



Asociación Mexicana de Adsorción

---

**AVANCES EN ADSORCIÓN Y  
FENÓMENOS DE SUPERFICIE**

*PRIMER FORO DE  
ADSORCIÓN EN MÉXICO*

---

**RESÚMENES  
10 DE DICIEMBRE 2021**

*Hoja de cortesía*



## **Avances en Adsorción y Fenómenos de Superficie**

### **Primer Foro de Adsorción en México**

Primera edición: diciembre de 2022

ISBN: 978-607-59537 0-0 (e-book-PDF)

Datos de catalogación de la publicación

Nombre: Asociación Mexicana de Adsorción

Título: Avances en Adsorción y Fenómenos de Superficie

Editores: Nancy Verónica Pérez Aguilar, Javier Antonio Arcibar Orozco, María Selene Berber Mendoza, Nancy Elizabeth Dávila Guzmán, Lidia Esmeralda García Díaz, Jacob Josafat Salazar Rábago.

Descripción: Primera edición. | San Nicolás de los Garza, Nuevo León, México: Asociación Mexicana de Adsorción, A.C., 2023.

Incluye bibliografía.

Identificadores: ISBN 978-607-59537 0-0 (e-book-PDF)

Materias: Materiales. | Adsorción.

Clasificación: TL455.C3 T6 I7 2022

Diseño de portada: Nancy Elizabeth Dávila Guzmán

Primera edición: 3 de febrero de 2023.

D.R. © 2022 Asociación Mexicana de Adsorción, A.C.

ISBN: 978-607-59537 0-0 (e-book-PDF)



# **AVANCES EN ADSORCIÓN Y FENÓMENOS DE SUPERFICIE**

## **EDITORA**

Nancy Verónica Pérez Aguilar  
Universidad Autónoma de Coahuila

## **COMITÉ EDITORIAL**

Javier Antonio Arcibar Orozco  
Centro de Innovación Aplicada en Tecnologías Competitivas

María Selene Berber Mendoza  
Universidad Autónoma de San Luis Potosí

Nancy Elizabeth Dávila Guzmán  
Universidad Autónoma de Nuevo León

Lidia Esmeralda García Díaz  
Benemérita Universidad Autónoma de Puebla

Jacob Josafat Salazar Rábago  
Universidad Autónoma de Nuevo León

# **PRIMER FORO DE ADSORCIÓN EN MÉXICO**

## **COMITÉ ORGANIZADOR CONSEJO DIRECTIVO AMDA**

**Nancy Elizabeth Dávila Guzmán**  
**Presidenta**

**Javier Antonio Arcibar Orozco**  
**Vicepresidente**

**Jacob Josafat Salazar Rábago**  
**Secretario General**

**Nancy Verónica Pérez Aguilar**  
**Secretaria de Investigación**

**María Selene Berber Mendoza**  
**Tesorera**

**Lidia Esmeralda García Díaz**  
**Secretaria de Difusión**

## **COMITÉ CIENTÍFICO**

Eindhoven University of Technology  
Azahara Luna Triguero

Universidad Nacional Autónoma de México  
Elí Sánchez González

Benemérita Universidad Autónoma de Puebla  
María Ana Pérez Cruz  
Sergio Alberto Sabinas Hernández

Universidad Autónoma de Nuevo León  
Eduardo Soto Regalado  
Héctor Javier Amézquita García

