



LA ESTRUCTURA ELECTRÓNICA DE LOS ÁNODOS Y SU CAPACIDAD PARA ELECTROOXIDAR MATERIA ORGÁNICA VÍA RADICALES HIDROXILO

Raciel Jaimes López^{1*}, Jorge Gabriel Vázquez-Arenas¹, Ignacio González Martínez¹, Marcelo Enrique Galván Espinosa¹

¹Departamento de Química, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, Av. San Rafael Atlixco No. 186, C.P 09340, Del. Iztapalapa, CDMX; México
*racieljaimes@gmail.com

La naturaleza del ánodo es decisiva en la mineralización electroquímica de contaminantes orgánicos en medio acuoso¹. El material de referencia para estos procesos es el diamante dopado con boro², BDD por sus siglas en inglés. La sustitución del BDD por un material con actividad similar, pero de bajo costo, se ha visto impedida por la inestabilidad de los materiales probados; encontrar sustitutos permitiría la implementación masiva de estos procesos de remediación ambiental. Del análisis del comportamiento experimental de diversos sistemas, se ha planteado la hipótesis de que una característica clave para el desempeño de los materiales en la mineralización, es la energía de adsorción del radical OH[•], en su superficie. Con la finalidad de avanzar en el estudio de materiales alternativos al BDD, en este trabajo se determina, por métodos ab-initio, la energía de adsorción del OH[•], para coberturas del 50 y 100% en las superficies mas estables de varios óxidos metálicos y se compara con la calculada previamente para el BDD². Se determinó que dicha energía sigue la secuencia: IrO₂>RuO₂>SnO₂≈ TiO₂≈ PbO₂> BDD. Adicionalmente, se determinó que la energía de reacción de los radicales adsorbidos, frente a un orgánico modelo (catecol) tiene la tendencia contraria: IrO₂<RuO₂<SnO₂≈ TiO₂≈ PbO₂< BDD. Esta tendencia es similar a la conocida experimentalmente para la oxidación de materia orgánica en general. Se discute en el trabajo el posible uso de este tipo de evaluaciones en el diseño de nuevos materiales anódicos para la mineralización electroquímica.

(1) Martínez-Huitle, C. A.; Brillas, E. Decontamination of Wastewaters Containing Synthetic Organic Dyes by Electrochemical Methods: A General Review. *Appl. Catal. B Environ.* **2009**, 87, 105–145.

(2) Jaimes, R., Vazquez-Arenas, J., González, I., Galván, M. Delimiting the Boron Influence on the Adsorptive Properties of Water and •OH radicals on H-terminated Boron Doped Diamond Catalysts: A Density Functional Theory Analysis. *Surf. Sci.* **2016**, 653, 27-33.