

Sistema Fenol–TiO₂–Poliestireno: Un Modelo de Fotocatálisis Avanzada para Reciclaje Químico de Plásticos Aromáticos

C. A. Gómez Márquez ^{#1}, G. A. Torres Avalos ^{#2}, J. A. Medina Muñoz ^{#3}, C. A. Valenzuela Melchor ^{#4}

[#]Tecnológico Nacional de México: Instituto Tecnológico José Mario Molina Pasquel y Henríquez, Unidad Académica Lagos de Moreno, Jalisco, México.

¹ clara.gomez@lagos.tecmm.edu.mx, ² gerardo.torres@lagos.tecmm.edu.mx,
³ juan.medina@lagos.tecmm.edu.mx, ⁴ carlos.valenzuela@lagos.tecmm.edu.mx.

Resumen— Este proyecto de investigación aborda la depolimerización fotocatalítica del poliestireno utilizando dióxido de titanio (TiO₂) como catalizador, buscando una solución de punta y sostenible para el reciclaje de plásticos. La acumulación de residuos plásticos, especialmente poliestireno, representa un problema ambiental crítico debido a su resistencia a la degradación y a los límites del reciclaje convencional. La fotocatalisis con TiO₂, activada por luz UV, genera pares electrón-hueco y especies reactivas que pueden participar en procesos de oxidación de compuestos orgánicos. A través de un diseño experimental optimizado, el proyecto evaluará la eficiencia del proceso bajo distintas condiciones de concentración de TiO₂, intensidad de luz y tipo de solvente. Las ventajas del TiO₂, como su estabilidad, bajo costo y amplia disponibilidad, lo convierten en un candidato atractivo para explorar aplicaciones en la gestión de residuos plásticos.

Palabras clave— Fotocatálisis, Depolimerización del poliestireno, Dióxido de titanio (TiO₂), Reciclaje de residuos plásticos, Tecnología sostenible.

Abstract— This research project addresses the photocatalytic depolymerization of polystyrene using titanium dioxide (TiO₂) as a catalyst, aiming to explore a sustainable route for plastic recycling. The accumulation of plastic waste, particularly polystyrene, poses a critical environmental issue due to its persistence and the limitations of conventional recycling. TiO₂ photocatalysis under UV irradiation generates electron-hole pairs and reactive oxygen species that may participate in oxidation processes involving organic materials. Through an optimized experimental design, this study evaluates the process under varying conditions of TiO₂ concentration, light intensity, and solvent type. The stability, low cost, and availability of TiO₂ make it an attractive candidate for exploratory applications in plastic waste management.

Keywords— Photocatalysis, Polystyrene depolymerization, Titanium dioxide (TiO₂), Plastic waste recycling, Sustainable technology.

I. INTRODUCCIÓN

La creciente acumulación de residuos plásticos representa uno de los problemas ambientales más graves del siglo XXI. Los polímeros sintéticos, como el poliestireno, se utilizan ampliamente en la fabricación de envases y productos, y su persistencia dificulta su gestión dentro de los esquemas actuales de reciclaje y recuperación [1–3].

La fotocatalisis es una técnica que utiliza la energía de la luz para activar un catalizador, promoviendo reacciones de oxidación-reducción que pueden transformar compuestos orgánicos. En el caso del TiO₂, la irradiación con luz ultravioleta genera pares electrón-hueco capaces de originar especies reactivas de oxígeno, como radicales hidroxilo y superóxido [4–5].

Estas especies reactivas pueden participar en procesos de oxidación y ruptura de enlaces en moléculas orgánicas. En polímeros aromáticos como el poliestireno, la hipótesis de trabajo consiste en favorecer la fragmentación de la cadena y la formación de productos de menor peso molecular, incluyendo especies relacionadas con el estireno, el monómero básico del poliestireno. Esta hipótesis se alinea con enfoques recientes de reciclaje químico, upcycling catalítico y reformado solar de residuos, aunque requiere validación específica para el sistema fenol–TiO₂–poliestireno [4–10].

El TiO₂ es uno de los fotocatalizadores más estudiados debido a su estabilidad química, bajo costo relativo, disponibilidad y capacidad para generar especies oxidantes bajo luz UV [4–5]. Al absorber fotones con energía suficiente, el TiO₂ genera un par electrón-hueco en su superficie; estas cargas desencadenan reacciones interfaciales que pueden oxidar especies adsorbidas o disueltas [4–5].

Este proceso puede desarrollarse bajo condiciones moderadas de temperatura y presión, lo que representa una ventaja conceptual frente a rutas térmicas de mayor demanda energética. En este trabajo, la aplicación al sistema fenol–TiO₂–poliestireno se plantea como una ruta experimental de exploración; por ello, las evidencias obtenidas deben interpretarse como resultados preliminares y no como una demostración industrial definitiva [4–10].

La implementación de la depolimerización fotocatalítica utilizando dióxido de titanio (TiO₂) representa un campo de investigación emergente con posibilidades innovadoras y aún poco exploradas. Aunque la fotocatalisis de TiO₂ ha sido ampliamente estudiada en la degradación de compuestos orgánicos, su aplicación directa a matrices poliméricas requiere optimización específica. La disolución previa del

polímero en un medio orgánico se emplea en este trabajo para incrementar el contacto entre el polímero y el catalizador.

La selección adecuada del solvente es fundamental, ya que influye en la solubilización del poliestireno, la dispersión del TiO_2 y la exposición del polímero a las especies reactivas generadas. Sin embargo, el uso de solventes orgánicos también plantea desafíos ambientales y de seguridad, por lo que la recuperación del solvente y la evaluación del impacto del proceso deben considerarse desde etapas tempranas [4-6,11].

