



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA
DE MÉXICO.

FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES
CUAUTITLÁN

**Estudio fisicoquímico y determinación del poder
catalítico de un suelo originario de Ciudad Delicias,
Chihuahua. Una contribución al acervo de la Química
Verde.**

T E S I S
QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:
INGENIERA QUÍMICA
P R E S E N T A :
YESSICA PAULINA TREJO DOMINGUEZ

ASESORES: DR. RENÉ MIRANDA RUVALCABA.
cDRA. LAURA BERTHA REYES SÁNCHEZ.

CUAUTITLÁN IZCALLI, ESTADO DE MÉXICO

2009



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.



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

UNIVERSIDAD NACIONAL
 AUTÓNOMA DE
 MEXICO

ASUNTO: VOTOS APROBATORIOS
 FACULTAD DE ESTUDIOS
 SUPERIORES CUAUTITLAN

DRA. SUEMI RODRIGUEZ ROMO
 DIRECTOR DE LA FES CUAUTITLAN
 PRESENTE



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

Con base en el art. 26 del Reglamento General de Exámenes, nos permitimos comunicar a usted que revisamos la Tesis:

Estudio fisicoquímico y determinación del poder catalítico de un
suelo originario de Ciudad Delicias, Chihuahua. Una contribución
al acervo de la Química Verde.

que presenta la pasante: Yessica Paulina Trejo Dominguez
 con número de cuenta: 40503217-2 para obtener el título de :
Ingeniera Química

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 16 de Junio de 2009.

PRESIDENTE	<u>Dr. Juan Manuel Aceves Hernández</u>	
VOCAL	<u>Dr. René Miranda Ruvalcaba</u>	
SECRETARIO	<u>Dr. Ricardo Paramont Hernández García</u>	
PRIMER SUPLENTE	<u>Dr. Gabriel Arturo Arroyo Razo</u>	
SEGUNDO SUPLENTE	<u>MC. Bernardo Francisco Torres</u>	

AGRADECIMIENTOS:

Al Instituto Nacional de Estadística, Geografía e Informática: INEGI por facilitarnos las muestras y los datos correspondientes al perfil del suelo trabajado.

Así como al Proyecto PAPIIT-UNAM **IN213007**, por el apoyo económico brindado para la realización de este trabajo.

A mis asesores, el Dr. René Miranda y a la cDra. Laura Bertha Reyes por su dedicación, tiempo, paciencia y apoyo otorgado para llevar a cabo la realización de este proyecto.

Al honorable jurado: Dr. Juan Manuel Aceves, Dr. Ricardo Paramont García, Dr. Gabriel Arturo Arroyo y MC. Bernardo Francisco, por el tiempo brindado para llevar a cabo la revisión de este trabajo, así como por sus comentarios y apoyo recibido de su parte.

A la UNAM, por permitirme formar parte de la máxima casa de estudios, por las enseñanzas adquiridas dentro de la misma, así como por cada una de las oportunidades brindadas para lograr mi crecimiento tanto profesional como personal.

A todas las personas que laboran en el laboratorio de Química Orgánica, en especial a la cDra. Olivia Noguez por su apoyo en el laboratorio, al cDr. Joel por sus enseñanzas, pero sobre todo por su paciencia, a mis compañeros Mónica y Omar por sus consejos y por permitirme aprender de ellos.

A los profesores que fueron parte de mi formación profesional por su esfuerzo y dedicación, especialmente al I.Q. Arturo Ortega por su ejemplo y enseñanzas durante sus clases y fuera de ellas.

Al Dr. Ricardo Paramont García, por todo su apoyo otorgado durante la carrera, enseñanzas y confianza, pero sobre todo por su amistad.

A el cDr. Gilberto Amaya, por compartirme sus conocimientos, su confianza, ejemplo, sencillez y amistad.

A Sra. Tere y a Sra. Triní por su paciencia y amabilidad prestadas en cada una de mis visitas a la coordinación.

A la Lic. Ma. Eugenia Castell por su trabajo y apoyo para poder realizar mis estancias en la Universidad de Guanajuato y Stanford.

A mis padres el Sr. Pedro Trejo y Ma. Elena Dominguez, por ser el gran ejemplo de toda mi vida, por los sacrificios hechos por darme esta gran oportunidad, por enseñarme que el mundo es de aquellos que dejan el miedo atrás, pero sobre todo por su amor y su apoyo.

A mi hermana Daniela Trejo, por ser una de mis motivaciones más grandes para salir adelante, por ser mi amiga y compañera en los momentos difíciles, por su apoyo y ejemplo, y por todo su cariño.

A mis abuelos Sr. Abdón Dominguez, Sra. Petra González, Sr. Eugenio Trejo y Sra. Guadalupe Campos, por hacer de mis padres las grandes personas que son, por su cariño y cuidados.

A toda mi familia por su cariño, atención y por formar parte de mi vida.

A mis hermanas y amigas Paola Granados e Izamara Hernández, quienes me brindaron su amistad incondicional, apoyo en todo momento y cariño y con las cuales viví innumerables aventuras.

A Elizabeth Cruz, por ser una persona muy linda conmigo y permitirme ser su amiga.

A mis amigas Paola y Paulina, con las que he vivido toda una vida, disfrutando de grandes momentos de alegría y con las cuales he ido creciendo poco a poco.

A Lizbeth, por ser más que mi prima una amiga y por su cariño.

A Victor por ser un buen amigo desde la preparatoria y por su apoyo y por creer en mí.

A la familia Hernández Quiroz, por abrirme las puertas de su casa y hacerme sentir como en la mía aún cuando estaba lejos.

A esas personas especiales que la vida me dio la oportunidad de conocer y con las cuales pude compartir momentos llenos de alegría durante mi estancia en Guanajuato, Diana, Lilian, Jonh, Pastor y Carlos.

A mis amigos de la FES, Cuautitlán, Osvaldo y Andrés, con los cuales compartí grandes momentos y de los cuales pude aprender muchas cosas.

A las grandes personas que conocí en Stanford, Armando, Daniel, Emilio, Maribel, Rodrigo, Thelma y Jeffery que me enseñaron lo lejos que se puede llegar cuando así se quiere, que la amistad trasciende fronteras, con los que viví momentos inolvidables y con los cuales me quedan muchos por vivir.

A Dios, por rodearme de personas maravillosas y estar conmigo todos los días de mi vida.

ÍNDICE

1. INTRODUCCIÓN.	iv
2. GLOSARIO Y ACRÓNIMOS.	vii
3. UNIDADES Y VARIABLES.	ix
4. ANTECEDENTES.	1
4.1 Aspectos Generales.	1
4.2 Suelos.	3
4.2.1 Definición de suelo.	5
4.2.3 Características del suelo.	6
4.2.4 Componentes del suelo.	6
4.2.5 Textura del Suelo.	8
4.3 Arcillas.	9
4.3.1 Estructura de las arcillas.	9
4.3.2 Clasificación de las arcillas.	12
4.4 Técnicas empleadas en la caracterización de los suelos.	13
4.5 Química verde.	14
4.6 Fuentes alternas para la activación de una reacción	15
4.7 Catálisis.	16
4.7.1 Definición de catalizador.	17
4.7.2 Características de un catalizador.	17
4.7.3 Mecanismo general de la acción catalítica.	18
4.8 Benciltoluenos y dibenciltoluenos.	19
5. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA.	21
6. HIPÓTESIS.	22

7. OBJETIVOS.	23
7.1 General.	23
7.2 Particulares	23
8. EXPERIMENTAL.	24
8.1 Descripción del sitio de muestreo.	24
8.2 Metodología.	25
9. RESULTADOS Y DISCUSIÓN.	29
9.1 Difracción de rayos-X.	29
9.2 Fluorescencia de rayos-X.	31
9.3 Isotermas de adsorción-desorción.	32
9.4 Resonancia magnética nuclear.	33
9.5 Análisis térmico.	36
9.5.1 Calorimetría Diferencial de Barrido.	36
9.5.2 Análisis Termogravimétrico.	37
9.6 Microscopía de barrido electrónico.	38
9.7 Espectrofotometría de absorción infrarroja.	40
9.8 Comprobación de la actividad catalítica y porcentajes de formación.	44
9.9 Aproximación a la determinación del orden de reacción.	55
10. CONCLUSIONES.	59
11. REFERENCIAS.	61
12. APÉNDICE A. Minerales encontrados en la muestra de Ciudad Delicias.	65
12.1.1 Albita.	65
12.1.2 Calcita.	67
12.1.3 Corindón.	69

12.1.4 Cuarzo.	71
12.1.5 Ulvospinel.	73
13. APÉNDICE B. Listado de Tablas.	75
14. APÉNDICE C. Listado de Figuras.	76

1. INTRODUCCIÓN.

En la década de 1980, la Comisión Mundial sobre el Medio Ambiente y Desarrollo de la ONU, precedida por la primera ministra noruega Gro Harlem Brundtland, introdujo el término “desarrollo sostenible”, para designar los desafíos del desarrollo futuro de nuestro planeta; éste, debe satisfacer las necesidades del presente sin comprometer la capacidad de las generaciones futuras para satisfacer las propias.¹

Haciendo notar así, la importancia evidente de llevar a cabo actividades educativas que se reflejen en los próximos ciudadanos, surgiendo de esta manera la necesidad de formar científicos de alto nivel, que estén preparados para responder a los retos presentes y futuros, lo anterior desde una perspectiva ecológica, que conlleve al uso de materiales de origen natural, lo que permitirá un menor impacto ambiental. Es en este contexto que este trabajo de tesis busca la utilización de materias primas naturales de origen mexicano, cuyo uso sea de bajo impacto ambiental y que a la vez representen una disminución de los costos de producción, como vía de contribución al desarrollo de México.

Con respecto a lo mencionado anteriormente, en este trabajo se llevó a cabo la caracterización física y química de la muestra de un suelo originario de Ciudad Delicias, Chihuahua con clave H13-11, proporcionado por el INEGI, así como la determinación de su poder catalítico; con la finalidad de implementarlo posteriormente como catalizador en reacciones de síntesis específicas. Esto, por que un número considerable de sólidos ácidos, no sólo han probado ser más económicos como catalizadores, sino que también producen frecuentemente mejores cantidades de un producto determinado, debido a que suelen presentar una mejor actividad catalítica, en comparación a los catalizadores ácidos convencionales.²

Así mismo, se implementó el uso de fuentes alternas de activación como son las irradiaciones de microondas y de infrarrojo, lo anterior con respecto al tratamiento térmico tradicional buscando con ello, y mediante el uso de la filosofía de la química verde, reducir o eliminar el uso y generación de sustancias peligrosas en el diseño y manufactura de productos químicos,³ con la finalidad de realizar procesos limpios y económicos que permitan avanzar hacia la sostenibilidad.

Para llevar a cabo el estudio mencionado, el INEGI proporciono la muestra de suelo, posteriormente se procedió a la realizar la caracterización del suelo, utilizando diversas

técnicas analíticas tales como: difracción de rayos-X, fluorescencia de rayos-X, isoterma de adsorción-desorción (BET), resonancia magnética nuclear, análisis térmico, microscopía de barrido electrónico y espectrofotometría de absorción infrarroja. Los resultados obtenidos en cada una de éstas, se muestran a continuación de manera por demás resumida. Con ayuda de difracción de rayos-X, se determinaron los minerales presentes en el suelo los cuales resultaron ser: cuarzo (SiO_2), albita ($\text{NaAlSi}_3\text{O}_8$), calcita (CaCO_3), ulvospinel (Fe_2TiO_4) y corindón (Al_2O_3).

Respecto a fluorescencia de rayos-X, se estableció que la muestra está compuesta principalmente por oxígeno, silicio y aluminio, sin embargo, también se encuentra presente el hierro aunque en menor proporción, determinándose de esta manera que su composición atómica de la muestra es: $\text{Si}_{1.25}\text{Al}_{0.47}\text{O}_{2.18}$.

A partir de las isoterma de BET, se obtuvieron parámetros superficiales como el área superficial específica con un valor de $59 \text{ m}^2/\text{g}$, el volumen de microporos de $0.07 \text{ cm}^3/\text{g}$, así como también un volumen de macroporos $0.56 \text{ cm}^3/\text{g}$ y diámetro de poro promedio de 50 \AA .

Gracias a la resonancia magnética nuclear por medio del ángulo mágico, se determinaron los ambientes químicos para los núcleos de ^{27}Al con sitios de tipo AlO^4 y AlO^6 y para el ^{29}Si sitios del tipo $\text{Q}^4(4\text{Al})$ y $\text{Q}^4(1\text{Al})$.

En el estudio de análisis térmico, por medio de calorimetría diferencial de barrido (DSC), se observó una línea casi continua asignada a una descomposición gradual que puede ser debida a material orgánico, mientras que con el análisis termogravimétrico TGA, fue posible confirmar la presencia de materia orgánica, al observarse la pérdida del material a diferentes temperaturas y además de una mínima cantidad de agua presente en la muestra.

Por medio de la microscopía electrónica de barrido, se detectó la textura, apariencia y diversidad de la muestra respecto a los tamaños de partículas presentes en la misma.

En relación a la espectrofotometría de absorción infrarroja por medio de la adsorción de piridina se determinó la presencia de sitios del tipo ácido de Lewis y de Brønsted-Löwry.

Por otra parte, al llevar a cabo la determinación del poder catalítico del suelo, se efectuó la reacción de alquilación de Friedel-Crafts⁴ por medio de la cual se obtuvieron benciltoluenos

y oligómeros de tolueno^a, utilizando como reactivos cloruro de bencilo y tolueno empleando diferentes fuentes de activación.

Los resultados correspondientes, indican rendimientos por encima del 90%, para los tres métodos de activación. Donde sobresalen las microondas no solo por tener los mejores rendimientos sino por lograrlo en el menor tiempo de reacción. Además este método fue el único que mostró características de selectividad respecto a la formación de productos, dado que desde los 2 min. y hasta los 4 min. de reacción se llevó a cabo la formación de benciltoluenos, y a partir de los 5 min. de reacción fueron sintetizados dibenciltoluenos, a diferencia de las técnicas de infrarrojo y tratamiento térmico en donde se obtienen ambos compuestos con un tiempo de reacción inicial de 3 y 4 min. respectivamente.

Al realizar una aproximación a la determinación el orden de la reacción de acuerdo a los porcentajes de formación total, se encontró que por medio del método integral⁵ no es posible determinar el orden de reacción debido a que los coeficientes de correlación no se aproximan lo suficiente al valor esperado de 1, para ninguno de los órdenes, sin embargo, el más cercano hace referencia a un orden de reacción 2, para el caso de tratamiento térmico.

Para determinar de manera más confiable el orden de reacción, se realizó dicho análisis por medio del método de Powell⁵, que al comparar las curvas teóricas de Powell con las obtenidas experimentalmente, cada una de estas se sobreponen con una curva representativa diferente es decir que la reacción posee un diferente orden de reacción cuando es tratada con las diferentes fuentes de activación, dando como resultado ordenes de 0.5, 1.5 y 2 para microondas, tratamiento térmico e infrarrojo, respectivamente.

^a Nombre que también se le da a los dibenciltoluenos.

2. GLOSARIO Y ACRÓNIMOS.

% ar	Abundancia relativa en porciento.
Al	Aluminio
B.L.	Bandas Laterales
TGA	Análisis termogravimétrico.
Ca	Calcio
C. I. C.T.	Capacidad de intercambio catiónico total.
C	Carbono
DSC	Calorimetría diferencial de barrido.
Cl	Cloro
DRX	Difracción de rayos X.
EAI	Espectrofotometría de absorción infrarroja.
EIME	Espectrometría de masas por impacto electrónico.
FRX	Fluorescencia de rayos X.
Fe	Hierro.
IR	Infrarrojo.
INEGI	Instituto Nacional de Estadística Geografía e Informática.
BET	Isotermas de S. Brauner, P. Emmett y E. Teller.
M ⁺	Ión molecular.
MAS	Magic angle spinning (giro con ángulo mágico).
Mg	Magnesio
MEB	Microscopía de barrido electrónico.
MW	Microondas.
N	Nitrógeno.
ONU	Organización de las Naciones Unidas.
UNESCO	Organización de las Naciones Unidas, para la Educación, la Ciencia y la Cultura.
O	Oxígeno
P.M.	Peso molecular.
CP	Polarización cruzada.

K	Potasio
RMN	Resonancia magnética nuclear.
Si	Silicio
Na	Sodio
Ti	Titanio
TT	Tratamiento térmico.
IUPAC	Unión Internacional de Química Pura y Aplicada.

3. UNIDADES Y VARIABLES.

Å	Ángstrom.
θ	Ángulo formado por los rayos incidentes y planos de dispersión.
α, β, γ .	Ángulos formados por las aristas de la celda unitaria.
S_g	Área específica.
cm	Centímetros.
cm ³	Centímetros cúbicos.
cm ⁻¹	Centímetros a la menos uno (número de onda).
D	Diámetro de poro.
ΔE	Diferencia de energía.
a, b, c.	Dimensiones de la celda unitaria.
eV	Electron volts (electrón voltios).
°C	Grados Celsius.
K	Grados Kelvin.
g	Gramos.
Hz	Hertz (Herzios)
H	Hora.
km	Kilómetros.
km ²	Kilómetros cuadrados.
kV	Kilovolts (kilovoltios).
	Longitud de onda.
MHz	Megahertz (Mega Hercios).
m	Metros.
μm	Micrómetro.
μmol	Micromoles.
MW	Microondas.
mg	Miligramos.
mL	Mililitro.
mm	Milímetros.
min.	Minuto.

ppm	Partes por millón.
%	Porcentaje o por ciento en peso.
m/z	Relación masa/carga.
s	Segundo.
T _c	Temperatura de cristalización.
T _g	Temperatura de transición vítrea.
V	Volts (Voltios).
V _m	Volumen de macroporo.
V _g	Volumen de microporo.
W	Watts (Vatios).
Wh	Watt-hora.

4. ANTECEDENTES.

4.1 Aspectos generales.

El estado de Chihuahua, es una de las 32 entidades federativas de los Estados Unidos Mexicanos. Está localizado al norte del país en las coordenadas latitud $25^{\circ} 30' - 31^{\circ} 47''$ N, longitud $103^{\circ} 18' - 109^{\circ} 07''$ O, limitando al oeste con los estados de Sonora y Sinaloa, al sur con Durango, al este con Coahuila y al norte con los de Nuevo México y Texas (Estados Unidos de América), Figura 4.1.1; contando con una superficie de $247,938 \text{ km}^2$, lo que lo convierte en el estado más grande de México⁶.



Figura 4.1.1. Localización del Estado Chihuahua.

Está conformado por tres grandes regiones denominadas sierra, llanura o meseta y desierto, que se suceden de oeste a este en forma de grandes bandas; lo que le da al clima de Chihuahua y a su geografía, condiciones contrastantes, que son las causas de sus grandes desiertos, montañas, barrancas y bosques.

Chihuahua se divide en 67 municipios. Dentro de los cuales destaca Ciudad Delicias con código INEGI: 021, es una de las ciudades más importantes del estado, aún cuando a la vez, es el municipio más pequeño: con una extensión territorial de 335.40 km^2 , se ubica en las coordenadas de latitud $28^{\circ} 11' \text{ N}$ y longitud $105^{\circ} 28' \text{ O}$, es decir en la zona centro del estado, colindando al norte con el municipio de Meoqui, al este y al sur con Saucillo y al oeste con Rosales, Figura 4.1.2.

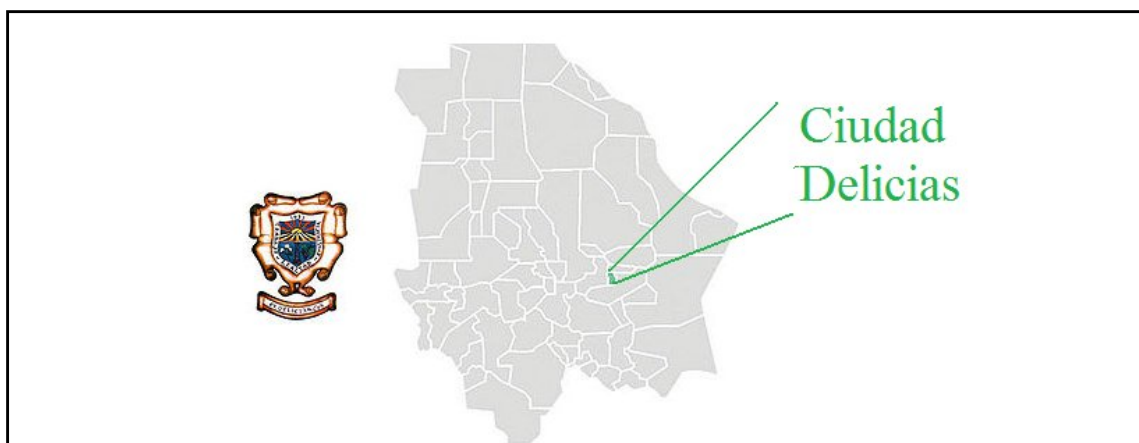


Figura 4.1.2. Ubicación de Ciudad Delicias en el Estado de Chihuahua.

Ciudad Delicias se encuentra a 1,170 metros sobre el nivel del mar. Cuenta con un clima semiárido extremoso, con una temperatura media anual de 18.6° C, temperatura máxima de 42° C y mínima de -13° C. La precipitación pluvial media anual es de 294.7 mm. con un promedio anual de 82 días de lluvia y una humedad relativa del 45%. Se estiman 60 días de lluvia y 2 de granizo al año. Los días con heladas son 110 y existen 3 días de heladas tempranas en octubre y 4 de heladas tardías en abril, según las estadísticas oficiales. Los vientos dominantes proceden del sudoeste. Dentro de su orografía, se tiene que el territorio es plano en las mesetas inmediatas a los ríos Conchos y San Pedro, las cuales son interrumpidas por cortos lomeríos de escasa relevancia. Cabe mencionar que el principal recurso natural de Ciudad Delicias es su suelo, que la dota de tierras fértiles para la agricultura y la ganadería.

En la zona noroeste y suroeste predominan los suelos solonchaks de textura media, en pendientes de nivel sin asociaciones o inclusiones y en su fase salina. En la porción restante, existen los yermosoles háplicos de textura media, en pendientes de nivel o quebradas.

A continuación se describen las propiedades de los dos tipos de suelos predominantes en las tierras de Ciudad Delicias, conforme a la clasificación FAO/UNESCO 1970 y 1974, modificada por la Dirección de Geografía del Territorio Nacional de DETENAL y por el Instituto Nacional de Estadística, Geografía e Informática (INEGI).⁷

- Solonchak

Su nombre proviene del ruso sol, sal y chak, área salina, estos son suelos exclusivos de materiales que presentan propiedades flúvicas y salinidad alta sin horizontes diagnóstico. Es un suelo halomórfico o alcalino; mal drenado, y perteneciente a la clasificación de suelos aluviales⁸, que se localiza en regiones áridas y en el cordón litoral. Su vegetación cuando la hay, es de pastizal o plantas que toleran grandes cantidades de sales halófitas. Estos se pueden dividir según la última revisión 1987 FAO/UNESCO⁹ en: háplicos, mólicos, cálcicos, gypsicos, sódico, gléyicos y gélicos.

- Yermosoles háplicos

Del español yermo que significa desierto, los cuales presentan una capa superficial de color claro muy pobre en materia orgánica y nitrógeno, presentan acumulación de yeso y carbonato de calcio en la superficie o a diversas profundidades. Se localizan en zonas áridas y semiáridas; su vegetación natural es de pastizales y matorrales. Son suelos difícilmente erosionables salvo en terrenos muy inclinados. Se encuentran dentro de la clasificación de los aridisoles, o suelos de zonas áridas.⁸

Son suelos con horizonte A ócrico, poco desarrollado y con un régimen de humedad arídico, no presentan permafrost en los 200 cm superficiales. Los yermosoles pueden ser divididos en: takyricos, lúvicos, gypsicos, cálcicos o háplicos; sin embargo, en la última revisión de 1987 FAO/UNESCO los yermosoles desaparecen como unidad dominante de suelos y son considerados en segundo nivel, sólo como propiedades yérmicas.⁹

4.2 Suelos.

El suelo es un recurso natural indispensable, del que dependen no sólo la posibilidad de contar con alimentos y agua, sino que es además imprescindible para la realización y regulación de los ciclos biogeoquímicos que permiten al planeta ser un lugar hópito y conservar en él la vida. Adicionalmente, los componentes mineralógicos del suelo, ofrecen grandes posibilidades de aprovechamiento múltiple en la minería, la industria, y la petroquímica, por mencionar algunas.

