



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES
CUAUTITLÁN

DEGRADACIÓN Y ESTABILIZACIÓN DE POLICARBONATOS
MEDIANTE RECICLAJE QUÍMICO A TRAVÉS DE REACCIONES
DE CATÁLISIS BÁSICA

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE

LICENCIADA EN QUÍMICA INDUSTRIAL

P R E S E N T A

EVA GUADALUPE LIZÁRRAGA PAULÍN

ASESORA:

M. en C. MARÍA DEL ROSARIO RODRÍGUEZ HIDALGO



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.



UNIVERSIDAD NACIONAL
AUTÓNOMA DE
MÉXICO

FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES CUAUTITLAN
UNIDAD DE LA ADMINISTRACION ESCOLAR
DEPARTAMENTO DE EXAMENES PROFESIONALES

ASUNTO: VOTOS APROBATORIOS

FACULTAD DE ESTUDIOS
SUPERIORES CUAUTITLAN



DEPARTAMENTO DE
EXAMENES PROFESIONALES

DRA. SUEMI RODRIGUEZ ROMO
DIRECTOR DE LA FES CUAUTITLAN
PRESENTE

ATN: L. A. ARACELI HERRERA HERNANDEZ
Jefe del Departamento de Exámenes
Profesionales de la FES Cuautitlán

Con base en el art. 28 del Reglamento General de Exámenes, nos permitimos
comunicar a usted que revisamos la Tesis :

"Degradación y Estabilización de Policarbonatos mediante
Reciclaje Químico a través de reacciones de Catálisis Básica".

que presenta la pasante: Eva Guadalupe Lizárraga Paulín
con número de cuenta: 30087480-8 para obtener el título de :
Licenciada en Química Industrial

Considerando que dicho trabajo reúne los requisitos necesarios para ser discutido en
el EXAMEN PROFESIONAL correspondiente, otorgamos nuestro VOTO APROBATORIO.

ATENTAMENTE
"POR MI RAZA HABLARA EL ESPIRITU"

Cuautitlán Izcalli, Méx. a 24 de Agosto de 2007.

PRESIDENTE	<u>Q. Juana Cabrera Hernández</u>	
VOCAL	<u>MC. María del Rosario Rodríguez Hidalgo</u>	
SECRETARIO	<u>Q. Margarita Ordóñez Andrade</u>	
PRIMER SUPLENTE	<u>Dr. César Soto Figueroa</u>	
SEGUNDO SUPLENTE	<u>Dr. Alejandro Solano Peralta</u>	

A DIOS

Por darme la oportunidad de existir.

Por enseñarme a vivir cada día como si fuera el último.

Por ser mi guía espiritual, que me ha llevado a ser lo que soy.

A MIS PADRES:

ALFREDO y SOCORRO

Porque su amor, enseñanzas, paciencia y sacrificio han sido mi estandarte para mi realización personal y profesional. Los quiero mucho.

A MIS HERMANAS:

LORENA Y ELSA

Por su ejemplo, apoyo y comprensión.

Porque son mujeres excepcionales y excelentes hermanas.

Las quiero niñas.

A MIS SOBRINOS:

LUIS DAVID, ISMAEL Y NADIA LORENA

Porque cada una de sus sonrisas me recuerda que lo más importante de ésta vida es ser feliz.

A LA M. en C. MARÍA DEL ROSARIO RODRÍGUEZ HIDALGO

Por ser una gran profesionista y una gran mujer.

Por su enorme contribución a mi desarrollo profesional.

Por todo el apoyo brindado para la realización del presente trabajo.

AL Dr. CÉSAR SOTO FIGUEROA, y AL Dr. ALEJANDRO SOLANO PERALTA,

Por su ayuda, cooperación, conocimientos, enseñanzas, apoyo, afecto y confianza.

A LA UNAM – FESC Y SUS PROFESORES

Por ser el semillero de grandes profesionistas en nuestro país.

A LA CÁTEDRA DE INVESTIGACIÓN Clave: IN1-160 de la FES–Cuautitlán, UNAM.
Titulada: “Investigación teórica y experimental sobre el reciclamiento químico de materiales poliméricos contaminantes”, Proyecto del área de Ciencias Químicas.

AL PROYECTO PAPIIT Clave IN101008 *Titulado “Investigación Teórica y Experimental de Materiales Poliméricos Nanoestructurados”.*

AL LABORATORIO DE IR DE LA NAVE 3000 DE LA FES-CUAUTITLÁN

Por las facilidades para efectuar los Análisis de Infrarrojo presentados en éste trabajo.

A MIS COMPAÑEROS DE LA 8° GENERACIÓN DE Q.I.

Por todas las experiencias vividas durante estos 4 años y medio... ¡Goya... Industriales!

A MIS AMIGOS

A quienes no menciono por sus nombres pero sí por sus acciones.

Por ser verdaderos compañeros, por confiar en mí, por su apoyo en los momentos difíciles y por todas las alegrías compartidas; pero muy especialmente...

A JOAQUIN G. NERI SALDIVAR

Por ser una persona única, por ser un gran compañero, mi mejor amigo, dispuesto a ayudar en todo momento, por su confianza, apoyo y ayuda, y sobre todo por todas las experiencias que vivimos juntos.

A GABRIEL CAMPOS DÍAZ

Por ocho años de amistad incondicional.

Por dos años y medio de alegre adolescencia.

Por cuatro años y medio de reflexión y madurez.

Por el año más feliz de toda mi vida.

Por todos y cada uno de los momentos que hemos compartido.

Por el futuro que con el día a día estamos construyendo juntos.

Por toda la confianza y el invaluable apoyo brindado para la realización del presente trabajo.

TE AMO

INDICE

1. Resumen.....	1
2. Objetivo General.....	3
3. Objetivos Particulares.....	3
4. Introducción.....	4
5. Justificación de la Experimentación.....	9
6. Justificación Teórica.....	14
7. Materiales y Métodos.....	17
7.1 Preparación de la Muestra.....	19
7.2 Tratamiento Químico.....	19
7.3 Pruebas de Caracterización.....	25
8. Resultados y Discusión.....	27
8.1 Parte Experimental (Aspecto Químico).....	27
8.2 Aplicación Microbiológica.....	55
8.3 Aspecto Teórico (Simulación Molecular).....	59
9. Conclusiones	68
10. Perspectivas.....	69
11. Anexos.....	70
11.1 Propiedades Físicas, Químicas y Toxicológicas de Reactivos y Productos.....	70
11.2 Espectroscopia de Infrarrojo.....	73
11.3 Cromatografía en Capa Fina y en Placa Preparativa.....	75
12. Referencias.....	77

“DEGRADACIÓN Y ESTABILIZACIÓN DE POLICARBONATOS MEDIANTE RECICLAJE QUÍMICO A TRAVÉS DE REACCIONES DE CATÁLISIS BÁSICA”

1. RESUMEN

Los polímeros son materiales de gran importancia en la actualidad, ya que son ampliamente utilizados para diferentes aplicaciones debido a sus excelentes propiedades y a la accesibilidad de costos. Sin embargo, se ha encontrado que tales materiales son generadores de una gran cantidad de desechos que en la mayoría de los casos no son tratados para reducir índices de contaminación. Dentro de los tratamientos más comúnmente empleados para éste fin, se encuentran aquellos que involucran procesos físicos tales como la molienda, los tiraderos a cielo abierto, la incineración, entre otros; no obstante la contaminación emitida por estos métodos es abundante, y en algunos casos los tratamientos resultan ser de poca utilidad. Por esta razón, en el trabajo que aquí se presenta, se llevó a cabo un reciclaje químico, ya que es una técnica muy innovadora y efectiva que permite lograr el reuso del material mediante el aprovechamiento de sus materias primas.

En el presente estudio se eligió reciclar al polímero de carbonato (Policarbonato). La experimentación consistió en el ataque de una muestra comercial del polímero en estudio mediante una serie de reacciones de catálisis básica empleando para tal efecto un álcali fuerte y sometiendo las muestras a condiciones diversas de tiempo a temperatura constante, lográndose así la depolimerización del Policarbonato y obteniendo una gran diversidad de productos de degradación, predominando por su importancia el Bisfenol A, que es uno de los monómeros correspondientes.

Como una herramienta para evaluar y comprobar la posibilidad de reciclar químicamente al polímero de carbonato, se empleó una técnica auxiliar: una Simulación Molecular, a través de la cual se logró modelar el sistema en estudio

para vislumbrar su comportamiento ante diversas condiciones experimentales permitiendo conocer la viabilidad de tal procedimiento.

La identidad de los productos de reacción obtenidos a través de la experimentación realizada fue comprobada mediante la Técnica de Cromatografía en Capa Fina (TLC), para posteriormente ser separados y purificados mediante una Cromatografía en Placa Preparativa. En algunos casos fue necesario también emplear como técnica auxiliar la recristalización. Ya obtenidos los productos con una pureza aceptable, fueron caracterizados e identificados mediante diversas técnicas, las cuales involucraron desde métodos físicos como la descripción del sólido y la determinación de sus puntos de fusión, métodos químicos como pruebas de solubilidad e ignición, hasta técnicas analíticas específicas, tal es el caso de la Espectroscopía de Infrarrojo que permitió comprobar la existencia del producto de interés ya mencionado. Como parte de la estabilización de los productos y para corroborar su importancia y posibles aplicaciones, todos ellos fueron empleados como fungicidas para atacar al hongo *Penicillium*, especie muy común en las frutas en estado de putrefacción, obteniendo resultados satisfactorios al inhibir significativamente el crecimiento del citado hongo.

2. OBJETIVO GENERAL

- Desarrollar una metodología basada en conocimientos experimentales para lograr la degradación y reutilización del Policarbonato.

3. OBJETIVOS PARTICULARES

- Llevar a cabo mediante reacciones de catálisis básica la depolimerización de Policarbonatos a partir de residuos generados por el consumo de productos elaborados con éste material.
- Inferir mediante estudios teóricos de Simulación Molecular el proceso de depolimerización del Policarbonato.
- Reutilizar el producto obtenido mediante la reacción de degradación para aplicaciones industriales (fungicida).

4. INTRODUCCIÓN

Desde los primeros tiempos, el hombre ha utilizado una gran variedad de materiales que van desde la piedra, madera y metal, hasta el concreto y los plásticos, que han cambiado su estilo de vida dando origen a tecnologías avanzadas que traen como consecuencia la resolución de problemas complejos y con ello la emisión de residuos que no siempre pueden ser tratados fácilmente.

Los plásticos (del griego *plastikós* que significa “que sirve para modelar”) son los materiales poliméricos más nuevos que han contribuido a formar nuestro estilo de vida. Químicamente, los polímeros (del griego *poly*, “muchos” y *meros*, que significa “parte o segmento”) son moléculas de cadena larga de pesos moleculares muy altos, que generalmente exceden los cientos e incluso miles de unidades, siendo construidas a partir de un número repetitivo de segmentos unidos entre sí mediante enlaces químicos. Por esta razón, el término “macromoléculas” se usa frecuentemente cuando nos referimos a materiales poliméricos, entre ellos, los plásticos.⁽¹⁾

Los primeros polímeros utilizados en la historia fueron los productos naturales, destacando materiales como el algodón, la celulosa, el almidón y las proteínas. A principios del siglo XX, se comenzaron a manufacturar los polímeros sintéticos. Los primeros polímeros importantes de éste tipo, la Baquelita y el Nylon, mostraron amplias posibilidades de obtención de nuevos materiales debido a las excelentes propiedades fisicoquímicas y mecánicas que éstos presentaban; sin embargo, los científicos de aquella época no entendían muchas de las relaciones entre las estructuras químicas y las propiedades físicas resultantes de ellas. De ahí que comenzaron a estudiarse una gran diversidad de aspectos que lograron relacionar justificadamente ambas cuestiones, así como el por qué de su estructura, morfología, propiedades, pesos moleculares, distribución molecular y la organización de los átomos a través de la cadena polimérica.^(1, 2)

Existe una gran cantidad de formas para clasificar a los polímeros, las cuales han sido producto de descubrimientos empíricos. Dichas clasificaciones⁽²⁾ están en función de:

- 1) Su fuente de obtención → naturales o sintéticos
- 2) El tipo de proceso empleado para su síntesis → adición o condensación
- 3) La naturaleza y tipo de cadena que forman → homopolímeros o heteropolímeros
- 4) Su comportamiento en estado sólido → monodispersos o polidispersos
- 5) Su naturaleza → orgánica o inorgánica
- 6) El tipo de monómeros que lo integran → homopolímeros o copolímeros
- 7) Su tipo de unión → lineales o ramificados
- 8) Su comportamiento eléctrico → polímeros cargados o sin carga
- 9) Su comportamiento ante la temperatura → termofijos o termoplásticos
- 10) Sus características generales y usos → fibras, plásticos y elastómeros
- 11) Su estructura cristalina → cristalinos o amorfos
- 12) Su isomería → atácticos, sindiotácticos o isotácticos

De estas clasificaciones se deriva una amplia gama de materiales que se emplean en diversas aplicaciones.⁽²⁾

Los polímeros sintéticos modernos han sustituido el uso de materiales resistentes como los metales, por lo cual son considerados como materiales de ingeniería. Entre las características físicas favorables para su uso encontramos que la mayoría de los polímeros son materiales ligeros, tienen excelentes propiedades térmicas y eléctricas, son resistentes a la corrosión, son prácticamente inertes a la mayoría de las sustancias químicas, son manejables, sus costos de fabricación y producción son relativamente bajos, tienen buena resistencia mecánica, estabilidad dimensional e incluso la mayoría tiene memoria, (lo cual significa que si se les aplica una fuerza determinada que modifique su apariencia física y/o dimensiones, el material tiene la capacidad de adquirir de

nueva cuenta su forma original). Además, gran parte de esos materiales son transparentes en apariencia, son susceptibles al teñido y a los procesos decorativos, tienen la capacidad de absorber los choques mecánicos y muestran resistencia a la abrasión⁽³⁾, la cual se ve reflejada al someter los plásticos a un medio corrosivo sin que éstos materiales se vean afectados. Incluso también pueden someterse a condiciones extremas de humedad sin que se modifiquen las propiedades del polímero. Este es el caso de la mayoría de los termoplásticos, entre los cuales figuran el Polietileno, el Polipropileno, el Policloruro de Vinilo, el Policarbonato, entre otros.

Por otro lado, entre sus características no favorables destacan su alta capacidad de combustión, su baja ductilidad, en ocasiones son susceptibles a los efectos de la aplicación de altas temperaturas, ($T > 400 \text{ }^\circ\text{K}$)⁽³⁾ etc.; pero el principal inconveniente de estos materiales es que no pueden ser degradados fácilmente, (ya que para este fin se requieren tecnologías avanzadas que sean proporcionales a la creciente demanda de producción y consumo de plásticos, tecnologías que no han sido implementadas con éxito en nuestro país), motivo por el cual dichos materiales constituyen una gran fuente de contaminación ambiental.

Debido a ésta problemática, existe una serie de alternativas para el tratamiento de residuos poliméricos, tales como la creación de rellenos sanitarios, la incineración, la fotodegradación, la biodegradación y el reciclaje físico o mecánico; sin embargo, el método más eficiente y moderno por el que se ha optado en muchos países, incluyendo México, es la depolimerización o “reciclaje químico”, que consiste en la recuperación de materias primas básicas a través de procesos químicos aplicados a los polímeros. Existe una gran cantidad de tecnologías de reciclado de materia prima que actualmente están siendo estudiadas, entre las cuales destacan la pirólisis, la hidrogenación, la gasificación y la solvólisis.⁽⁴⁾

Uno de los materiales poliméricos que tiene gran aplicación en México y en todo el mundo es el Policarbonato (PC), el cual es un [plástico](#) claro usado para hacer ventanas inastillables, lentes livianas para anteojos, y sobre todo, es el material con el que se fabrican los Discos Compactos (CD's) y los Discos Versátiles Digitales (DVD's) que diariamente consumimos.⁽⁵⁾ Los Discos Compactos no regrabables están hechos de policarbonatos rígidos y transparentes con una cubierta de metal reflectante¹ en la parte superior del plástico; un láser es empleado para codificar la información a través de la creación de un proceso que se conoce como "pits and lands", proporcionando diferente reflectividad a la interfase policarbonato-metal. Por otra parte, los Discos Compactos regrabables contienen un colorante orgánico entre el policarbonato y el recubrimiento metálico; en ellos, un láser crea áreas de diferente reflectividad en la capa de colorante a través de reacciones fotoquímicas. Para lograr su reproducción, un rayo láser emitido por un semiconductor de diodo "interroga" el interior de cualquiera de los Discos Compactos ya descritos identificando las áreas reflectadas, las cuales corresponden al "uno" binario, mientras que a las áreas no reflectadas les corresponde el "cero" binario. La habilidad de "leer" la información depende de la longitud de onda del láser.⁽⁶⁾ Son precisamente los metales y los colorantes orgánicos que recubren al plástico, los materiales que impiden que el Policarbonato pueda degradarse para obtener materias primas cien por ciento puras.

De acuerdo a datos estadísticos reportados por la empresa *Plast Univers*⁽⁷⁾, se ha encontrado que anualmente en nuestro país se producen 2,000 toneladas de desperdicio de Policarbonato que son derivadas de cerca de 1,400 millones de Discos Compactos, sin contar el resto de los artículos que son manufacturados en base a este material.⁽⁷⁾ Debido a que ésta cifra es realmente abrumadora, surge la inquietud de proponer una técnica sencilla que emplee materiales básicos y que implique costos mínimos para poder llevar a cabo la depolimerización del citado material, lo cual es una alternativa viable para la mayoría de las industrias

¹ REFLECTANTE: Que refleja. Dispositivo dotado de muchas facetas que devuelve la luz en múltiples direcciones. (*Diccionario de la Real Academia de la Lengua Española; 23ª Edición; 2007.*)

productoras del plástico en cuestión, ya que de esta manera se reducirían los índices de contaminación y se conformaría un proceso de retroalimentación en cadena para las empresas productoras, en las que sus propios desperdicios puedan ser utilizados como materia prima de alta pureza para obtener un producto con las especificaciones pertinentes y con la calidad requerida.

5. JUSTIFICACIÓN DE LA EXPERIMENTACIÓN

El Policarbonato (PC) es un polímero sintético producido por primera vez en el año de 1957 y fabricado mayoritariamente por la empresa Farbenfabriken Bayer AG, comercializado bajo los nombres de Baylon® y Makrolon®, así como por General Electric Co, bajo el nombre de Lexan® entre otras.⁽⁸⁾ Este material se clasifica dentro del grupo de los termoplásticos, es decir, es un polímero de cadena larga que se reblandece a altas temperaturas (ya que su Temperatura de Transición es de 413.1893 °K, mientras que su Temperatura de Descomposición es de 667.2282 °K)¹ y puede moldearse a [presión](#), regresando a su estado original al retirarse la fuerza aplicada. Entre sus propiedades fisicoquímicas destacan su alta cristalinidad, sus buenas propiedades mecánicas, su alta resistencia al impacto, su buena estabilidad térmica y su resistencia a la oxidación. Además es transparente, autoextinguible y tiene una baja absorción de humedad.⁽⁹⁾ Debido a las peculiares características de éste material, se ha empleado no sólo para la elaboración de Discos Compactos y Discos Versátiles Digitales, sino también para anteojos livianos y ventanales por su gran transparencia, para cascos de fútbol americano por su alta resistencia mecánica, para fabricar los recubrimientos de Ipod's (aquellos reproductores digitales de música creados por la empresa Apple Inc.™) por su alta estética y durabilidad, en autopartes (faros, defensas y juntas de puertas), lámparas de alumbrado público, electrodomésticos, colectores solares y una amplia gama de aplicaciones diversas.⁽⁵⁾

Químicamente, el Policarbonato (PC) es un polímero de condensación que toma su nombre de los grupos carbonato que se hallan en su cadena principal, siendo su unidad de repetición característica un éster.⁽¹⁰⁾ **(Figura 1)**. El Policarbonato es un poliéster de ácido carbónico inestable, dando como resultado un polímero relativamente estable. Su fabricación original consistía en hacer reaccionar fosgeno con Bisfenol A [2,2-bis(4-hidroxifenil)propano] en un medio alcalino. La sal sódica de Bisfenol A reaccionaba luego con fosgeno, un

¹ De acuerdo a cálculos realizados mediante el Software *Material Studio Modeling 4.1*

compuesto bastante desagradable debido a que, al momento de reaccionar, emite vapores sumamente tóxicos que incluso pueden provocar la muerte.⁽¹¹⁾ **(Figura 2)**

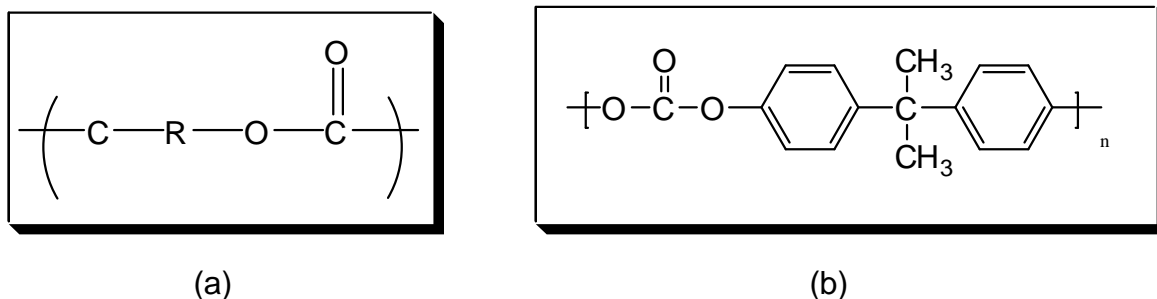


Figura 1. (a) Estructura de la unidad repetitiva característica para la síntesis del Policarbonato (éster). (b) Fórmula de la molécula de Policarbonato, un polímero de condensación sintética.

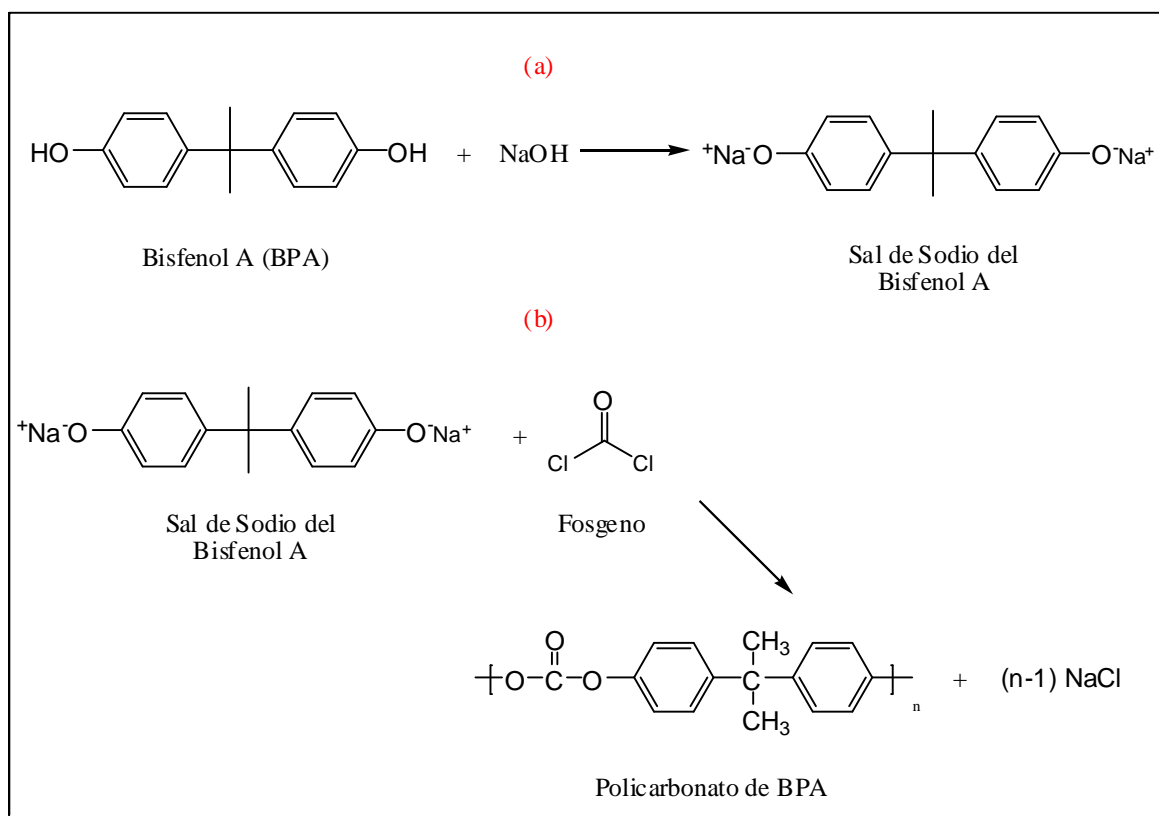


Figura 2. Reacción tradicional de síntesis de Policarbonato. (a) El BPA reacciona con NaOH para dar como producto la sal sódica de BPA. (b) La sal sódica de BPA reacciona con fosgeno para dar como producto el polímero de interés.

