



Desarrollo y uso de polímeros (g-C₃N₄) para la descontaminación del agua

Development and use of polymers (g-C₃N₄) for water decontamination

Karina Portillo-Cortez, Sergio Fuentes Moyado, Uriel Caudillo- Flores*

Universidad Nacional Autónoma de México, Centro de Nanociencias y Nanotecnología,
Km. 107 Carretera Tijuana a Ensenada, C.P. 22860, Ensenada, Baja California, México

[*ucaudillo@ens.cnyn.unam.mx](mailto:ucaudillo@ens.cnyn.unam.mx)

En las últimas décadas, el crecimiento de la población ha generado un aumento en el consumo de recursos de primera necesidad como el agua potable y la energía eléctrica. Actualmente, el acceso al agua limpia es cada vez más difícil debido a la presencia de los denominados contaminantes emergentes (CE) en ríos, lagos, lagunas y otros cuerpos de agua. Por definición, los CE son sustancias químicas que se han detectado recientemente en el agua y pueden representar un riesgo para la salud humana y el medio ambiente (Portillo-Cortez et al., 2023). Aunque muchos de los CE son de origen orgánico (hormonas, colorantes, pesticidas, fármacos, entre otros), su descomposición mediante procesos naturales es difícil y lenta debido a que presentan alta estabilidad química, por lo que se requiere de otros métodos específicos para su eliminación (Xing et al., 2022).

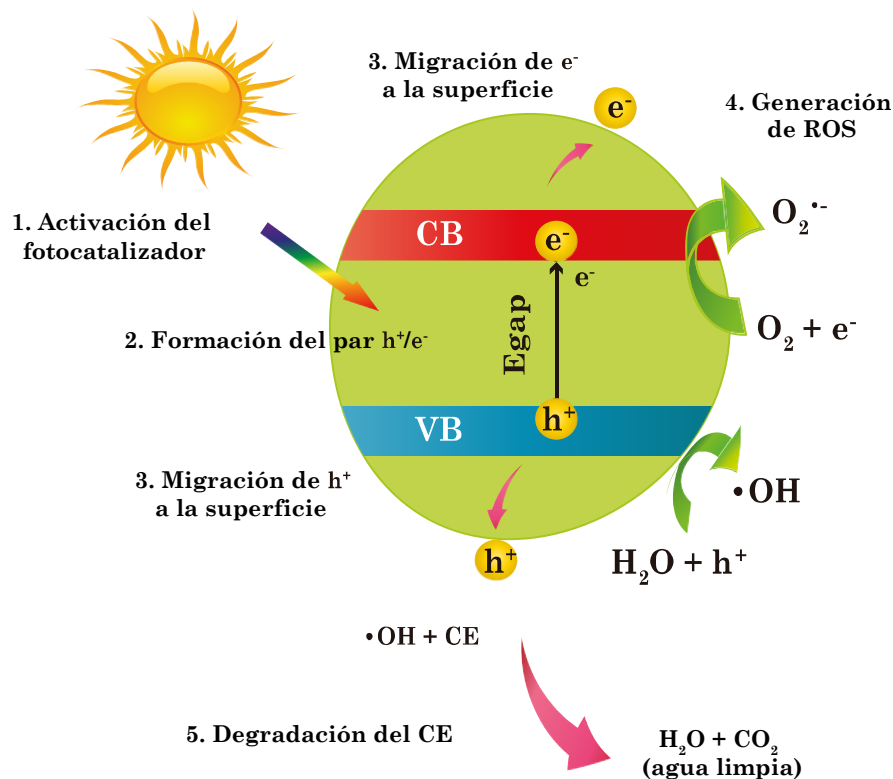
La fotocatalisis heterogénea: una solución sustentable para la eliminación de contaminantes

Una alternativa prometedora para la eliminación de contaminantes es la fotocatalisis heterogénea debido a su eficiencia, bajo costo de operación y a que es respetuosa con el ambiente. Este proceso imita la fotosíntesis natural de las plantas y utiliza nanomateriales conocidos como *fotocatalizadores*, que absorben luz (solar o artificial) para generar moléculas reactivas que descomponen al contaminante en agua (H₂O), dióxido de carbono (CO₂) y otras sales inofensivas.