Los suelos de amplias regiones de México, Figura 4.1.3, son ricos en diferentes tipos de minerales argílicos expandibles, de gran y diversa importancia económica; por lo que en la búsqueda del mejor aprovechamiento de los recursos naturales de México, ofrecen una

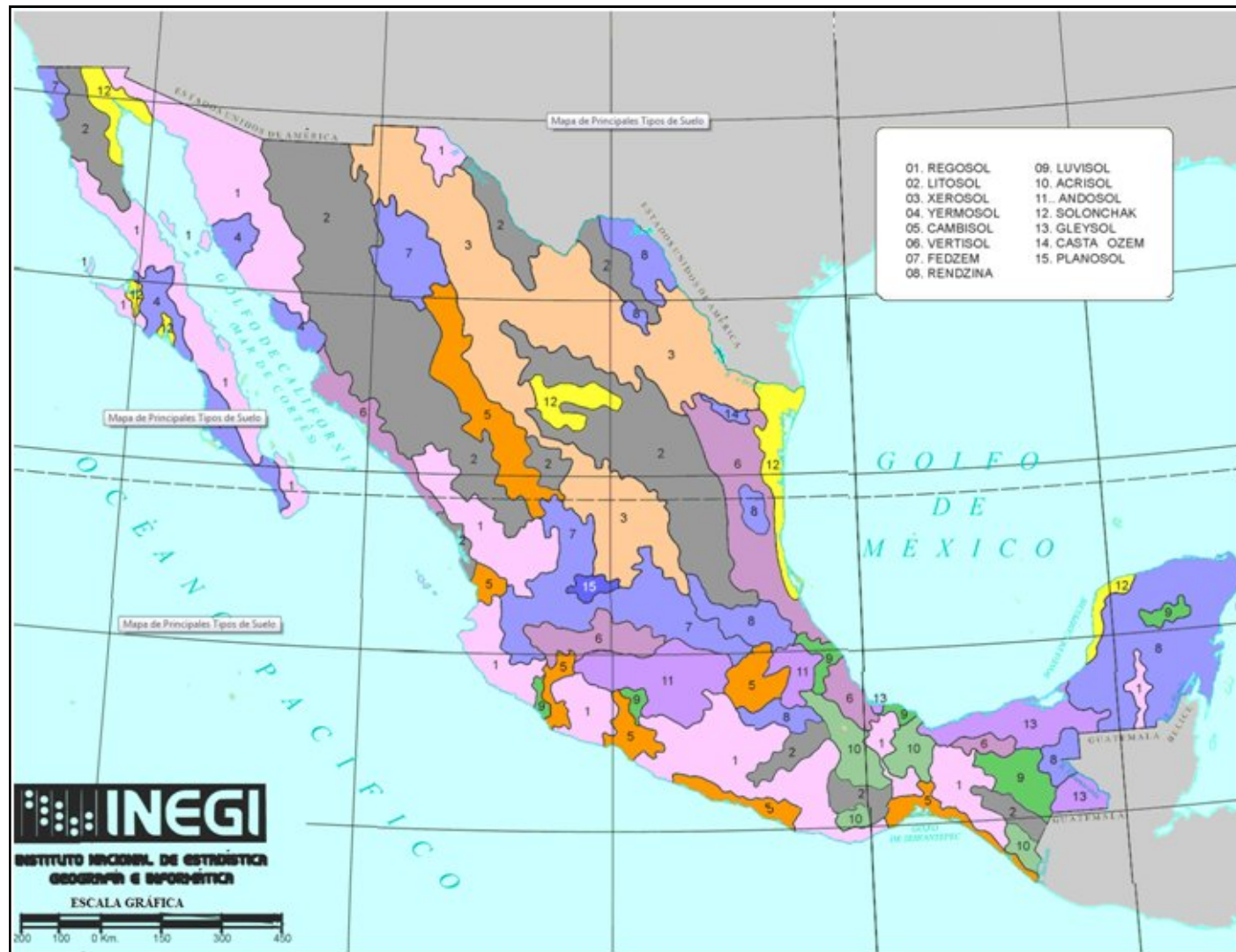


Figura 4.1.3. Mapa de los suelos dominantes de la República.

oportunidad de estudio interdisciplinar que en este trabajo se aborda, tanto desde el campo de la edafología, como del de la química aplicada a la búsqueda de la sostenibilidad de los procesos productivos, como su competencia que es, para beneficio de ambas disciplinas.

Es por ello que en las últimas dos décadas, debido a las propiedades que éstas presentan, se ha abierto la perspectiva del estudio de las arcillas presentes en los suelos mexicanos, a su aplicación en el campo de catálisis, por lo que debido a su importancia, a continuación se define suelo y se abordan sus propiedades.

4.2.1 Definición de suelo.

El suelo es la fina capa de material fértil que recubre la superficie de la Tierra situada en el límite entre la atmósfera y la zona continental de la corteza terrestre¹⁰, Figura 4.2.1. Desde un punto de vista edafológico, un suelo es un "ente natural organizado e independiente, con constituyentes, propiedades y génesis que son el resultado de la actuación de una serie de factores activos (litología, clima, organismos, relieve y tiempo) sobre un material pasivo (la roca madre)."¹¹

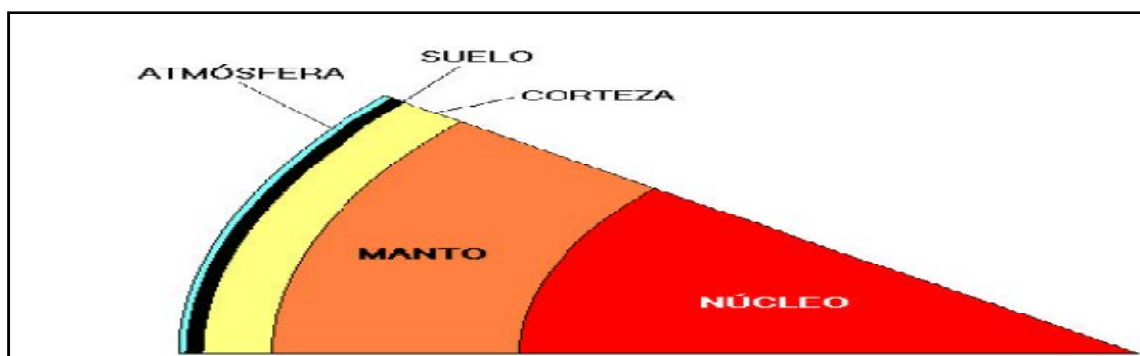


Figura 4.2.1 Sección transversal de la Tierra a través de un continente.

El suelo forma un sistema abierto a la atmósfera y a la corteza que almacena de forma temporal los recursos necesarios para los seres vivos. La disponibilidad de estos recursos (agua, energía, nutrientes minerales, etc.) depende de la intensidad y velocidad de los procesos de intercambio entre el suelo y el resto de compartimentos del ecosistema.

4.2.3 Características del suelo.

Los límites superiores del suelo son la atmósfera, las aguas superficiales poco profundas (es decir, que pueden soportar el crecimiento de raíces), y las plantas vivas o el material orgánico que no ha comenzado a descomponerse. Los límites horizontales, lo constituyen las áreas donde el suelo es invadido por aguas profundas (más de 2.5 m), materiales estériles, rocas o hielo. El límite inferior está constituido por la roca dura y continua. De manera arbitraria, la profundidad máxima del suelo fértil se establece en 2 m.

De este modo, la visión del suelo como una intersección: atmósfera, litósfera, hidrósfera y biósfera deja paso a un concepto de suelo como un subsistema de los ecosistemas terrestres. Este concepto sistémico del suelo implica tres características fundamentales:¹²

- Complejidad: el suelo está caracterizado por una atmósfera interna, una economía particular del agua, una flora y fauna, determinadas partículas minerales, orgánicas y organometálicas, estando todos estos componentes fuertemente relacionados.
- Dinamismo: es decir que sus propiedades evolucionan continuamente por la acción combinada del medio. La roca madre se altera por influencia del clima y la vegetación; los residuos vegetales y animales son atacados por los microorganismos del suelo, forman complejos orgánicos coloidales que se denominan humus y que después se mineralizan progresivamente, hasta formar partículas iónicas nutritivas, que son tomadas por las plantas a través de sus raíces; dando así lugar a uno más de los ciclos de vida.
- Permeabilidad: es un sistema abierto que permite intercambio de materiales sólidos, líquidos y gases. Esta permeabilidad repercute en la mayor o menor facilidad para su evolución o degradación.

4.2.3 Componentes del suelo.

El suelo puede ser considerado como un sistema disperso en el que pueden diferenciarse tres fases:¹³

- Fase sólida: agregados minerales y orgánicos. Ésta constituye el esqueleto o matriz del suelo; la disposición de las partículas del esqueleto permite la existencia de una cantidad variable de poros de diferentes dimensiones: macroporos, mesoporos, y

microporos. Esta es la clasificación y nomenclatura del tamaño de poro aceptada por la IUPAC para los tamices moleculares^{14,15} indicada en la Tabla 4.2.3.1.

Tabla 4.2.3.1. Clasificación de los poros de acuerdo a su tamaño de diámetro.

Tipo de Poro	Dimensiones del diámetro.
Microporo	$1 \leq D \leq 20\text{\AA}$
Mesoporo	$20 \leq D \leq 500\text{\AA}$
Macroporo	$D \geq 500\text{\AA}$

- Fase líquida: agua edáfica o solución del suelo, que transporta en disolución a los iones nutritivos, sales solubles, y compuestos orgánicos solubles: que pueden ser, todos ellos, absorbidos a través de las raíces; pero también transporta elementos pseudosolubles, contaminantes, y materiales en suspensión. El porcentaje de humedad del suelo controla su consistencia, penetrabilidad, temperatura, etc.
- Fase gaseosa: aire contenido en el espacio poroso, que permite la respiración de los organismos del suelo y de las raíces de las plantas. También ejerce un papel de primer orden en los procesos de oxidación-reducción que tienen lugar en el suelo y juega un rol primordial en los procesos de captura de carbono, que son indispensables para el equilibrio climático.

En volumen, la fase sólida ocupa aproximadamente el 50% del total, mientras que las fases gaseosa y líquida se reparten el resto del espacio disponible, Figura 4.2.2.

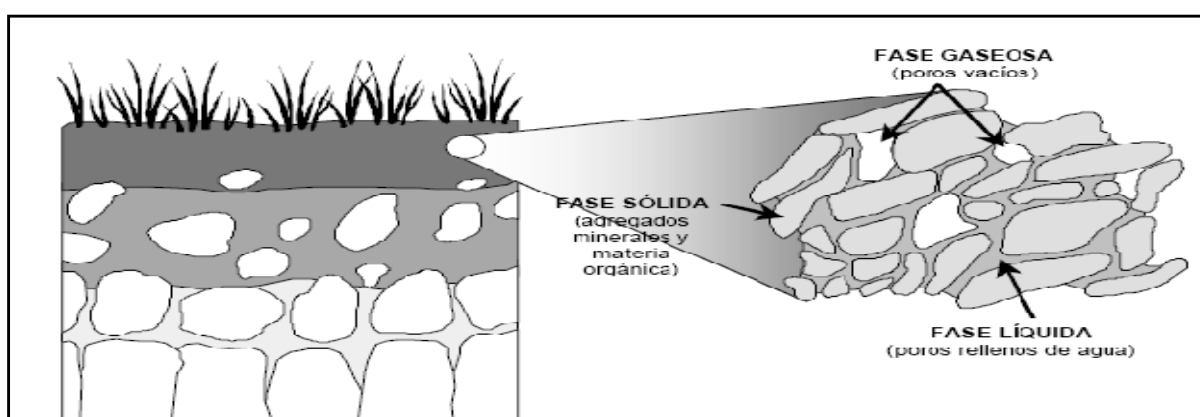


Figura 4.2.2. Esquema de las fases del suelo.

4.2.3 Textura del suelo.

El suelo es una mezcla de partículas minerales de diferentes tamaños, producto de la disgregación de las rocas y materia orgánica en diferentes estado de descomposición. La textura y las propiedades físicas del suelo se considera que dependen fundamentalmente del tamaño de las primeras. Mayores tamaños de partículas significa mayor espacio entre ellas, resultando un suelo más poroso por el que pueden circular agua y aire con facilidad; menor tamaño de partículas tendrán menor espacio entre ellas, por lo tanto este suelo será menos poroso¹⁶, dificultando el paso del aire y el agua. Los tamaños de partícula mineral, se clasifica por su diámetro medido en mm. y se clasifican conforme a determinados estándares, como se observa en la Figura 4.2.3.1.

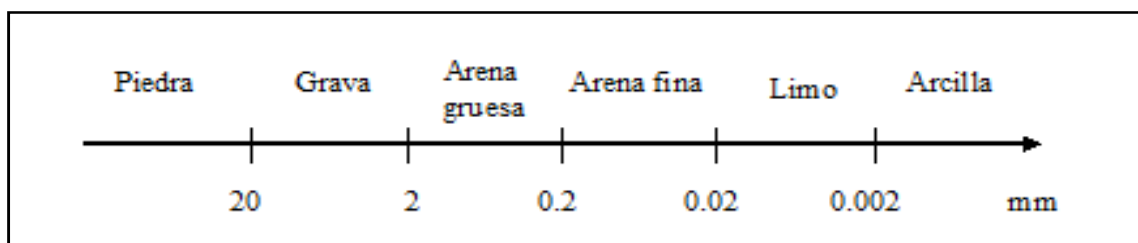


Figura 4.2.3.1. Escala de tamaños de partícula de acuerdo a los estándares internacionales.

- Grava: son fragmentos grandes de roca, fácilmente identificables a simple vista.
- Arena: son aquellos fragmentos que en muchas ocasiones son apreciables sin necesidad de ayuda de equipos adicionales (lupa ó microscopio). Están compuestas por partículas de un tamaño considerable, generan un mayor espacio entre partículas macroporos, el agua drena muy rápidamente a través de ella, arrastrando los nutrimentos en respuesta a la gravedad.
- Limo: son fracciones microscópicas del suelo que constituyen granos muy finos de cuarzo y algunas partículas en forma de escamas que son fragmentos de minerales micáceos.
- Arcilla: son principalmente partículas submicroscópicas en forma de escamas. Al ser partículas tan pequeñas, dejan muy poco espacio entre ellas llamados microporos, por lo que es reducida su permeabilidad; por ello, los suelos ricos en arcillas, presentan problemas de drenaje y aireación. Su diámetro tan pequeño

ofrece una gran superficie de contacto suelo-agua-aire, por lo cual poseen asombrosas propiedades de adsorción, que permiten al suelo retener adsorbidas en contra de la gravedad, grandes cantidades tanto de agua, como de iones nutrimentales disueltos en ella; los cuales quedan por tanto, a disposición de las raíces de las plantas, que los intercambian con la solución edáfica, mediante procesos fundamentalmente de intercambio catiónico suelo-planta. Sin embargo, debido a esa gran capacidad de adsorción, si el suelo posee un elevado porcentaje de arcillas, puede adsorber cantidades de agua que lo saturen, ocupando todo el espacios entre partículas o microporos y cuando el suelo está saturado de agua, el aire no puede circular a través de los espacios microporosos, lo que hace que al suelo en el que predominan las arcillas –suelo argílico-, se le caracterice por su pobre drenaje y aireación.

4.3 Arcillas.

Las arcillas son un conjunto de minerales de origen secundario, formado en el proceso de alteración química de las rocas, poseen un tamaño coloidal, con estructura cristalina bien definida y un gran desarrollo superficial, con propiedades fisico-químicas responsables en gran parte de la actividad fisicoquímica del suelo.

Desde el punto de vista químico, una arcilla constituye el componente más importante de la fracción mineral del suelo, ya que está constituida por partículas cargadas capaces de interactuar con los líquidos en el suelo.

Los minerales clásicos de una arcilla son los aluminosilicatos, comúnmente constituidos por Si, Al y O, además de otros elementos, como Na, K, Ca, Mg, Fe, etc. Desde la antigüedad se sabía que algunos componentes del suelo son capaces de intercambiar iones. En 1929, mediante la aplicación de técnicas de rayos X, Grim y Holding determinaron la naturaleza cristalina de las arcillas.

4.3.1 Estructura de las arcillas

Los silicatos están constituidos por una unidad estructural común, un tetraedro de coordinación Si-O. El silicio situado en el centro del tetraedro de coordinación y rodeado de 4 oxígenos situados en los vértices. Este grupo tetraédrico se encuentra descompensado

eléctricamente $(\text{SiO}_4)^{4-}$, por lo que los oxígenos se coordinan a otros cationes para compensar sus cargas.¹⁷ Dependiendo del número de oxígenos que se coordinen a otros silicios se originan los grandes grupos de silicatos (es decir, según el número de vértices compartidos por tetraedros, que pueden ser 0, 1, 2, 3, y 4 (Tabla 4.3.1. Tipos de silicatos). Es así, como los tetraedros pueden unirse por la base para formar hexaedros. De este modo, la fórmula general de las arcillas podría ser la siguiente: $(\text{Si}_x \text{O}_y)$.

Tabla 4.3.1. Tipos de silicatos.

Número de átomos de oxígeno compartidos por cada tetraedro	Tipo de agrupamiento de los tetraedros	Nombre del gran grupo de silicato
0	Aislados	Nesosilicatos
1	Parejas	Sorosilicatos
2	Anillos	Ciclosilicatos
2 y 3	Cadenas	Inosilicatos
3	Planos	Filosilicatos
4	Tridimensionales	Tectosilicatos

Dependiendo de la coordinación de los otros oxígenos que se unen a otros cationes distintos del silicio se forman los diferentes minerales dentro de cada gran grupo de silicatos. La estructura de estos minerales se origina por repetición de una celdilla unidad, constituida por la asociación de tetraedros (aislados, o parejas, etc) y por los cationes que se sitúan entre los grupos tetraédricos.

Desde el punto de vista edáfico el gran grupo de los filosilicatos es la clase más importante, ya que a este grupo pertenecen la mayoría de los minerales de la fracción arcilla. Estos están constituidos por el agrupamiento de los tetraedros compartiendo entre sí tres vértices (los tres del plano basal) formando planos, como se observa en la Figura 4.3.1. El cuarto vértice (el vértice superior) se une a un catión de coordinación octaédrica. Generalmente el catión octaédrico es Al (capa dioctaédrica) o Mg (capa llamada trioctaédrica).¹⁸

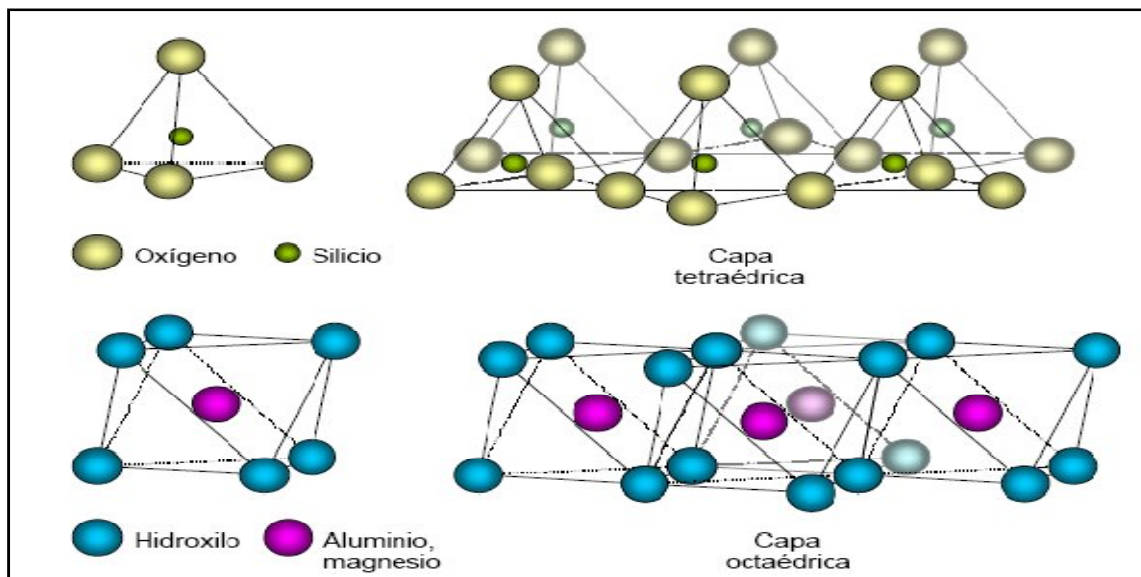


Figura 4.3.1. Estructura de las arcilla.

De esta manera la estructura de estos minerales está formada por un apilamiento de capas de tetraedros y octaedros, formando estructuras laminares. Las capas se unen mediante oxígenos compartidos. Se trata, por lo tanto de capas íntimamente unidas y difíciles de separar. Las capas pueden ser de dos tipos las fijas o no expandibles, las cuales no absorben agua ni nutrientes y las móviles o expandibles que al contrario de las primeras si absorben agua y nutrientes.

Según el modelo de repetición se forman dos tipos de láminas con diferentes estructuras¹⁰:

- La 1:1 con una capa de tetraedros y otra de octaedros, y
- La 2:1 con dos capas de tetraedros que engloban a una de octaedros.

Las capas de tetraedros y octaedros no están aisladas sino que comparten planos comunes en los que los oxígenos están unidos simultáneamente a un Si tetraédrico y a un Mg o Al octaédricos. En las capas tetraédricas y octaédricas se producen sustituciones entre cationes que cuando son de distinta valencia crean déficit de carga y para compensarlos son atraídos otros cationes que se introducen entre las láminas, son los llamados cationes interlaminares. Este es el mecanismo que permite a los silicatos tener características superficiales únicas de acidez e intercambio iónico, tales que a estas se deben las propiedades catalíticas de las arcillas.

Dependiendo del déficit que se origine, de donde se produzca (capa tetraédrica u octaédrica) y de los cationes interlaminares atraídos, aparecen las distintas especies minerales: caolinitas, serpentinas, micas (moscovita, biotita, ilita), esmectitas (montmorillonita), vermiculita, bentonitas, clorita, sepiolita y vermiculita, principalmente.

4.3.2 Clasificación de las arcillas.

En base a las características citas anteriormente como es posible estable una clasificación de las arcillas tal como se resume en la Tabla 4.3.2.

Tabla 4.3.2 Clasificación de las arcillas.

Grupo de arcillas	Formación Mg ²⁺ / Al ³⁺	Formación Si ⁴⁺ / Al ³⁺	Cationes Interlaminares
Grupo Caolín (Caolinita, Nacrita, Anauxita, etc.)	Trioctaedral	1:1 Si - Al (Isoeléctricas)	Alta en magnesio Bajo en potasio
Grupo Zeolitas (Clinoptilolitas, Aragonitas, etc.)	Tectosilicatos / Dioctaedral	1:2 Si - Al - Al (Polar, Expandible)	Alto en calcio y/o sodio
Grupo Montmorillonitas (Esméctica, Bentonitas, Beidelita, etc.)	Dioctaedral	2:1 Si - Al - Si (Polar, Expandible)	Alto en calcio y/o sodio
Grupo Micas – Hidratadas (Sepiolitas, Vermiculitas, Atapulguita)	Dioctaedral Y/O Trioctaedral	2:1 Si - Al - Si (Polar y/o Dipolares) (Expandible)	Alto en potasio Bajo en magnesio
Grupo Micas– No Hidratadas (Iltas, Cloritas)	Trioctaedral	2:1:1 Si - Al - Si - Al (Dipolares, No expandible)	Alto en magnesio Bajo en potasio

4.4 Técnicas comúnmente empleadas para la caracterización de minerales aluminosilícicos.

La caracterización fisicoquímica de los sólidos empleados en la catálisis heterogénea requiere de la aplicación de diversas técnicas analíticas, entre ellas se encuentran los rayos X, fluorescencia de rayos-X, isothermas de BET, la resonancia magnética nuclear, el análisis térmico en la modalidad de DSC y DTG, microscopia de barrido electrónico y por último pero no menos importante, la espectrofotometría de absorción en el infrarrojo. A continuación en la Tabla 4.4.1, se muestra de manera resumida, el principio de cada una de las técnicas empleadas así como los parámetros y propiedades que se pueden determinar.

Tabla 4.4.1 Técnicas de caracterización de minerales aluminosilícicos.

Técnica	Principio	Parámetro o propiedad determinada.
DRX	La dispersión coherente del haz de rayos X por parte de la materia y en la interferencia constructiva de las ondas que están en fase y que se dispersan en determinadas direcciones del espacio ¹⁹ , formando un ángulo θ . Puede describirse con la Ley de Bragg.	Grado de cristalinidad, identificación de las fases cristalinas (minerales) y el tamaño de las partículas metálicas.
FRX	La excitación y emisión de electrones de las capas internas del átomo al ser bombardeadas por un haz de electrones o fotones de rayos- X. ²⁰	Composición elemental de la muestra.
BET	La adsorción como un fenómeno físico, en multicapas y que las fuerzas de interacción entre las moléculas del gas son iguales a las fuerzas responsables de la condensación del vapor. ²¹	Área superficial específica de un sólido, volumen de macroporo y microporo, diámetro promedio de los poros.
RMN	Para sustancias en estado sólido. La diferencia de energía (ΔE) entre los estados de espín alfa y beta, esto sólo para elementos con núcleos atómicos magnéticamente activos, es decir poseen espín, igual que los electrones (número impar de protones o neutrones). ²²	Determinar la presencia de núcleos específicos como ²⁷ Al y ²⁹ Si en arcillas y minerales.

DSC	La diferencia del flujo de calor entre una muestra y una referencia, en función de la temperatura, al existir una transformación física por parte de la primera. ²³ Esta se detecta en forma de pico.	Cambios de fase (ej. transiciones vítreas), información sobre capacidad calorífica (Cp), temperatura de transición vítrea (Tg), temperatura de cristalización (Tc), energía latente de cristalización, temperatura de fusión (Tm).
TGA	La medición de la variación de la masa de una muestra cuando se la somete a un cambio de temperatura en una atmósfera controlada. ²⁴	Pérdida o ganancia de masa debida a la descomposición o reacción con otros componentes respectivamente.
MEB	La emisión de electrones secundarios con energías de pocas decenas de eV por parte de la muestra, y los electrones del haz incidente que interactúan con la muestra (alta energía) y son reflejados al exterior de nuevo ²⁵ . Con la finalidad de formar una imagen.	Permite la observación y caracterización superficial de materiales inorgánicos y orgánicos, entregando información morfológica del material analizado.
EAI	La interacción de las moléculas con la radiación ($\geq 7800\text{\AA}$) y en las moléculas de piridina absorbidas en la superficie del catalizador ²⁶ .	Determinación de sitios de ácidos de Brønsted-Löwry o Lewis

4.5 Química verde.

La química verde²⁷⁻²⁹ es una vía de aproximación a la sostenibilidad; respetando como parte de las leyes del equilibrio químico, el equilibrio de los ecosistemas. Es por ello que se puede establecer también que es el uso de principios químicos y metodologías que disminuyan las fuentes de degradación y contaminación del medio ambiente, siendo así la forma más conveniente de prevenirlas.

