



# JEEOS

JOURNAL OF ENERGY, ENGINEERING  
OPTIMIZATION AND SUSTAINABILITY

# 2026

ENERGÍA Y SUSTENTABILIDAD



Vol. 10 Núm. 2 (2026)

Reserva de Derechos al Uso Exclusivo

No. 04-2026-050410175100-102. ISSN: 2448-8186



## DIRECTORIO

**L.D. GUILLERMO NARVÁEZ OSORIO**

Rector

**DR. WILFRIDO MIGUEL CONTRERAS SÁNCHEZ**

Secretario de Investigación, Posgrado y Vinculación

**DR. LUIS MANUEL HERNÁNDEZ GOVEA**

Secretario de Servicios Académicos

**LIC. ALEJANDRINO BASTAR CORDERO**

Encargado del Despacho de la Secretaría de  
Servicios Administrativos

Esta revista está citada en:

Sistema Regional de Información en Línea para Revistas Científicas de América Latina y el Caribe, España y Portugal LATINDEX.<http://www.latindex.unam.mx/> JOURNAL OF ENERGY, ENGINEERING OPTIMIZATION AND SUSTAINABILITY, Vol 10, No. 2, Año 2026, es una publicación continua editada por la Universidad Juárez Autónoma de Tabasco, Av. Universidad S/N, Zona de la Cultura, Col. Magisterial, C.P. 86040, Villahermosa, Tabasco, México. Tel. (+52) (933) 358 1500 Ext. 5040, <https://revistajeeos.ujat.mx/JEEOS/es/>, Email: [jeeos@ujat.mx](mailto:jeeos@ujat.mx). Indizada en LATINDEX. Editora responsable: Laura Lorena Díaz Flores. Reserva de derechos al uso exclusivo No. 04-2026-050410175100-102, ISSN: 2448-8186, ambos otorgados por el Instituto Nacional del Derecho de Autor. Responsable de la última actualización de este número: Pauly González Mayo, Universidad Juárez Autónoma de Tabasco, Av. Universidad S/N, Zona de la Cultura, Col. Magisterial, Centro, Tabasco. C.P. 86040. Fecha de última actualización, 31 de agosto 2026.

This work is licensed under a Creative Commons Attribution- NonCommercialShareAlike 4.0 International License.

Dra. Laura Lorena Díaz Flores  
**EDITORA EN JEFE**

M.A. Pauly González Mayo  
**GESTORÍA Y ASISTENCIA EDITORIAL**

MIS Dalia Exaltación Medina Mandujano  
MAEE. Mary Cruz Valenzuela Jiménez  
**ASISTENTE DE DISEÑO Y ESTILO**

Dra. Sulma Guadalupe Gómez Jiménez  
Dra. Margarita del Carmen Noguera Miceli  
**ASISTENCIA EN TRADUCCIÓN Y MAQUETADO**

### **EDITORES ASOCIADOS INVITADOS**

Dr. Darío Colorado Garrido. **Universidad Veracruzana**  
Dra. Linda Viviana García Quiñonez. **Universidad Veracruzana**  
Dr. Cristian Gómez. **Universidad Veracruzana**  
Dra. Deysi Carmina Peña Ortiz. **Universidad Veracruzana**  
Dr. Roberto Agustín Conde Gutiérrez. **Universidad Veracruzana**  
Dr. Gerardo Alcalá Perea. **Universidad Veracruzana**  
Dra. Zaira Ruth Zuviría López. **Universidad Autónoma de Guadalajara**  
Dra. Karen Rodríguez Rosales. **Universidad Autónoma de Querétaro**  
Dra. Laura López Díaz. **Universidad Juárez Autónoma de Tabasco**  
Dr. Erik Ramírez Morales. **Universidad Juárez Autónoma de Tabasco**

## COMITÉ EDITORIAL

Dr. Bassam Ali, **Facultad de Ingeniería, Universidad Autónoma de Yucatán**

Dr. Fabricio Nápoles Rivera, **Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo**

Dr. Francisco López Villareal, **Instituto Tecnológico de Villahermosa.**

Dr. Fernando Israel Gómez Castro, **Universidad de Guanajuato**

Dr. Juan Serrano Arellano, **Instituto Tecnológico de Pachuca**

Dra. Isabel María Valdivia Fernández, **Universidad de la Habana- Facultad de Geografía**

Dra. Ivett Zavala Guillén, **Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada, Baja California**

Dr. Luis Alfonso García Cerda, **Centro de Investigación de Química Aplicada**

Dra. Nancy del Pilar Medina Herrera, **Universidad Autónoma de Nuevo León**

Dra. Ma. Guadalupe Garnica Romo, **Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo.**

Dra. María Guadalupe Alpuche Cruz, **Universidad de Sonora**

Dr. Pedro Cruz Alcantar, **Universidad Autónoma de San Luis Potosí**

Dr. Salvador Tututi Ávila, **Universidad Autónoma de Nuevo León**

Dra. Santa del Carmen Herrera Sánchez, **Universidad Autónoma del Carmen**

## Índice Vol. 10 Núm. 2 (2026)

### Carta editorial

Zuviría-López Z.R.

### Integración de calor en la purificación de ciclohexano grado textil utilizando etilenglicol como solvente 1-16

Cruz-Valdez J.A.<sup>1\*</sup>, Álvarez-Alor B.<sup>2</sup>, Montalvo-Salinas D.<sup>3</sup>, Garzón-Pérez A.S.<sup>4</sup>, Alvarado-Méndez P.E.<sup>5</sup>

### Fotosíntesis artificial efecto sinérgico de $\text{Ti}^{3+}$ , $\text{Co}^{2+}$ , $\text{Co}^{3+}$ en los mecanismos de activación, acoplamiento c-c hacia la producción de isopropanol 17-30

Pérez- de la Cruz A.Y.<sup>1</sup>, Montalvo Salinas-D.<sup>2\*</sup>, Cruz-Valdez J.A.<sup>1</sup>, Pérez- Francisco J.M.<sup>1</sup>, Jiménez- Castillo U.<sup>1</sup>, Álvarez-Alor B.<sup>3</sup>

### Predicción de la potencia en una turbina vestas v52 mediante regresión polinomial y una red neuronal 31-46

Olan-Barroso A.A.<sup>1\*</sup>, Alaffita-Hernández F.A.<sup>2</sup>, Escobedo-Trujillo B.A.<sup>1</sup>, Colorado-Garrido D.<sup>2</sup>

### Estrategias de ingeniería de software verde para aplicaciones energéticamente eficientes

Morales-Reyes E.<sup>1\*</sup>, Pacheco-Reyes J.N.<sup>1</sup>, Vázquez-Hernández R.<sup>1</sup>, Gilbón-Aburto A.<sup>1</sup>, Gómez-Manuel E.<sup>1</sup> 47-54

### Estudio teórico y experimental de la eficiencia térmica de un colector cilindro parabólico en Coatzacoalcos, México 55-70

Rodríguez-Flores E.<sup>1</sup>, González-Martínez M.I.<sup>2</sup>, Fuentes-Orozco S.<sup>2</sup>, Garrido-Meléndez J.<sup>3</sup>, Márquez-Nolasco A.<sup>4</sup>, Conde-Gutiérrez R.A.<sup>4\*</sup>.