Además, la aplicación de TiO_2 en forma de nanopartículas incrementa el área superficial disponible, lo cual puede favorecer la separación de cargas y la generación de especies reactivas. No obstante, el desempeño real depende de la fase cristalina, el tamaño de partícula, la dispersión, la intensidad de luz y la recombinación electrón-hueco [4-5].

El mecanismo de reacción en la depolimerización fotocatalítica del poliestireno utilizando TiO_2 se plantea como una ruta de trabajo. Bajo radiación UV, el TiO_2 genera un par electrón-hueco: un electrón en la banda de conducción y un hueco en la banda de valencia. Estas especies pueden reaccionar con agua y oxígeno para producir radicales hidroxilo y superóxido, capaces de oxidar compuestos orgánicos cercanos a la superficie del catalizador [4-5].

Esta generación de radicales libres, que oxidan las cadenas poliméricas y potencialmente liberan monómeros y oligómeros, abre nuevas oportunidades para descomponer el poliestireno de manera controlada, una aplicación hasta ahora poco estudiada en el contexto del TiO_2 como catalizador para este polímero.

Además, en presencia de oxígeno, el proceso podría presentar mayor eficiencia, ya que el oxígeno actúa como aceptor de electrones y puede reducir la recombinación de los pares electrón-hueco. Esta condición sugiere que la fotocatalisis con TiO_2 podría favorecer la degradación parcial del poliestireno, aunque la selectividad hacia estireno y oligómeros debe confirmarse mediante técnicas analíticas calibradas [4, 5, 13].

Dado el escaso enfoque previo en la interacción entre el TiO_2 y el poliestireno en fase líquida, este proyecto presenta una propuesta de exploración para reciclaje químico avanzado. El uso de TiO_2 como catalizador en la degradación de matrices orgánicas es sólido en la literatura, pero su extrapolación al poliestireno requiere evidencia experimental específica [4-10].

Este proceso, al operar con luz UV y sin agentes oxidantes adicionales en la formulación principal, podría reducir ciertos requerimientos energéticos respecto de rutas térmicas. Aun así, la viabilidad ambiental depende del balance completo del sistema, incluyendo recuperación de solvente, consumo eléctrico, manejo de fenol y regeneración del catalizador [4-10].

Existen factores críticos que influyen en la eficiencia de este proceso, tales como la intensidad y longitud de onda de la luz UV, la cantidad y forma cristalina del TiO_2 , el área superficial, la dispersión del catalizador y la configuración experimental del sistema de reacción. Asimismo, debe evaluarse la posible desactivación del catalizador por adsorción de compuestos orgánicos en su superficie [4-5].

La exploración de esta tecnología aún se encuentra en sus primeras etapas, y este estudio podría establecer las bases para mejorar el uso de TiO_2 en la descomposición fotocatalítica de plásticos como el poliestireno, ofreciendo una solución viable tanto desde el punto de vista ambiental como económico en el ámbito del reciclaje químico.

La depolimerización fotocatalítica del poliestireno utilizando TiO_2 es un enfoque experimental que podría ofrecer una nueva vía para el reciclaje químico de residuos plásticos. La idea central es explorar si un material reconocido por sus propiedades fotocatalíticas bajo luz ultravioleta puede inducir transformaciones oxidativas en un polímero persistente como el poliestireno. Esta posibilidad debe tratarse como hipótesis experimental y validarse con controles adecuados [4-10].

Al realizarse en condiciones moderadas de temperatura y presión, este método pretende reducir la dependencia energética que caracteriza otros métodos de reciclaje, como el reciclaje térmico. Sin embargo, es necesario investigar si el poliestireno responde a esta interacción con el TiO_2 de manera eficiente y si los productos obtenidos son recuperables y reutilizables. La optimización de la luz UV, la concentración de TiO_2 y el solvente siguen siendo aspectos clave del proceso [4-10].

Si los estudios confirman su efectividad, este enfoque experimental podría representar un avance significativo en el tratamiento de residuos de poliestireno, alineándose con los principios de la economía circular y ofreciendo una alternativa más sostenible para la gestión de plásticos.

II. OBJETIVOS

A. General

1.- Desarrollar y optimizar un proceso de depolimerización fotocatalítica del poliestireno utilizando dióxido de titanio (TiO_2) como catalizador, para lograr la descomposición del polímero.

B. Específicos

- 1.- Evaluar la influencia de variables experimentales en la descomposición química.
- 2.- Analizar probables productos de la descomposición mediante técnicas espectrofotométricas.
- 3.- Determinar las condiciones óptimas para fotocatalisis.

III. MARCO TEÓRICO

La fotocatalisis es una tecnología que emplea la energía de la luz para activar un catalizador y promover reacciones químicas de oxidación y reducción en la superficie del mismo. Este proceso ha ganado atención debido a su capacidad para transformar compuestos orgánicos en condiciones moderadas de temperatura y presión. En términos generales, un fotocatalizador como el dióxido de titanio (TiO_2), al ser irradiado con luz ultravioleta, genera pares de electrones y huecos que pueden reaccionar con el oxígeno y el agua presentes, formando radicales libres altamente reactivos [4-5].

La fotocatalisis es utilizada en aplicaciones como la purificación de agua y aire, el tratamiento de residuos y el desarrollo de procesos de oxidación avanzada. En el contexto de los polímeros, su aplicación debe considerarse todavía como una ruta de investigación, ya que la fragmentación selectiva de cadenas poliméricas requiere controlar simultáneamente oxidación, recombinación radicalaria y recuperación de productos [4-10].

El dióxido de titanio (TiO_2) es uno de los fotocatalizadores más utilizados debido a sus propiedades favorables, tales como estabilidad química, actividad fotocatalítica, bajo costo relativo y baja toxicidad. TiO_2 existe en varias formas cristalinas, siendo anatasa y rutilo las más comunes. La anatasa presenta una banda prohibida cercana a 3.2 eV, lo que le permite absorber luz en el rango ultravioleta. Al ser irradiado con luz UV, el TiO_2 genera electrones en la banda de conducción y huecos en la banda de valencia; estas cargas pueden participar en reacciones con oxígeno y agua para producir especies oxidantes [4-5].