Es decir, la química verde es la utilización de un conjunto de principios que reducen o elimina el uso o generación de sustancias peligrosas en el diseño, manufactura y aplicación de los productos químicos,³ con el propósito de minimizar el impacto negativo en el medio ambiente. A continuación se describen brevemente los doce principios en los que ésta se basa.

1. Prevención de desechos.
2. Economía atómica.
3. Síntesis químicas menos peligrosas.

4. Diseño de productos eficaces y no tóxicos.
5. Eliminar el uso de sustancias auxiliares (ej. disolventes, agentes de separación).
6. Diseño para lograr una eficiencia energética (síntesis a temperatura y presión ambiente).
7. Uso de materias primas renovables.
8. Evitar el uso de derivados.
9. Uso de catalizadores tan selectivos como sea posible.
10. Diseño de productos degradables.
11. Análisis de procesos en tiempo real (monitoreo y control).
12. Uso de sustancias que disminuyan el riesgo de accidentes.

4.6 Fuentes alternas para la activación de una reacción.

Uno de los puntos clave de la química verde, es el uso de condiciones de reacción que permitan una mayor eficiencia energética, para lo cual se ha propuesto el uso de fuentes alternas de activación con respecto al tratamiento térmico tradicional, tales como las microondas y el infrarrojo. Esto debido a las ventajas que ambas presentan en su uso, tales como: brindar condiciones más eficientes de reacción, disminuir los tiempos de reacción, mejorar rendimientos y realizar las reacciones regularmente de forma más limpia.

Infrarrojo: la región del infrarrojo (del latín *infra*, debajo del rojo) del espectro electromagnético, corresponde a frecuencias que van desde valores del extremo rojo del espectro visible, hasta la región de las microondas, es decir en longitudes de onda comprendidas entre 0.7 y 500 μm , equivalentes a un número de onda entre 14000 y 20 cm^{-1} .

La absorción del infrarrojo tiene su origen en las vibraciones moleculares, dado que las moléculas no son asociaciones rígidas de átomos, por lo que los átomos unidos por un enlace de constante de fuerza k están en continuo movimiento vibratorio sobre sus posiciones de equilibrio, lo que determina el nivel de energía de vibracional de una molécula; misma que cambia con la temperatura. Sin embargo, para que una molécula pueda absorber este tipo de radiación debe experimentar un cambio neto en el momento dipolar, como consecuencia de su movimiento vibracional y rotacional.³⁰ Se sabe además,

que una excitación intensa en la región del infrarrojo, puede producir ruptura de enlaces químicos.³¹

Microondas: Son radiaciones electromagnéticas no ionizantes que causan movimiento molecular por migración de los iones y rotación de los dipolos, su intervalo de frecuencia es del orden de 300-30,000 MHz lo cual en términos de longitud de onda es de $1-10^2$ m.

En un horno de microondas convencional, el campo electromagnético generado mueve literalmente las moléculas de agua, orientándolas en una dirección determinada, posteriormente el campo eléctrico se invierte rápidamente, con lo que todas las moléculas de agua cambian su posición (rotan), esto se lleva a cabo a razón de 2,500 millones de veces por segundo, lo que produce calor por la agitación molecular (el calor está directamente relacionado con la vibración o agitación molecular). Por tanto, los materiales se calientan por excitación de las moléculas de agua, que se están moviendo, girando sobre sí mismas, a gran velocidad.

4.7 Catálisis.

El término de catálisis fue introducido por Berzelius en 1836, al tratar de describir una “fuerza” que dirigía una reacción química, que en presencia de ciertas sustancias aparentemente no tomaban parte de ella. Sin embargo, ya se conocían estudios de descomposición catalítica anteriores a la definición.

Las grandes aplicaciones industriales coinciden con el desarrollo de estudios sistemáticos de estos fenómenos, siendo así que en nuestros días estos materiales catalíticos son parte medular de los procesos químicos aplicados a gran escala.

Cabe mencionar que existen dos tipos de catálisis, las cuales se definirán a continuación:

- Homogénea: Es cuando el catalizador se encuentra en el mismo estado físico que el de los elementos reaccionantes.
- Heterogénea: En este tipo de catálisis el catalizador se encuentra en un estado físico diferente al de los elementos reaccionantes, teniendo así interacciones entre estos pueden ser gas-sólido, líquido- sólido y gas líquido. La mayoría de los catalizadores son sólidos por lo cual la reacción ocurre en la superficie del catalizador contribuyendo a la especificidad química, siendo así que los sólidos producen

diferentes velocidades de reacción y dan origen a la producción de diferentes productos.

4.7.1 Definición de catalizador.

Según Ostwald (1902), un catalizador es *toda sustancia que altera la rapidez de una reacción química sin aparecer en los productos finales*³², sin embargo esta definición excluye el caso de reacciones autocatalíticas, donde uno de los productos actúa a su vez como un catalizador, por lo cual es necesario establecer una definición mas general que implique dichas reacciones; actualmente se reúnen en el término catálisis a todos los procedimientos que usan luz y calor, etc., que aceleran u orientan una reacción sin modificar su estequiometría.

Igualmente es necesario contar con una definición de catalizador que excluya la alteración de la rapidez de reacción producida por los inhibidores, debido a que el término catálisis en sentido negativo, no tiene sentido. Por lo tanto se tomará como catalizador a *una sustancia que acelera u orienta una reacción química*.³³

4.7.2 Características de un catalizador.

Dentro de las propiedades con las que cuenta un catalizador son:³⁴

1. Hacen variar la velocidades de reacción pero no se alteran y pueden recuperarse sin cambio al final de la reacción.
2. No alteran la posición de equilibrio de una reacción.
3. Aumentan las velocidades de reacción hacia la derecha y a la izquierda en forma proporcional.
4. Actúan dando una ruta de reacción alterna y menor energía de activación.

Sin embargo, para que una sustancia sea considerada como un buen catalizador, ésta debe contar con tres características primordiales que son: actividad, selectividad y estabilidad.^{35,36}

Actividad: permite el aumento de la velocidad en una reacción con respecto a la velocidad obtenida sin catalizador, esto en las mismas condiciones de reacción (presión, temperatura, etc.), es decir; es la capacidad de generar en un tiempo razonable, una cantidad importante de producto por unidad de masa del catalizador.

Selectividad: es la propiedad que tiene un catalizador al favorecer el mayor rendimiento de determinada especie entre un conjunto de productos de reacción; algunos reactivos, especialmente los de naturaleza orgánica, dan origen a reacciones paralelas o sucesivas que permiten obtener una mezcla de productos, cuya separación no se lleva a cabo, generalmente, de forma sencilla o económica, por ende una elevada selectividad da un buen rendimiento del producto de interés y reduce así la formación de subproductos.

Estabilidad: ésta puede ser expresada como la vida útil del catalizador y es considerada como la propiedad del catalizador de mantener sus características originales con el paso del tiempo (actividad, selectividad, etc.), durante un periodo de tiempo suficiente para aplicarlo a nivel industrial. Las características del catalizador se modifican debido a los cambios físicos y químicos que ocurren durante la reacción.

4.7.3 Mecanismo general de la acción catalítica.

La catálisis involucra una serie de interacciones fisicoquímicas entre los reactivos y el catalizador, de esta manera se tiene un nuevo camino de la reacción, el cual está compuesto por una serie de reacciones elementales. Esta trayectoria de reacción es a menudo más compleja, sin embargo la suma de energías de activación de los pasos elementales de la reacción catalítica, es inferior a la energía de activación que se requiere para llevar a cabo la reacción no catalizada, como se muestra en la Figura 4.4.3.1.

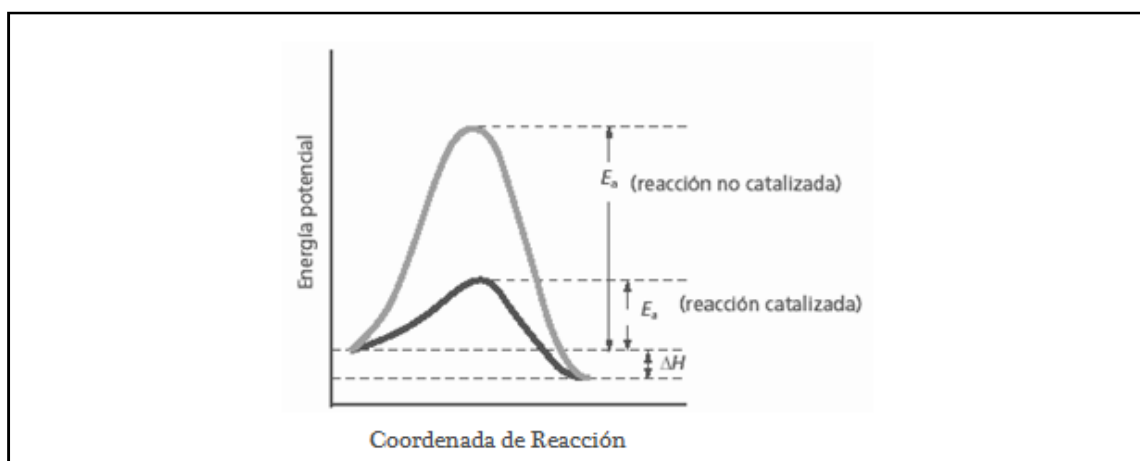


Figura 4.4.3.1. Variación en la energía de activación al usar un catalizador.

En efecto, la acción catalítica es siempre explicable por medio de un mecanismo de reacción complejo: el catalizador interviene en al menos dos etapas, en donde se combina y regenera sucesivamente, cabe mencionar que la etapa intermedia más lenta impone su valor de rapidez al proceso global.

4.8 Benciltoluenos y dibenciltoluenos.

Los benciltoluenos como se muestra en la Figura 4.9.1, son compuestos químicos que presentan la siguiente composición $C_{14}H_{14}$, con un peso molecular de 182.27 g/mol, 92.96% C, 7.74% H, estos pertenecen al grupo de los arilmetanos, compuestos que forman agujas prismáticas incoloras, con un olor herbáceo reminiscente de las hojas de geranio, son solubles en alcohol, éter y cloroformo.

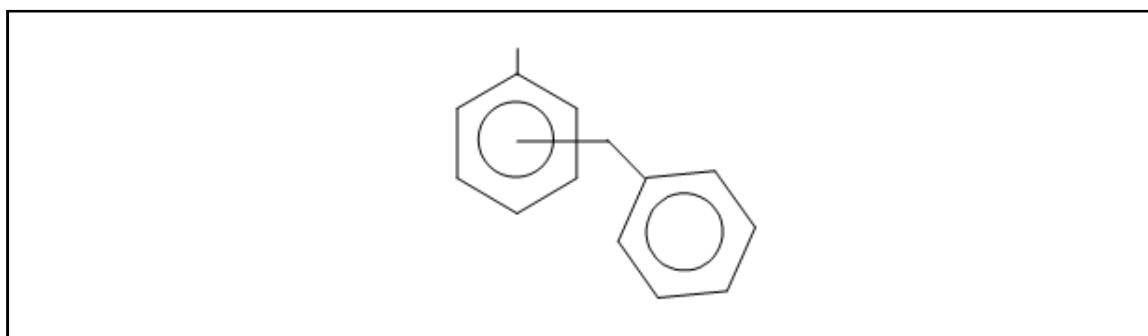


Figura 4.9.1. Estructura de los benciltoluenos.

Estos son productos de gran valor comercial por sus aplicaciones como herbicidas, bactericidas, insecticidas, pesticidas, plasticidas, se usan en la producción de jabones, como aditivos para combustibles de aviones, como materia prima para la obtención de antraquinonas, poliuretanos y benzofenonas, así como fluidos dieléctricos en sistemas eléctricos como los transformadores;³⁷⁻⁴¹ que ayudan a la disminución del consumo energético.

Los dibenciltoluenos como se muestra en la Figura 4.9.2 son compuestos químicos que presentan una composición $C_{21}H_{20}$, con un peso molecular de 272.3827 g/mol, 92.59% C, 7.41% H, también son solubles en alcohol, éter y cloroformo.

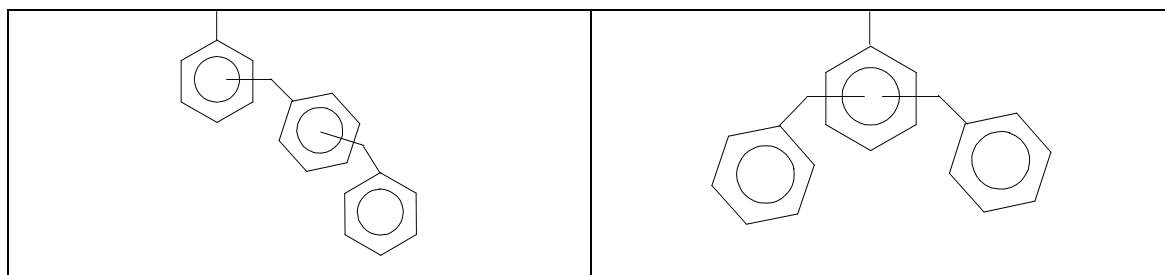


Figura 4.9.2. Estructura molecular de los dibenciltoluenos.

Para llevar a cabo la obtención de los benciltoluenos y dibenciltoluenos se efectúa una alquilación de Friedel Crafts, consistente en una sustitución electrofílica aromática⁴² que permite añadir cadenas carbonadas al anillo aromático. Los reactivos son haloalcanos en presencia de un ácido de Lewis, que interacciona con el grupo saliente, catalizando la reacción. Ésta consiste en la unión de un grupo alquilo al anillo del benceno, la primera alquilación favorece la segunda reacción de sustitución, es decir se genera una polialquilación. En este trabajo y mediante el estudio de una reacción de alquilación de Friedel Crafts, se busca determinar las propiedades catalíticas de este suelo y así contribuir al conocimiento y mejor utilización de los recursos naturales de México, cuyo deterioro y contaminación impactan gravemente a la salud y economía pública.

5. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA.

En México existen una gran diversidad de suelos, muchos de los cuales han sido recolectados y estudiados desde un punto de vista edafológico, por el INEGI, institución que ha logrado recabar gran cantidad de información edafológica al respecto, así como ponerla a disposición del usuario con fines prácticos, que van desde su clasificación hasta la aplicación de los mismos en diversos aspectos. Sin embargo, la información obtenida de dichos estudios, no incluye la caracterización fisicoquímica de las arcillas presentes en los suelos del País.

Por tal motivo, por medio de un estudio fisicoquímico se pretende caracterizar un suelo originario de Ciudad Delicias, con el objetivo de obtener información mineralógica detallada del mismo y a su vez, determinar sus propiedades catalíticas, mediante el seguimiento de una reacción de alquilación de Friedel Crafts en la que este suelo será empleado como catalizador.

Lo anterior con la finalidad de contribuir al acervo de la química verde al hacer uso de catalizadores naturales, que causan un nulo o bajo impacto ambiental; así como promover la sostenibilidad de los procesos al emplear recursos de bajo costo. Además de llevar a cabo una aportación en el conocimiento de los recursos naturales mexicanos y de tal manera dar solución al problema antes descrito.

6. HIPÓTESIS.

La catálisis heterogénea ha demostrado ser una alternativa que permite tener buenos resultados en la síntesis de compuestos a nivel docente e industrial, dando como resultado una disminución en el impacto ambiental; sin embargo, la mayoría de los catalizadores empleados son sintéticos y considerados como agentes contaminantes.

En base a lo anterior, varios equipos de trabajo se han inclinado por el estudio de diferentes suelos que dado a sus propiedades, pueden ser considerados como catalizadores naturales.

Dado a lo anterior si se lleva a cabo el estudio fisicoquímico de un suelo originario de Ciudad Delicias, Chihuahua y se caracteriza y evalúan las propiedades fisicoquímicas y catalíticas de éste, será factible proponerlo como un nuevo catalizador.

7. OBJETIVOS.

7.1 General.

Realizar un estudio interdisciplinario que no sólo contribuya al acervo de la química verde, mediante el estudio y caracterización de la muestra de un suelo de Ciudad Delicias, Chihuahua; sino que de forma complementaria, explore su posible poder catalítico, como una vía de avanzar en los hechos, hacia una química que busca acercarse a la sostenibilidad.

7.2 Particulares.

- Determinar la composición de los minerales presentes en la muestra, mediante la técnica de difracción de rayos-X por el método de polvos.⁵
- Encontrar la composición elemental por medio del análisis de fluorescencia de rayos X.⁶
- Evaluar mediante las isothermas de adsorción-desorción de N₂ líquido a 73 K, la superficie activa de la muestra, es decir los parámetros superficiales específicos.⁵
- Establecer el ambiente químico de los núcleos de ²⁷Al y ²⁹Si, con ayuda de la resonancia magnética nuclear mediante el método de ángulo mágico.⁶
- Determinar la estabilidad térmica de los materiales mediante el análisis térmico por los métodos de DSC y TGA.
- Analizar la textura de la muestra de suelo⁷ mediante un estudio de microscopía de barrido electrónico.
- Evaluar la acidez Lewis y/o Brønsted-Lowry mediante espectrofotometría de absorción infrarroja en presencia de piridina.
- Estimar la actividad catalítica del suelo al llevar a cabo una reacción de alquilación de Friedel Crafts⁸.
- Obtener los porcentajes de formación de los productos de la reacción catalizada mediante espectrometría de masas y cromatografía de gases.¹⁰
- Determinar los parámetros mediante el estudio cinético con los resultados obtenidos en la experimentación.

8. EXPERIMENTAL.

En este apartado se señala la ubicación de donde fue tomada la muestra del suelo de Ciudad Delicias, Chihuahua, así como la metodología empleada, el equipo y condiciones experimentales para cada una de las técnicas utilizadas en la caracterización de la misma

8.1 Descripción del sitio de muestreo.

La muestra de suelo, corresponde a un perfil que se encuentra ubicado en una llanura aluvial salina de origen cuaternario en la zona norte del país, 150 km. al sureste de la ciudad de Chihuahua y 11 km. al noroeste de la ciudad de el Gigante, Chihuahua: longitud: 2243485.98528 y latitud 1776867.48250; los parámetros de referencia espacial fueron obtenidos para una proyección cónica conforme Lambert y en datum NAD 27.

La zona corresponde a un clima muy seco (tipo BWhw) con intensa radiación solar y escasos 300 mm. de precipitación pluvial anual que favorecen el desarrollo de arcillas esmectíticas y la presencia de carbonatos precipitados en grietas con estructura muy dura. La vegetación común presente es pastizal halófilo.

El perfil de terreno tiene 117 cm. de profundidad, presenta un horizonte superficial (0 a 23 cm.) de textura franca, consistencia firme y que está bien diferenciado del horizonte subsuperficial (23 a 117cm) que es más arcilloso, duro y adhesivo. En toda la profundidad del suelo permanece el color pardo rojizo y la acumulación importante de carbonatos (reacción fuerte al ácido clorhídrico). Presenta una C. I. C. T baja (valores de 28.4 a 29.4 m. e. q./100 gr.)

Desde el punto de vista agrícola, se trata de un suelo libre de salinidad pero con acumulaciones importantes de sodio, con pH entre 8.3 y 8.4, apenas abajo del límite de clasificación como fuertemente alcalino, con bajo contenido de carbón orgánico (0.3% en promedio) y que a partir de los 23 y hasta los 117 cm. contiene por lo menos 23% de carbonatos, los cuales amortiguan el exceso de sodio. Su clave es de una clasificación WRB de Vertisol grumi-cálcico.

8.2 Metodología.

La metodología empleada para la caracterización de la muestra fue la siguiente:

1. La recolección de la muestra la realizó el Instituto Nacional de Estadística Geográfica e Informática INEGI, en el sitio de muestreo antes descrito.
2. La determinación de la composición de la muestra, se efectuó mediante difracción de rayos-X por el método de polvos²¹ para ello se utilizó un equipo de la marca Philips modelo Kristaloflex 5000, con radiación de $\text{CuK}\alpha$, filtro de Níquel y radiación 1.514 Å.
3. El establecimiento de la composición elemental se llevó a cabo por medio del respectivo análisis de fluorescencia de rayos X,²³ para lo cual se implementó un equipo de la marca Nortec, acoplado a un microscopio electrónico, operado a un voltaje de aceleración de 20 kV, con muestra sin pulir ni recubrimiento y un tiempo de exposición de 50 s.
4. Se obtuvieron las isotermas de adsorción-desorción de N_2 líquido a 73 K, se llevó a cabo en un equipo de la Micrometrics modelo 200 con la finalidad de determinar la superficie activa de la muestra y los siguientes parámetros superficiales específicos:²¹
 - Área superficial específica m^2/g .
 - Volumen de microporo y macroporo cm^3/g .
 - Diámetro de microporo promedio Å.
5. La resonancia magnética nuclear mediante el método del ángulo mágico, se realizó con la finalidad de determinar la presencia de núcleos de ^{27}Al y ^{29}Si , así como de sus ambientes químicos de cada uno, por lo cual se usó un equipo de la marca Varian modelo Mercury 300 con una sonda de CP-MAS de 4 mm en un espectrómetro Bruker modelos ASX300 operando a 78.19 MHz para el caso del ^{27}Al y de 56.6 MHz para el ^{29}Si , aplicando un campo magnético externo de 7.4 Teslas. La obtención de las áreas de las señales fue mediante el método de integración de Guassianas-Lorenzianas.²⁹

6. El análisis térmico se llevó a cabo con el objetivo de determinar los cambios de fase y la cantidad de material volátil que contienen la muestra del suelo mediante:²¹
 - Calorimetría Diferencial de Barrido (DSC) con la cual se determinó la combustión o descomposición de material orgánico, esto con ayuda de un equipo de la marca TA Instruments modelo 2050.
 - Análisis Térmico Gravimétrico (TGA), mediante el que se obtuvo la temperatura a la que se lleva a cabo una combustión o evaporación de sustancias volátiles, en esta ocasión con un equipo de la misma marca pero del modelo 2010.
7. Con microscopia de barrido electrónico se estableció la textura de la muestra de suelo⁴³ lo anterior se realizó en un Microscopio de barrido JEOL modelo JSM-25SII, por esta razón fue necesario el recubrimiento de la muestra como la técnica lo especifica por lo cual se evapora oro o carbón para hacer que la superficie de la muestra conduzca electrones, esto se realizó con el equipo de la marca JEOL modelo FINE COAT ION SPUTTER JFC-1100.
8. En la espectrofotometría de absorción infrarroja en presencia de piridina, se realizó primeramente una pastilla de 27 mg con los polvos de la muestra. Dicho estudio se efectuó a temperatura ambiente y consecutivamente desgasificado en vacío a diferentes temperaturas. Para el tratamiento de la muestra antes de la adsorción se mantuvo a la misma en una atmósfera de oxígeno a la temperatura de 350 °C, durante un periodo de 18 horas y posteriormente en vacío manteniendo la misma temperatura durante una hora. Después se enfrió la muestra para poder realizar así la adsorción. Lo anterior se llevó a cabo en un equipo de la marca FTIR Magna 760 con una resolución de 4 cm⁻¹ y 100 barridos por espectro.
9. Se realizó una reacción de Friedel-Crafts, Figura 8.2.1, con el uso de los reactivos de cloruro de bencilo y tolueno⁴ en una proporción de 1:10, en cantidades de 0.23 mL y 2.3 mL respectivamente, esto con la finalidad de que el tolueno intervenga como reactivo y disolvente, en presencia de 50 mg de muestra del suelo como catalizador. Dicha reacción se llevó a cabo a microescala (volúmenes menores a los

5ml) y se implementaron diferentes métodos de activación⁴⁴ bajo las condiciones que se muestran en la Tabla 8.2:

Tabla 8.2 Condiciones de operación para la obtención de los benciltoluenos y dibenciltoluenos.

Fuente de Activación	Recipiente	Tiempo de operación.	Recursos Extra
Microondas	Microreactor de vidrio 50 mL.	0-10 min.	Ninguno.
Infrarrojo	Matraz de 50 mL.	0-17 min.	Reflujo.
Tratamiento térmico	Matraz de 50 mL.	0-20 min.	Agitación y reflujo.

Lo anterior con la finalidad de establecer el poder catalítico del la muestra de suelo así como la mejor forma de activación cuando se emplea este material como catalizador.

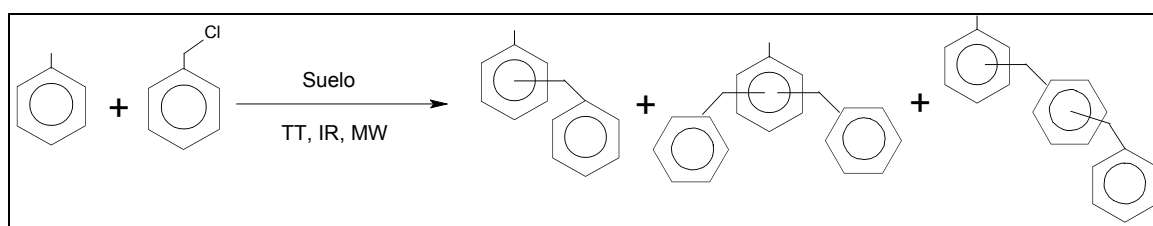


Figura 8.2.1. Reacción de Friedel Crafts.

