes modos vibracionales, como estiramiento simétrico y antisimétrico, así como movimientos de meneo, torsión y balanceo. En el caso del análisis de líquidos, se utilizan celdas de transmisión o técnicas de reflexión para evaluar la composición molecular e identificar interacciones intermoleculares con alta precisión. En el análisis de líquidos, se emplean celdas de transmisión o técnicas de reflexión para obtener datos precisos sobre la composición molecular y las interacciones intermoleculares de las muestras [67]. La FT-IR se emplea en diferentes campos de investigación, como geología, química, materiales, ciencia de los alimentos y biología, para caracterizar alimentos y envases biológicos, así también para identificar contaminantes. En el caso de líquidos, la espectroscopía infrarroja es ampliamente utilizada para analizar la composición de soluciones biológicas, detectar la presencia de impurezas, y evaluar cambios estructurales en función de parámetros como la temperatura, el pH y la concentración [68] [67].

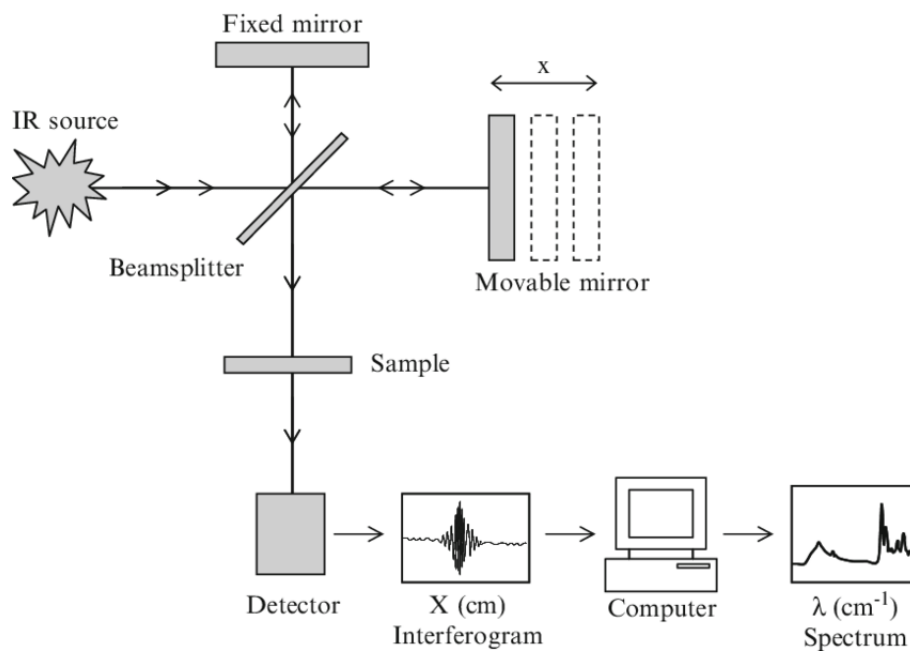


Figura 17. Espectroscopía Infrarroja por Transformada de Fourier (FT-IR)
[69].

CAPÍTULO 3

METODOLOGÍA EXPERIMENTAL

En este capítulo se detallan los materiales, reactivos y el proceso utilizado para sintetizar ZnO y ZnO-Co. Se incluye la caracterización estructural, óptica y morfológica de los nanomateriales obtenidos, llevada a cabo en los laboratorios de IIIER-UNICACH, LaMPSus. Asimismo, se proporciona una descripción de los ensayos experimentales realizados para evaluar la aplicación fotocatalítica de los diferentes nanomateriales de ZnO y ZnO-Co en la degradación de TMP/STM y paracetamol.

3.1. Síntesis de ZnO y ZnO-Co

La preparación de los nanomateriales de ZnO y ZnO-Co se realizó utilizando el método hidrotermal. Este proceso implica la reacción química de precursores en solución acuosa a baja temperatura. El dopaje de cobalto se llevó a cabo durante la síntesis, donde se introdujo cobalto en la estructura cristalina del ZnO para modificar y mejorar sus propiedades. Este procedimiento de dopaje es crucial para ajustar las características de los nanomateriales, como la morfología, la estructura cristalina, la conductividad y la actividad fotocatalítica. Como se detalla a continuación.

3.2. Reactivos y equipos para la síntesis hidrotermal de ZnO y ZnO-Co

En la tabla 3 se presentan los reactivos y solventes usados para la síntesis hidrotermal de nanomateriales de ZnO y ZnO-Co.

Tabla 3. Reactivos y solventes para la síntesis hidrotermal de ZnO y ZnO-Co.

Reactivo	Fórmula Química	Pureza (%)	Marca
Acetato de Zinc dihidratado	$(\text{CH}_3\text{COO})_2\text{Zn} \cdot 2\text{H}_2\text{O}$	99.7	Fermont
Hidróxido de sodio	NaOH	97	Meyer
Alcohol metílico	CH_3OH	99.8	Meyer
Agua destilada	H_2O destilada	99	Whitewaters Chemistry
Nitrato de Cobalto hexahidratado	$\text{Co}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$	98	Meyer

En la tabla 4 se encuentran los equipos que se utilizaron para la síntesis hidrotermal de ZnO y ZnO-Co.

Tabla 4. Equipos utilizados para el desarrollo de la síntesis hidrotermal ZnO y ZnO-Co.

Equipo	Marca
Parrilla	Cole-Palmer
Balanza analítica	Velab
Mufla	Felissa
Centrifugadora	MPW
Peachímetro	Bante

3.3. Síntesis hidrotermal

3.3.1. Síntesis hidrotermal de ZnO

Para la síntesis de ZnO se empleó el método hidrotermal. Se comenzó pesando 2.72 g de $(\text{CH}_3\text{COO})_2\text{Zn} \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, los cuales se disolvieron en 60 mL de agua destilada. Luego de mezclar y agitar la solución magnéticamente en una parrilla de agitación/calentamiento durante 30 minutos a temperatura ambiente, se ajustó el pH a 9 mediante la adición gradual de una solución de NaOH al 1M. Posteriormente, la solución se trasladó a una autoclave de acero inoxidable de $17.48 \times 5 \times 5 \text{ cm}^3$ (120 ml), la cual fue sellada herméticamente y calentada en una parrilla de agitación/calentamiento a 90 °C durante 2 horas. Tras enfriarse la autoclave a temperatura ambiente, la mezcla se vertió en contenedores y se centrifugó a 3500 rpm durante 15 minutos mediante una centrifugadora. A continuación, el precipitado se filtró, lavándolo cuatro veces con agua destilada y metanol. El sólido obtenido se secó en una parrilla de calentamiento a 60 °C durante 30 minutos. Finalmente, la muestra se calcinó a 600 °C durante 4 horas

en una mufla, se enfrió a temperatura ambiente, se etiquetó y almacenó para su posterior caracterización.

En la figura 18 se detalla el procedimiento llevado a cabo para sintetizar ZnO mediante el método hidrotermal.

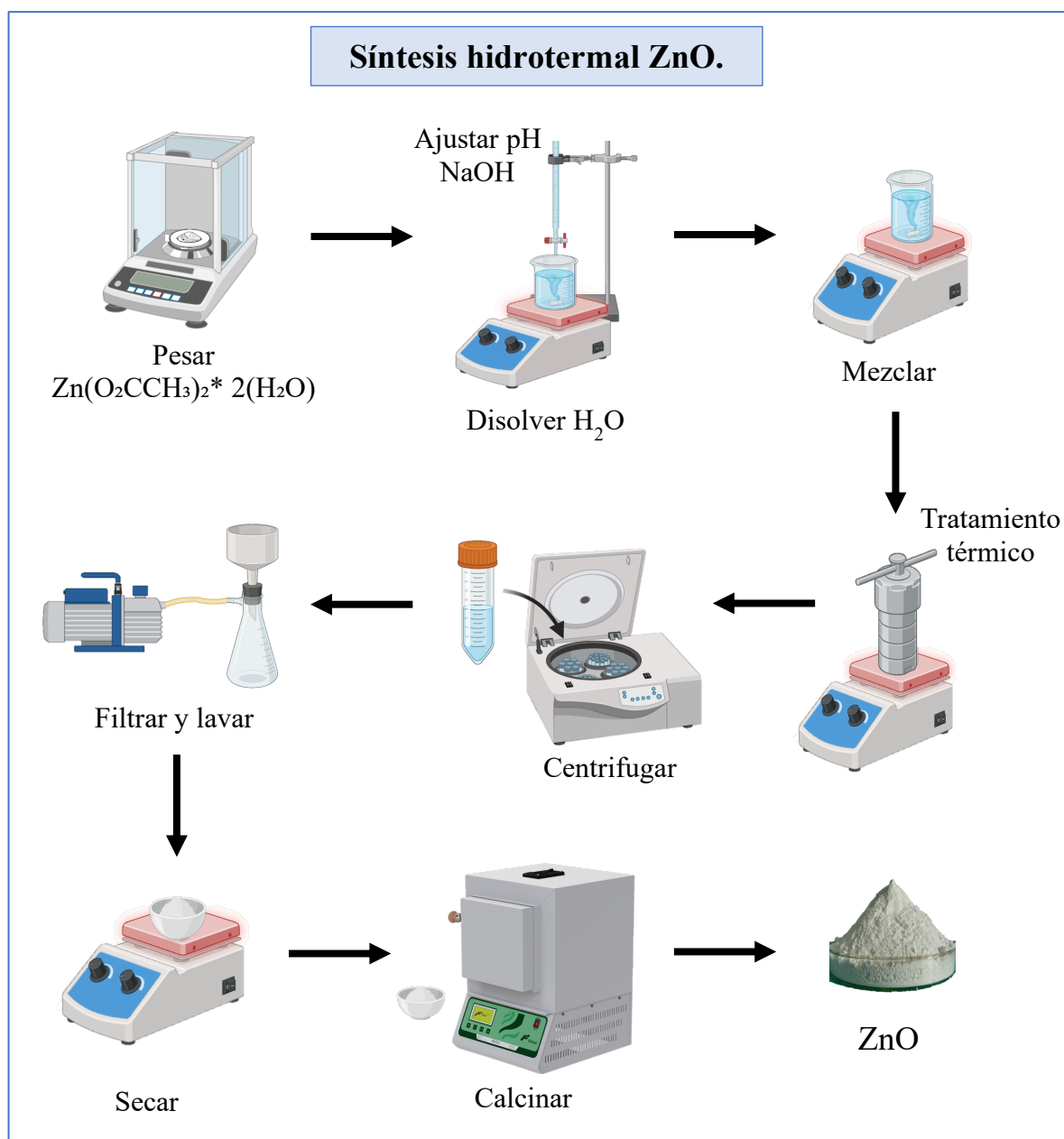


Figura 18. Síntesis de ZnO por el método hidrotermal.

3.3.2. Síntesis hidrotermal para el dopaje de ZnO-Co

Se empleó el método hidrotermal para la síntesis de ZnO dopado con Co. Inicialmente, se disolvieron 2.72 g de $(\text{CH}_3\text{COO})_2\text{Zn} \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, en 60 mL de agua destilada. La solución resultante se agitó magnéticamente durante 30 minutos a temperatura ambiente en una parrilla de agitación/calentamiento. Se ajustó a pH 9 agregando gradualmente una solución de NaOH al 1M. Posteriormente, se agregó $\text{Co}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ en porcentajes de 2%, 4% y 6% en relación peso, y se agitó durante 30 minutos. La solución se transfirió a una autoclave de acero inoxidable de 17.48x5x5 cm³ (120 ml) y se calentó a 90 °C durante 2 horas en la parrilla de agitación/calentamiento. Después de enfriarse a temperatura ambiente, la mezcla se centrifugó a 3500 rpm durante 15 minutos utilizando una centrifugadora. El precipitado se filtró y se lavó cuatro veces con agua destilada y metanol. El sólido se secó en una parrilla de calentamiento a 60 °C durante 30 minutos. Finalmente, la muestra se calcinó a 600°C durante 4 horas en una mufla, se dejó enfriar a temperatura ambiente, se etiquetó y se almacenó para su posterior caracterización. En la figura 19 se detalla el procedimiento llevado a cabo para sintetizar ZnO-Co mediante el método hidrotermal.

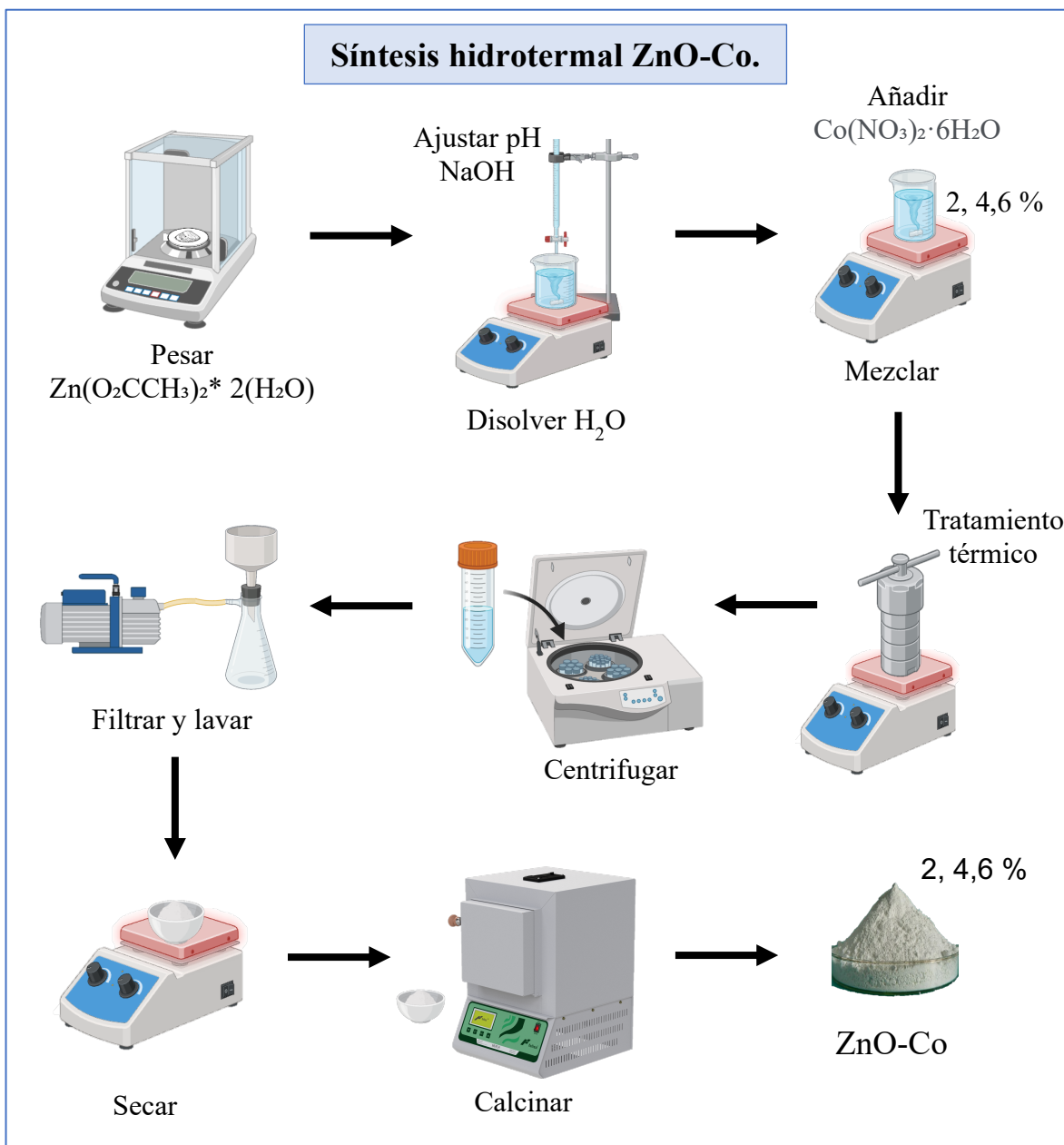


Figura 19. Síntesis hidrotermal de ZnO-Co.

3.4. Diseño de experimentos ZnO y ZnO-Co

En el proceso experimental, se llevaron a cabo la síntesis de cuatro muestras distintas, cada una de ellas se sintetizó por triplicado. Estas muestras se prepararon con el objetivo de investigar las propiedades y características de los nanomateriales de ZnO y ZnO dopados con diferentes porcentajes de cobalto. En primer lugar, se procedió a la síntesis de ZnO puro, el cual serviría como punto de referencia para comparar con las muestras dopadas. Posteriormente, se llevó a cabo la síntesis de ZnO mediante dopaje de Co. Para ello, se añadieron diferentes porcentajes de $\text{Co}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ (2%, 4% y 6% en peso) a la solución precursora durante el proceso de síntesis de ZnO. Este dopaje se realizó con el propósito de modificar las propiedades del ZnO y explorar cómo la presencia de cobalto afecta su estructura, morfología y actividad fotocatalítica. En la siguiente tabla se muestra el diseño experimental de las muestras y sus condiciones en el proceso de síntesis.

Tabla 5. Diseño experimental de la síntesis hidrotermal y dopaje.

Muestra	pH	Calcinación (°C)	Dopaje (%)
ZnO	9	600	0
ZnO-Co-2			2
ZnO-Co-4			4
ZnO-Co-6			6

3.5. Caracterización de ZnO y ZnO-Co

Para comprender las propiedades físicas y químicas de los fotocatalizadores, se emplearon diversas técnicas de caracterización. Estas técnicas proporcionaron información detallada sobre la estructura, composición y comportamiento de los materiales en estudio. Los objetivos de estas caracterizaciones incluyeron la identificación de fases cristalinas, la evaluación de la estructura morfológica, la determinación de la presencia de impurezas, la cuantificación de la concentración del elemento dopante y la evaluación de las propiedades ópticas y electrónicas. Se caracterizaron mediante Difracción de Rayos X (DRX), Área BET, Microscopía Electrónica de Barrido (MEB), Espectroscopía ultravioleta-visible (UV-Vis), Fluorescencia de Rayos X (FRX) y colorimetría. Estas técnicas de caracterización fueron seleccionadas por su capacidad para proporcionar información complementaria sobre las propiedades de los fotocatalizadores, permitiendo así una evaluación integral de su estructura, composición y comportamiento. Mediante la combinación de estas técnicas, se logró obtener una comprensión profunda de las características físicas y químicas de los materiales, lo que facilitó la interpretación de los resultados experimentales y el desarrollo de conclusiones significativas para el proyecto.

3.5.1. Colorimetría

Para la determinación del color de las muestras, se utiliza un espectrofotómetro portátil (Figura 20). Primero, se preparó la muestra mediante la molienda del polvo, asegurándose de obtener una cantidad suficiente para cubrir completamente el área de medición del equipo. El polvo fue luego compactado en una caja Petri, garantizando una superficie uniforme para la medición. El espectrofotómetro portátil se encendió y se calibró adecuadamente antes de iniciar las mediciones. Se utiliza un estándar blanco para establecer la referencia

de medición y asegurar la precisión de los resultados. Una vez calibrado, el polvo compactado fue cubierto con parafilm, lo cual permitió evitar cualquier interferencia con la medición óptica sin alterar las propiedades del material. Finalmente, se registraron los valores obtenidos, los cuales fueron expresados en términos de los parámetros CIE (L^* , a^* , b^*), que describen el color de la muestra en función de la luminosidad y las coordenadas cromáticas. Estos valores fueron analizados para evaluar las características colorimétricas del polvo bajo las condiciones de medición establecidas.



Figura 20. Espectrofotómetro medidor de color de mano.

3.5.2. Difracción de Rayos X (DRX)

La difracción de rayos X se llevó a cabo utilizando un difractómetro de la marca Rigaku Ultima IV, ubicado en el Laboratorio de Caracterización de Materiales del IIIER-UNICACH. Las condiciones del equipo se presenta en la siguiente tabla:

Tabla 6. Condiciones de medición para DRX-Rigaku.

Condiciones de medición.	
Ángulo de escaneo	2 θ / θ
$\lambda K\alpha Cu$ (Å)	1.5418
Rango de escaneo (°)	20 - 80
Amperaje (mA)	44
Velocidad de escaneo (° por min)	2
Configuración	Bragg Brentano
Voltaje (kV)	40
Potencia (kW)	1.76

Para llevar a cabo la caracterización, previamente se preparó la muestra, con ayuda mortero de ágata se depositó la muestra sobre él y con el pistilo se molió la muestra hasta quedar un polvo fino, una vez obtenido el polvo molido, se transfirió al porta muestra del equipo, colocando sobre la superficie marcada, quedando así un polvo compacto y listo para la medición.



Figura 21. Difractómetro de Rayos X-IIIER.

La identificación de las tarjetas de las fases de los fotocatalizadores son del software integrado de difracción de rayos X en polvo (PDXL2).

El cálculo del tamaño del cristal se realizó utilizando la ecuación de Scherrer.

$$L = \frac{k \times \lambda}{FWHM \times \cos \theta} \quad \text{Ecuación 3}$$

Donde: L es tamaño de cristal (nm), K es la constante de Scherrer con valor de 0.89, λ es la longitud de onda de rayos X (Å), FWHM (Full Width at Half Maximum) es el ancho medio de pico y θ es la posición angular de picos DRX, mitad de 2θ [70].

3.5.3. Espectroscopía UV-Visible (UV-Vis)

Se empleó el Espectrofotómetro UV-VIS-NIR-3600 de la marca SHIMADZU. Para llevar a cabo las mediciones de reflectancia (R%) del ZnO y ZnO-Co, se hizo uso de la esfera integradora, un dispositivo que permite obtener mediciones precisas y fiables. El proceso consistió en tomar polvo finamente molido y compactarlo con los accesorios adecuados para garantizar la estabilidad de la muestra. El equipo operó en un amplio rango de longitud de onda, desde 800 hasta 200 nm, lo que permitió una caracterización exhaustiva de las propiedades ópticas del ZnO y ZnO-Co.



Figura 22. Espectrofotómetro UV-Vis-IIIER.

Tabla 7. Parámetros de medición de reflectancia (R%).

Parámetros de medición	
Resolución (nm)	0.1
Sistema fotométrico	Doble haz
Longitud de onda (nm)	800 a 200

De acuerdo con los resultados obtenidos de reflectancia difusa, se llevó a cabo el cálculo del ancho de banda utilizando la fórmula de Kubelka-Munk. Con la ecuación

$$F(R) = \frac{(1-R)^2}{2R} \quad \text{Ecuación 4}$$

Donde R es la reflectancia difusa y se denomina función de Kubelka-Munk.

Por consiguiente, la energía de la ancho de banda (Eg) puede determinarse de manera sencilla a partir de los datos experimentales mediante la aplicación de la relación de Tauc [71].

$$(\alpha h\nu)^2 = c(h\nu - E_g) \quad \text{Ecuación 5}$$

Donde h es la constante de Plank ($1.98644586 \times 10^{-25}$ J·m), v es la frecuencia de la luz incidente, c es la constante característica del material y Eg el ancho de banda prohibida (eV) [25] [71].

3.5.4. Microscopía Electrónica de Barrido (MEB)

El microscopio electrónico de barrido se compone por un cañón de electrones, un sistema de lentes, una bobina de barrido compuesto, un colector de electrones y un tubo con pantalla de rayos catódicos (CRT). Las muestras fueron analizadas utilizando el modelo Hitachi FE-SEM S-5500, obteniendo imágenes de la morfología de las mismas. Los parámetros empleados incluyen una magnificación de 10,000x, un voltaje de 5,000 V y una corriente de emisión de 16,100 nA.



Figura 23. Microscopio electrónico de barrido - Hitachi FE-SEM S-5500.