### Determinación de la acumulación de metales en *eichhornia crassipes* para valorización de biomasa 71-80

Benítez-Martínez X. S.<sup>1</sup>, Domínguez-Villate W. A.<sup>1</sup>, Núñez-Correa S.<sup>1</sup>, Morales-Salas L.<sup>2,3\*</sup>

### Restricciones de sostenibilidad y riesgo de cola en portafolios accionarios de México 81-96

Villada-Medina H.D.<sup>1\*</sup>, Rendón-García J.F.<sup>1</sup>, Alcalá-Perea G.<sup>2</sup>

### Análisis en lazo cerrado de un convertidor elevador en cascada con reducción del rizo de corriente de entrada para aplicaciones con celda de combustible de hidrógeno 97-114

Hidalgo-Leal H.D.<sup>1</sup>, Cruz-Gutiérrez F.<sup>1\*</sup>, May-Burgos L.D.<sup>1</sup>, Sarao-Cruz L.D.J.<sup>1</sup>, Pérez-Aguilar A.<sup>1</sup>.

**Fotosíntesis artificial efecto sinérgico de  $\text{Ti}^{3+}$ ,  $\text{Co}^{2+}$ ,  $\text{Co}^{3+}$  en los mecanismos de activación, acoplamiento c-c hacia la producción de isopropanol****Artificial photosynthesis synergistic effect of  $\text{Ti}^{3+}$ ,  $\text{Co}^{2+}$ ,  $\text{Co}^{3+}$  on the activation mechanisms, c-c coupling towards isopropanol production**

Pérez- de la Cruz A.Y.<sup>1</sup>, Montalvo-Salinas D.<sup>2\*</sup>, Cruz-Valdez J.A.<sup>1</sup>, Pérez- Francisco J.M.<sup>1</sup>, Jiménez- Castillo U.<sup>1</sup>, Álvarez-Alor B.<sup>3</sup>

<sup>1</sup> División de Ingeniería Química. Tecnológico Nacional de México/ Instituto Tecnológico Superior de Coatzacoalcos, Carretera Antigua Minatitlán-Coatzacoalcos Km. 16.5, Coatzacoalcos 96536, México.

<sup>2</sup> División de Ingeniería Bioquímica. Tecnológico Nacional de México/ Instituto Tecnológico Superior de Coatzacoalcos, Carretera Antigua Minatitlán-Coatzacoalcos Km. 16.5, Coatzacoalcos 96536, México.

<sup>3</sup> División de Ingeniería Mecánica, Tecnológico Nacional de México/ Instituto Tecnológico Superior de Coatzacoalcos, Carretera Antigua Minatitlán-Coatzacoalcos Km. 16.5, Coatzacoalcos 96536, México.

**Artículo Científico****Publicado: 31 de agosto 2026****RESUMEN**

La producción de alcoholes mediante fotosíntesis artificial suele verse limitada por bajas eficiencias de conversión y escasa selectividad. En el presente estudio, se empleó un fotocatalizador de 1% Co/TiO<sub>2</sub> con el objetivo de maximizar la producción de isopropanol mediante la reducción fotocatalítica de CO<sub>2</sub> en presencia de H<sub>2</sub>O como agente donador de electrones y, bajo irradiación UV y visible. La caracterización mediante UV-Vis y XPS indicó que la alta actividad catalítica se asocia con la formación de especies de  $\text{Ti}^{3+}$ ,  $\text{Co}^{2+}$  y  $\text{Co}^{3+}$ . Estas especies químicas reducen el band gap de TiO<sub>2</sub> y favorecen la separación eficiente de pares electrón-hueco, lo que disminuye la recombinación. Asimismo, mejoran la adsorción y la activación del CO<sub>2</sub> en la superficie del fotocatalizador, lo que promueve la generación de radicales formilos ( $\bullet\text{CHO}$ ), una etapa clave en la ruta mecanística hacia isopropanol.

**Palabras clave:** Adsorción, alcoholes, CO<sub>2</sub>, fotoreducción, 1%Co/TiO<sub>2</sub>.

**ABSTRACT**

The production of alcohols from artificial photosynthesis is often limited by low conversion efficiencies and poor selectivity. In this study, a 1% Co/TiO<sub>2</sub> photocatalyst was used to maximize isopropanol production via the photocatalytic reduction of CO<sub>2</sub> using H<sub>2</sub>O as an electron donor and under UV and visible light irradiation. Characterization by UV-Vis and XPS, spectroscopy indicated that the high catalytic activity is related to the formation of  $\text{Ti}^{3+}$ ,  $\text{Co}^{2+}$ , and  $\text{Co}^{3+}$  species. These chemical species lower the band gap energy of TiO<sub>2</sub> and promote the efficient separation of electron-hole pairs, thereby reducing their recombination. They also improve the adsorption and activation of CO<sub>2</sub> on the photocatalyst surface, promoting the generation of formyl radicals ( $\bullet\text{CHO}$ ), a key step in the mechanistic pathway to isopropanol.

**Keywords:** Adsorption, alcohols, CO<sub>2</sub>, photoreduction, 1%Co/TiO<sub>2</sub>.

## INTRODUCCIÓN

El incremento excesivo de los gases de efecto invernadero ha alterado el equilibrio ambiental del planeta, siendo el CO<sub>2</sub> el principal contribuyente al cambio climático y al calentamiento global [1]. Su concentración atmosférica ha aumentado de manera acelerada desde la revolución industrial (280 ppm) [2] como consecuencia directa de la combustión masiva de combustibles fósiles (gas, carbón y petróleo), que aún sostienen la mayor parte de la demanda energética mundial [3]. Este escenario no solo exige reducir emisiones, sino también transformar el CO<sub>2</sub> en un recurso estratégico en un esquema de economía circular del carbono.

En este marco, la fotorreducción catalítica de CO<sub>2</sub> con H<sub>2</sub>O, inspirada en la fotosíntesis natural, representa una ruta tecnológica de alto potencial al permitir la conversión directa de energía lumínica en combustibles líquidos. Entre los posible productos, el isopropanol destaca por su elevado índice de octano, alta densidad energética [4–6] y compatibilidad con infraestructuras existentes, lo que lo posiciona como un combustible C<sub>3</sub> de alto valor agregado y como aditivo avanzado para gasolinas.