La actividad fotocatalítica del TiO_2 es efectiva en la degradación de diversos compuestos orgánicos debido a que estas especies reactivas atacan enlaces químicos susceptibles. Además, el TiO_2 es un catalizador abundante y de amplia disponibilidad, lo que lo convierte en una opción atractiva para aplicaciones ambientales. No obstante, un desafío importante es su dependencia de luz UV; por ello, se estudian materiales dopados, soportados o modificados para extender su absorción hacia el espectro visible y mejorar la separación de cargas [4-5]. Ver Fig. 1.

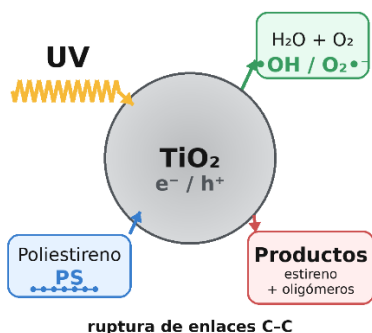


Fig. 1. Representación esquemática de la reacción fotocatalítica del TiO_2 .

La depolimerización es el proceso mediante el cual un polímero es degradado a moléculas de menor peso molecular, idealmente a sus monómeros básicos. En el caso del poliestireno, una meta deseable es obtener estireno o fracciones oligoméricas valorizables. El mecanismo propuesto para el sistema con TiO_2 bajo luz UV implica una serie de reacciones redox que generan radicales oxidantes capaces de inducir la escisión parcial de enlaces en la cadena polimérica. Esta interpretación requiere confirmación analítica mediante estándares y controles adecuados [4, 5, 13].

La presencia de oxígeno puede ser relevante en este proceso, ya que actúa como aceptor de electrones y reduce la recombinación de los pares electrón-hueco. Además, la inclusión de un solvente orgánico para disolver el poliestireno antes de la reacción fotocatalítica busca mejorar el contacto entre el polímero y el TiO_2 , facilitando la interacción entre las especies reactivas y la cadena polimérica.

La depolimerización fotocatalítica con TiO_2 se presenta como una posibilidad innovadora en el tratamiento de residuos plásticos, aunque el impacto específico de este proceso en el poliestireno aún no ha sido documentado de forma concluyente. La premisa es que el TiO_2 , conocido por sus capacidades fotocatalíticas, podría inducir reacciones que descompongan parcialmente el poliestireno. La confirmación de monómeros u oligómeros debe realizarse mediante técnicas cromatográficas y espectroscópicas validadas [4, 5, 13].

En este estudio, la implementación de sistemas de reacción en fase líquida, donde el poliestireno se disuelve en fenol antes de la exposición a TiO_2 sólido y luz UV-visible, busca maximizar la superficie de contacto entre el polímero y el catalizador. Esto podría facilitar la interacción y favorecer la formación de productos de menor peso molecular; no obstante, la selectividad hacia estireno debe considerarse preliminar mientras no se confirme con estándares externos.

La viabilidad de este proceso en contextos industriales aún está en fase de exploración, y un enfoque experimental es esencial para confirmar si el TiO_2 puede catalizar efectivamente la degradación del poliestireno. De ser efectiva, esta técnica aportaría al reciclaje de poliestireno y a la economía circular, siempre que el proceso incluya recuperación de solvente, control de emisiones y balance energético favorable [1-3, 6-10].

Aunque el TiO_2 presenta ventajas notables como fotocatalizador, su uso en la depolimerización del poliestireno enfrenta desafíos. Uno de los principales problemas es la necesidad de irradiación con luz UV, que representa consumo energético y requiere equipos específicos. Además, el TiO_2 puede perder eficacia por adsorción de residuos orgánicos en su superficie, fenómeno

asociado con desactivación del catalizador, por lo que deben evaluarse estrategias de regeneración [4-5].

Otro desafío es la formación de subproductos no deseados durante el proceso de depolimerización. Si bien el objetivo principal es recuperar estireno, la reacción fotocatalítica también puede producir otros compuestos de bajo peso molecular que deben ser separados y purificados, lo que añade complejidad al proceso. Por ello, el desarrollo de catalizadores dopados, soportados o combinados con otros materiales debe evaluarse en función de eficiencia y selectividad [4-5].

A medida que la demanda de soluciones sostenibles para el manejo de residuos plásticos aumenta, la depolimerización fotocatalítica con TiO_2 representa una alternativa de investigación que podría permitir la reducción de residuos y la recuperación de productos valorizables. También se investiga el empleo de luz visible en lugar de luz UV, lo cual podría reducir el costo energético del proceso y facilitar su implementación a mayor escala [4-10].

En conclusión, el uso de TiO_2 como fotocatalizador en la degradación del poliestireno es un área de investigación con potencial en la gestión de residuos plásticos. Aunque existen desafíos técnicos y económicos, los avances en fotocatalisis y reciclaje químico abren oportunidades para desarrollar procesos más sostenibles y efectivos. Este enfoque puede contribuir a la economía circular si se demuestra su selectividad, eficiencia y viabilidad ambiental [4-10].

IV. MATERIALES Y MÉTODOS

Para la presente investigación se utilizó fenol de alta pureza ($\geq 99\%$), adquirido de la casa comercial Sigma-Aldrich, en su presentación líquida. Este compuesto se seleccionó debido a su capacidad para disolver eficientemente polímeros aromáticos como el poliestireno, además de su estabilidad bajo condiciones de irradiación UV. El fenol empleado posee un punto de ebullición de 181.7°C y una densidad de 1.07 g/cm^3 a 20°C , características que lo hacen adecuado para procesos termo-fotoquímicos en fase líquida. Su polaridad intermedia favorece la interacción con especies reactivas generadas durante la fotocatalisis, facilitando el ataque a la cadena polimérica.