Debido a la alta toxicidad del fosgeno, se ha sustituido su uso por el Etilenglicol, que es un compuesto orgánico que propicia una reacción de glicólisis proporcionándonos exactamente el mismo producto; no obstante la reacción es sumamente lenta, más no nociva. De hecho, esa nueva síntesis es la que más se emplea en la Industria actualmente, ya que implica menores riesgos y un bajo costo. **(Figura 3)**. Cabe mencionar que una característica muy importante del Policarbonato, es que la cadena polimérica no es estructuralmente simétrica, lo cual promueve la presencia de una fase amorfa, confiriéndole así al material propiedades particulares de entre las cuales destaca una alta transparencia cuando se encuentra en forma de películas delgadas, por lo que es utilizado como “vidrio irrompible” ⁽¹²⁾.

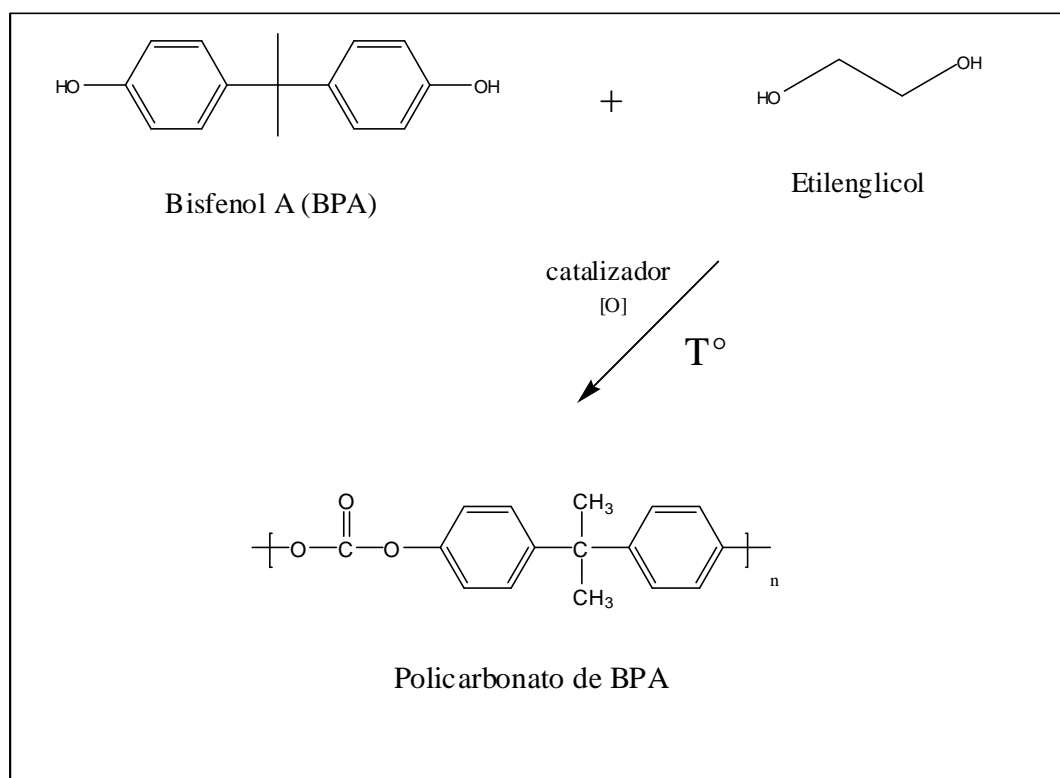


Figura 3. Reacción modificada de síntesis de Policarbonato. El BPA se hace reaccionar con Etilenglicol (EC) en presencia de un catalizador y Temperatura para dar como producto el polímero de interés.

En el presente trabajo se llevó a cabo un reciclaje químico de Policarbonato cuyo propósito es darnos como producto Bisfenol A de alta pureza que pueda ser empleado para aplicaciones industriales, ya sea como materia prima para la síntesis de Policarbonato o como un efectivo fungicida, siendo éste último el destino que se les dio a los productos obtenidos mediante la experimentación realizada. Se emplearon métodos y técnicas convencionales en cuanto a la experimentación se refiere, además de que se utilizó equipo de laboratorio simple involucrando procesos de consumo de baja energía. Esta es una propuesta sencilla que puede aplicarse a los residuos del material mencionado, siendo una alternativa económica para que las industrias aprovechen sus residuos y reduzcan su inversión en materias primas.

Experimentalmente se siguieron dos metodologías para poder llevar a cabo un reciclaje químico eficiente, las cuales se basaron en los estudios realizados en el *Kyoto Institute of Technology* en Japón⁽¹³⁾, modificando algunos de los procedimientos ahí descritos, y por ende, obteniéndose resultados distintos a los reportados en el citado artículo al cambiar las condiciones de reacción. Cabe mencionar que el artículo referido es uno de los pocos documentos que evidencian el estudio del reciclaje químico del Policarbonato, de ahí el interés por crear una propuesta alterna para el tratamiento de tal material.

En lo que se refiere al uso de los productos obtenidos a partir de la degradación del Policarbonato y su aplicación industrial, es bien sabido que el Bisfenol A y sus derivados son empleados como potentes fungicidas⁽¹¹⁾, aunque cabe aclarar que éste uso ha sido ampliamente criticado por numerosas instituciones, debido a que se considera una sustancia altamente tóxica al ser consumida por el ser humano y los animales, ya que puede causar alteraciones hormonales en los individuos⁽¹⁴⁾. Es por ello que el uso sugerido de éste químico es como materia prima para volver a sintetizar el Policarbonato, limitando su uso para aplicaciones relacionadas con la Industria Alimenticia.

Sin embargo, los derivados del Bisfenol A, los cuales son en su mayoría oligómeros como el Bisfenol A de glicidil éter (BADGE), el metacrilato de Bisfenol A de glicidil éter (Bis-GMA), así como algunos etoxilatos y propoxilatos del BPA⁽¹⁵⁾, son sustancias de amplio uso en la Industria Agroalimentaria ya que con ellos se elabora el recubrimiento interior de los envases metálicos de estaño; mientras que por parte de los dentistas, es empleado en la Industria Cosmetológica como un antibacterial en cremas dentales⁽¹¹⁾. Como puede verse, el uso de los productos de reacción obtenidos mediante la degradación química del Policarbonato tienen usos importantes y su adecuado aprovechamiento puede resultar benéfico a los productores de tales materiales.

6. JUSTIFICACIÓN TEÓRICA ^(16, 17, 18, 19)

Como una herramienta útil para conocer la viabilidad de la reacción y comprobar que efectivamente es posible lograr la obtención del Bisfenol A con fundamentos teóricos que expliquen la interacción de las moléculas, se empleó Simulación Molecular apoyada por Química Computacional a través de la cual se pudo comprobar el curso de la reacción y el comportamiento de las moléculas para lograr los resultados esperados. Dicho cómputo se llevó a cabo en una estación de Trabajo Marca Dell de 2 procesadores Xeon, de 3.2 GHz.

La Química Computacional se define como un subcampo de la Química Teórica que implica el modelaje de aspectos químicos por computadora y que tiene aplicaciones en múltiples ramas de la ciencia. El objetivo del empleo de esta útil herramienta, es el hecho de predecir estructuras moleculares, caracterizar a una molécula determinada de acuerdo a sus niveles de energía y propiedades electrónicas, verificar la estabilidad de los sistemas químicos, estimar las diferencias de energía en distintos estados para poder explicar los avances de una reacción e incluso sus mecanismos a nivel atómico, etc. La Química Computacional es de gran importancia en la actualidad porque depende directamente de áreas como la Química Teórica, la Mecánica Cuántica, la Química Cuántica y la Química Molecular.

Una Simulación Molecular es una reproducción que se logra mediante Química Computacional en la cual se permite que átomos y moléculas interactúen por un periodo de tiempo bajo diversas condiciones derivadas de la Mecánica Cuántica. En su forma más simple, ésta herramienta predice las propiedades desde la estructura molecular. A través de los programas que permiten llevar a cabo estos cálculos, se pueden obtener desde longitudes de enlace, ángulos de enlace, estados de transición, detección de intermediarios de reacción, hasta obtener datos de equilibrio de fases, predecir propiedades mecánicas, capacidades caloríficas, calores de formación y reacción, solubilidades,

propiedades de transporte, e incluso se puede diseñar la molécula indicada a partir de las propiedades deseadas. Estos programas de Simulación son diseñados a partir de datos empíricos con los que se genera una base de datos que correlaciona propiedades con grupos de átomos en los que se divide la molécula, o diseñados con base en teorías, ya que por ejemplo, algunos usan modelos de la Termodinámica Estadística o métodos de la Mecánica Cuántica.

En este caso particular, la Simulación Molecular (calculada por medio de Material Studio Modeling 4.1)⁽¹⁹⁾ se aplicó a un sistema polimérico para predecir la reacción de degradación del Polibisfenildimetilcarbonato (Policarbonato) y con ello la generación de Bisfenol A o alguna de sus sales como producto de reacción, obteniendo resultados óptimos que permitieron comprobar la viabilidad de la reacción.

Para describir el comportamiento de la molécula en estudio, se empleó la Teoría del Funcional de Densidad (DFT por sus siglas en inglés), la cual es una formulación alternativa de la mecánica cuántica en la que la cantidad central es la densidad electrónica y no la función de onda de los cuerpos. La ventaja de esta teoría es que la densidad es un objeto mucho más simple que las funciones de onda, lo cual favorece su facilidad de cálculo. En otras palabras, puede decirse que la DFT es un método fundamental para calcular la estructura electrónica de un cuerpo, y con ello poder determinar la energía funcional del mismo, cumpliendo con un principio variacional: La energía será mínima para la densidad real del sistema.

La primera aproximación para este funcional se conoce como Aproximación de Densidad Local (LDA) y consiste en suponer que en cada punto, la energía de intercambio y correlación depende sólo de la densidad en ese punto. Este valor se considera como el que tendría un gas de electrones libres de esa densidad. Esta aproximación es bastante fuerte, por lo que se obtienen resultados muy precisos para algunas propiedades.

Sin embargo, existen otras aproximaciones más sofisticadas conocidas como “Aproximaciones de Gradiente Generalizado” (GGA), las cuales consideran en cada punto el valor de la densidad y sus gradientes. De hecho, para algunas propiedades éstas aproximaciones dan mejores resultados que LDA, en particular para geometrías moleculares y energías del estado fundamental, aunque para otras no representan una mejora sustancial.

Todas estas aproximaciones en conjunto, que forman parte de la Teoría del Funcional de Densidad, son útiles para calcular y describir las propiedades estructurales de los sistemas físicos, su estabilidad y características de reacción, permitiéndonos conocer el comportamiento de un sistema de reacción incluso antes de llevarlo a cabo a nivel laboratorio, lo cual es muy útil porque nos permite economizar en la experimentación, ya que generalmente el costo de cálculo es mucho menor al experimental.

Del mismo modo, los métodos de cálculo basados en la Teoría del Funcional de Densidad nos permiten llevar a cabo el análisis y estudio de la Función de Fukui, la cual ha demostrado ser una herramienta muy útil en el estudio conceptual de la selectividad en una reacción química; esto es, que la Función de Fukui es una herramienta que nos permite ver qué sitios de la molécula son más susceptibles a participar en ataques nucleofílicos, electrofílicos o de radicales libres, los cuales favorecerán la posibilidad de éxito en una reacción determinada.

El uso de los DFT ha sido muy criticado debido a que las condiciones experimentales que emplea son una Temperatura de 0 °K en fase gaseosa, las cuales no corresponden a las condiciones experimentales (348.15 °K en fase líquida para éste caso particular); sin embargo, hay que hacer hincapié en que ésta es sólo una herramienta que permite conocer la viabilidad de la reacción proporcionándonos resultados muy semejantes a los obtenidos experimentalmente.

7. MATERIALES Y MÉTODOS

MATERIAL

- 4 vasos de precipitados de 150 ml
- 2 pipetas graduadas de 10 ml
- 1 probeta de 100 ml
- 1 termómetro
- 1 embudo de filtración
- 1 embudo de separación
- 1 vidrio de reloj
- Placas cromatográficas de sílica gel, 60F₂₅₄ Merck™ (de 20cm x 20cm para la Cromatografía en Placa Preparativa y de 4.0cm x 2.5cm para la Cromatografía en Placa Fina)
- 1 agitador de vidrio
- 4 cajas petri
- 1 asa bacteriológica

EQUIPOS:

- 1 parrilla de calentamiento con agitación
- 1 agitador magnético
- 1 soporte universal completo
- 1 cámara de vidrio reveladora para Cromatografía en Placa Fina de 20cm x 20cm, Marca Latch-Lid™
- 1 lámpara de rayos UV de 254nm a 365nm, Marca Cole-Parmer™
- Espectrofotómetro de Infrarrojo Magna-IR 560, Nicolet
- Aparato de Determinación de Punto de Fusión Fisher-Johnes, con intervalo de temperatura de 20°C a 300°C
- Estufa
- Estación de Trabajo Marca Dell de 2 procesadores Xeon, 3.2GHz

REACTIVOS:

- Residuos de Policarbonato (PC) (Discos Compactos)
- Hidróxido de Sodio
(Grado Reactivo, Marca Baker Analyzed™, PM=40g/mol, hojuelas con pureza del 99%)
- Etilenglicol (EG)
(Grado Reactivo, Marca Baker Analyzed™, PM=62.07g/mol, $\delta= 1.113\text{g/mol}$, Pureza= 98%)
- Etilencarbonato (EC)
(Grado Reactivo, Marca Aldrich™, PM=88.06g/mol, cristales con pureza del 98%)
- Metanol
(Grado Reactivo, Marca Merck®, PM=32.04g/mol, Pureza= 99.7%)
- Etanol
(Grado Reactivo, Marca Baker Analyzed™, PM=46.06g/mol, Pureza= 99.7%)
- Éter
(Grado Reactivo, Marca Fermon®, PM=74.12g/mol, Pureza= 99.7%)
- Acetona
(Grado Reactivo, Marca Baker Analyzed™, PM=58.08g/mol, $\delta=0.785\text{g/mol}$, Pureza=99.6%)
- Acetato de Etilo
(Grado Reactivo, Marca Baker Analyzed™, PM=88.108g/mol, $\delta=0.895\text{g/mol}$, Pureza= 99%)
- Hexano
(Grado Reactivo, Marca Baker Analyzed™, PM=86.18g/mol, Pureza= 85%)
- Cloroformo
(Grado Reactivo, Marca Monterrey®, PM=119.39g/mol, Pureza= 98%)
- Tetracloruro de Carbono
(Grado Reactivo, Marca Baker Analyzed™, PM=153.82g/mol, Pureza= 98%)
- Agua destilada
- Medio de cultivo Agar Dextrosa Papa (PDA)
(Bacto-Agar Deshidratado, Marca Difco®, pH=5.6 a 25°C)

METODOLOGÍA: (Figura 4)

7.1 PREPARACIÓN DE LA MUESTRA

El reciclaje se llevó a cabo empleando discos compactos de desecho.

1. Con una lija fina (Marca Fandeli®, A-99, No.600), se eliminó la pintura y el resto de la carga adicionada al polímero hasta obtener una pieza transparente, libre de color. Al realizar este procedimiento se evitó rayar demasiado el polímero, ya que de otra forma, pequeñas partículas de la lija pueden quedarse atrapadas en la estructura plástica e interferir en el proceso de degradación.
2. Acto seguido, se limpió cuidadosamente el disco con un algodón impregnado en acetona para eliminar las sustancias indeseables remanentes (trazas de metales y colorantes orgánicos) que podrían afectar el curso de la reacción.
3. Se cortó el disco de Policarbonato (PC) obteniendo virutas pequeñas para lograr una reacción más rápida al aumentar la superficie de contacto.

7.2 TRATAMIENTO QUÍMICO

Etapa 1 (*Policarbonato con Etilenglicol catalizado con una base fuerte*)

1. Se disolvieron 0.5mmol de NaOH en 100mmol de Etilenglicol a una temperatura aproximada de 80°C purgando el medio con Nitrógeno.
2. Homogenizada la mezcla de reactivos mediante agitación, se añadieron 5mmol de Policarbonato preparado anteriormente.

3. El sistema se calentó con agitación constante a 175°C durante intervalos de tiempo que oscilaron entre 1 y 20 minutos, para posteriormente enfriar a temperatura ambiente.
4. Se adicionaron 50 ml de acetona y se mezcló para obtener una solución líquida y homogénea.
5. Se filtró el producto final y se almacenó la solución.

Etapa 2 (*Policarbonato con Etilenglicol y Etilencarbonato catalizado con una base fuerte*)

Se prepararon 4 sistemas semejantes al descrito anteriormente, en el cual se modificaron algunas de las condiciones para poder conocer bajo qué circunstancias se pueden obtener los resultados esperados. Para cada uno de ellos se siguió el procedimiento que a continuación se enuncia:

1. Se disolvieron 0.5mmol de NaOH en 100mmol de Etilenglicol manteniendo una temperatura aproximada de 80°C.
2. Se añadieron 5mmol de Policarbonato, así como 7mmol de Etilencarbonato.
3. Se calentaron los sistemas con agitación constante a una temperatura específica de 175°C. Los intervalos de tiempo de calentamiento para cada uno de los 4 sistemas fueron de 0 a 10 minutos, de 11 a 20 minutos, de 21 a 50 minutos y de 51 a 100 minutos respectivamente.
4. Posteriormente se enfriaron los sistemas a temperatura ambiente y se adicionó a cada uno de ellos 50 ml de acetona, mezclando hasta homogenizar.
5. Se filtraron los productos finales y se almacenaron las soluciones.

Identificación de los Productos de Degradación

Como la reacción realizada fue propiamente una reacción de degradación, es de esperarse que se obtenga una gran diversidad de productos, ya que, aunque se esperan dos como mayoritarios, puede existir un sinnúmero más de ellos (los cuales se discuten en la sección de Resultados que se presenta más adelante) debido a que el Bisfenol A y el Etilencarbonato pueden modificar sus características fisicoquímicas al ser sometidos a altas temperaturas, de modo que no hay que ignorar la posibilidad de que pueden reaccionar con intermediarios o consigo mismos y dar otros productos diferentes a los esperados, pero de igual manera de cierta importancia industrial y que puedan ser empleados para una gran diversidad de fines.

Por esta razón, para comprobar la existencia de Bisfenol A y Etilencarbonato, se llevó a cabo una Cromatografía en Capa Fina^(20, 21) empleando como referencia los reactivos mencionados anteriormente, de acuerdo al siguiente procedimiento:

1. Con un capilar, se colocó en una placa cromatográfica (4.0 x 2.0 cm) una gota de Bisfenol A disuelto en acetona como referencia y una gota de la solución obtenida como producto para cada uno de los 5 sistemas degradados.
2. Después se corrió^(20, pag.11) la placa empleando una mezcla de Hexano/Acetato de Etilo en proporción 70:30 respectivamente.
3. Posteriormente se llevó a cabo el mismo procedimiento, colocando ahora una gota de EC disuelto en acetona como referencia.
4. Finalmente se revelaron las placas empleando una cámara de yodo, llevando a cabo el mismo procedimiento para cada uno de los sistemas obtenidos en las diferentes etapas de la experimentación.

5. Para confirmar la existencia de los productos de interés, las placas fueron reveladas de nueva cuenta, ahora empleando una cámara de rayos UV (254 nm).

Separación de los Productos de Degradación

La separación de los productos de degradación identificados previamente, se llevó a cabo empleando una Cromatografía en Placa Preparativa^(20, 21) de acuerdo al procedimiento que a continuación se describe:

1. Cada solución que contenía los productos de interés en los sistemas obtenidos, fue aplicada en Placas Preparativas de aluminio para TLC con sílica gel 60F₂₅₄ de 20 cm x 20 cm (Merck®).
2. La aplicación de los sistemas en las placas se llevó a cabo empleando tubos capilares con terminación extrafina y concentrando mediante temperatura la solución.
3. Ya aplicadas cada una de las muestras, se procedió a correr las placas colocándolas dentro de una cámara reveladora para cromatografía y empleando una mezcla de disolventes Hexano/Acetato de Etilo en proporción 70:30, misma que se empleó para hacer el ensayo preliminar.
4. Una vez finalizado el paso anterior, se procedió a revelar las placas empleando una lámpara de rayos UV (254 nm), para de esta manera distinguir las diferentes fases de los correspondientes productos de degradación.
5. Finalmente, se separaron las diferentes fases raspando la sílice de las placas y colocándola en recipientes diferentes para no mezclar los productos de degradación obtenidos.

Obtención de los Productos de Degradación

Ya que se aislaron las diferentes fracciones, fue necesario separar los productos de degradación, ya que estos se encontrarían aún mezclados con la sílice de las placas. Para lograrlo, se llevó a cabo el siguiente procedimiento:

1. Se colocó sobre un recipiente de vidrio un embudo de filtración con papel filtro de poro fino (papel filtro Whatman No. 1).
2. Posteriormente se vertió sobre el papel filtro la sílice que contenía el producto de interés y se agregó poco a poco acetona.
3. Se llevó a cabo el mismo procedimiento para todas y cada una de las fases obtenidas a partir de las placas cromatográficas.
4. Finalmente, los recipientes que contenían los productos en solución de acetona se taparon y se dejaron reposar para luego ser vertidos en cajas petri, las cuales se sometieron a temperatura ambiente para lograr la evaporación del disolvente e inducir la cristalización de los productos.

Purificación de los Productos de Degradación

Ya finalizado el proceso de obtención de los productos de degradación, se hizo una separación mediante decantación de los productos en estado sólido y en estado líquido. Debido a que los productos mayoritarios esperados son sólidos, únicamente se seleccionaron los que se encontraban en este estado y se llevó a cabo su purificación de acuerdo al siguiente procedimiento:

1. Se disolvieron los sólidos en una solución agua/acetona en proporción 10:90 respectivamente, sometiendo a un calentamiento constante, sin exceder los 80°C de temperatura.
2. Ya formada la solución, se procedió a dejar evaporar la totalidad del disolvente y se observó la aparición de cristales.

3. Se llevó a cabo el mismo procedimiento para cada uno de los sólidos obtenidos.

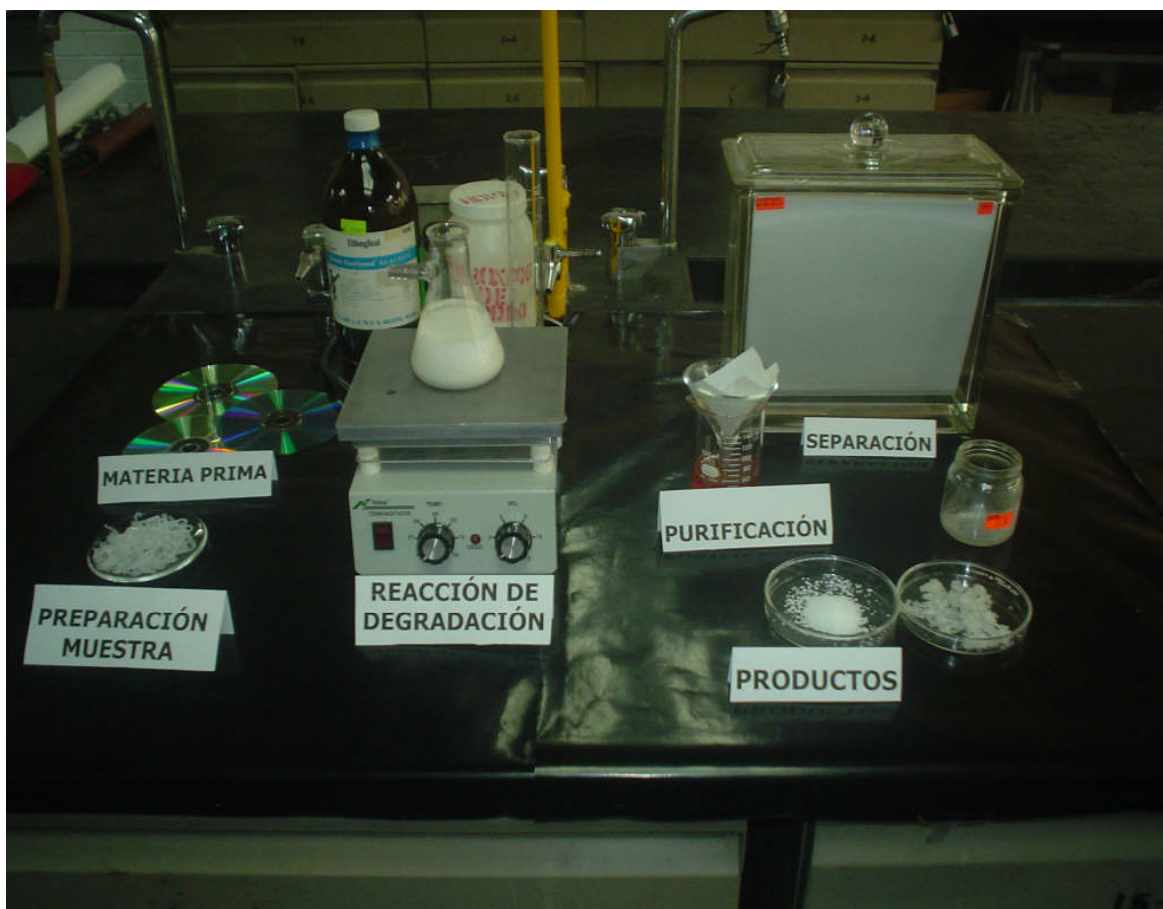


Figura 4. Proceso de Degradación y Estabilización de Policarbonatos mediante Reciclaje Químico a través de Reacciones de Catálisis Básica

7.3 PRUEBAS DE CARACTERIZACIÓN

Pruebas físicas preeliminares

1. Se observaron las características físicas básicas de cada uno de los sólidos obtenidos (color, olor, forma de los cristales, tamaño, etc.)
2. Posteriormente se llevaron a cabo pruebas de ignición para los sólidos obtenidos.
3. Se determinó la solubilidad de los productos y se midió su punto de fusión.