El TiO<sub>2</sub> ha sido ampliamente empleado como semiconductor fotocatalítico debido a su estabilidad química, bajo costo y disponibilidad, sin embargo, su amplia energía de banda prohibida (3.2 eV) y la rápida recombinación electrón-hueco limitan su aprovechamiento bajo luz visible [7–10]. La modificación con metales de transición, como el cobalto, emerge como una estrategia efectiva para inducir defectos electrónicos, estrechar el band-gap y generar sitios activos que favorezcan la separación de cargas [11].

Los sistemas basados en Co/TiO<sub>2</sub> no solo amplían la respuesta espectral hacia la región visible, sino que también promueven la activación del CO<sub>2</sub> y la estabilización de intermediarios reactivos clave para el acoplamiento C-C, un paso determinante en la formación selectiva de isopropanol. No obstante, alcanzar una alta eficiencia cuántica y selectividad hacia productos C<sub>3</sub> continúa siendo un desafío crítico, estrechamente vinculado al diseño electrónico del fotocatalizador y al control fino de los mecanismos de transferencia de carga interfacial.

## PRÁCTICO

**Desarrollo de fotocatalizadores Co/TiO<sub>2</sub>.** Los materiales fotocatalíticos Co/TiO<sub>2</sub> fueron preparados mediante la técnica de impregnación húmeda, empleando TiO<sub>2</sub> (Merk) como soporte y soluciones acuosas de nitrato de cobalto (Co (NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>·6H<sub>2</sub>O, pureza 99,9 %, Merck) como precursor metálico. La cantidad de solución se ajustó estequiométricamente para alcanzar cargas nominales de 1% de cobalto en peso respecto al soporte.

Tras la adición del precursor, la mezcla se sometió a agitación magnética continua durante 30 min a temperatura ambiente, lo que garantizó una distribución homogénea del cobalto en la superficie del TiO<sub>2</sub>. Posteriormente, el sólido impregnado se secó a 90 °C durante aproximadamente 2 horas para eliminar el agua. El material seco fue sometido a calcinación a 1000 °C durante 4 h, bajo un

flujo continuo de aire atmosférico ( $100 \text{ mL} \cdot \text{min}^{-1}$ ), lo que favoreció la formación de especies de Co altamente dispersas. La calcinación drástica a  $1000^\circ\text{C}$  induce una interdifusión controlada de cationes en la interfaz, provocando de manera intencional una alta densidad de vacancias de oxígeno estables y forzando la estabilización del par redox molecular coordinado superficialmente como sitios aislados ricos en electrones. Esto modifica termodinámicamente la barrera de acoplamiento C-C orientando la selectividad hacia productos de cadena más larga ( $\text{C}_3$ ), al mismo tiempo, reduce el band gap del material obtenido al presentarse la fase de rutilo en  $\text{TiO}_2$ . De manera paralela, se preparó una muestra de  $\text{TiO}_2$  puro bajo las mismas condiciones térmicas, que se utilizó como referencia experimental.

## CARACTERIZACIÓN DE 1%CO/TIO<sub>2</sub>

**Análisis superficial mediante espectroscopía de fotoelectrones de rayos X (XPS).** La composición química superficial y los estados de oxidación presentes en los fotocatalizadores 1%Co/ $\text{TiO}_2$ , evaluados en la reacción de fotoreducción de  $\text{CO}_2$ , fueron determinados mediante espectroscopía de rayos X de fotoelectrones (XPS). Los análisis se realizaron en un espectrómetro Escalab 200R equipado con un analizador hemisférico, operado con energía de paso constante para garantizar una resolución espectral adecuada. La fotoemisión se llevó a cabo empleando radiación monocromática de  $\text{Mg K}\alpha$  ( $h\nu = 1253.6 \text{ eV}$ ), generada por un tubo de rayos X configurado a 10 mA y 12 kV. Estas condiciones permitieron obtener señales bien definidas correspondientes a los niveles electrónicos característicos de Co, Ti y O en la superficie del material.

**Caracterización óptica mediante espectroscopía UV-Vis.** Las propiedades ópticas de los fotocatalizadores se determinaron mediante espectroscopía UV-Vis en modo de reflectancia difusa (DRS). Las muestras fueron analizadas en forma de pastillas compactadas en seco (15 mm de diámetro), empleando un espectrofotómetro Shimadzu UV-2450 equipado con una esfera integradora. El sulfato de bario ( $\text{BaSO}_4$ ) se utilizó como material de referencia para la corrección de la línea base. Los espectros se registraron en el intervalo de 190 a 900 nm a temperatura ambiente. Esta metodología permitió evaluar la capacidad de absorción de radiación en las regiones ultravioleta y visible, una propiedad directamente relacionada con la activación fotoinductiva del sistema durante la actividad fotocatalítica para la reducción de  $\text{CO}_2$ .

**Determinación de la energía de banda prohibida ( $E_g$ ) de 1%Co/ $\text{TiO}_2$ .** La energía de banda prohibida ( $E_g$ ) se estimó a partir de los datos obtenidos mediante DRS, considerando que este parámetro representa la energía mínima necesaria para promover un electrón desde la banda de valencia a la de conducción.

Inicialmente, el valor de  $E_g$  se calculó mediante la extrapolación lineal del borde de absorción hacia el eje de longitud de onda, aplicando la relación derivada de la ecuación de Planck:

$$E_g = \frac{hc}{\lambda} = \frac{1239.84(\text{eV/nm})}{\lambda(\text{nm})} \quad (1)$$

donde  $h$  corresponde a la constante de Planck ( $4.1357 \times 10^{-15}$  eV·s),  $c$  es la velocidad de la luz ( $3 \times 10^{17}$  nm·s<sup>-1</sup>) y  $\lambda$  a la longitud de onda (nm) asociada al punto de intersección.

**Evaluación de la reacción de fotoreducción de CO<sub>2</sub> con H<sub>2</sub>O.** Los ensayos fotocatalíticos se realizaron en un reactor discontinuo de vidrio Pyrex con un volumen útil de 1 L, equipado con una ventana de cuarzo que garantiza una transmisión eficiente de la radiación UV-Vis. En cada experimento se introdujeron 100 mL de agua y 10 g del fotocatalizador. El sistema se mantuvo a presión atmosférica y a una temperatura controlada de  $30 \pm 2$  °C. Posteriormente, el sistema se expuso a la fuente luminosa seleccionada durante 60 min.