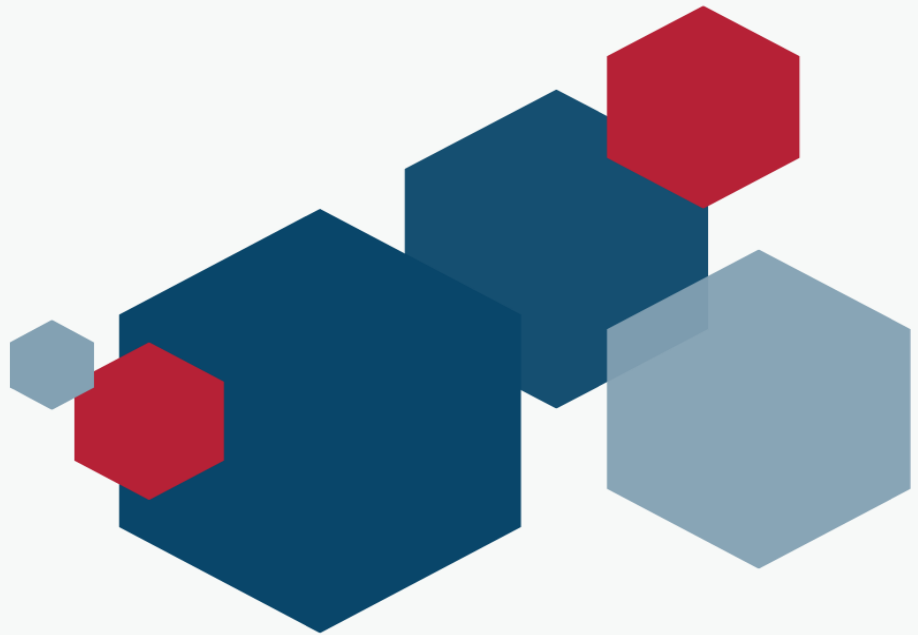
Universidad de Guanajuato  
Araceli Jacobo Azuara

Universidad Autónoma del Estado de Morelos  
María Luisa García Betancourt

Universidad Autónoma de San Luis Potosí  
Erika Padilla Ortega  
Nahúm Andrés Medellín Castillo  
Paola Elizabeth Díaz Flores



# Asociación Mexicana de Adsorción AC



## Acerca de Nosotros

La Asociación Mexicana de Adsorción AC, se constituyó legalmente el 14 de octubre de 2020 en Monterrey, N.L., por iniciativa de investigadores de universidades públicas y centros de investigación en el noreste y centro del país.

## Objetivos

Promover la colaboración de los actores científicos en México, en el sector público y privado, para dar solución a las problemáticas en México y el mundo en materia de sustentabilidad, seguridad hídrica, energías renovables, contaminación del aire y del agua.

Consolidar una academia de adsorción impulsando el diálogo científico y la colaboración a través de encuentros, congresos, talleres y coloquios sobre adsorción, para difundir los avances más representativos en el campo.

[www.adsorcion.com.mx](http://www.adsorcion.com.mx)



@amda\_mex



<https://www.facebook.com/adsorcion>



Asociación Mexicana de Adsorción



Asociación Mexicana de Adsorción

## AGRADECIMIENTOS

La Asociación Mexicana de Adsorción reconoce y agradece el respaldo y compromiso de las siguientes empresas, quienes han apoyado las actividades realizadas para enriquecer e incrementar el alcance de nuestros objetivos.

**Anyover**

<https://anyover.com.mx>



**Anton Paar**

<https://anton-paar.com/es-es/>





## **IMPORTANTE**

La información contenida en las contribuciones incluidas en esta obra es responsabilidad de los autores, por lo que la Asociación Mexicana de Adsorción se deslinda del uso inadecuado de los resultados publicados. La totalidad de los capítulos que forman este libro fueron arbitrados por un comité de especialistas en adsorción con el sistema de simple ciego.

## NOTA PRELIMINAR

El Comité Directivo de la Asociación Mexicana de Adsorción celebra con nuestros socios y patrocinadores el haber logrado en un corto periodo de tiempo grandes resultados, gracias al trabajo decidido y entusiasta de quienes se han adherido a esta comunidad. Desde el comienzo de actividades en la AMDA, hemos sido testigos del compromiso de quienes se han integrado y colaborado activamente en los diferentes eventos realizados, tales como webinarios, Encuentros de Adsorción, conferencias y mesas de análisis con Mujeres Científicas en Adsorción, la Escuela de Verano, y recientemente, el **Primer Foro de Adsorción en México**.