En la Figura 1 se muestra el proceso fotocatalítico que se lleva a cabo para la descomposición de CE y que consiste en los siguientes pasos: 1) Activación del semiconductor (fotocatalizador) al ser irradiado con fotones de igual o mayor energía que el de su brecha prohibida (E_{gap} , *por sus siglas en inglés*). 2) El fotocatalizador al absorber los fotones genera el fenómeno denominado “formación de pares hueco-electrón (h^+/e^-)”. Es decir, por cada fotón que incide y se absorbe sobre la superficie del fotocatalizador, de la banda de valencia (BV) se desplaza un electrón (e^-) a la banda de conducción (BC), generando un exceso de electrones en la BC y huecos positivos (h^+ ; ausencia de electrones) en la BV. 3) Tanto los electrones como los huecos migran a la superficie del fotocatalizador. 4) Generación de especies reactivas de oxígeno (ROS, *por sus siglas en inglés*; $O_2^{\cdot-}$, H_2O_2 , $\bullet OH$), por la interacción de los h^+/e^- con especies quimisorbidas, como el O_2 y el H_2O . 5) Interacción de las ROS con los CE. Es importante destacar que, de las distintas ROS el radical hidroxilo ($\bullet OH$) es quien desempeña el rol principal en la degradación de los CE, debido a su alto poder oxidativo (2.8 V) que se encuentra solamente por debajo del flúor. Los $\bullet OH$ al entrar en contacto con los contaminantes emergentes, y después de un tiempo suficiente de interacción con ellos, degrada a los CE hasta llevarlos a su mineralización completa (H_2O , CO_2 y otras sustancias inocuas) (Portillo-Cortez et al., 2023).

Figura 1

Proceso de degradación de CE en el agua por fotocátalisis heterogénea.



El papel de los nanomateriales como fotocatalizadores en la degradación de CE

Como se mencionó anteriormente, para llevar a cabo la degradación de un contaminante, es necesario el uso de un material fotocatalizador. Un fotocatalizador es una sustancia que es activada por la energía de un fotón incidente que absorbe y, además, es capaz de incrementar la rapidez de una reacción sin consumirse. Por lo tanto, la selección de un fotocatalizador depende de las propiedades de éste, tal como su capacidad para absorber la radiación incidente, el valor de su E_{gap} , la capacidad de separación de pares electrón-hueco, su estabilidad química y térmica, etc. Sin embargo, es preciso entender primero los tipos de materiales que existen de acuerdo con su capacidad de conducir electricidad, los cuales se clasifican en conductores, aislantes y semiconductores.

Un material conductor permite el paso libre de los electrones debido a que presentan un E_{gap} pequeño o nulo; ejemplo de estos materiales son el cobre y el oro que se emplean en la fabricación de circuitos electrónicos. En el caso opuesto se encuentran los materiales aislantes como el teflón o el vidrio que impiden el movimiento libre de los electrones a través de su estructura. Los materiales aislantes no pueden activarse debido a que poseen un valor de E_{gap} elevado (> 5 eV). En el caso intermedio están los materiales semiconductores como el óxido de titanio (TiO_2) y el óxido de zinc (ZnO), que presentan un valor de E_{gap} entre 0.25 y 5 eV y tienen la capacidad de comportarse como conductores o aislantes dependiendo de la energía de la radiación que se les incide (Chroneos et al., 2012) (Nemiwal et al., 2021).

En el área de la fotocatálisis heterogénea, los materiales conductores son escasamente empleados, debido al traslape de la BV y BC, lo que hace que la separación de los portadores de carga (h^+/e^-) sea prácticamente imposible. Asimismo, los materiales aislantes no son útiles como fotocatalizadores debido a que su E_{gap} es muy amplia (> 5 eV), por lo que la absorción de la luz UV o visible es poco probable que genere su gran pares h^+/e^- . Por su parte, los materiales semiconductores son los únicos que pueden ser empleados como fotocatalizadores debido a que son capaces de generar los h^+/e^- al absorber fotones con energía del espectro UV o visible.