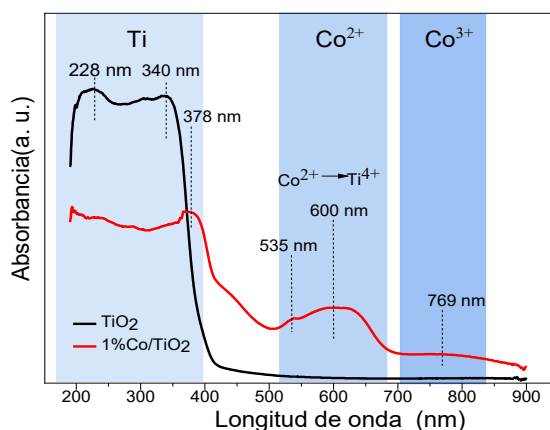
Finalizado el tiempo de reacción, se extrajo una muestra gaseosa de 10 mL para su análisis mediante espectroscopía infrarroja por transformada de Fourier (FTIR) con un espectrofotómetro Bruker Vertex 70. Los espectros fueron adquiridos en modo ATR con una resolución de 4 cm<sup>-1</sup> y 150 barridos. Se utilizó helio de alta pureza como gas de referencia. La cuantificación de los productos generados durante la reducción de CO<sub>2</sub> del isopropanol se realizó con el software Grams/AI 7.02.

## RESULTADOS

### CARACTERIZACIÓN ÓPTICA Y ESTRUCTURAL DE LOS FOTOCATALIZADORES.

**Propiedades ópticas y energía de band gap.** La espectroscopía UV-Vis en modo de reflectancia difusa se utilizó para estudiar el comportamiento óptico de los fotocatalizadores y su capacidad de absorción.

En la **Figura 1** se observa que el TiO<sub>2</sub> mostró una absorción predominante en la región ultravioleta (200-400 nm), atribuida a la transición electrónica desde los orbitales O 2p (banda de valencia) hacia los orbitales Ti 3d (banda de conducción)[12]. Tras el dopaje de TiO<sub>2</sub> con Co, se observó un desplazamiento del borde de absorción hacia longitudes de onda más altas, lo que indica una reducción de la brecha de banda prohibida y una extensión de la respuesta óptica hacia la región visible.



**Figura 1.** Espectro UV-Vis de de TiO<sub>2</sub> y 1 % Co/TiO<sub>2</sub>

Los espectros de los sistemas Co/TiO<sub>2</sub> evidenciaron, además, nuevas bandas en el intervalo de 415-850 nm, asociadas a transiciones electrónicas d-d y a procesos de transferencia de carga entre especies Co<sup>2+</sup>/Co<sup>3+</sup> y la red de TiO<sub>2</sub>. Las absorciones en el rango 535-700 nm pueden asociarse a transiciones características de Co<sup>2+</sup> en coordinación tetraédrica, mientras que las señales alrededor de 739 nm se asocian con transiciones electrónicas de Co<sup>3+</sup> en un entorno octaédrico, lo que confirma la coexistencia de ambos estados de oxidación en la superficie catalítica [13].

La energía de Eg se estimó mediante la extrapolación lineal del borde de absorción, utilizando la ecuación de Planck. **Tabla 1.**

**Tabla 1.** Energía de band gap de los fotocatalizadores estimada según la ecuación de Planck

| Fotocatalizador        | Eg (eV)          |                  |                  |
|------------------------|------------------|------------------|------------------|
|                        | Ti <sup>4+</sup> | Co <sup>2+</sup> | Co <sup>3+</sup> |
| TiO <sub>2</sub>       | 2.97             |                  |                  |
| 1%Co/ TiO <sub>2</sub> | 2.72             | 1.65             | 1.93             |

Los valores obtenidos mostraron una disminución de Eg con la presencia de cobalto en la red cristalina de titanio.

### Evaluación de la química superficial por espectroscopía de fotoelectrones de rayos X (XPS).

La estructura electrónica superficial de TiO<sub>2</sub> y del material modificado 1% Co/TiO<sub>2</sub> fue investigada mediante espectroscopía XPS, con el propósito de establecer relaciones entre los estados de oxidación presentes en la superficie y su desempeño en la producción de isopropanol.

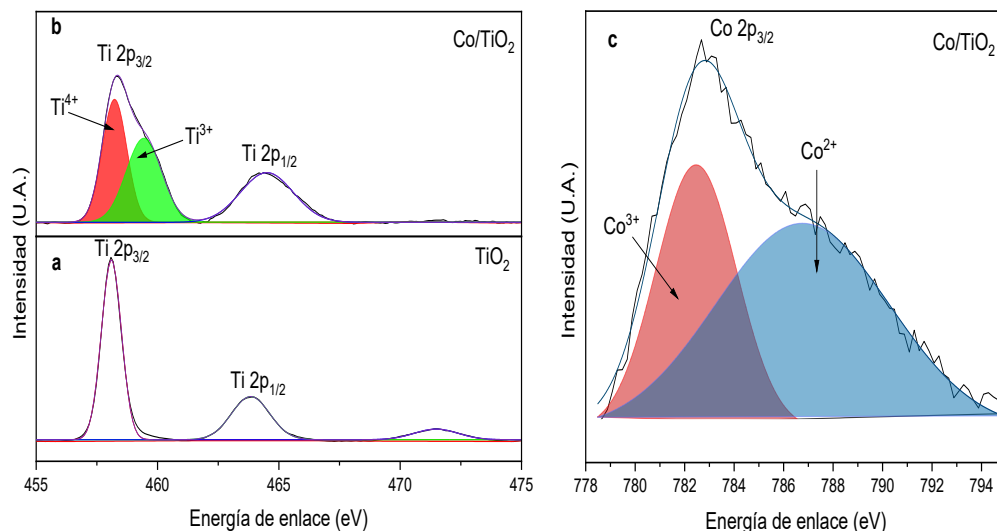
El espectro de alta resolución correspondiente a Ti 2p en el TiO<sub>2</sub> sin modificaciones presentó dos contribuciones simétricas centradas en 458.32 eV (Ti 2p<sub>3/2</sub>) y 464.05 eV (Ti 2p<sub>1/2</sub>). La separación energética observada concuerda con el desdoblamiento espín-órbita típico del Ti<sup>4+</sup> en redes cristalinas de tipo anatasa/rutilo [14–17]. La ausencia de señales adicionales o asimetrías en los picos indica que el titanio se encuentra predominantemente en estado +4, lo que confirma una superficie estequiométrica sin defectos electrónicos detectables con esta técnica.

En el caso del sistema 1%Co/TiO<sub>2</sub>, el perfil espectral de Ti 2p mostró un leve desplazamiento hacia energías de enlace ligeramente superiores (458.57 eV y 464.57 eV), acompañado de un ensanchamiento y asimetría de las señales. La deconvolución permitió distinguir cuatro contribuciones: dos asociadas a Ti<sup>4+</sup> y dos adicionales atribuidas a Ti<sup>3+</sup> superficial (459.75 eV y 465.37 eV)[18]. El análisis cuantitativo indicó una proporción aproximada de 67% Ti<sup>4+</sup> y 33 % Ti<sup>3+</sup>.