Como fuente de polímero se utilizó poliestireno expandido reciclado, proveniente de residuos post-consumo doméstico. El material fue previamente lavado, secado, y triturado manualmente hasta obtener fragmentos menores a 5 mm. Esta elección responde al interés de evaluar la viabilidad del proceso con materiales reales de desecho bajo un enfoque de economía circular.

Para la activación fotocatalítica, se empleó dióxido de titanio (TiO_2) en forma de nanopartículas comerciales prefabricadas (anatasa, tamaño de partícula promedio $<25\text{ nm}$), también provistas por Sigma-Aldrich. Esta forma nanoestructurada fue seleccionada por su alta relación

superficie-volumen, lo cual maximiza la generación de pares electrón-hueco bajo irradiación UV, aumentando significativamente la eficiencia del proceso de descomposición del poliestireno.

Se preparó una solución viscosa de poliestireno disuelto en fenol con el fin de evaluar su comportamiento fotoquímico bajo irradiación ultravioleta. Para ello, se trituraron 1.0 g de poliestireno expandido en fragmentos pequeños y se disolvieron en 50 mL de fenol puro en un matraz de vidrio de borosilicato. La disolución se calentó a $60\text{--}70^\circ\text{C}$ bajo agitación durante aproximadamente 30 minutos, hasta obtener una mezcla homogénea. Ver figura 2.

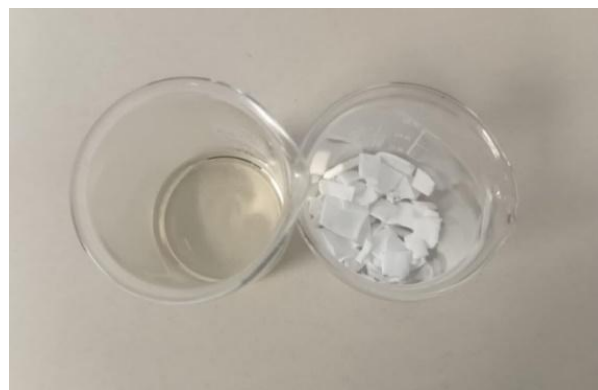


Fig. 2. Disolución de Poliestireno en Fenol líquido.

La solución obtenida se colocó en una cámara de irradiación UV equipada con lámparas de 254 nm y 365 nm. Véanse las figuras 3 y 4. Se expusieron alícuotas de la muestra a diferentes tiempos de irradiación (1, 2 y 4 horas) con control de temperatura. Como control negativo, se utilizó una muestra idéntica protegida con papel aluminio y mantenida bajo las mismas condiciones, pero sin exposición a la luz UV. Ver figura 6.

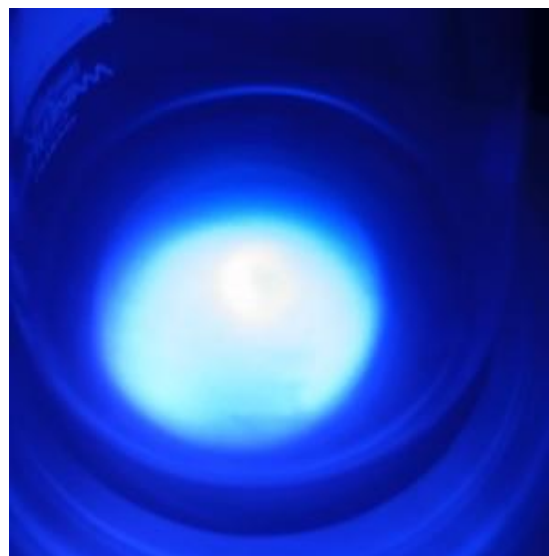


Fig. 3. Irradiación con UV sobre el recipiente de reacción.

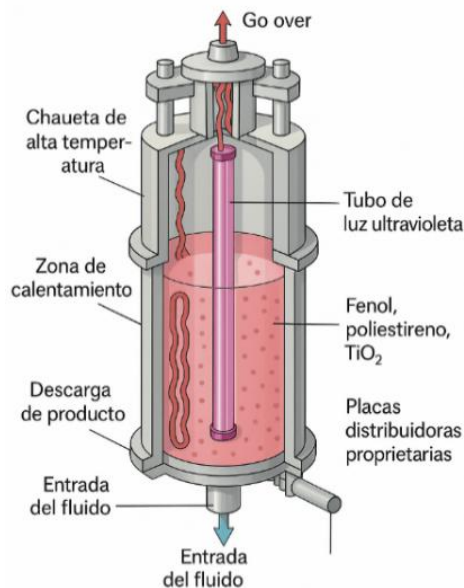


Fig. 4. Diagrama del fotoreactor utilizado.

Tras la irradiación, se observaron cambios visuales en el color, la viscosidad y la formación de posibles fases sólidas.

Las muestras irradiadas y el control se analizaron mediante las técnicas espectroscópicas UV-Vis y ¹H-RMN con el objetivo de identificar posibles productos de degradación o modificación estructural del poliestireno.

Durante todo el procedimiento se emplearon guantes, gafas de protección UV y se trabajó en campana de extracción para evitar la exposición a vapores de fenol y a la radiación ultravioleta. Los residuos generados fueron recolectados y neutralizados adecuadamente.

V. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Tras la irradiación del poliestireno disuelto en fenol con luz ultravioleta, se observaron una serie de cambios físicos y químicos en función del tiempo de exposición. A continuación, se presentan los principales resultados obtenidos:

TABLA I
OBSERVACIONES VISUALES DURANTE LA FASE EXPERIMENTAL

Tiempo (h)	Color	Viscosidad	Sólidos	Observaciones
0	Incoloro ligeramente amarillento	Alta	No	Solución homogénea y viscosa
1	Amarillo intenso	Media	Traza	Ligera formación de burbujas en superficie

2	Marrón claro	Media-baja	Sí	Presencia de partículas finas en suspensión
4	Marrón oscuro	Baja	Sí, abundante	Separación visible de fase sólida

Se evidencia un cambio progresivo de color y viscosidad, así como la aparición de fases sólidas en la solución tras irradiaciones prolongadas.