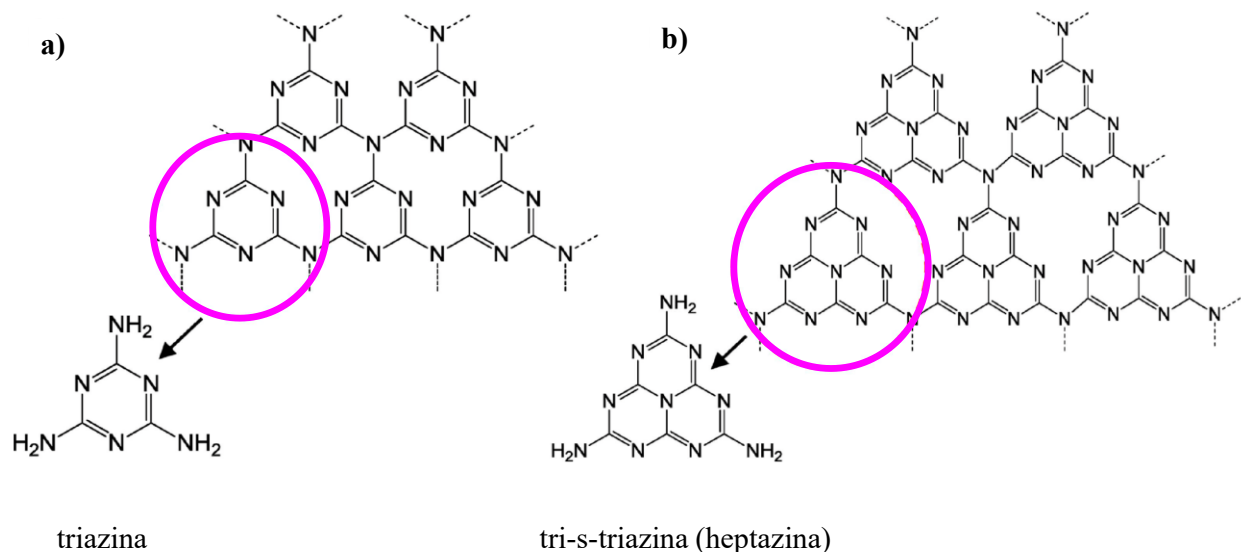
Gracias a la nanotecnología, hoy contamos con nanomateriales fotocatalíticos capaces de descomponer contaminantes en el agua. Entre los más conocidos se encuentran el TiO_2 y el ZnO . Sin embargo, estos materiales presentan una limitación: solo se activan con luz ultravioleta, la cual representa apenas el 5 % de la radiación solar. Para superar este obstáculo, se han desarrollado nuevos nanomateriales que pueden activarse con luz visible.

Uno de los fotocatalizadores nanoestructurados más prometedores es el **nitruro de carbono grafítico (g- C_3N_4)**. Este es un nanomaterial polimérico con propiedades de semiconductor que está formado a base de láminas apiladas compuestas por átomos de carbono (C) y nitrógeno (N) enlazados formando anillos planares de triazina o tri-s-triazina (heptazina) como unidad básica de la estructura (Antolini, 2025), como se muestra en la **Figura 2**. Además de ser económico, no tóxico, estable química y térmicamente, puede ser activado con luz visible debido al valor de su E_{gap} (2.7 eV) (Caudillo-Flores et al., 2020). Por lo que lo convierte en un nanomaterial ideal para ser utilizado en la eliminación de contaminantes en agua por medio de FH. No obstante, el g- C_3N_4 también presenta desafíos, uno de ellos, es su baja área superficial, lo que limita la cantidad de sitios activos disponibles

para la degradación del contaminante (Portillo-Cortez et al., 2024). Asimismo, las velocidades de reacción suelen ser bajas, lo que reduce su eficiencia práctica.

Figura 2

Estructura de $g-C_3N_4$ formada por la unidades básicas de anillos planares de a) triazina, o b) tri-s-triazina (heptazina).



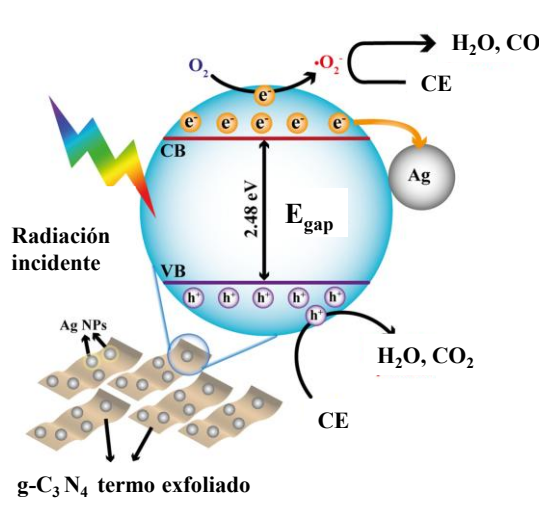
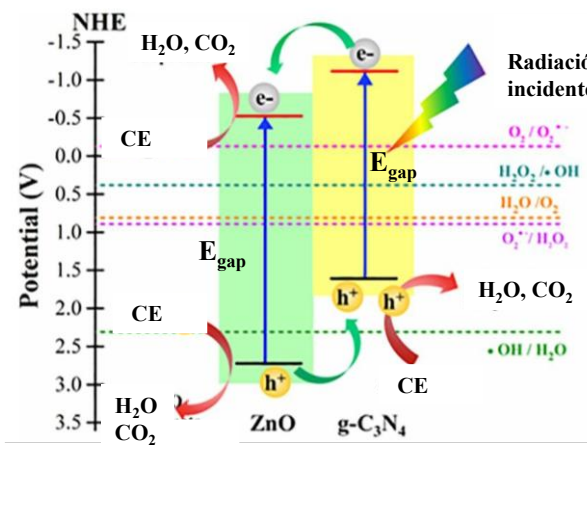
Nota: Adaptado de “The Application of 2D Graphitic Carbon Nitride ($g-C_3N_4$) and Hexagonal Boron Nitride (h-BN) in Low-Temperature Fuel Cells: Catalyst Supports, ORR Catalysts, and Membrane Fillers” (p. 1), por E. Antolini, 2025, *Molecules*, 30, 1852