La reacción se llevo a cabo utilizando fuentes alternas de activación por lo cual se implementaron los siguientes equipos:

- Microondas de la marca SHARP modelo No. R-405K5, con un voltaje de 120 V, frecuencia de 60Hz y una potencia de 1000 W.
- Dispositivo de infrarrojo, diseñado en la FES Cuautitlán el cual cuenta con un cilindro de aluminio, provisto con una lámpara de infrarrojo marca OSRAM, con un voltaje de 125 V, corriente de 100 A y una potencia de 100 W.
- Dispositivo de tratamiento térmico (mantilla de calentamiento) de la marca SEVE, con un voltaje de 127 V, frecuencia 60 Hz, corriente de 137 A y una potencia de 171 W.

10. Al término de la reacción, se separó el suelo de los productos por medio de una filtración por gravedad.

11. El seguimiento de la reacción se llevó a cabo mediante cromatografía de capa fina, para lo cual se utilizó un sistema hexano-acetato de etilo (80:20) y como reveladores una lámpara de ultravioleta y sulfato de cerio II (CeSO_4).
12. La cuantificación y caracterización de los productos obtenidos durante la reacción se realizó por medio de cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas.⁴⁵
13. Por último, se efectuó un estudio cinético de los resultados obtenidos para la determinar el orden de reacción.

9. RESULTADOS Y DISCUSIÓN.

En este apartado se muestran las diferentes técnicas analíticas empleadas en la caracterización de la muestra de Ciudad Delicias, Chihuahua; mismas que en conjunto dan como resultado un estudio más completo del dicho suelo. Además de realizar un análisis de la información brindada por cada una de las técnicas, con el propósito de complementar y tener una mejor interpretación de los resultados.

9.1 Difracción de rayos-X.

La identificación de los minerales presentes en la muestra se realizó mediante difracción de rayos X, por el método de polvos. En el difractograma obtenido, Figura 9.1.1, se puede observar los minerales que se encuentran en la muestra así como la intensidad relativa de las líneas de difracción en función de las mismas, en la posición del ángulo 2θ , demuestra la presencia de las siguientes fases, cuarzo (SiO_2) con los valores de 2θ en: 43.4, 45.7, 50.1, 54.8, 59.9, 64.1, 67.8, 68.1, 73.5, 75.7, 79.9, calcita (CaCO_3): 39.4, 43.1, 47.8, 48.5, 56.6, 57.5, 60.8, 64.7, 69.1, 70.2, 77.3, siendo estos componentes los más abundantes.

Es necesario mencionar que en el mismo se presentan las fases en $2\theta = 14, 22.1, 24, 24.2, 28.3, 29.8, 34, 36, 67.8$, correspondiente a la albita ($\text{NaAlSi}_3\text{O}_8$); $20.8, 36.5, 40.3, 18, 29.6, 34.7, 52.4, 55.9, 61.2, 72.5$, pertenecientes al ulvoespinel (Fe_2TiO_4); $25.5, 29.3, 35.9, 37.9$; y $23.1, 31.3, 35, 43.3, 47, 52.4, 57.6, 61, 63.1, 66.4, 68.2, 72.9, 76.2$, que señalan la presencia de corindón (Al_2O_3). Una mayor información sobre cada uno de los minerales antes mencionados, se encuentra en el apéndice A de este trabajo.

De los minerales presentes se descartaron nepalina $\text{K}(\text{Na},\text{K})_3[\text{Al}_4\text{Si}_4\text{O}_{16}]$, anortita ($\text{CaAl}_2\text{Si}_2\text{O}_8$) y la moganita ($[\text{NR}] \text{SiO}_2$), debido a que la mayoría de los picos de sus fases en el ángulo 2θ , obtenidas del banco de datos, no se observan.

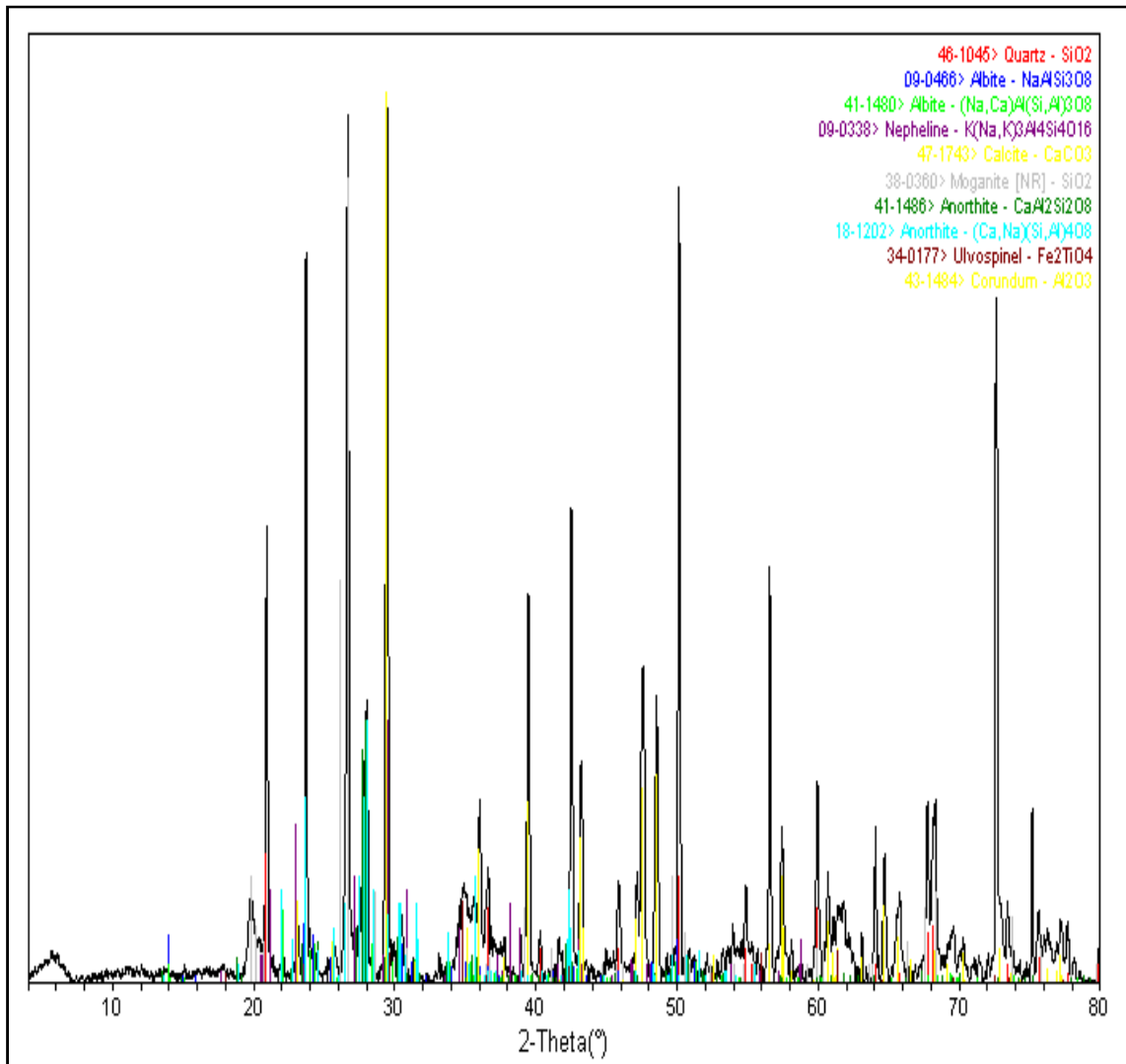


Figura 9.1.1. Patrón de difracción de rayos-X de la muestra H13-11, Delicias.

Al tomar en consideración las estructuras moleculares de los minerales determinados es posible observar que tanto el corindón como la albite tienen como componente a el aluminio, lo que les brinda un carácter de ácido de Lewis, lo que indica grandes posibilidades catalíticas; adicionalmente el ulvospinel cuenta con átomos de Fe y Ti que le brindan de igual manera características de ácido de Lewis, dando como resultado una mayor posibilidad de obtener buenos resultados en las propiedades catalíticas del suelo.

9.2 Fluorescencia de rayos X.

El análisis elemental de la muestra del suelo muestra, determinado por fluorescencia de rayos-X de la muestra de suelo, arrojó la siguiente composición química la cual se resume en la Tabla 9.2:

Tabla 9.2. Composición química de la muestra de suelo H13-11 Delicias.

Elemento	Concentración Aproximada	Intensidad	% Peso	% Desviación estándar del peso
O	20.35	0.7433	34.85	0.99
Na	1.75	0.9043	2.46	0.26
Mg	1.2	0.8007	1.91	0.22
Al	8.82	0.881	12.75	0.35
Si	22.31	0.8083	35.12	0.65
Cl	0.76	0.6703	1.44	0.2
K	2.87	0.9621	3.8	0.21
Ca	0.49	0.9259	0.67	0.17
Ti	0.51	0.8102	0.8	0.2
Fe	4.08	0.8382	6.2	0.38
Totales			100	

En base a los resultados obtenidos del análisis elemental obtenido mediante la técnica de fluorescencia de rayos X, Tabla 9.2, fue calculada la composición atómica de la muestra: $\text{Si}_{1.25}\text{Al}_{0.47}\text{O}_{2.18}$. Para ello, se tomaron en cuenta solo a aquellos elementos que tienen una concentración por encima del 10% en peso; dado que los demás átomos se encuentran en sitios interlaminares y son fácilmente intercambiables.

De esta manera es posible observar que los tres elementos más abundantes en la muestra son oxígeno, silicio y aluminio y en un cuarto lugar se encuentra el fierro, logrando así una concordancia con los resultados obtenidos anteriormente con la técnica de difracción de rayos-X, se encontraron minerales que contiene dichos elementos en tal proporción; confirmándose así una vez más las grandes posibilidades que tiene el suelo de ser considerado como un buen catalizador tipo ácido de Lewis.

9.3 Isotermas de adsorción-desorción (BET).

Mediante el uso de isotermas de adsorción-desorción de N₂ a 73 K, obtenidas para el material en cuestión, fue posible obtener los respectivos parámetros superficiales; los cuales se muestran de manera resumida en la Tabla 9.3.1, donde: S_g = área superficial específica (m²/g); V_g= volumen de microporos (cm³/g); V_m= volumen de macroporos (cm³/g); D = diámetro de poro promedio (Å).

Tabla 9.3.1 Parámetros superficiales.

Muestra	S _g (m ² /g)	V _g (cm ³ /g)	V _m (cm ³ /g)	D (Å)
Ciudad Delicias (H13-11)	59	0.07	0.56	50

En base a la información obtenida en la Tabla 9.3.1, es posible establecer la clasificación del suelo en cuestión, de acuerdo a su diámetro de poro de 50 Å, el cual corresponde a los mesoporosos que abarca un intervalo entre 20 y los 200 Å.

Además la presencia de macroporos en la muestra indica que el suelo tiene ciertas limitantes para la infiltración de los fluidos dentro del mismo, ya que estos pueden entrar en los macroporos de manera sencilla pero no se tiene buena retención de los mismos. Respecto a su área superficial cabe destacar que la muestra de suelo de Ciudad Delicias, tiene una superficie activa relativamente grande respecto a otros suelos, lo cual es característico de las arcillas, además de ser muy importante para ciertos usos industriales en los que la interacción sólido-fluido depende directamente de esta propiedad.⁴⁶ Es necesario mencionar también que esta propiedad está directamente relacionada, al igual que la porosidad, con las capacidades de absorción y adsorción.⁴⁷

Al establecer una comparación con otros suelos ya caracterizados que han sido evaluados como catalizadores, como lo muestra en la Tabla 9.3.2, es posible determinar que este suelo cuenta con un área superficial mayor que la que tiene la Montmorillonita Mexicana, lo mismo sucede con el volumen de los microporos; sin embargo, el diámetro del poro es considerablemente mucho menor. Por otra parte al establecer las diferencias entre el resto de los suelos y la muestra de Ciudad Delicias, Chihuahua, es posible percatarse de que sus

características son muy similares en lo que se refiere al área superficial y el diámetro de poro; a diferencia del volumen de poro que es menor para la muestra estudiada en este trabajo.

Lo anterior, es un indicador de la selectividad del suelo, al contar con un diámetro pequeño, se tiene que no cualquier molécula entrará en el microporo, lo cual ayudará a incrementar dicha propiedad. Por otra parte, se tiene que al tener un volumen de microporo no tan grande, la cantidad de moléculas del mismo tipo que pueden entrar en el mismo es menor que si se contara con un volumen mayor, como lo es en caso de los suelos de Sinaloa, Campeche y Veracruz.

Tabla 9.3.2. Comparación con otros suelos mexicanos.

Muestra	Sg (m ² /g)	Vg (cm ³ /g)	D (Å)
Ciudad Delicias (H13-11)	59	0.07	50
Suelo de Sinaloa ⁴⁸	70	0.18	79
Suelo de Campeche ⁴⁹	70	0.18	79
Suelo de Veracruz ⁵⁰	54	0.13	78
Montmorillonita Mexicana ⁵¹	23	0.0438	220

9.4 Resonancia magnética nuclear.

Al realizar los estudios de RMN, fue posible determinar los ambientes químicos para el núcleo de ²⁷Al encontrándose las bandas de 63, 61.172, 53.777 y 50 ppm, las cuales al encontrarse dentro del rango de 50 a 80 ppm representan a un sitio de forma tetraédrica es decir AlO₄, mientras que la banda de 14.318 al encontrarse en el rango de -10 a 20 ppm hace referencia a un sitio octaédrica AlO₈. , Mientras que la banda de 35 ppm se considera como ligeramente octaédrico.

Así como también del núcleo de ²⁹Si para el que se tienen las bandas de 9.13 y -176.136 ppm, que son bandas laterales características de este y las banda de -83.306 que es del tipo Q⁴(4Al) y -99.155 ppm que representa al tipo Q⁴(1Al).

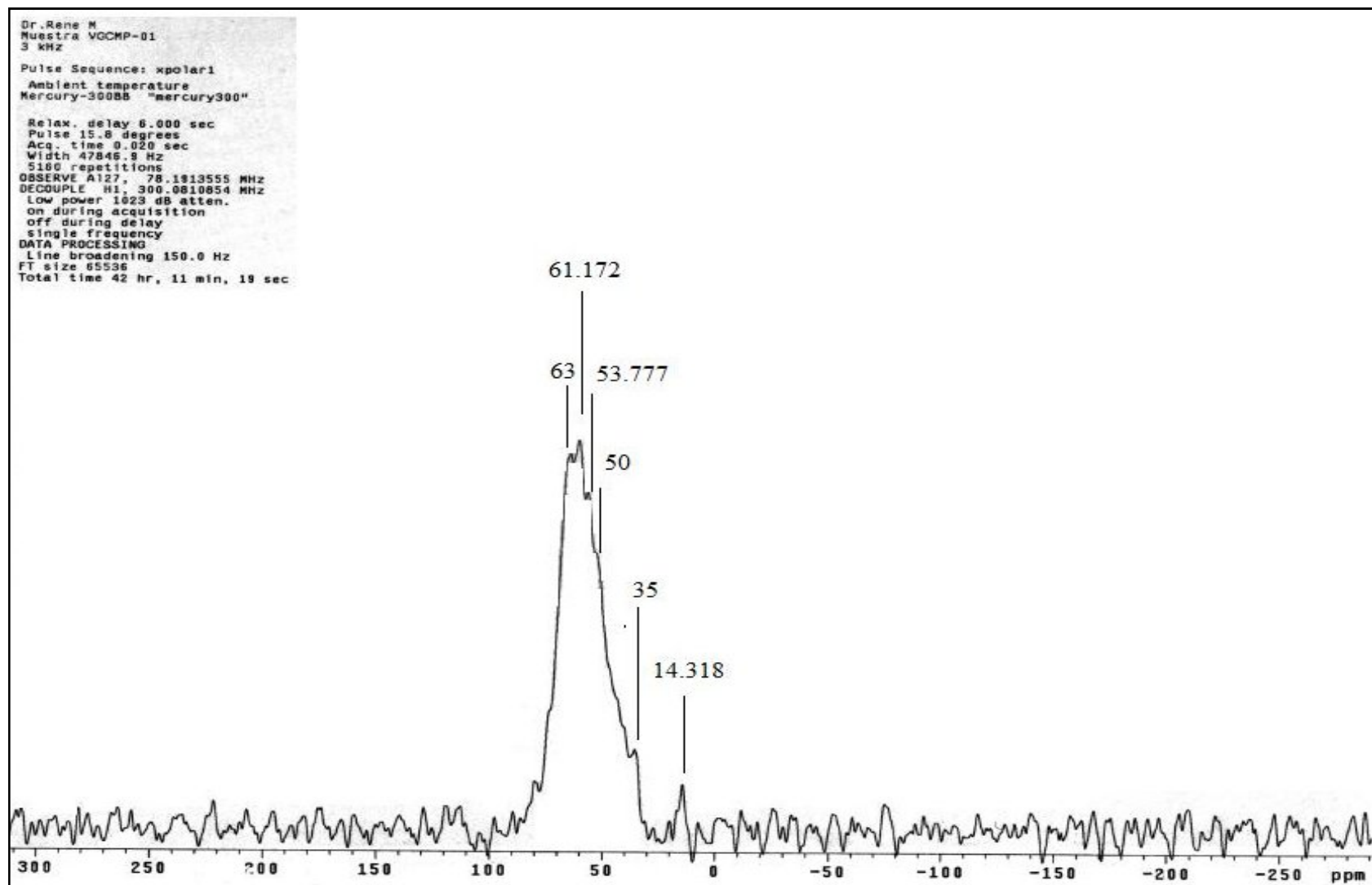


Figura No. 9.4.1. Espectro de resonancia magnética nuclear para núcleos de aluminio.

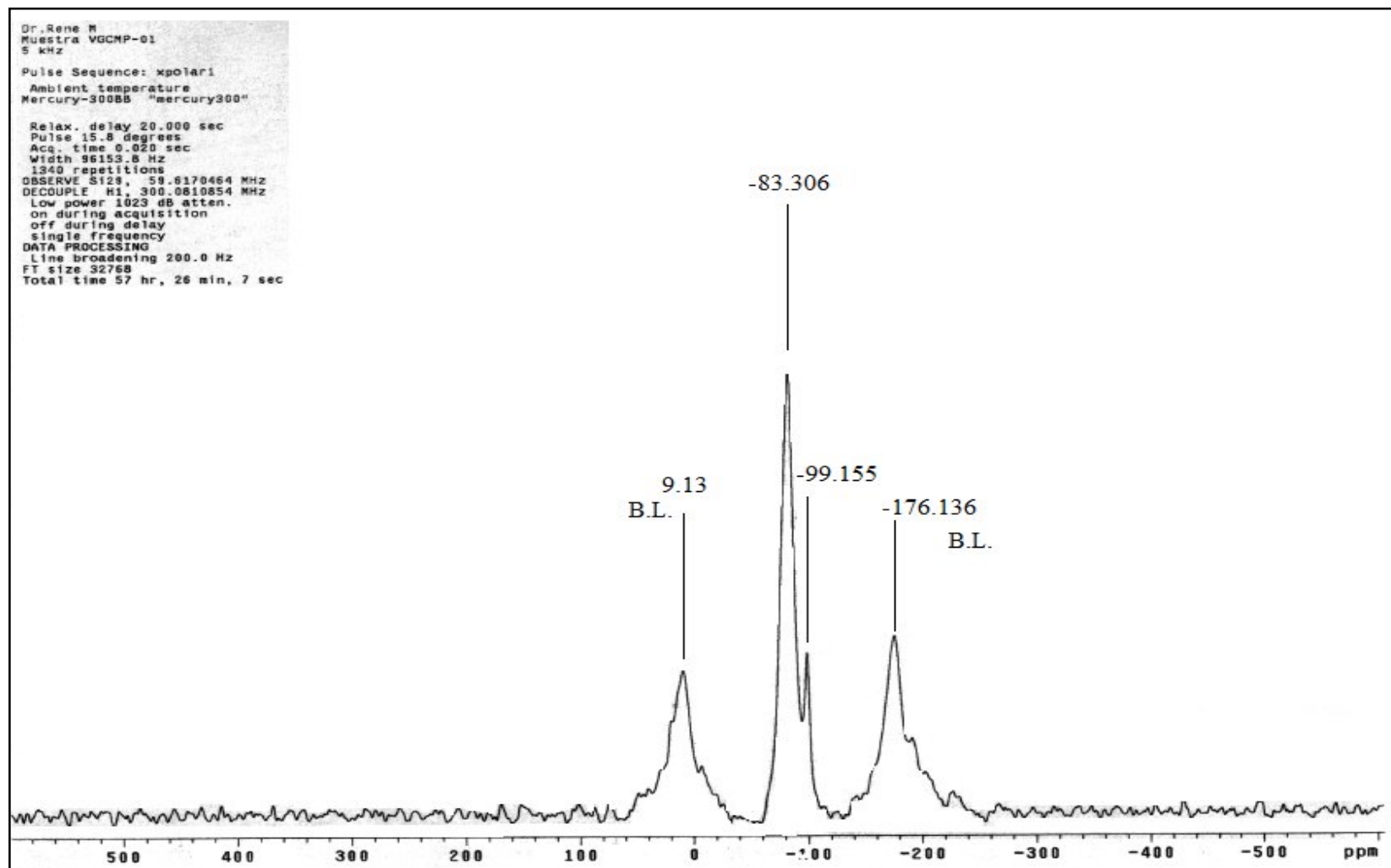


Figura No. 9.4.1. Espectro de resonancia magnética nuclear para núcleos de silicio.

9.5 Análisis térmico.

Con la finalidad de determinar los cambios de fase y la cantidad de material volátil que contienen la muestra del suelo estudiado, se realizó un análisis térmico mediante dos técnicas experimentales; DSC y TGA, obteniéndose los siguientes resultados respectivamente.

9.5.1 Calorimetría Diferencial de Barrido, DSC.

En el DSC se obtuvo como resultado, una curva que muestra casi una línea continua de descomposición gradual como lo se ilustra en la Figura 9.5.1, la que puede ser debida a la descomposición del material orgánico, o puede corresponder a carbonatos o nitratos que son calcinados. Además es posible establecer que el punto marcado con el número uno, se encuentra la temperatura de transición vítrea (T_g), como es característico de este tipo de curvas, así como también se logró determinar el punto número dos la temperatura de cristalización (T_c), lo cual denota un proceso exotérmico, es decir la liberación de calor por parte de la muestra del suelo, en el punto número tres se tiene presente la oxidación o combustión por parte de la muestra, así como en el punto número cuatro, donde se observa la descomposición del suelo

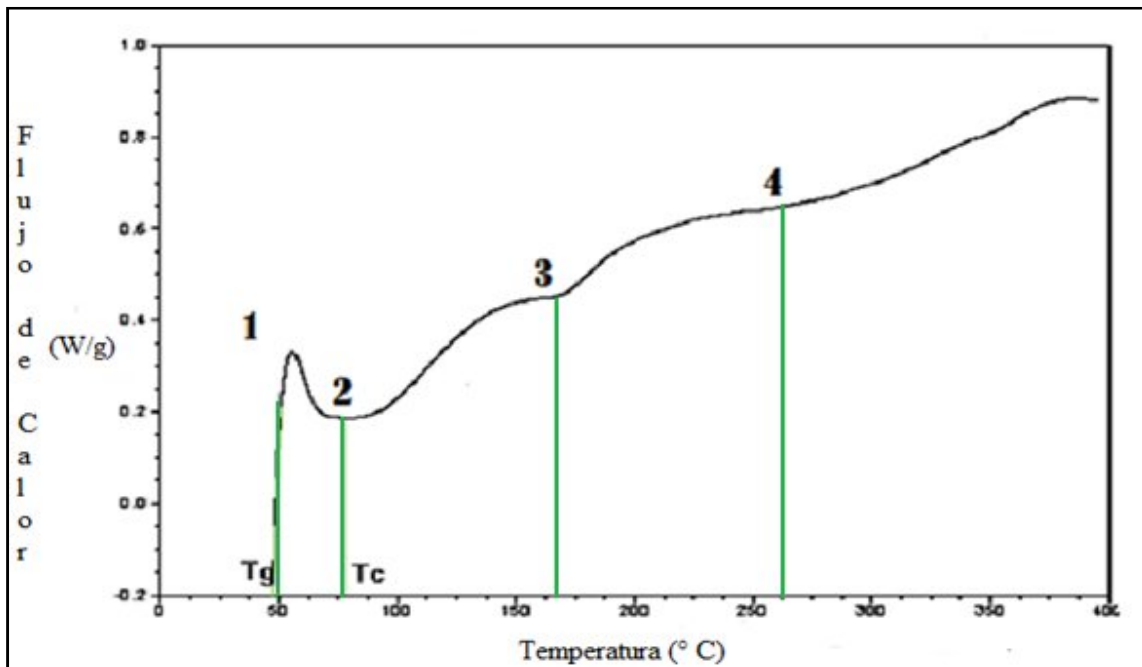


Figura 9.5.1. Calorimetría diferencial de barrido (DSC) de la muestra H13-11, Delicias.