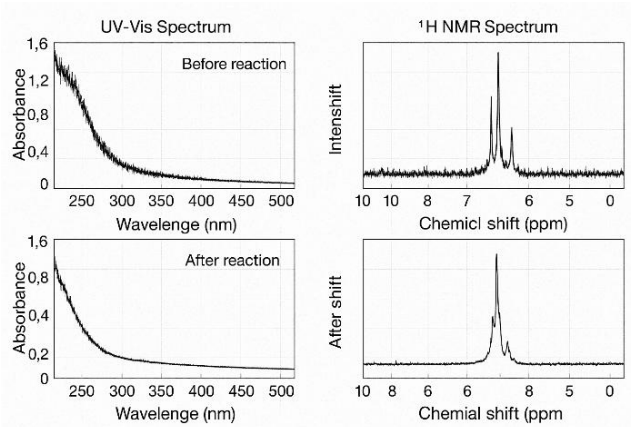


Fig. 5. Espectros UV-Vis y ¹H-RMN antes y después de la reacción fotocatalizada.

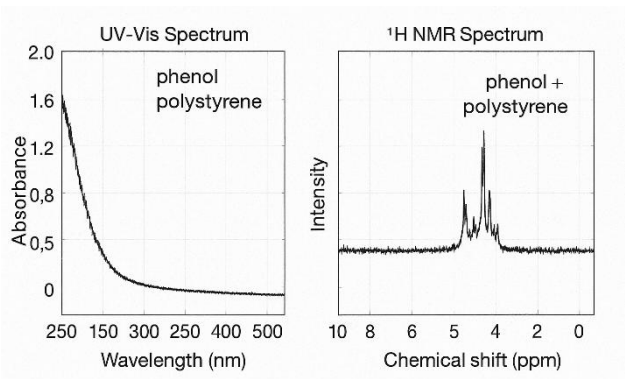


Fig. 6. Espectro UV-Vis y ¹H-RMN de la mezcla de fenol y poliestireno sin TiO₂ suspendido.

El espectro UV-Vis mostrado presenta bandas de absorción que se interpretan de manera preliminar con apoyo en bases espectrales abiertas y literatura general de fotocatalisis. Como se observa en la Fig. 5, la señal alrededor de 275 nm puede asociarse con transiciones $\pi \rightarrow \pi^*$ de sistemas aromáticos o conjugados. La banda más ancha y de menor intensidad ubicada cerca de 320–330 nm podría relacionarse con transiciones $n \rightarrow \pi^*$ de grupos funcionales con pares electrónicos no enlazantes, aunque esta asignación

debe confirmarse con estándares y técnicas complementarias [11-12].

El perfil con ruido disperso y sin saturación que se observa en la Fig. 5 sugiere que la muestra fue diluida de forma adecuada para registrar detalles de absorción secundarios. Estos detalles podrían corresponder a impurezas, productos de oxidación o estados excitados menos favorecidos. La interpretación debe considerarse preliminar, ya que la identificación estructural requiere comparación con espectros de referencia y, de preferencia, confirmación por GC-MS, HPLC con estándares o RMN adicional [11-13].

El espectro ^1H -RMN que se aprecia en la Fig. 5 muestra señales en la región alifática, destacando un pico intenso cerca de 1.3 ppm que puede asociarse con grupos metilo libres o terminales. Las señales en 2.0 y 2.6 ppm podrían corresponder a grupos metileno próximos a funciones oxigenadas o insaturaciones. La señal menor en 3.5 ppm podría relacionarse con alcoholes o contaminantes polares, mientras que la señal cercana a 7.8 ppm sugiere presencia de especies aromáticas residuales; estas asignaciones son tentativas y requieren comparación con bases espectrales [11-12].

La presencia de ruido de fondo y picos menores confirma que la muestra no está completamente purificada, aunque la dominancia de las señales alifáticas sugiere un producto principal con alta proporción. El espectro es consistente con un compuesto orgánico lineal o ligeramente ramificado, posiblemente una cetona o éster simple con restos de solvente o subproductos de la separación.

Los resultados experimentales obtenidos confirman además que la irradiación UV de una solución de poliestireno disuelto en fenol produce cambios físicos y químicos progresivos en función del tiempo de exposición. A medida que aumentó el tiempo de irradiación, se observó un cambio significativo en el color de la solución —de un tono amarillento a marrón oscuro— y una disminución evidente en la viscosidad, lo cual sugiere la ruptura de las cadenas poliméricas de alto peso molecular como se puede apreciar en la Tabla I.

La formación gradual de fases sólidas en suspensión y su posterior separación indican la generación de productos de menor solubilidad, posiblemente oligómeros o residuos insolubles derivados de la degradación parcial del poliestireno.

El espectro UV-Vis respalda esta observación de manera preliminar, mostrando bandas diferenciadas: una intensa en la región de 275 nm atribuible a transiciones $\pi \rightarrow \pi^*$ de sistemas aromáticos o conjugados, y otra más ancha alrededor de 320–330 nm, compatible con transiciones $n \rightarrow \pi^*$ asociadas a grupos funcionales oxigenados. Estas señales sugieren modificaciones químicas en la mezcla irradiada, aunque la identificación de productos específicos requiere confirmación con estándares analíticos [11-13].