El Primer Foro de Adsorción en México es un evento que se planificó para fomentar la participación de estudiantes, constituye un semillero para el desarrollo de los jóvenes que están iniciando en este fascinante mundo de la investigación. Este libro titulado “**Avances en Adsorción y Fenómenos de Superficie**”, está integrado por 29 contribuciones, 13 de ellas sobre adsorbentes carbonosos y 16 sobre otros materiales adsorbentes, que en conjunto se presentaron en dos modalidades, 17 en cartel y 12 en presentaciones orales. Sin duda, este foro fue un ejercicio valioso para impulsar el desarrollo de las habilidades de comunicación de los estudiantes, probables futuros investigadores en este campo. Sobre el lugar de origen de los autores y coautores participantes, principalmente se contó con investigadores de México, pero también de Sudamérica, Europa y Estados Unidos, lo que refleja la colaboración que se ha cultivado entre los diferentes grupos de investigación en este campo. Algunas de las instituciones de adscripción de los participantes en este Primer Foro de Adsorción, son la Universidad Autónoma de San Luis Potosí, Universidad Autónoma de Coahuila, Universidad Autónoma de Nuevo León, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Instituto Tecnológico de Aguascalientes, Instituto Tecnológico de Toluca, Instituto Tecnológico de Estudios Superiores de Monterrey, Universidad Nacional de Colombia, Universidad Nacional de San Luis, Universidad de Granada, Universidad de las Islas Baleares, Sapienza University de Rome, entre otras.

Consideramos que este libro presenta una muestra de la investigación de calidad que se realiza en la comunidad latina con el impulso decidido de distinguidos científicos. Esto es solo el principio y los invitamos para continuar participando con el mismo entusiasmo, con el firme objetivo de impulsar el crecimiento de quienes participan y cultivan este fascinante campo de investigación.

**Consejo Directivo de la AMDA**

## PRESENTACIÓN

La adsorción está presente en el quehacer del ingeniero, la observamos en fenómenos cotidianos como la acumulación de vapor en el espejo durante la ducha, hasta aplicaciones industriales de separación y refinación de gases y líquidos. Las aplicaciones y beneficios de la adsorción son tan grandes y variadas que hoy en día son objeto de materias especializadas y múltiples investigaciones, manteniendo su vigencia y desarrollo continuo. Su aplicación es tan viable y factible que es posible llevarse a cabo en pequeñas comunidades y zonas de escasos recursos económicos, pues solo se necesita un material adsorbente y un contenedor adecuado para obtener sus beneficios. Un ejemplo es la región Bengala, donde ha sido posible salvar la vida de millones de personas eliminando el arsénico de sus fuentes de agua por medio de la adsorción.

Recordemos que hace más de 120 años se desarrolló la ecuación de BET, hoy imprescindible para la caracterización de sólidos porosos; pero además, el panorama actual es mucho más emocionante por el nacimiento y desarrollo de nuevas ciencias y tecnologías, como la nanotecnología, la biotecnología y la industria 4.0, que están coadyuvando el desarrollo de esta ciencia tan fascinante. Hoy en día es posible deleitarse con los trabajos de investigación relacionados con el desarrollo y estudio de materiales nanoestructurados que pueden adsorber, sorber y degradar moléculas contaminantes recalcitrantes complicadas de degradar por metodologías tradicionales. Los esfuerzos relacionados con la comprensión y uso de biomasa residual y natural han permitido desarrollar y sintetizar biosorbentes para tratar efluentes industriales, algo que hubiera parecido imposible en otros tiempos, ahora es posible de manera práctica y sostenible. Por otro lado, las barreras convencionales de lo que se considera un adsorbente, se están ampliando, con materiales que tienen decenas de miles de metros cuadrados por unidad de masa, como los armazones organometálicos que prometen hacer contribuciones únicas en la catálisis, captura de gases y almacenamiento de energía. El acelerado desarrollo de la biotecnología ha permitido entender los fenómenos interfaciales de biomoléculas, permitiendo reproducir sintéticamente procesos de coordinación y ensamble molecular que sin los conocimientos interfaciales serían incomprensibles. Cuando se considera que uno de los sistemas más difundidos para el abatimiento del calentamiento global, se basan en la adsorción y captura de bióxido de carbono y metano, se puede comprender el rol vital de la adsorción.