3.5.5. Fluorescencia de Rayos X (FRX)

La composición química de las muestras se evaluó mediante un espectrómetro de fluorescencia de rayos X (FRX) de la marca Rigaku, modelo Supermini 200, equipado con un generador de rayos X Max. Las condiciones operativas incluyen un voltaje de 50 kV, una corriente de 4 mA y una fuente de rayos X de 200 W [25].



Figura 24. Espectrómetro de fluorescencia de rayos-X, Supermini 200 (Rigaku).

La preparación de las muestras fue sencilla: se tomó una pequeña cantidad de polvo finamente molido, se compactó en aditamentos adecuados y se cubrió con parafilm. Posteriormente, se llevó al equipo de medición y procesamiento para su análisis.

3.5.6. Método BET (Brunauer-Emmett-Teller)

El análisis de área superficial BET se realizó utilizando el equipo NOVA touch LX¹ (Figura 25), especializado en el análisis de área superficial y tamaño de poro. Antes de iniciar la medición, las muestras se sometieron a un pretratamiento para garantizar la precisión de los resultados. Se pesaron 150 mg de fotocatalizador y se colocaron en celdas específicas. Posteriormente, se llevó a cabo un proceso de desgasificación, cuyo objetivo era eliminar contaminantes como humedad o gases adsorbidos, asegurando que la muestra estuviera completamente limpia antes del análisis.

La tabla 8 muestra las condiciones empleadas para realizar la desgasificación del fotocatalizador.

Tabla 8. Parámetros para desgasificar el fotocatalizador.

Desgasificación	
Temperatura (°C)	180
Tiempo (horas)	12
Rampa (°C/min)	5
Tipo	En vacío



Figura 25. Analizador de área de superficie y tamaño de poro.

Después del tiempo establecido, la celda se transfiere al analizador de área superficial y se sumerge en nitrógeno líquido. Para iniciar el análisis, se calibran las celdas utilizando helio a la misma presión (12 psi) y se introduce nitrógeno como gas adsorbente a 12 psi. El equipo mide la cantidad de gas adsorbido por la muestra a diferentes presiones relativas y registra la cantidad de gas liberada al reducir la presión. Este proceso permite obtener la isoterma de adsorción-desorción, cuyos datos se analizan utilizando la ecuación BET (Ecuación 2). A partir de este análisis, se calcula el área superficial específica de la muestra (m^2/g). Además, es posible determinar la distribución y el volumen de poros mediante técnicas complementarias, proporcionando una caracterización más completa del material.

3.6. Evaluación fotocatalítica de ZnO y ZnO-Co

3.6.1. Preparación de solución de contaminantes emergentes

Para preparar la solución madre de TMP/SMX y Paracetamol a una concentración de 100 ppm, se utilizaron tabletas comerciales (Tabla 9) que fueron molidas hasta obtener un polvo fino. Posteriormente, se pesaron 10 mg de este polvo, los cuales se disolvieron en un matraz volumétrico de 100 mL, diluyendo la mezcla y aforando hasta completar el volumen.

Tabla 9. Descripción de los fármacos.

Contaminantes			
Fórmula	Contiene		Marca
TMP/SMX	80 mg/400 mg	Tableta	Soltrim
Paracetamol	500 mg	Tableta	Icetazol

Partiendo de la solución a 100 ppm se pueden hacer diluciones mediante la siguiente fórmula:

$$C_1V_1 = C_2V_2 \quad \text{Ecuación 6}$$

C_1 = concentración inicial (100 ppm)

V_1 = volumen de la solución

C_2 = concentración final

V_2 = volumen final

Para llevar a cabo el estudio de fotodegradación de contaminantes emergentes, se prepararon soluciones con una concentración inicial de 10 ppm. Para ello, se disolvió la cantidad exacta del contaminante en un volumen conocido de agua destilada, asegurando una mezcla homogénea. Estas soluciones se utilizaron como base para evaluar la eficiencia de los materiales fotocatalíticos en la degradación de TMP/SMX y paracetamol.

3.6.2. Descripción del sistema para la evaluación de fotocatalizadores

El sistema de fotoreacción consistió en un fotoreactor construido con una caja de madera, pintado en su interior y exterior con pintura negra mate para minimizar la reflexión de la luz y optimizar la absorción de radiación. Las dimensiones de la caja fueron de 80 cm de largo, 34 cm de ancho y 30 cm de alto. En el interior del fotoreactor se instalaron dos lámparas UV, una de 25 W y otra de 30 W, posicionadas de manera que la radiación incidiera directamente sobre la solución contaminante. Para garantizar una agitación adecuada de la mezcla de solución contaminante y fotocatalizador, se utilizó una parrilla magnética, asegurando la homogeneidad durante todo el proceso de fotodegradación.

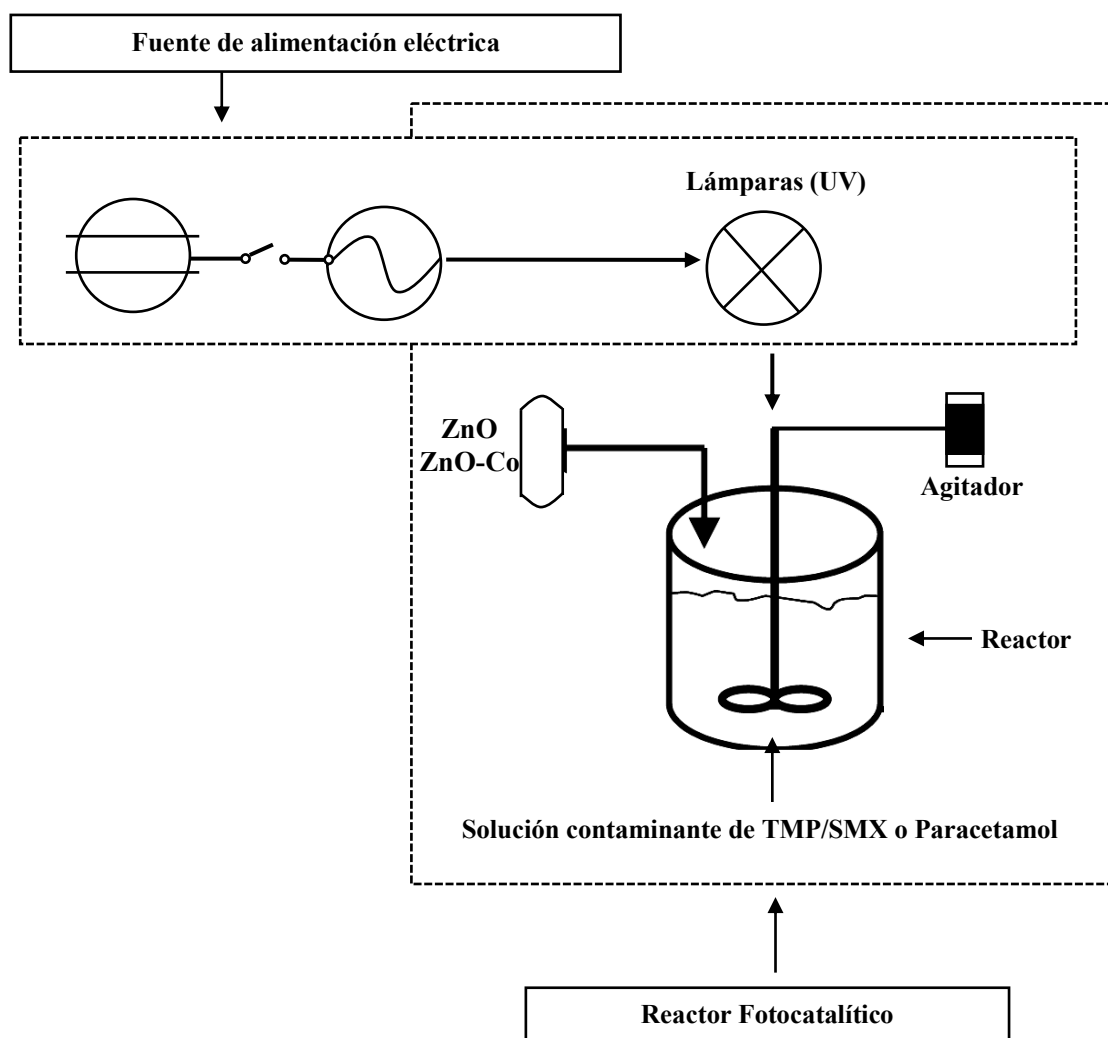


Figura 26. Diagrama del sistema de evaluación.

3.6.3. Mediciones de absorbancia

Para las mediciones de TMP/SMX y paracetamol, se utilizó un espectrofotómetro UV-VIS-NIR modelo 3600 de la marca SHIMADZU, donde se llevaron a cabo los análisis de absorbancia. El procedimiento incluyó el uso de dos cubetas de cuarzo: una se empleó como blanco (referencia) y la otra contenía la solución contaminante para la medición. Las mediciones se realizaron en un rango de longitud de onda de 400 a 200 nm. El pico de mayor absorbancia, correspondiente a cada compuesto, fue identificado como el punto de máxima absorbancia. Para el paracetamol, este valor se registró en 242 nm,

mientras que para TMP/SMX se observó a 256 nm [72]. Este método permitió caracterizar la absorbancia específica de cada material de manera precisa.

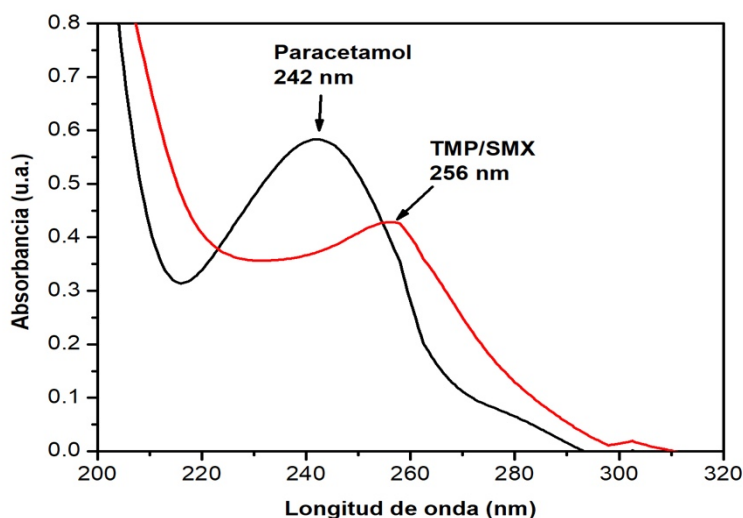


Figura 27. Punto de abs para TMP/SMX y Paracetamol.

3.6.4. Degradación de TMP/SMX y Paracetamol

La evaluación de ZnO y ZnO-Co (2%, 4% y 6%) para la degradación de TMP/SMX y paracetamol se llevó a cabo durante un período de 330 minutos para cada experimento. Se utilizó una solución a 10 ppm de concentración, mezclada con 70 mg de fotocatalizador. Esta mezcla se colocó en una caja Petri y se agitó magnéticamente a 600 rpm sobre una parrilla. Inicialmente, la solución fue mantenida en oscuridad dentro del reactor durante 30 minutos para permitir el proceso de adsorción. Al finalizar este tiempo, se tomó una muestra para análisis. Posteriormente, se encendieron las lámparas UV y se inició el proceso de fotodegradación. Se tomaron muestras cada 30 minutos durante un período total de 300 minutos de exposición a la luz. Las muestras se recolectaron utilizando una micropipeta y se depositaron en tubos de centrifugación. Estas se centrifugaron para separar el fotocatalizador de la solución contaminante. Finalmente, el líquido resultante fue transferido a

cubetas de cuarzo para medir su absorbancia mediante espectrofotometría, permitiendo así monitorear el progreso de la degradación.

A partir de los resultados obtenidos, es posible calcular el porcentaje de degradación de TMP/SMX y paracetamol, mediante la ecuación 4 [73].

$$\frac{C_i - C_f}{C_i} \times 100 = \% \text{degradación} \quad \text{Ecuación 7}$$

3.6.5. Evaluación de fotólisis, fotocátalisis y adsorción de ZnO y ZnO-Co

Para evaluar con precisión la eficiencia del proceso fotocatalítico, fue necesario realizar pruebas complementarias de fotólisis y adsorción. La prueba de fotólisis se llevó a cabo con el fin de determinar si el contaminante (solución 10 ppm) sufre algún grado de degradación únicamente por efecto de la radiación UV, sin la presencia del fotocatalizador. Por otro lado, la prueba de adsorción permitió identificar la cantidad de contaminante que puede ser removido mediante interacción física o química con la superficie del fotocatalizador (70 mg) en ausencia de luz. Estas evaluaciones se realizaron bajo las mismas condiciones descritas previamente: un tiempo total de 300 minutos, con toma de muestras cada 30 minutos. Al comparar estos resultados con los obtenidos durante el proceso fotocatalítico, donde intervienen simultáneamente el catalizador y la radiación, se logró distinguir el aporte de la fotocátalisis en la eliminación del contaminante. Esta evaluación integral fue esencial para comprender con mayor detalle los mecanismos involucrados en el proceso, así como el efecto del dopaje con cobalto en el comportamiento del ZnO.

3.6.6. Degradación por ciclos

Las evaluaciones cíclicas de ZnO y ZnO-Co (2%, 4% y 6%) para la degradación de TMP/SMX y paracetamol se realizaron durante un período total de 330 minutos. Para cada prueba, se utilizaron 70 mg de fotocatalizador en 100 ml de

solución a 10 ppm, colocados en una caja Petri y agitada magnéticamente a 600 rpm. Inicialmente, la muestra se mantuvo en oscuridad durante 30 minutos para permitir la adsorción del contaminante, luego se tomó la primera muestra para su análisis. A continuación, la solución fue expuesta a la luz UV durante 300 minutos, tomando una muestra al finalizar el tiempo.

Las muestras se extrajeron con micropipetas y se transfirieron a tubos de centrifugación, donde se separó el fotocatalizador de la solución contaminante mediante centrifugación. Posteriormente, la solución se analizó midiendo su absorbancia en cubetas de cuarzo. Al final de cada ciclo, el fotocatalizador se recolectó, se lavó, se secó y se reutilizó en un nuevo ciclo, repitiendo el procedimiento. Este proceso se repitió tres veces para evaluar la estabilidad y eficacia del fotocatalizador a lo largo del tiempo.

3.7. Análisis de la solución TMP/SMX y paracetamol mediante espectroscopía Infrarroja por Transformada de Fourier (FT-IR)

Se llevó a cabo el análisis de las soluciones contaminantes, enfocándose en la medición inicial de TMP/SMX y paracetamol. Posteriormente, se realizaron mediciones en tres momentos clave del proceso de evaluación: primero, tras la adición del fotocatalizador y un periodo de 30 minutos en oscuridad; después de 150 minutos de exposición a la luz; y finalmente, tras 300 minutos al concluir el periodo de evaluación. Este seguimiento permitió determinar los cambios ocurridos en la solución a lo largo del tiempo.

Las mediciones se llevaron a cabo con el equipo Espectrómetro de Mediano Infrarrojo por Transformada de Fourier marca Thermo Scientific modelo Nicolet iS50.



Figura 28. Espectrómetro de Mediano Infrarrojo por Transformada de Fourier marca Thermo Scientific modelo Nicolet iS50.

CAPÍTULO 4

ANÁLISIS Y DISCUSIÓN DE RESULTADOS

Se aborda el análisis y la discusión de los resultados obtenidos durante la investigación. Se examinan detalladamente los datos recopilados a lo largo del estudio y desarrollo del proyecto. Se destacan las observaciones clave, se comparan con la literatura relevante y se interpretan los objetivos planteados.

4.1. Síntesis hidrotermal de ZnO y ZnO-Co

Se lograron sintetizar cuatro muestras utilizando el método hidrotermal. Durante este proceso, se mantuvieron constantes el pH a 9 y la temperatura de calcinación a 600°C. La variación principal radicó en la introducción de dopajes de cobalto (Co). Se prepararon muestras de ZnO puro y ZnO dopado con cobalto en concentraciones de 2%, 4% y 6% en relación peso (Anexo 1). Durante la preparación previa al proceso en autoclave, se observó un cambio notable en la coloración de las muestras. La adición de nitrato de cobalto generó un cambio significativo hacia un tono rosa en las muestras. Posteriormente, tras el proceso de calcinación, todas las muestras dopadas experimentaron un cambio adicional en su coloración, adoptando un tono verdoso. Estos cambios evidencian la influencia del dopaje y del tratamiento térmico en las propiedades visuales de las muestras [74]. Este fenómeno sugiere una alteración en las propiedades ópticas de los materiales debido a la introducción del dopaje de cobalto. A continuación se presenta la tabla de experimentos.

Tabla 10. Parámetros experimentales.

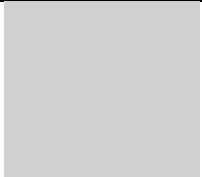
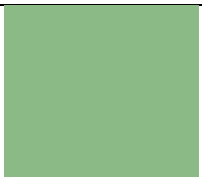
Semiconductor	pH	Calcinación (°C)	Dopaje (%)
ZnO	9	600	0
ZnO-Co			2
ZnO-Co			4
ZnO-Co			6

4.2. Colorimetría

Los resultados de color de las muestras se presentan en la Tabla 11. En esta Tabla se detallan los valores obtenidos mediante análisis colorimétrico,

incluyendo los parámetros de luminosidad (L^*), cromaticidad en el eje rojo-verde (a^*), y cromaticidad en el eje amarillo-azul (b^*). Estos valores permiten evaluar de manera cuantitativa la variación de color inducida por la adición de nitrato de cobalto.

Tabla 11. Determinación de colores.

Colorimetría			
ZnO			
CIELab	HEX	Color	Imagen
$L^* = 84.01$ $a^* = -0.27$ $b^* = -0.69$	#D0D2D0	Gris claro	
ZnO-Co-2%			
CIELab	HEX	Color	Imagen
$L^* = 79.71$ $a^* = -14.57$ $b^* = -14.98$	#B2CDA9	Verde mar oscuro	
ZnO-Co-4%			
CIELab	HEX	Color	Imagen
$L^* = 70.78$ $a^* = -25.52$ $b^* = 20.95$	#86BA85	Verde mar oscuro	
ZnO-Co-6%			
CIELab	HEX	Color	Imagen
$L^* = 33.79$ $a^* = -4.29$ $b^* = 55.92$	#575100	Verde oliva oscuro	

Además, se presentan los códigos de color en formato HEX, los cuales permiten una representación digital precisa de la coloración observada en las muestras. Estos códigos, basados en la combinación de los componentes rojo, verde y azul (RGB), facilitan la comparación visual y la reproducibilidad de los resultados [75].

4.3. Difracción de Rayos X (DRX)

4.3.1. Difractograma ZnO y ZnO-Co

Se procedió a caracterizar las muestras sintetizadas mediante la técnica de Difracción de Rayos X (DRX) con el propósito de confirmar la formación de ZnO y ZnO-Co. En la Figura 29 se presenta el difractograma de la muestra de ZnO puro. Los resultados obtenidos del análisis confirman de manera concluyente la presencia de ZnO puro, exhibiendo una fase pura y cristalina, ya que no tenía fases secundarias ni impurezas.

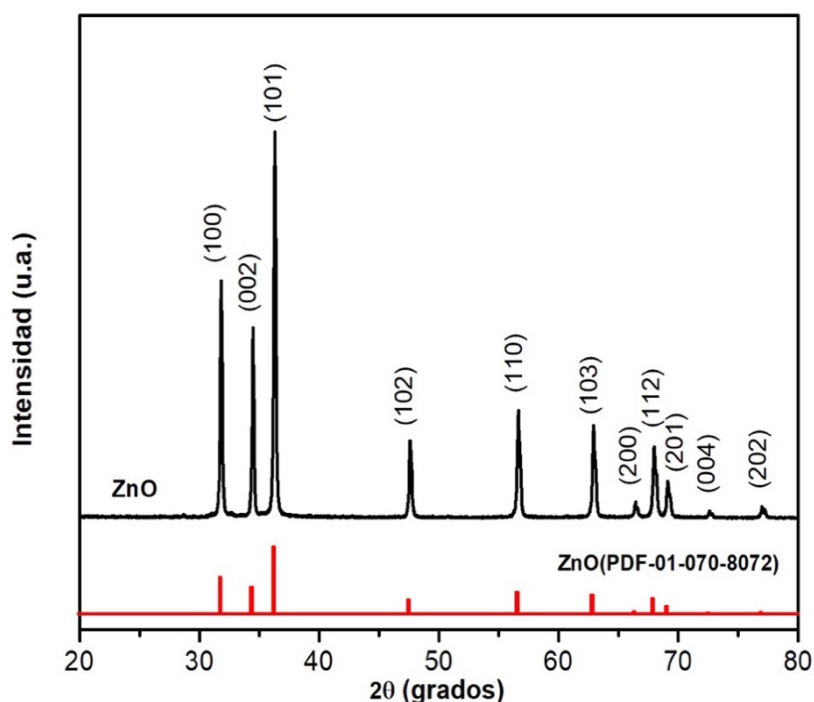


Figura 29. Difractograma de ZnO por el método hidrotermal.

De acuerdo con la tarjeta cristalográfica No. PDF-01-070-8072, se identificaron los picos característicos en el difractograma a valores de 2θ de 31.80° , 34.51° , 36.34° , 47.63° , 56.68° , 62.94° , 66.46° , 68.02° , 69.16° , 72.65° y 77.01° [20] [76], estos picos corresponden a los planos cristalográficos (1 0 0), (0 0 2), (1 0 1), (1 0 2), (1 1 0), (1 0 3), (2 0 0), (1 1 2), (2 0 1), (0 0 4) y (2 0 2), respectivamente [77] [78]. El análisis confirma que la estructura cristalina corresponde a una configuración hexagonal tipo Wurtzita, perteneciente al grupo espacial P6₃mc (186), con un volumen de celda unitario de $47.491 \text{ \AA}^3$. Estos resultados descartan la presencia de otras fases, indicando que el material obtenido es puro y altamente cristalino.

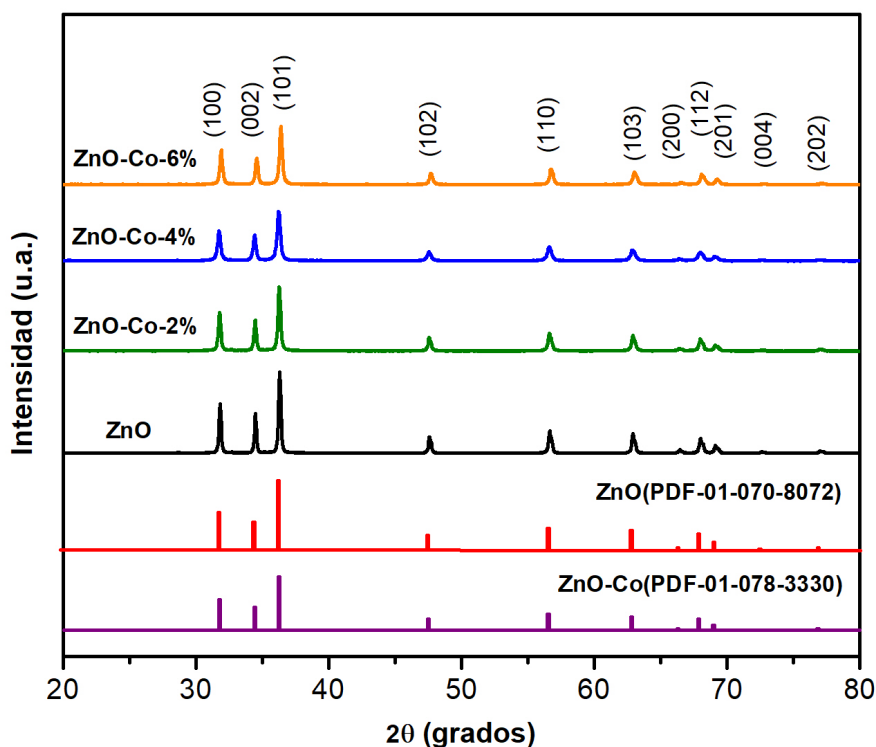


Figura 30. Difractograma de ZnO y ZnO-Co.