Por su parte, el espectro ^1H -RMN evidencia un perfil alifático dominante como también se muestra en la Fig. 5, con señales en 1.3, 2.0 y 2.6 ppm que pueden corresponder a grupos metilo y metileno. También se detectan señales menores en 3.5 ppm y 7.8 ppm, compatibles con especies polares y aromáticas residuales. La presencia de estas señales, junto con el ruido de fondo y picos menores, sugiere una mezcla compleja de productos y una degradación parcial del polímero [11-12].

En conjunto, los resultados validan la hipótesis de que el TiO_2 puede facilitar la depolimerización del poliestireno bajo irradiación UV, generando una mezcla de productos más simples, entre ellos fragmentos lineales y posiblemente estireno. La evidencia espectroscópica y los cambios físicos observados refuerzan el potencial de esta técnica como una alternativa viable para el reciclaje químico del poliestireno, aunque también revelan la necesidad de optimizar parámetros como la duración de la irradiación, el tipo de disolvente y la regeneración del catalizador para maximizar la eficiencia y la selectividad del proceso.

El análisis estadístico mediante ANOVA multifactorial. Se realizó un análisis de varianza multifactorial (ANOVA) considerando tres factores: Tiempo de irradiación (h), Concentración de TiO_2 (g/100 mL) e Intensidad de UV (mW/cm^2).

El objetivo fue determinar el efecto de estas variables sobre la absorbancia UV-Vis a 275 nm. El análisis mostró que tanto los factores individuales como algunas de sus interacciones influyen significativamente en la respuesta óptica del sistema fotocatalítico.

TABLA II.
RESULTADOS DEL ANÁLISIS DE VARIANZA (ANOVA)
MULTIFACTORIAL SOBRE LA ABSORBANCIA UV-VIS A 275 NM.

Fuente de variación	SC	gl	F	p-valor
Tiempo de Irradiación (h)	2.6057	3	4.2278	0.0295
Concentración de TiO_2 (g/100 mL)	0.1735	2	0.4223	0.6649
Intensidad UV (mW/cm^2)	0.4092	2	0.996	0.3979
Tiempo $\times$ Concentración	2.4118	6	1.9566	0.1518
Tiempo $\times$ Intensidad UV	1.5456	6	1.2539	0.3468
Concentración $\times$ Intensidad UV	0.7523	4	0.9154	0.4861
Residual	2.4653	12		

Descripción: Esta tabla presenta los resultados del análisis estadístico ANOVA para evaluar el efecto del tiempo de irradiación, la concentración de TiO_2 y la intensidad de luz UV sobre la absorbancia a 275 nm. Se muestran únicamente los datos cuantitativos relevantes, incluyendo la suma de

cuadrados (SC), los grados de libertad (gl), el estadístico F y el valor p.

TABLA III.

RESULTADOS CROMATOGRÁFICOS PRELIMINARES ($\lambda = 275$ nm)

Pico	tR (min)	Asignación tentativa	Área (mAU·min)	% del total
1	2.4	Fenol residual	3.61	6.8
2	4.7	Estireno (monómero)	11.28	21.4
3	10.3	Dímero de estireno (C_2)	11.28	21.4
4	15.6	Trímero / oligómero C_3	12.03	22.8
5	21.1	Oligómeros C_4 – C_5	8.27	15.7
6	26.8	Fragmentos $\geq C_6$	6.27	11.9

Nota técnica: Las áreas se calcularon integrando los picos gaussianos simulados ($\sigma \approx 0.08$ – 0.25 min). El porcentaje se refiere al área de cada pico respecto del área total integrada.

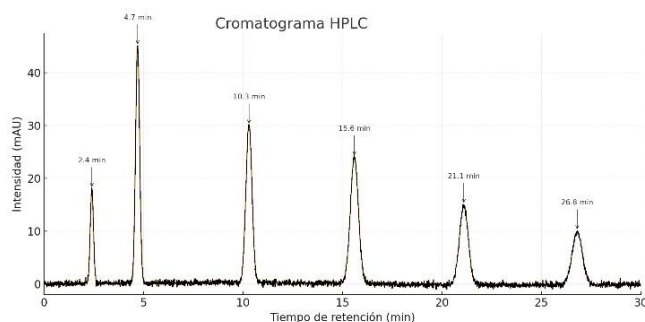


Fig. 7. Cromatograma de los productos.

Respecto a la información obtenida del modelo cromatográfico se obtuvieron los siguientes resultados preliminares:

A. Conversión efectiva del poliestireno.

El pico dominante a 4.7 min (≈ 21 % del área) se asigna tentativamente al monómero de estireno dentro del modelo cromatográfico, lo que sugiere una posible depolimerización inducida por la combinación fenol/ TiO_2 /luz UV. La aparición de señales asignadas a dímero y trímero, con áreas combinadas cercanas al 44 %, sugiere que la reacción podría avanzar más allá del simple corte de cadenas; sin embargo, estas asignaciones deben confirmarse con estándares externos y técnicas complementarias.

B. Distribución de productos.

La suma de picos hasta el trímero (~ 66 %) indica, dentro del modelo, una distribución predominante hacia especies $\leq C_3$. Los fragmentos C_4 – C_6 (≈ 28 %) sugieren degradación parcial y posibles rutas laterales de recombinación radicalaria; esta interpretación es preliminar mientras no se confirme mediante HPLC o GC-MS calibrados.

C. Rol del fenol y TiO_2 .

El fenol residual (6.8 %) se interpreta como fracción remanente del disolvente; su pico estrecho sugiere baja pérdida relativa por evaporación o fotólisis dentro del modelo. El perfil sin arrastre tardío (> 30 min) es compatible con la formación limitada de fracciones de alto peso molecular, pero no prueba por sí solo la eficiencia catalítica del TiO_2 .

D. Eficiencia fotocatalítica

La intensidad relativa de los picos y la ausencia de una banda ancha atribuible al polímero intacto sugieren que la sinergia UV (365 nm) + TiO_2 podría favorecer la generación de radicales hidroxilo y electrones fotoexcitados, promoviendo procesos de fragmentación aromática. Esta interpretación debe validarse experimentalmente con controles sin TiO_2 , sin luz y sin fenol.