Actualmente, las aplicaciones de la adsorción van más allá de la caja negra de efluente sobre material poroso. La correcta adsorción de componentes inhibidores del transporte de carga puede llevar al desarrollo de baterías avanzadas como el caso de los polisulfuros en baterías de litio-azufre, mientras que el desarrollo de puntos cuánticos está ayudando a desarrollar sistemas eficientes de fotoemisión de luz con propiedades bactericidas. Por otro lado, las

nuevas herramientas de inteligencia artificial han permitido que, de manera exponencial, incrementemos nuestra capacidad para entender fenómenos interfaciales, mientras que el entrenamiento de redes neuronales puede describir con mayor precisión todos los parámetros de ingeniería que influyen en la operación de separación.

En fin, las nuevas aplicaciones aparecen y se refuerzan día a día, siempre encaminadas al beneficio de la sociedad. Afortunadamente, en México se ha logrado desarrollar una importante academia y tecnología de procesos basados en la adsorción para múltiples aplicaciones, con el nacimiento de la Asociación Mexicana de Adsorción, se busca orientar estos esfuerzos en favor de una sociedad mexicana sostenible. Por favor acompáñeme a revisar los trabajos más importantes llevados a cabo en México durante el 2021 por los miembros de la AMDA y que se compilan en esta obra. Estoy seguro de que su lectura les ayudará a establecer nuevas ideas y colaboraciones para reforzar su investigación o tecnología.