9.5.2 Análisis Termogravimétrico TGA.

El TGA brinda información sobre como cambia la masa respecto a la variación de la temperatura cuando se tienen condiciones constantes que permiten mantener una atmósfera controlada, como lo muestra la Figura 9.5.2, en la que se observa que a una temperatura de 120.21 ° C se ha perdido el 5.022 % del material inicial, correspondiente a un volátil, lo que muy posiblemente se deba a la presencia de agua. Esto es posible determinarlo dado que como se indica en la literatura el segmento indicado entre los puntos 1 y 2, se tiene una curva característica del tipo II⁵², lo que indica una rápida pérdida de masa inicial propia de los procesos de desorción y secado.⁵³ Lo anterior, es de suma importancia ya que al existir solo una pequeña cantidad de agua en la superficie se logrará favorecer las propiedades ácido de Lewis que el suelo presenta.

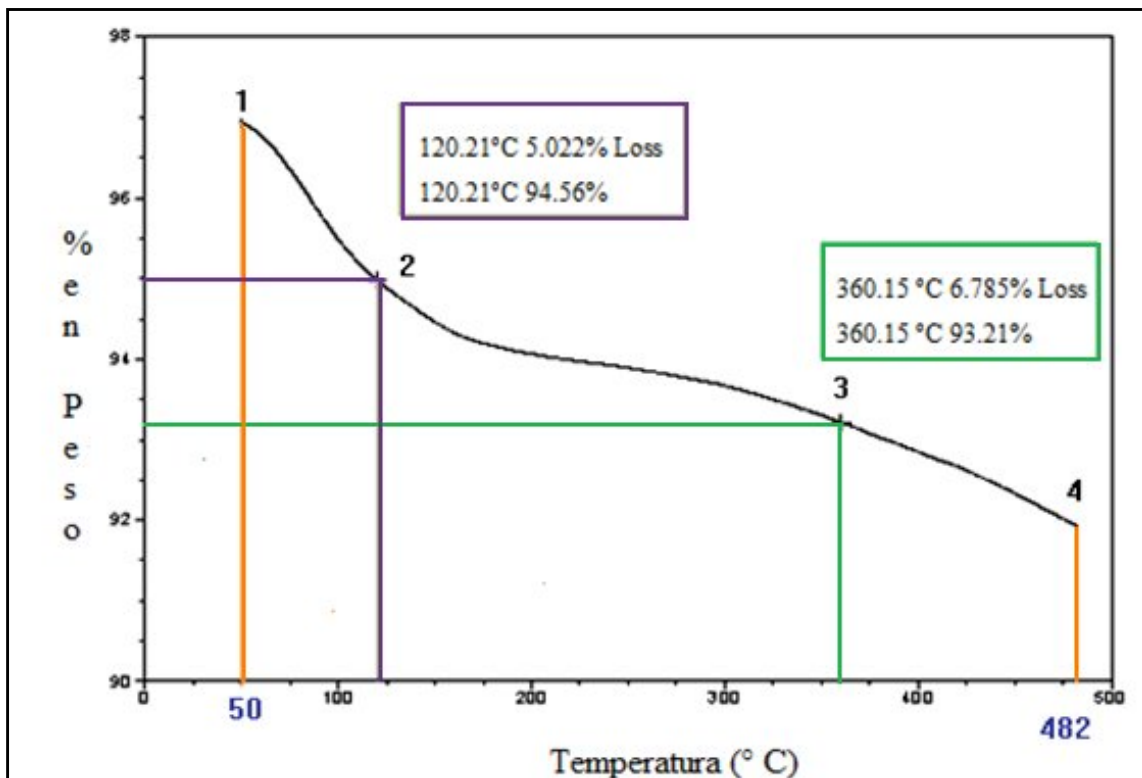


Figura 9.5.2. Análisis termogravimétrico (TGA) de la muestra H13-11, Delicias.

Así mismo, se observó una pérdida de masa de 6.785 % de la masa total a una temperatura de 360.15 ° C, lo cual confirma la presencia de material orgánico en la muestra, esto es verificable al comparar los resultados mostrados entre los puntos 2 y 3 de la Figura 9.5.2, con la información bibliográfica que clasifica este comportamiento como inverso al tipo

IV⁵², es decir se tiene una pérdida de masa en lugar de una ganancia en un intervalo de temperaturas de 120.21 °C y los 360.15 °C, esto debido a la presencia de materiales volátiles Cabe mencionar que dicho comportamiento se mantiene hasta los 482 °C aproximadamente, como se observa en el intervalo limitado por los puntos 3 y 4.

9.6 Microscopía de barrido electrónico.

Por medio de la microscopia electrónica de barrido MEB, se observa la textura, apariencia y diversidad de la muestra respecto a los tamaños de partículas presentes en la misma, observándose lo siguiente:

A un acercamiento de 10 veces, el tamaño original, Figura 9.6.1, se puede ver que este suelo posee pocos componentes y una diversidad de tamaños no muy amplia, siendo así las diferencias dimensionales entre las especies presentes es notable que unas sobresalen más que las otras al contar con un mayor volumen.

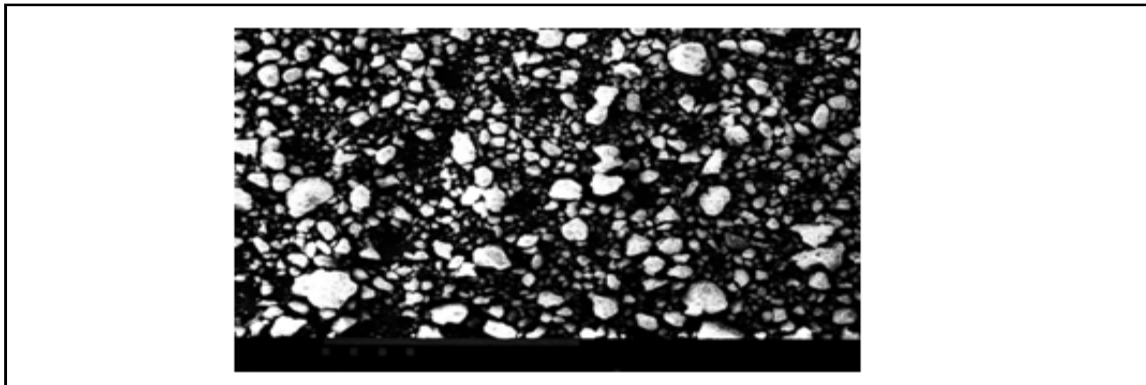


Figura 9.6.1. Micrograma H13-11(2-10X) Delicias.

En el acercamiento a 30 veces el tamaño de la muestra, Figura 9.6.2, se corrobora lo anterior y se observa, además que los cantos son subangulares y aun cuando no existe una gran diversidad de tamaños, si se encuentra gran variedad de formas presente en la geometría de dichos cuerpos, así como la aparición de irregularidad en la superficie de éstos.

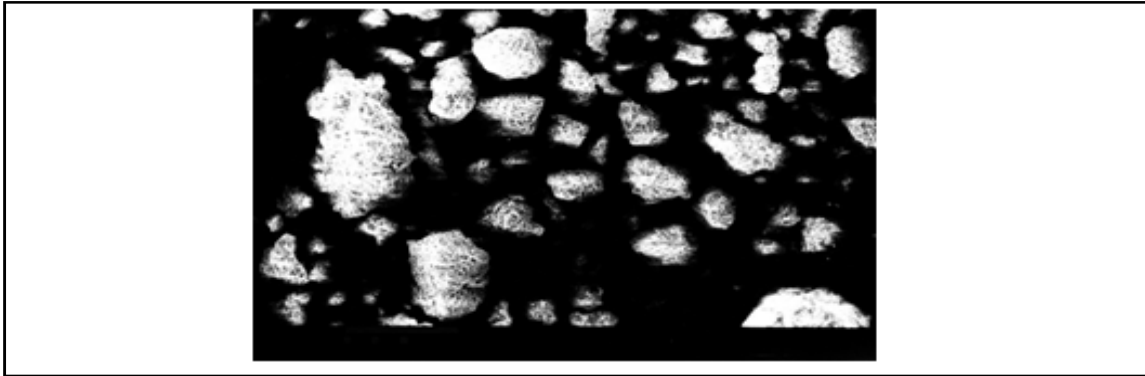


Figura 9.6.2. Micrograma H13-11 (2-30X) Delicias.

En la Figura 9.6.3, con un aumento de 450 veces, el tamaño real de la muestra con lo que se logra observar prácticamente una partícula aislada, de esta manera es posible observar que las irregularidades mostradas en la superficie se deben a la porosidad del material, concordando así con los resultados determinados en las isothermas BET, al encontrarse la presencia de microporos y macroporos.

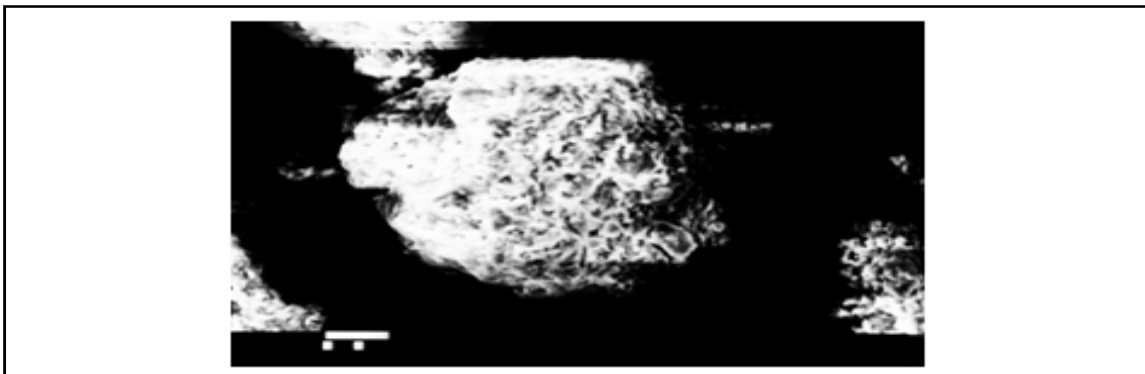


Figura 9.6.3. Micrograma H13-11 (2-450X) Delicias.

Posteriormente en la Figura 9.6.4, se tiene un aumento de 2000 veces el tamaño de la muestra, donde de manera más precisa se observan las irregularidades del material, que forma así una superficie porosa.

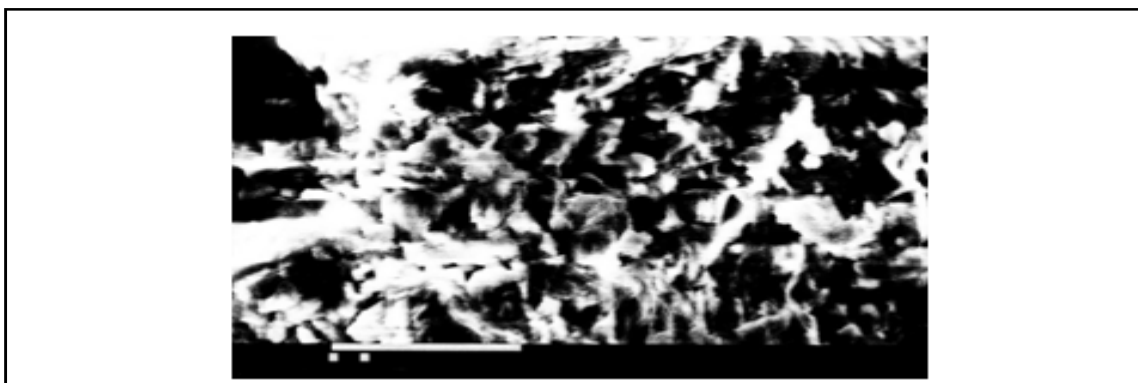


Figura 9.6.4. Micrograma H13-11 (2-2000X) Delicias.

9.7 Espectrofotometría de absorción infrarroja.

Por medio del estudio de espectrometría de absorción de radiación infrarroja en presencia de piridina, fue posible determinar las propiedades ácidas ya sean del tipo de Lewis o Brönsted-Löwry, así como el porcentaje de las mismas. Tal como se muestra en la Figura 9.7.1, donde cada uno de los espectros corresponde a las diferentes temperatura a las cuales se realizó dicho análisis: 25^A, 25^B, 100, 200 y 300 °C, respectivamente. Cabe mencionar que sólo la primera se llevó a cabo sin evacuar la atmosfera, posteriormente se evacuó el aire y se realizo el estudio bajo esa condición.

^A Refiera a la atmosfera sin evacuar.

^B Refiere a la atmosfera ya evacuada.

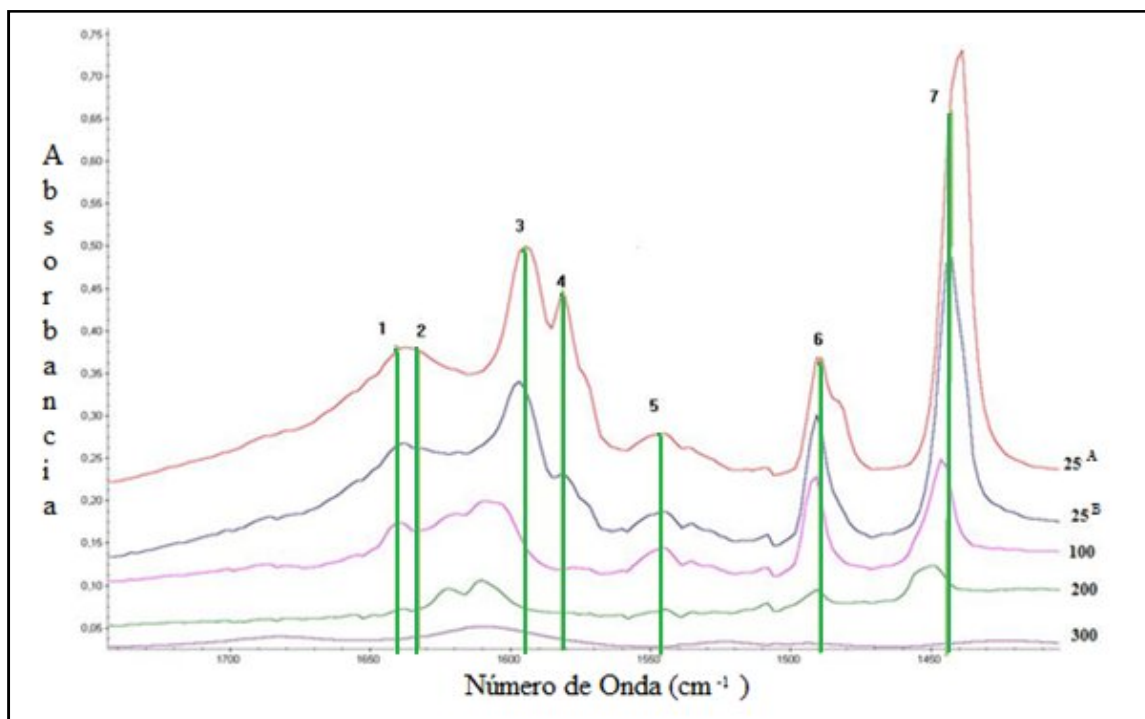


Figura 9.7.1 Espectrofotometría de Absorción Infrarroja en presencia de piridina.

Como se indica en la Figura 9.7.1 se tiene la presencia de bandas características del complejo donador-aceptor formado por la piridina y los sitios de Lewis como se reportan en la literatura⁵⁴, sin embargo, no todas las bandas son del mismo tipo, pues algunas de ellas denotan una combinación de los dos tipos de acidez, así como también reportan sólo la existencia de sitios Bronsted-Löwry, obteniéndose los resultados mostrados en la Tabla 9.7.1.

Tabla 9.7.1. Determinación de los sitios ácidos de Lewis y Bronsted-Löwry.

No. Punto	1	2	3	4	5	6	7
Tipo de ácido	Brönted-Löwry	Lewis	Lewis	Lewis	Brönted-Löwry	Brönted-Löwry-Lewis	Lewis
Número de onda(cm^{-1}).	1640	1633	1593	1581	1546	1489	1450

De esta manera, tal como lo muestra la Tabla 9.7.1, se tiene que las bandas localizadas en 1640 y 1546 cm^{-1} indica la presencia de sitios Brönted-Löwry pertenecientes a la especie piridonio. Así como los valores de 1633, 1593, 1581, 1489 y 1450 cm^{-1} corresponden a los

sitios ácidos de Lewis; por último la absorción ubicada en 1489 cm^{-1} es representativa de una combinación entre los dos tipos de acidez.

Para determinar el grado de cada uno de los tipos de acidez, es necesario determinar la cantidad de piridina adsorbida por gramo de muestra, de esta manera se obtuvieron los resultados mostrados en la Tabla 9.7.2.

Tabla 9.7.2. Absorción de la piridina en los sitios ácidos de Lewis y Bronsted-Löwry.

Característica	Absorción de piridina $\mu\text{mol/g}$				
	25 ^A	25 ^B	100	200	300
Temperatura (°C)	25 ^A	25 ^B	100	200	300
Sitio de Lewis	203.99	152.42	58.61	20.12	0
Sitio Bronsted-Löwry	33.22	25.56	17.11	1.41	0
% de Comparación *	16.28	16.77	29.19	7.01	0
Proporción **	6.14	5.96	3.42	14.27	0

* Se refiere al porcentaje representado por la acidez de Brönsted-Löwry respecto a 100% de la acidez de Lewis.

** Se refiere a la proporción de cuantas veces más grande es la acidez de Lewis respecto a la del tipo Brönsted-Löwry.

Es posible observar que cuando se tiene una temperatura ambiente sin evacuar el aire, la acidez tipo Lewis es poco más de seis veces mayor que la del tipo de Brönsted-Löwry, es importante hacer ver, que dicha proporción se mantiene casi igual cuando la atmósfera es evacuada, aún cuando éstas se ven disminuidas en un 25.28 % y 23 % respectivamente. Además, al realizar la comparación entre el resto de las temperaturas se tiene que la acidez de Lewis siempre es más predominante que la acidez de Brönsted-Löwry, por ejemplo a la temperatura de 200 °C se tiene una proporción de 14.27 veces. Es a esta misma temperatura que se tiene el menor valor para la acidez de Brönsted-Löwry antes de desaparecer por completo a los 300 °C, lo cual sucede también en el caso de la acidez de Lewis. Es posible observar una tendencia en la disminución de la acidez de la muestra conforme se incrementa la temperatura, Figura 9.7.2, de esta manera se puede considerar que el intervalo de temperaturas óptimo para realizar las reacciones está entre los 25 y 200 °C.

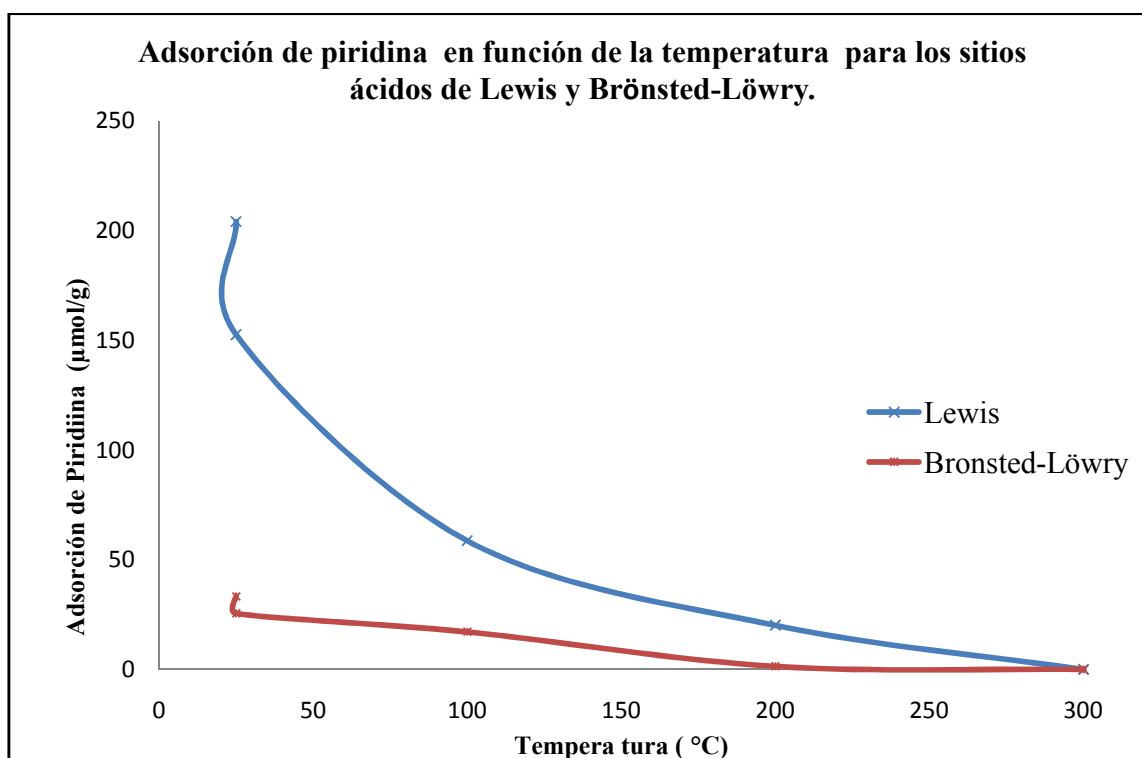


Figura 9.7.2. Comportamiento de los sitios ácidos de Lewis y Brønsted-Löwry ante el aumento de la temperatura

En base a todo lo anterior, es posible decir que la presencia de sitios de Lewis se corrobora con los resultados arrojados por otras técnicas que permitieron conocer que el suelo está compuesto por los elementos de Al, Si, Fe y O, así como la geometría de las especies presentes, sin dejar de lado área superficial, volumen y diámetro del poro, lo que se ve reflejado en el grado de acidez de Lewis.

9.8 Comprobación de la actividad catalítica y porcentajes de formación.

Uno de los objetivos de mayor relevancia de este trabajo es evaluar el poder catalítico del suelo estudiado, por lo que con dicha finalidad, se llevó a cabo la reacción de alquilación de Friedel- Crafts a través de la cual se obtuvieron benciltoluenos (posiciones *orto*, *para*, principalmente) y oligómeros de tolueno^C, utilizando como reactivos cloruro de bencilo y tolueno (el que también fungió como disolvente), con diferentes fuentes de activación como lo son: infrarrojo, microondas y tratamiento térmico tradicional. Para identificar los productos de reacción, que se obtuvieron se llevó a cabo la interpretación de los picos presentes en los espectros de masas, en los cuales se observa un patrón similar de fragmentación para las tres fuentes de activación empleadas.

A continuación se muestran algunos espectros de masas, Figuras 9.8.1, 9.8.2, y 9.8.3 así como su respectivo patrón de fragmentación.

En primer lugar, se tiene el espectro correspondiente a un tiempo de retención de de 2.28 min, en el cual no es posible observar la presencia del trímero, sin embargo, se tiene la existencia de los benciltoluenos (posiciones *orto*, *para*). EIMS (70 eV) m/z (% ar):

51(3)[C₄H₃]⁺, 91(48)[C₇H₇]⁺, 105(15)[C₈H₉]⁺, 167(100)[C₁₃H₁₁]⁺, 182(80)M⁺ •.

En un tiempo de retención de 3.16 min, Figura 9.8.2, aún no se observa el trímero, sin embargo, la presencia de otros fragmentos mayores al 182 m/z, sugieren la existencia de otra molécula más grande como es el caso de los oligotoluenos. EIMS (70 eV) m/z (% ar):

51(12)[C₄H₃]⁺, 65(9)[C₅H₅]⁺, 77(9)[C₆H₅]⁺, 91(38)[C₇H₇]⁺, 104(19)[C₈H₈]⁺,
165(100)[C₁₃H₉]⁺, 182(55)M⁺ •.

Al seguir el análisis se observa que aun tiempo de retención 16.93 min, la presencia del trímero que tiene una m/z 272: EIMS (70 eV) m/z (% ar):

91(8)[C₇H₇]⁺, 105(12)[C₈H₉]⁺, 165(98)[C₁₃H₉]⁺, 181(100)[C₁₄H₁₃]⁺, 257(18)[C₂₀H₁₇]⁺,
272(83)M⁺ •.

^C Nombre con que se designa también a los dibenciltoluenos.