Los resultados de la caracterización de ZnO-Co se observan en la figura 30, se determinaron 11 señales de difracción en 2θ de 31.73° , 34.41° , 36.22° , 47.50° , 56.53° , 62.81° , 66.29° , 67.88° , 69° , 72.53° y 76.87° correspondientes a los

planos cristalográficos (1 0 0), (0 0 2), (1 0 1), (1 0 2), (1 1 0), (1 0 3), (2 0 0), (1 1 2), (2 0 1), (0 0 4) y (2 0 2), respectivamente [79]. Que coincide con la tarjeta cristalográfica No. PDF-01-078-3330, con estructura hexagonal, grupo espacial P63mc (186) y volumen de celda unitaria de 47.746 Å [80]. Los patrones de DRX, como se presentan en la figura 30, muestran que las nanopartículas sintetizadas de ZnO dopadas con Co no alteran significativamente las de ZnO puro. Se ha reportado que la sustitución de Mg^{2+} en el sitio de Zn^{2+} no desplazó de manera notable las posiciones de los picos de difracción debido a la similitud de sus radios iónicos (0.57 Å para Mg^{2+} y 0.60 Å para Zn^{2+}). Sin embargo, aunque el radio iónico de Co^{2+} (0.58 Å) es bastante cercano al de Zn^{2+} , en el presente trabajo se observa un desplazamiento en las posiciones de los picos de difracción de las nanopartículas de ZnO dopadas con Co en los valores de 2θ en comparación con el ZnO puro, lo que puede generar algunas imperfecciones en la red, haciendo que la intensidad disminuya. Lo que caracteriza al Co por tener un radio iónico más pequeño [81] [82]. A medida que aumenta la concentración de dopaje a 6%, la intensidad de los picos disminuye, lo que indica que un mayor número de iones Co^{2+} están siendo incorporados en la red cristalina del ZnO, sustituyendo a los iones de Zn^{2+} .

4.3.2. Tamaño de cristal ZnO y ZnO-Co

El cálculo del tamaño del cristal se realizó utilizando la ecuación de Scherrer (ecuación 3).

Tabla 12. Tamaño de cristal.

Muestra	Tamaño de cristal (nm)
ZnO	26.32
ZnO-Co 2%	26.25

ZnO-Co 4%	26.34
ZnO-Co 6%	26.35

El ancho medio de pico (FWHM, por sus siglas en inglés: Full Width at Half Maximum) está directamente relacionado con el tamaño de los cristales. En la Figura 30 se observan intensidades altas con picos estrechos, lo que está asociado a que un pico más ancho generalmente indica un tamaño de cristal más pequeño o la presencia de defectos cristalinos, mientras que picos más estrechos suelen estar asociados con cristales más grandes y mejor ordenados [83]. Los tamaños de cristal obtenidos para el ZnO puro concuerdan con los valores reportados en la literatura [84]. En comparación con el ZnO-Co, no se observó un cambio significativo. Al dopar con un 2% de Co, el tamaño del cristal disminuyó en 0.07 nm en relación con el ZnO puro. No obstante, al incrementar el porcentaje de Co, se evidenció un ligero aumento en el tamaño de los cristales.

4.4. Espectroscopía UV-Visible (UV-Vis)

4.4.1. Reflectancia difusa

Durante la caracterización mediante espectroscopía UV-Vis, se evaluó la reflectancia de los materiales sintetizados. Se observó una notable caída en la reflectancia en el rango de longitud de onda de 300 a 400 nm. Este fenómeno indica que la muestra presenta una absorción significativa en esta región del espectro, lo cual es característico del rango ultravioleta [25] [85]. El aumento significativo en la reflectancia a longitudes de onda superiores a 375 nm podría estar relacionado con la banda prohibida directa del ZnO, debido a la transición electrónica de un electrón desde la banda de valencia a la banda de conducción, específicamente de un orbital O 2p a un orbital Zn 3d (O 2p $\rightarrow$ Zn 3d) [86].

Este resultado es relevante, ya que sugiere que los materiales tienen propiedades ópticas que los hacen potencialmente útiles en aplicaciones que implican interacciones con radiación ultravioleta. Como se presenta en la siguiente imagen [87].

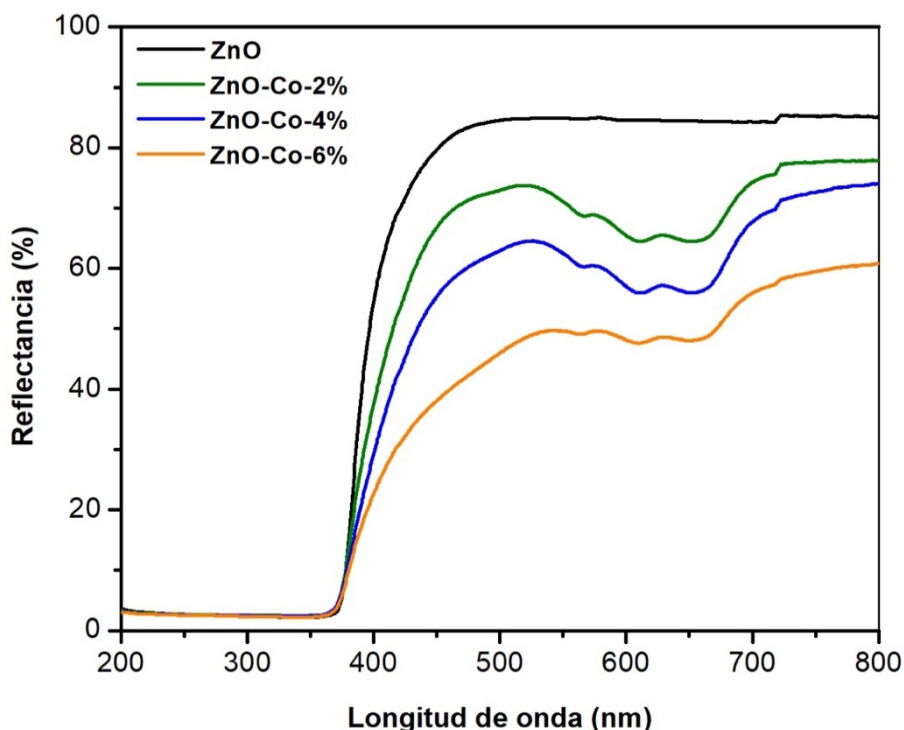


Figura 31. Medición de reflectancia % de ZnO y ZnO-Co.

En el caso del ZnO dopado con Co, figura 31, debido a la sustitución de iones Co^{2+} en la estructura, no se observa un desplazamiento significativo en la longitud de onda, manteniéndose en el rango ultravioleta. Se observa un comportamiento lineal en la reflectancia, ya que a medida que aumenta el nivel de dopaje con Co, esta disminuye en el rango de 400 nm a 800 nm. Esta reducción se debe a la sustitución de iones Zn^{2+} por Co^{2+} en la red cristalina del ZnO, lo que introduce niveles de energía intermedios dentro del ancho de banda, disminuyendo así la reflectancia en dicha región [88]. Para las muestras de ZnO dopado con 2%, 4% y 6% de Co, se presentan picos en el rango de 500 a 700

nm, los cuales son característicos de los iones Co^{2+} con configuración de alto espín $3d^7$ en un campo cristalino tetraédrico. Estos picos se atribuyen a las transiciones electrónicas $^4A_2(F) \rightarrow ^2A_1(G)$, $^4A_2(F) \rightarrow ^4T_1(P)$ y $^4A_2(F) \rightarrow ^2T_1(G)$, que corresponden a estados de alto espín ($S=3/2$, $S=3/2$, $S=3/2$). Se observa que a concentraciones de Co superiores al 6%, los picos se difuminan y la intensidad de los espectros de reflexión disminuye. Esto sugiere que el Co adicional incorporado en la estructura del ZnO ocupa sitios con un campo cristalino local diferente, lo que afecta las propiedades ópticas del material [89].

4.4.2. Ancho de banda (Kubelka-Munk)

Los resultados del cálculo indicaron que el ZnO puro presentó un ancho de banda de 3.25 eV, que se encuentra dentro del rango esperado según la literatura [90] [91]. Esta brecha de banda permite una eficiente absorción de luz en la región ultravioleta (UV), lo que favorece su aplicación en procesos fotocatalíticos.

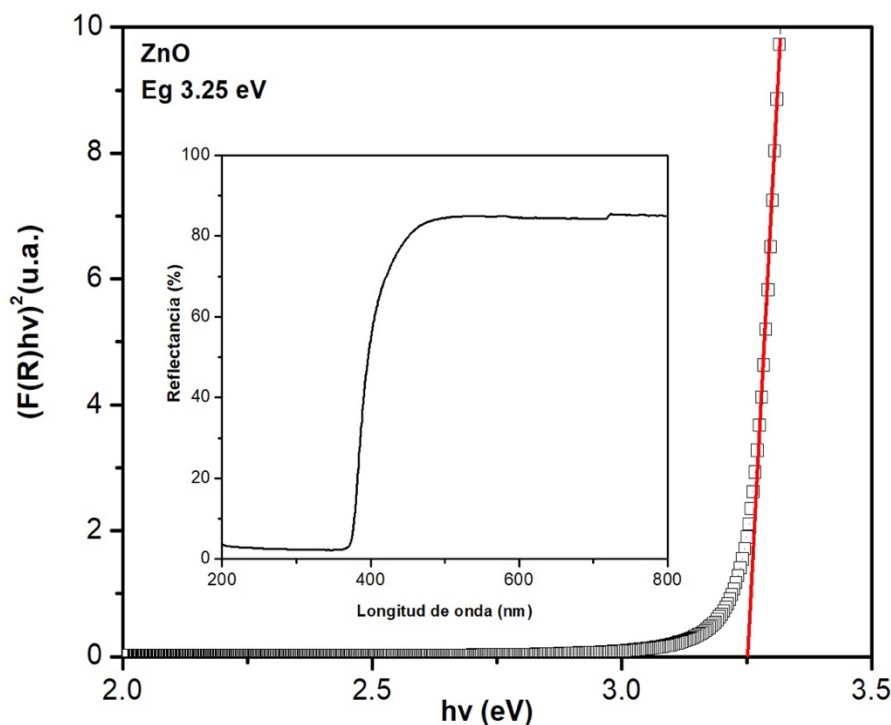


Figura 32. Ancho de banda ZnO.

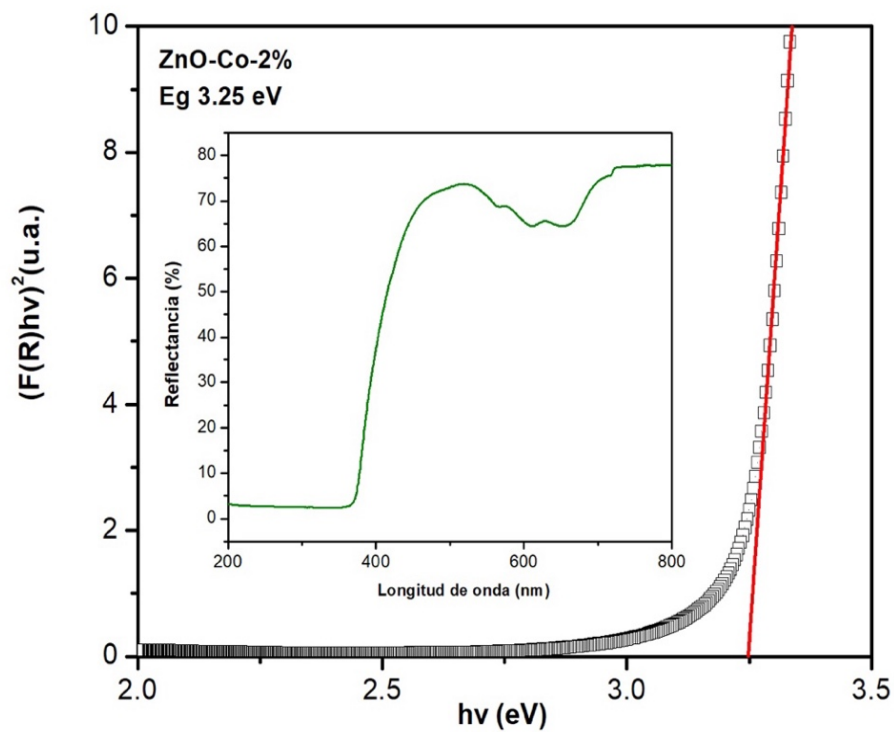


Figura 33. Ancho de banda ZnO-Co 2%.

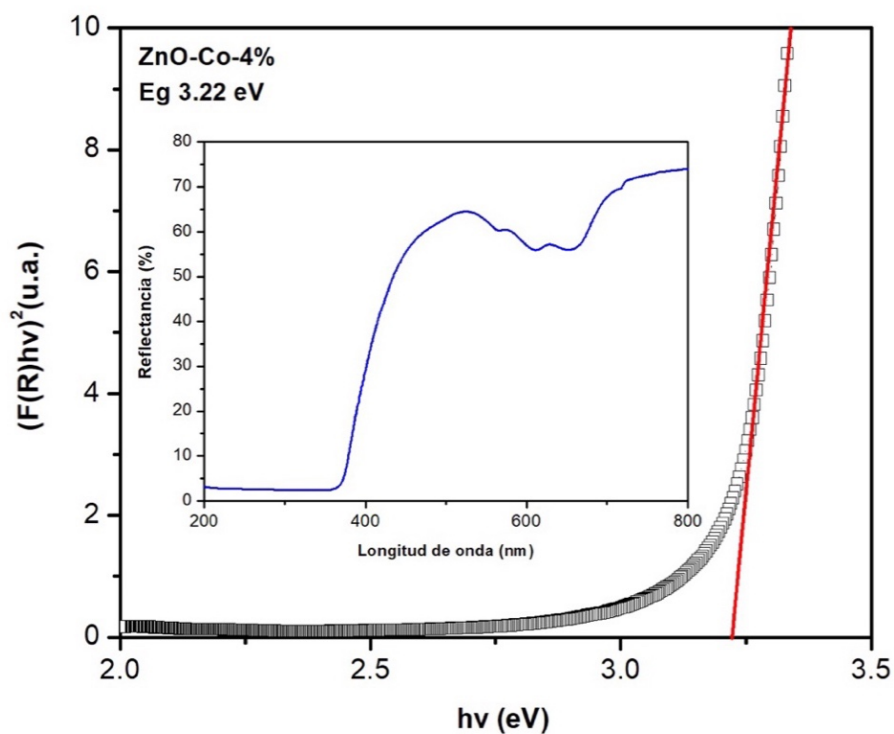


Figura 34. Ancho de banda ZnO-Co 4%.

Sin embargo, a concentraciones más altas de Co, la formación de fases secundarias o la recombinación de pares electrón-hueco podría reducir la eficiencia fotocatalítica del material [92].

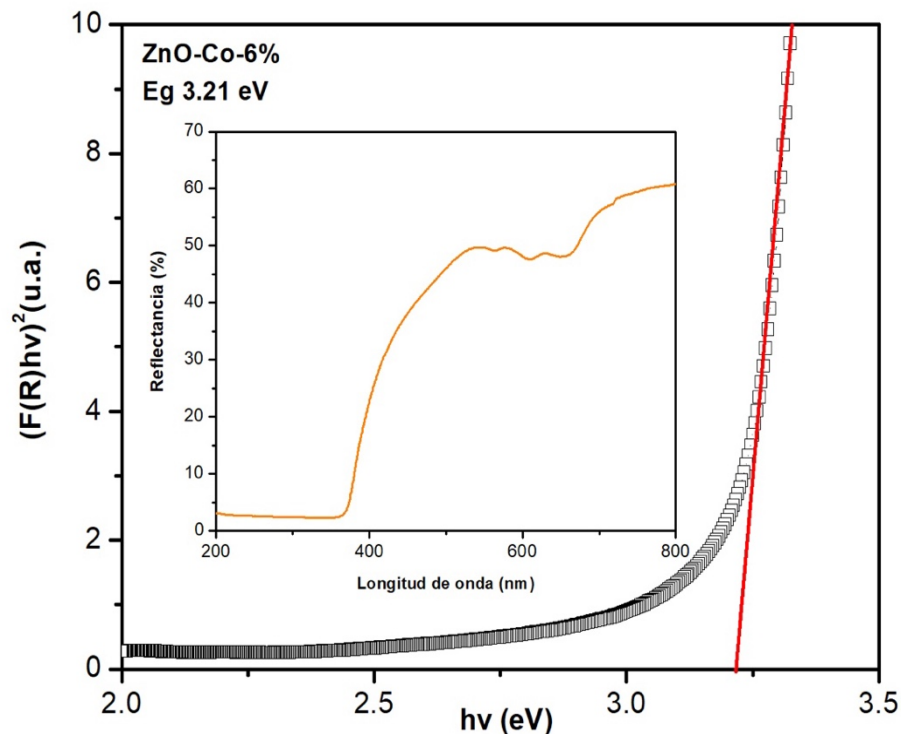


Figura 35. Ancho de banda ZnO-Co 6%.

La presencia de iones Co^{2+} puede introducir defectos estructurales, como vacantes de oxígeno o zinc, que afectan la transición electrónica y la absorción de luz. Estos efectos combinados pueden mejorar la actividad fotocatalítica del ZnO-Co, extendiendo su absorción hacia la región visible del espectro electromagnético [92].

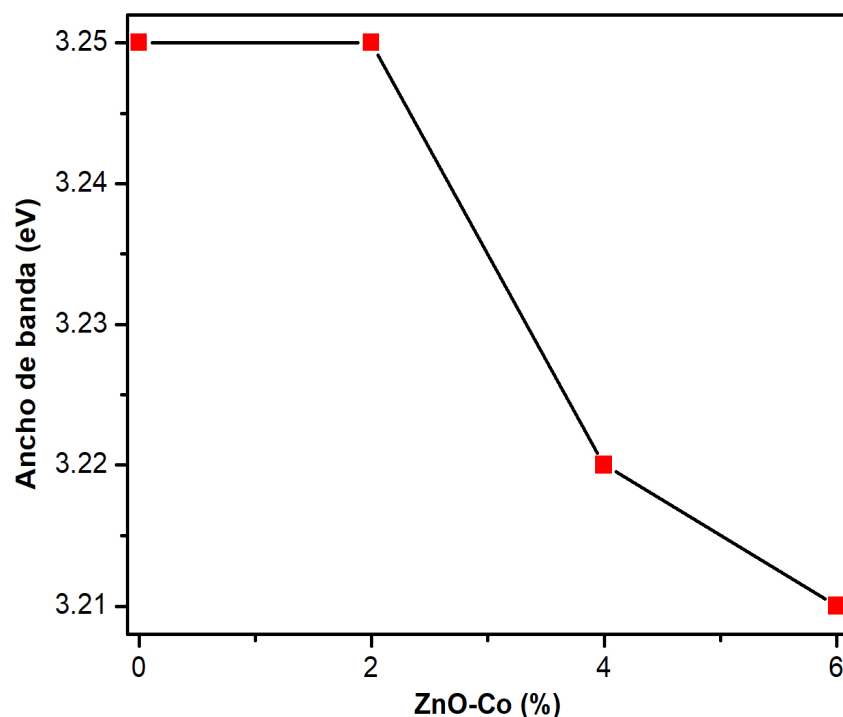


Figura 36. Ancho de banda ZnO y ZnO-Co.

Para las muestras dopadas, se obtuvieron valores de ancho de banda de 3.25 eV, 3.22 eV y 3.21 eV para ZnO-Co con 2%, 4% y 6% de dopaje figura 33, 34 y 35, respectivamente. Esta ligera disminución en la energía de la brecha de banda sugiere que la incorporación de cobalto modifica las propiedades ópticas del ZnO, posiblemente debido a la introducción de niveles de energía intermedios y la distorsión de la red cristalina figura 36 [92].

4.5. Microscopia electrónica de barrido (MEB)

4.5.1. Micrografías ZnO

Las micrografías de las nanopartículas de ZnO, presentadas en la figura 37 con ampliaciones de 10,000X, 2,000X y 1,000X, respectivamente, permiten observar con claridad la morfología característica del ZnO puro. En las imágenes se identifican estructuras en forma de nanobarras hexagonales, así como cúmulos de estas estructuras [93].

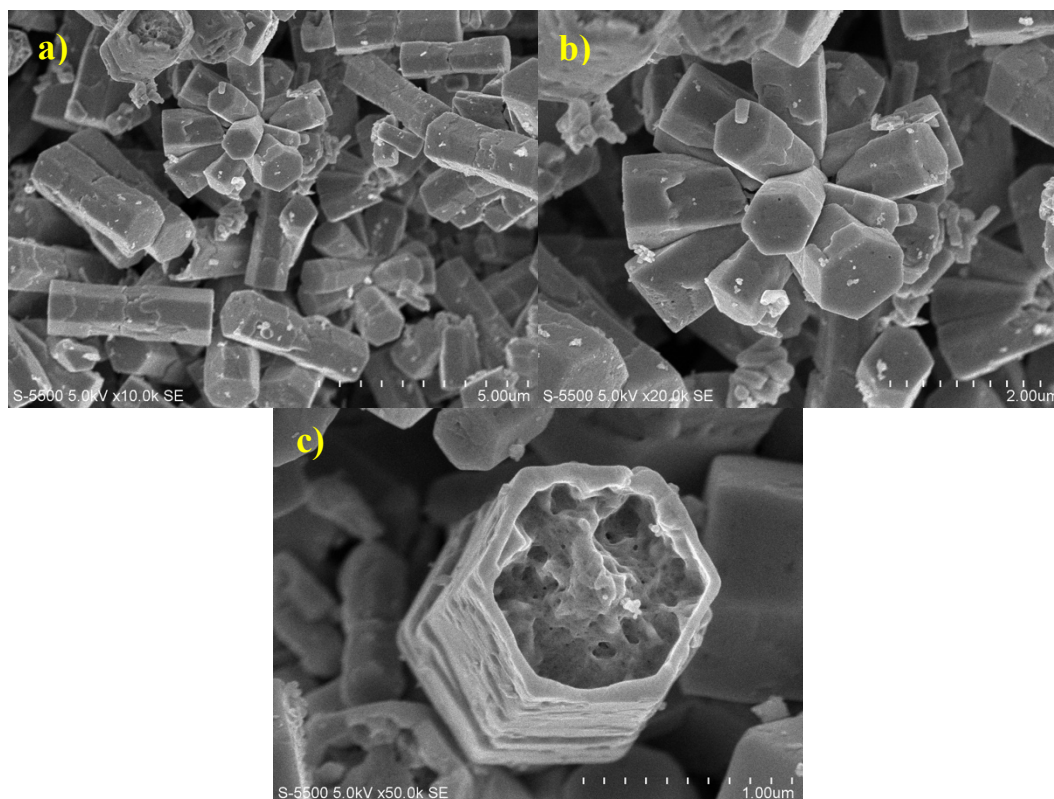


Figura 37 Micrografía de ZnO a pH 9. Ampl. a) 10,000 X, b) 2,000 X y c) 1,000 X.