¿Cómo podemos mejorar el $g-C_3N_4$ para un Futuro Sostenible?

Con el desarrollo de la nanotecnología, hoy en día se disponen de diversas estrategias para mejorar las propiedades del $g-C_3N_4$ entre las que se incluyen el dopaje con otros elementos, decoración con metales nobles, formación de heteroestructuras mediante el acoplamiento con otro semiconductor y el incremento del área superficial. **El esquema 1** muestra las principales ventajas que se obtienen del $g-C_3N_4$ al modificarlo mediante la adición de nanopartículas metálicas y la formación de heteroestructuras. Del lado derecho se muestra el proceso de degradación de un CE usando $g-C_3N_4$ decorados con nanopartículas metálicas. En este caso, cuando el semiconductor es excitado, el electrón que fue promovido a la BC tiene la posibilidad de recombinarse, es decir, el electrón puede regresar nuevamente a la BV por lo que no se generaría ninguna ROS. En este caso, ante la presencia de una partícula metálica, el electrón tiene la posibilidad de ser transferido al metal evitando la recombinación con el hueco y se promueve la generación de ROS.

Esquema 1

Principales cambios que resultan de la modificación del g-C₃N₄.

Decoración con metales nobles	Formación de heteroestructuras
 <p>Diagrama de un g-C₃N₄ termo exfoliado decorado con nanopartículas de Ag. Se muestra la radiación incidente excitando electrones (e^-) de la banda de valencia (VB) a la banda de conducción (CB), dejando huecos (h^+). Las nanopartículas de Ag actúan como trampas de electrones, reduciendo la recombinación. Se indica un E_{gap} de 2.48 eV. Los productos de degradación son H₂O y CO₂.</p> <ul style="list-style-type: none"> ✓ Metal funciona como trampa de electrones. ✓ Disminuye la recombinación de portadores de carga fotogenerados. ✓ Se beneficia la formación de especies ROS. 	 <p>Diagrama de un heteroestructura de ZnO/g-C₃N₄. Se muestra la radiación incidente excitando electrones (e^-) y huecos (h^+). Se indica el E_{gap} de ZnO y g-C₃N₄. Se muestran los niveles de potencial (V) para H₂O/CO₂ y OH⁻/H₂O. Los productos de degradación son H₂O y CO₂.</p> <ul style="list-style-type: none"> ✓ La unión de dos semiconductores resulta en el acoplamiento de sus BV y BC. ✓ Se mejoran los procesos de separación y transporte de carga. ✓ Se beneficia la formación de especies ROS.

Por su parte, en el lado derecho del esquema se muestra el proceso de degradación del CE usando el g-C₃N₄ unido a un semiconductor secundario. La principal característica de este tipo de sistemas es el acoplamiento generado entre las BV y BC de ambos materiales que permite que los electrones y huecos fotogenerados sean transportados de un semiconductor al otro y de esta manera se disminuye la recombinación de los portadores de carga y se favorece la formación de especies ROS que degradan el CE.