La aparición de Ti<sup>3+</sup> sugiere la generación de vacancias de oxígeno inducidas por la interacción con las especies de cobalto. Estos defectos estructurales son particularmente relevantes en sistemas fotocatalíticos, ya que actúan como centros de captura de electrones y favorecen tanto la adsorción de CO<sub>2</sub> como la transferencia interfacial de carga, procesos determinantes para la formación selectiva de isopropanol.

El espectro de Co 2p del material modificado evidenció las señales características del desdoblamiento espín-órbita en 780.68 eV (Co 2p<sub>3/2</sub>) y 796.48 eV (Co 2p<sub>1/2</sub>), con una separación aproximada de 15.8 eV.

La deconvolución del componente Co 2p<sub>3/2</sub> reveló contribuciones atribuibles a Co<sup>2+</sup> (782.37 eV) y Co<sup>3+</sup> (780.04 eV)[19–22], mientras que las señales correspondientes en la región 2p<sub>1/2</sub> confirmaron la coexistencia de ambos estados de oxidación. La presencia de picos satélite intensos respalda la asignación de especies de cobalto en un entorno oxidado, lo cual es consistente con la fase espinela Co<sub>3</sub>O<sub>4</sub> y con interacciones electrónicas Co-O bien definidas. **Figura 2.**



**Figura 2.** Espectro XPS de alta resolución de a) Ti 2p, b) Ti 2p en 1%Co/TiO<sub>2</sub> y c) Co 2p en 1% Co/TiO<sub>2</sub>.

El análisis cuantitativo de áreas indicó una mayor proporción superficial de Co<sup>2+</sup> (71%) respecto a Co<sup>3+</sup> (29%), lo que sugiere una superficie enriquecida en centros redox potencialmente activos. Esta coexistencia de Co<sup>2+</sup>/Co<sup>3+</sup> favorece procesos de transferencia electrónica cíclica, lo que facilita la activación de CO<sub>2</sub> y la generación de especies reactivas implicadas en la formación de isopropanol.

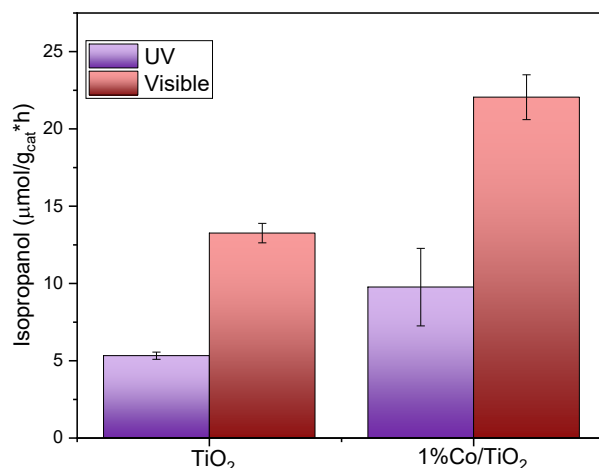
Adicionalmente, la relación superficial Co/Ti determinada por XPS evidenció que aproximadamente el 27% de los átomos de titanio superficiales están cubiertos por o interactúan con especies de cobalto. Este grado de cobertura indica una dispersión adecuada del componente activo, preservando simultáneamente los sitios del soporte necesarios para los procesos de separación de carga y de adsorción reactiva. En conjunto, el análisis XPS confirma que la incorporación de Co modifica significativamente la estructura electrónica superficial del TiO<sub>2</sub>, lo que promueve la generación de defectos y centros redox que favorecen la eficiencia y la selectividad en la producción fotocatalítica de isopropanol.

**Reducción fotocatalítica de CO<sub>2</sub>.** Con el objetivo de analizar la influencia de la energía de irradiación sobre la fotorreducción de CO<sub>2</sub>, se evaluaron los fotocatalizadores de TiO<sub>2</sub> y 1%Co/TiO<sub>2</sub> empleando dos fuentes fotónicas diferentes, UV (254 nm) y visible. Después de 1 hora

de irradiación, se tomaron muestras gaseosas mediante el burbujeo de CO<sub>2</sub> a través de la fase líquida del sistema de reacción. Estas muestras contienen tanto especies volátiles arrastradas por el flujo de CO<sub>2</sub> como productos parcialmente disueltos en el medio líquido. El análisis cualitativo y cuantitativo se realizó mediante espectroscopía FTIR. El análisis por FTIR se acopló con curvas de calibración previas usando estándares certificados en fases gaseosas y en líquidos evaporados (Bruker Vertex 70 con celda de gases de paso largo), lo que permitió la deconvolución precisa mediante segundas derivadas matemáticas en el software Grams/AI 7.02 para evitar el solapamiento de bandas de estiramiento C-O y C=O entre el isopropanol, el acetaldehído y el ácido fórmico. Como control, se realizó una prueba en blanco en ausencia de fotocatalizador, bajo las mismas condiciones experimentales, sin detectarse formación de productos con ninguna de las fuentes de irradiación.

El análisis cuantitativo de las corrientes gaseosas obtenidas mostró que el producto mayoritario fue isopropanol con trazas de ácido fórmico, formaldehído, metanol y acetaldehído. La concentración máxima del producto mayoritario se muestra en la **Figura 3**.

En la figura se observa la formación de isopropanol bajo luz UV y visible. Los fotocatalizadores modificados con Co mostraron una actividad superior a la del TiO<sub>2</sub> prístino en la formación de isopropanol, lo que confirma el papel promotor del cobalto en la fotoactividad del TiO<sub>2</sub>. Este comportamiento sugiere que la hidrogenación del CO<sub>2</sub> ocurre a una velocidad mayor que la de su desoxigenación, lo que favorece la formación de compuestos oxigenados. Asimismo, se ha reportado que la fotorreducción de CO<sub>2</sub> en sistemas acuosos sigue complejas redes de reacción debido a la multiplicidad de rutas electrónicas disponibles entre los portadores fotogenerados y las especies adsorbidas.



**Figura 3.** Producción de isopropanol sobre TiO<sub>2</sub> y 1%Co/TiO<sub>2</sub> bajo irradiación UV y visible

Los espectros UV-Vis de los fotocatalizadores CoTiO<sub>2</sub> muestran una banda de absorción intensa y amplia entre 400 y 800 nm, asociada a especies activas de Co<sup>2+</sup> y Co<sup>3+</sup> en la región visible. La mejora en la actividad fotocatalítica del TiO<sub>2</sub> tras la incorporación de Co se atribuye principalmente a la prolongación de la vida útil de los electrones excitados en la banda de conducción; es decir, el cobalto actúa como una trampa de electrones, lo que reduce la recombinación electrón-hueco y

favorece las reacciones de reducción [23], por lo que se observa una mayor producción de isopropanol bajo irradiación visible. Los datos demuestran que el TiO<sub>2</sub> prístino presenta una actividad significativamente inferior a la de los materiales modificados con cobalto.