Particularmente, en la Figura 37c) se evidencia la presencia de porosidad en la muestra, evidenciando huecos en su interior. Esta característica porosa es de particular interés, ya que puede influir significativamente en las propiedades fotocatalíticas y en la capacidad de adsorción de los materiales, características importantes para aplicaciones en la fotodegradación de contaminantes. La presencia de porosidad interna también sugiere un potencial para mejorar la eficiencia en procesos fotocatalíticos, dado que aumenta la superficie activa disponible para la interacción con las moléculas contaminantes. Estos hallazgos son consistentes con los reportados en la literatura, confirmando la morfología típica del ZnO sintetizado [93] [94].

4.5.2. Micrografías ZnO-Co-2%

Se analizó la morfología de la muestra ZnO-Co-2% con ampliificaciones de 10,000X, 2,000X y 1,000X, repectivamente. Los resultados revelaron un cambio significativo en la morfología del ZnO al ser dopado con cobalto.

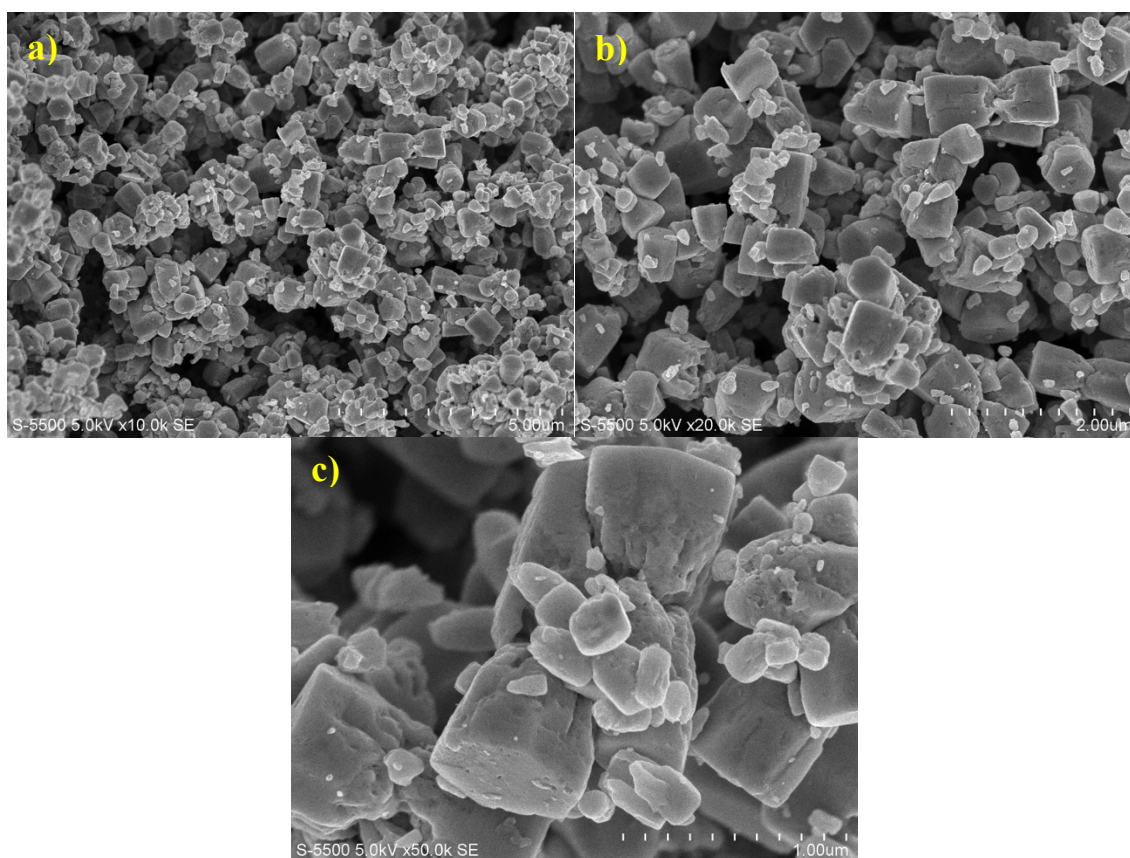


Figura 38 Micrografía de ZnO-Co-2%. Ampl. a) 10,000 X, b) 2,000 X y c) 1,000 X.

Se observó que las nanobarras hexagonales características del ZnO experimentaron fracturas tras el dopaje con un 2% de Co, lo que condujo a la formación de fragmentos más pequeños y agrupaciones dispersas con una morfología cercana a estructuras casi esféricas y granulares. Los granos de cobalto se encuentran distribuidos entre los restos de las estructuras de ZnO, lo que sugiere una integración efectiva del Co en la red cristalina del material. En la figura 38c), correspondiente a la mayor magnificación, se puede apreciar con

mayor detalle la porosidad inherente de las estructuras fracturadas. La incorporación de Co no solo alteró la estabilidad estructural del ZnO, sino que también promovió una mayor dispersión de las partículas y la generación de defectos cristalinos. Estos cambios en la morfología y porosidad pueden tener un impacto significativo en las propiedades fotocatalíticas del material, al influir en la absorción de luz y la eficiencia en la degradación de contaminantes [95].

4.5.3. Micrografías ZnO-Co-4%

La muestra de ZnO-Co-4% presenta una variación significativa en su morfología en comparación con las muestras de menor dopaje. A medida que aumenta el contenido de cobalto, las estructuras de ZnO experimentan una transformación más pronunciada, evidenciada por fracturas más notorias en las nanobarras hexagonales características del ZnO. Las imágenes obtenidas revelan que estas nanobarras se fragmentan en partículas más pequeñas, llamadas microesferas, las cuales tienden a aglomerarse, e incluso algunas pierden por completo su estructura original. El aumento en la concentración de Co favorece la formación de racimos compuestos por granos de ZnO y cobalto, lo que sugiere una mayor interacción entre ambos elementos y una posible segregación de fases secundarias. Esta transformación estructural podría estar relacionada con el estrés inducido en la red cristalina debido a la sustitución parcial de Zn^{2+} por Co^{2+} , provocando distorsiones y la aparición de defectos cristalinos [96].

Además, la presencia de Co influye en la superficie del material, afectando su porosidad y su capacidad de dispersión, lo que podría impactar en su actividad fotocatalítica. La pérdida de la estructura ordenada del ZnO y la formación de aglomerados pueden modificar la dinámica de adsorción de contaminantes y la

generación de especies reactivas durante el proceso fotocatalítico, aspectos clave para su rendimiento en aplicaciones ambientales [96].

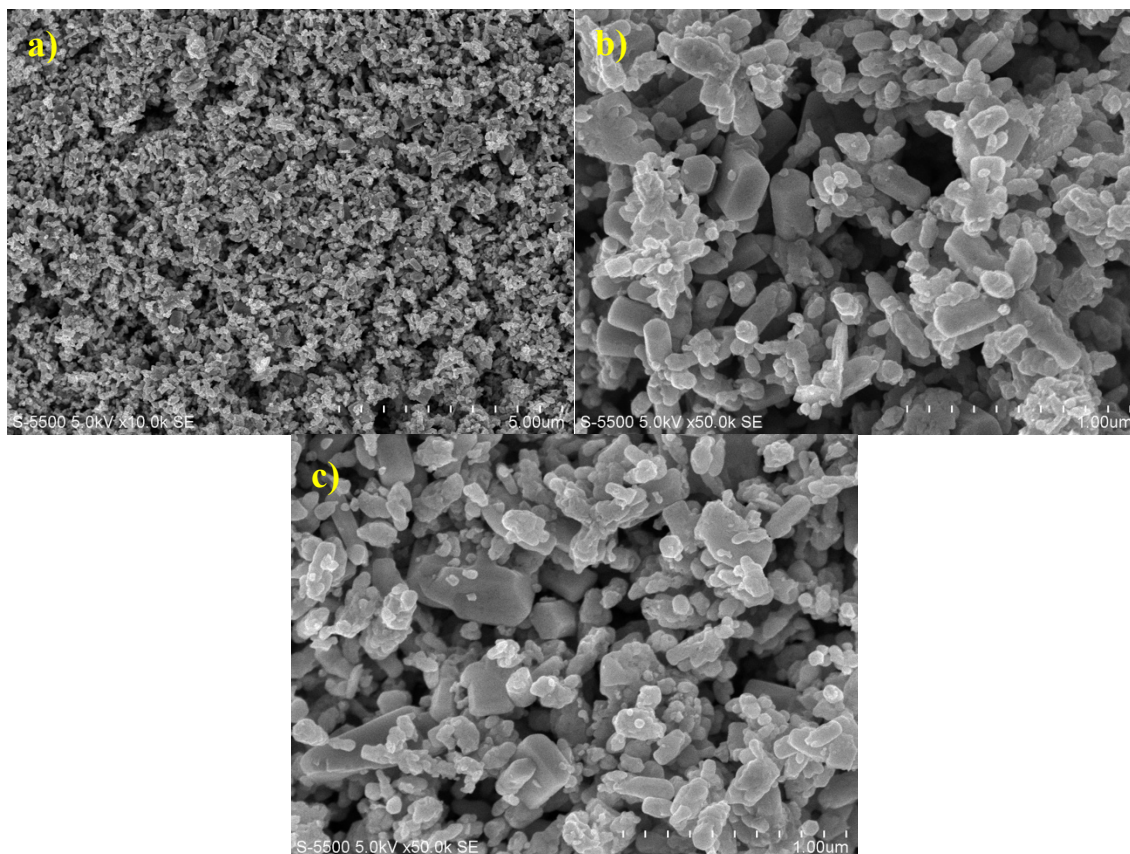


Figura 39 Micrografía de ZnO-Co-4%. Ampl. a) 10,000 X, b) 2,000 X y c) 1,000 X.

4.5.4. Micrografías ZnO-Co-6%

El análisis morfológico de la muestra de ZnO-Co-6% revela que la concentración de cobalto tiene un impacto significativo en la morfología final del material. A medida que aumenta el porcentaje de cobalto, se observa una notable pérdida de la morfología característica de nanobarras hexagonales en aproximadamente un 90% de las partículas. En su lugar, se forma una estructura predominantemente irregular, con la aparición de microesferas de cobalto, formas no definidas y una tendencia pronunciada hacia la aglomeración de

partículas. Estos cambios en la morfología sugieren que el dopaje con concentraciones más altas de Co altera la organización cristalina del ZnO, promoviendo un desorden estructural significativo en la superficie del material. La introducción de Co no solo interfiere con la formación de las nanobarras hexagonales, sino que también contribuye a la creación de una estructura menos ordenada, lo que puede generar más defectos y vacantes en la red cristalina [95].

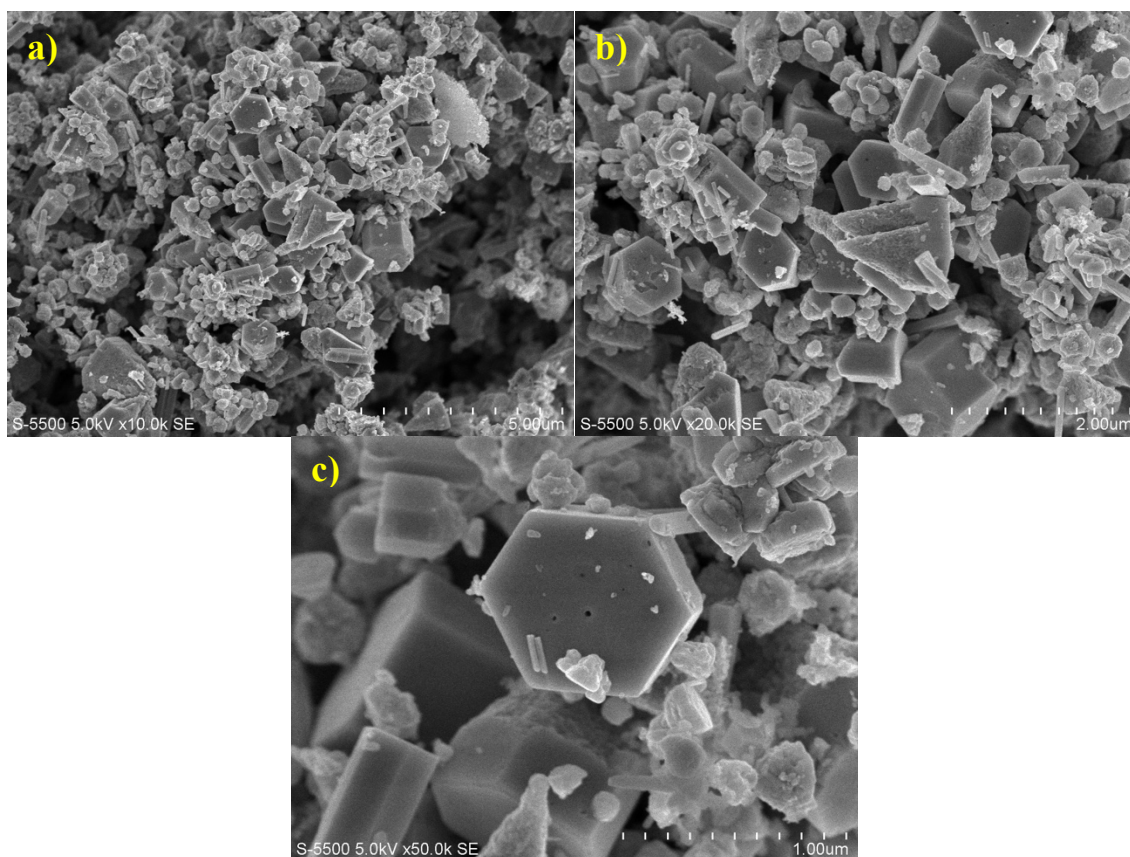


Figura 40 Micrografía de ZnO-Co-6%. Ampl. a) 10,000 X, b) 2,000 X y c) 1,000 X.

Este desorden estructural puede tener un efecto negativo en el rendimiento fotocatalítico del material, ya que la aglomeración de partículas disminuye el área superficial disponible para la interacción con la solución contaminante. Implicando menos sitios activos para la adsorción de contaminantes, lo que puede reducir la eficiencia del proceso de degradación. Además, la alteración

en la organización cristalina podría afectar la movilidad de los electrones y huecos generados durante la fotocatalisis, limitando la producción de especies reactivas necesarias para la degradación de los contaminantes [95] [97].

4.6. Fluorescencia de rayos X (FRX)

Los resultados obtenidos, presentados en la Tabla 13, confirman que el dopaje de ZnO con Co se realizó de manera eficiente. En el caso del ZnO puro, se alcanzó una pureza del 99.7%, lo que resalta la alta calidad del material base utilizado en el estudio. Para las muestras dopadas, es crucial emplear cantidades precisas de cobalto para asegurar una incorporación adecuada del dopante en la estructura del ZnO. Los datos indican que el procedimiento de dopaje fue exitoso, logrando las concentraciones de Co esperadas para 4% y 6%, lo que refleja la efectividad del proceso en términos de distribución homogénea del dopante en la red cristalina.

Tabla 13. Resultados de composición de % masa del ZnO y ZnO-Co.

Muestra	ZnO (%)	Co (%)
ZnO puro	99.7	0
ZnO-Co-2%	98.73	1.27
ZnO-Co-4%	95.53	4.47
ZnO-Co-6%	93.25	6.75

Además, la incorporación de cobalto en las muestras dopadas influyó en las propiedades estructurales y ópticas del material, como se observa en los cambios en la morfología y la brecha de banda. La precisión en el control de las

concentraciones de dopante es fundamental para maximizar el rendimiento de los materiales en procesos como la degradación de contaminantes.

4.7. Método BET (Brunauer-Emmett-Teller)

4.7.1 ZnO

La caracterización de la superficie específica de las muestras de ZnO y ZnO dopado con Co se realizó mediante el método de adsorción-desorción de nitrógeno utilizando el modelo de Brunauer-Emmett-Teller (BET) (ecuación 2) y para determinar el ancho de poro se determinó mediante el método Density Functional Theory (por sus siglas en inglés DFT). Los valores obtenidos para el ZnO se presentan en la Tabla 14.

Tabla 14. Análisis BET ZnO.

BET	
Área superficial (m ² /g)	4.59879
Volumen total de poro (cc/g)	0.0088879
Porosidad (%)	5.969
Diámetro medio de poro (nm)	7.7307
DFT	
Ancho de poro (nm)	2.6472

El área superficial específica determinada fue de 4.59879 m²/g, lo que sugiere una baja capacidad de adsorción. La clasificación de la IUPAC (Unión Internacional de Química Pura y Aplicada) establece que los poros con tamaños entre 2 y 50 nm corresponden a la categoría de mesoporos [98] [99]. Esto confirma que el ZnO posee una estructura mesoporosa, lo que lo hace ideal para aplicaciones de adsorción y catálisis, ya que permite una difusión eficiente de moléculas dentro de los poros [100].

4.7.2. ZnO-Co-2%

La Tabla 15 muestra los resultados del análisis de las muestras de ZnO dopado con Co, donde se observa que la adición del 2% de Co provoca una ligera disminución en el área superficial. Esta reducción puede atribuirse a la modificación de la morfología del ZnO y a la ocupación de sitios activos por los iones Co^{2+} . El material obtenido presenta una estructura mesoporosa; sin embargo, el bajo volumen de poro indica una cantidad limitada de poros o un tamaño reducido de los mismos, lo que podría influir en la capacidad de adsorción del material.

Tabla 15. Análisis BET ZnO-Co-2%.

BET	
Área superficial (m^2/g)	4.53948
Volumen total de poro (cc/g)	0.016011
Porosidad (%)	10.582
Diámetro medio de poro (nm)	14.108
DFT	
Ancho de poro (nm)	2.4194

4.7.3. ZnO-Co-4%

La Tabla 16 presenta los resultados del análisis de las muestras de ZnO dopado con un 4% de Co, donde se observa un aumento significativo en el área superficial, alcanzando un valor de $9.96244 \text{ m}^2/\text{g}$. Este aumento sugiere que la incorporación de Co en mayor proporción podría estar generando una estructura más porosa, posiblemente debido a la alteración en la disposición de las partículas de ZnO. El volumen total de poro de 0.063144 cc/g , junto con un porcentaje de porosidad del 42.378%, indica una mayor disponibilidad de espacio para la adsorción en comparación con el dopaje al 2%, lo que podría

mejorar el rendimiento del material en aplicaciones de descontaminación ambiental [101].

Tabla 16. Análisis BET ZnO-Co-4%.

BET	
Área superficial (m ² /g)	9.96244
Volumen total de poro (cc/g)	0.063144
Porosidad (%)	42.378
Diámetro medio de poro (nm)	25.353
DFT	
Ancho de poro (nm)	3.7750

4.7.4. ZnO-Co-6%

En los resultados obtenidos se observa una disminución del área superficial a 5.01425 m²/g en comparación con la muestra dopada con 4% de Co. Esta reducción sugiere que una mayor concentración de cobalto podría estar generando una aglomeración de partículas o una menor disponibilidad de sitios activos debido a la posible ocupación de la superficie por los iones Co²⁺. El material sigue presentando una estructura mesoporosa, con un diámetro medio de poro de 21.521 nm, lo que permite la difusión de moléculas dentro del material. Sin embargo, el volumen total de poro de 0.026978 cc/g y un porcentaje de porosidad del 17.702% indican una menor cantidad de poros en comparación con la muestra dopada con 4% de Co, lo que podría afectar la capacidad de adsorción del material.

Tabla 17. Análisis BET ZnO-Co-6%.

BET	
Área superficial (m ² /g)	5.01425
Volumen total de poro (cc/g)	0.026978

Porosidad (%)	17.702
Diámetro medio de poro (nm)	21.521
DFT	
Ancho de poro (nm)	11.1731

4.7.5. Isoterma de adsorción

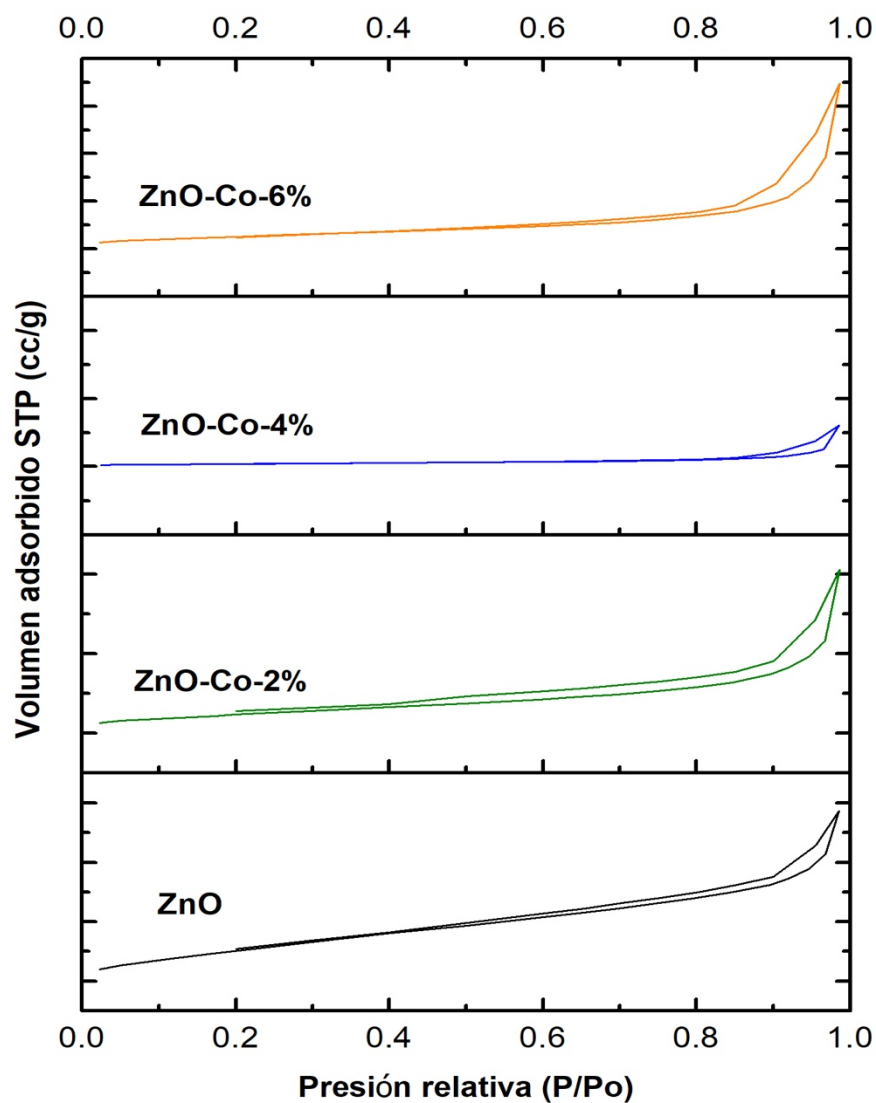


Figura 41 Isotermas ZnO y ZnO-Co.

La Figura 41 muestra una isoterma de adsorción de tipo IV, de acuerdo con la clasificación de la IUPAC, la cual describe el comportamiento de adsorción de

un gas en la superficie del material. La presencia de esta isoterma, junto con un ciclo de histéresis de tipo H3, indica que el material contiene mesoporos, con tamaños de poro en el rango de 2 a 50 nm [102].