En el Centro de Nanociencias y Nanotecnología de la UNAM, investigadores han trabajado en la modificación del g-C₃N₄ para mejorar sus propiedades. Por un lado, se ha reportado la obtención de nanohojas de g-C₃N₄ de alta área superficial ($\sim 140 \text{ m}^2 \text{ g}^{-1}$) sintetizadas por el método de exfoliación térmica. Posteriormente, el g-C₃N₄ exfoliado fue decorado con nanopartículas de Ag usando el método de impregnación química asistida por ultrasonido. En pruebas de laboratorio, este material aumentó la degradación del colorante azul de metileno de 55 % a 74 % en solo tres horas y dicha mejora fue atribuida a la reducción de los procesos de recombinación debido a la presencia de las nanopartículas de Ag (Portillo-Cortez et al., 2024). Por otro lado, también se ha reportado la formación de heteroestructuras de nanohojas de g-C₃N₄ y ZnO obtenidas por el método de impregnación húmeda. Los materiales obtenidos fueron empleados en la degradación del fármaco ceftriaxona obteniendo un 100 % de degradación en 1h para la mejor muestra y una degradación del 90 % en 180

min para el g-C₃N₄ puro. La mejora en la actividad fotocatalítica fue atribuida a la disminución significativa de los procesos de recombinación que resultó del acoplamiento de ambos sistemas (g-C₃N₄ y ZnO). Estos trabajos demuestran el potencial que tiene el g-C₃N₄ para poder mejorar sus propiedades y ser usado como un fotocatalizador eficiente.

Nuestro compromiso con el futuro del agua

Los avances en la eliminación de contaminantes demuestran que la ciencia y la innovación son fundamentales para enfrentar los retos ambientales, y en este sentido, debido a las ventajas que ofrece la fotocatálisis heterogénea, se propone como una estrategia prometedora en la degradación de contaminantes. Además, se resalta el papel fundamental de la nanotecnología como herramienta que permite llevar a cabo la modificación y optimización de las propiedades de los nanomateriales para su aplicación. Aunque aún queda mucho por hacer, los progresos en la investigación, en cuanto al desarrollo e innovación de nuevos nanomateriales, son prometedores debido a que cada vez se están obteniendo resultados más eficientes en la eliminación de CE utilizando el g-C₃N₄ como base de estos fotocatalizadores nanoestructurados. Lo que resulta en un paso importante hacia un mundo más limpio y sostenible.

Agradecimientos: Este trabajo fue apoyado por la DGAPA-PAPIIT (UNAM, México) a través del proyecto IV-100124, IN-116424.

Referencias bibliográficas:

- Antolini, E. (2025). The Application of 2D Graphitic Carbon Nitride (g-C₃N₄) and Hexagonal Boron Nitride (h-BN) in Low-Temperature Fuel Cells: Catalyst Supports, ORR Catalysts, and Membrane Fillers. In *Molecules* (Vol. 30, Issue 8). Multidisciplinary Digital Publishing Institute (MDPI). <https://doi.org/10.3390/molecules30081852>
- Caudillo-Flores, U., Rodríguez-Padrón, D., Muñoz-Batista, M. J., Kubacka, A., Luque, R., & Fernández-García, M. (2020). Facile synthesis of B/g-C₃N₄ composite materials for the continuous-flow selective photo-production of acetone. *Green Chemistry*, 22(15), 4975–4984. <https://doi.org/10.1039/d0gc01326a>
- Chroneos, A., Rushton, M. J. D., & Grimes, R. W. (2012). 1.02 - Fundamental Point Defect Properties in Ceramics. In *Comprehensive Nuclear Materials: Volume 1-5* (Vols. 1–5, pp. 47–64). Elsevier. <https://doi.org/10.1016/B978-0-08-056033-5.00002-1>
- Nemiwal, M., Zhang, T. C., & Kumar, D. (2021). Recent progress in g-C₃N₄, TiO₂ and ZnO based photocatalysts for dye degradation: Strategies to improve photocatalytic activity. *Science of the Total Environment*, 767, 144896. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2020.144896>
- Portillo-Cortez, K., Caudillo-Flores, U., Sánchez-López, P., Smolentseva, E., Dominguez, D., & Fuentes-Moyado, S. (2024). Photocatalytic Activity of Ag Nanoparticles Deposited on Thermoexfoliated g-C₃N₄. *Nanomaterials*, 14(7). <https://doi.org/10.3390/nano14070623>
- Portillo-Cortez, K., Romero-Ibarra, J. E., Dominguez, D., Alonso-Núñez, G., & Caudillo-Flores, U. (2023). Photodegradation of ceftriaxone using g-C₃N₄-ZnO nanocomposite as an efficient photocatalyst. *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry*, 445(May). <https://doi.org/10.1016/j.jphotochem.2023.115090>

Xing, J., Wang, N., Li, X., Wang, J., Taiwaikuli, M., Huang, X., Wang, T., Zhou, L., & Hao, H. (2022). Synthesis and modifications of g-C₃N₄-based materials and their applications in wastewater pollutants removal. *Journal of Environmental Chemical Engineering*, 10(6). <https://doi.org/10.1016/j.jece.2022.108782>