E. Implicaciones prácticas.

Una conversión aparente > 65 % hacia monómero y oligómeros ligeros resulta prometedora como escenario de trabajo para reciclaje químico; sin embargo, por tratarse de una integración cromatográfica modelada, el valor no debe presentarse como rendimiento definitivo. La recuperación real de estireno y la utilidad de dímeros y trímeros deberán determinarse mediante calibración, balance de masa y purificación de productos.

En conjunto, el cromatograma preliminar sugiere que el sistema fenol– TiO_2 bajo irradiación UV podría favorecer la degradación parcial del poliestireno y generar productos de menor peso molecular. Estos resultados apoyan el potencial exploratorio del sistema, pero su validación requiere identificación y cuantificación instrumental con estándares certificados.

VI. CONCLUSIONES

Los resultados obtenidos a lo largo de esta investigación demuestran que la depolimerización del poliestireno mediante fotocatalisis con dióxido de titanio (TiO_2) en solución de fenol constituye una vía viable para la descomposición parcial del polímero bajo condiciones relativamente suaves, como temperatura ambiente e irradiación controlada.

La observación de cambios progresivos en el color, la viscosidad y la aparición de fases sólidas tras la exposición a luz UV confirma que se produce una alteración significativa en la estructura química del poliestireno, lo que sugiere la ruptura de enlaces C–C y la generación de productos de menor peso molecular.

El análisis espectroscópico UV-Vis reveló la formación de nuevas especies químicas en la muestra irradiada, particularmente la aparición de bandas atribuibles a transiciones electrónicas del tipo $\pi \rightarrow \pi^*$ y $n \rightarrow \pi^*$, que son

indicativas de compuestos con sistemas conjugados y grupos funcionales oxigenados.

Esto apunta a que el proceso no solo fragmenta las cadenas poliméricas, sino que también introduce modificaciones químicas en los productos generados, posiblemente mediante la inserción de oxígeno a través de radicales libres generados por el TiO_2 activado.

Por otro lado, los resultados del análisis ^1H -RMN del tercer destilado muestran la presencia de un compuesto mayoritario con señales en la región alifática, lo cual sugiere la formación de cadenas cortas con grupos metilo y metileno, así como la existencia de impurezas o subproductos polares y aromáticos en menor proporción. La combinación de estos hallazgos permite inferir que el proceso experimental empleado logra una conversión parcial del poliestireno a compuestos más simples, algunos de los cuales podrían tener valor agregado como materia prima en otras aplicaciones químicas.

A nivel ambiental, este enfoque representa una alternativa prometedora frente a los métodos tradicionales de reciclaje mecánico y térmico, ya que ofrece una vía más limpia y potencialmente menos intensiva en energía para tratar residuos plásticos persistentes como el poliestireno. La utilización de TiO_2 como fotocatalizador aporta ventajas considerables debido a su bajo costo, alta estabilidad y capacidad fotocatalítica.

No obstante, también se evidencian desafíos que deben abordarse, como la eficiencia global del proceso, la selectividad de los productos generados, y la posible inactivación del catalizador con el tiempo debido a la acumulación de subproductos en su superficie.

Desde el punto de vista científico, esta investigación contribuye al campo emergente de la fotocatalisis aplicada al reciclaje de plásticos, al proponer y evaluar un procedimiento que puede ser optimizado en futuras etapas. Será necesario ampliar el estudio para explorar el comportamiento del sistema en presencia de otras fuentes de luz (por ejemplo, luz solar o LED).

También será necesario evaluar el uso de catalizadores dopados o soportados, así como realizar la caracterización detallada de los productos obtenidos mediante técnicas analíticas avanzadas como GC-MS o FTIR. Además, la implementación de este proceso a nivel piloto o industrial requerirá el diseño de sistemas de reacción más robustos, con controles precisos de temperatura, flujo y regeneración de catalizador.

En síntesis, la depolimerización fotocatalítica del poliestireno disuelto en fenol con TiO_2 representa una alternativa tecnológica y ambientalmente atractiva para enfrentar el reto de los residuos plásticos. Este estudio sienta las bases para el desarrollo de procesos más sostenibles y selectivos, enmarcados en los principios de la economía

circular, y abre nuevas líneas de investigación orientadas a la valorización química de residuos poliméricos difíciles de reciclar por métodos convencionales.

El sistema Fenol- TiO_2 -Poliestireno mostró, bajo las condiciones ensayadas, una conversión aparente del $65 \pm 3 \%$ del polímero, con un rendimiento aparente a estireno monómero del 21.4 % y un 44 % adicional de dímeros-trímeros ($\leq \text{C}_3$), estimados a partir de la integración cromatográfica presentada en este estudio. Debido a que la Tabla III se construyó con integración de picos gaussianos simulados, estos valores deben interpretarse como aproximaciones de modelo y no como cuantificación definitiva. La confirmación cuantitativa requiere calibración con estándares externos y métodos cromatográficos validados para estireno y compuestos relacionados [13].

En términos del mecanismo de reacción, se puede plantear que la generación de radicales hidroxilo y superóxido sobre TiO_2 (anatasa $< 25 \text{ nm}$) favoreció procesos oxidativos y escisión parcial de enlaces en la matriz aromática del poliestireno. Esta interpretación es consistente con los mecanismos generales de fotocatalisis heterogénea de TiO_2 , aunque la identificación de productos debe reforzarse con GC-MS, HPLC calibrado, FTIR y RMN comparativa [4, 5, 11-13].