Este tipo de histéresis sugiere la existencia de una estructura porosa compuesta por agregados de partículas o láminas con poros no completamente cerrados, lo que favorece su aplicación en procesos de adsorción y catálisis al permitir una adecuada difusión de moléculas dentro de la estructura porosa. Describe cómo el gas se adsorbe en la superficie en distintas etapas: primero llenando pequeños espacios, luego formando capas de moléculas, y finalmente condensándose en la superficie a altas presiones [103] [104].

4.8. Evaluación fotocatalítica

4.8.1 Degradación de Paracetamol

Los resultados obtenidos de la evaluación fotocatalítica para las muestras de ZnO puro, ZnO-Co-2%, ZnO-Co-4% y ZnO-Co-6% fueron analizados durante un período de 300 minutos bajo irradiación de luz UV. Se observó una diferencia notable en la eficiencia de degradación entre el ZnO puro y las muestras dopadas con cobalto. El ZnO puro presentó la mayor eficiencia, logrando un 99% de degradación de paracetamol en 300 min figura 42 [105] [106], mientras que las muestras dopadas mostraron una disminución significativa en su actividad fotocatalítica.

En particular, la muestra ZnO-Co-4% alcanzó únicamente un 57% de degradación, lo cual se atribuye a las características estructurales previamente descritas, como la pérdida de la morfología y la formación de aglomeraciones. Estas alteraciones estructurales, que incluyen la desorganización de las nanobarras hexagonales y la presencia de agrupamientos de partículas, reducen la área superficial disponible para la interacción con el contaminante.

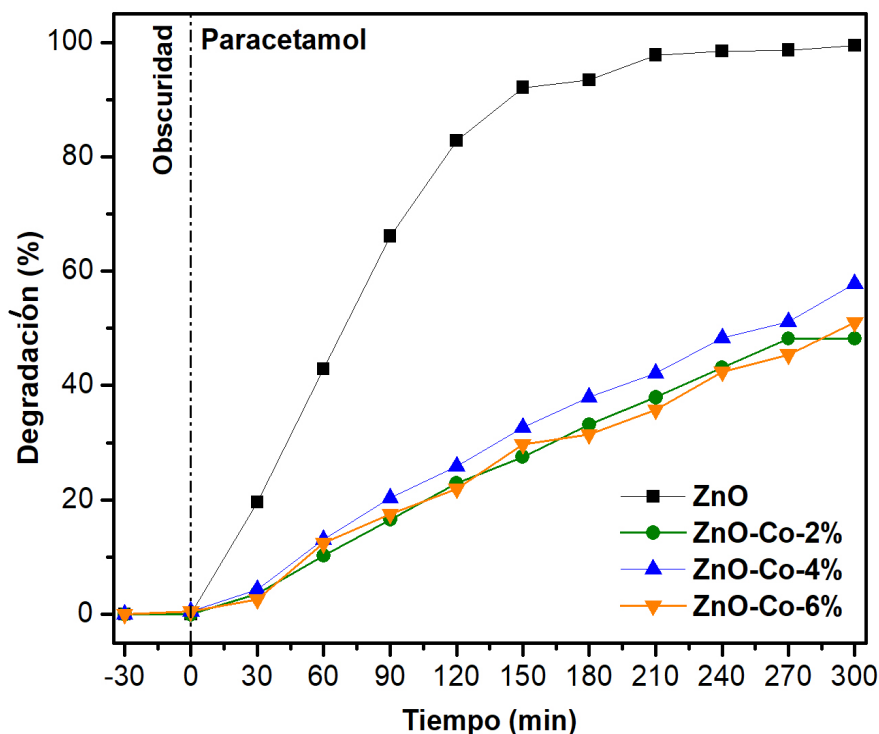


Figura 42. Evaluación fotocatalítica para la degradación de Paracetamol.

Un área superficial menor implica menos sitios activos para la adsorción y la generación de especies reactivas, lo que limita la eficiencia del proceso fotocatalítico. Este comportamiento también se observó en las muestras ZnO-Co-2% y ZnO-Co-6%, que presentaron una degradación de 48% y 51%, respectivamente. En ambas, el aumento de las aglomeraciones y la mayor desorganización de la estructura provocaron una disminución del contacto efectivo entre el material y la solución contaminante, lo que también afectó negativamente la eficiencia fotocatalítica [11]. Estos resultados destacan la importancia de mantener una estructura adecuada y una distribución homogénea del dopante para maximizar el rendimiento en procesos de degradación de contaminantes.

4.8.2. Degradación de TMP/SMX

En el estudio de la degradación del antibiótico, el ZnO puro demostró la mayor actividad fotocatalítica, alcanzando un 97% de degradación en 240 minutos figura 43.

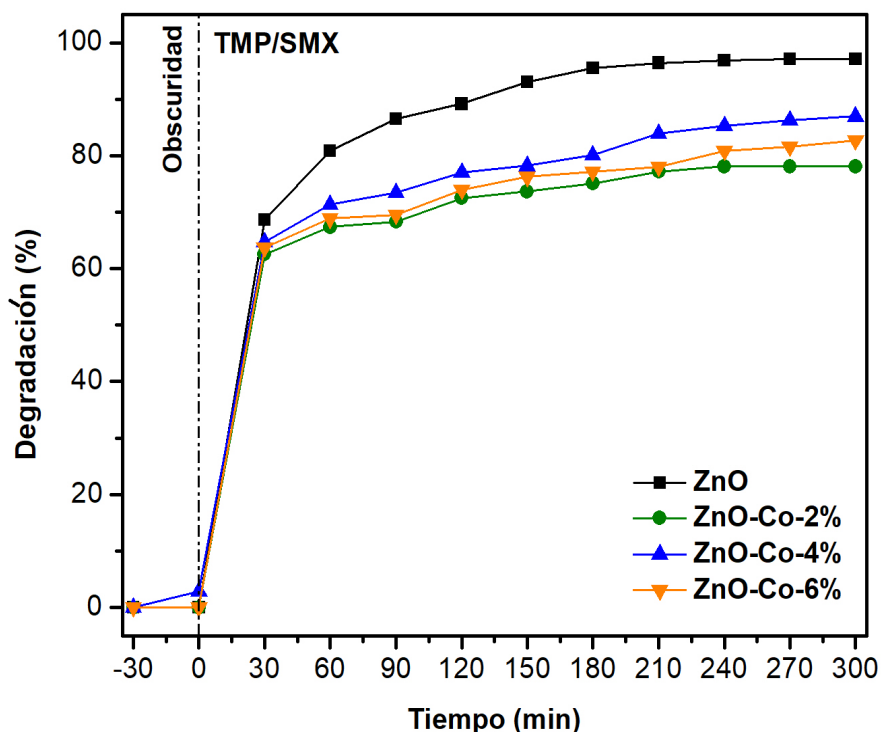


Figura 43. Evaluación fotocatalítica para la degradación de TMP/SMX.

Aunque las muestras dopadas con cobalto también lograron degradar el antibiótico, su eficiencia fue significativamente menor, con degradaciones de 78%, 87% y 82% para los dopajes de Co al 2%, 4% y 6%, respectivamente. Sin embargo, ninguna de estas muestras alcanzó la eficacia del ZnO puro. Este comportamiento puede atribuirse a las alteraciones estructurales causadas por el dopaje con cobalto. Además, el dopaje con Co podría haber introducido defectos en la red cristalina, afectando la generación de especies reactivas necesarias para la degradación del antibiótico [11]. Un comportamiento similar se observó en la degradación del antiinflamatorio, donde todas las muestras dopadas mostraron una eficiencia comparable, aunque menor que la del ZnO

puro [107]. Entre las muestras dopadas, la mejor respuesta fotocatalítica correspondió a la ZnO-Co-4%, lo que sugiere que esta concentración específica de dopante ofrece un mejor equilibrio entre la actividad fotocatalítica y las propiedades estructurales del material. La mejor eficiencia de la muestra ZnO-Co-4% puede estar relacionada con una distribución más homogénea del dopante, que favorece una mayor estabilidad estructural y una interacción más efectiva con los contaminantes.

4.8.3. Evaluación de fotólisis, fotocátalisis y adsorción de ZnO y ZnO-Co

En este proceso de evaluación, se analizaron las dos mejores muestras en términos de degradación: ZnO puro y ZnO-Co-4%. Para examinar su comportamiento, se consideraron tres parámetros fundamentales:

- **Fotólisis:** Este parámetro consistió en exponer la solución contaminante directamente a la luz UV, sin la presencia del fotocatalizador. Como se observa en las Figuras 44 y 45, no se detectó ninguna actividad fotocatalítica bajo estas condiciones, lo que confirma que la degradación de los contaminantes no ocurre únicamente por la incidencia de la luz.
- **Adsorción:** En esta etapa, la solución contaminante se mezcló con el fotocatalizador en ausencia de luz (obscuridad). Los resultados mostraron una adsorción del 2% (Figura 44), atribuida a la interacción entre las partículas contaminantes y la superficie del fotocatalizador. En la Figura 45, se observa que el porcentaje de adsorción no supera el 1%, lo que sugiere que no hay una adhesión significativa de las partículas contaminantes sobre el fotocatalizador.
- **Fotocátalisis:** En este último parámetro, la solución contaminante fue mezclada con el fotocatalizador y expuesta a la luz UV. Este proceso mostró una clara actividad fotocatalítica, confirmando la degradación de

los contaminantes emergentes. La presencia de luz, combinada con el fotocatalizador, fue clave para generar los mecanismos responsables de la degradación efectiva de los compuestos analizados.

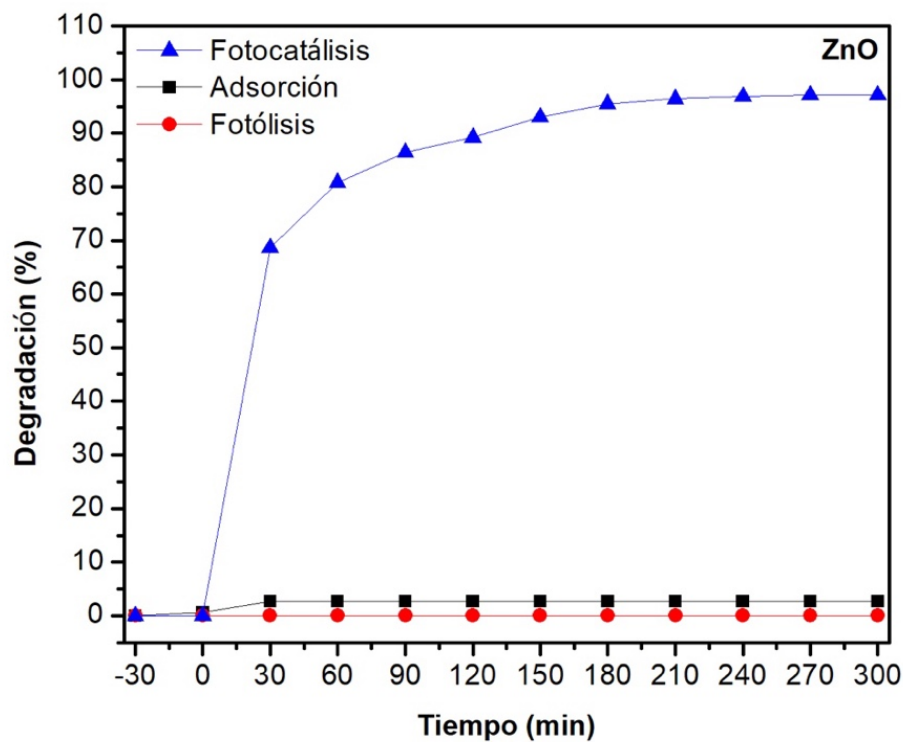


Figura 44. Fotocatálisis, adsorción y fotólisis ZnO.

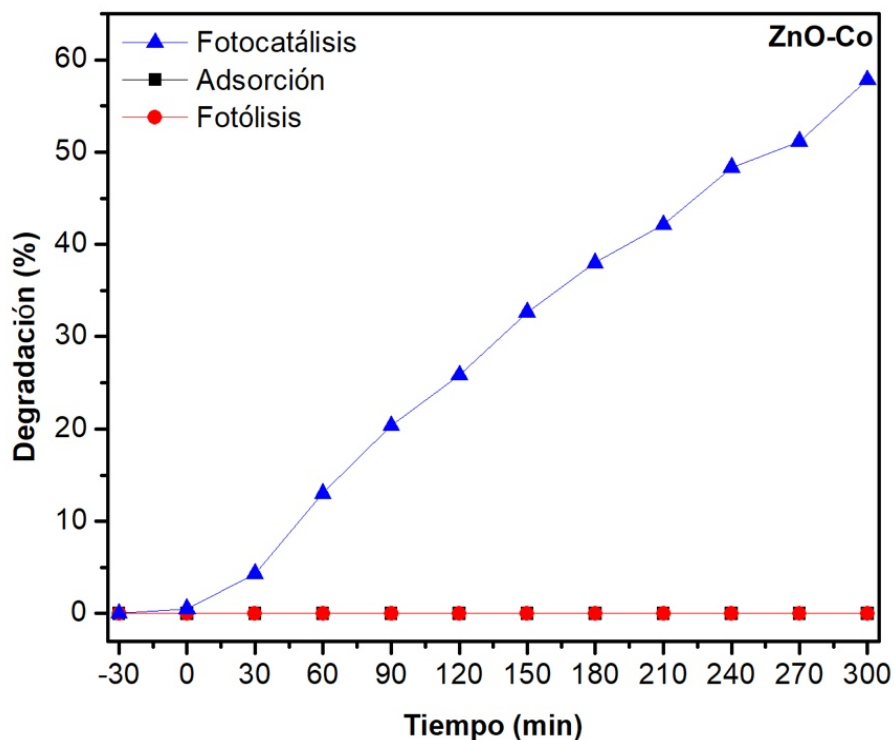


Figura 45. Fotocatálisis, adsorción y fotólisis ZnO-Co-4%.

4.8.4. Eficiencia de ZnO y ZnO-Co mediante ciclos

Como se observa en las Figuras 46 y 47, se llevaron a cabo pruebas cíclicas para los contaminantes TMP/SMX y Paracetamol, con el objetivo de evaluar la eficiencia del fotocatalizador tras 3 usos consecutivos. Al finalizar cada ciclo de fotodegradación, el fotocatalizador fue sometido a un proceso de lavado para eliminar cualquier partícula residual de contaminante que pudiera haberse adherido a su superficie durante la reacción.

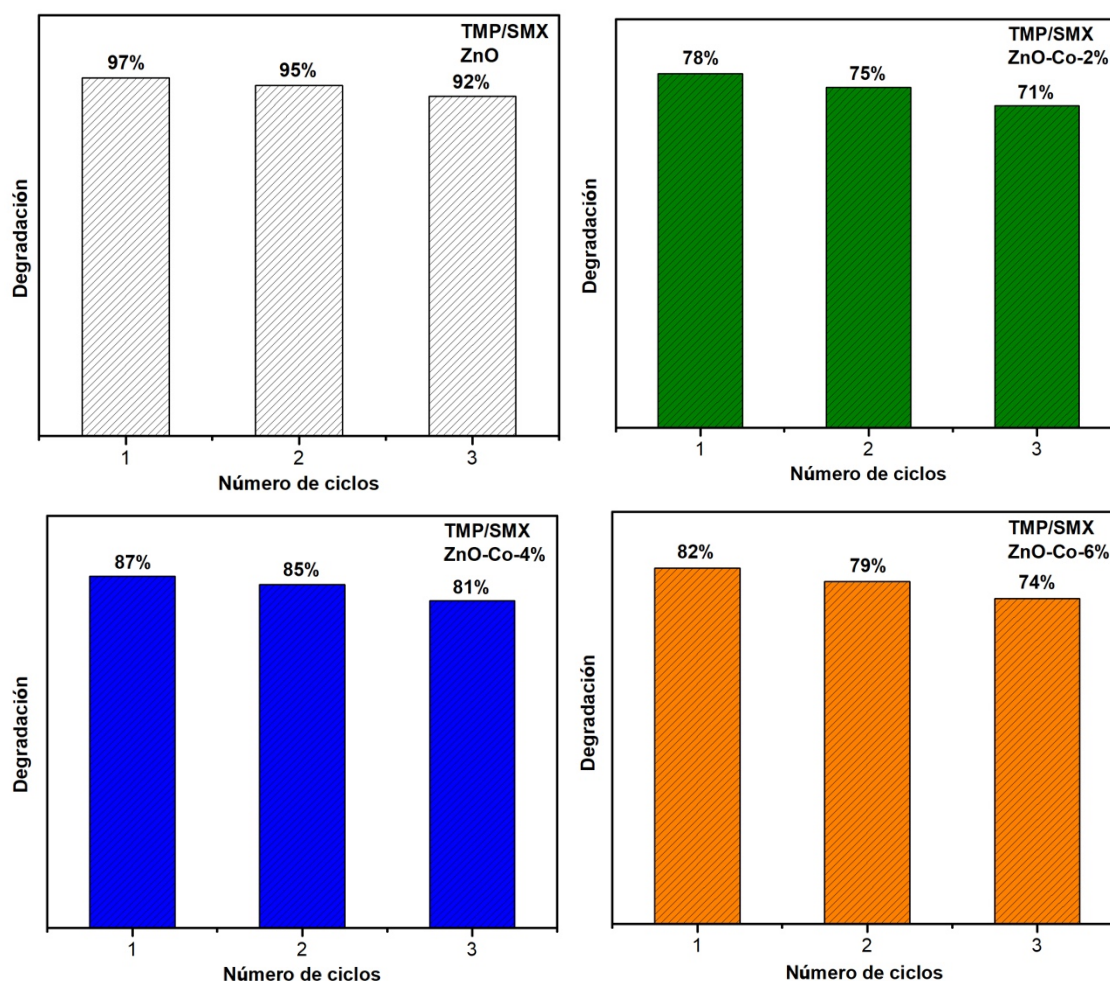


Figura 46. Número de ciclos para la degradación de TMP/SMX usando como fotocatalizador ZnO y ZnO-Co.

Dado que el material catalítico presentaba una morfología de polvo fino, se logró recuperar una gran parte después de cada ciclo. Sin embargo, debido a las pérdidas inevitables durante el proceso de manipulación y lavado, se observó una disminución progresiva en la eficiencia del fotocatalizador a lo largo de los ciclos. Este comportamiento se atribuye tanto a la pérdida parcial del material como a posibles alteraciones en la superficie activa del fotocatalizador tras los sucesivos usos.

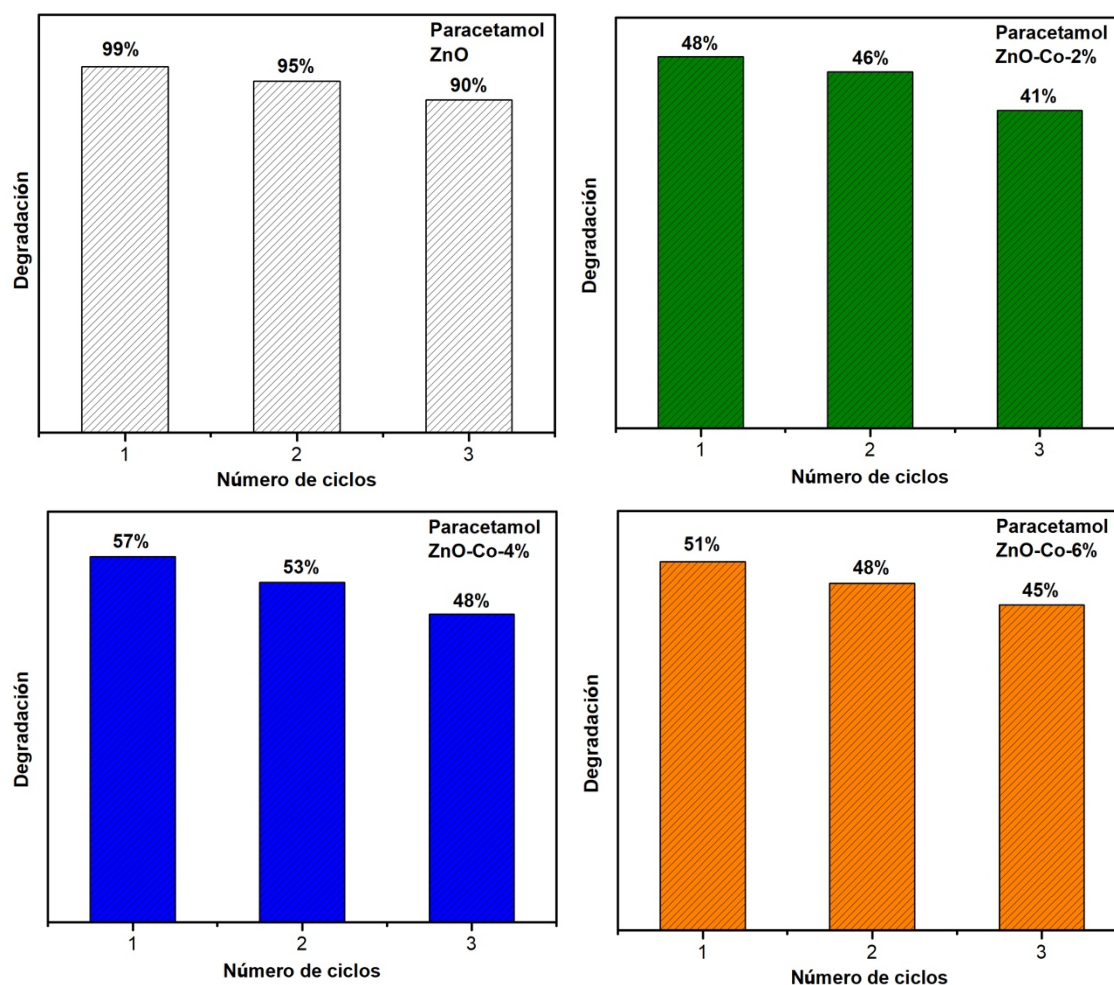


Figura 47. Número de ciclos para la degradación de Paracetamol usando como fotocatalizador ZnO y ZnO-Co.

4.9. Análisis de la solución TMP/SMX y paracetamol mediante espectroscopía Infrarroja por Transformada de Fourier (FT-IR)

4.9.1. Espectro TMP/SMX y Paracetamol

El espectro FT-IR de TMP/SMX en solución acuosa muestra alteraciones significativas en comparación con los valores reportados en estado sólido [108] [109], principalmente debido a la presencia del agua, que afecta la intensidad y posición de las bandas características. Estas diferencias sugieren que el medio acuoso induce interacciones intermoleculares que pueden modificar la estructura vibracional de los grupos funcionales analizados.

Para mejorar la interpretación del espectro, sería recomendable comparar con un espectro de agua pura en las mismas condiciones experimentales y restar su contribución o utilizar métodos de corrección basados en referencias.