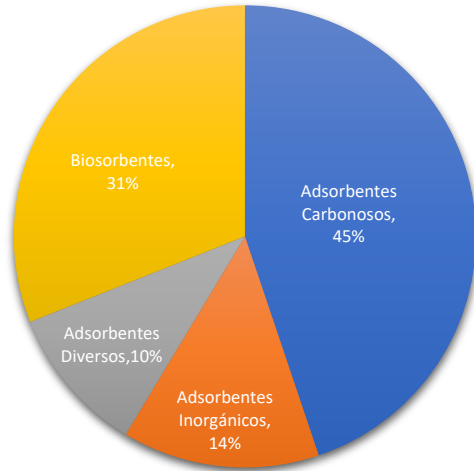


**Dr. Javier Antonio Arcibar Orozco**  
*Vicepresidente de la AMDA*

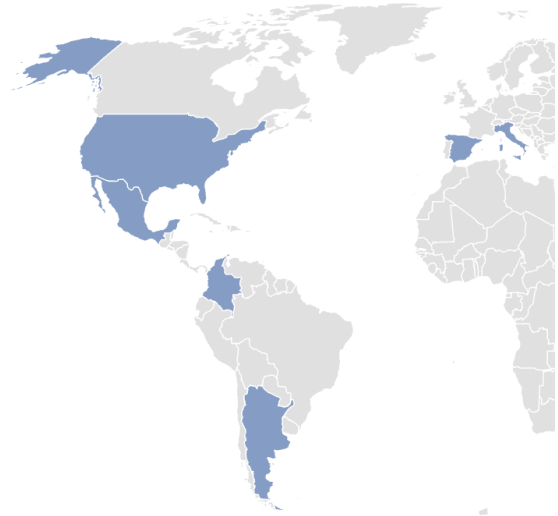


# NUMERALIA

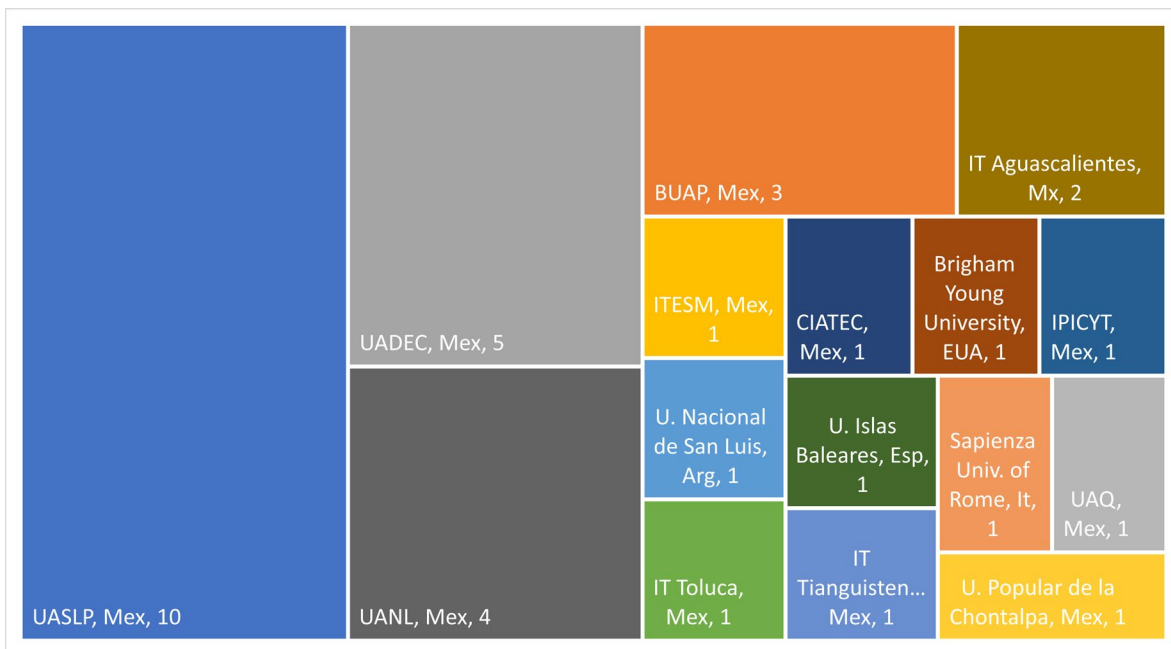
Contribuciones por área temática



País de origen de las contribuciones



Contribuciones por institución





## CIENTÍFICOS RECONOCIDOS POR SU CONTRIBUCIÓN EN ADSORCIÓN



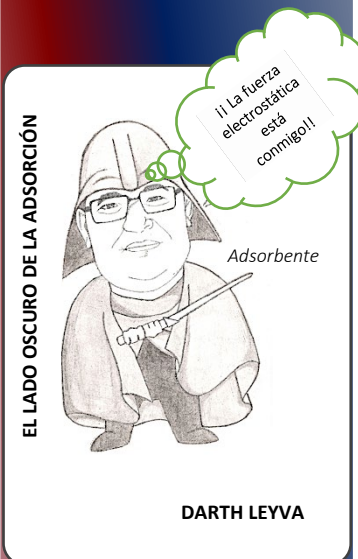
### **Dr. Roberto Leyva Ramos**

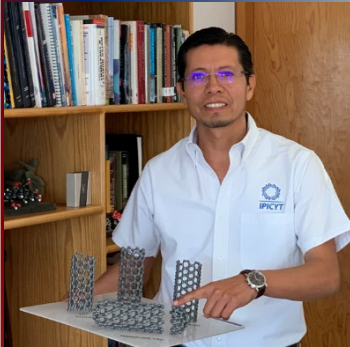
*Universidad Autónoma de San Luis Potosí  
San Luis Potosí, México*

*La palabra adsorción está grabada en mi mente y mi corazón ya que he estado realizando estudios de adsorción desde hace 45 años. Mi tesis doctoral fue sobre difusión superficial de varios compuestos orgánicos en solución acuosa durante la adsorción sobre carbón activado.*

*He trabajado con muchos y muy diversos materiales carbonosos tales como carbón activado granular y en polvo, fibras de carbón activado, óxido de grafito, grafito de elevada área específica, nanotubos de carbono, xerogeles y xerogeles de carbono. Además, he investigado la adsorción sobre arcillas, organoarcillas, zeolitas naturales, carbonizado de hueso, alúmina activada, hidróxido doble laminar (HDL) y SBA-15. También, he desarrollado adsorbentes verdes a partir de olote de maíz, aserrín de madera de pino, lirio acuático y bagazo de caña de azúcar. Cada tema, ha representado un reto personal para entender mejor el proceso de adsorción y elucidar los diferentes mecanismos de adsorción y transporte de masa.*