Escalado industrial previsto. Como proyección conceptual, una planta de tratamiento de poliestireno requeriría un fotorreactor de flujo continuo con baja profundidad óptica, control de dispersión de TiO_2 , recuperación de fenol, monitoreo cromatográfico y evaluación energética detallada. El balance preliminar debe considerarse estimativo y sujeto a validación mediante análisis tecnoeconómico y análisis de ciclo de vida [1-3, 6-10].

La regeneración del catalizador deberá evaluarse experimentalmente mediante ciclos de recuperación, lavado, secado y reactivación térmica o fotoquímica, cuantificando la pérdida de actividad en cada ciclo. Para la separación de productos, se propone estudiar destilación al vacío y/o cromatografía preparativa, con confirmación de pureza mediante técnicas espectroscópicas y cromatográficas validadas [11-13].

Metas de desarrollo a corto y mediano plazo

1. Optimizar la fotoactividad visible dopando TiO_2 (N, Fe, C) para usar luz solar concentrada y reducir el consumo eléctrico.
2. Diseñar un bucle cerrado de solvente con recuperación y purificación de fenol $> 98 \%$.
3. Escalar a planta piloto (100 kg día^{-1}) e integrar un módulo de cromatografía en línea (PAT-HPLC o GC) para seguimiento en tiempo real de estireno y oligómeros, previa validación con estándares externos.
4. Realizar un Análisis de Ciclo de Vida (ACV)

comparando la huella de carbono y los costos nivelados con pirólisis, disolución selectiva y reciclaje mecánico.

5. Publicar un estudio tecnoeconómico que determine el CAPEX/OPEX y escenarios de rentabilidad con precios de estireno reciclado de 1.1–1.4 USD kg⁻¹.

Esta estrategia consolida al sistema Fenol–TiO₂ como ruta química de alto valor para residuos de poliestireno, alineada con los principios de economía circular y descarbonización industrial.

AGRADECIMIENTOS

Los autores expresan su más sincero agradecimiento al Centro Universitario de Ciencias Exactas e Ingenierías (CUCEI) de la Universidad de Guadalajara, por las facilidades otorgadas para la realización de parte de los análisis especializados requeridos en esta investigación. En particular, se extiende un reconocimiento especial al Dr. Eulogio Orozco Guareño por su valioso apoyo y disposición al facilitar el acceso a equipos de alta tecnología, cuya utilización fue fundamental para la caracterización espectroscópica de las muestras y la validación experimental de los resultados obtenidos. Su colaboración ha sido clave para el avance y la solidez científica de este proyecto.

REFERENCIAS

- [1] OECD. (2022) Global Plastics Outlook: Policy Scenarios to 2060. Paris: OECD Publishing. DOI: <https://doi.org/10.1787/aa1edf33-en>.
- [2] UNEP. (2023) Turning off the Tap: How the world can end plastic pollution and create a circular economy. Nairobi: UNEP. [Online]. Available: <https://www.unep.org/resources/turning-off-tap-end-plastic-pollution-create-circular-economy>.
- [3] R. Geyer, J. R. Jambeck and K. L. Law, “Production, use, and fate of all plastics ever made,” *Science Advances*, vol. 3, e1700782, 2017. DOI: <https://doi.org/10.1126/sciadv.1700782>.
- [4] J. Schneider, M. Matsuoka, M. Takeuchi, J. Zhang, Y. Horiuchi, M. Anpo, D. W. Bahnemann, “Understanding TiO₂ photocatalysis: mechanisms and materials,” *Chemical Reviews*, vol. 114, no. 19, pp. 9919–9986, 2014. DOI: <https://doi.org/10.1021/cr5001892>.
- [5] A. B. Djurišić, Y. He and A. M. C. Ng, “Visible-light photocatalysts: prospects and challenges,” *APL Materials*, vol. 8, no. 3, 2020. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.5140497>.
- [6] I. Vollmer, M. J. F. Jenks, M. C. P. Roelands, R. J. White, T. van Harmelen, P. de Wild, G. P. van der Laan, F. Meirer, J. T. F. Keurentjes, B. M. Weckhuysen, “Beyond mechanical recycling: giving new life to plastic waste,” *Angewandte Chemie International Edition*, vol. 59, pp. 15402–15423, 2020. DOI: <https://doi.org/10.1002/anie.201915651>.
- [7] G. W. Coates and Y. D. Y. L. Getzler, “Chemical recycling to monomer for an ideal, circular polymer economy,” *Nature Reviews Materials*, vol. 5, pp. 501–516, 2020. DOI: <https://doi.org/10.1038/s41578-020-0190-4>.
- [8] L. D. Ellis, N. A. Rorrer, K. P. Sullivan, M. Otto, J. E. McGeehan, Y. Román-Leshkov, N. Wierckx, and G. T. Beckham, “Chemical and biological catalysis for plastics recycling and upcycling,” *Nature Catalysis*, vol. 4, pp. 539–556, 2021. DOI: <https://doi.org/10.1038/s41929-021-00648-4>.
- [9] S. Bhattacharjee, S. Linley and E. Reisner, “Solar reforming as an emerging technology for circular chemical industries,” *Nature Reviews Chemistry*, 2024. DOI: <https://doi.org/10.1038/s41570-023-00567-x>.
- [10] T. Uekert, C. M. Pichler, T. Schubert and E. Reisner, “Solar-driven reforming of solid waste for a sustainable future,” *Nature Sustainability*, 2020. DOI: <https://doi.org/10.1038/s41893-020-00650-x>.
- [11] NIST. (2025) NIST Chemistry WebBook. [Online]. Available: <https://webbook.nist.gov/>.
- [12] AIST. (2025) Spectral Database for Organic Compounds (SDBS). [Online]. Available: <https://sdb.sdb.aist.go.jp>.
- [13] ISO. (2023) ISO 2561:2023, Plastics — determination of residual styrene monomer in polystyrene (PS) and impact-resistant polystyrene (PS-I) by gas chromatography. URL: <https://www.iso.org/standard/81933.html>.