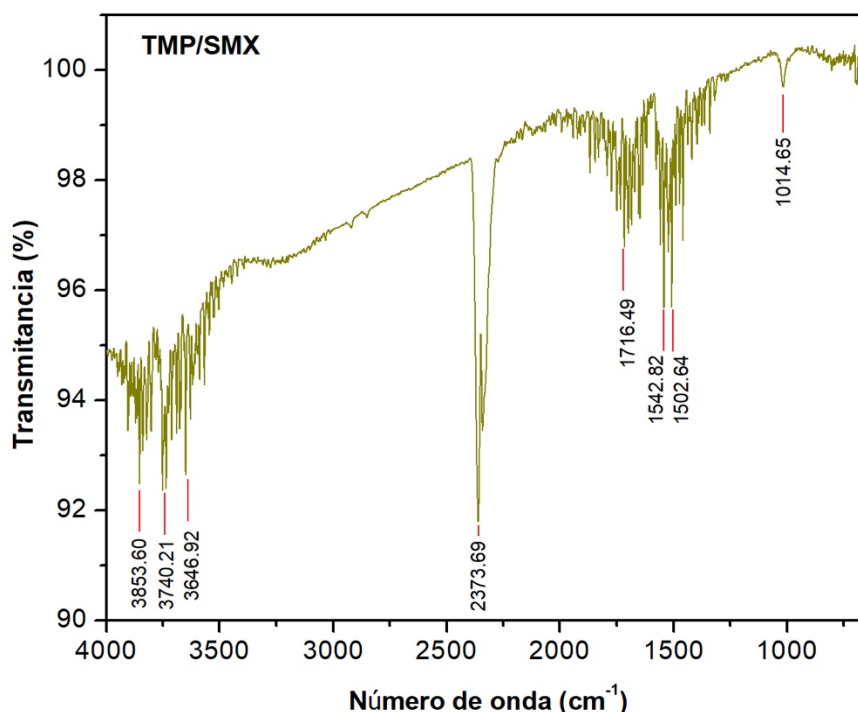


Figura 48. Espectro infrarrojo TMP/SMX solución a 10 ppm.

El pico observado en 2373.69 cm^{-1} corresponde al CO_2 presente en la atmósfera, que es detectado comúnmente en los análisis FT-IR debido a su absorción característica en esta región del espectro. Sin embargo, este pico no interfiere en la medición ni en la interpretación de los grupos funcionales de interés en la muestra, ya que no coincide con las bandas características de los compuestos analizados. Por lo tanto, puede ser considerado un artefacto inherente al entorno experimental [110].

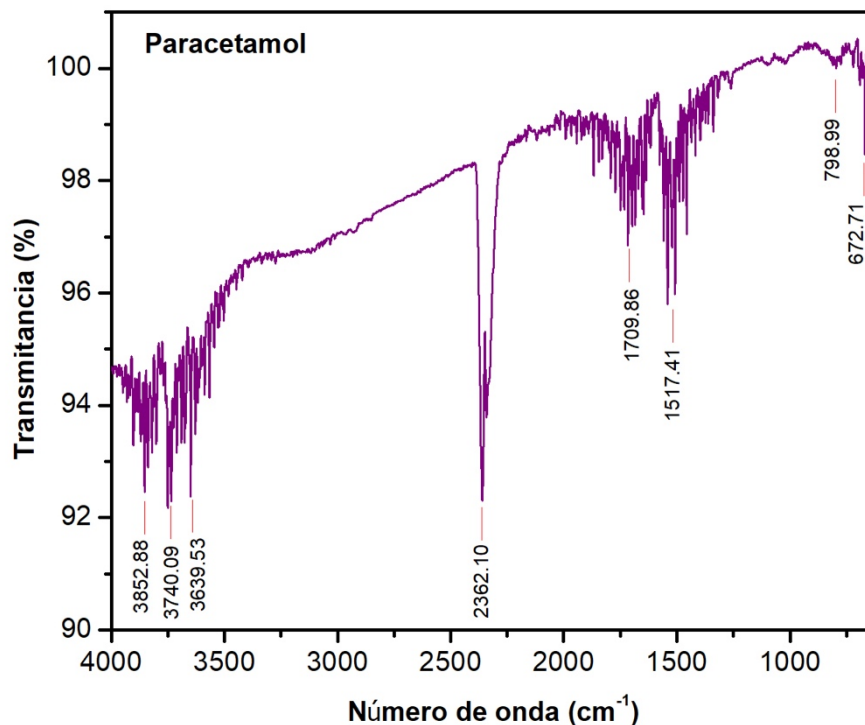


Figura 49. Espectro infrarrojo Paracetamol solución a 10 ppm.

El mismo caso se observa en el análisis del paracetamol, donde la presencia de agua interfiere significativamente en el espectro, generando alteraciones en los valores característicos reportados para el compuesto en estado sólido, según como reporta Chanda, Abhijit su estado sólido [111] [112].

4.9.2. ZnO TMP/SMX

Durante el periodo de degradación, se analizaron cuatro muestras representativas. Inicialmente, se evaluó la solución del fármaco a una concentración de 10 ppm. Posteriormente, se tomó una muestra tras 30 minutos en oscuridad con el fotocatalizador, seguido de la exposición a luz UV, recolectándose muestras adicionales a los 150 y 300 minutos. Este procedimiento, ilustrado en las Figuras 50, 51, 52 y 53, permitió observar los cambios iniciales y finales del proceso, evidenciando la descomposición progresiva de los fármacos.

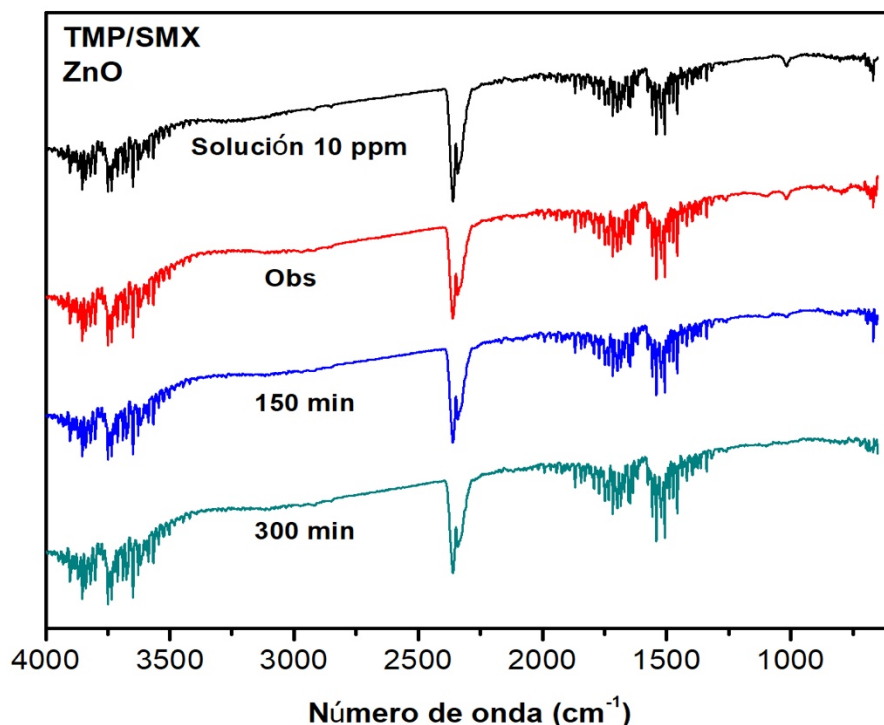


Figura 50. Espectro infrarrojo TMP/SMX ZnO. a) solución inicial, b) 30 min obscuridad, c) 150 min expuesto a luz UV y d) 300 min expuesto a luz UV.

Como se muestra en la Figura 50, durante la degradación de TMP/SMX utilizando el fotocatalizador ZnO, no se observan cambios significativos en el espectro entre 4000 y 1250 cm^{-1} . Sin embargo, el pico localizado en 1014.65 cm^{-1} presenta una disminución progresiva con la exposición a la luz, hasta desaparecer por completo al alcanzar los 300 minutos, evidenciando la descomposición del fármaco en esta región específica del espectro.

4.9.3. ZnO Paracetamol

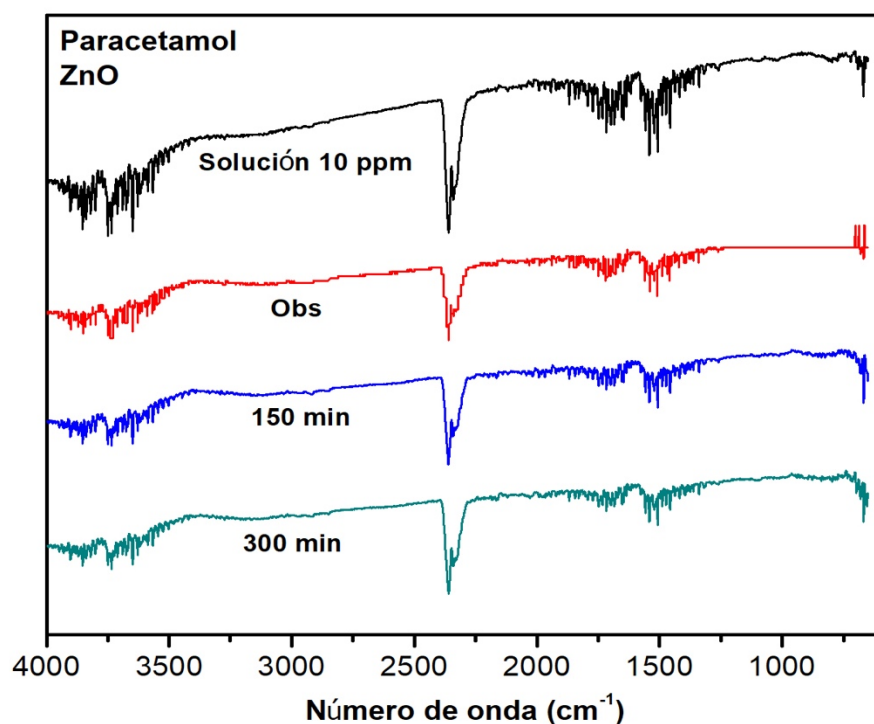


Figura 51. Espectro infrarrojo Paracetamol ZnO. a) solución inicial, b) 30 min oscuridad, c) 150 min expuesto a luz UV y d) 300 min expuesto a luz UV.

En comparación con el espectro del paracetamol, no se observan cambios evidentes debido al ruido presente, atribuible a la naturaleza de la solución acuosa. Sin embargo, se aprecia una disminución progresiva en la intensidad de los picos con el tiempo, lo que indica que el ZnO tuvo un efecto notable en el compuesto.

4.9.4. ZnO-Co-4% TMP/SMX

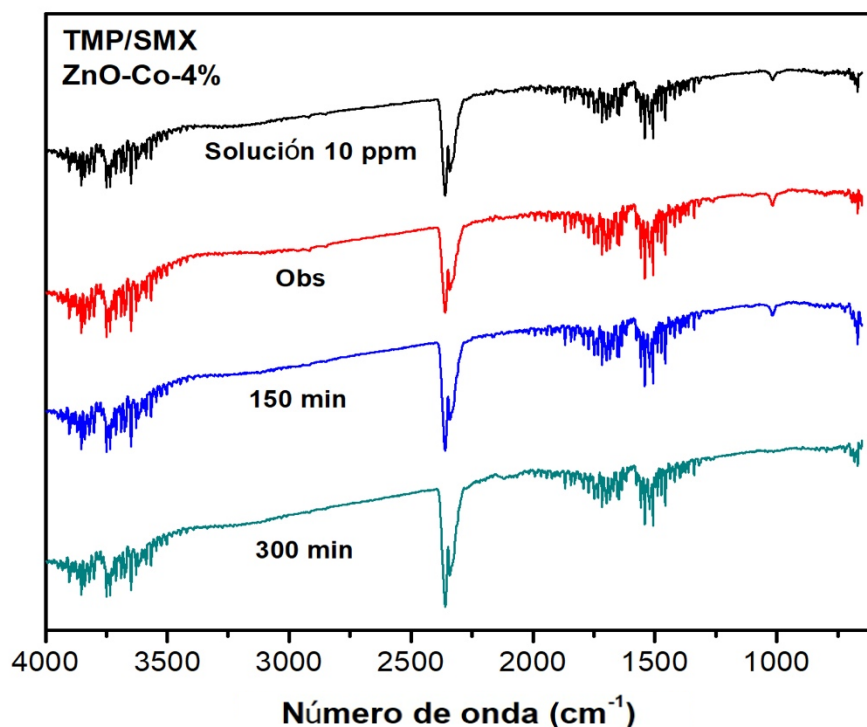


Figura 52. Espectro infrarrojo TMP/SMX ZnO-Co-4%. a) solución inicial, b) 30 min obscuridad, c) 150 min expuesto a luz UV y d) 300 min expuesto a luz UV.

Como se muestra en la Figura 50 y 52, tanto para ZnO como para ZnO-Co-4%, se observa una tendencia similar en la degradación de TMP/SMX, evidenciada por la disminución del pico a 1014.65 cm^{-1} , que desaparece completamente después de 300 minutos de exposición a luz. Esto sugiere que tanto ZnO como ZnO-Co-4% tienen la capacidad de descomponer la estructura de los fármacos.

4.9.5. ZnO-Co-4% Paracetamol

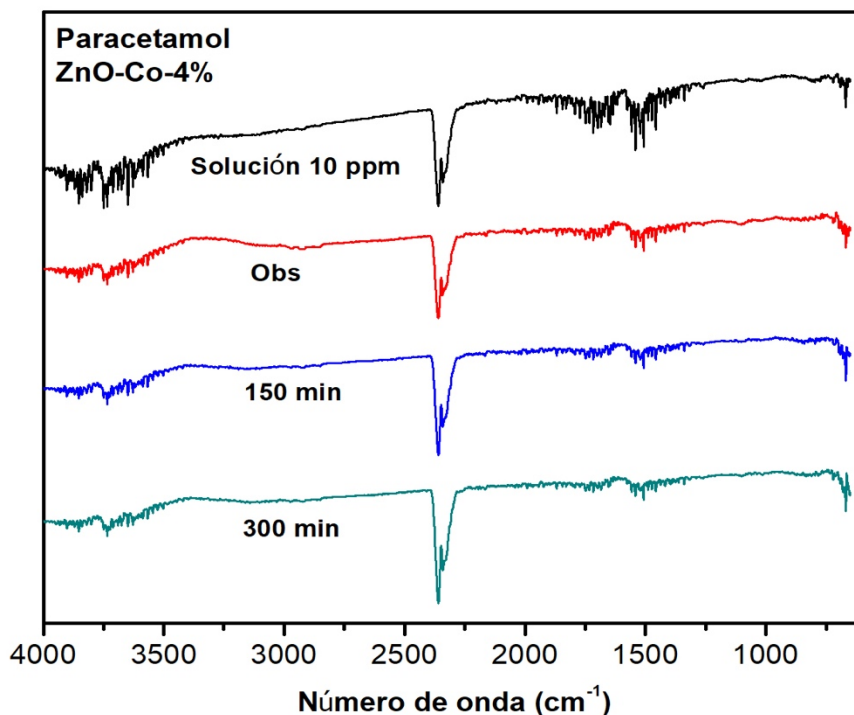


Figura 53. Espectro infrarrojo Paracetamol ZnO-Co-4%. a) solución inicial, b) 30 min obscuridad, c) 150 min expuesto a luz UV y d) 300 min expuesto a luz UV.

La degradación de paracetamol con ZnO y ZnO-Co al 4% se vuelve más evidente con el tiempo, observándose una disminución en la intensidad de la señal y menos ruido, lo que confirma la descomposición efectiva del paracetamol. Esto demuestra que el uso de fotocatalizadores como ZnO y ZnO-Co es altamente efectivo para la degradación de fármacos, ya que facilitan la descomposición de contaminantes emergentes en el agua mediante un proceso fotocatalítico, contribuyendo a la purificación del agua de manera eficiente [11].

CAPÍTULO 5

CONCLUSIONES

En este capítulo, se exponen las conclusiones más destacadas obtenidas a lo largo de este estudio de investigación. Se detallan los hallazgos significativos de la experimentación realizada, del análisis y de los resultados obtenidos.

- Se lograron sintetizar con éxito muestras de ZnO y ZnO dopado con cobalto (Co) en concentraciones 2,4 y 6% en peso.
- Los resultados de colorimetría mostraron que los colores obtenidos para ZnO puro, ZnO-Co al 2%, ZnO-Co al 4% y ZnO-Co al 6% fueron gris claro, verde mar oscuro y verde olivo oscuro, respectivamente.
- La caracterización estructural mediante difracción de rayos X (DRX) confirmó la presencia de ZnO puro con una estructura cristalina hexagonal tipo Wurtzita.
- En el caso de las muestras dopadas, el análisis de DRX confirmó exitosamente el dopaje con cobalto, evidenciado por un ligero desplazamiento en los picos de difracción. Este cambio se atribuye al reemplazo de los radios iónicos de zinc por los de cobalto, manteniendo la estructura hexagonal del material.
- Los resultados de E_g mostraron una ligera reducción con el aumento en la concentración de cobalto, con valores de 3.25 eV para ZnO puro, 3.25 eV para ZnO-Co 2%, 3.22 eV para ZnO-Co 4% y 3.21 eV para ZnO-Co 6%, indicando que el dopaje afecta las propiedades ópticas del material, lo cual influyó en la capacidad para absorber luz.
- El análisis morfológico mostró que las muestras de ZnO puro presentan nanobarras hexagonales bien definidas. El dopaje con cobalto alteró significativamente la morfología: en ZnO-Co 2%, se observó fractura de las nanobarras y aparición de granos de Co; en ZnO-Co 4%, los granos de Co se distribuyeron de manera dispersa con menor definición estructural; y en ZnO-Co 6%, predominó una morfología irregular y aglomerada, con granos de Co más evidentes, lo que refleja el impacto del dopaje en la estructura superficial del material.

- Los resultados de FRX confirmaron el dopaje exitoso de ZnO con cobalto, mostrando concentraciones de cobalto en las muestras de ZnO-Co de 1.27% para 2%, 4.47% para 4% y 6.75% para 6%, lo que evidencia la incorporación del cobalto en las estructuras de ZnO.
- Los resultados del análisis BET mostraron un aumento en el área superficial específica de las muestras dopadas con cobalto en comparación con el ZnO puro. Sin embargo, este incremento no resultó en una mejora en la eficiencia fotocatalítica, debido a la aglomeración observada en concentraciones más altas de cobalto.
- En las pruebas fotocatalíticas para la degradación de paracetamol, el ZnO puro mostró una eficiencia sobresaliente con un 99% de degradación. En cambio, el ZnO-Co 4% alcanzó un 57%, mientras que ZnO-Co 2% y ZnO-Co 6% lograron 48% y 51%, respectivamente, lo que refleja una disminución en la eficiencia debido a las aglomeraciones presentes en la morfología de las muestras dopadas.
- Para la degradación de TMP/SMX, el ZnO puro logró un 97% de degradación, mientras que el ZnO-Co 4% alcanzó un 87%, mostrando un mejor desempeño que en la degradación de paracetamol, aunque aún inferior al ZnO puro. Las muestras ZnO-Co 2% y ZnO-Co 6% presentaron degradaciones de 78% y 82%, respectivamente.
- El análisis de fotólisis, adsorción y fotocátalisis confirmó la degradación fotocatalítica debido a la activación del fotocatalizador por la luz. Sin embargo, en el proceso de adsorción, no se observó un cambio significativo en el ZnO-Co 4% en comparación con el ZnO puro.
- El análisis cíclico confirmó la eficiencia del material tras cada proceso de degradación, aunque se observó una disminución en la eficiencia debido

a la pérdida de polvo en cada ciclo.

- El análisis de la solución por FT-IR no proporcionó espectros definidos debido a la naturaleza acuosa de la solución; sin embargo, se observó una disminución en la intensidad de los picos, indicando la degradación del contaminante.
- Estos resultados destacan la capacidad del ZnO puro como un fotocatalizador altamente eficiente, mientras que el dopaje con cobalto, aunque mejora ciertas propiedades estructurales y electrónicas, introduce limitaciones en la morfología, lo que afecta negativamente la actividad fotocatalítica.
- Las diferencias en eficiencia entre las muestras sugieren que la mejora de la concentración de dopante y la morfología del material son factores clave para maximizar la actividad fotocatalítica.
- Este estudio proporciona una base sólida para futuras investigaciones dirigidas a mejorar las propiedades de los nanomateriales dopados, buscando equilibrar las ventajas electrónicas y ópticas del dopaje con una morfología óptima para aplicaciones en la degradación de contaminantes emergentes.

TRABAJOS A FUTURO

- Evaluar diferentes tipos de morfologías bajo las mismas condiciones experimentales.
- Evaluar de la degradación de otros contaminantes emergentes.
- Mejorar el diseño del fotorreactor.

ACTIVIDADES ACADÉMICAS.

Seminarios, coversatorios, congresos, cursos, talleres y publicación.

Participación en el conversatorio “Experiencia y retos de la mujer en el porgrado”.

Tuxtla Gutiérrez, Chiapas- Marzo 2023

Participación en el curso “Creación de Empresas y Registros de Marcas”.

Tuxtla Gutiérrez, Chiapas-Junio 2023

Participación en el 31st International Materials Research Congress – IMRC2023 modalidad póster con el tema “Removal Of Methylene Blue Using Nanostructures Of ZnO Obtained By The Hydrothermal Method”.

Cancún, Quintana Roo-Agosto 2023

Participación en el curso “Divulgación de la Ciencia: Protección Eléctrica, Vida o Muerte”

Tuxtla Gutiérrez Chiapas-Septiembre 2023

Participación en VI Congreso Internacional y VIII Nacional “Universidad, Salud y Ambiente: La importancia de la divulgación y difusión de la Ciencia y la Tecnología” modalidad póster con el tema “Optimización de la producción de biometano a partir de las vinazas de lactosuero”.

Tuxtla Gutiérrez, Chiapas-Septiembre 2023

Participación en la Semana de la Divulgación de la Ciencia e Ingeniería: Energías Renovables 2023 modalidad póster con el tema “Optimización de la producción de biometano a partir de las vinazas de lactosuero”.

Tuxtla Gutiérrez, Chiapas-Septiembre 2023

Participación en 1er Congreso en Ciencias y Desarrollo Tecnológico y el 2° International Materials and Systems Congress for Renewable Energy Applications (IMSCREA 2023) modalidad póster con el tema “Optimización de la producción de biometano a partir de las vinazas de lactosuero”.

Tuxtla Gutiérrez, Chiapas-Septiembre 2023

Participación en el taller “Microscopía Electrónica de Barrido” en el 1er Congreso en Ciencias y Desarrollo Tecnológico y el 2° International Materials and Systems Congress for Renewable Energy Applications (IMSCREA 2023).

Tuxtla Gutiérrez, Chiapas-Septiembre 2023

Participación en el seminario “Creación de Redes Bibliométricas y sus Aplicaciones en la Investigación”.

Tuxtla Gutiérrez, Chiapas-Marzo 2024

Participación en la Semana de las Energías Renovables modalidad póster con el tema “Síntesis y Caracterización de ZnO y ZnO-Co para la Fotodegradación de TMP/SMX y Paracetamol”.

Tuxtla Gutiérrez, Chiapas-Septiembre 2024

Participación en el Taller Mantenimiento y Seguridad Industrial en la Semana de las Energías Renovables.

Tuxtla Gutiérrez, Chiapas-Septiembre 2024

Participación en el Mini Verano de la Investigación Científica 2.4 como instructora del taller “Degradación de colorantes por fotocatalisis heterogénea con ZnO”

Tuxtla Gutiérrez, Chiapas-Junio 2024

Participación como Miembro del Capítulo Estudiantil de la Universidad de Ciencias y Artes de Chiapas de la Sociedad Mexicana de Materiales A.C.

Tuxtla Gutiérrez Chiapas - 2023,2024

Participación en el Simposio Ambiente y Bioenergía en modalidad oral con el tema “Synthesis and characterization of ZnO nanomaterials for photocatalytic applications”.