Espectroscopia de Infrarrojo (IR) ^(22, 23, 24)

1. Se coloraron en un mortero de ágata 0.25 g de KBr, agregando aproximadamente 0.05g de los productos de interés. Se trituraron con el pistilo hasta obtener un polvo muy fino, logrando la completa homogenización de la mezcla.
2. Se compactó el polvo mediante presión para obtener una pastilla uniforme.
3. Después de encender el equipo, se introdujo la pastilla en el porta pastilla del mismo, y se dieron las instrucciones pertinentes al software para obtener las lecturas correspondientes.
4. Se obtuvieron los espectros de los productos de degradación, los cuales fueron analizados e interpretados para determinar la naturaleza de los productos.

Cabe mencionar que también se obtuvieron los espectros de Infrarrojo del Bisfenol A y el Etilencarbonato grado reactivo, para de esta manera ser utilizados como patrones para el análisis de los productos de degradación obtenidos.

Estabilización y uso de los Productos de Degradación

Como se enunció desde el principio, el Bisfenol A y sus derivados se emplean en la Industria de los Insecticidas como potentes fungicidas, los cuales se encargan de combatir y matar los hongos, especialmente en algunos cultivos. Por esta razón, para comprobar su capacidad y utilidad, se procedió a realizar lo siguiente:

1. Se obtuvo el hongo de la especie *Penicillium* a partir de una fruta en estado de descomposición. Esto se logró exponiendo un durazno a condiciones de humedad y ausencia de luz durante aproximadamente 96 horas, para así favorecer la aparición del citado hongo en su fase exponencial de crecimiento.
2. Se prepararon 4 cajas petri con Agar Dextrosa Papa (PDA) y se inoculó el hongo empleando un asa bacteriológica, colocándolo en el medio de cultivo mediante una técnica de dilución. Todo el procedimiento se llevó a cabo en un medio estéril para evitar la contaminación por bacterias.
3. Se controló el crecimiento del hongo durante 48 horas a una temperatura de entre 25 y 28°C, y se registraron los datos pertinentes.
4. Se suspendieron los productos obtenidos en la menor cantidad de mezcla agua/acetona posible y se agregaron a diferentes concentraciones (de una a cuatro gotas) sobre los hongos crecidos en la caja petri.
5. Se dejaron reposar las cajas petri durante 48 horas más.
6. Se etiquetaron los sitios de ataque para su posterior identificación y para evaluar la capacidad de inhibición de los productos de degradación.
7. Se registraron los resultados obtenidos y se obtuvieron las conclusiones pertinentes.

8. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

8.1 PARTE EXPERIMENTAL (ASPECTO QUÍMICO)

Como se explicó desde un inicio, la primera experimentación realizada consistió en una reacción de Policarbonato (PC) con Etilenglicol (EG) catalizada por un medio básico, el cual se generó por la presencia de Hidróxido de Sodio (NaOH). Esta reacción empleó calor en presencia de un disolvente para atacar al polímero y degradarlo a sus monómeros obteniendo como producto mayoritario el Bisfenol A (BPA) y algunas de sus sales, así como Etilencarbonato (EC) aunque en una porción minoritaria, ya que éste no fue cuantificable (<0.05g). **(Tabla No. 1)**. La segunda etapa consistió en una serie de reacciones de Policarbonato (PC) con Etilenglicol (EG) en presencia de Etilencarbonato (EC) catalizada por un medio básico, siendo éste de nueva cuenta el NaOH y empleando calor, aunque la intensidad de la temperatura se fue modificando para poder determinar cuáles serían las condiciones ideales para obtener la mayor cantidad de BPA. **(Tabla No. 2)**

De acuerdo a lo descrito en el Desarrollo Experimental, puede verse que se agregó una cantidad considerable de Etilenglicol (100mmol) al Policarbonato para favorecer la reacción. A manera de ensayo, la reacción de depolimerización inicialmente se realizó en presencia de Etilenglicol como único agente químico, y al cabo de algunos minutos, lo que se logró fue solamente la fusión del polímero al someterlo a altas temperaturas, generando como producto una solución clara, viscosa y ácida (ya que alcanza un pH =4.0), es por ello que se requirió de la adición de un reactivo que además de acelerar la reacción, cambiara el pH de la solución. Por esta razón se agregó el NaOH, que a pesar de haber sido adicionado en poca cantidad (0.5mmol), ésta fue suficiente para elevar el pH a 11.0, lo cual trae como consecuencia una alcalinización considerable de las soluciones, además de que actúa como un potente catalizador, logrando que la reacción se realice de manera óptima en cortos periodos de tiempo.

ETAPA 1 (PC CON EG CATALIZADO CON NaOH)			
Sistema	Tiempo de Reacción	Temperatura	Observaciones
1	10 min	175°C	Solución clara, ligeramente viscosa, se torna cristalina después de la adición de acetona y el respectivo proceso de filtración.

Tabla No. 1: Condiciones de reacción del sistema 1 en la Etapa 1, así como sus respectivas características.

ETAPA 2 (PC CON EG Y EC CATALIZADO CON NaOH)				
Sistema	Intervalo de Reacción	Tiempo Específico	Temperatura	Observaciones
1	1-10 min	10 min	175°C	Solución color ámbar, viscosa, olor desagradable.
2	11-20 min	20 min	175°C	Solución color café claro, mayor viscosidad que la anterior, se intensifica el olor a resina.
3	21-50 min	40 min	175°C	Obscurecimiento del color, (comparado con los sistemas anteriores) viscosidad semejante, realce del olor.
4	51-100min	90 min	175°C	Color café muy oscuro, alta turbidez. Coloidal. Realce del olor, siendo totalmente desagradable. Aparición en el fondo y la superficie de cascarillas cafés lisas y brillantes.

Tabla No. 2: Condiciones de reacción para los diferentes sistemas en la Etapa 2, así como sus respectivas características.

En los cinco sistemas descritos anteriormente, pudo observarse que desde los 80°C hasta 100°C, el Policarbonato comienza a reblandecerse, lo cual indica el comienzo de la reacción de depolimerización, ya que como recordaremos, ésta es propiamente una reacción de degradación en donde químicamente se lleva a cabo

una alteración del grado de polimerización al romperse paulatinamente los enlaces de la macromolécula en cuestión. En este caso, el encargado de agilizar la reacción fue el hidróxido de sodio, mientras que el Etilenglicol fue el generador de la ruptura de enlaces para la obtención del monómero mayoritario, es decir, el Bisfenol A, aunque no hay que pasar por alto la existencia de productos minoritarios, siendo éstos principalmente hidroxietiléteres generados a partir de la reacción de BPA con el propio Etilencarbonato obtenido como producto de la reacción de glicólisis.

De acuerdo al mecanismo de reacción que a continuación se presenta (**Figura 5**) los hidroxietiléteres que se producen son el Monohidroxietiléter de Bisfenol A y el Bihidroxietiléter de Bisfenol A (MHE-BPA y BHE-BPA)⁽¹³⁾, así como también algunos otros derivados, los cuales pueden formar oligómeros y constituir una materia prima de importante aplicación industrial, ya que como se mencionó con anterioridad, en conjunto son empleados como barnices para el recubrimiento interior de las latas usadas en la Industria Alimenticia, como fungicida para atacar algunas especies de hongos en determinados cultivos e incluso como antiséptico en cremas dentales.

Debido a que el EC reacciona químicamente con el BPA aún sin llegar al término de la reacción, es que de manera alterna se hizo reaccionar en una segunda etapa el BPA con un exceso de EC a diferentes condiciones de temperatura para así poder observar el curso de la obtención de los productos mayoritarios con otros parámetros, tal y como se muestra en la **Tabla 2** anteriormente presentada. El objetivo de la adición de un exceso del carbonato cíclico a la reacción fue precisamente el observar y comprobar el consumo del mismo al ser empleado como intermediario y precursor de la formación de las sales ya mencionadas en el párrafo anterior.

De acuerdo a las características físicas descritas en la **Tabla 2**, puede observarse claramente que el producto obtenido como resultado de la

experimentación para el sistema 5, no es el esperado, ya que al someterlo a un tiempo excesivo de calentamiento, se propicia la formación de un chapopote, el cual es producto de la descomposición de las materias primas obtenidas por acción de las altas temperaturas.

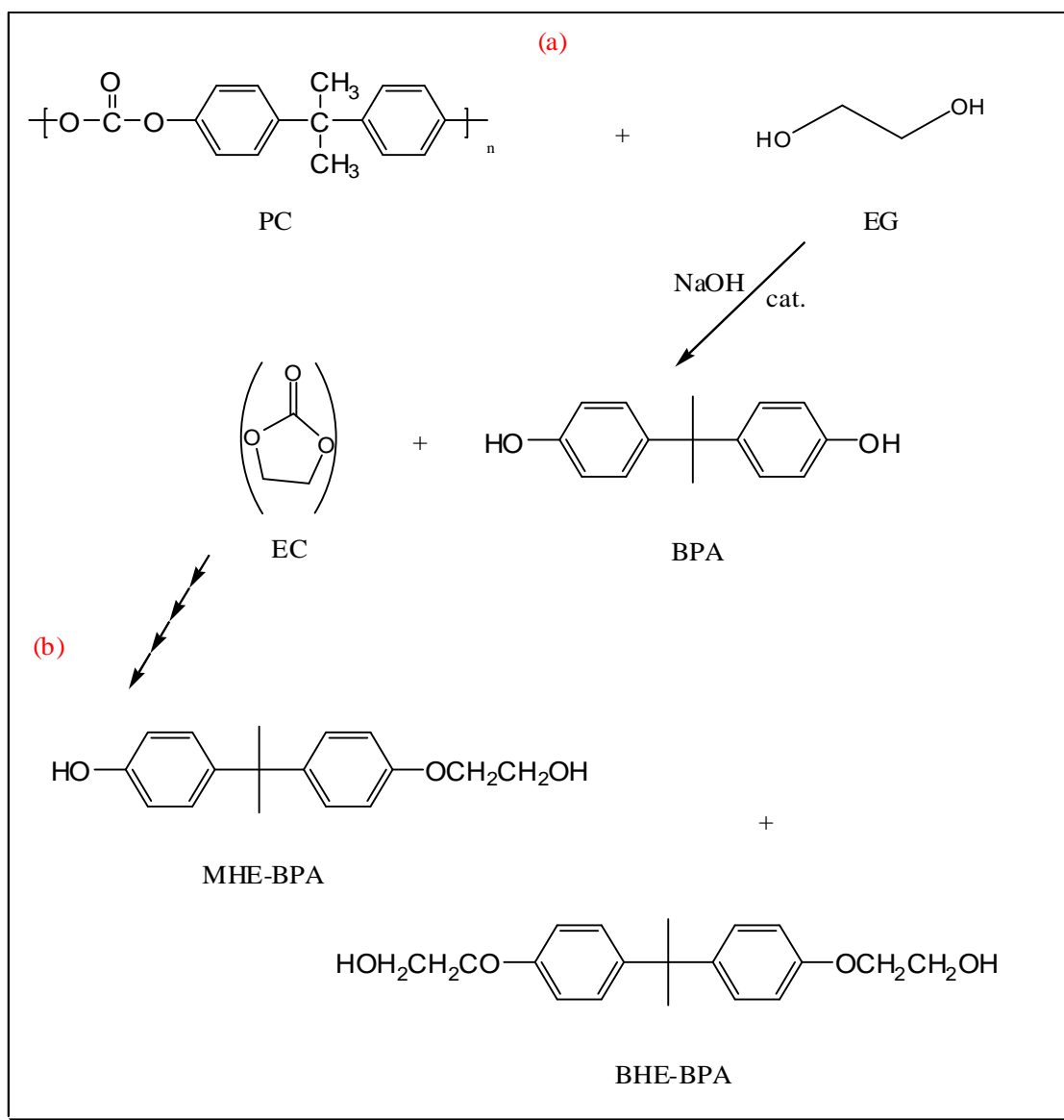


Figura 5. Reacción de depolimerización del PC en la primera etapa. (a) Primeramente, el PC reacciona con EG en un medio muy alcalino para formar el BPA y EC, que se muestra entre paréntesis por ser poco cuantitativo y fungir como intermediario. (b) Posteriormente, el EC y el BPA reaccionan entre sí para dar como producto hidroxietiléteres que son propiamente sales de BPA.

Al llevar a cabo la Cromatografía en Capa Fina, pudo comprobarse la presencia de BPA en la mayoría de los sistemas, (**Figuras 6 y 7**) mientras que la aparición de EC en los mismos no es evidente (**Figuras 8 y 8a**). Sin embargo, no fue sino hasta la Cromatografía en Placa Preparativa (**Figura 9**) que pudo notarse la presencia de una gran diversidad de productos de reacción. De hecho, ésta cromatografía tuvo que llevarse a cabo dos veces consecutivas para poder obtener los productos de reacción con la mayor pureza posible, ya que en la primera cromatografía se obtuvieron productos los cuales se sometieron a una segunda purificación (2° cromatografía) para finalmente obtener 21 nuevos productos, de los cuales solo 13 fueron cuantificables (>0.05g).

El hecho de que no sea evidente la formación de EC como producto de reacción, radica en que, además de ser una sustancia poco estable, la temperatura del Laboratorio en donde se llevó a cabo el experimento no fue del todo favorable, ya que muchas veces alcanzaba los 30°C, temperatura muy cercana al punto de fusión del EC, haciendo difícil su identificación, sobre todo si se trata de un producto difícilmente cuantificable; del mismo modo, no hay que pasar por alto que se trata de una sustancia altamente higroscópica.

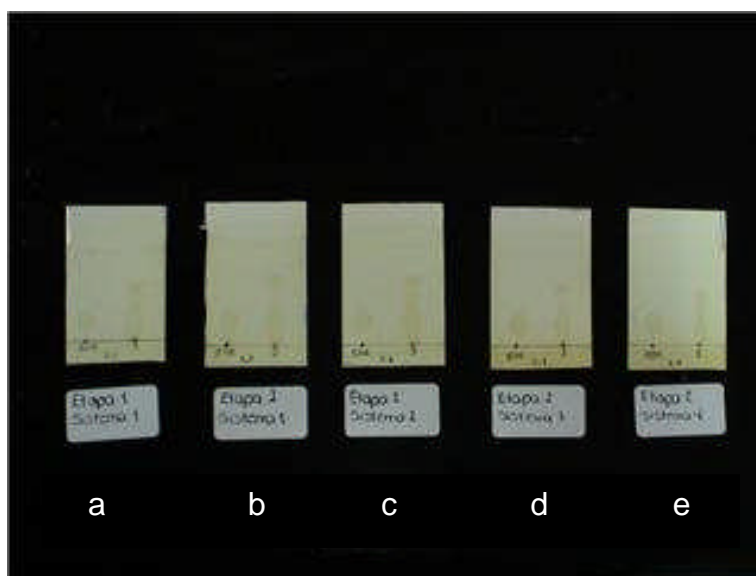


Figura 6. Cromatografía en Capa Fina de los sistemas de reacción empleando como referencia BPA grado reactivo. (a) Etapa 1, Sistema 1. (b) Etapa 2, Sistema 1. (c) Etapa 2, Sistema 2. (d) Etapa 2, Sistema 3. (e) Etapa 2, Sistema 4.

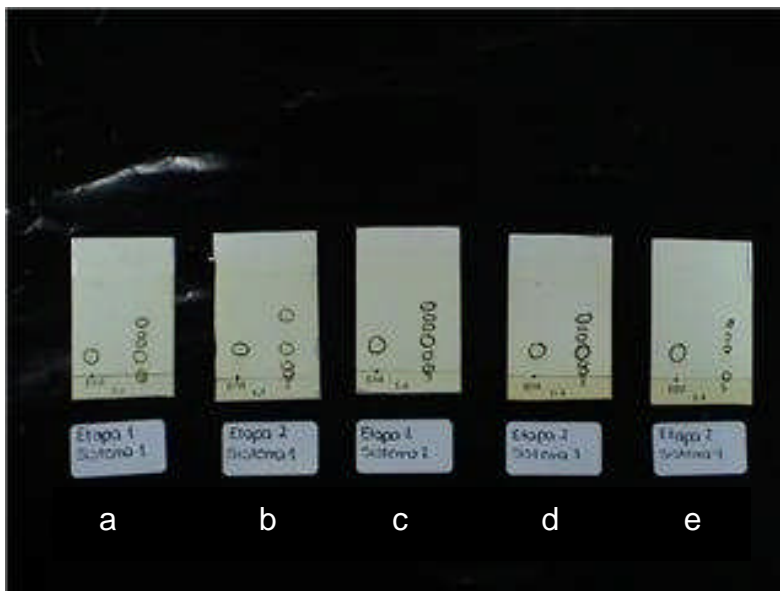


Figura 7. Para la facilidad de análisis, aquí se muestran remarcadas las huellas dejadas por la adsorción de los sistemas de reacción y del reactivo-referencia. Puede verse que en las placas (a), (b), (c) Y (d) hay presencia de Bisfenol A, mientras que en la placa (e) no se presenta; por lo tanto esas últimas condiciones no son viables para depolimerizar el Policarbonato.

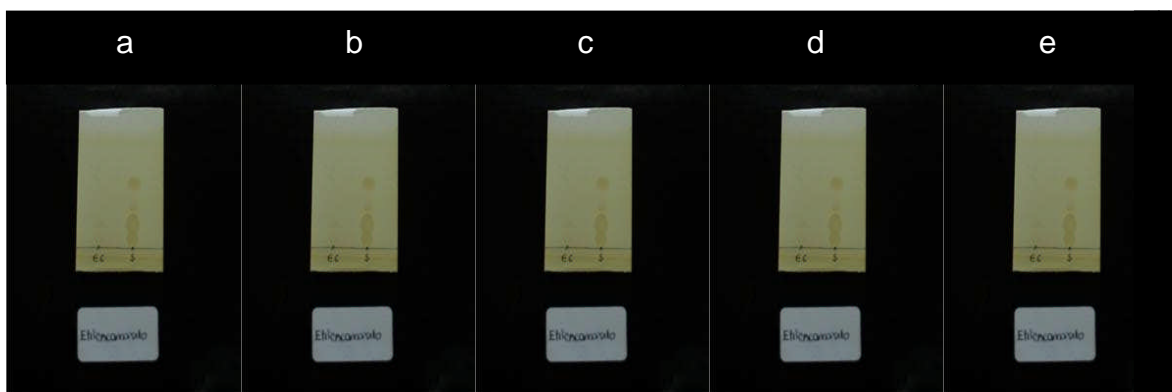


Figura 8. Cromatografía en Capa Fina de los sistemas de reacción empleando como referencia EC grado reactivo. Como puede verse en las imágenes, no es evidente su presencia por su baja estabilidad, e incluso tampoco se evidencia su presencia en la Cromatografía en Placa Preparativa.

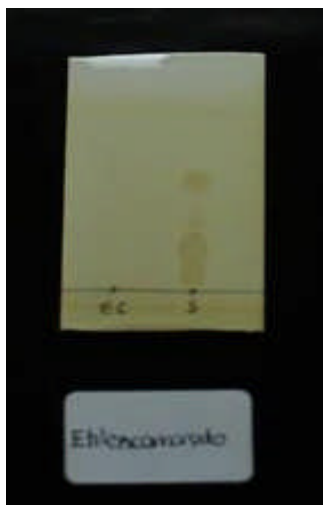


Figura 8a. En este acercamiento puede apreciarse más claramente la ausencia de las huellas correspondientes al Etlenocarbonato.



Figura 9. Cromatografía en Placa Preparativa, empleada para llevar cabo la separación de los productos de degradación

A pesar de que para cada uno de los sistemas ya descritos se obtuvo una gran cantidad de fracciones, solamente se hace referencia en las tablas que se presentan en las siguientes páginas, a aquellas 13 muestras que resultaron ser significativas debido a la existencia macroscópica de productos. Cabe aclarar también que algunas fracciones, ya purificadas mediante recristalización, dieron como producto residuos aceitosos poco cuantificables ($<0.05\text{g}$), los cuales poseen una gama variada de colores que oscilan entre el transparente, blanco y amarillo. Estas fracciones no fueron estudiadas a fondo, ya que por sus características físicas, lo más probable es que se traten de sustancias plastificantes, estabilizadores térmicos o retardadores de llama,⁽⁸⁾ (los cuales son aplicados como

carga extra a la mayoría de los materiales poliméricos para hacer rendir el material y con ello contribuir al la disminución de costos o en su defecto para intensificar algunas de sus características), o bien colorantes orgánicos y trazas metálicas que son esenciales para permitir la reflectividad que hace posible la codificación de la información que se archiva en el disco, y cuya presencia dentro de los sistemas de reacción puede afectar algunas de las características fisicoquímicas del plástico en estudio.⁽⁶⁾ Este es un detalle muy importante, ya que por ejemplo, el Policarbonato crudo que se produce en las industrias tiene un punto de fusión reportado en la literatura de por lo menos 195°C,⁽⁶⁾ mientras que el punto de fusión medido experimentalmente para los discos reciclados en el presente trabajo osciló entre los 210 y los 220°C. Por éste motivo hay que considerar que es probable que los productos obtenidos, a pesar de ser considerablemente puros, pueden no coincidir con los puntos de fusión reportados para los compuestos en cuestión, así como también algunas características físicas de los productos pueden verse alteradas como consecuencia de la purificación, ya que en esta se emplean solventes orgánicos, que a pesar de que pueden volatilizarse de manera casi inmediata, reaccionan levemente con la sustancia cambiando algunas de sus propiedades.

La **Tabla No. 3** que a continuación se presenta, contiene la descripción de las propiedades físicas de la materia prima y de los reactivos analíticos empleados como referencia para la Cromatografía en Capa Fina; del mismo modo se incluye la medición experimental de sus respectivos puntos de fusión, los cuales servirán de parámetro para la caracterización de los productos obtenidos a través de la reacción. En la **Tabla No. 4** se describen las propiedades químicas (pruebas de solubilidad y de ignición) de los reactivos-referencia empleados. La **Tabla No. 5** incluye lo correspondiente para las fracciones más significativas obtenidas a partir de las primera cromatografía realizada para la experimentación, mientras que la **Tabla No. 6** describe las propiedades químicas de las fracciones obtenidas mediante la primera cromatografía.