*Las publicaciones son importantes en mi trayectoria científica, pero lo más importante de mi trabajo es la formación de futuros investigadores y profesionistas y personas de bien. Siempre he considerado que al lado de un investigador exitoso están un grupo de discípulos dedicados, brillantes y felices de estar colaborando. Brillo con la brillantez y trabajo de mis discípulos.*





**Dr. José René Rangel Méndez**

*Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica, AC., (IPICYT)  
San Luis Potosí, México*

*“El fenómeno de adsorción, no absorción, pero parte inicial de esta e ingrediente del proceso de sorción, muy sencillo de definir, pero muy complejo de demostrar.”*

*El proceso de adsorción se consideraba algo esotérico en el siglo XIX, y sigue siendo algo misterioso para los neófitos de esta ciencia, por lo cual seguirá siendo atractivo para los amantes de lo desconocido. Mi introducción a esta fascinante área del conocimiento ocurrió en los años 90, y la curiosidad y ganas por seguir aprendiendo me llevó a continuar mis estudios en Inglaterra y Estados Unidos de América.*

*Finalmente, me traje de regreso a casa en el año 2004. Desde entonces, la adsorción ha sido mi inspiración, alegría y motor que mueve mi actividad académica, emoción que he tratado de transmitir a los 40 estudiantes de posgrado que he graduado hasta estos días. Varios de ellos ya todos unos investigadores en diversas instituciones nacionales e internacionales, lo cual me llena de orgullo y alegría.*

*Debemos considerar que el proceso de adsorción es parte fundamental de muchas áreas del conocimiento, lo cual nos da la gran oportunidad de profundizar, innovar y colaborar, sin necesidad de repetir lo que se hace y ha hecho en el pasado, pues es pérdida de tiempo, dinero y talento.*



**Dr. Juan Carlos Moreno Piraján**

*Universidad de los Andes*

*Bogotá, Colombia*

*La adsorción me ha permitido poder devolver a la sociedad algo de lo que he aprendido. Hacer adsorción es aplicar esta sencilla palabra para referirnos a una de las áreas de investigación más fascinantes. Su influencia comprende diversas disciplinas tales como medicina, farmacia, ingeniería, por mencionar algunas.*

*Quienes trabajamos haciendo investigación en adsorción, recordamos el impacto de ésta durante la pandemia por Covid-19. En este corto periodo, hemos visto un decidido impulso a la investigación y desarrollo de materiales muy útiles, en los que la adsorción ha jugado un papel preponderante. Un ejemplo es el desarrollo de adsorbentes que contienen medicamentos y que funcionan mediante el mecanismo de “entrega controlada”. Este es un aspecto que muestra la importancia de los fenómenos de superficie en la solución de problemas actuales.*