Este comportamiento es consistente con reportes previos que demuestran que la deposición de metales de transición sobre TiO<sub>2</sub> mejora la producción fotocatalítica de alcoholes bajo luz visible. En particular, se ha informado de que una carga cercana al 1% en peso de Co sobre TiO<sub>2</sub> conduce a rendimientos óptimos de alcoholes ligeros [24]. Por otra parte, el TiO<sub>2</sub> prístino mostró una mayor actividad fotocatalítica bajo radiación visible. Este fenómeno se atribuye a las propiedades ópticas intrínsecas derivadas de su síntesis. El análisis UV-Vis reveló que TiO<sub>2</sub> presenta una banda prohibida de 2.97 eV, lo que equivale a una longitud de onda de 417 nm y se ubica en el intervalo del espectro visible. La aplicación de una radiación energética superior a este umbral —como la del espectro ultravioleta— induce un exceso de energía libre que acelera la recombinación de los portadores de carga fotogenerados (e<sup>-</sup>/h<sup>+</sup>) antes de que puedan migrar a la superficie. Por lo tanto, al operar en la radiación visible, el sistema reduce la velocidad de recombinación, lo que justifica el incremento observado en la actividad fotocatalítica bajo esta fuente de iluminación.

La **Tabla 2** muestra el balance electrónico bajo radiación UV y visible, y la selectividad hacia isopropanol para ambos catalizadores, calculados mediante la Ecuación 2.

$$\%S = \frac{18 e^{-} \times n_{isopropanol}}{\Sigma(e^{-} \times n_{productos})} \quad (2)$$

**Tabla 2.** Flujo de electrones y selectividad hacia isopropanol bajo diferentes fuentes de radiación

| Radiación | Fotocatalizador       | Flujo de e <sup>-</sup> (μmol) | Selectividad (%) |
|-----------|-----------------------|--------------------------------|------------------|
| UV        | TiO <sub>2</sub>      | 95.98                          | 99.77            |
|           | 1%Co/TiO <sub>2</sub> | 176.70                         | 99.42            |
| Visible   | TiO <sub>2</sub>      | 240.12                         | 90.40            |
|           | 1%Co/TiO <sub>2</sub> | 401.92                         | 98.75            |

En la tabla se observa que el TiO<sub>2</sub> prístino y el fotocatalizador de 1%Co/TiO<sub>2</sub> exhibieron una alta selectividad hacia el isopropanol, alcanzando valores de 99.77% y 99.42%, respectivamente. En ambos fotocatalizadores, los subproductos simples (C1, ácido fórmico, formaldehído, metanol) permanecieron fijos en límites de detección analíticas (0.01 μmol). La diferencia medular introducida por la incorporación del cobalto no radica en la alteración de la ruta selectiva bajo luz UV, sino en una aceleración drástica de la cinética de transferencia de carga. El flujo total de electrones útiles invertidos en el proceso de fotorreducción aumentó en un 84.10%, pasando de 95.98 μmol de e<sup>-</sup> en el blanco de titania a 176.70 μmol de e<sup>-</sup> en el catalizador dopado. Este fenómeno demuestra que la introducción superficial de especies de cobalto actúa como un sumidero cinético eficiente que mitiga la recombinación de los portadores de carga fotogenerados en la banda de conducción del TiO<sub>2</sub>.

Bajo radiación visible, el TiO<sub>2</sub> prístino procesa un total de 240.12  $\mu\text{mol}$  de  $e^-$ , mientras que el fotocatalizador 1%Co/TiO<sub>2</sub> alcanza un máximo de 401.92  $\mu\text{mol}$  de  $e^-$ , lo que representa un incremento del 67.38%. Este aumento se correlaciona directamente con las transiciones subbandgap identificadas por DRS y XPS, en las que la coexistencia de los estados de oxidación Co<sup>2+</sup> y Co<sup>3+</sup> genera niveles de energía discretos (estados intrabanda) dentro de la brecha de banda prohibida del semiconductor, lo que permite la absorción y la explotación eficientes de fotones en la región visible.

A pesar de la alta generación de portadores de carga bajo luz visible, la selectividad electrónica hacia el isopropanol se mantuvo constante. Es importante mencionar que la concentración de acetaldehído (CH<sub>3</sub>CHO) aumentó de 0.12  $\mu\text{mol}$  en el TiO<sub>2</sub> a 0.49  $\mu\text{mol}$  en el sistema dopado (**Tabla 3-4**). En términos de balance energético, esto representó un redireccionamiento controlado de 4.9  $\mu\text{mol}$  de  $e^-$  hacia la ruta del intermediario C2. Desde una perspectiva mecanicista, la acumulación detectable de acetaldehído actúa como la huella digital molecular que valida el mecanismo de acoplamiento C-C consecutivo.

**Tabla 3.** Productos detectados por FTIR durante la fotoreducción de CO<sub>2</sub> bajo radiación UV

| Productos<br>( $\mu\text{mol} \cdot \text{gcat}^{-1} \cdot \text{h}^{-1}$ ) | Fotocatalizadores |                       |
|-----------------------------------------------------------------------------|-------------------|-----------------------|
|                                                                             | TiO <sub>2</sub>  | 1%Co/TiO <sub>2</sub> |
| Ácido fórmico                                                               | 0.01              | 0.01                  |
| Acetaldehído                                                                | 0.01              | 0.01                  |
| Formaldehído                                                                | 0.01              | 0.01                  |
| Metanol                                                                     | 0.01              | 0.09                  |
| Isopropanol                                                                 | 5.32              | 9.76                  |

**Tabla 4.** Productos detectados por FTIR durante la fotoreducción de CO<sub>2</sub> bajo radiación visible

| Productos<br>( $\mu\text{mol} \cdot \text{gcat}^{-1} \cdot \text{h}^{-1}$ ) | Fotocatalizadores |                       |
|-----------------------------------------------------------------------------|-------------------|-----------------------|
|                                                                             | TiO <sub>2</sub>  | 1%Co/TiO <sub>2</sub> |
| Ácido fórmico                                                               | 0.01              | 0.01                  |
| Acetaldehído                                                                | 0.12              | 0.49                  |
| Formaldehído                                                                | 0.01              | 0.01                  |
| Metanol                                                                     | 0.03              | 0.01                  |
| Isopropanol                                                                 | 13.26             | 22.05                 |