PROPIEDADES FÍSICAS DE LA MATERIA PRIMA Y REFERENCIAS EMPLEADAS PARA LAS CROMATOGRAFÍAS EN PLACA PREPARATIVA		
Reactivo	Características	Punto de Fusión
CD (PC)	Plástico duro pero maleable, ligeramente opaco de la superficie pero transparente de los bordes.	210-220°C
BPA puro	Cristales blancos, opacos y esféricos de tamaños variables semejantes a bolitas de unicel.	155-158°C
BPA / 	Cristales blancos brillantes, nacarados, en forma de agujas de diversos tamaños, con agrupación semejante a la de los hongos.	144-146°C
EC	Cristales transparentes muy brillantes de forma indefinida, sumamente higroscópicos y de tamaño variable.	34°C
EC/ 	Polvo muy fino casi imperceptible, transparente y que deja un halo blanquecino en el recipiente que lo contiene.	30-32°C

Tabla No. 3 *Propiedades físicas de la materia prima empleada para la experimentación y de los reactivos analíticos empleados como referencia para la Cromatografía en Placa Preparativa a través de la cual se llevó a cabo la separación de los productos de la reacción de catálisis básica. La tercera y la quinta fila corresponden al Bisfenol A y el Etilencarbonato respectivamente, disueltos en acetona, la cual posteriormente fue evaporada para obtener un sólido recristalizado con las mismas condiciones que los obtenidos mediante la reacción química.*






PROPIEDADES QUÍMICAS DE LAS REFERENCIAS EMPLEADAS PARA LA CROMATOGRAFÍA EN PLACA PREPARATIVA							
PRUEBAS DE SOLUBILIDAD							
Reactivo	H ₂ O		CCl ₄	EtOH	MeOH	Eter	CHCl ₃
BPA puro	-	+	-	+	+	+	-
BPA / 	-	+	-	+	+	+	-
EC	+	+	-	+	+	-	+
EC / 	+	+	-	+	+	-	+
PRUEBAS DE IGNICIÓN							
Reactivo	Características						
BPA puro	Arde sin emitir colores en la flama, se funde desprendiendo un olor a quemado.						
BPA / 	Arde coloreando la flama de rojo, se funde desprendiendo un intenso olor a quemado.						
EC	Fundes de inmediato con olor a quemado pero muy dulce, sin colorear la flama.						
EC / 	Fundes de inmediato con olor a quemado pero muy dulce, sin colorear la flama.						

Tabla No. 4 Propiedades químicas de los reactivos analíticos empleados como referencia para la Cromatografía en Placa Preparativa a través de la cual se llevó a cabo la separación de los productos de la reacción de catálisis básica. En la parte superior se presentan los resultados obtenidos tras la realización de las pruebas de solubilidad, mientras que en la parte inferior se presentan los resultados obtenidos para las pruebas de ignición correspondientes.

Como es evidente, las características de los reactivos que se muestran en la **Tabla No. 3**, se ven modificadas al ser recristalizados, ya que el disolvente a pesar de evaporarse por completo, interacciona levemente con el compuesto alterando sus características de ignición.

PROPIEDADES FÍSICAS DE LOS PRODUCTOS DE CATÁLISIS BÁSICA OBTENIDOS MEDIANTE LA 1° CROMATOGRAFÍA				
Etapa	Sistema	Muestra	Características	Punto de Fusión
2	2	Z	Sólido formado en la parte en donde se aplicó la muestra. Cristales pequeños y blanquecinos en forma de agujas, agrupación semejante a las de los hongos, bien definidos.	100°C
		Y	Sólido formado en la parte en donde se aplicó la muestra. Agujas de color amarillo distribuidas al azar.	105°C
		X	Cristales muy pequeños en forma de diminutas agujas incoloras, combinadas homogéneamente con hojuelas amarillas de mayor tamaño.	92°C
		W		
		V	Sólido amarillo y amorfo combinado homogéneamente con cristales pequeños e incoloros en forma de agujas.	120°C
		U		
		T		
S	Sólido amorfo no cristalino de color amarillo intenso y de tamaños variables	110-115°C		

Tabla No. 5 Propiedades físicas de las fracciones significativas obtenidas a partir de la primer Cromatografía en Placa Preparativa para los sistemas resultantes de la reacción de catálisis básica.


PRUEBAS DE SOLUBILIDAD DE LOS PRODUCTOS DE CATÁLISIS BÁSICA OBTENIDOS MEDIANTE LA 1° CROMATOGRAFÍA							
Muestra	H ₂ O		CCl ₄	EtOH	MeOH	Eter	CHCl ₃
2.2.Z	-	+	-	+	+	+	+
2.2.Y	-	+	-	+	+	+	+
2.2.X / 2.2.W	-	+	+	+	-	-	-
2.2.V / 2.2.U	-	+	-	+	+	+	-
2.2.T / 2.2.S	-	+	-	+	+	-	+

Tabla No. 6 Pruebas de solubilidad de las fracciones significativas obtenidas a partir de la primer Cromatografía en Placa Preparativa para los sistemas resultantes de la reacción de catálisis básica.


Como puede apreciarse a través de las tablas anteriores, es evidente la existencia de derivados del Bisfenol A o inclusive del Bisfenol A mismo; de igual

manera, tal como lo indica la **Tabla No. 6**, las características tanto físicas como químicas de los productos nos permitieron reducir de 8 a 5 los productos de degradación obtenidos a partir de la primera purificación. Sin embargo, debido a que algunos de los productos son cristales de diferentes características, se procedió a llevar a cabo una segunda Cromatografía en Placa Preparativa obteniendo nuevos resultados, los cuales se presentan a continuación.

PROPIEDADES FÍSICAS DE LOS PRODUCTOS DE CATÁLISIS BÁSICA					
Etapa	Sistema	Fracción	Características	Punto Fusión	
1	1	A	Cristales blancos, finos y delgados en forma de agujas.	120°C	
2	1	A	Cristales blancos, brillantes, nacarados, planos, en forma de aguja y agrupación semejante a la de los hongos.	100°C	
		B	Cristales ligeramente amarillentos en forma de agujas.	149°C	
		C	Cristales blancos brillantes en forma de finas agujas con agrupación en forma de hongo, combinada con pequeños cristales planos circulares de igual color.	149°C	
		D	Pequeños cristales muy finos en forma de agujas, nacarados, agrupación en forma de hongo.	100°C	
		E	Polvo blanco y brillante no cuantificable.	>290°C	
		F	Polvo blanco no cuantificable.	>290°C	
		G	Polvo blanco no cuantificable	>290°C	
	2	2	A	Cristales muy blancos, agujas finas con agrupación semejante a la de los hongos.	102°C
			B	Cristales muy blancos y nacarados con agrupación semejante a la de hongos.	99°C
			C	Pequeños cristales muy finos en forma de agujas, nacarados, agrupación en forma de hongo.	100°C
			D	Cristales finos en forma de pequeñas hojuelas amarillentas agrupadas entre sí al azar.	122°C
			E	Cristales blancos, brillantes y nacarados en forma finas agujas con agrupación en forma de hongo.	100°C

		F	Cristales finos y muy pequeños en forma de aguja y con agrupación en forma de hongo.	121°C
		G	Agujas cristalinas muy brillantes agrupadas al azar de color transparente a blanco.	122°C
		H	Gránulos finos de color blanco, variables en tamaño, hasta llegar a ser polvos muy finos.	>290°C
		I	Hojuelas delgadas de color blanco, de diversos tamaños, hasta llegar a ser polvos muy finos.	>290°C
	3	A	Polvo fino y cristalino de color amarillo y ligeramente pegajosos.	30°C
		B	Cristales blancos, planos y medianos.	>290°C
3	0*	A	Hojuelas brillantes de color café, ligeramente pegajosas.	84°C
		B	Pequeños cristales amarillos en forma de aguja distribuidos al azar.	85°C

Tabla No. 7 Propiedades físicas de las fracciones significativas obtenidas a partir de la segunda Cromatografía en Placa Preparativa para los sistemas resultantes de la reacción de catálisis básica.

CARACTERÍSTICAS QUÍMICAS DE LOS PRODUCTOS DE CATÁLISIS BÁSICA							
PRUEBAS DE SOLUBILIDAD							
Muestra	H ₂ O		CCl ₄	EtOH	MeOH	Eter	CHCl ₃
1.1.A	-	+	+	+	+/-	+	+/-
2.1.A	+	+	+	-	+	+	+
2.1.B	No cuantificable						
2.1.C	-	+	-	+	+	+/-	+
2.1.D	-	+	+/-	+	+	+	+
2.1.E	No cuantificable						
2.1.F	No cuantificable						
2.1.G	No cuantificable						
2.2.A	-	+	-	+	+	-	+
2.2.B	-	+	+/-	+	+	+	+
2.2.C	-	+	+/-	+	+	+	+
2.2.D	-	+	-	+	+	+	+
2.2.E	-	+	+/-	+	+	+/-	+
2.2.F	-	+	-	+	+	+	+
2.2.G	-	+	-	+	+	+	+
2.2.H	-	+	-	+	+	-	+
2.2.I	-	-	-	+/-	-	-	-
2.3.A	-	+	-	-	+	+	-

2.3.B	-	-	-	-	-	-	-
3.0.A	-	+	-	+	+	-	+
3.0.B	-	+	+/-	+	+	-	+/-
PRUEBAS DE IGNICIÓN							
Producto	Características						
1.1.A	Se quema rápidamente hasta fundirse desprendiendo olor a carne quemada, dejando un residuo ligeramente viscoso.						
2.1.A	Funde a velocidad menor. El olor que desprende es singularmente dulce, dejando un residuo ligeramente pegajoso.						
2.1.B	El sólido se consume con el fuego dejando un residuo sólido fino y duro con olor a quemado.						
2.1.C	El sólido arde coloreando el fuego de rojo y se funde generando olor a quemado.						
2.1.D	Funde rápidamente liberando un olor a quemado, dejando un residuo líquido y coloreando la flama de rojo.						
2.1.E	Olor intenso a quemado, saca chispas mas no se consume, deja un residuo blanquecino considerable.						
2.1.F	Olor intenso a quemado, saca chispas mas no se consume, deja un residuo blanquecino considerable.						
2.1.G	Olor intenso a quemado, saca chispas mas no se consume, deja un residuo blanquecino considerable.						
2.2.A	Flama con chispa roja. Arde y se funde, dejando un líquido pegajoso con olor a quemado.						
2.2.B	Funde rápido, olor a quemado, residuo líquido, chispa sin color.						
2.2.C	Funde rápido, olor a quemado, residuo líquido escaso, chispa sin color.						
2.2.D	Chispas rojas, poco residuo pero pegajoso, olor a quemado.						
2.2.E	Funde rápidamente emitiendo chispas blancas con olor a quemado y residuo pegajoso.						
2.2.F	Sin chispa, residuo escaso con olor a quemado.						
2.2.G	Sin chispa, residuo escaso con olor a quemado.						
2.2.H	No funde, deja un residuo sólido con olor a quemado.						
2.2.I	No funde, solo se calcina, emitiendo una flama roja y con olor a quemado.						
2.3.A	Funde rápidamente dejando un residuo viscoso con olor a quemado.						
2.3.B	Arde sin calcinarse con olor a quemado.						
3.0.A	Funde con olor a quemado, dejando un residuo ligeramente pegajoso.						
3.0.B	Funde rápidamente con olor a quemado dejando un residuo considerable.						

Tabla No. 8 Propiedades químicas de las fracciones significativas obtenidas a partir de la segunda Cromatografía en Placa Preparativa para los sistemas resultantes de la reacción de catálisis básica. En la parte superior se presentan los resultados obtenidos tras la realización de las pruebas de solubilidad, mientras que en la parte inferior se presentan los resultados obtenidos para las pruebas de ignición correspondientes.

De acuerdo con todos los datos obtenidos mediante las pruebas físicas preliminares de los productos obtenidos mediante la primera cromatografía, pudo

verse que las condiciones de reacción óptimas para llevar a cabo la degradación son las correspondientes al sistema 2 de la segunda etapa, esto es, llevando a cabo la reacción a 175°C durante un periodo de 11 a 20 minutos con un ligero exceso de Etilencarbonato, ya que bajo estas condiciones pueden obtenerse los productos de reacción deseados. En cuanto a la segunda cromatografía se refiere, puede confirmarse que las condiciones de reacción óptimas para llevar a cabo la degradación química del Policarbonato son las correspondientes no solo al sistema 2 de la segunda etapa, sino también a la Etapa 1 (10 minutos a 175°C sin exceso de Etilencarbonato) y al sistema 1 de la Etapa 2 (175°C durante un tiempo de 1 a 10 minutos). Como puede apreciarse, los sistemas 3 y 4 de la segunda etapa quedan descartados como posibles rutas de la reacción, ya que para el sistema 4 (de 51 a 100 minutos a 175°C) se obtiene como resultado la descomposición total de los posibles productos debido a que el tiempo es excesivo y no favorece al curso de la reacción, mientras que para el sistema 3 se obtienen productos que no son el Bisfenol A ni sus derivados, ya que sus características son totalmente diferentes. Cabe mencionar que bajo tales condiciones (de 21 a 50 minutos a 175°C) la muestra aplicada no “corre” a través de la placa cromatográfica, sino que en la línea en donde se aplica la sustancia, solamente se logra observar la formación de dos líneas nuevas con un particular relieve, las cuales fueron separadas y purificadas para obtener los sólidos de color café descritos anteriormente bajo las referencias 3.0.A Y 3.0.B.

Para poder corroborar la existencia de Bisfenol A, Etilencarbonato o alguno de sus derivados (**Tabla No. 9**) se llevaron a cabo los análisis de Espectroscopía de Infrarrojo para cada uno de los productos, tanto de la primera como de la segunda purificación. Primeramente, se estudiaron los espectros pertenecientes a los monómeros correspondientes tanto en estado puro como recristalizados en acetona (**Figuras 10, 11 y 12**) para luego ser empleados como referencia para el análisis de los productos de degradación obtenidos.

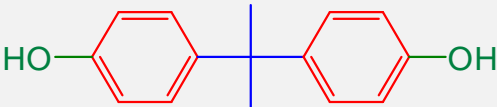
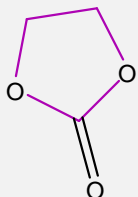
PRODUCTOS ESPERADOS (EMPLEADOS COMO REFERENCIA)			
BPA		EC	

Tabla No. 9 Estructuras de los productos esperados a partir de la reacción de depolimerización.

Posteriormente, a partir de la **Figura 13** se presentan los espectros de Infrarrojo correspondientes a las fracciones obtenidas a partir de la segunda purificación de los productos (los 13 productos mayormente cuantitativos).

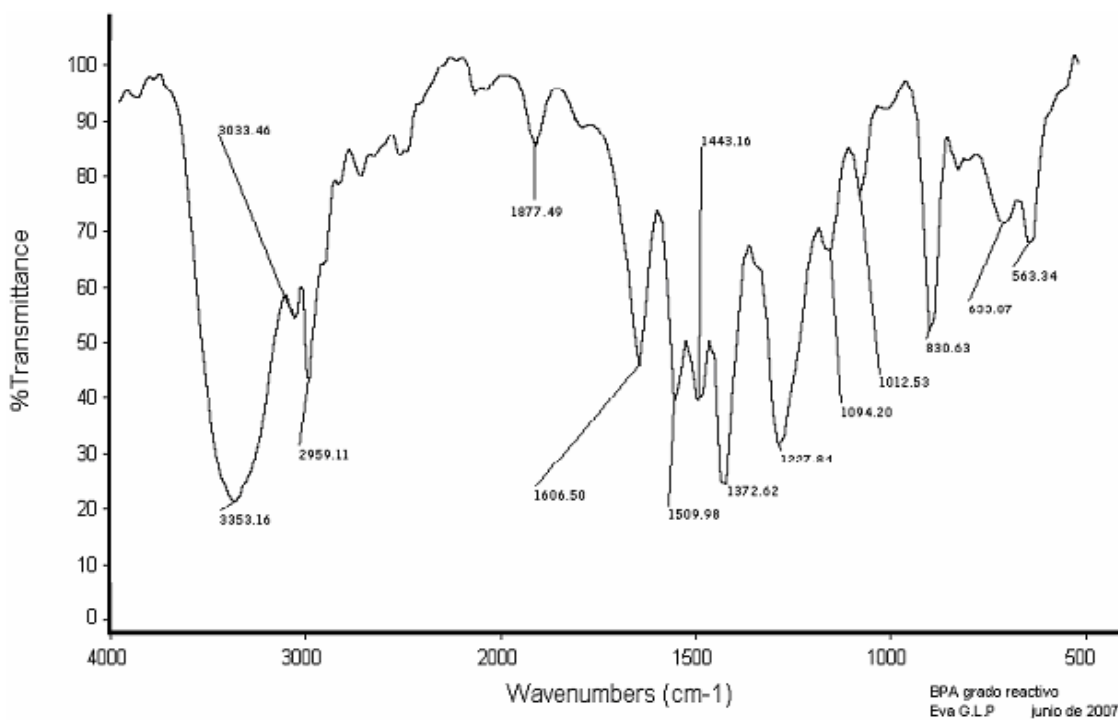


Figura 10. Espectro de IR del BPA grado reactivo.

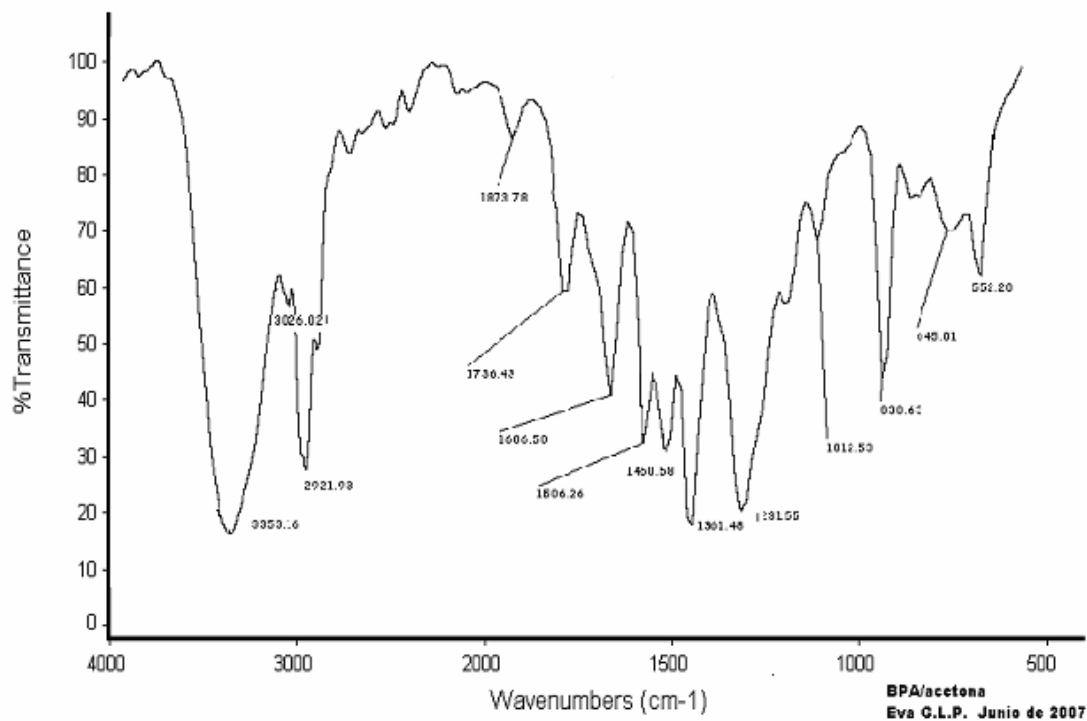


Figura 11. Espectro de IR del BPA grado reactivo disuelto en acetona, que fue empleado como referencia para la identificación de los productos de reacción obtenidos a partir de la segunda cromatografía.

Como puede apreciarse en las figuras anteriores, los espectros de Infrarrojo del BPA grado reactivo y el BPA disuelto en acetona son diferentes debido a que es evidente la interacción existente entre el BPA y su disolvente, ya que a pesar de que la acetona se evapora fácilmente, la banda que se encuentra en 1736.43cm^{-1} muestra la existencia de un grupo carbonilo, correspondiente a la 2-propanona.

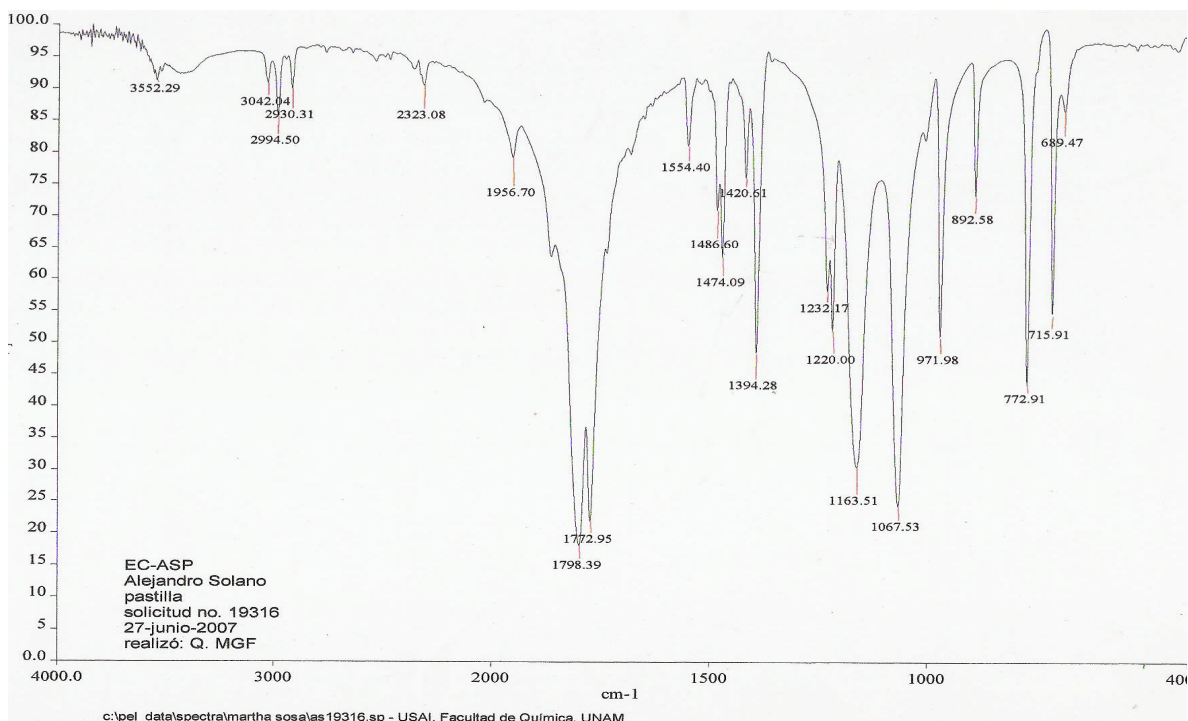


Figura 12. Espectro de IR del EC grado reactivo.

En este espectro puede verse claramente que el EC, debido a sus características funcionales, estructurales y a su bajo punto de fusión es altamente higroscópico, lo cual lo hace un compuesto inestable, razón por la cual no es evidente su existencia dentro de los productos de reacción obtenidos experimentalmente. La información que nos proporciona éste espectro es muy deficiente, sin embargo, la literatura⁽²⁴⁾ nos indica que el espectro mostrado en la figura anterior es el preciso para el carbonato cíclico en cuestión, ya que las bandas situadas en 1789.39 y 1772.95 cm^{-1} son específicas para el citado compuesto. A continuación se presenta el conjunto de espectros correspondientes a los productos obtenidos mediante la segunda purificación a través de cromatografía en placa preparativa:

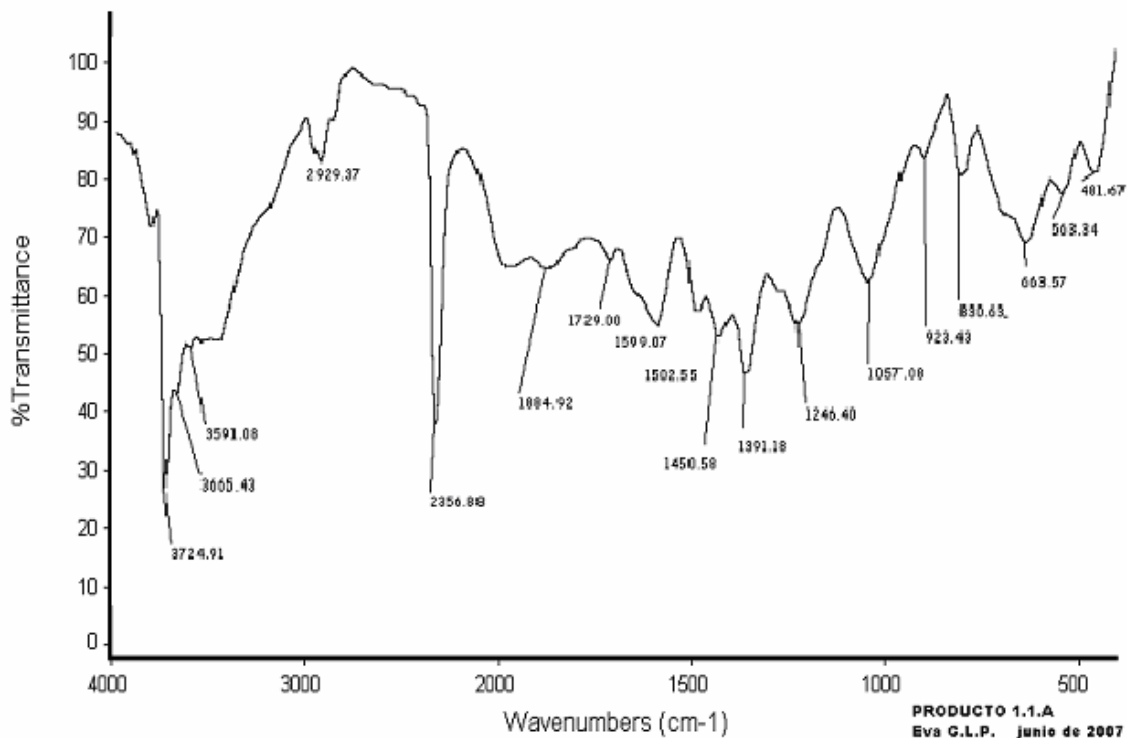


Figura 13 . Espectro de IR del producto de reacción “1.1.A” recristalizado en acetona.