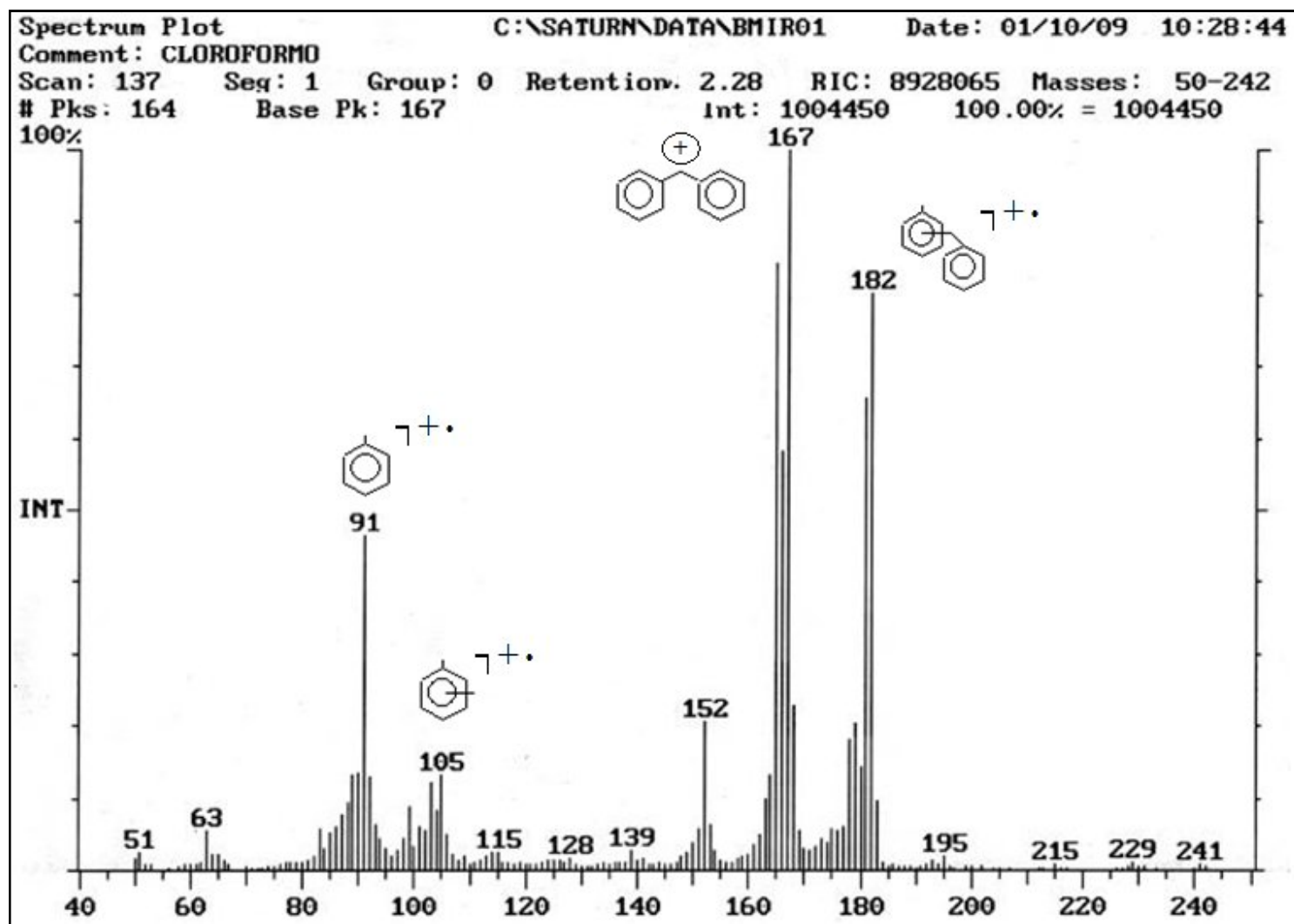


Figura 9.8.1. Espectro de masas obtenido a los 4 min. de reacción utilizando infrarrojo a un tiempo de 2.28 min de retención.

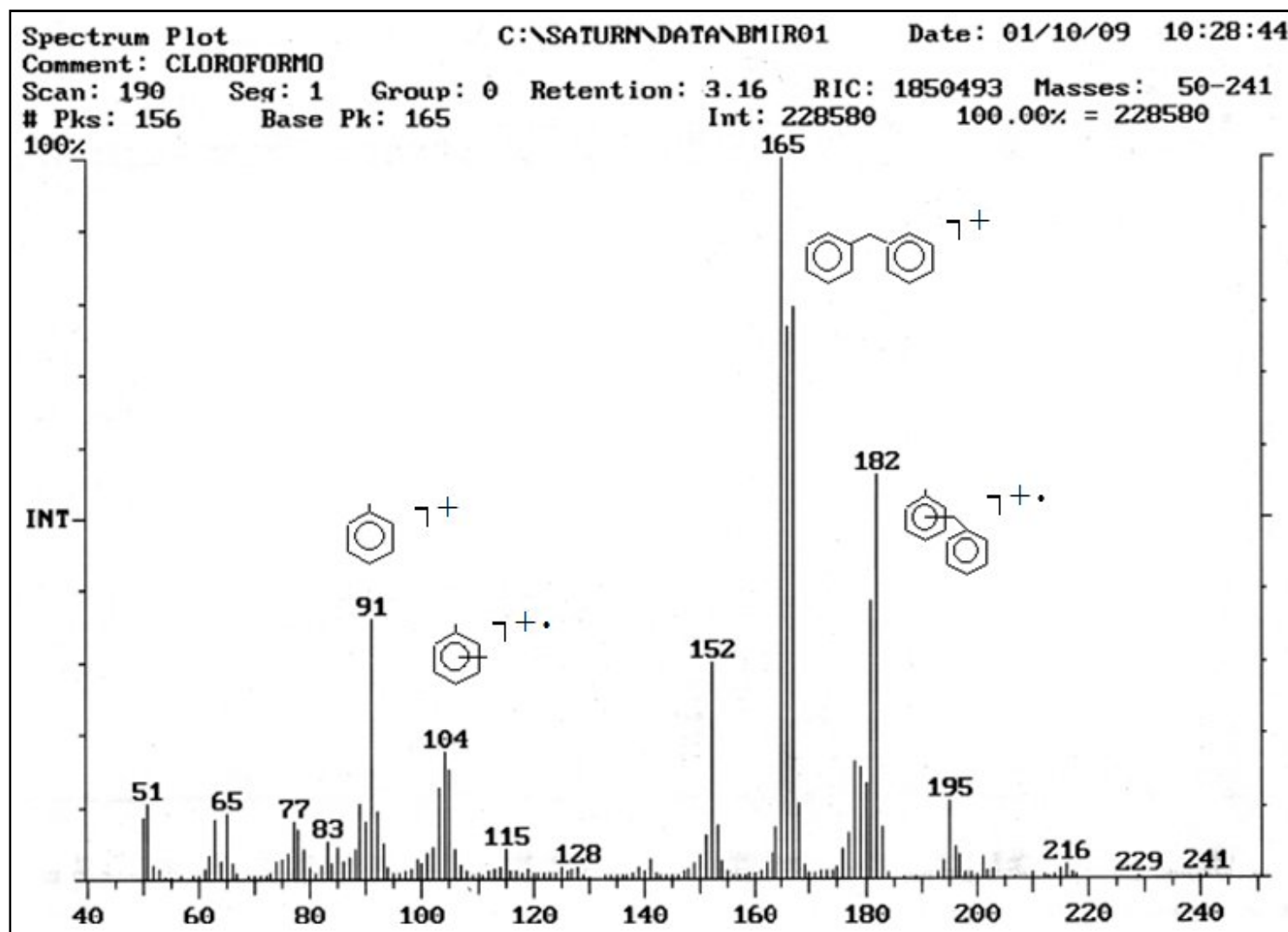


Figura 9.8.2. Espectro de masas obtenido a los 4 min. de reacción utilizando infrarrojo a un tiempo de 3.16 min de retención

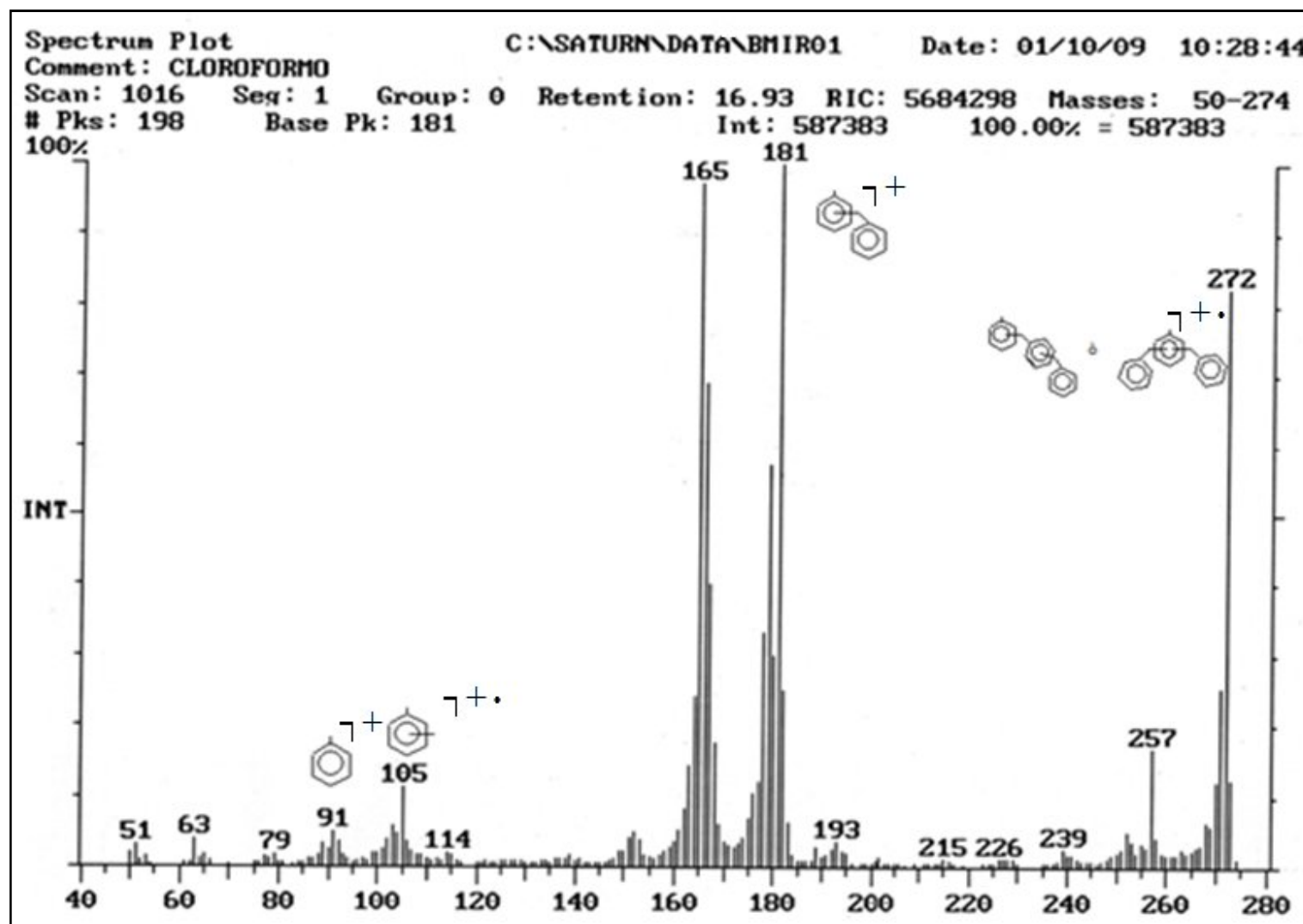


Figura 9.8.3. Espectro de masas obtenido a los 4 min. de reacción utilizando infrarrojo a un tiempo de 16.93 min de retención

Posteriormente se llevó a cabo la cuantificación para determinar los porcentajes de formación para las diferentes energías de activación, mediante los correspondientes cromatogramas, Figuras 9.8.4, 9.8.5, 9.8.6, obtenidos para cada uno de los tiempos de reacción.

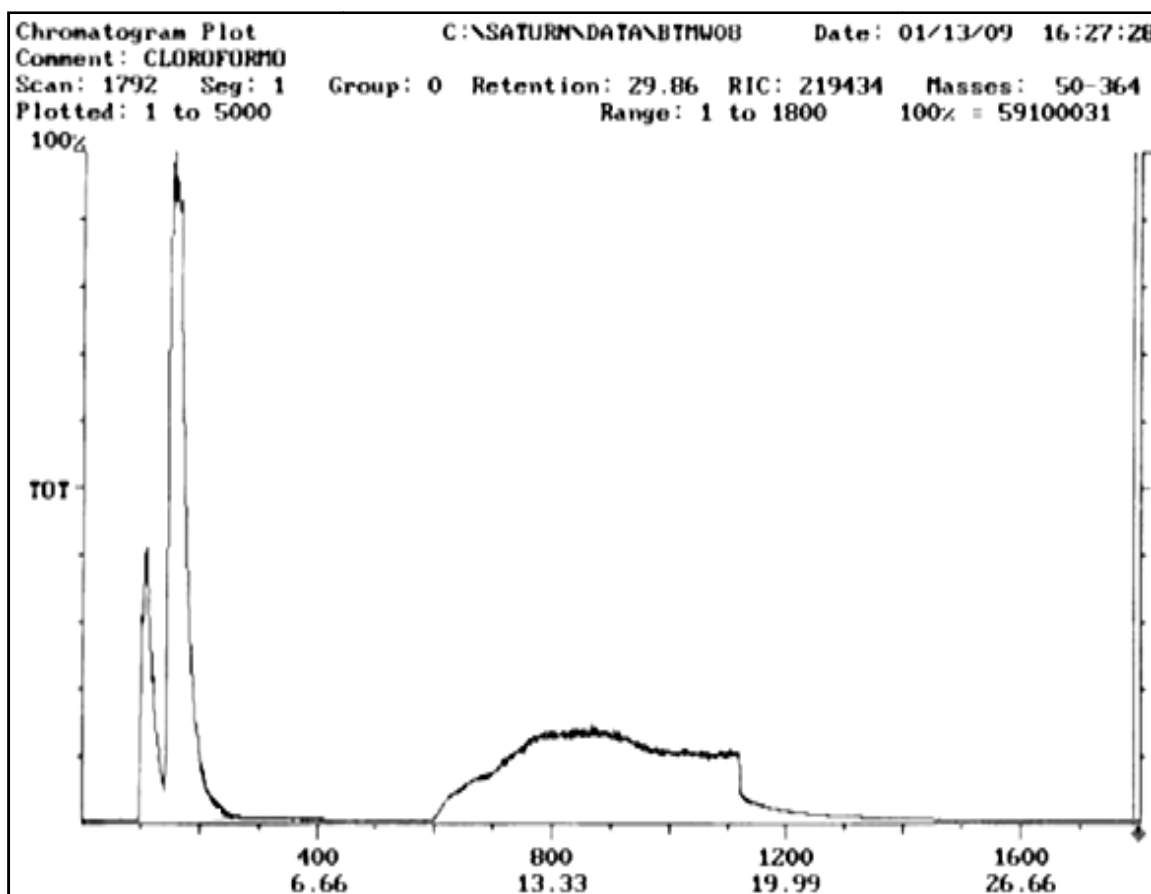


Figura 9.8.4. Cromatograma perteneciente a los productos obtenidos a los 10 min. de reacción mediante microondas.

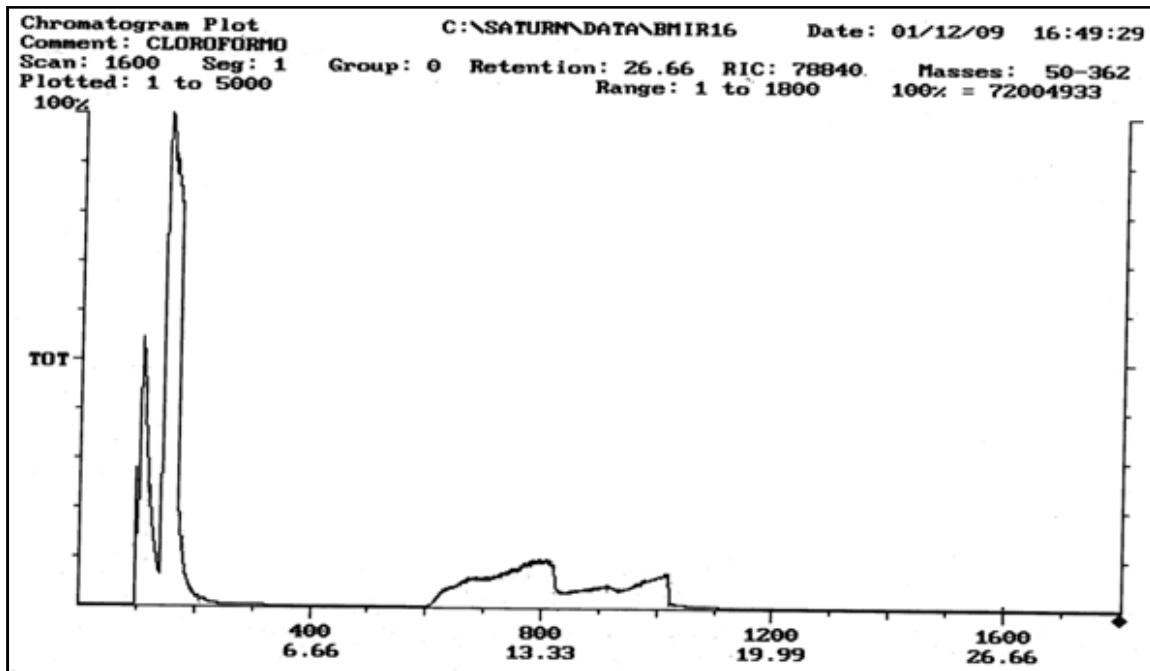


Figura 9.8.5. Cromatograma perteneciente a los productos obtenidos a los 17 min. de reacción mediante infrarrojo.

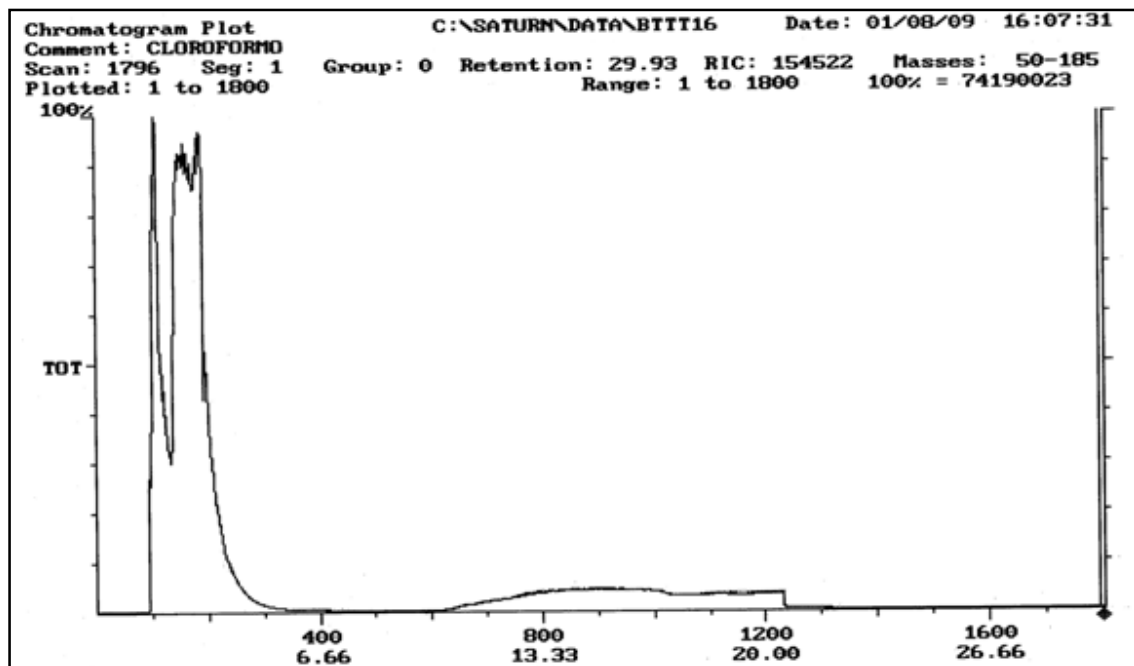


Figura 9.8.6. Cromatograma perteneciente a los productos obtenidos a los 20 min. de reacción mediante tratamiento térmico tradicional.

Los resultados están resumidos en las Tablas 9.8.1, 9.8.2 y 9.8.3. Es importante mencionar que la reacción se llevó a diferentes tiempos, con la finalidad de determinar el tiempo óptimo de reacción para cada una de las alternas de activación, así como conocer cuál de éstas promueve una mayor transformación en un menor tiempo.

Tabla 9.8.1. Porcentajes de formación de los productos con su respectivo tiempo de reacción, utilizando microondas.

Tiempo de reacción	Porcentajes de Formación.		
	min.	Benciltoluenos	Dibenciltoluenos
2	60.7307	0	60.7307
3	62.5955	0	62.5955
4	67.4712	0	67.4712
5	29.2282	54.7595	83.9878
5.5	34.8928	59.6779	94.5706
6.5	21.5067	73.2685	94.7752
10	27.3631	68.6285	95.9916

Tabla 9.8.2. Porcentajes de formación de los productos con su respectivo tiempo de reacción, utilizando infrarrojo.

Tiempo de reacción	Porcentajes de Formación.		
	min.	Benciltoluenos	Dibenciltoluenos
3	26.2118	58.1455	84.3573
5	21.5831	63.3288	84.9119
6	28.8986	60.5457	89.4443
7	31.1938	59.7504	90.9441
8	17.4848	74.6872	92.172
9	18.8011	73.7228	92.5239
11	26.6473	66.0901	92.7374
12	26.0647	66.8164	92.8811
13	25.6881	67.23	92.9181
17	28.3409	64.8806	93.2214

Tabla 9.8.3. Porcentajes de formación de los productos con su respectivo tiempo de reacción, utilizando tratamiento térmico tradicional.

Tiempo de reacción min.	Porcentajes de Formación.		
	Benciltoluenos	Dibenciltoluenos	Total
4	36.4428	5.6381	42.081
5	35.5702	7.5174	43.0876
6	54.9193	6.7673	61.6866
9	30.9713	48.6268	79.5981
10	48.0039	36.4492	84.4531
13	34.8908	53.739	88.6298
14	55.6355	33.1782	88.8137
15	35.6645	57.2674	92.9319
20	51.6926	42.6094	94.3020

En base a los resultados obtenidos anteriormente, es posible determinar que el suelo de Ciudad Delicias, presenta buenas propiedades catalíticas al obtener porcentajes de formación total de productos de la alquilación por encima del 90 %, además de que en el caso del infrarrojo se obtiene 84.35% de rendimiento a los tres minutos, convirtiendo a este método de activación el que necesita el menor tiempo para obtener un resultado aceptable. Esto se ve reflejado en la Figura 9.8.7, donde es posible observar dicho comportamiento. Además, cabe mencionar que la activación por microondas, resulta ser selectiva para la formación de benciltoluenos hasta los 4 min., dado que no se tiene la formación de dibenciltoluenos hasta este tiempo (Tabla 9.8.1.).

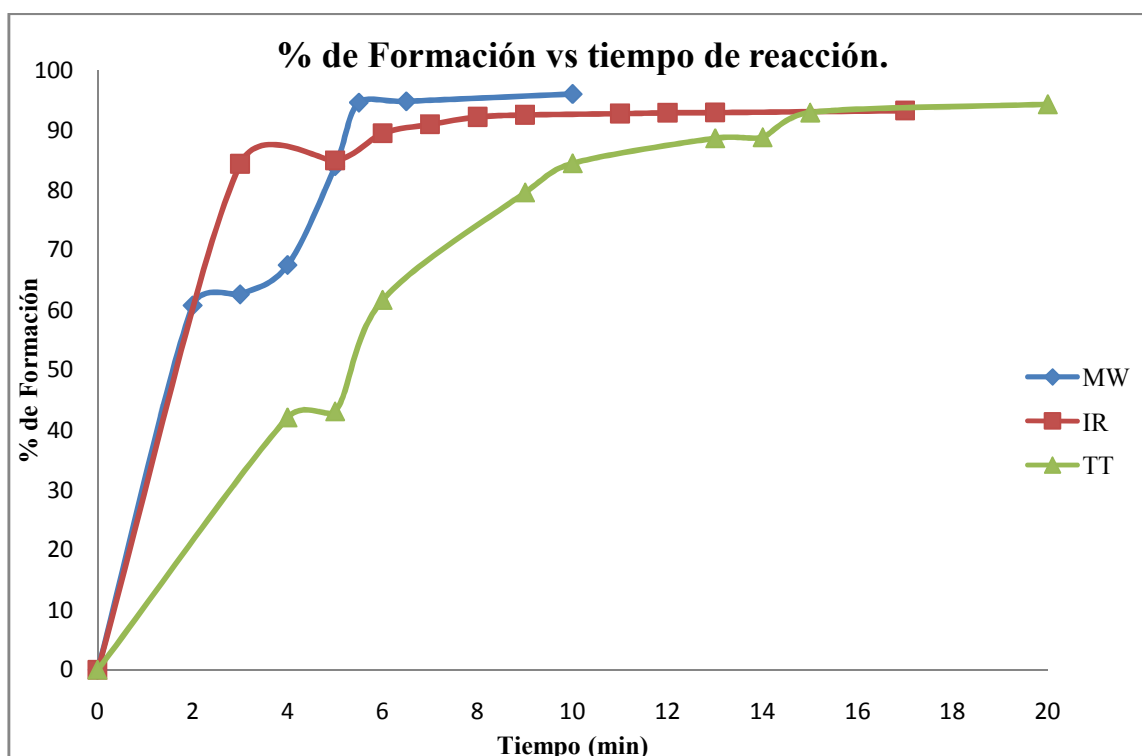


Figura 9.8.7. Comparación entre los porcentajes de formación total respecto a tiempo de reacción transcurrido utilizando diferentes fuentes de activación.

Si lo que interesa es la obtención de máximos porcentajes de formación en el menor tiempo posible, al analizar los resultados mostrados por la Figura 9.8.7, fue posible observar que la fuente de activación que ofreció mejores rendimientos en la obtención de los dibenciltoluenos fueron las microondas, las cuales no solo lograron el mejor rendimiento sino que requirieron un menor tiempo para llevar a cabo dicha transformación. Siendo así que las microondas alcanzaron mejores resultados en tan sólo el 58.82 % del tiempo que la técnica de infrarrojo necesitó; mientras que en comparación con el tratamiento térmico estas lo hicieron en el 50% del tiempo empleado por la tradicional fuente de activación, tal como se muestra en la Tabla 9.8.4.

Tabla 9.8.4. Comparación de porcentajes de formación entre las diferentes fuentes de activación.