El factor de amplificación cinético interfacial (FACI) es la relación de electrones procesados por unidad de energía de banda gap disponible (Ecuación 3):

$$FACI = \frac{\text{Flujo de electrones}}{E_g} \quad (3)$$

El análisis cinético-fotónico (**Tabla 5**) revela el efecto sinérgico en el sistema 1%Co/TiO<sub>2</sub>, demostrando que el catalizador modificado duplica el solapamiento electrónico (intersección espacial de las nubes electrónicas (orbitales atómicos) de dos o más átomos cuando se aproximan lo suficiente para formar un enlace de tipo covalente) respecto a la titania, alcanzando un valor crítico de 147.76  $\mu\text{mol } e^- \cdot \text{eV}^{-1}$  bajo radiación visible, lo que descarta que las especies de cobalto

actúan como filtros ópticos pasivos (absorbe luz pero no participa en el proceso de reacción). Mientras que en el  $\text{TiO}_2$  la energía libre de los fotones absorbidos se disipa mediante recombinación no productiva hacia productos monocarbonados (C1). La coexistencia interfacial del sitio activo trimálico ( $\text{Ti}^{3+}\text{-O}_{\text{vac}}\text{-Co}^{2+}/\text{Co}^{3+}$ ), determinada mediante XPS, actúa como un rectificador cuántico de carga. Los estados intrabanda generados no solo estrechan el band gap de 2.97 eV a 2.72 eV, sino que también prolongan la vida media superficial de los electrones fotogenerados; esto eleva la probabilidad de colisión y de adsorción del  $\text{CO}_2$  y del intermediario detectado, C2 (acetaldehído). Este aumento energético permitió sostener la demanda multielectrónica de  $18e^-$  con selectividad hacia el isopropanol.

**Tabla 5.** Factor de amplificación cinético interfacial

| Radiación | Fotocatalizador      | FACI ( $\mu\text{mol } e^- \cdot \text{eV}^{-1}$ ) |
|-----------|----------------------|----------------------------------------------------|
| UV        | $\text{TiO}_2$       | 95.98                                              |
|           | 1%Co/ $\text{TiO}_2$ | 176.70                                             |
| Visible   | $\text{TiO}_2$       | 240.12                                             |
|           | 1%Co/ $\text{TiO}_2$ | 401.92                                             |

**Consideraciones mecanísticas.** Con base en la distribución de productos detectados durante la reducción fotocatalítica de  $\text{CO}_2$  con  $\text{H}_2\text{O}$  sobre  $\text{TiO}_2$  y 1%Co/ $\text{TiO}_2$  reportados en las tablas 3 y 4 y los resultados obtenidos en XPS se propone el siguiente mecanismo de reacción:

1. Transferencia de  $\text{CO}_2$  y  $\text{H}_2\text{O}$  a la superficie de los fotocatalizadores Co/ $\text{TiO}_2$ .
2. Adsorción de  $\text{CO}_2$  y  $\text{H}_2\text{O}$  sobre la superficie del fotocatalizador. La adsorción del  $\text{CO}_2$  se produce mediante la interacción entre los orbitales de  $\text{Ti}^{4+}$ ,  $\text{Co}^{2+}$  y  $\text{Co}^{3+}$  y los orbitales  $\pi^*$  del  $\text{CO}_2$ . Esta interacción debilita el enlace  $\text{C}=\text{O}$ , lo que favorece la flexión de la molécula y su capacidad de aceptar electrones. La adsorción de  $\text{H}_2\text{O}$  se produce mediante la interacción con los sitios activos de  $\text{TiO}_2$  y con especies de  $\text{Co}^{3+}$ .
3. Fotoabsorción por los fotocatalizadores Co/ $\text{TiO}_2$  y generación de pares electrón-hueco ( $e^-/h^+$ ) en  $\text{TiO}_2$  y en las especies de Co.
4. El  $h^+$  fotogenerado oxida el  $\text{H}_2\text{O}$  adsorbido, produciendo protones ( $\text{H}^+$ ) y radicales hidroxilos ( $\bullet\text{OH}$ ).
5. El radical  $\text{CO}_2\bullet^-$  se forma mediante la reducción del  $\text{CO}_2$  adsorbido con los electrones fotogenerados.
6. Los  $\text{H}^+$ ,  $e^-$  y radicales intermedios reaccionan a través de rutas sucesivas de hidrogenación para formar productos tales como: metanol ( $\text{CH}_3\text{OH}$ ), acetaldehído ( $\text{C}_2\text{H}_4\text{O}$ ), hasta llegar a isopropanol ( $\text{C}_3\text{H}_8\text{O}$ ).
7. Desorción de los productos finales desde la superficie del fotocatalizador.
8. Transferencia de los productos desde la superficie del fotocatalizador al medio de reacción.

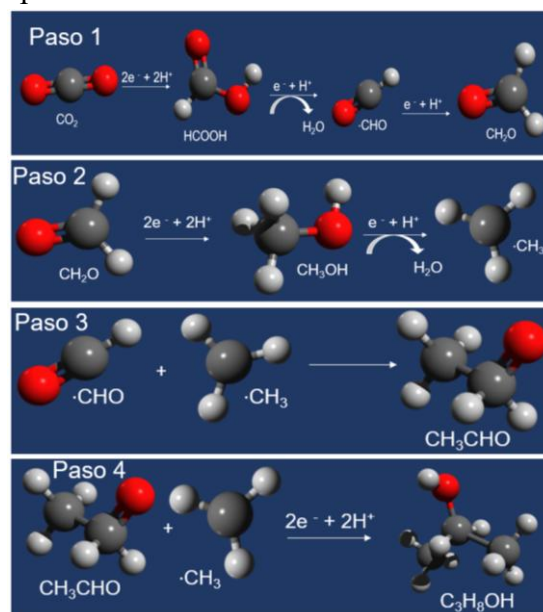
Con base en la literatura y en los productos detectados mediante espectroscopía FTIR, se propone el siguiente paso de la reacción. **Figura 7.**

Paso 1. Formación de ácido fórmico (CHOOH) y formaldehído.

Paso 2. Formación de metanol.

Paso 3. Formación del acetaldehído.

Paso 4. Formación de isopropanol.



**Figura 7.** Mecanismo de reacción propuesto para la formación de isopropanol

## CONCLUSIÓN

Los resultados obtenidos demuestran que la modificación de  $\text{TiO}_2$  con 1% de Co induce un efecto sinérgico entre  $\text{Ti}^{3+}$ ,  $\text{Co}^{2+}$  y  $\text{Co}^{3+}$  que reduce la banda prohibida y mejora la separación de los pares  $e^-h^+$ , lo que favorece la activación del  $\text{CO}_2$  y la formación de intermediarios clave para el acoplamiento C-C. El fotocatalizador 1%Co/ $\text{TiO}_2$  presentó mayor actividad, mayor selectividad hacia el isopropanol y mayor estabilidad frente al  $\text{TiO}_2$  prístino.