El espectro presentado en la **Figura 13** corresponde al producto de reacción más significativo obtenido al someter a una temperatura de 175°C durante 10 minutos la mezcla de reacción sin exceso de EC. Como puede apreciarse, la banda perteneciente al hidroxilo presenta una deformación considerable, ya que se muestran dos inflexiones importantes a la izquierda. Estas corresponden a las llamadas “señales de perturbación”⁽²⁴⁾, las cuales son propiamente trazas de agua que generalmente se manifiestan en las proximidades de 3700 y 3600 cm^{-1} , así como incluso una pequeña deformidad cercana a los 1600 cm^{-1} . Por otra parte, éste espectro tiene otra particularidad: que la presencia de un Carbono con hibridación sp_2 no es evidente en la longitud de onda correspondiente, sino que se confirma la existencia del mismo hasta la banda ubicada en 1502.55 cm^{-1} , así como en las bandas K del benceno. Con estos datos se puede afirmar que el producto significativo obtenido a través de la primera etapa de la experimentación corresponde a un derivado del BPA, el cual tiene la particular característica de ser altamente higroscópico.

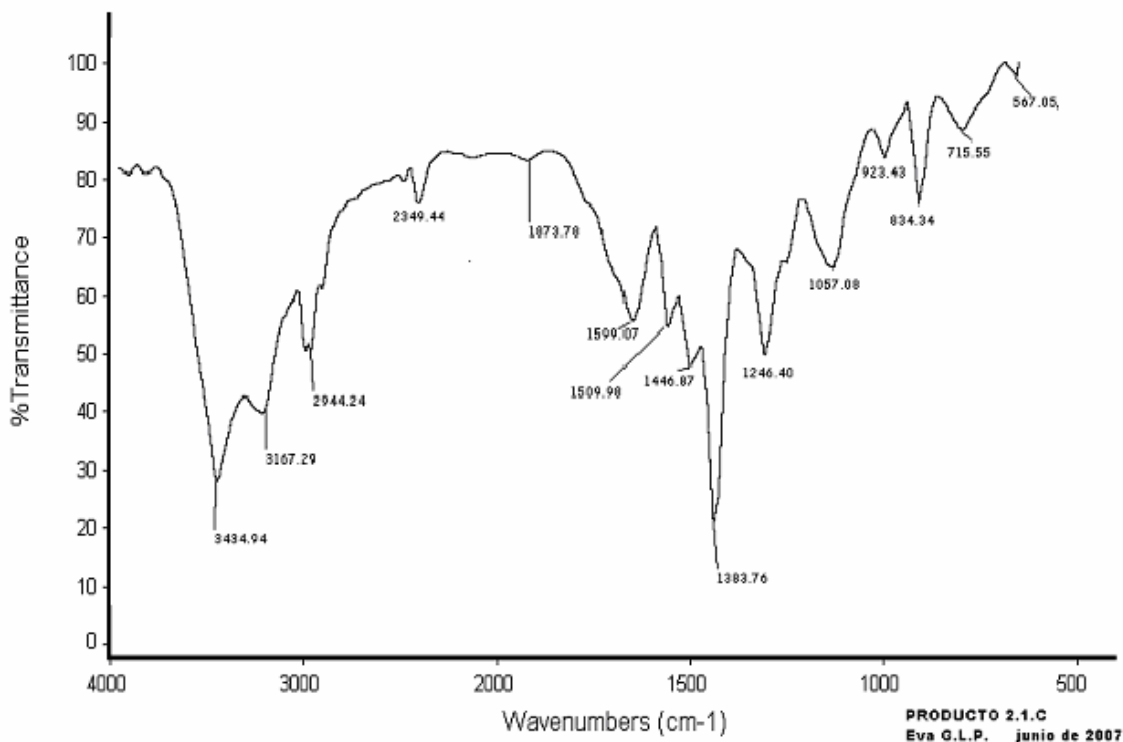


Figura 14 . Espectro de IR del producto de reacción “2.1.C” recristalizado en acetona.

ANÁLISIS FUNCIONAL DE IR PARA EL PRODUCTO “2.1.C”			
λ (cm^{-1})	Grupo Funcional	Intervalo Teórico (cm^{-1})	Observaciones
3434.94	OH	3600-3200	La banda del OH se ve deformada debido a la presencia de humedad.
3167.29	Csp ₂	~3100	Alqueno
2944.24	Csp ₃ -H	2990-2800	
1878.78	Benceno	2000-1600	Representativa de las Bandas K
1599.07	Benceno -p	1650-1590	
1509.98	C=C	1600-1500	
1446.87	Alqueno Conjugado	1450-1400	
1388.76	Alcohol aromático	1400-1300	

Tabla No. 10. Análisis Funcional de las bandas emitidas por la radiación Infrarroja del producto de reacción “2.1.C” recristalizado en acetona. (Figura 14)

Este espectro, a pesar de que no es idéntico al presentado para el BPA grado reactivo disuelto en acetona, nos indica que el producto de reacción se trata del BPA mismo, ya que como puede observarse, los grupos funcionales que presenta son los esperados, además de que las características tanto físicas como químicas del producto son exactamente las mismas del compuesto de interés. La tendencia

del espectro es la misma que para el presentado en la **Figura 11**, con la única variante de que en el producto 2.1.C existe humedad (evidente por la deformidad en la banda del OH que impide que se vea claramente la banda de Csp_2 y el ancho de la banda en 1599.07cm^{-1}). Por otra parte, la **Tabla No. 10** y su respectiva figura denotan la presencia de trazas de agua en los productos, provocando que las bandas se desplacen ligeramente, tal como ocurre en éste espectro en el cual, comparándolo con el de la **Figura 11**, presenta sus bandas recorridas ligeramente hacia la derecha. También es posible que se encuentren algunas impurezas; sin embargo estas no son evidentes a nivel macroscópico, ya que como se mencionó en renglones anteriores, la aparición de cristales en forma de aguja y su agrupación circular a manera de hongo es idéntica a la del BPA en acetona. La variación en el punto de fusión de éste producto con respecto al esperado es de aproximadamente 3°C , diferencia bastante lógica debida a la presencia de agua en la muestra. De este producto se obtuvo un rendimiento del 82.5%, un porcentaje considerablemente alto que nos permite afirmar que este proceso de degradación es efectivo y costeable.

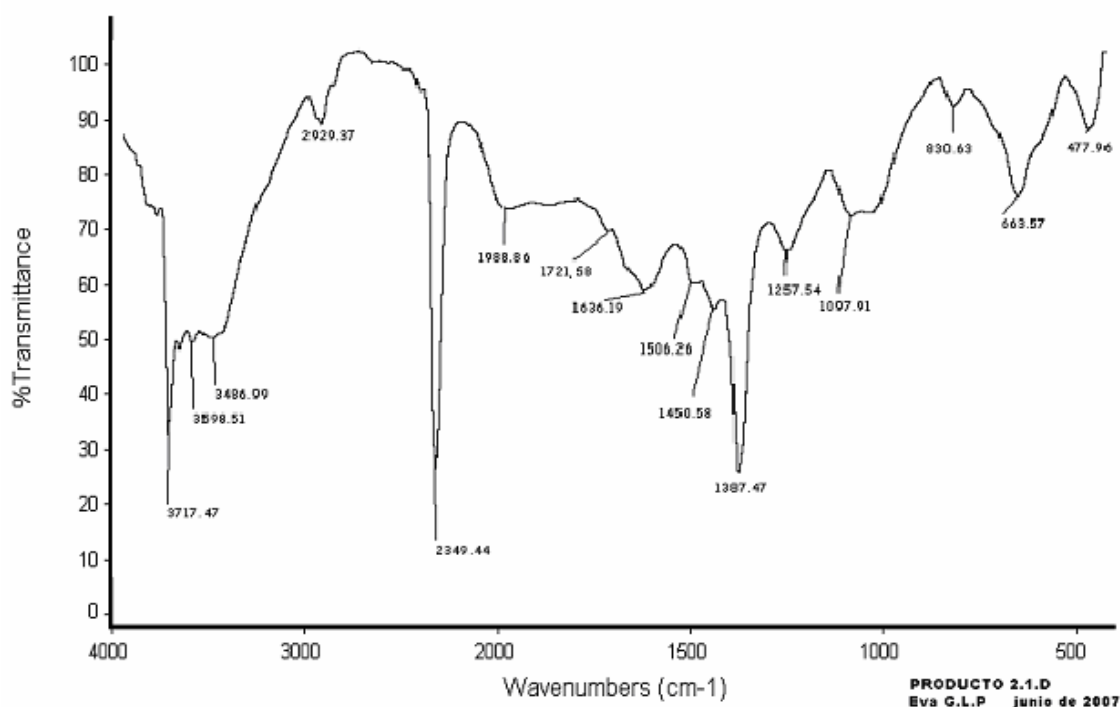


Figura 15. Espectro de IR del producto de reacción "2.1.D" recristalizado en acetona.

Analizando los datos del espectro anterior puede observarse que éste es casi idéntico al mostrado en la **Figura 13**, sin embargo las características físicas de los productos obtenidos no son las mismas. Las condiciones de reacción para lograr la obtención de ambos productos son iguales, ya que se sometieron a los mismos tiempos y temperaturas, con la única diferencia de que a éste último se le agregó un exceso de EC. Con esto puede comprobarse que efectivamente el carbonato cíclico en exceso tiene una gran influencia en la reacción, ya que modifica al producto, transformándolo en un nuevo derivado del BPA. De igual manera, llama la atención la forma de los cristales, ya que en la primera etapa éstos adquieren la forma de agujas aisladas, mientras que al agregar una mayor cantidad de EC, estas agujas se compactan formando agrupaciones circulares y generando puntos de fusión ligeramente más bajos.

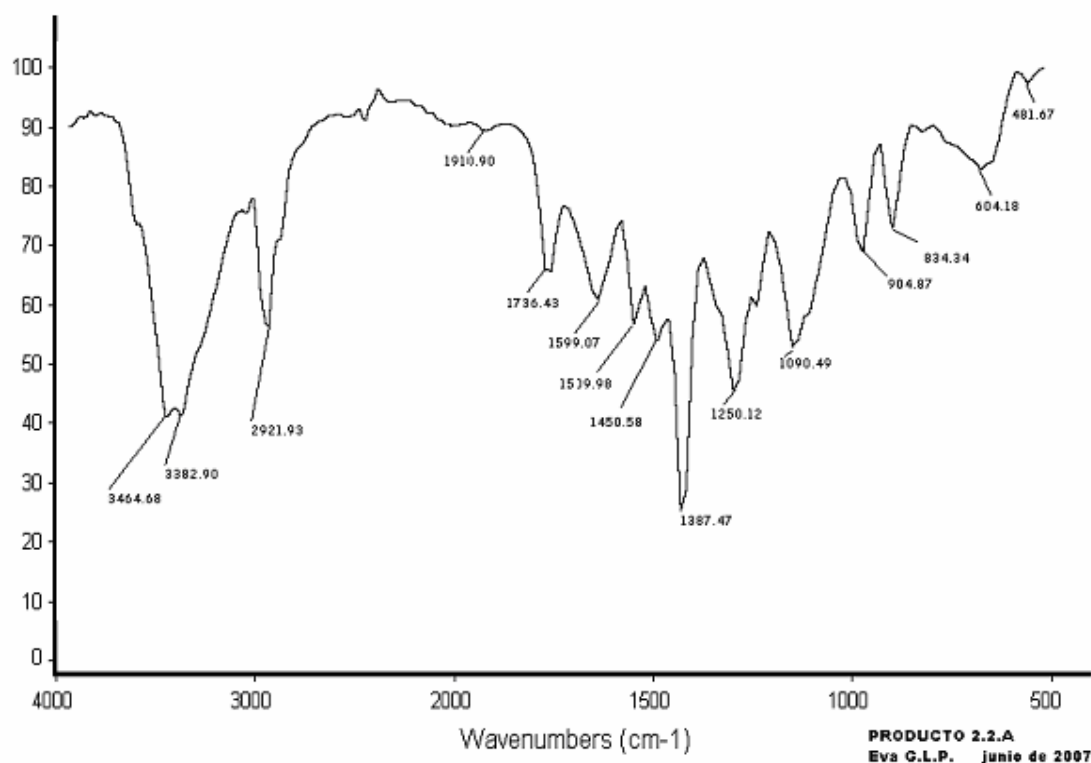


Figura 16. Espectro de IR del producto de reacción "2.2.A" recristalizado en acetona.

Las características funcionales, así como físicas y química de este nuevo producto, (**Figura 16**) son indicativas también de que se trata de un derivado del BPA.

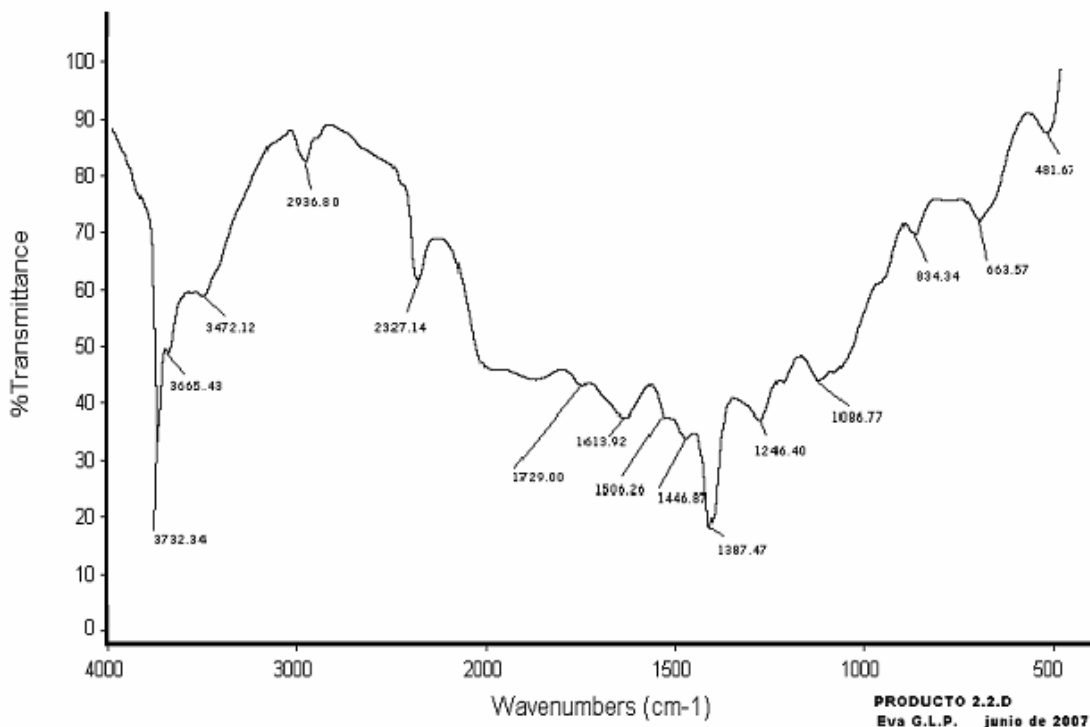


Figura 17. Espectro de IR del producto de reacción “2.2.D” recristalizado en acetona.

El espectro anterior tiene la particularidad de que no existe en él una banda característica de las bandas K del benceno; sin embargo la banda que aparece en 1631.92 cm⁻¹ nos confirma la existencia del mismo. No obstante, las posibles bandas K se encuentran ubicadas en un % de transmitancia relativamente pequeño comparado con el resto de los espectros en estudio. He ahí que posiblemente se trate de un compuesto muy particular, ya que se manifiesta en forma de hojuelas amarillentas que sólo fueron obtenidas a partir de esa fracción. Por otra parte, al igual que en la **Figura 13**, aquí se presentan “señales de perturbación” debidas a las trazas de agua y del disolvente, las cuales modifican la forma la banda correspondiente al hidroxilo; sin embargo, continúan presentes todos los grupos funcionales esperados (C_{sp2}, C_{sp3}, alqueno conjugado y alcohol).

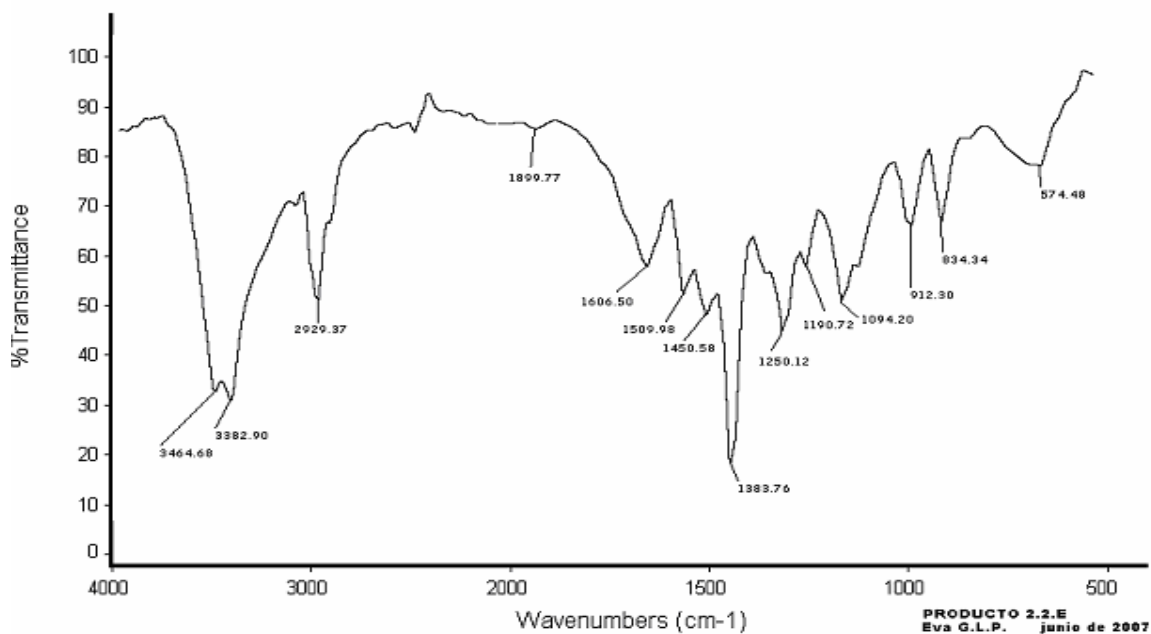


Figura 18. Espectro de IR del producto de reacción "2.2.E" recristalizado en acetona.

En la **Figura 18**, la banda correspondiente a C=C presenta una anchura poco usual, esto puede deberse a que se encuentre combinada con la banda del carbonilo de la acetona, ya que esta se presenta a una longitud de onda cercana a los 1700 cm^{-1} . Este espectro es muy semejante al presentado en la **Figura 16**, por lo que tal vez se trate del mismo producto, derivado del BPA.

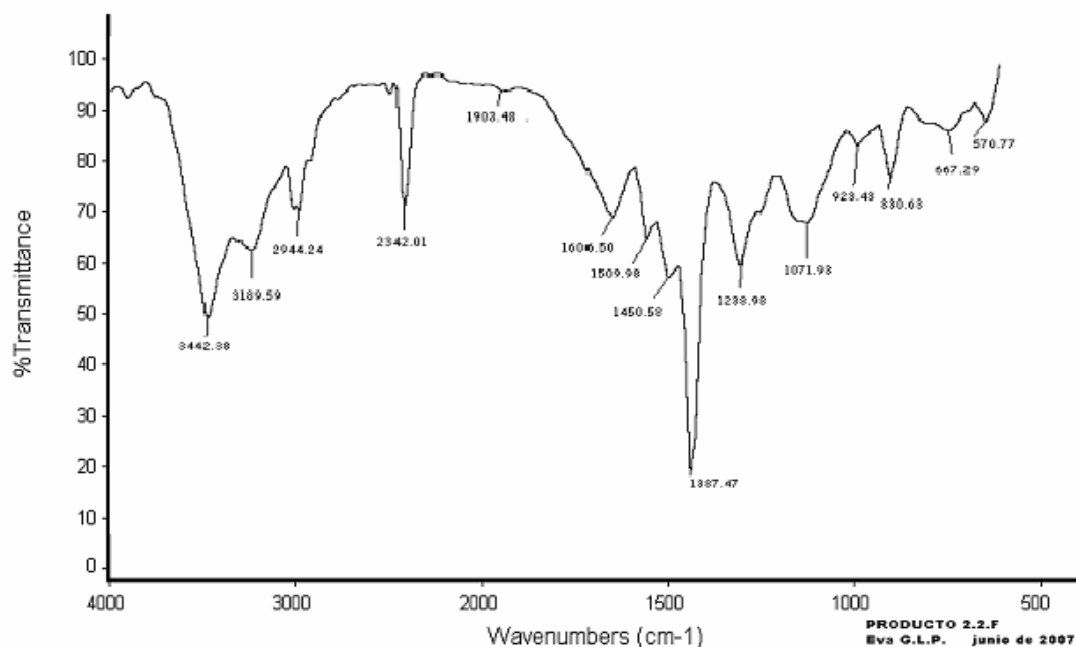


Figura 19. Espectro de IR del producto de reacción "2.2.F" recristalizado en acetona.

En este espectro (**Figura 19**) puede verse que nuevamente se encuentra deformada la banda correspondiente al $-OH$ por efecto de las impurezas remanentes causadas por el agua o incluso por el disolvente. Sin embargo, la banda indicativa de este último, en este caso no está presente. La banda correspondiente al Csp_2 es demasiado ancha, por lo tanto no puede determinarse con exactitud cuál es la longitud de onda a en la que se encuentra.

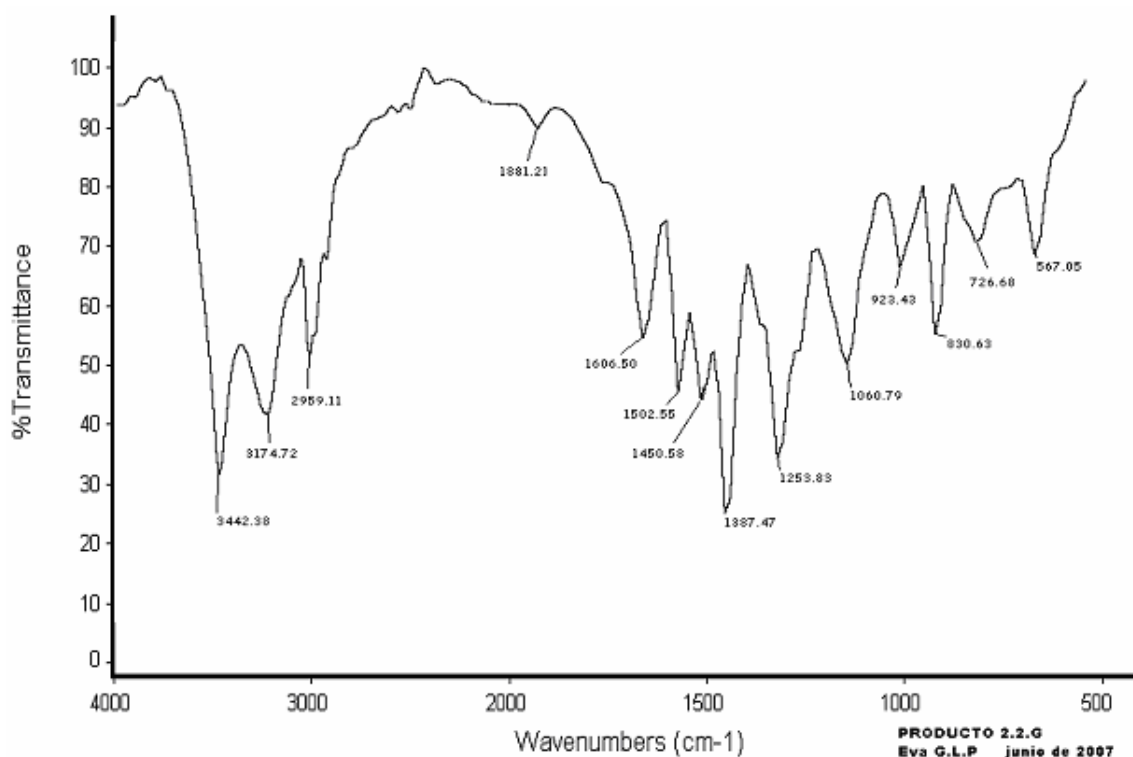


Figura 20. Espectro de IR del producto de reacción "2.2.G" recristalizado en acetona.