Fuente de Activación	% de Formación Máximo	Tiempo de formación (min).
Microondas	95.99	10
Infrarrojo	93.22	17
Tratamiento térmico	94.30	20

Sabiendo que uno de los principios de la química verde, es disminuir el impacto de las fuentes de energía, se realizó un estudio del consumo energético de cada una de las fuentes de activación, mostrado en la Tabla 9.8.5.

Tabla 9.8.5. Comparación del consumo energético entre las diferentes fuentes de activación.

Fuente de Activación	% de Formación Máximo	Potencia W	Tiempo Min	Tiempo h	Consumo Energético Wh
Microondas	95.99	1000	10	0.1667	167
Infrarrojo	93.22	250	17	0.2834	71
Tratamiento térmico	94.3	171	20	0.3334	57

La tabla 9.8.5 muestra, que el consumo energético utilizando microondas fue el mayor de las tres fuentes de activación, aún cuando a la vez esta fuente de energía, presenta los menores tiempos para los mejores rendimientos.

Tabla No. 9.8.6. Comparación del consumo energético entre las diferentes fuentes de activación a un porcentaje determinado de formación.

Fuente de Activación	% de Formación Máximo	Potencia W	Tiempo min	Tiempo h	Consumo Energético Wh
Microondas	93	1000	5.42	0.09033333	90.334
Infrarrojo	93	250	16.59	0.2765	69.125
Tratamiento térmico	93	171	15.24	0.254	43.434

Al analizar la información brindada por la Tabla 9.8.6, se tiene que al establecer un porcentaje de transformación del 93 % (máximo rendimiento obtenido utilizando la técnica de infrarrojo), se tiene como era de esperarse en base a lo mostrado en la Tabla 9.8.6, que las microondas logran ese objetivo en el menor tiempo, sin embargo, consumen 108 % más de energía que el tratamiento térmico, el cual triplica el tiempo de reacción comparado con las microondas, siendo así que el infrarrojo se mantiene como un técnica con los mayores tiempos de reacción, y un consumo medio de energía.

9.9 Aproximación a la determinación del orden de reacción.

Como parte de la evaluación catalítica del suelo, se llevó a cabo una aproximación del orden de reacción esto mediante el método integral, lo cual arrojó los resultados mostrados en la Tabla 9.9.1, donde se observa que aún cuando el objetivo es lograr un coeficiente de correlación cercano a uno, este no se logra, sin embargo, se tiene que los valores que más se aproximan son en los tres casos para el orden de reacción 2, todo lo anterior no es suficiente para determinar el orden, por tanto se procedió a determinarlo mediante el método de Powell.

Tabla 9.9.1. Ecuaciones integradas para obtener el orden de reacción y sus coeficientes de correlación para las diferentes fuentes de activación.

Orden	Ec. Integral	Coeficientes de Correlación		
		Microondas	Infrarrojo	T. Térmico
0	$x=kt$	0.72	0.62	0.79
1	$\frac{x}{t} = k$	0.77	0.67	0.94
2	$\frac{x}{t^2} = k$	0.82	0.71	0.95

α = Concentración inicial del reactivo; x = fracción de formación del producto; t = tiempo (min);
 k =constante de velocidad.

Al llevar a cabo el estudio por el método de Powell, se lograron obtener las gráficas mostradas en las Figuras 9.8.8, 9.8.9 y 9.8.10, las cuales describen el comportamiento de α , (fracción que queda sin reaccionar en un intervalo de uno a cero), respecto del logaritmo natural del tiempo, ésto con la finalidad de transponer cada una de estas sobre la curva característica de Powell (α en función de logaritmo natural de ϕ) para la determinación del orden de reacción Figura 9.8.11. Es importante mencionar que para llevar a cabo dicha curva se tomaron los valores reportados en la literatura para $\ln \phi$.⁵

$$= \frac{\alpha}{\phi} = \frac{\alpha}{\phi} = \frac{\alpha}{\phi}$$

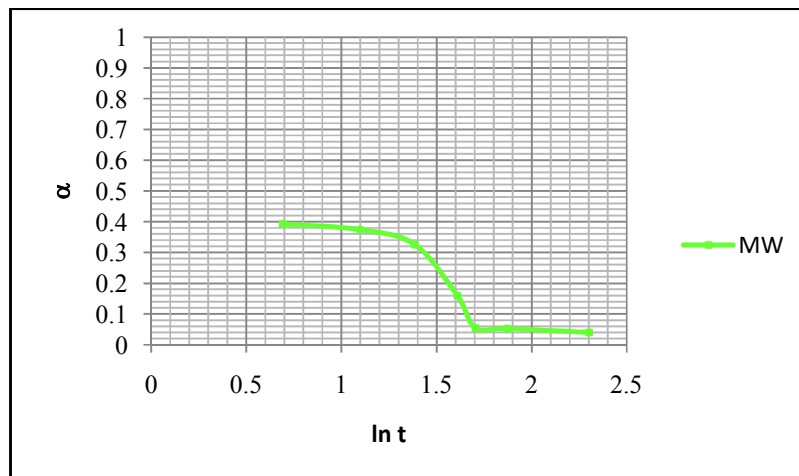


Figura 9.8.8. Representación de Powell experimental utilizando microondas.

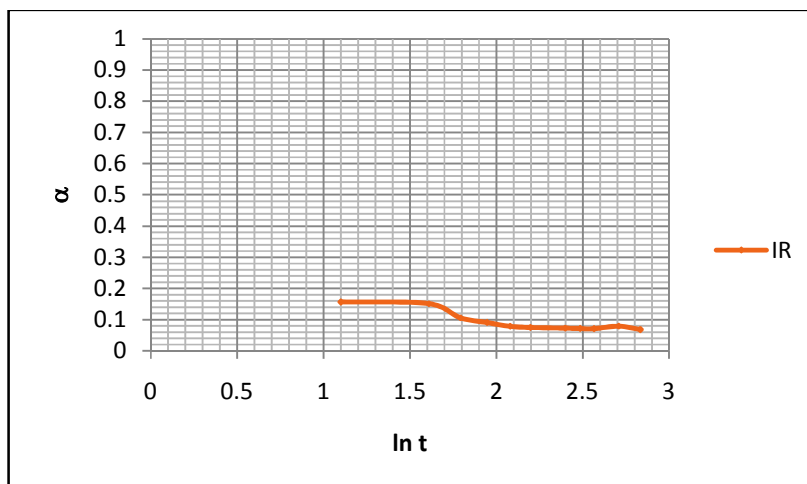


Figura 9.8.9. Representación de Powell experimental usando infrarrojo.

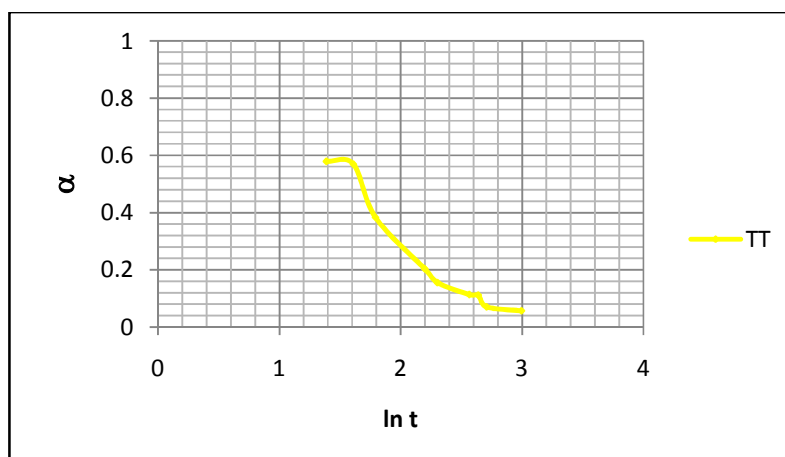


Figura 9.8.10. Representación de Powell experimental empleando tratamiento térmico tradicional.

Como se observa en la Figura 9.8.11, la comparación entre la representación de Powell teórica y las obtenidas experimentalmente, muestra que cada una de las curvas experimentales concuerda con una curva representativa diferente; es decir, cada una de las fuentes de activación parece tener un diferente orden de reacción, es decir 0.5, 1.5 y 2 para microondas, tratamiento térmico e infrarrojo respectivamente.

La discrepancia entre estos puede deberse a que para cada una de las fuentes de activación se alcanzan temperaturas desiguales, así como la posibilidad de presentar un mecanismo de reacción diferente para cada una de estas. Dichos órdenes de reacción no son contundentes debido a que no se cuenta con un número conveniente de repeticiones para cada corrida, así como tampoco la determinación de un porcentaje de error para cada una de las mismas.

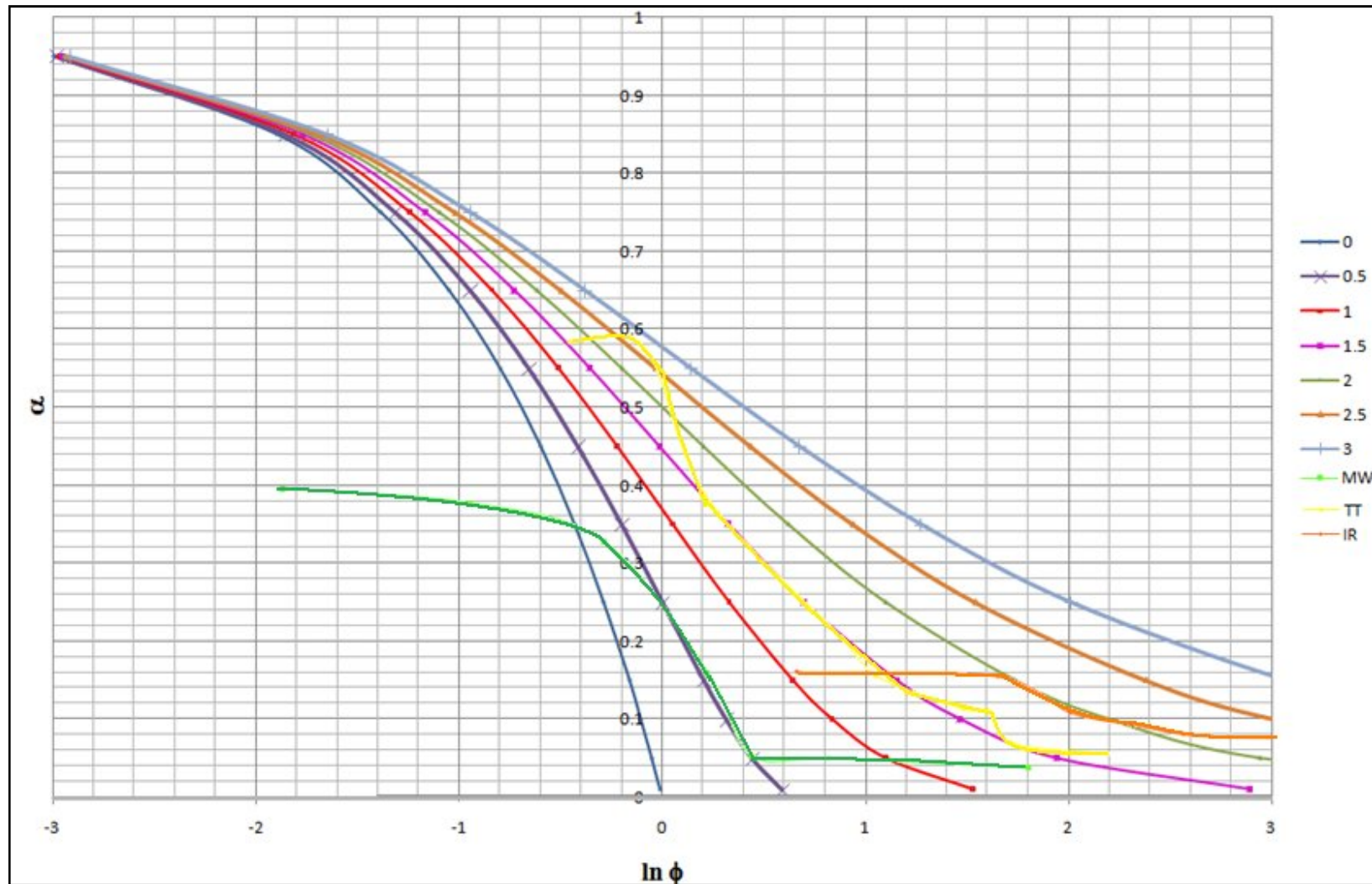


Figura 9.8.11. Comparación entre la representación de Powell teórica y las obtenidas experimentalmente.

10. CONCLUSIONES.

Es importante mencionar, que con las actividades desarrolladas en este trabajo fue posible alcanzar los objetivos planteados inicialmente, logrando así realizar un estudio interdisciplinario que permitió la caracterización fisicoquímica del suelo originario de Ciudad Delicias, así como también la exploración para determinar su posible poder catalítico, contribuyendo de esta manera al acervo de la química verde, dando como resultado un avance en los hechos hacia una química que busca acercarse a la sostenibilidad.

Como parte del estudio realizado, y con la finalidad de cumplir con los objetivos particulares se llevo a cabo la implementación de varias técnicas analíticas obteniéndose lo siguiente:

- Mediante difracción de rayos-X, se determinaron los minerales presentes en el suelo los cuales resultaron ser: cuarzo (SiO_2), calcita (CaCO_3), albita ($\text{NaAlSi}_3\text{O}_8$), ulvospinel (Fe_2TiO_4) y corindón (Al_2O_3).
- Por fluorescencia de rayos-X, se estableció que la muestra está compuesta principalmente de O, Si, Al y Fe.
- De la información obtenida a través de las isothermas de BET, se determinó que el suelo tiene un área superficial que le permite presentar óptimas condiciones para llevar a cabo una reacción.
- De la resonancia magnética nuclear por medio del ángulo mágico, se determinaron los ambientes químicos para los núcleos de ^{27}Al y ^{29}Si .
- En los estudio de análisis térmico, se confirmó la presencia de materia orgánica, así como de una mínima cantidad de agua, esta característica favorece sus propiedades de ácido de Lewis.
- Con ayuda de la MEB, fue posible observar que la muestra presenta un tamaño de partícula no muy variado y que estas tienen una textura rugosa.
- En relación a la EAI, por medio de la adsorción de piridina se determinó de manera muy clara, que la acidez de Lewis predomina de forma preponderante sobre la acidez de Brønsted-Löwry.

- Al llevar a cabo la determinación de su poder catalítico, con ayuda de la espectrometría de masas y cromatografía de gases, se obtuvieron como resultados porcentajes de formación por encima del 90% para las diferentes fuentes de activación.
- El método de las microondas fue el único que mostró características de selectividad respecto a la formación de benciltoluenos.
- En la aproximación al orden de reacción por el método de Powell se observó que cada una de las fuentes de activación parece tener un diferente orden de reacción: 0.5, 1.5 y 2 para microondas, tratamiento térmico e infrarrojo respectivamente.

Con base a todo lo anterior, es posible determinar que el suelo originario de Ciudad Delicias, Chihuahua tiene un buen poder catalítico, esto como consecuencia de las propiedades que este posee; lo cual le da amplias posibilidades de ser utilizado como un catalizador de origen natural, fomentando así la aplicación de los principios de química verde, la cual a su vez promueve la sostenibilidad.

11. REFERENCIAS

1. Brundtland, G. H. Our Common Future: The World Commission on Environment and Development. Ed. Oxford University Press. Reino Unido (1987).
2. Viswamanathan, B., Sivasanker S., Ramaswamy A. Catalysis: Principles and Applications. Ed. Narosa. India (2006), 220-226.
3. Anastas, P. T., Warner J. C. Green Chemistry: Theory and Practice. Ed. Oxford University Press. USA (1998), 12-30.
4. Vollhardt, K., Schore E. N. Organic Chemistry: Structure and Function. 5ª edición. Ed. W. H. Freeman. Estados Unidos de América (2007), 696-712.
5. Vargas, R. M., Obaya V. A. Cálculo de parámetros de rapidez en cinética química y enzimática. Ed. FES Cuautitlán, UNAM. México (2005), 35-45.
6. Almada, F. R. Diccionario de Historia, Geografía y Biografía Chihuahuenses, Chihuahua. Ed. Dirección General de Fomento Económico, Departamento de Planeación Industrial México (1968).
7. Aguirre, G. A. Química de los suelos salinos y sódicos. Ed. Universidad Nacional Autónoma de México. México (1993), 22-30.
8. FAO/UNESCO. Soil Map of the World 1:5,000,000. Ed. UNESCO –Paris. México y América Central, III (1976).
9. FAO/UNESCO. Soil Map of the World 1:5,000,000. Amended fourth draft Ed. FAO-Rome, (1987).
10. Jordán, L. A. Manual de edafología. Ed. Universidad de Sevilla. España (2005), 5-6.
11. Bonneau, M. Sohier, B., Edafología 2. Constituyentes y propiedades del suelo. Ed. Toray-Masson. España (1987), 10-11.
12. Baver, L. D. Gardner, W. R. Física de suelo. Ed. UTEHA. México (1973), 15-18.
13. Duchaufour, P. Manual de Edafología. Ed. Toray-Masson. España (1975), 55-77.
14. Cartigles, S., Nissen, H., Wessicken, R., Zeolites, **9**, (1989), 346.
15. Beyerlain, R., Choi-Feng, C., Hall, J., Huggins, B., Ray, G., *Symp. Series*, **571**, (1994), 81.
16. Emerson, W.W., Dexter, A. R. Modification of soil structure. Ed. John Wiley. USA (1978), 35-36.

17. White, R. E. Introduction to the principles and practice of soil science. Ed. Blackwell Publ. USA (1979), 43-45.
18. Clasificación arcillas Foth, H. D. Fundamentos de la ciencia del suelo. Ed. Continental. México (1987).
19. Glusker, J. P., Trueblood, K. N. Crystal structure analysis- a primer. Ed. Oxford University Press. United Kingdom (1985).
20. Olsen, E. D. Métodos ópticos de análisis. Ed. Reverte. México (2003), 515-517.
21. Rouffignac, E. Técnicas Experimentales de caracterización de catalizadores. Series Científicas. Ed. Instituto Mexicano del Petróleo. México (1986), Cap. 3.
22. Duer, J. M. Solid State NMR Spectroscopy: Principles and Applications. Ed. Blackwell Science. USA (2002).
23. Dean, J. A., Pradyot, P. The Analytical Chemistry Handbook. Ed. McGraw Hill, USA (1995), 15.1–15.5.
24. Skoog, A. D., Holler, J. F., Crouch, R. S. Principles of Instrumental Analysis. 5th Edition. USA (1998), 905-908.
25. Putnis, A. Introduction to mineral Sciences. Ed. Cambridge University Press. USA (1992), 76-80.
26. Leary, J. J., Skoog, A. D. Principios de Análisis Instrumental. 6^a edición. Ed. Cengage Learning Editores. México (2008), 430-432.
27. Anastas, P.T., Williamson, T. C. Green Chemistry An Overview. In Green Chemistry: Designing Chemistry for the Environment. *America Chemical Society Symposium Series*, **626**, (1996), 1-17.
28. Anastas, P.T., Farris, C. A. Benign by Design Chemistry. In Benign By Design for Pollution Prevention, *America Chemical Society Symposium Series*, **577**, (1994), 2-22.
29. Collins, T. J. Green Chemistry. Macmillan Encyclopedia of Chemistry. Ed. McMillan Inc, USA (1997).
30. Wilson, B. E., Decius, J.C., Cross, C. P. Molecular Vibrations, theory of Infrared and Raman Vibrational Spectra. Ed. Mc Graw-Hill. USA (1995).
31. Conn, T. G., Avery, G. D. Infrared methods principles and applications. Ed. Academic Press. USA (1960).

32. Aguilar, G. Fundamentos de catálisis heterogénea. Ed. Instituto Mexicano del Petróleo. México (1988), 6-34.
33. Scott F. H., Escalona G. R., Ramírez S. J. Elementos de ingeniería de las reacciones químicas. Ed. Pearson Educación. México (2001), 59-78.
34. Wittcoff, H., Reyben, B. Productos químicos orgánicos industriales. Materias primas y fabricación. Ed. Limusa. México (2000), 50-51.
35. Carballo, S. M. Introducción a la catálisis heterogénea. Ed. Universidad de Colombia. Colombia (2002), 6-10.
36. Izquierdo, F. J., Cunill, F., Tejero J., Iborra M., Fité C. Cinética de las Reacciones Químicas. Ed. Universitat Barcelona. España (2004), 154-156.
37. Gunter, R. C., Blinn, G. E., Pappas. J. L. *J. Econ Entomol.* **51**, (1958), 385-390.
38. Floresteno, J. *J. Pharmacol. Exptl. Therap.* **96**, (1949), 238-249.
39. Beck, J.S., Chu, C. T., Johnson, I. D., Kresge, C. T., Leonowicz, M. E., Roth, W. J. *J. Chem. Soc.*, **91**, (1991), 11390-11394.
40. Lamneck, J. H., Wise, P. H. *Nat. Advis. Comm. Aeronaut. Tech. Notes*, **17**, (1950), 2230.
41. Simmamura, O., Mizuno, Y. (*Tokio University*) *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **30**, (1957), 196-197.
42. McMurry, J., Lanto, A., Hernández, L., Vázquez, M. Química Orgánica. 7ª edición. Ed. Cengage Learning Editores. México (2008), 548-550.
43. González, G., Ruiz, V. Guía de Microscopía Electrónica. Ed. Universidad Nacional Autónoma de México. México (2003), 31-38.
44. Miranda, R., Arroyo, G., Penieres, G., Delgado, F., Cabrera, A., Álvarez, C., Salmón M. Preparative heterocyclic chemistry using tonsil, a bentonitic clay. *Trends in Heterocyclic Chemistry* .1981 TO 2003. **9**, (2003), 196-235.
45. Miranda, R., Delgado F., Velasco L., Pérez J., Salmón M. *Rapid Commun. Mass Spectrom.* **14**, (2000), 188–193.
46. Guggenheim, S., and Koster A., *Clay and Clay Minerals*, **49**(5), (2001), 433-443.
47. Domínguez, J., Schiefter, I. “Las Arcillas: El barro noble”. Ed. La ciencia desde México. México (1992).

48. Rivero, R. Análisis fisicoquímico y determinación del poder catalítico de un suelo originario del Estado de Sinaloa. Tesis Profesional. FES Cuautitlán, UNAM. Cuautitlán Izcalli, Estado de México (2008), 63.
49. Sánchez, D. Caracterización fisicoquímica de un suelo del estado de Campeche, México, y su posible uso como catalizador. Tesis Profesional. FES Cuautitlán, UNAM. Cuautitlán Izcalli, Estado de México (2008), 28.
50. Montiel, J. Caracterización fisicoquímica y determinación de la actividad de un suelo del Estado de Veracruz. Tesis Profesional. FES Cuautitlán, UNAM. Cuautitlán Izcalli, Estado de México (2008), 48.
51. Vargas R., Gómez V., Vázquez L., *Revista Mexica de Ciencias Geológicas*, **25**(1), (2008), 135-144.
52. Hatakeyama, T., Quinn, F: Thermal Analysis, fundamentals and applications to polymer science. Ed. Wiley and Sons. 2th edition. USA (1999).
53. Brunauer, S, Emmett, P., *J. Am, Chem. Soc.*, 59, (1937), 2680-2683.
54. Gyanani, Anil and Muggli, S. Darrin. Applied Catalysis B. *Enverimomental*, **84**, (2008), 591-597.
55. Cambell, J. T., Willard, Roberts, L.W. Encyclopedia of Minerals. 2da edición. Ed. Van Nostrand Reinhold Company. USA (1990).
56. Fleischer, M., Mandarino A. J. Glossary of Mineral Species. Ed. Mineral Recod. USA (1991).
57. Sinkankas, J. Gemstone and Mineral Data Book: A Compilation of Data, Recipes, Formulas and Instructions for the Mineralogist, Gemologist, Lapidary, Jeweler, Craftsman and Collector. Ed. Geoscience Press. USA (1988).
58. Pough, F. H., Peterson T. R. A field guide to rocks and minerals. 5th Edition. Ed. Houghton Mifflin Harcourt. USA (1988).

12 APÉNDICE A. Minerales encontrados en la muestra de Ciudad Delicias

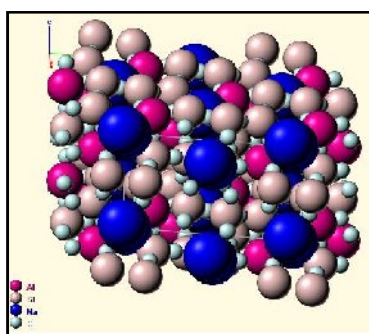
12.1.1. Albita⁵⁵⁻⁵⁸.

Información general	
Fórmula química	NaAlSi ₃ O ₈
Fórmula empírica	Na _{0.95} Ca _{0.05} Al _{1.05} Si _{2.95} O ₈
Nombre en inglés	Albite
Peso molecular	263.02 g/mol
Etimología	Del latín " <i>albus</i> " blanco
Sinónimos	Ab100, An0, Clevelandita.



Figura 12.1.1.1. Albita en su estado natural.

Clasificación			
Clase	Silicatos	Subclase	Tectosilicatos
Grupo	Feldespatos	Subgrupo	Plagioclasas
Clasificación de Dana		76.1.3.1 (76)Tectosilicato Al-Si.	



Composición Química				
Elemento	Porcentaje	Forma	Porcentaje	Forma
Sodio	8.30	Na	11.19	Na ₂ O
Calcio	0.76	Ca	1.07	CaO
Aluminio	10.77	Al	20.35	Al ₂ O ₃
Silicio	31.50	Si	31.50	SiO ₂
Oxígeno	48.66	O		

Figura 12.1.1.2. Composición química de la albita.