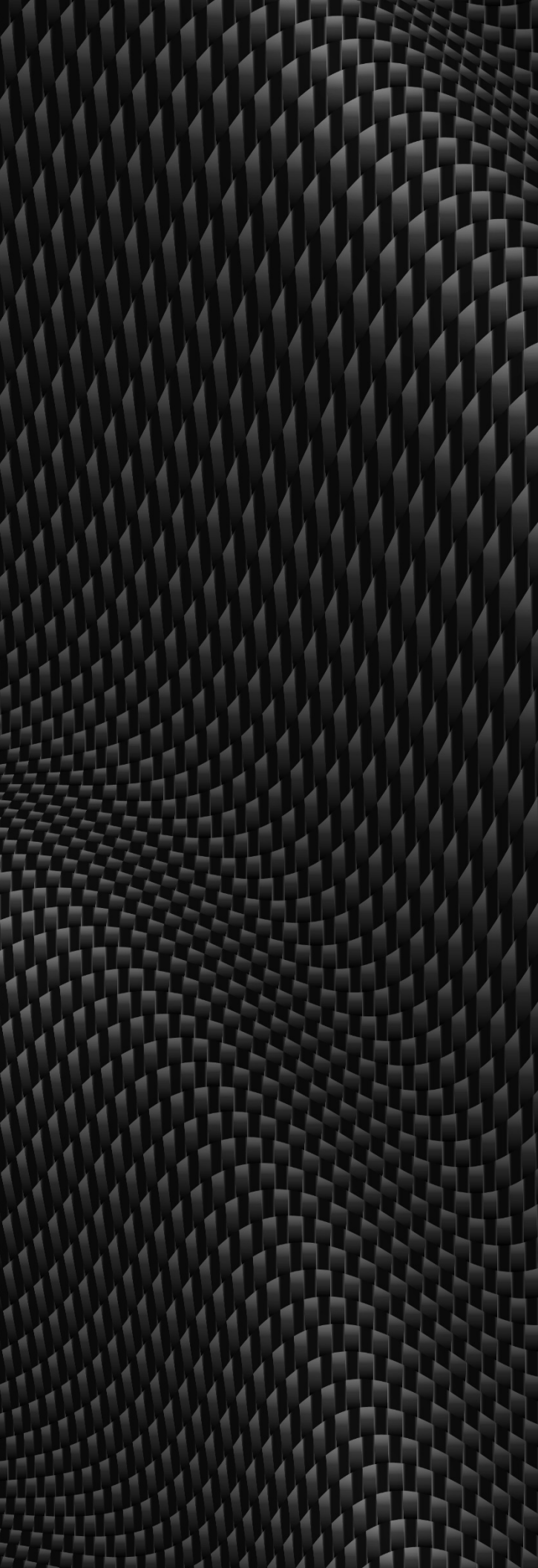
*Es apasionante trabajar en lo que nos gusta y que aporta a nuestra sociedad.*

# ÍNDICE

<b>NOTA PRELIMINAR</b>	<b>I</b>
<b>PRESENTACIÓN</b>	<b>II</b>
<b>NUMERALIA</b>	<b>IV</b>
<b>CIENTÍFICOS RECONOCIDOS POR SU CONTRIBUCIÓN EN ADSORCIÓN</b>	<b>V</b>
<b>CAPÍTULO I. MATERIALES CARBONOSOS</b>	<b>1</b>
NANOTUBOS DE CARBONO EN LA ADSORCIÓN DE DIVERSOS CONTAMINANTES <i>B. A. Ávila Camacho<sup>1</sup>, N. A. Rangel Vázquez<sup>1</sup></i>	2
APLICACIÓN DE CARBÓN ACTIVADO PROVENIENTE DE RESIDUOS ORGÁNICOS PARA EL TRATAMIENTO DE AGUAS CONTAMINADAS CON COLORANTES <i>G. Pérez Osorio<sup>1</sup>, I. Macías Juárez<sup>1</sup>, J.E.M. Gutiérrez Arias<sup>2</sup>, A. Sampieri Croda<sup>1</sup>, J. Arriola Morales<sup>1</sup></i>	5
EQUILIBRIO Y CINÉTICA DE ADSORCIÓN DE METALES PESADOS EN SOLUCIÓN ACUOSA SOBRE FIBRA DE CARBÓN ACTIVADO <i>G. D. Valdez García<sup>1</sup>, R. Leyva Ramos<sup>1</sup></i>	8
EQUILIBRIO DE ADSORCIÓN INDIVIDUAL Y SIMULTÁNEA DE LOS FÁRMACOS, SULFAMETOXAZOL–DICLOFENACO EN SOLUCIÓN ACUOSA SOBRE ÓXIDO GRAFÍTICO <i>B.A. Jiménez López<sup>1</sup>, R. Leyva Ramos<sup>1</sup>, A. Juárez Martínez<sup>1</sup>, D.H. Carrales Alvarado<sup>2</sup></i>	11
OBTENCIÓN Y APLICACIÓN DEL CARBÓN DERIVADO DE MIL-101(Fe) EN LA ADSORCIÓN DE ANTIINFLAMATORIOS <i>G. Peña-Velasco<sup>1</sup>, L. Hinojosa-Reyes<sup>1</sup>, C. Palomino-Cabello<sup>2</sup>, G. Turnes-Palomino<sup>2</sup>, L. Sandoval Rangel<sup>3</sup>, J.L. Guzmán-Mar<sup>1</sup>.</i>	14
MATERIALES NANOPOROSOS DE CARBÓN COMO PORTADORES EN LA ADSORCIÓN Y LIBERACIÓN CONTROLADA DE CEFALEXINA <i>K. Montiel-Centeno<sup>1</sup>, D. Barrera*, K. Sapag<sup>1</sup></i>	17
ADSORCIÓN MULTICOMPONENTE DE FÁRMACOS DE PREOCUPACIÓN EMERGENTE <i>E. García-Díaz<sup>1</sup>, G. Cavazos-Juárez<sup>1</sup>, M.P. Elizalde-González<sup>1</sup></i>	20
ADSORCIÓN DE EMISIONES DE GASOLINA EN NANOTUBOS DE CARBONO SINTETIZADOS SOBRE UN BIOCHAR MACROPOROSO <i>J. J. Gutiérrez-Martínez<sup>1</sup>, J. R. Rangel-Méndez<sup>1</sup></i>	23