En este espectro tampoco es evidente la presencia del carbonilo de la acetona, sin embargo la banda puede estar presente junto con la correspondiente al Benceno $-p$ sustituido, ya que esta se observa muy ancha comparada con los estándares, tratándose de nueva cuenta de algún derivado del BPA.

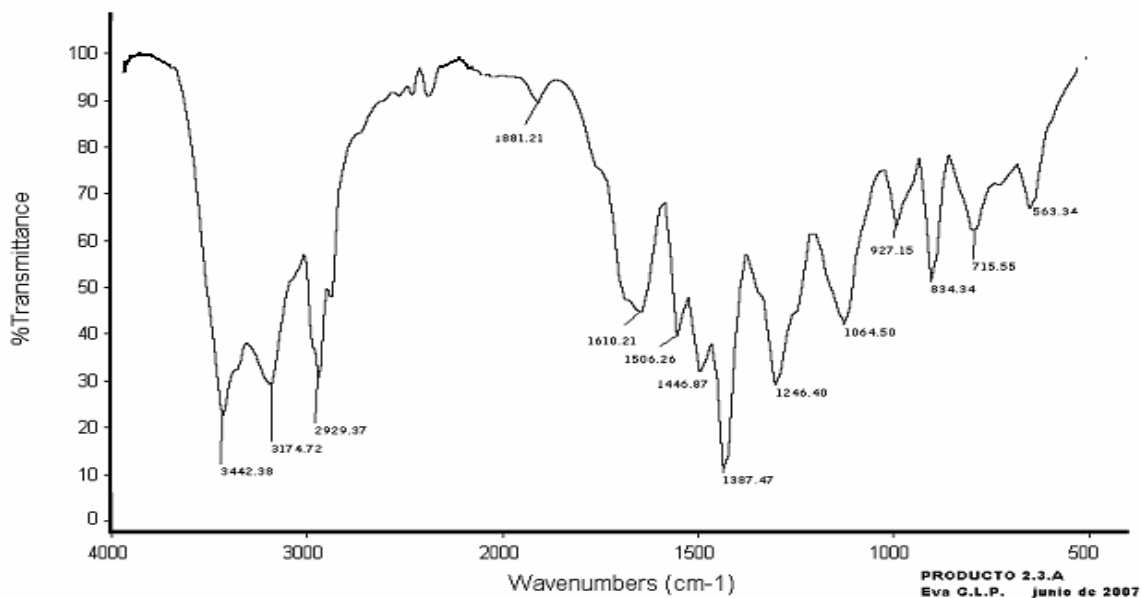


Figura 21. Espectro de IR del producto de reacción "2.3.A" recristalizado en acetona.

El espectro de la **Figura 21** tiene la misma tendencia que el correspondiente a la **Figura 20**. Igualmente, tampoco es evidente la presencia de acetona; sin embargo la banda indicativa del benceno ν sustituido es demasiado ancha, por lo que puede inferirse que la banda del carbonilo se halla vecina a la longitud de onda de 1610.21cm^{-1} .

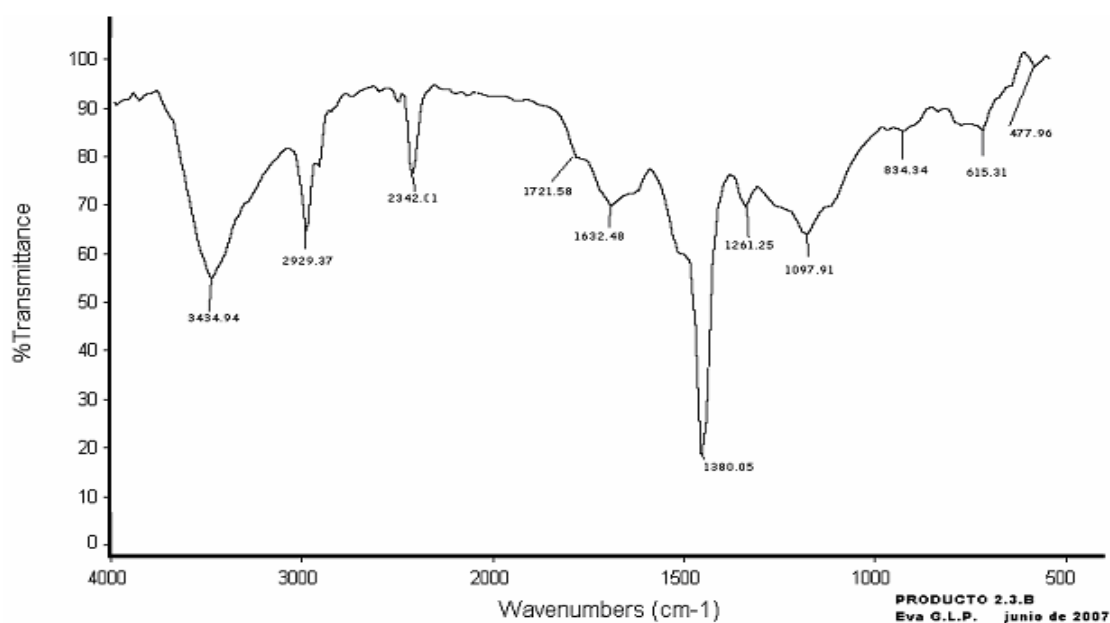


Figura 22. Espectro de IR del producto de reacción "2.3.B" recristalizado en acetona.

La **Figura 22** no nos muestra suficiente información a pesar de que contiene algunos de los grupos funcionales esperados. Llama la atención en este espectro la ausencia de bandas K, así como también la ausencia de las principales bandas que denoten la presencia de alqueno. Parece contradictoria la presencia de una banda en 1632.48 cm^{-1} , ya que ésta bien podría corresponder a algún doble enlace, sin embargo, éste no es evidente y esa banda puede corresponder a efectos de la humedad del disolvente, ya que es una banda ancha y amorfa. Por tal motivo es que queda descartado que este producto sea un derivado del BPA. Este hecho queda confirmado al observar el punto de fusión reportado en la **Tabla No. 7** para éste compuesto ($>290^{\circ}\text{C}$) ya que es una temperatura muy elevada, por lo tanto se puede inferir que este producto contiene sales derivadas del catalizador empleado, o en su defecto se trata de algún plastificante, ya que algunos de ellos (como los ftalatos⁽²⁴⁾, que son los ésteres dialquílicos o arílicos del ácido 1,2-benzenodicarboxílico) suelen alcanzar altos puntos de fusión cuando se encuentran combinados con otras sustancias.

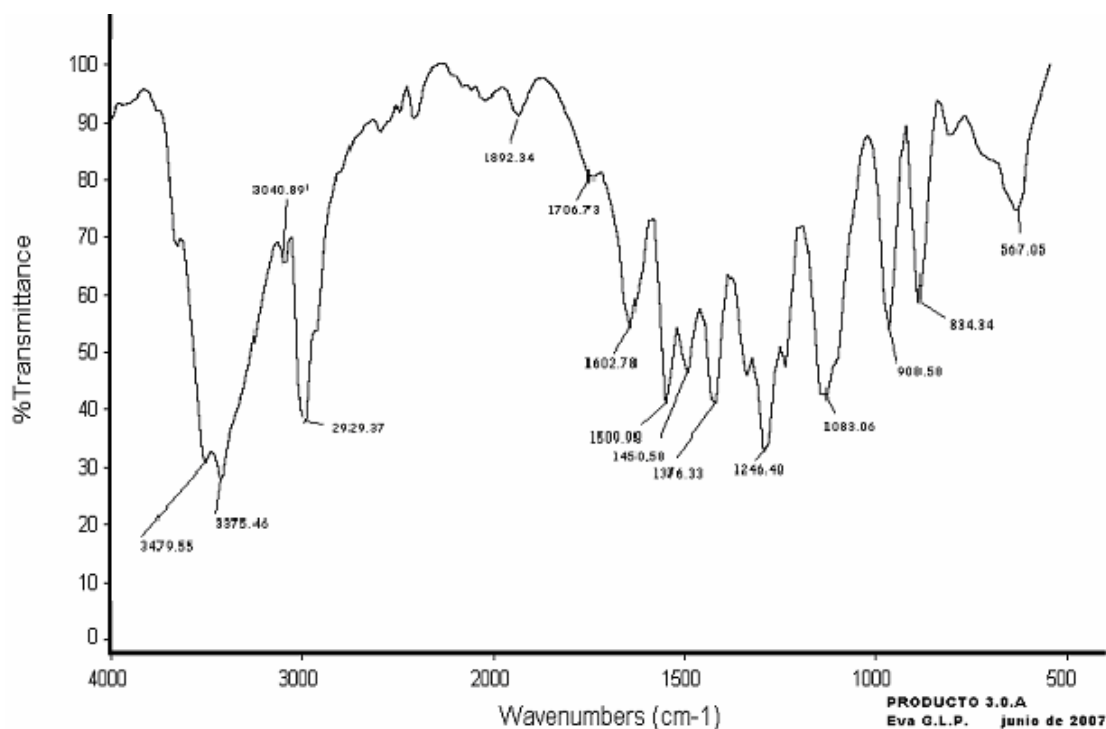


Figura 23. Espectro de IR del producto de reacción "3.0.A" recristalizado en acetona.

Este producto (correspondiente a la **Figura 23**), sí puede considerarse como un derivado del BPA, incluso su espectro es semejante a algunos obtenidos anteriormente, con la diferencia de que los cristales físicamente son muy distintos a los obtenidos mediante las anteriores condiciones de reacción, lo mismo ocurre con el producto 3.0.B cuyo respectivo espectro se muestra a continuación (**Figura 24**):

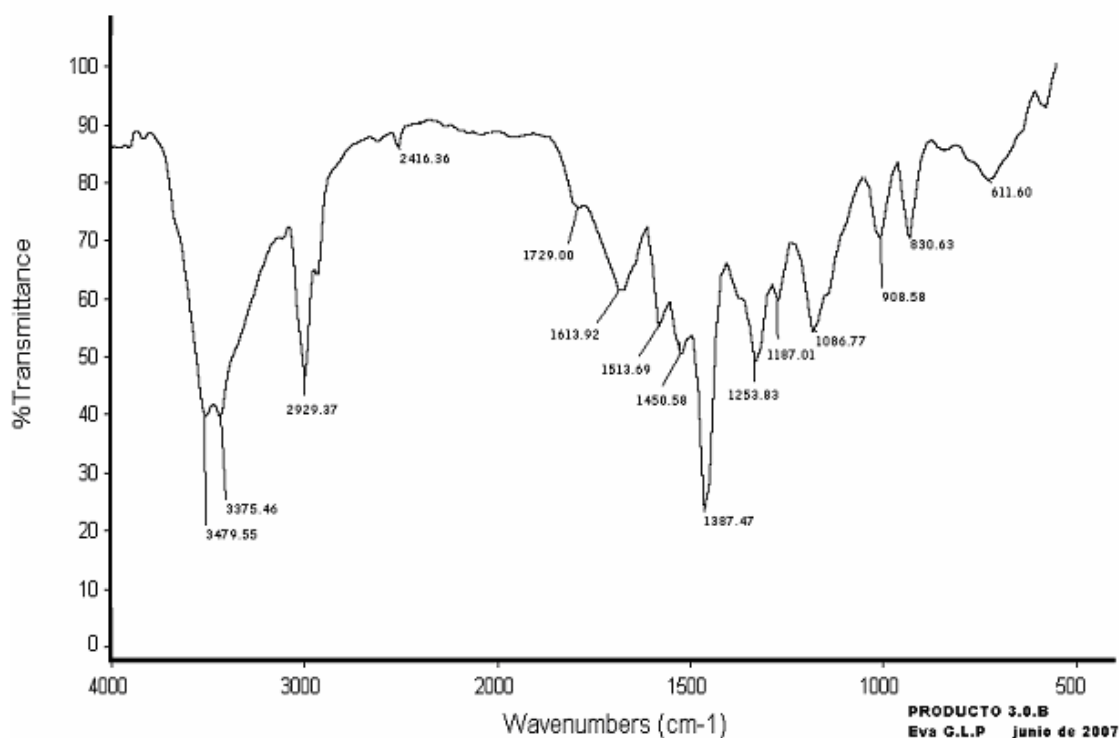


Figura 24. Espectro de IR del producto de reacción "3.0.B" recristalizado en acetona.

Después del minucioso análisis presentado anteriormente, puede afirmarse que la degradación del Policarbonato empleando una catálisis básica da como producto el BPA y algunos derivados del mismo. El BPA se obtiene llevando a cabo la reacción de depolimerización a una temperatura de 175°C durante un periodo de tiempo de aproximadamente 10 minutos, añadiendo un pequeño exceso de Etilencarbonato, el cual nos permitirá obtener el producto de interés. De igual manera puede afirmarse que la mayoría de los derivados de BPA se

logran obtener sometiendo la reacción a la misma temperatura (175°C) durante un intervalo de 10 hasta 20 minutos. En el momento en el que se excede este tiempo, se logran obtener otra serie de productos que no corresponden a la familia del BPA, sino que tienen características totalmente diferentes.

En lo que se refiere al Etilencarbonato, puede observarse que éste no se obtiene como producto de degradación, ya que ninguno de los espectros es semejante al mostrado en la **Figura 12**, lo cual confirma de nueva cuenta la baja estabilidad de éste compuesto, así como su capacidad para seguir reaccionando con los productos que se van generando.

8.2 APLICACIÓN MICROBIOLÓGICA

Ya determinada la naturaleza de los productos de degradación obtenidos mediante la reacción de catálisis básica, se procedió a evaluar su capacidad de inhibición sobre hongos comunes, tal y como se muestra en la secuencia de imágenes que a continuación se presenta (**Figura 25**). Después de haber llevado a cabo ensayos sobre la cantidad ideal de solución de BPA, se determinó que la dosis para lograr los mejores resultados fue de una gota, ya que ésta es suficiente para observar la evolución de la desaparición del hongo, o bien, su muerte.

Previendo que la acetona por sí sola pudiese inhibir el crecimiento del hongo, se aplicó una gota de la misma a una porción de la muestra fúngica, la cual no se vio afectada en absoluto por el disolvente. Cabe mencionar que este procedimiento se llevó a cabo a temperaturas ligeramente elevadas para lograr su rápida evaporación y mantener un ambiente estéril. Los resultados obtenidos fueron los que se muestran en la **Tabla No. 11**

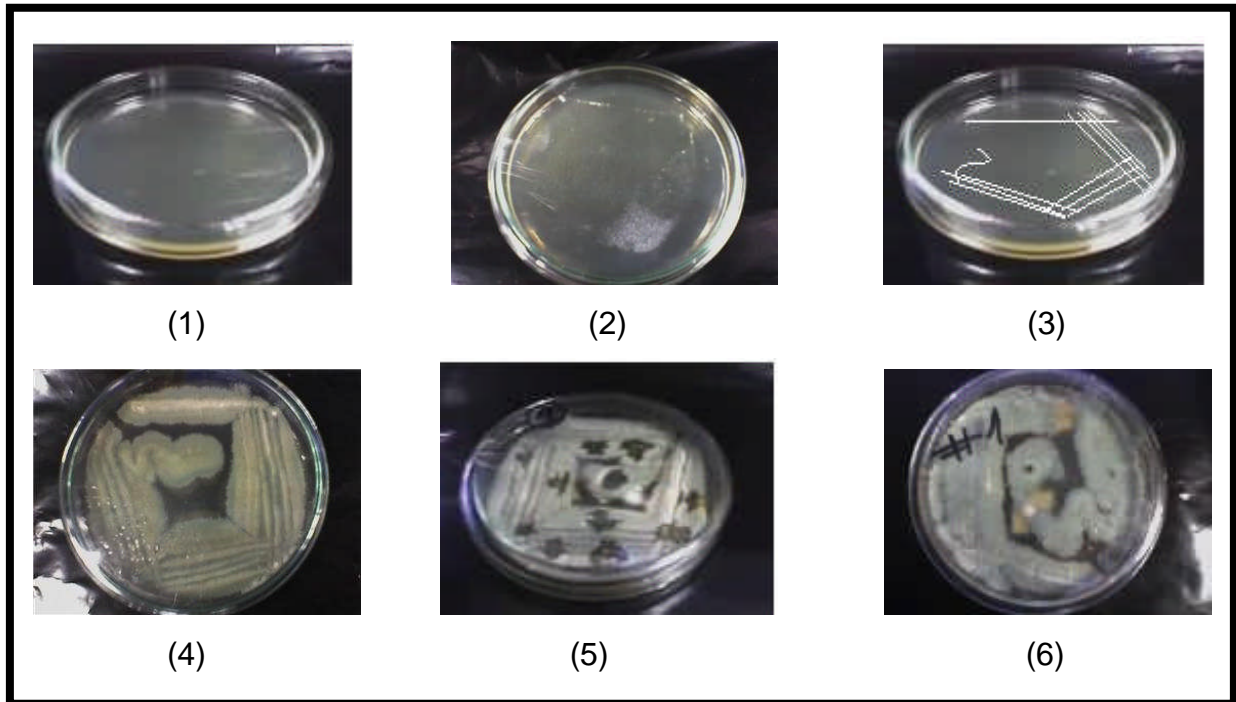


Figura 25. Secuencia de imágenes de estabilización y uso de los Productos de degradación. (1) Medio de cultivo PDA recién preparado. (2) Crecimiento del hongo *Penicillium* después de 24 horas de haber sido sembrado. (3) Crecimiento del hongo después de 48 horas, puede verse que es blanquecino y conserva la morfología de su aplicación mediante dilución, momento en el cual se aplicaron los fungicidas. (4) Evolución normal (sin adición de químicos) de un cultivo fúngico después de 48 horas más de reposo. (5) Después de 12 horas de haber agregado BPA y sus derivados al cultivo de la figura 3. (6) El mismo cultivo 36 horas después, en donde logran apreciarse a simple vista las áreas blanquecinas en donde los químicos evitaron la expansión del hongo, así como los sitios que presentan microorganismos aislados, en donde se inhibió totalmente el crecimiento de los mismos.

De acuerdo a las imágenes presentadas anteriormente, puede verse claramente que el crecimiento del hongo en estudio es sumamente acelerado, por lo tanto, la fase ideal para poder llevar a cabo la adición del químico inhibidor es su fase exponencial de crecimiento, de modo que sea evidente la acción del antifúngico sobre los microorganismos en estudio.

CAPACIDAD DE INHIBICIÓN DE LOS PRODUCTOS DE DEGRADACIÓN SOBRE EL HONGO <i>Penicillium</i>		
Producto	Inhibición	Forma de inhibición
BPA	+	Inhibe totalmente el crecimiento del hongo
Z	+/-	Evita la expansión del hongo
Y	+/-	Evita la expansión del hongo
W, X	+/-	Evita la expansión del hongo
U, V	+/-	Evita la expansión del hongo
S, T	+/-	Evita la expansión del hongo
1.1.A	+/-	Evita la expansión del hongo
2.1.A	+/-	Evita la expansión del hongo
2.1.B	+/-	Evita la expansión del hongo
2.1.C	+	Inhibe totalmente el crecimiento del hongo
2.1.D	+/-	Evita la expansión del hongo
2.1.E	+/-	Evita la expansión del hongo
2.1.F	+/-	Evita la expansión del hongo
2.1.G	+/-	Evita la expansión del hongo
2.2.A	+/-	Evita la expansión del hongo
2.2.B	+/-	Evita la expansión del hongo
2.2.C	+/-	Evita la expansión del hongo
2.2.D	++	Elimina totalmente al hongo
2.2.E	+/-	Evita la expansión del hongo
2.2.F	+/-	Evita la expansión del hongo
2.2.G	+/-	Evita la expansión del hongo
2.2.H	+/-	Evita la expansión del hongo
2.2.I	+/-	Evita la expansión del hongo
2.3.A	+/-	Evita la expansión del hongo
2.3.B	-	No se presenta modificación alguna
3.0.A	+/-	Evita la expansión del hongo
3.0.B	+/-	Evita la expansión del hongo

Tabla No. 11. Capacidad de inhibición de los productos de degradación sobre el hongo *Penicillium*

Como puede verse a partir de la **Tabla No. 11**, el producto 2.1.C es efectivamente el BPA, ya que es el único producto de degradación que logra inhibir totalmente el crecimiento del hongo, tal y como lo hace el Bisfenol A grado reactivo. Se dice que inhibe totalmente su crecimiento porque al momento en el que se aplicó el BPA en solución, los hongos aún eran jóvenes y su aspecto era plano, circular y blanquecino, encontrándose aislados unos de otros. Al cabo de las 48 horas de reposo posterior, los hongos alcanzaron el máximo de su crecimiento tornándose verdes y esporulados; sin embargo, el sitio en donde se aplicó en BPA y el producto 2.1.C se mantuvo intacto, es decir, los hongos no alteraron su aspecto circular, blanquecino, plano y aislado. Aquellos productos que evitaron la expansión del hongo, provocaron que las esporas retardaran su aparición, esto es, al cabo de 48 horas la tonalidad verde fue apenas perceptible y las esporas se apreciaban poco densas comparadas con el resto que había quedado libre de químicos.

De acuerdo a las pruebas de caracterización realizadas para el producto 2.3.B, éste no comparte características con el resto y quedó descartado como un derivado del BPA. De nueva cuenta esto fue confirmado mediante las pruebas de estabilización y uso, ya que fue el único producto que no presentó inhibición alguna, sino que al contrario, mantuvo al hongo en su etapa adecuada de crecimiento.

De acuerdo a algunos datos de investigación en industrias, se hace referencia a que los derivados del BPA se emplean como recubrimientos (barnices protectores)⁽¹⁵⁾ de algunas latas para conservas. Conforme a la investigación realizada en el presente trabajo, podría pensarse que el objetivo de la adición de este tipo de sustancias como recubrimiento en recipientes envasadores de comestibles es el de actuar como conservadores, sin embargo no se puede afirmar cuáles serían los posibles daños a la salud causados por este químico.

8.3 ASPECTO TEÓRICO (SIMULACIÓN MOLECULAR)

La estructura de partida para el estudio de Simulación Molecular fue la unidad repetitiva de Polibisfenildimetilcarbonato (**Figura 26**). Cabe mencionar que para agilizar y facilitar el cálculo, se empleó la unidad repetitiva inicial de la cadena polimérica, la cual se muestra a continuación:

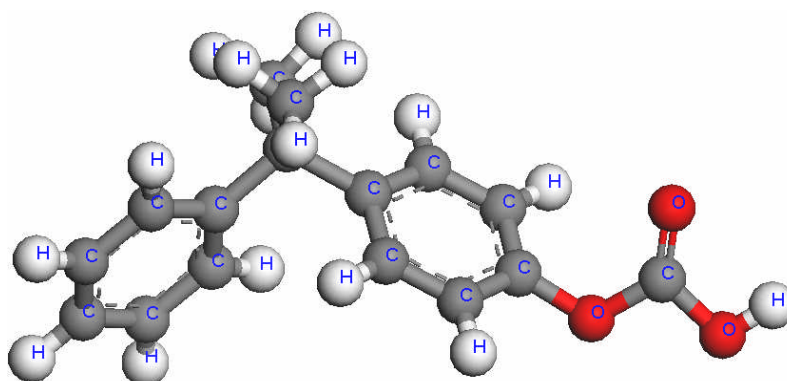


Figura 26. Unidad Repetitiva de Policarbonato
(inicio de la cadena)

Para la optimización de geometría de todas las estructuras, se empleó el potencial de correlación de intercambio de DFT (Teoría del Funcional de Densidad), el GGA (Funcional de Correlación de Gradiente) y la base BLYP. Para el tratamiento de los electrones de core, se utilizaron pseudo potenciales Semi-core (DSPP) de DFT, que sustituye electrones de la base por un solo potencial eficaz, lo cual reduce el costo de cómputo. Con ello se calcularon los orbitales de más alta energía (HOMO) y de más baja energía (LUMO) para la molécula en estudio (**Figura 27**).