Propiedades Físicas			
Color	Incoloro, blanco, gris, más raramente verdoso, amarillento y rojo carne		
Raya	Blanca	Luminiscencia	Ninguna.
Brillo	Reluciente	Diafanidad	Transparente-translucido.
Dureza	7 (cuarzo)	Densidad	2.63 g/cm ³
Separación	[001] Perfecta, [010] Buena.		
Hábito	Bloques, gránulos y estriado.		
Fractura	Desigual.		

Óptico	Índices de refracción bajos, birrefringencia débil, ángulo de los ejes ópticos grande. Biáxico positivo
--------	---

Cristalografía			
Sistema y clase	Triclínico $\bar{1}$	Grupo espacial	$C\bar{1}$
Formas	[0 0 1] [1 0 0] [1 0 1] [0 1 0]		
Z (átomos por celda)	4	Volumen V	664.40
Líneas de DRX (intensidades)	4.02(7) - 3.77(5) - 3.66(6) - 3.21(7) - 3.18(10).		
Radio axiales	a:b:c = 0.6368:1:0.5599		
Dimensiones de la celda (Å)		Ángulos de la celda	
a	8.144	α	94.266°
b	12.787,	β	116.583°
c	7.16	γ	87.667°

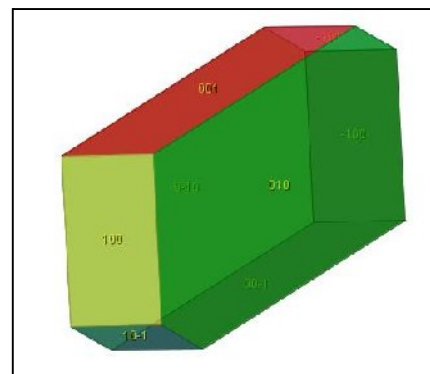


Figura 12.1.1.3. Forma [001] de la albita

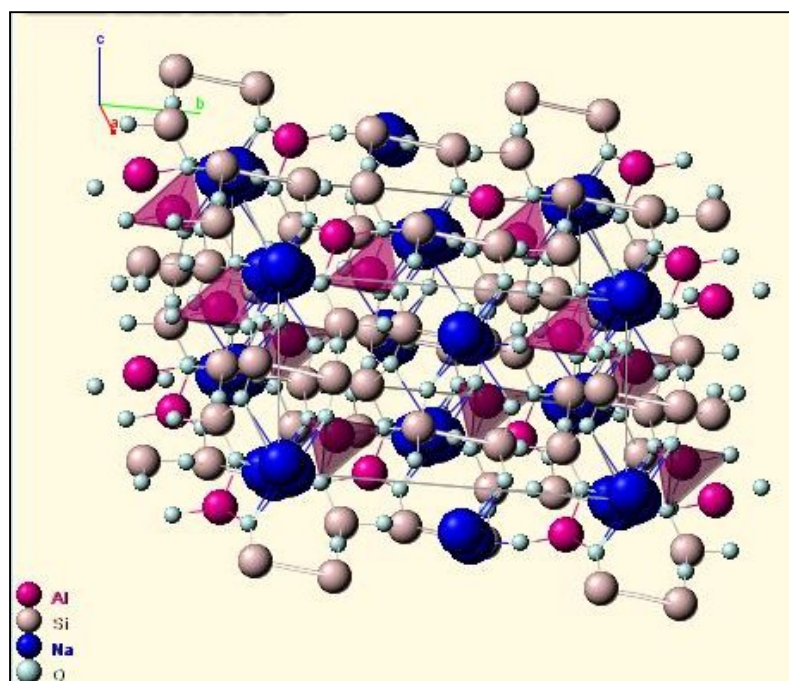


Figura Estructura

12.1.1.4. cristalina

de la albita.

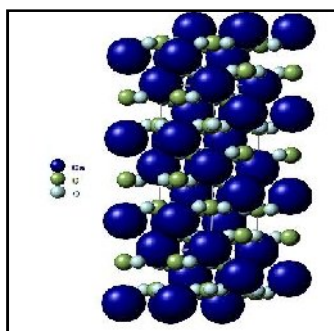
12.1.2. Calcita⁵⁵⁻⁵⁸

Información general	
Fórmula química	CaCO ₃
Fórmula empírica	(CO ₃)
Nombre en inglés	Calcite
Peso molecular	100.09 g/mol
Etimología	Del latín “ <i>calx</i> ” cal.
Sinónimos	ICSD 73446.



Figura 12.1.2.1. Calcita en su estado natural.

Clasificación			
Clase	Carbonatos	Subclase	-
Grupo	de la calcita	Subgrupo	-
Clasificación de Dana		14.1.1.1 (14) Anhydrous Carbonates	



Composición Química				
Elemento	Porcentaje	Forma	Porcentaje	Forma
Calcio	40.04	Ca	56.03	CaO
Carbón	12.00	C	43.97	CO ₂
Oxígeno	47.96			

Figura 12.1.2.2. Composición química de la calcita.

Propiedades Físicas			
Color	Incolora transparente o blancas, si bien algunas impurezas le dan coloraciones rojas, amarillentas, verdes, moradas, café, rosa.		
Raya	Blanca	Luminiscencia	Fluorescente
Brillo	Vítreo	Diapfanidad	Transparente- translucido - opaco.
Dureza	3 (Calcita)	Densidad	2.710 g/cm ³
Separación	[1011] Perfecta, [1011] Perfecta, [1011] Perfecta		
Hábito	Cristal, formando grandes masas.		
Fractura	Quebradizo.		
Óptica	Uniaxica negativa. Muy birrefringente.		

Cristalografía			
Sistema y clase	Hexagonal 32/m- romboédrica	Grupo espacial	R3c
Formas	[2 1 1] [0 1 1]		
Z (átomos por celda)	4,2	Volumen V	367.78
Líneas de DRX (intensidades)	3.04(10) - 2.29(2) - 2.10(2) - 1.913(2) - 1.875(2)		
Radios axiales	a:c = 1:3.41992		
Dimensiones de la celda (Å)		Ángulos de la celda	
a	4.989	α	-
b	-	β	-
c	17.062	γ	120
Dimensiones celda romboédrica (Å)		Ángulos celda romboédrica	
a	6.37	α	46

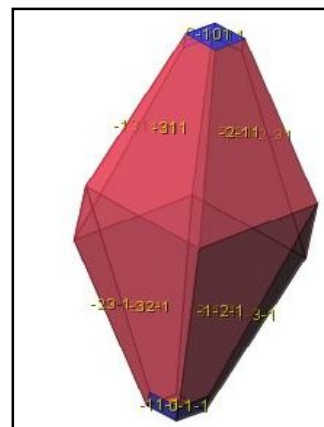


Figura 12.1.2.3. Forma [211] de la calcita.

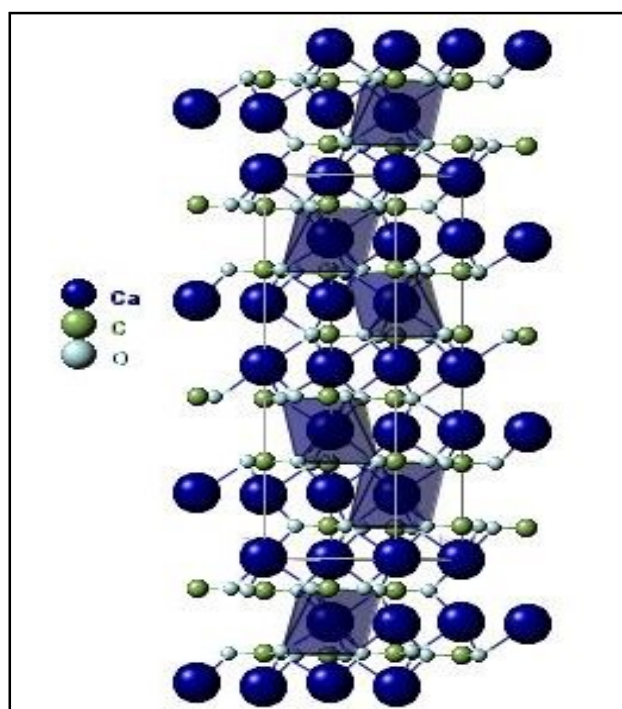


Figura 12.1.2.4. Estructura cristalina de la calcita.

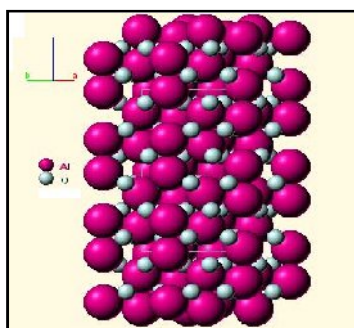
12.1.3. Corindón⁵⁵⁻⁵⁸

Información general	
Fórmula química	Al ₂ O ₃
Fórmula empírica	(Al ₂ O ₃)
Nombre en inglés	Corundum
Peso molecular	101.96 g/mol
Etimología	" <i>kauruntaka</i> " nombre indio del mineral. "Rubí"
Sinónimos	ICSD 31545, Zafiro (azul), Rubí (rojo).



Figura 12.1.3.1. Corindón en su estado natural.

Clasificación			
Clase	Óxidos	Subclase	-
Grupo	de la hematites	Subgrupo	-
Clasificación de Dana		4.3.1.1 (4) Óxidos simples.	



Composición Química				
Elemento	Porcentaje	Forma	Porcentaje	Forma
Aluminio	52.93	Al	10	Al ₂ O
Oxígeno	47.07	O		

Figura 12.1.3.2. Composición química del corindón.

Propiedades Físicas			
Color	Muy variado desde el rojo oscuro del <i>Rubí</i> hasta azul del <i>Zafiro</i> .		
Raya	Más clara que el color original.	Luminiscencia	Ninguna.
Brillo	Adamantino - vítreo.	Diafanidad	Transparente-translucido
Dureza	9	Densidad	3.98 a 4.10 g/cm ³
Separación	Ninguna.		
Hábito	Cristales euhedral , prismático, tabular.		
Fractura	Duro, difícil de romper como lo muestran los minerales fibrosos y la mayoría de los metales.		
Óptico	Uniáxico negativo.		

Cristalografía			
Sistema y clase	Hexagonal $32/m$	Grupo espacial	$R\bar{3}c$
Formas	[1 1 4] [2 0 1] [1 0 2] [1 0 1] [0 0 1]		
Z (átomos por celda)	6	Volumen V	253.54
Líneas de DRX (intensidades)	2.54(6) - 2.08(9) - 1.738(5) - 1.599(10) - 1.374(7)		
Radio axiales	a:c = 1:2.72995		
Dimensiones de la celda (Å)		Ángulos de la celda	
a	4.76	α	
b	-	β	
c	12.97	γ	

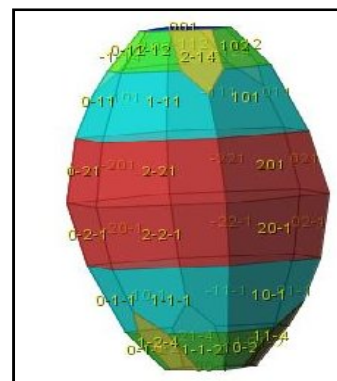


Figura 12.1.3.3. Forma [114] del corindón.

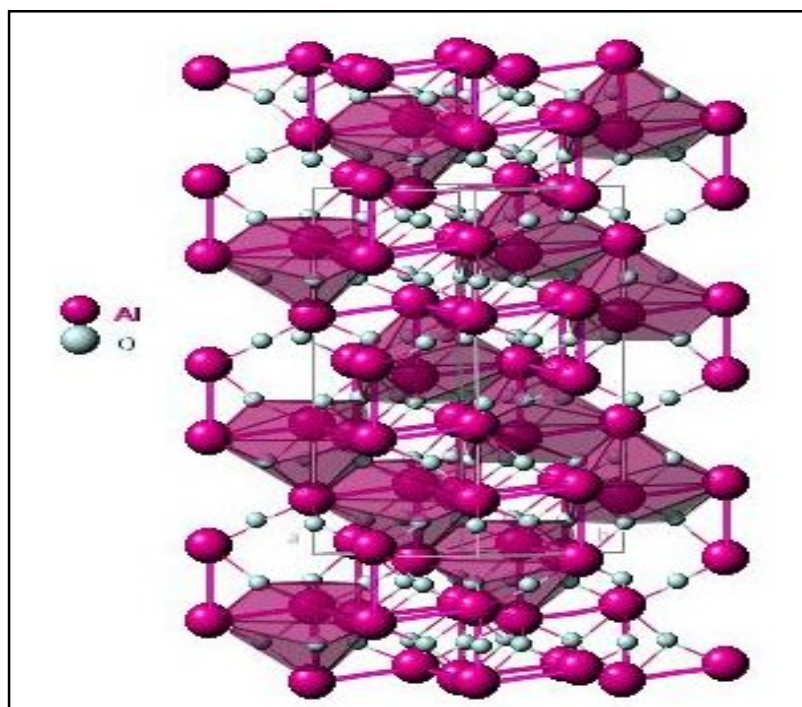


Figura 12.1.3.4. Estructura cristalina del corindón.

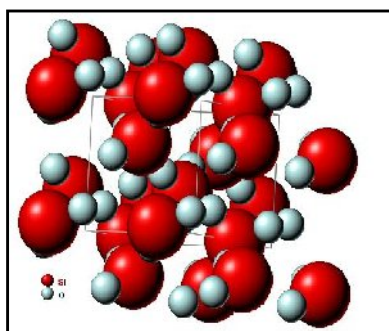
12.1.4. Cuarzo⁵⁵⁻⁵⁸

Información general	
Fórmula química	SiO ₂
Fórmula empírica	(SiO ₂)
Nombre en inglés	Quartz
Peso molecular	60.08 g/mol
Etimología	Del alemán " <i>Quarz</i> "
Sinónimos	Agata, Amatista, Pedernal, Ojo de gato, etc.



Figura 12.1.4.1. Cuarzo en su estado natural.

Clasificación			
Clase	Silicatos	Subclase	Tectosilicatos
Grupo	De la sílice	Subgrupo	-
Clasificación de Dana	75.1.3.1 (75) Tectosilicato		



Composición Química				
Elemento	Porcentaje	Forma	Porcentaje	Forma
Silicio	46.74	Si	100.00	SiO ₂
Oxígeno	53.26	O		

Figura 12.1.4.2. Composición química del cuarzo.

Propiedades Físicas			
Color	Café, incoloro, violeta, gris, amarillo, rosa, rojo.		
Raya	Blanca	Luminiscencia	Triboluminiscente
Brillo	Vitreo	Diafanidad	Transparente.
Dureza	7 (Cuarzo)	Densidad	2.62 g/cm ³
Separación	[0110] Indistinta		
Hábito	Cristal fino.		
Fractura	Conchoidal, fracturas desarrolladas en materiales quebradizos se caracteriza por las superficies suavemente curvas.		
Óptico	Débil birrefringencia, polarización rotatoria, uniáxico positivo.		

12.1.5. Ulvospinel⁵⁵⁻⁵⁸

Información general	
Fórmula química	TiFe ²⁺ ₂ O ₄
Fórmula empírica	TiFe ²⁺ ₂ O ₄
Nombre en inglés	Ulvospinel
Peso molecular	223.57 g/mol
Etimología	Nombrado por el lugar y grupos espinel.
Sinónimos	Ulvita, ulvospinela.

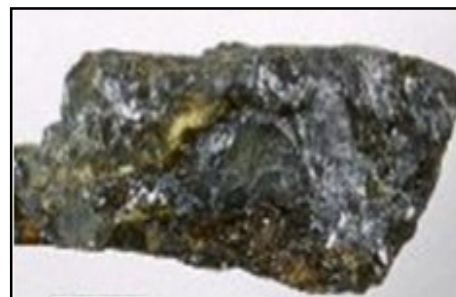
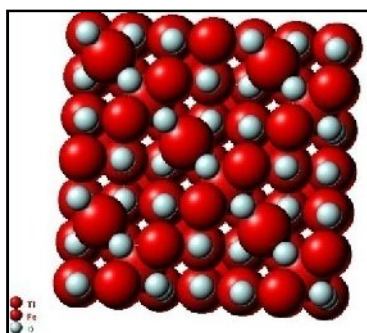


Figura 12.1.5.1. Ulvospinel en su estado natural.

Clasificación			
Clase		Subclase	
Grupo	Espinel.	Subgrupo	Titanio
Clasificación de Dana	7.2.5.2 (7) Múltiples óxidos.		



Composición Química				
Elemento	Porcentaje	Forma	Porcentaje	Forma
Titanio	21.42 %	TiO ₂	35.73 %	
Hierro	49.96 %	FeO	64.27 %	
Oxígeno	28.63 %			

Figura 12.1.5.2. Composición química del ulvospinel.

Propiedades Físicas			
Color	Negro		
Raya	Negra.	Luminiscencia	-
Brillo	Metálico	Diafanidad	Opaco
Dureza	6 (Cuchillo Blindado)	Densidad	4.91 g/cm ³
Óptico	Isotrópico		

Cristalografía			
Sistema y clase	Cúbica	Grupo espacial	Fd-3m
Formas	-		
Z (átomos por celda)	8	V (Å ³)	605.41
Líneas de DRX (intensidades)	4.924(10), 3.018(30), 2.573(100), 2.134(20), 1.742(10), 1.643(30), 1.509(40), 0.871(10)		
Radios axiales			
Dimensiones de la celda (Å)		Ángulos de la celda	
a	8.4596	α	90°
b	8.4596	β	90°
c	8.4596	γ	90°

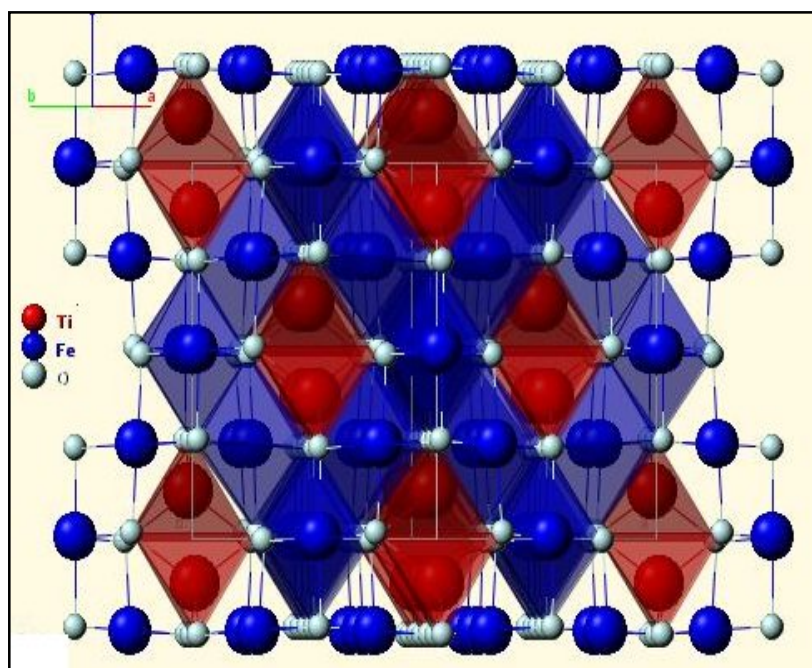


Figura 12.1.5.3. Estructura Cristalina del ulvospinel.

13 APÉNDICE B. Listado de Tablas.

Tabla 4.2.3.1. Clasificación de los poros de acuerdo a su tamaño de diámetro.	7
Tabla 4.3.1. Tipos de silicatos.	10
Tabla 4.3.2 Clasificación de las arcillas.	12
Tabla 4.4.1 Técnicas de caracterización de minerales aluminosilícicos.	13
Tabla 8.2 Condiciones de operación para la obtención de los benciltoluenos y dibenciltoluenos	27
Tabla 9.2. Composición química de la muestra de suelo H13-11 Delicias.	31
Tabla 9.3.1 Parámetros superficiales.	32
Tabla 9.3.2. Comparación con otros suelos mexicanos.	33
Tabla 9.7.1. Determinación de los sitios ácidos de Lewis y Bronsted-Löwry.	41
Tabla 9.7.2. Absorción de la piridina en los sitios ácidos de Lewis y Bronsted-Löwry.	42
Tabla 9.8.1. Porcentajes de formación de los productos con su respectivo tiempo de reacción, utilizando microondas.	50
Tabla 9.8.2. Porcentajes de formación de los productos con su respectivo tiempo de reacción, utilizando infrarrojo.	50
Tabla 9.8.3. Porcentajes de formación de los productos con su respectivo tiempo de reacción, utilizando tratamiento térmico tradicional.	51
Tabla 9.8.4. Comparación de porcentajes de formación entre las diferentes fuentes de activación.	53
Tabla 9.8.5. Comparación del consumo energético entre las diferentes fuentes de activación.	53
Tabla No. 9.8.6. Comparación del consumo energético entre las diferentes fuentes de activación a un porcentaje determinado de formación.	54
Tabla 9.9.1. Ecuaciones integradas para obtener el orden de reacción y sus coeficientes de correlación para las diferentes fuentes de activación.	55

14 APÉNDICE C. Listado de Figuras.

Figura 4.1.1. Localización del Estado Chihuahua.	1
Figura 4.1.2. Ubicación de Ciudad Delicias en el Estado de Chihuahua.	2
Figura 4.1.3. Mapa de los suelos dominantes de la República	4
Figura 4.2.1 Sección transversal de la Tierra a través de un continente.	5
Figura 4.2.2. Esquema de las fases del suelo	7
Figura 4.2.3.1. Escala de tamaños de partícula de acuerdo a los estándares internacionales.	8
Figura 4.3.1. Estructura de las arcilla.	11
Figura 4.4.3.1. Variación en la energía de activación al usar un catalizador.	18
Figura 4.9.1. Estructura de los benciltoluenos.	19
Figura 4.9.2. Estructura molecular de los dibenciltoluenos.	20
Figura 8.2.1. Reacción de Friedel Crafts.	27
Figura 9.1.1. Patrón de difracción de rayos-X de la muestra H13-11, Delicias.	30
Figura No. 9.4.1. Espectro de resonancia magnética nuclear para núcleos de aluminio.	34
Figura No. 9.4.1. Espectro de resonancia magnética nuclear para núcleos de silicio	35
Figura 9.5.1. Calorimetría diferencial de barrido (DSC) de la muestra H13-11, Delicias.	36
Figura 9.5.2. Análisis termogravimétrico (TGA) de la muestra H13-11, Delicias.	37
Figura 9.6.1. Micrograma H13-11(2-10X) Delicias.	38
Figura 9.6.2. Micrograma H13-11 (2-30X) Delicias.	39
Figura 9.6.3. Micrograma H13-11 (2-450X) Delicias.	39
Figura 9.6.4. Micrograma H13-11 (2-2000X) Delicias.	40
Figura 9.7.1 Espectrofotometría de Absorción Infrarroja en presencia de piridina.	41
Figura 9.7.2. Comportamiento de los sitios ácidos de Lewis y Brönsted-Löwry ante el aumento de la temperatura	43
Figura 9.8.1. Espectro de masas obtenido a los 4 min. de reacción utilizando	45

infrarrojo a un tiempo de 2.28 min de retención	
Figura 9.8.2. Espectro de masas obtenido a los 4 min. de reacción utilizando infrarrojo a un tiempo de 3.16 min de retención.	46
Figura 9.8.3. Espectro de masas obtenido a los 4 min. de reacción utilizando infrarrojo a un tiempo de 16.93 min de retención.	47
Figura 9.8.4. Cromatograma perteneciente a los productos obtenidos a los 10 min. de reacción mediante microondas.	48
Figura 9.8.5. Cromatograma perteneciente a los productos obtenidos a los 17 min. de reacción mediante infrarrojo.	49
Figura 9.8.6. Cromatograma perteneciente a los productos obtenidos a los 20 min. de reacción mediante tratamiento térmico tradicional.	49
Figura 9.8.7. Comparación entre los porcentajes de formación total respecto a tiempo de reacción transcurrido utilizando diferentes fuentes de activación.	52
Figura 9.8.8. Representación de Powell experimental utilizando microondas.	56
Figura 9.8.9. Representación de Powell experimental usando infrarrojo.	56
Figura 9.8.10. Representación de Powell experimental empleando tratamiento térmico tradicional.	56
Figura 9.8.11. Comparación entre la representación de Powell teórica y las obtenidas experimentalmente.	58
Figura 12.1.1.1. Albita en su estado natural.	65
Figura 12.1.1.2. Composición química de la albita.	65
Figura 12.1.1.3. Forma [001] de la albita.	66
Figura 12.1.1.4. Estructura cristalina de la albita.	66
Figura 12.1.2.1. Calcita en su estado natural.	67
Figura 12.1.2.2. Composición química de la calcita.	67
Figura 12.1.2.3. Forma [211] de la calcita.	68
Figura 12.1.2.4. Estructura cristalina de la calcita.	68
Figura 12.1.3.1. Corindón en su estado natural.	69
Figura 12.1.3.2. Composición química del corindón.	69
Figura 12.1.3.3. Forma [114] del corindón.	70
Figura 12.1.3.4. Estructura cristalina del corindón.	70

Figura 12.1.4.1. Cuarzo en su estado natural.	71
Figura 12.1.4.2. Composición química del cuarzo.	71
Figura 12.1.4.3. Forma [211] del cuarzo.	72
Figura 12.1.4.4. Estructura cristalina del cuarzo.	72
Figura 12.1.5.1. Ulvospinel en su estado natural.	73
Figura 12.1.5.2. Composición química del ulvospinel.	73
Figura 12.1.5.3. Estructura Cristalina del ulvospinel.	74