Boca del Río, Veracruz - 2024

Participación como evaluadora en la exposición de proyectos invernales 2024

San Fernando, Chiapas – 2024

Participación en el Mini Verano de la Investigación Científica 2.5 como instructora del taller “Enlaces químicos”

Tuxtla Gutiérrez, Chiapas - junio 2025

Publicación en el capítulo de libro “Ambiente y bioenergía. El camino a la sustentabilidad”

ISBN 978-607-99118-4-3 – mayo 2025

REFERENCIAS

- [1] M. J. Lopez de Alda y L. Damia Barcelo, «Contaminación y calidad química del agua: el problema de los contaminantes emergentes,» Red del agua UNAM, Barcelona, 2021.
- [2] C. Nunez, «National Geographic,» 25 Abril 2024. [Internet]. Disponible en: <https://www.nationalgeographic.es/medio-ambiente/contaminacion-del-agua>. [Citado 10 Enero 2025].
- [3] M. J. Gil, A. M. Soto, J. I. Usma y O. D. Gutierrez, «Contaminantes emergentes en aguas, efectos y posibles tratamientos,» Producción + Limpia, vol. 7, n° 2, pp. 52-73, 2012.
- [4] I. Martínez Alcalá, J. Soto y A. Lahora, «Antibióticos como contaminantes emergentes. Riesgo ecotoxicológico y control en aguas residuales y depuradas,» Ecosistemas, vol. 29, n° 3, 2020.
- [5] S. Monge, A. Torres Pinto, R. Ribeiro, A. Silva y C. Bengoa, Manual técnico sobre procesos de oxidación avanzada aplicados al tratamiento de aguas residuales industriales, Programa Iberoamericano de Ciencia y Tecnología para el Desarrollo, 2018.
- [6] F. J. A. Cedillo, Estudio de fotocatalizadores nanoestructurados [$\text{SrAl}_2\text{O}_4:\text{Inx}$ y TiO_2] para la posible eliminación de Cr^{6+} en efluentes de tenería, Guanajuato, 2019.
- [7] S. J. Corujedo, «CSIC,» 06 7 2022. [Internet]. Disponible en: <https://rdcsic.dicat.csic.es/tecnologia-de-materiales-2/99-ofertas-tecnologicas/643-fotocatalizadores-para-depurar-el-agua-usando-luz-solar>. [Citado 02 05 2024].
- [8] B. E. J. Cisneros, «Información y calidad del agua en México,» Trayectorias, vol. IX, n° 24, pp. 45-56, 2007.
- [9] J. R. García Barrios y S. Mozka Estrada, Problemas del agua en México ¿Cómo abordarlos?, México: FCE, 2022.
- [10] A. Torres, H. A. Rogríguez y M. Ayala, «Contaminantes emergentes en México: panorama actual, retos y una posible solución biotecnológica,» Scielo, vol. 26, 2024.
- [11] X. Gallardo Monroy, H. F. Olivares Rubio, Á. d. J. Morales Ramírez y J. Hernández Fernández, «Degradación de fármacos mediante fotocátalisis con nanopartículas de ZnO ,» ResearchGate, vol. 39, pp. 319-371, 2022.
- [12] M. Soma, C. Somenath, B. Parita y M. Jaya, «ZnO based nanomaterials for photocatalytic degradation of aqueous pharmaceutical waste

- solutions,» *Environmental Nanotechnology, Monitoring and Management*, 2020.
- [13] S. V. Kiran, T. Rajesh J., S. Kinjal J., J. Pradyuman A. , S. Atindra D. y G. Vimal G. , «Photocatalytic degradation of pharmaceutical and pesticide compounds (PPCs) using doped TiO₂ nanomaterials,» *Chinese Roots Global Impact*, n° 3, pp. 46-61, 2020.
- [14] D. A. P. Sandoval, *Determinación de fármacos en agua residual hospitalaria y aplicación del proceso de fotocatalisis heterogénea solar para su degradación*, Nuevo León, 2018.
- [15] B. L. Martínez Vargas, S. M. Durón Torres, D. Bahena, J. L. Rodríguez López, J. M. Peralta Hernández y A. Picos, «One-pot synthesis of ZnO–Ag and ZnO–Co nanohybrid materials for photocatalytic applications,» *Elsevier*, vol. 135, 2019.
- [16] J. E. B. Bravo, «Contaminantes emergentes en el agua,» *Revista UNAM*, vol. 10, n° 8, 2009.
- [17] J. O. Duricha, «Resistencia bacteriana a los antibióticos,» *Elsevier*, vol. 36, n° 10, pp. 367-370, 2000.
- [18] E. Serna Galvis, Y. L. Martínez Mena, J. Porras y R. A. Torres Palma, «Antibióticos de alto consumo en Colombia, excreción en orina y presencia en aguas residuales» *Ingeniería y competitividad. Revista científica y tecnológica.*, vol. 24, n° 1, 2022.
- [19] D. S. Salazar, *Síntesis y caracterización de catalizadores nanoestructurados de Ni/ZnO para la reformación catalítica de biogás.*, Tuxtla Gutiérrez, 2021.
- [20] M. J. Cerda, *Síntesis y caracterización de ZnO para aplicaciones fotocatalíticas.*, Tuxtla Gutiérrez, 2022.
- [21] G. M. Hincapié Mejía, D. Ocampo, G. M. Restrepo y J. M. Marín, «Fotocatálisis Heterogénea y Foto-Fenton Aplicadas al Tratamiento de Aguas de Lavado de la Producción de Biodiesel,» *Scielo*, vol. 22, n° 2, pp. 33-42, 2011.
- [22] B. Bajorowicz, M. P. Kobylański, A. Malankowska, P. Mazierski, J. Nadolna, A. Pieczyńska y A. Z. Medynska, «Application of metal oxide-based photocatalysis,» *In Metal Oxides, Metal Oxide-Based Photocatalysis*, Elsevier, 2018, pp. 211-340.
- [23] J. C. F. Gonzalez, «Between understanding and predicting the performance of solid catalysts,» *Scielo*, vol. 14, n° 26, 2021.
- [24] C. D. Chicaiza Ortiz, K. V. Salazar García, K. Diéguez Santana, Á. F.

- Chicaiza Ortiz, V. P. Navarrete Villa y J. Zhang, «Aplicaciones de los catalizadores y su evaluación a través de análisis de ciclo de vida,» *Revista Ciencia UNEMI*, vol. 14, n° 37, pp. 60-72, 2021.
- [25] K. G. R. Soto, Síntesis y caracterización de nanomateriales de ZnO y ZnSe para la producción fotocatalítica de hidrógeno, Tuxtla Gutiérrez, 2023.
- [26] E. Vazquez Contreras y T. G. Rojas Perez, pH: Teoría y 232 problemas, Ciudad de México: Universidad Autónoma Metropolitana, 2016.
- [27] A. M. A. Gómez, pH, historia de un concepto. Análisis de textos de educación superior., Bogotá, 2013.
- [28] Libretexts, «Effects of Temperature, Concentration, and Catalysts on Reaction Rates,» LibreTexts Chemistry, 2020. [Internet]. Disponible en: https://chem.libretexts.org/Courses/Chabot_College/Introduction_to_General_Organic_and_Biochemistry/10%3A_Reaction_Rates_and_Equilibrium/10.03%3A_Effects_of_Temperature_Concentration_and_Catalysts_on_Reaction_Rates. [Citado 8 junio 2024].
- [29] L. F. Garcés Giraldo, E. A. Mejía Franco y J. J. Santamaría Arango, «La fotocatalisis como alternativa para el tratamiento de aguas residuales,» *Lasallista*, vol. 1, n° 1, pp. 83-92, 2004.
- [30] M. Rodríguez Peña y C. E. Barrera Dias, Procesos de oxidación avanzada en el tratamiento de agua., Toluca: Comps, 2020.
- [31] B. Abrams y J. Wilcoxon, «Nanosized semiconductors for photooxidation,» *Critical reviews in materials and solid state sciences.*, vol. 30, n° 3, pp. 153-182, 2005.
- [32] T. d. instalaciones., «Geocities.ws,» [Internet]. Disponible en: https://www.geocities.ws/ram_herrera/asignaturas/ti/ti.html. [Citado 08 junio 2024].
- [33] N. Baig, I. Kammakakam y L. Falath, «Nanomaterials: a review of synthesis methods, properties, recent progress, and challenges,» *Materials Advances*, n° 2, pp. 1821-1871, 2021.
- [34] D. J. Sánchez, «Linkedin,» 9 Septiembre 2017. [Internet]. Disponible en: <https://es.linkedin.com/pulse/nanomateriales-introducci%C3%B3n-i-david-jim%C3%A9nez-s%C3%A1nchez>. [Citado 14 Enero 2025].
- [35] Z. Fan y J. G. Lu, «Zinc Oxide Nanostructures: Synthesis and Properties,» *American Scientific Publishers*, vol. 5, n° 10, pp. 1561-1573, 2005.
- [36] T. Wonglakhon y Z. Dirk, «Potenciales de interacción para modelar la

- precipitación de GaN y el polimorfismo de estado sólido,» ResearchGate, vol. 32, n° 20, 2020.
- [37] E. J. Baran, «Cobalto: un elemento crítico y estratégico,» Anuales Acad. Nac. de Cs. Ex., Fís. y Nat, n° 70, pp. 77-106, 2018.
- [38] D. Klarström, P. Crook y M. d. S. Jahan, «Cobalt Alloys and Designation System,» Reference Module in Materials Science and Materials Engineering, 2018.
- [39] S. Ansari, R. Bhor, K. Pai, D. Sen, S. Mazumder, K. Ghosh, Y. Kolekar y C. Ramana, «Cobalt nanoparticles for biomedical applications: Facile synthesis, physiochemical characterization, cytotoxicity behavior and biocompatibility,» Applied Surface Science, Elsevier, 2017, pp. 171-187.
- [40] A. K. Sivan, . Galán González , L. Di Mario, N. Tappy , J. Hernández Ferrer , D. Catone , S. Turchini , A. M. Benito , W. K. Maser , S. Escobar Steinvall , A. Fontcuberta i Morral y G, «Optical properties and carrier dynamics in Co-doped ZnO nanorods,» Nanoscale Advances, vol. 3, pp. 214-222 , 2021.
- [41] H. A. Milquez Sanabria y J. Camilo Montagut, «Impact of emerging pollutants in aquatic environment and treatments for control and removal in water bodies.,» Scielo, vol. 25, n° 3, 2023.
- [42] I. Quesada Peñate, U. J. Jáuregui Haza, A. M. Wilhelm y H. Delmas , «Contaminación de las aguas con productos farmaceuticos. Estrategias para enfrentar la problemática,» Revista CENIC. Ciencias Biológicas, vol. 40, n° 3, pp. 173-179, 2009.
- [43] R. L. Acevedo Barrios, C. A. Severiche Sierra y J. D. C. Jaimes Morales, «Efectos tóxicos del paracetamol en la salud humana y el ambiente,» Revista de Investigación Agraria y Ambiental, vol. 8, n° 1, 2017.
- [44] R. J. N.S. Bajaj, «Chapter 3 - Energy materials: synthesis and characterization techniques.,» Energy Materials, Elsevier, 2021, pp. 61-82.
- [45] X. Hu, D. Zuo, S. Cheng, S. Chen, Y. Liu, W. Bao, S. Deng, S. J. Harris y J. Wan, «Ultrafast materials synthesis and manufacturing techniques for emerging energy and environmental applications,» Chemical Society Reviews, n° 52, pp. 1103-1128, 2023.
- [46] R. K. Pawan Kumar, «Synthesis process of functionalized ZnO nanostructure for additive manufacturing: a state-of-the-art review,» Additive Manufacturing with Functionalized Nanomaterials, Elsevier, 2021, pp. 135-153,.

- [47] N. Hussain Solangi , R. Rao Karri , N. Mujawar Mubarak y S. Ali Mazari , «Mechanism of polymer composite-based nanomaterial for biomedical applications,» KINGFA, vol. 7, n° 1, pp. 1-19, 2024.
- [48] R. VN Gundloori, A. Singam y N. Killi, «Nanobased intravenous and transdermal drug delivery systems,» Applications of Targeted Nano Drugs and Delivery Systems, 2019, pp. 551-594.
- [49] «Laboratorios Eyco,» 15 Noviembre 2023. [Internet]. Disponible en: <https://www.laboratorioseyco.com/medicion-del-color-en-pimenton-escala-asta/>. [Citado 14 Enero 2024].
- [50] J. I. Piñeiro Di Blasi, J. Martínez Torres, J. S. Pozo Antonio, C. Iglesias Comesaña, L. Cuesta, J. Taboada Castro, P. Gajino Núñez y E. Tresaco Vidaller, «Desarrollo de una aplicación para la comparación rápida de pigmentos a partir de sus coordenadas colorimétricas,» Dyna, vol. 81, n° 184, pp. 49-54, 2014.
- [51] E. G. A. Canela, «Colorimetric techniques,» Visión Criminológica-Criminalística, 2017.
- [52] M. Majithia y D. A. Barretto, «Biocompatible green-synthesized nanomaterials for therapeutic applications,» Advances in Nano and Biochemistry, Academic press, 2023, pp. 285-367.
- [53] «CSIC,» 15 Diciembre 2024. [Internet]. Disponible en: <https://www.xtal.iqf.csic.es/Cristalografia/index.html>. [Citado 14 Enero 2024].
- [54] M. Ghasempour Mouziraji , J. Lagarinhos , D. Afonso y R. Alves de Sousa , «A review study on metal powder materials and processing parameters in Laser Metal Deposition,» Elsevier, vol. 170, 2024.
- [55] K. Khalid, R. Ishak y Z. Zaman Chowdhury, «UV–Vis spectroscopy in non-destructive testing,» Non-Destructive Material Characterization Method, Elsevier, 2024, pp. 391-416.
- [56] M. Faraji, Y. Yamini y N. Salehi, «Characterization of magnetic nanomaterials,» Magnetic Nanomaterials in Analytical Chemistry, Elsevier, 2021, pp. 39-60.
- [57] G. Fernández, «Organic Chemistry,» 2 Marzo 2024. [Internet]. Disponible en: <https://www.quimicaorganica.net/esquema-espectrofot%C3%B3metro.html>. [Citado 14 Enero 2025].
- [58] M. Ipohorski y P. B. Bozzano, «Microscopía electrónica de barrido en la caracterización de materiales,» Ciencia e Investigación , vol. 63, n° 3, pp. 43-53, 2013.

- [59] A. Beristain, «Propiedades de películas delgadas de materiales basados en óxidos de Cu, Zn, Cd y Te, elaboradas por erosión catódica a partir de un solo blanco.,» ResearchGate, 2018.
- [60] M. P. C. Fernández, «Universidad de Burgos,» 4 Marzo 2020. [Internet]. Disponible en: <https://www.ubu.es/parque-cientifico-tecnologico/servicios-cientifico-tecnicos/microscopia/microscopia-electronica-de-barrido-meb>. [Citado 14 Enero 2025].
- [61] Neikov. Olgued. D., Yefimov. N. A., y Naboychenko SS., «Powder Characterization and Testing,» Handbook of Non-Ferrous Metal Powders (Second Edition), Elsevier, 2019, pp. 3-62.
- [62] R. Groarke, R. K. Vijayaraghavan, D. Powell, A. Rennie y D. Brabazon, «Powder characterization—methods, standards, and state of the art,» Fundamentals of Laser Powder Bed Fusion of Metals, Elsevier, 2021, pp. 491-527.
- [63] F. J. A. Rebollo, «ALTER,» [Internet]. Disponible en: <https://wpo-altertechnology.com/es/xrf-x-ray-fluorescence-spectroscopy-hi-rel-parts/>. [Citado 14 Enero 2025].
- [64] D. Dollimore, P. Spooner y A. Turner, «The bet method of analysis of gas adsorption data and its relevance to the calculation of surface areas,» Elsevier, vol. 4, pp. 121-160, 1976.
- [65] T. J. M. Filip Ambroz, V. Martis y I. P. Parkin, «Evaluation of the bet theory for the characterization of meso and microporous MOFs,» Small Methods, vol. 2, n° 11, 2018.
- [66] E. M. Fixman, F. Lavarra y N. Barroso, «conicet intequi,» [Internet]. Disponible en: <https://intequi-unsl.conicet.gov.ar/laboratorio-19-superficie-especifica-bet-y-ensayos-a-temperatura-programada-etp/>. [Citado 14 Enero 2025].
- [67] M. Mata-Miranda, C. Guerrero-Robles, M. Rojas-López, R. Delgado-Macuil, C. González-Díaz, V. Sánchez-Monroy, D. G. Pérez-Ishiwara y G. Vázquez-Zapién, «Principal components by FTIR spectroscopy as innovative characterization technique during differentiation of pluripotent stem cells to pancreatic cells,» Rev. Mex. Ing. Biomédica , vol. 38, n° 1, 2017.
- [68] H. Onyeaka, P. Passaretti, T. Miri y Z. T. Al-Sharify, «The safety of nanomaterials in food production and packaging,» Current Research in Food Science, vol. 5, pp. 763-774, 2022.
- [69] «Infinita Lab,» [Internet]. Disponible en: <https://infinitalab.com/metrology-testing-service/fourier-transform->

- infrared-spectroscopy-ftir/. [Citado 21 Enero 2025].
- [70] A. M. O. Anaya, J. L. Z. Pumacayo, F. B. Rodriguez, J. J. M. Fajardo, J. F. d. O. Ugarte, O. A. C. Sanchez y E. O. N. Manga, «Determination of the size of synthesized zinc oxide nanoparticles using the Scherrer equation,» *Revista del Instituto de Investigación de la Facultad de Ingeniería Geológica Minera Metalúrgica y Geográfica*, vol. 26, n° 51, 2023.
 - [71] S. S. Abdullahi, S. Güner, Y. Koseoglu, I. M. Musa, B. I. Adamu y M. I. Abdulhamid, «Simple Method For The Determination of Band Gap of a Nanopowdered Sample Using Kubelka Munk Theory,» *Journal of the Nigerian Association of Mathematical Physics*, vol. 35, pp. 241-246, 2016.
 - [72] M. I. Toral, N. Lara, A. E. Tapia, C. Torres Y P. Richter., «Estudio espectral y determinación simultanea de sulfametoxazol y trimetoprim por espectrofotometría derivada digital,» *Boletín de la Sociedad Chilena de Química*, vol. 47, n° 3, pp. 241-251, 2002.
 - [73] A. I. Meky, M. A. Hassaan, H. A. Fetouh, A. M. Ismail y A. E. Nemr, «Cube-shaped Cobalt-doped zinc oxide nanoparticles with increased visible-light-driven photocatalytic activity achieved by green co-precipitation synthesis,» *Scientific Reports*, vol. 13, n° 19329, 2023.
 - [74] E. J. Baran, «Cobalto: un elemento crítico y estratégico,» *Anuales Acad. Nac. de Cs. Ex., Fís. y Nat.*, vol. 70, pp. 77-106, 2018.
 - [75] «Color Designer - the most comprehensive color tools platform,» [Internet]. Disponible en: <https://colordesigner.io/convert/labtohex>. [Citado 20 Enero 2025].
 - [76] K. Nagarajan, B. Kataru, N. Sravani, T. Vigneshwari, A. Panneerselvam y D. Rajeswari, «Biosynthesis of Zinc oxide nanoparticles using culture filtrates of aspergillus niger: antimicrobial textiles and dye degradation studies,» *OpenNano*, vol. 3, 2018.
 - [77] S. Jayswal y R. S. Moirangthem, *Thermal decomposition route to synthesize ZnO nanoparticles for photocatalytic application*, 2018.
 - [78] M. Y. Al-Darwesh, S. S. Ibrahim, M. F. Naief, A. M. Mohammed y H. Chebbi, «Synthesis and characterizations of zinc oxide nanoparticles and its ability to detect O₂ and NH₃ gases,» *Results in Chemistry*, vol. 6, 2023.
 - [79] A. Akhtar, K. Akram, H. M. z. Aslam, D. Ihsanullah, N. Baig y M. Bello, «Photocatalytic degradation of p-nitrophenol in wastewater by heterogeneous cobalt supported ZnO nanoparticles: Modeling and

- optimization using response surface methodology,» *Environmental Progress & Sustainable Energy*, vol. 42, 2022.
- [80] L. M. Verma, . Kumar, . U. Bashir, . Gangwar, . P. Ingole y . Sharma, «Phase controlled green synthesis of wurtzite (P63mc) ZnO nanoparticles: interplay of green ligands with precursor anions, anisotropy and photocatalysis,» *Nanoscale Advances*, vol. 6, pp. 155-169, 2024.
- [81] P. Sundaram, T. Sangeetha, S. Rajakarthiyan, R. Vijayalakshmi, A. Elangovan y G. Arivazhagan, «XRD structural studies on cobalt doped zinc oxide nanoparticles synthesized by coprecipitation method: Williamson-Hall and size-strain plot approaches,» *Physica B: Condensed Matter*, vol. 595, 2020.
- [82] N. Abimari, A. M. S. Arulanantham y K. S. J. Wilson, «Structural and magnetic properties of cobalt doped ZnO thin films deposited by cost effective nebulizer spray pyrolysis technique,» *Materials Research Express*, vol. 7, nº 2, 2020.
- [83] C. R. Mendes, . Dilarri, . F. Forsan, . d. M. R. Sapata, . R. M. Lopes, . B. d. Moraes, . F. Renato Nallin Montagnolli y . D. Bidoia, «Antibacterial action and target mechanisms of zinc oxide nanoparticles against bacterial pathogens,» *Scientific Reports*, vol. 12, nº 2658, 2022.
- [84] A. M. Osorio Anaya, J. L. Zegarra Pumacayo, F. Blas Rodriguez, J. J. Manrique Fajardo, J. F. de Oliveira Ugarte, O. A. Cornejo Sanchez y E. O. . Ninan Manga, «Determinación del tamaño de nanopartículas de óxido de zinc sintetizadas empleando la ecuación de Scherrer,» *Revista del Instituto de investigación de la Facultad de minas, metalurgia y ciencias geográficas*, vol. 26, nº 51, 2023.
- [85] R. Sahoo, A. Mundamajhi y S. Das, «Growth of ZnO nanoparticles prepared from cost effective laboratory grade ZnO powder and their application in UV photocatalytic dye decomposition,» *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, vol. 30, 2019.
- [86] B. Simović, G. Aleksandar, D. Poleti y M. J. Scepanovic, «Enhanced photocatalytic degradation of RO₁₆ dye using Ag modified ZnO nanopowders prepared by the solvothermal method,» *Processing and Application of Ceramics*, vol. 11, nº 1, pp. 27-38, 2017.
- [87] D. Daksh y Y. K. Agrawal, «Rare Earth-Doped Zinc Oxide Nanostructures: A Review,» *Reviews in Nanoscience and Nanotechnology*, vol. 5, nº 1, pp. 1-27, 2016.
- [88] Y. Lu, L. Wang, L. Yanhong y D. Wang, «A high performance cobalt-