# Orbital		Unidades Atómicas (Au)	Energía (ev)	Ocupación del Orbital
68	(HOMO)	-0.206073	-5.608	2.000
69	(LUMO)	-0.042200	-1.148	0.000

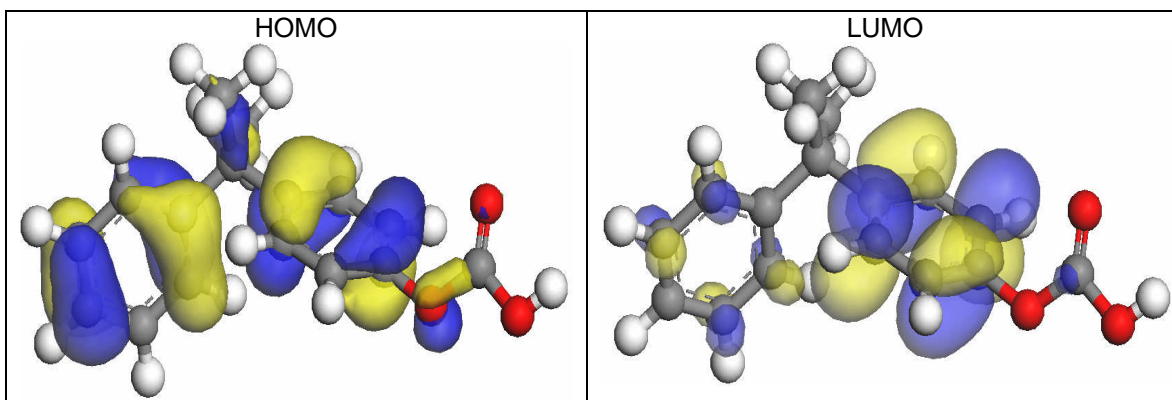


Figura 27. Orbitales HOMO y LUMO para la unidad repetitiva inicial del Policarbonato.

Posteriormente se calcularon las funciones de Fukui, (explicadas en el apartado No. 6) las cuales indican las regiones en donde pueden atacar las especies para lograr la ruptura del enlace en función de la naturaleza de la especie:

- Electrofílico $f(-)$: la reactividad con respecto a ataque electrofílico
- Nucleofílico $f(+)$: la reactividad con respecto a ataque nucleofílico
- Radical $f(0)$: la reactividad con respecto a ataque radical

En cada caso, los valores más grandes indican una mayor susceptibilidad al ataque.

Con base en lo anterior, en la **Figura 28**, se muestran los sitios en donde puede atacar el Na^{+1} o el OH^{-1} .

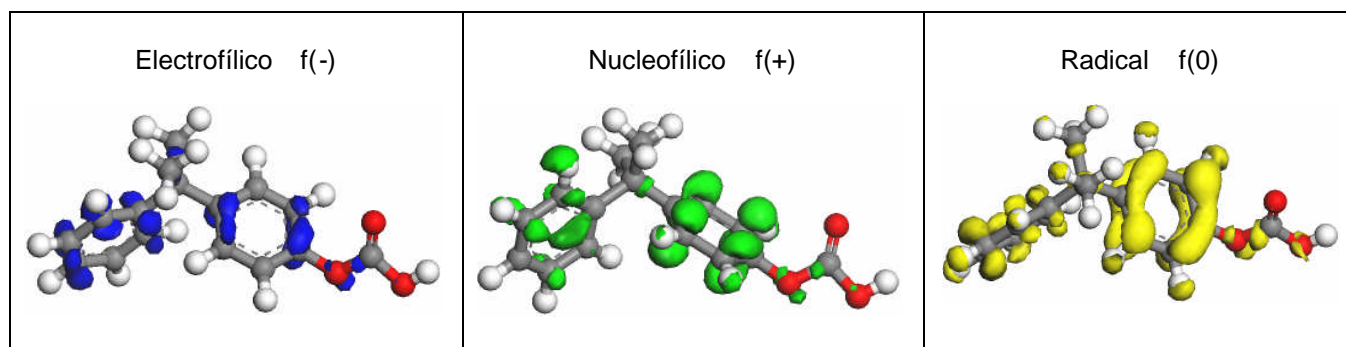


Figura 28. Posibles sitios de ataque para la molécula de Policarbonato.

Para poder analizar el tipo de interacción que tiene el NaOH con la molécula de Policarbonato, fue necesario llevar a cabo la construcción y optimización de las estructuras de los átomos independientes de la de la sal en cuestión; primeramente se estudió el ion Sodio (**Figura 29**), para posteriormente calcular sus orbitales de más alta y más baja energía. (**Figura 30**).

Después se llevó a cabo el mismo procedimiento para el ion Hidróxido (**Figuras 31 y 32**). Cabe aclarar que los orbitales Homo y Lumo también pueden calcularse para átomos independientes, ya que se dan en función de la energía del propio átomo. De igual manera, es importante recordar que estas simulaciones son solamente aproximaciones, por lo cual, en la mayoría de las ocasiones, el software no diferencia físicamente el tamaño de los átomos en una molécula determinada.

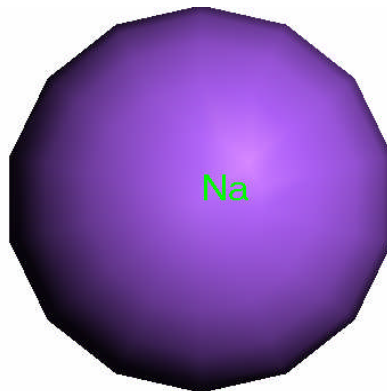


Figura 29. El ion Sodio

# Orbital		Unidades Atómicas (Au)	Energía (ev)	Ocupación del Orbital
10	(HOMO)	-1.308413	-35.604	1.000
11	(LUMO)	-0.268512	-7.307	0.050

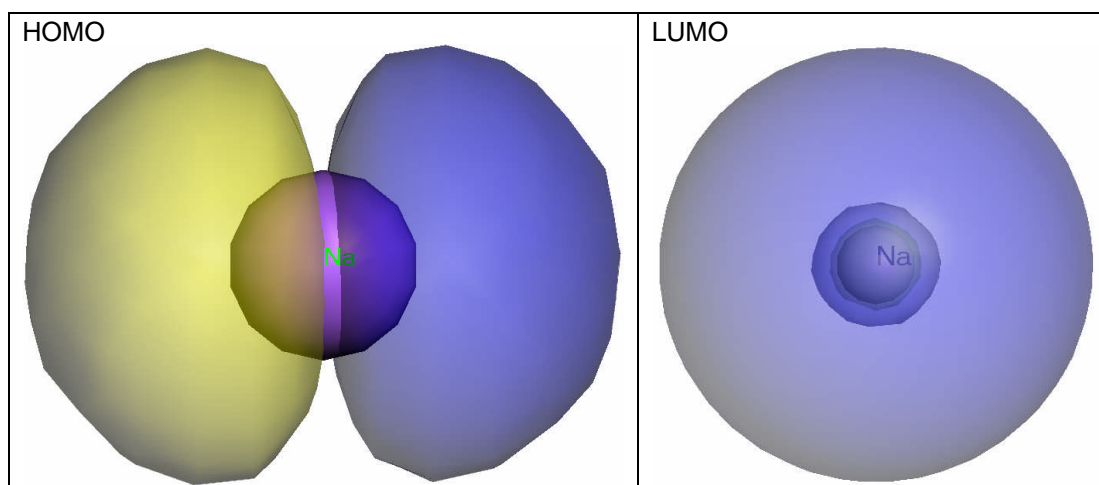


Figura 30. Orbitales HOMO y LUMO para el ion Sodio.

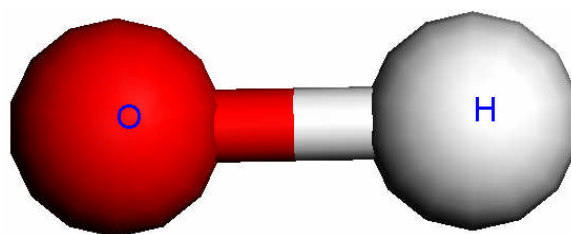


Figura 31. El ion Hidróxido

# Orbital		Unidades Atómicas (Au)	Energía (ev)	Ocupación del Orbital
10	(HOMO)	0.179001	4.871	1.000
11	(LUMO)	0.354469	9.646	0.000

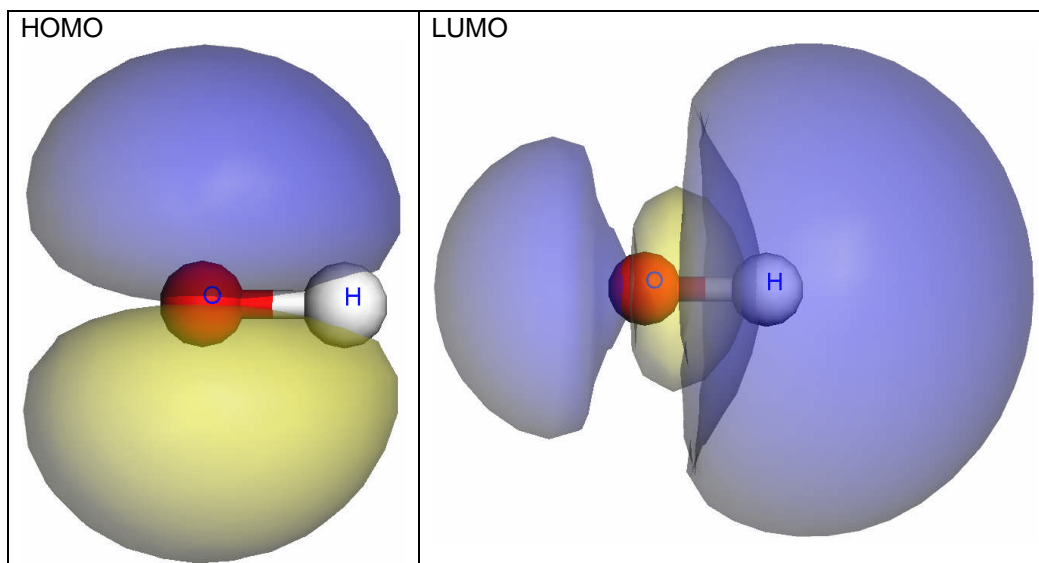


Figura 32. Orbitales HOMO y LUMO para el ion Hidroxilo.

Y al igual que para la molécula de Policarbonato, se calcularon los orbitales de Fukui para estimar cuáles son los sitios probables de interacción para favorecer la reacción en sus tres modalidades, tal y como se indica en la **Figura 33**.

A partir de la información obtenida mediante los análisis descritos, puede entonces predecirse el tipo de interacción entre las moléculas en cuestión. La reacción más viable será aquella en la que exista una mayor diferencia de energías, viéndose mayormente favorecida aquella que ocurre entre el PC y el OH^{-1} , de acuerdo a lo que se indica en el **Esquema No. 1**:

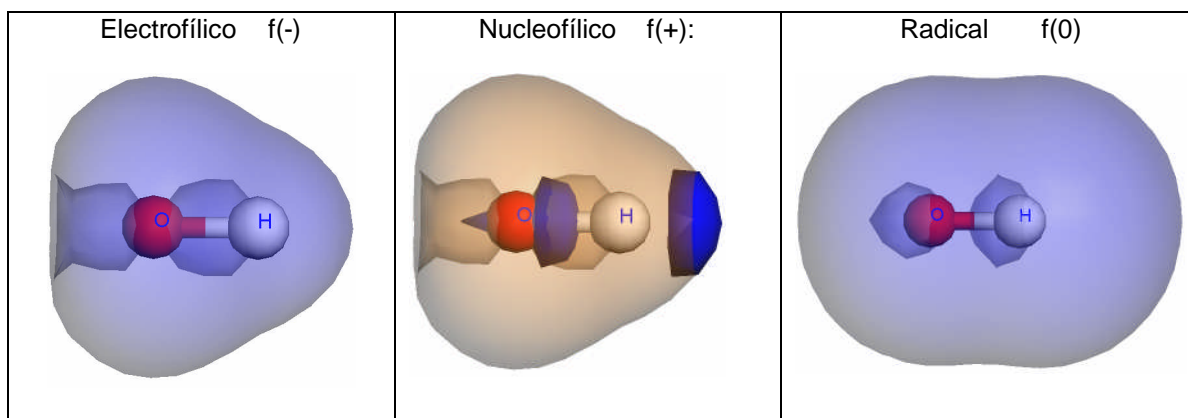
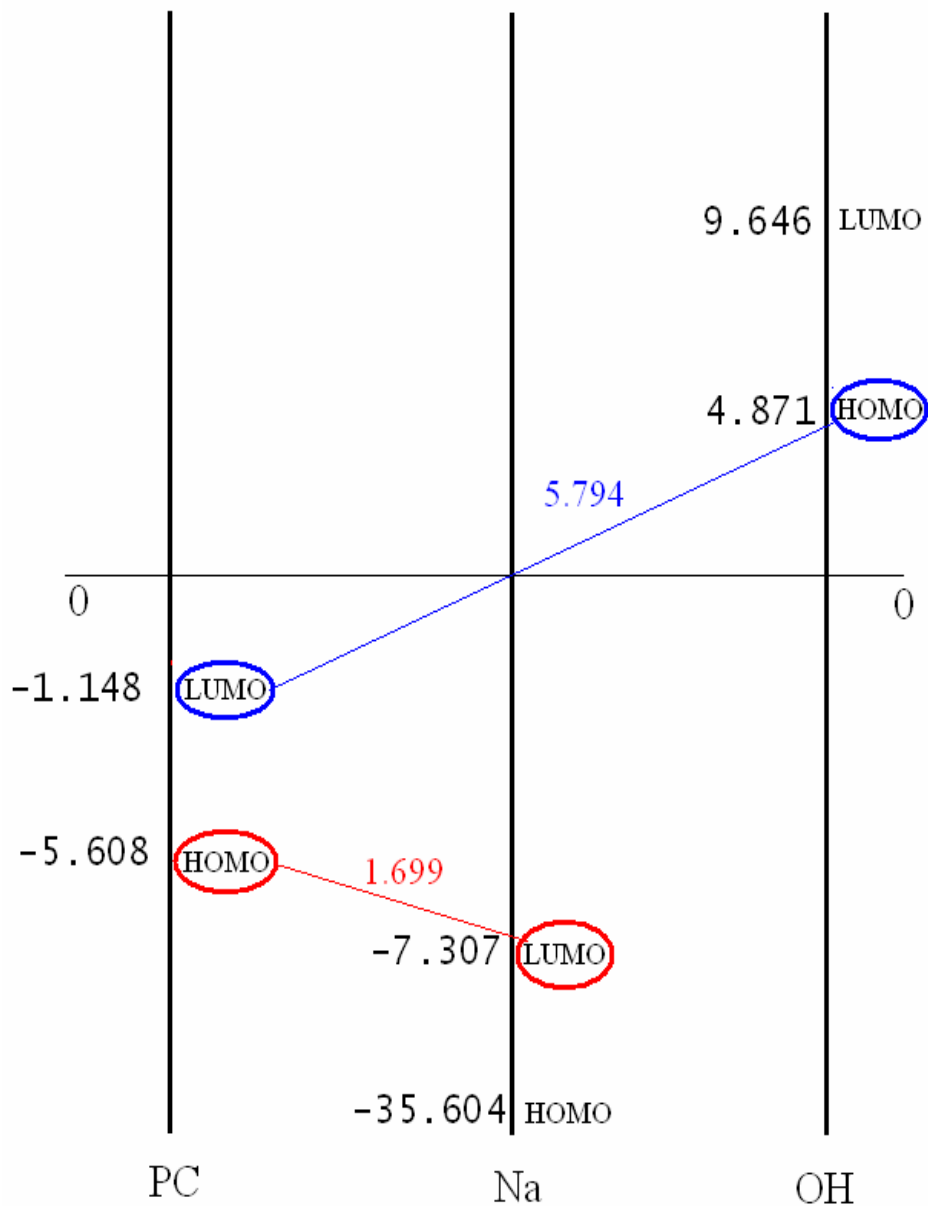


Figura 33. Posibles sitios de ataque para el ion hidróxido.



Esquema No. 1. Posibles interacciones moleculares basadas en la diferencia de energías.

Como puede apreciarse en el esquema anterior, de acuerdo a las energías existentes puede propiciarse la interacción entre PC y el ion Na^{+1} (**Figura 34**), entre PC y el ion OH^{-1} , (**Figura 35**) o entre ambos (**Figura 36**), lo cual puede comprobarse mediante simulación, después de la cual se obtiene lo siguiente:

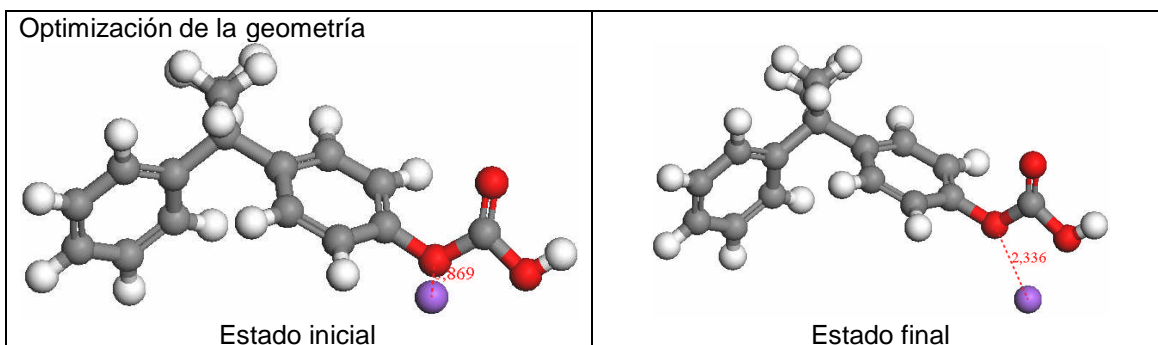


Figura 34. Interacción de la unidad repetitiva de PC con el ion Na^{+1}

En esta imagen se puede observar que no hay ninguna interacción, debido a que cuando se intenta acercar el ion sodio hacia el oxígeno que se encuentra unido al carbono aromático, en vez de atraerlo lo repele, de modo que la reacción no se puede generar por ese medio.

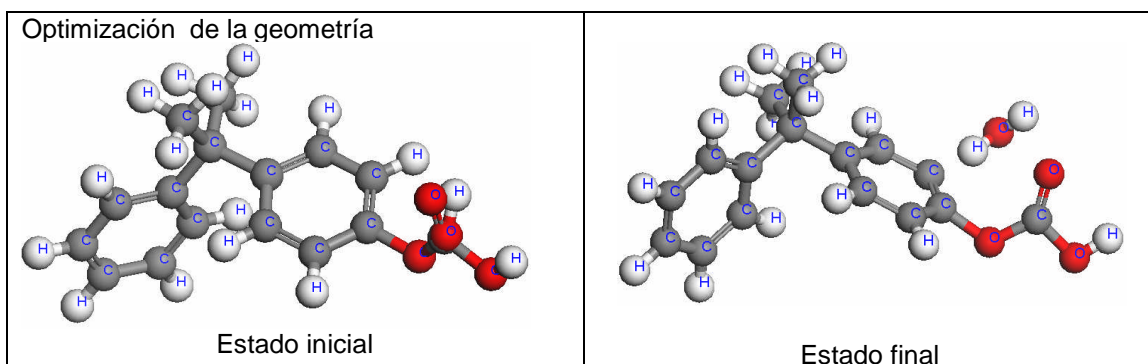


Figura 35. Interacción de la unidad repetitiva de PC con el ion OH^{-1}

En la imagen anterior se puede observar que sí hay interacción del ion hidróxido con los hidrógenos cercanos, ya que al inducirse su aproximación hacia el oxígeno del carbonilo, el OH^{-1} se aproxima hacia el hidrógeno del carbono más cercano, tomando entonces un H^{+} del anillo aromático (lo cual denota inestabilidad) para llegar a su estado final formando agua.

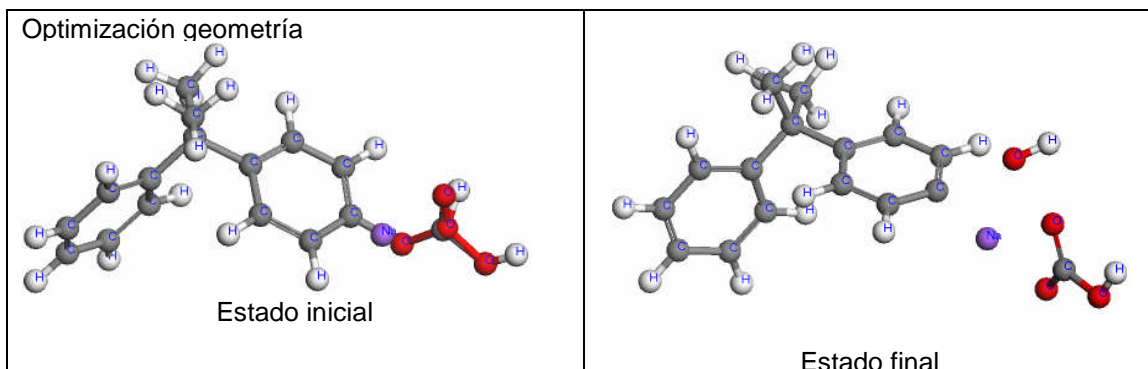


Figura 36. Interacción de la unidad repetitiva de PC con los iones Na^{+1} y OH^{-1}

En esta imagen se puede observar que hay una doble interacción, donde en el estado final se forma un posible precursor del Bisfenol A y Etilenglicol; por ello es conveniente incrementar a 2 las cadenas de PC (**Figura 37**), de modo que pueda ser más evidente la formación de una nueva molécula.

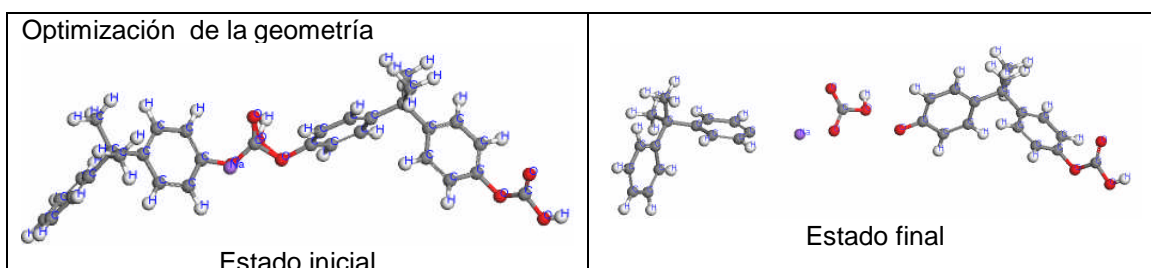


Figura 37. Interacción de 2 unidades repetitivas de PC con los iones Na^{+1} y OH^{-1}

En este sentido se puede observar el mismo efecto que en el caso anterior, es decir, se separa una molécula de CO_3H^{-} que puede ser la precursora del producto de interés y el Na^{+} queda libre para poder formar alguna sal; por lo cual, es conveniente probar únicamente con el ion hidróxido. Como se puede observar en la **Figura 38**, al llevar a cabo la interacción de las dos unidades de PC con el ion hidróxido, se obtiene un fragmento del Bisfenol A en la figura izquierda del estado final, lo cual es indicativo de la viabilidad de la reacción.