Asimismo, se identificó que el flujo fotónico en el rango visible es óptimo para maximizar la producción. En conjunto, el control de los estados redox del cobalto y de los defectos en  $\text{TiO}_2$  se confirma como una estrategia efectiva para dirigir la fotoreducción de  $\text{CO}_2$  hacia alcoholes  $\text{C}_3$  de mayor valor energético.

## REFERENCIAS

- [1] Abdullah H, Khan MdMR, Ong HR, Yaakob Z (2017) Modified  $\text{TiO}_2$  photocatalyst for  $\text{CO}_2$  photocatalytic reduction: An overview. *Journal of  $\text{CO}_2$  Utilization* 22:15–32.
- [2] Akshay VR, Arun B, Dash S, et al (2018) Defect mediated mechanism in undoped, Cu and Zn-doped  $\text{TiO}_2$  nanocrystals for tailoring the band gap and magnetic properties. *RSC Adv* 8:41994–42008.

- [3] Alex C, Sarma SCh, Peter SC, John NS (2020) Competing Effect of Co<sup>3+</sup> Reducibility and Oxygen-Deficient Defects Toward High Oxygen Evolution Activity in Co<sub>3</sub>O<sub>4</sub> Systems in Alkaline Medium. *ACS Appl Energy Mater* 3:5439–5447.
- [4] Bharti B, Kumar S, Lee H-N, Kumar R (2016) Formation of oxygen vacancies and Ti<sup>3+</sup> state in TiO<sub>2</sub> thin film and enhanced optical properties by air plasma treatment. *Sci Rep* 6:32355.
- [5] Chen Q, Ji F, Liu T, et al (2013) Synergistic effect of bifunctional Co–TiO<sub>2</sub> catalyst on degradation of Rhodamine B: Fenton-photo hybrid process. *Chemical Engineering Journal* 229:57–65.
- [6] Feng H, Zhang J, Wang X, Lee TH (2018) Analysis of auto-ignition characteristics of low-alcohol/iso-octane blends using combined chemical kinetics mechanisms. *Fuel* 234:836–849.
- [7] Ghadikolaie MA, Wong PK, Cheung CS, et al (2021) Impact of lower and higher alcohols on the physicochemical properties of particulate matter from diesel engines: A review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews* 143:110970.
- [8] Hamadanian M, Reisi-Vanani A, Majedi A (2010) Sol-gel preparation and characterization of Co/TiO<sub>2</sub> nanoparticles: Application to the degradation of methyl orange. *JICS* 7: S52–S58.
- [9] Jin C, Liu B, Lei Z, Sun J (2015) Structure and photoluminescence of the TiO<sub>2</sub> films grown by atomic layer deposition using tetrakis-dimethylamino titanium and ozone. *Nanoscale Res Lett* 10:95.
- [10] Khalilzadeh A, Shariati A (2018) Photoreduction of CO<sub>2</sub> over heterogeneous modified TiO<sub>2</sub> nanoparticles under visible light irradiation: Synthesis, process and kinetic study. *Solar Energy* 164:251–261.
- [11] Khan MdM, Sharma RP, Kadian AK, Hasnain SMM (2022) An assessment of alcohol inclusion in various combinations of biodiesel-diesel on the performance and exhaust emission of modern-day compression ignition engines – A review. *Materials Science for Energy Technologies* 5:81–98.
- [12] Kumar Singh A, Das C, Indra A (2022) Scope and prospect of transition metal-based cocatalysts for visible light-driven photocatalytic hydrogen evolution with graphitic carbon nitride. *Coordination Chemistry Reviews* 465:214516.
- [13] Li J, Li Z, Ning F, et al (2018) Ultrathin Mesoporous Co<sub>3</sub>O<sub>4</sub> Nanosheet Arrays for High-Performance Lithium-Ion Batteries. *ACS Omega* 3:1675–1683.
- [14] Liu J, Ma X, Yang L, et al (2018) In situ green oxidation synthesis of Ti<sup>3+</sup> and N self-doped SrTiO<sub>x</sub>N<sub>y</sub> nanoparticles with enhanced photocatalytic activity under visible light. *RSC Adv* 8:7142–7151.

- [15] Mardones C, Baeza N (2018) Economic and environmental effects of a CO<sub>2</sub> tax in Latin American countries. *Energy Policy* 114:262–273.
- [16] McGee M (2022) Global CO<sub>2</sub> emissions. In: CO<sub>2</sub>.earth. <https://www.co2.earth/global-co2-emissions>. Accessed 6 Oct 2022.
- [17] Ola O, Maroto-Valer MM (2015) Transition metal oxide based TiO<sub>2</sub> nanoparticles for visible light induced CO<sub>2</sub> photoreduction. *Applied Catalysis A: General* 502:114–121.
- [18] Valadkhani A, Smyth R, Nguyen J (2019) Effects of primary energy consumption on CO<sub>2</sub> emissions under optimal thresholds: Evidence from sixty countries over the last half century. *Energy Economics* 80:680–690.
- [19] Wang L, Qi T, Wang J, et al (2018) Uniform dispersion of cobalt nanoparticles over nonporous TiO<sub>2</sub> with low activation energy for magnesium sulfate recovery in a novel magnesia-based desulfurization process. *Journal of Hazardous Materials* 342:579–588.
- [20] Wang W, Li T, Komarneni S, et al (2022) Recent advances in Co-based co-catalysts for efficient photocatalytic hydrogen generation. *Journal of Colloid and Interface Science* 608:1553–1575.
- [21] Xu L, Jiang Q, Xiao Z, et al (2016) Plasma-Engraved Co<sub>3</sub>O<sub>4</sub> Nanosheets with Oxygen Vacancies and High Surface Area for the Oxygen Evolution Reaction. *Angew Chem Int Ed* 55:5277–5281.
- [22] Zhang L, Jaroniec M (2018) Toward designing semiconductor-semiconductor heterojunctions for photocatalytic applications. *Applied Surface Science* 430:2–17.
- [23] Zhao Y, Wei Y, Wu X, et al (2018) Graphene-wrapped Pt/TiO<sub>2</sub> photocatalysts with enhanced photogenerated charges separation and reactant adsorption for high selective photoreduction of CO<sub>2</sub> to CH<sub>4</sub>. *Applied Catalysis B: Environmental* 226:360–372.
- [24] Zheng L, Li H, Xu X (2018) Catalytic decomposition of N<sub>2</sub>O over Mg-Co composite oxides hydrothermally prepared by using carbon sphere as template. *Journal of Fuel Chemistry and Technology* 46:569–577.