- doped ZnO visible light photocatalyst and its photogenerated charge transfer properties,» Nano Research, vol. 4, n° 11, 2011.
- [89] N. F. Djaja, D. A. Montja y R. Saleh, «The Effect of Co Incorporation into ZnO Nanoparticles,» Advances in Materials Physics and Chemistry, vol. 3, n° 1, 2013.
- [90] S. S. F. Hernández, Síntesis y Caracterización de nano-estructuras de ZnO, NiO, Co₃O₄, Cuautitlán Izcalli, 2010.
- [91] S. S. Wagh, C. V. Jagtap, V. S. Kadam, F. Shaikh, Ubaidullah, Pandit, B. Salunkhe y R. S. Patil, «Silver Doped Zinc Oxide Nanoparticles Synthesized for Photocatalysis Application,» Energy & Environment, vol. 17, pp. 94-105, 2022.
- [92] A. Khantoula, M. Sebaisa, B. Rahalb, B. Boudinea y O. Halimia, «Structural and Optical Properties of ZnO and Co Doped ZnO Thin Films Prepared by Sol-Gel,» Acta physica polonica a, vol. 20180, n° 1, 2018.
- [93] J. M. Hancock, W. M. Rankin, B. Woolsey, R. S. Turley y R. G. Harrison, «Controlled formation of ZnO hexagonal prisms using ethanolamines and water,» CrossMark, n° 84, pp. 214-221, 2017.
- [94] M. A. Borysiewicz, «ZnO as a Functional Material, a Review,» Crystals, vol. 9, n° 10, 2019.
- [95] T. M. Hammad, R. G. Harrison y J. K. Salem, «Structure, optical properties and synthesis of Co-doped ZnO superstructures,» Applied Nanoscience, vol. 3, n° 2, 2012.
- [96] M. I. Din, R. Khalid, Z. Hussain, S. Gul y A. Mujahid, «Synthesis and characterization of cobalt doped zinc oxide nanoparticles and their application for catalytic reduction of methylene blue dye,» Desalination and Water Treatment, vol. 317, 2024.
- [97] I. Y.-Y. Bu, «Optoelectronic properties of sol–gel derived ZnO:Co: Effect of Co concentration,» Superlattices and Microstructures, vol. 75, pp. 657-666, 2014.
- [98] «Servicios Técnicos de Investigación,» [Internet]. Disponible en: <https://sstti.ua.es/es/instrumentacion-cientifica/unidad-de-analisis-termico/analisis-de-la-textura-porosa-de-solidos.html#:~:text=Los%20poros%20se%20clasifican%2C%20de,di%2C%20A1metros%20superiores%20a%2050%20nm.> [Citado 26 Enero 2025].
- [99] P. M. Raja y A. R. Barron, «LibreTexts Chemistry,» 28 Agosto 2022. [Internet]. Disponible en:

- [https://chem.libretexts.org/Bookshelves/Analytical_Chemistry/Physical_Methods_in_Chemistry_and_Nano_Science_\(Barron\)/02%3A_Physical_and_Thermal_Analysis/2.03%3A_BET_Surface_Area_Analysis_of_Nanoparticles](https://chem.libretexts.org/Bookshelves/Analytical_Chemistry/Physical_Methods_in_Chemistry_and_Nano_Science_(Barron)/02%3A_Physical_and_Thermal_Analysis/2.03%3A_BET_Surface_Area_Analysis_of_Nanoparticles). [Citado 26 Enero 2025].
- [100] M.-A. Gatou, N. Lagopati, I.-A. Vagena, M. Gazouli y E. A. Pavlatou, «ZnO Nanoparticles from Different Precursors and Their Photocatalytic Potential for Biomedical Use,» *Nanomaterials* (Basel), vol. 13, n° 1, p. 122, 2022.
- [101] X. Lu, A. Xie, C. Jiang, M. Lu, Y. Zhang, H. Zhong y S. Zhuang, «Synthesis of well-dispersed ZnO–Co–C composite hollow microspheres as advanced anode materials for lithium ion batteries,» *RSC Adv*, vol. 7, n° 4269, 2017.
- [102] V. P. Madrigal, D. S. Salazar, M. O. Avilés, E. R. Valdovinos, E. Albitier, M. A. Valenzuela y F. P. Albores., «Performance of CaO-Promoted Ni Catalysts over Nanostructured CeO₂ in Dry Reforming of Methane,» *Processes*, vol. 12, n° 12, 2024.
- [103] M. A. Ismail, K. K. Taha, A. Modwi Y L. Khezamib, «ZnO nanoparticles: surface and x-ray profile analysis,» *Journal of Ovonic Research*, vol. 14, n° 5, pp. 381 - 393, 2018.
- [104] M. Thommes, K. Kaneko, A. V. Neimark, J. P. Olivier, F. Rodriguez y Reinoso, «Physisorption of gases, with special reference to the evaluation of Surface area and pore size distribution,» *J. Rouquerol and K. S. W. Sing, Pure Appl. Chem*, vol. 87, p. 1051-1069, 2015.
- [105] D. Ivanova, G. Tzvetkov y N. Kaneva, «Degradation of Paracetamol in Distilled and Drinking Water via Ag/ZnO Photocatalysis under UV and Natural Sunlight,» *Water*, vol. 15, n° 20, 2023.
- [106] N. Lakshmi, S. Anandakumar, V. Sampathkumar y S. Manoj, «Synthesized ZnO nanoparticles using Sorghum Panicle for the photocatalytic degradation of pharmaceutical waste water Author links open overlay panel,» *Desalination and Water Treatment*, vol. 319, 2024.
- [107] C. E. C. Herrera, *Métodos de remoción y degradación de antibióticos en medios acuosos*, Toluca, 2013.
- [108] «NIST,» 2023. [Internet]. Disponible en: <http://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=C723466&Mask=80>. [Citado 28 Enero 2025].
- [109] «Chemical Book,» 2017. [Internet]. Disponible en: https://www.chemicalbook.com/SpectrumEN_738-70-5_IR1.htm. [Citado 28 Enero 2025].

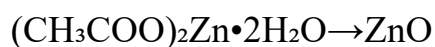
-
- [110] P. M. M. Cortez, «Análisis de los espectros de infrarrojo,» CIATEJ, 2020.
- [111] A. Chanda, «Evaluation and isolation of novel binding agent alstonia scholaris in the formulation of tablet,» World Journal of Pharmacy and Pharmaceutical Sciences, vol. 4, 2015.
- [112] A. Fakhruddin, M. Alkotaji y F. Abachi, «Development of novel paracetamol/naproxen co-crystals with an improvement in naproxen solubility.,» Iraqi Journal of Pharmaceutical Sciences , vol. 31, 2022.

ANEXOS

Anexo 1

Cálculo de porcentaje ZnO-Co 2%, 4% y 6%

- Masa de acetato de zinc dihidratado $(\text{CH}_3\text{COO})_2\text{Zn} \cdot 2\text{H}_2\text{O} = 2.72 \text{ g}$
- Cobalto añadido en porcentajes = 2%, 4%, 6% en peso
- Masa molar del acetato de zinc dihidratado $(\text{CH}_3\text{COO})_2\text{Zn} \cdot 2\text{H}_2\text{O} = 219.50 \text{ g/mol}$
- Masa molar del nitrato de cobalto hexahidratado $\text{Co}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O} = 291.03 \text{ g/mol}$



$$\text{Masa de } \text{Co}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O} = \left(\frac{\%}{100} \right) \times \text{Masa de } (\text{CH}_3\text{COO})_2\text{Zn} \cdot 2\text{H}_2\text{O}$$

2% de dopaje:

$$\left(\frac{2}{100} \right) \times 2.72 = 0.0544 \text{ g de } \text{Co}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$$

Para 4% de dopaje:

$$\left(\frac{4}{100} \right) \times 2.72 = 0.0544 \text{ g de } \text{Co}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$$

Para 6% de dopaje:

$$\left(\frac{6}{100} \right) \times 2.72 = 0.0544 \text{ g de } \text{Co}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$$

Anexo 2

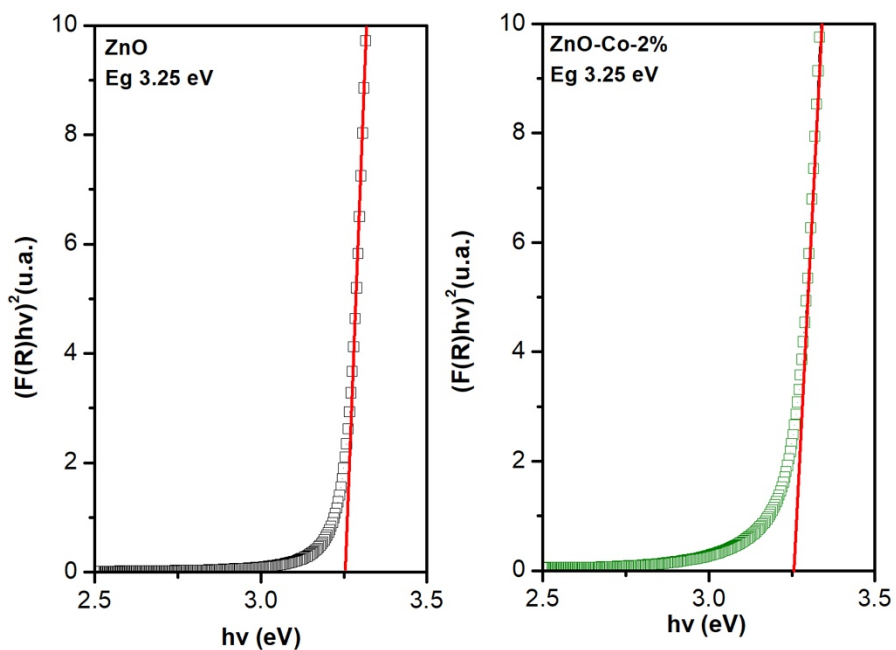


Figura 54. Ancho de banda ZnO y Zno-Co 2%.

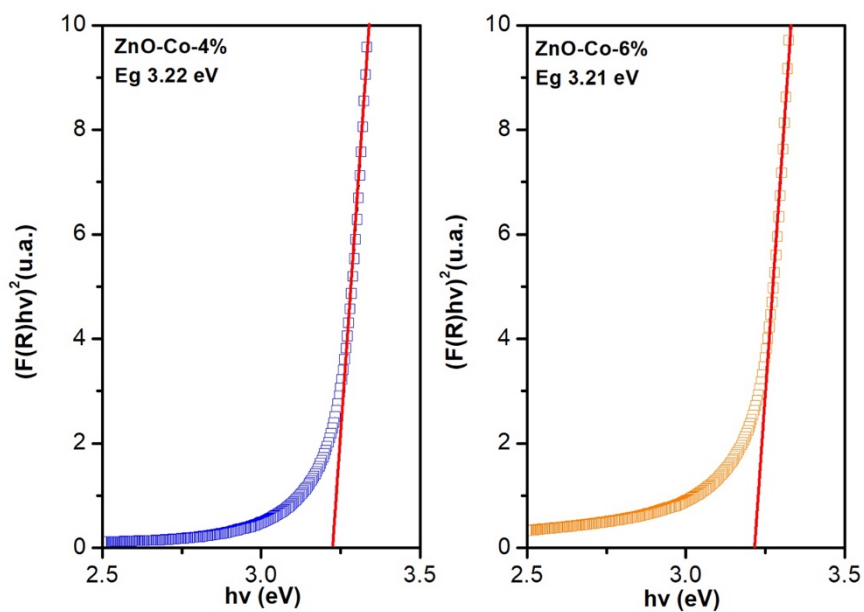


Figura 55. Ancho de banda ZnO-Co 4% y Zno-Co 6%.

Anexo 3

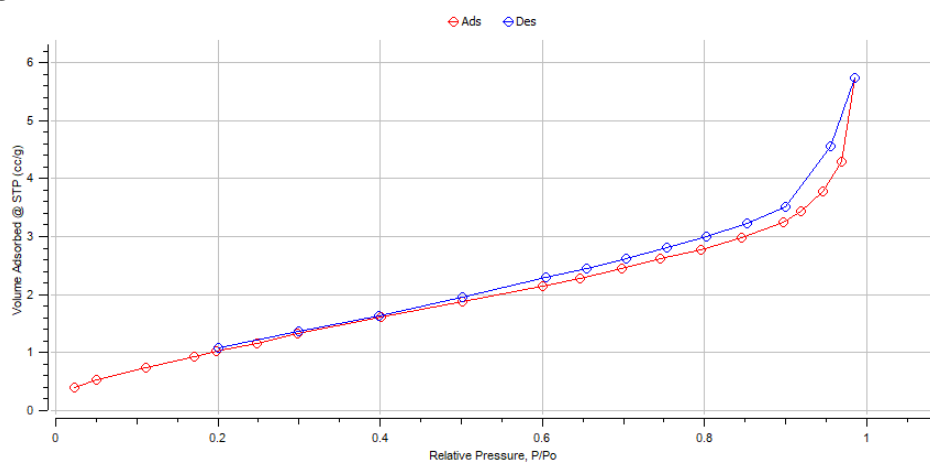


Figura 56. Isotherma ZnO.

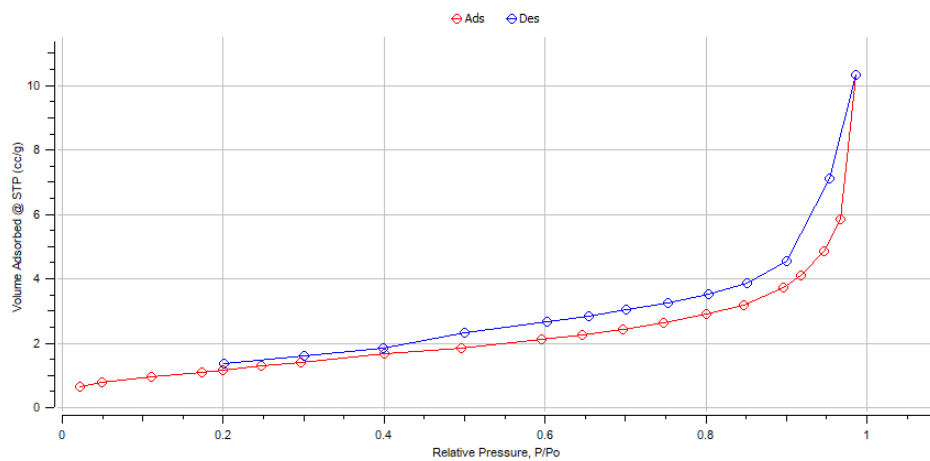


Figura 57. Isotherma ZnO-Co-2%.

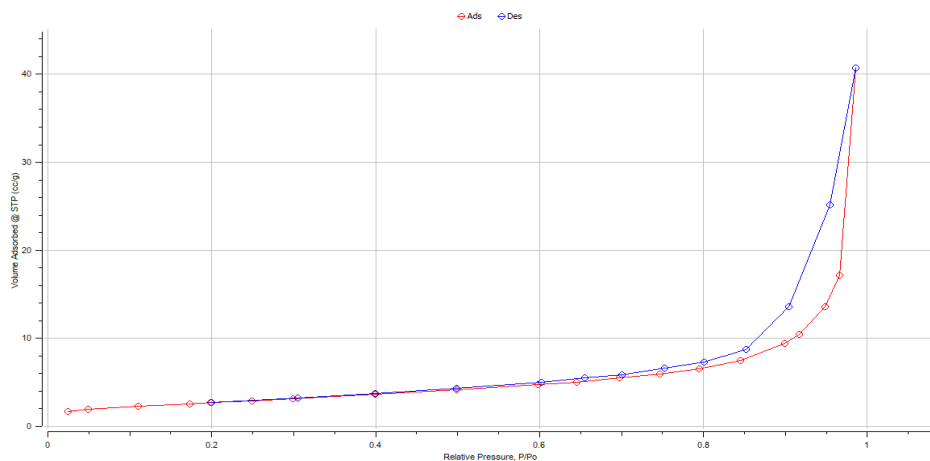


Figura 58. Isotherma ZnO-Co-4%.

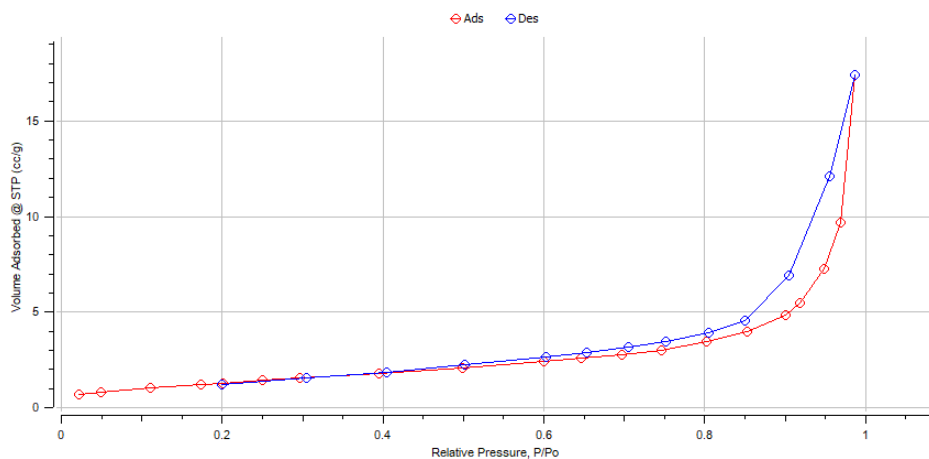


Figura 59. Isotherma ZnO-Co-6%.

Anexo 4

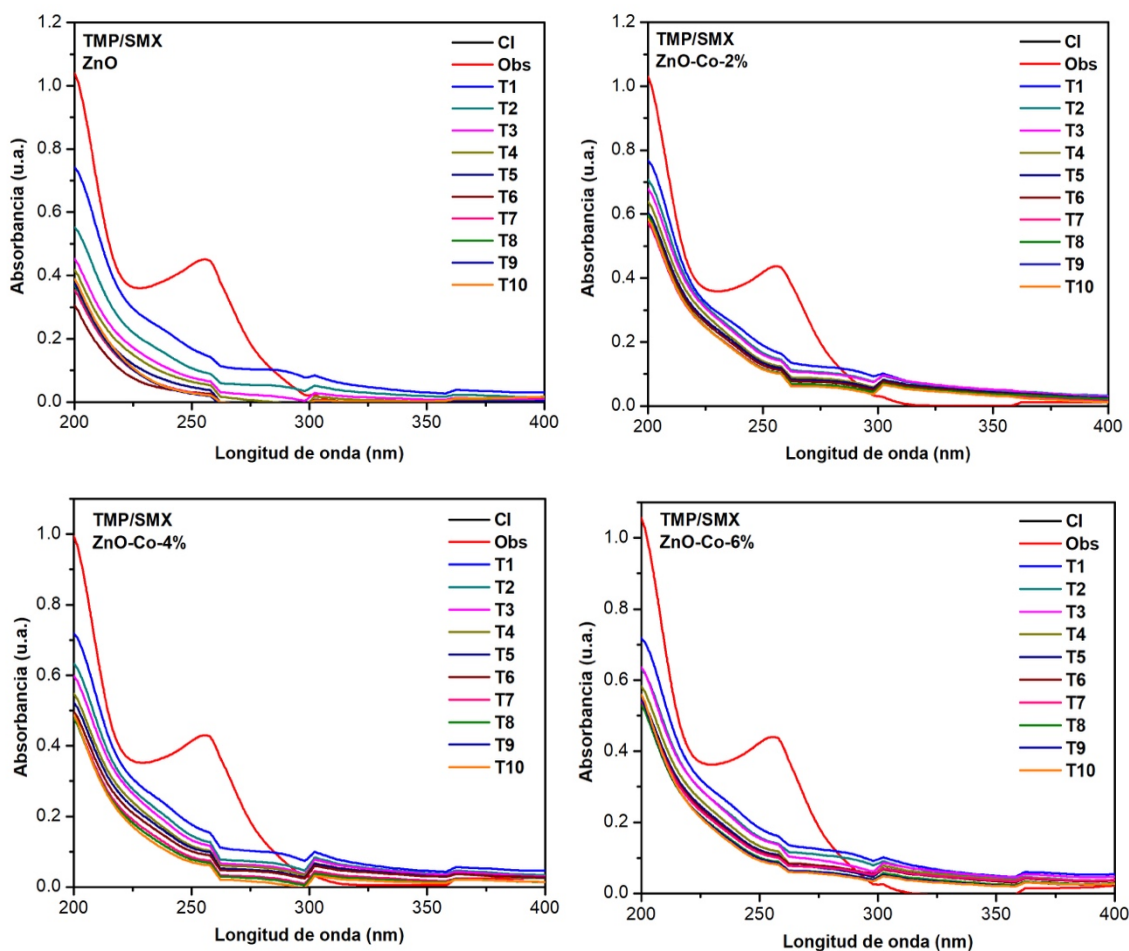


Figura 60. Degradación de TMP/SMX usando como fotocatalizador ZnO y ZnO-Co.

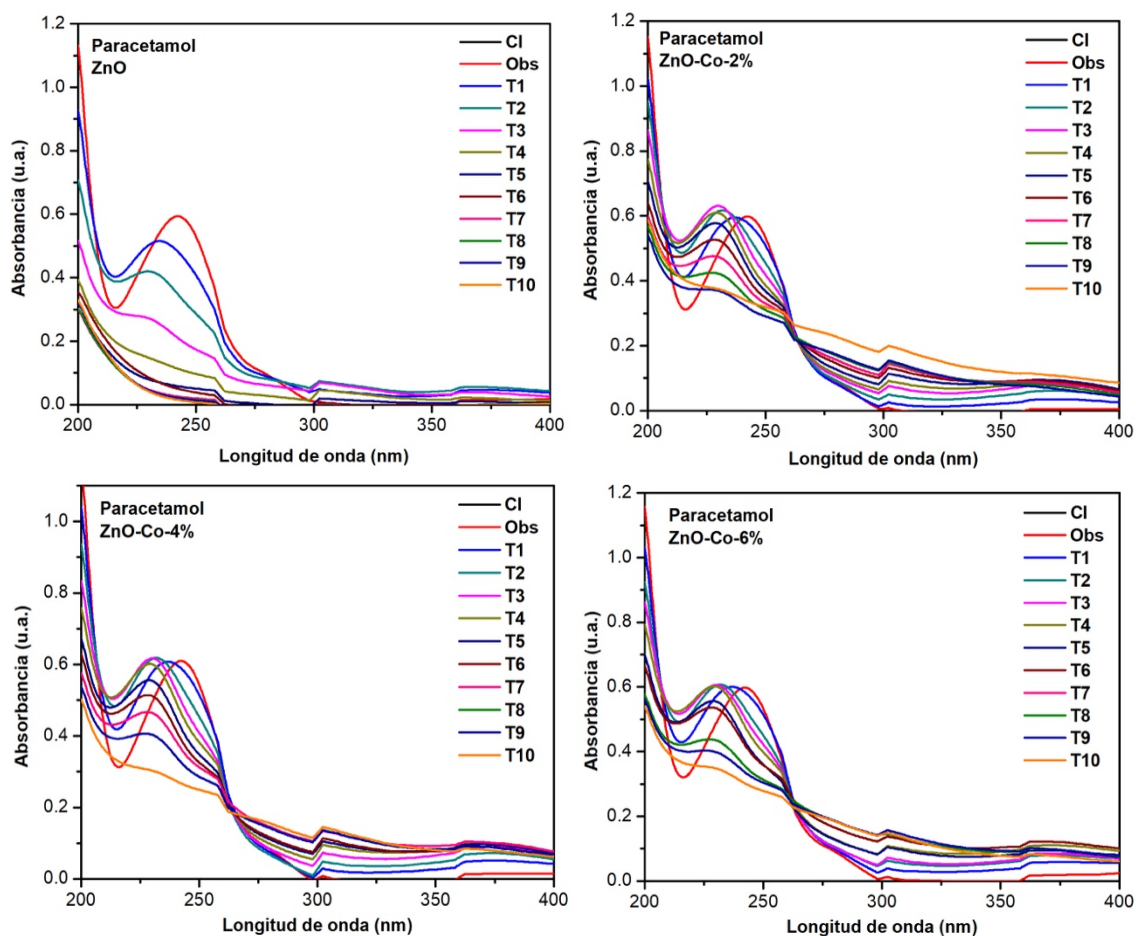


Figura 61. Degradación de Paracetamol usando como fotocatalizador ZnO y ZnO-Co.