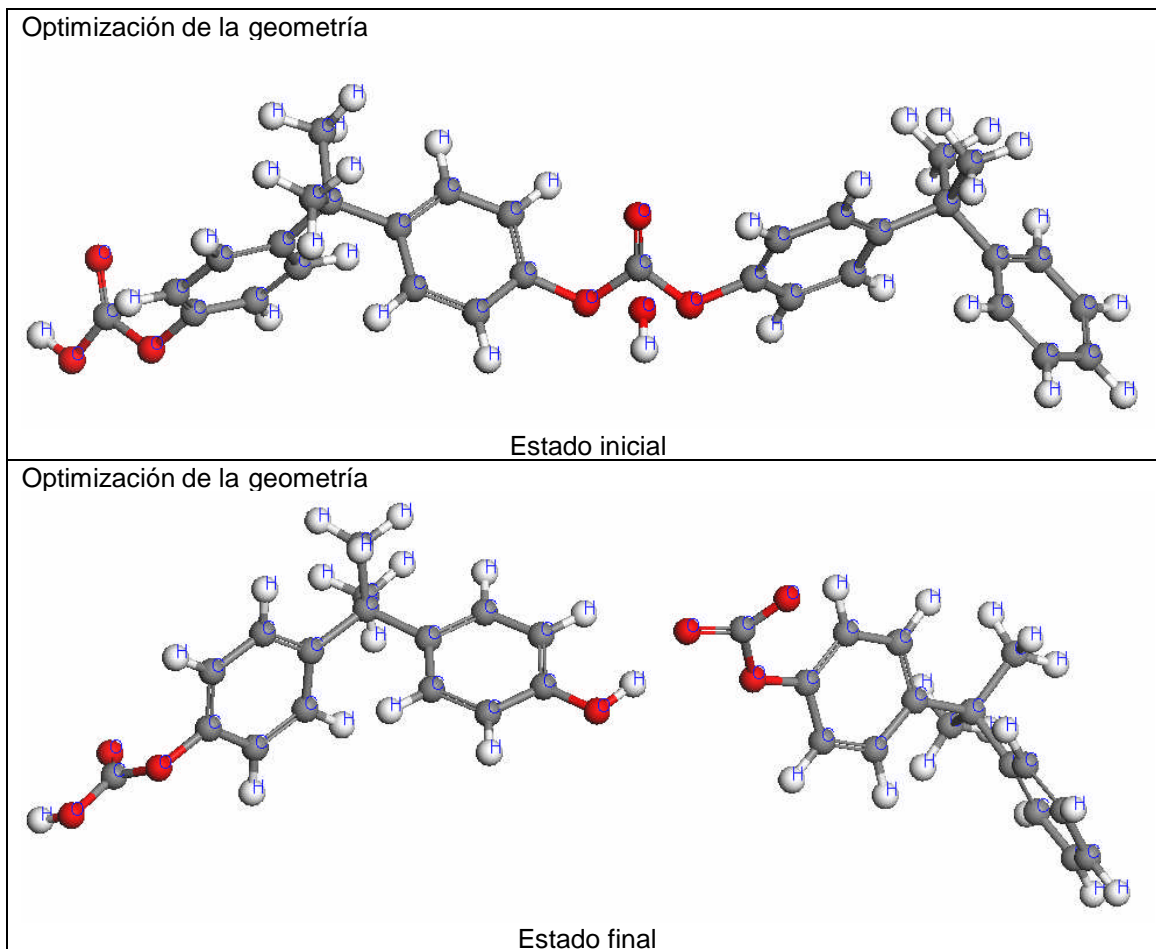


Figura 38. Interacción de 2 unidades repetitivas de PC con el ion OH⁻

En un estudio teórico más detallado, podría hacerse el ensayo de las interacciones presentadas aumentando el número de unidades repetitivas de Policarbonato, así como también haciendo interactuar el PC no sólo con el NaOH como tal o con sus iones independientes, sino también con el Etilenglicol, que fue empleado en la experimentación como parte fundamental de la degradación.

9. CONCLUSIONES

En el presente trabajo se llevó a cabo la depolimerización del Policarbonatos mediante reacciones de catálisis básica a partir de residuos generados por el consumo de Discos Compactos (los cuales son elaborados a base del citado material) obteniendo como producto mayoritario el Bisfenol A con un rendimiento del 82.5%.

Del mismo modo, para evaluar e inferir la viabilidad de tal procedimiento, se llevaron a cabo estudios teóricos de Simulación Molecular para el proceso de depolimerización del Policarbonato, dando como resultado la confirmación de la posibilidad de llevar a cabo la degradación con éxito.

Ya obtenido el producto mayoritario, éste se empleó como fungicida para inhibir el crecimiento del hongo *Penicillium*, obteniendo resultados satisfactorios, cumpliendo así con los objetivos planteados inicialmente.

Las condiciones de reacción para lograr la depolimerización son sencillas, ya que se requiere únicamente someter el sistema durante aproximadamente 10 minutos a un calentamiento constante a 175°C. Además del Bisfenol A, puede obtenerse una gran variedad de productos de reacción, los cuales en su mayoría son derivados del mismo y tienen aplicaciones industriales importantes. De igual forma si se modifican los tiempos de reacción, puede obtenerse una mayor cantidad de derivados empleados en su mayoría como fungicidas.

A pesar de que el Etilencarbonato es también una materia prima importante para la producción del Policarbonato, este no se puede obtener como producto de degradación debido a su baja estabilidad en el medio ambiente y a su capacidad para seguir reaccionando con los productos que se van generando.

10. PERSPECTIVAS

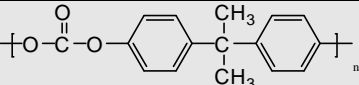
Hay que hacer hincapié en que la investigación llevada a cabo y presentada en las páginas anteriores no ha culminado, ya que sería interesante incrementar el rendimiento de la reacción, de modo que podamos conocer de manera cuantitativa cuál es la producción máxima de BPA y sus derivados mediante la técnica aquí propuesta.

Por otra parte es esencial continuar con el estudio del aspecto microbiológico, de modo que pueda evaluarse la capacidad de inhibición del Bisfenol A sobre algún hongo de otra especie, así como también llevar a cabo estudios para estimar la toxicidad del producto obtenido y sus derivados, para que de esta forma su uso pueda extenderse a otras áreas de la industria.

Debido a la gran diversidad de aplicaciones que tienen los productos de degradación polimérica, puede entenderse la importancia de los procesos de depolimerización de desechos en la Industria Química, ya que además de ser una alternativa para que la producción de plásticos sea de bajo impacto ambiental, estos procesos ayudan a las empresas para la minimización de costos y como una nueva alternativa de producción a partir de "material basura". De igual manera si las empresas aprovechan sus recursos de esta forma, pueden implementarse iniciativas de ley que sancionen la producción excesiva de desechos y que exhorten a los productores para crear nuevas industrias que favorezcan el desarrollo sustentable de nuestro país.

11. ANEXOS

ANEXO I PROPIEDADES FÍSICAS, QUÍMICAS Y TOXICOLÓGICAS DE REACTIVOS Y PRODUCTOS (3, 9, 11)

POLICARBONATO	
Fórmula General	
Peso Molecular	En moldeado por inyección varía desde 20,000 hasta 30,000g/mol, y si es por extrusión supera los 60,000g/mol.
Clasificación	Polímero sintético, producto de condensación (glicólisis o transesterificación), homopolímero, naturaleza orgánica, copolímero lineal, termoplástico, amorfo.
Síntesis	Producto de una polimerización interfacial de un diol con fosgeno, o bien, una transesterificación entre difenilcarbonato y bisfenol A.
Tº fusión	Varía de 195°C hasta 225°C. En aleación puede llegar a los 270°C.
Propiedades Físicas	Transparente, de gran claridad óptica, gran dureza, resistente al impacto, buena resistencia al creep, baja absorción de humedad, buena capacidad de transmisión de la luz (88% de la luz visible), baja inflamabilidad, densidad de 1.197 kg/dm ³ , temperatura de transición de 432 K (159°C). Energía de activación de 120 kJ/mol. Es procesable si se encuentra fundido a temperaturas por debajo de los 500 K (227°C) y puede ser moldeado por inyección o extrusión.
Propiedades Químicas	Plástico térmicamente estable, puede soportar hasta 600 K por un periodo de tiempo corto. Resistente a ácidos diluidos, hidrocarburos alifáticos, grasas, ceras y aceites. Puede ser atacado por ácidos oxidantes fuertes, álcalis, amoníaco, metanol, hidrocarburos aromáticos, cetonas, éteres y ésteres. Soluble en cloruro de metileno, cloroformo, 1,2-dicloroetileno, tetracloroetano, clorobenceno, etilenglicol, etc.
Usos de Ingeniería	Alumbrado público, semáforos, cascos de protección, equipamiento en casas, equipo de protección en general, telescopios, cámaras fotográficas y de video, autopartes, aplicaciones médicas, etc.
Otros Usos	CD's, DVD's, ipod's biberones, garrafones, secadoras de cabello, alumbrado, etc.
Nombres Comerciales	Baylon, Maknolon, (Farbenfabriken Bayer, AG); Nuclon (Pittsburg Plate Glass Co.).
Toxicidad	Con las nuevas técnicas que se han implementado para la síntesis de este material, se ha comprobado que no es tóxico, de ahí su utilización en envases de productos alimenticios. Sin embargo las antiguas técnicas que aun emplean fosgenos como reactivo, suelen dejar trazas del mismo que en caso de no ser limpiado o eliminado, pueden causar daños a la salud por inhalación o ingestión causando problemas respiratorios, intoxicación e incluso la muerte.
Usos	Fabricación de vidrios para ventanas no astillables, lentes livianas, CD's, domos para aprovechamiento de la luz solar, combinaciones con fibra óptica, etc. También se emplea en la industria alimentaria como envases de imitación vidrio y en la fabricación de biberones de alta calidad.

HIDRÓXIDO DE SODIO	
Fórmula	NaOH
Peso Molecular	40.0 g/mol
Punto de Ebullición	1390°C
Punto de Fusión	318°C
Densidad Relativa	2.1 g/mL
Solubilidad	Altamente soluble en agua con desprendimiento de calor.
Aspecto Físico	Sólido blanco, delicuescente en diversas formas e inodoro; sustancia incolora e higroscópica que se vende en forma de trozos, escamas, hojuelas, granos o barras.
Características Químicas	Base fuerte, reacciona violentamente con ácidos; corrosiva en ambientes húmedos para metales (cinc, aluminio, estaño y plomo), originando hidrógeno combustible y explosivo. Ataca a algunas formas de plástico, caucho y recubrimientos. Absorbe rápidamente dióxido de carbono y agua del aire. Puede generar calor en contacto con la humedad o el agua.
Toxicología	Se puede absorber por inhalación del aerosol y por ingestión. Es muy corrosivo para los ojos, la piel y el tracto respiratorio. El contacto prolongado o repetido con la piel puede producir dermatitis.
Usos y Aplicaciones	En la industria química, principalmente en forma de lejía de sosa, que se prepara por disolución en agua de la sosa sólida. Se emplea también en industrias de algodón, sed artificial, plásticos, textiles y jabones, así como en la fabricación de diversos productos químicos entre otros usos.

ETILENGLICOL	
Otros Nombres	<i>Etano-1,2-diol; 1,2-Dihidroxietano</i>
Fórmula	HOCH ₂ CH ₂ OH
Peso Molecular	62.1 g/mol
Punto de Ebullición	198°C
Punto de Fusión	-13°C
Densidad Relativa	1.1 g/mL
Solubilidad	Miscible en agua y en algunos solventes orgánicos.
Aspecto Físico	Líquido incoloro, inodoro, viscoso, higroscópico y de aspecto oleoso.
Características Químicas	Combustible, fácil formación de gases tóxicos. Reacciona con oxidantes y bases fuertes.
Toxicología	Se puede absorber por inhalación y a través de la piel; irrita los ojos, la piel y el tracto respiratorio. Puede causar efectos en el riñón y el sistema nervioso central, dando lugar a alteraciones renales y daño cerebral. La exposición podría causar disminución de la conciencia; puede afectar al sistema nervioso central y a los ojos.
Usos y Aplicaciones	Empleado principalmente como reactivo básico en la industria de los polímeros y en la elaboración de algunos plásticos.

BISFENOL A	
Otros Nombres	<i>4,4'-(1-Metilidien)bisfenol; 4,4'-isopropilidenfenol</i>
Fórmula	$C_{15}H_{16}O_2$
Peso Molecular	228.29 g/mol
Punto de Ebullición	220°C
Punto de Fusión	150-155°C (rango de solidificación).
Solubilidad	Prácticamente insoluble en agua. Soluble en soluciones alcalinas acuosas, alcohol y acetona, ligeramente soluble en tetracloruro de carbono.
Aspecto Físico	Cristales u hojuelas blancas y brillantes de olor fenólico.
Características Químicas	Altamente reactivo, incluso puede afectar el metabolismo de algunas especies animales.
Toxicología	Se puede absorber por inhalación y por ingestión. Es muy corrosivo para los ojos, la piel y el tracto respiratorio.
Usos y Aplicaciones	En la industria química principalmente para la fabricación de Policarbonatos y como potente fungicida.

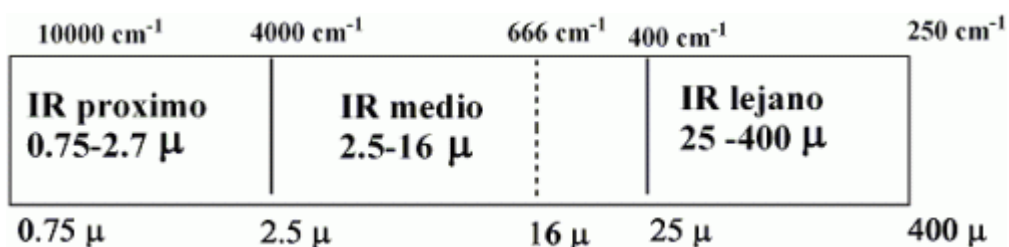
ETILENCARBONATO	
Otros Nombres	<i>Etilenglicol Carbonato; 1,3-dioxolan-2-ona; Glicol Carbonato; 2-Dioxolona; Cicloetilencarbonato; Acido Etilencarbónico; Acido Carbónico; Ester de etileno cíclico.</i>
Fórmula	$C_3H_4O_3$
Peso Molecular	88.06 g/mol
Punto de Ebullición	243-244°C (se descompone)
Punto de Fusión	35-37°C
Solubilidad	Altamente soluble en agua, acetona, éter, hexano, acetato de etilo y otros disolventes orgánicos.
Aspecto Físico	Sólido inodoro e incoloro.
Características Químicas	Es un compuesto con gran estabilidad química, no es afectado fácilmente por agentes químicos externos.
Toxicología	Se puede absorber por ingestión. Es muy corrosivo para los ojos, la piel y el tracto respiratorio.
Usos y Aplicaciones	En alquilen-carbonatos, teniendo una alta solubilidad y reactividad. Ya en reacción tiene baja toxicidad, es biodegradable y su alto punto de ebullición favorece muchas aplicaciones: como solvente en agricultura, tintas, colorantes, y sales orgánicas en la Industria Textil; como solvente en la producción de acrilonitrilo para la producción de fibras de acrilonitrilo; como acelerador en los procesos de teñido; en la producción de policarbonatos y poliésteres elastoméricos como aditivo y plastificante; auxiliar en procesos de refinería, para la elaboración de baterías recargables de ion-litio, etc.

ANEXO II ESPECTROSCOPIA DE INFRARROJO ^(22, 23)

El Infrarrojo (IR) es una técnica espectrofotométrica basada en los cambios energéticos producidos en las transiciones de las moléculas de varios estados de energía vibracionales y rotacionales a otro.

Una molécula vibra constantemente: sus enlaces se alargan y se contraen, combinándose recíprocamente. La absorción de luz infrarroja produce cambios en las vibraciones de una molécula: la luz que se encuentra más allá (frecuencia menor, longitud de onda mayor) del rojo del espectro visible. La molécula sufre un cambio neto en el momento bipolar como consecuencia de su movimiento de vibración o rotación, lo cual trae como consecuencia la absorción de la radiación. El fundamento de esta técnica está basado en algunos principios como la Transformada de Fourier, la Ley de Hooke y la Frecuencia Natural de Oscilación.

La espectroscopia IR utiliza la radiación del espectro electromagnético cuya longitud de onda (λ) está comprendida entre los 800 y los 400,000nm, es decir, 0.8 y 400 μ ($1\mu = 10^{-4}\text{cm}$) y su efecto sobre la materia orgánica, como se indicó con anterioridad, es producir deformaciones de los enlaces de la sustancia. Debido a su gran amplitud se suele dividir en tres zonas, siendo el IR medio el más utilizado para determinar experimentalmente las estructuras químicas (2.5 - 16 μ):



Debido a consideraciones de tipo histórico la unidad más usada en la espectroscopia infrarroja no es la longitud de onda (λ) sino el número de onda (ν , $\nu = 1/\lambda \text{ cm}^{-1}$), correspondiendo el IR medio a la zona comprendida entre 4000 y 625 cm^{-1} . Esta técnica se caracteriza porque, de todas las propiedades de un

compuesto orgánico, es la que da más información acerca de su estructura, ya que el espectro nos indica los grupos funcionales que contiene la molécula o que no están en ella. Esta técnica tiene la peculiaridad de que pueden analizarse casi todo tipo de muestras:

- Gases (contenidos en cubetas cilíndricas)
- Disoluciones (al igual que en UV, con disolventes incoloros)
- Líquidos (siempre y cuando sea puro)
- Sólidos (pulverizados)
- Pastillas (cristales sólidos mezclados con KBr)
- Suspensiones (de aceite mineral o aceite florado)

Del mismo modo, es una técnica aplicable principalmente para:

- Casi todo tipo de especies orgánicas
- La mayoría de las especies Bioquímicas
- Puede emplearse para establecer la identidad de dos compuestos y revelar la estructura de uno nuevo.

Las partes específicas del espectro infrarrojo se denotan por su longitud de onda (o preferentemente por su frecuencia). La longitud de onda se expresa en micrones, μ ($1\mu=10^{-4}\text{cm}$ o 10^4 \AA). La frecuencia no se expresa en Hertz, sino en números de onda, cm^{-1} , a menudo llamados centímetros recíprocos. El número de onda es simplemente el número de ondas por centímetro, y es igual al recíproco de la longitud de onda en centímetros. En este tipo de espectros, un grupo de átomos determinados da origen a *bandas de absorción características* es decir, un grupo específico absorbe luz de frecuencias determinadas, que son prácticamente las mismas de un compuesto a otro. Estas bandas son las que deben interpretarse de acuerdo a parámetros previamente establecidos para conocer la identidad del compuesto químico en cuestión.

ANEXO III CROMATOGRAFÍA EN CAPA FINA -CCF- (THIN LAYER CROMATOGRAPHY -TLC-) Y CROMATOGRAFÍA EN PLACA PREPARATIVA ^(20, 21)

La cromatografía en capa fina es un procedimiento que se utiliza para separar moléculas relativamente pequeñas. Es una técnica sencilla, eficiente y de bajo costo. Se emplea en biología celular para separar azúcares, lípidos, aminoácidos, nucleótidos, metabolitos, etc., pero también tiene aplicación como método de separación de productos naturales y compuestos orgánicos en general.

Al igual que otras cromatografías, consiste de una fase estacionaria y una fase móvil en donde la sustancia de interés se adherirá a la fase estacionaria o se moverá con la fase móvil, viajando una distancia que es inversamente proporcional a la afinidad por la fase estacionaria. La muestra aplicada en la capa es adsorbida en la superficie del material por la acción de fuerzas electrostáticas (fuerzas de Van der Waals, puentes de Hidrógeno, efectos inductivos, etc). Luego, cuando la capa es expuesta a un flujo por acción capilar, se inicia una competencia de enlaces entre los sitios activos del adsorbente y la sustancia con el solvente.

Para que la aplicación de la muestra sobre la placa se lleve a cabo de manera fina y homogénea, es recomendable hacerlo con un capilar, de tal manera que, en el caso de la CCF, se aplique solamente una gota muy fina de muestra, la cual será suficiente para obtener una placa corrida con la mayor nitidez posible. Del mismo modo, para la Cromatografía en Placa Preparativa es necesario aplicar la muestra con un capilar, lo cual permitirá una distribución homogénea que al correr, evitará la formación de ondulaciones en la fase estacionaria y permitirá una separación sencilla.

Entre los adsorbentes más utilizados destacan Sílica gel (que se utiliza en el 80% de las separaciones), el óxido de aluminio o alúmina (ácida, neutra ó básica), la tierra silícea ó Kieselguhr, la celulosa (Nativa o micro-cristalina) y las

Poliamidas. La fase estacionaria puede ser de papel, de celulosa o de un gel de silicato (vidrio molido fino) unido a una superficie sólida (una placa de vidrio, aluminio, plástico o papel). Esta superficie sólida puede ser rígida o flexible. El tipo de fase estacionaria que se utilice en un experimento dependerá del tipo de moléculas que se quieran separar. Incluso existen algunas placas con indicadores fluorescentes.

La fase estacionaria consiste de un solvente que puede ser agua, un solvente orgánico o una mezcla de ambos.

La Cromatografía en Placa Preparativa se fundamenta de la misma manera, sin embargo, la diferencia radica en dos aspectos. El primero: el tamaño de las placas, y el segundo, que la CCF se emplea para la identificación de los compuestos, mientras que la Cromatografía en Placa Preparativa se emplea para lograr la separación y purificación de los mismos..

El procedimiento es sencillo: Se colocan las muestras a un centímetro del borde en uno de los extremos de la placa, se deja secar, se coloca la placa en un envase (tanque de desarrollo) que ya contiene una pequeña cantidad del solvente, se tapa y se deja correr. El solvente subirá por capilaridad e irá arrastrando las moléculas, las cuales se moverán según la afinidad que muestren por la fase estacionaria.

Si la mezcla de muestras que se está analizando presenta color, se verán los distintos colores migrando a distintas velocidades. Si son incoloras hay que someter la placa a algún tratamiento con una sustancia reveladora para poder determinar la presencia de sustancias sobre el silicato. También pueden sustituirse las sustancias reveladoras por la aplicación de rayos Ultravioleta.

12. REFERENCIAS

1. SPERLING L.H.; Introduction to Physical Polymer Science; 3° Edición; John Wiley & Sons; EUA, 2001; pp. 1-3, 11-15.
2. CAMPBELL, I. M.; Introduction to Synthetic Polymers; 2° Edición; Oxford University Press; EUA, 2000; pp. 1-25.
3. BRANRUP *et al*; Polymer Handbook; 4° Edición; Wiley Interscience; EUA, 1999.
4. Reciclaje de Plásticos. Residuos Plásticos: Su aprovechamiento como necesidad. Argentina. www.plastivida.com.ar Mayo de 1993.
5. BRAUN D, *et al*; Polymer Synthesis; Theory and Practice; Fundamentals, Methods, Experiments; 3° Edición; Alemania, 2001; pp 223-225.
6. SEYMOUR R, CARRAHER C.; Polymer Chemistry; 6° Edición; Marcel Dekker; EUA, 2003; pp. 208-217.
7. Plásticos Universales. Reciclar CD's, el Mercado del Policarbonato. México. www.plastunivers.com/Tecnica/Hemeroteca/ArticuloCompleto.asp?ID=6633; Junio de 2003.
8. SEYMOUR R, CARRAHER C.; Introducción a la Química de los Polímeros; 2° Reimpresión; Reverté; España, 2002; pp. 1-13, 250, 260, 379, 554.
9. BASHFORD, D. (Compiled by); Thermoplastics, Directory and Databook; Chapman & Hall; Great Britain, 1997; pp 21.
10. PAINTER P, COLEMAN M.; Fundamentals of Polymer Science, an Introductory Text; Technomic Publishing Co. ; EUA, 1994; pp. 27-39.
11. The Merck Index. An Encyclopaedia of Chemicals, Drugs and Biologicals; 13ª Edición; Staff Merck & Co.; EUA; 2001.
12. BAHADUR P., SASTRY N. V.; Principles of Polymer Science; 2° Edición; Alpha Science International; UK, 2005; pp 1-8, 175-176.
13. OKU-TANAKA-HATA; "Chemical Conversion of Poly(carbonate) to bis(hydroxyethyl)ether of Bisphenol A. An approach to the Chemical recycling of plastic wastes as monomers"; Polymer; Japón, 2000; Vol. 41; pp 6749-6753.

14. Bio Bio, Productos Ecológicos. Agricultura y Medio Ambiente. <http://www.biobio.es/?op=art&id=1170>, España, 2003.
15. Control de Alimentos. Bisfenol y sus derivados. www.um.es/grupos/grupo-analisis-control-alimentario/conferencias/moleculas.ppt, España, 2005.
16. ANDRES J, BELTRAN J.; Química Teórica y Computacional; Universitat Jaume-I; España, 2000.
17. NICOLÁS I, MARIN E., *et. al.*; Algunos Aspectos Básicos de la Química Computacional; FESC-UNAM; 2006.
18. JENSEN F.; Introduction to Computational Chemistry; John Wiley & Sons; Dinamarca, 2002.
19. Material Studio Modeling 4.1; Accelrys Software Inc.; 2007.
20. EDWARDS D. I.; Cromatografía (Principios y Técnicas); El Manual Moderno; México, 1973.
21. STAHL E.; Thin Layer Chromatography, a Laboratory Handbook; 2º Edición; John Wiley & Sons; Singapur, 1990.
22. HARRIS, D.; Análisis Químico Cuantitativo; Reverté; España, 2000; pp.500-521.
23. SILVERSTENIN, R.; Spectrometric Identification of Organic Compounds; John Wiley & Sons; EUA, 1963; pp 135-141.
24. PRETSCH, *et. al.*; Tablas para la Elucidación Estructural de Compuestos Orgánicos por Métodos Espectroscópicos; 2º Edición; Alhambra; España, 1985.