CARACTERIZACIÓN FÍSICOQUÍMICA Y TRANSFORMACIÓN HIDROTÉRMICA DE <i>BYRSONIMA CASSIFOLIA</i> Y SU APLICACIÓN EN LA REMOCIÓN DE METFORMINA DEL AGUA	26
<i>J.M. Sánchez Silva<sup>1</sup>, R. Ocampo Pérez<sup>1</sup>, E. Padilla Ortega<sup>1</sup>, N. A. Medellín Castillo<sup>2</sup>, V. H. Collins Martínez<sup>3</sup></i>	
CARBÓN ACTIVADO OBTENIDO DEL RESIDUO AGROINDUSTRIAL DE JAMAICA	29
<i>G. Cavazos-Juárez<sup>1</sup>, E. García-Díaz<sup>1</sup>, M.P. Elizalde-González<sup>1</sup></i>	
TRATAMIENTO DE UN CARBÓN ACTIVADO CON PLASMA FRÍO	32
<i>P.R. Aldaba Lucio<sup>1</sup>, N.V. Pérez Aguilar<sup>1</sup>, R.I. Narro Céspedes<sup>1</sup>, E. Oyervides Muñoz<sup>1</sup></i>	
ELUCIDACIÓN DE LOS MECANISMOS FÍSICOQUÍMICOS PRESENTES EN LA REMOCIÓN DE CLORFENAMINA Y CIPROFLOXACINO SOBRE CARBONES ACTIVADOS	35
<i>J.J. Salazar Rábago<sup>1</sup>, L.A. Cavazos Cuello<sup>1</sup>, C.B. García Reyes<sup>1</sup>, R. Ocampo Pérez<sup>2</sup>, N.E. Dávila Guzmán<sup>1</sup></i>	
OXIDACIÓN DE CARBÓN ACTIVADO CON PLASMA PARA INCREMENTAR SU CAPACIDAD DE ADSORCIÓN	37
<i>M.N. Elías Zuñiga<sup>1</sup>, N.V. Pérez Aguilar<sup>1*</sup>, E. Oyervides Muñoz<sup>1</sup>, M.A. García Lobato<sup>1</sup>, R.I. Narro Céspedes<sup>1</sup></i>	
<b>CAPÍTULO II. MATERIALES DIVERSOS</b>	<b>40</b>
MODIFICACIÓN DE UNA BENTONITA CON NANOPARTÍCULAS DE Fe-Cu PARA LA REMOCIÓN DE VERDE MALAQUITA EN SOLUCIÓN ACUOSA	41
<i>A. Blanco Flores<sup>1</sup>, H. P. Toledo Jaldin<sup>1</sup>, D. M. Ávila Márquez<sup>2</sup></i>	
ADSORCIÓN DE DICLOFENACO, SULFAMETOXAZOL, TRIMETOPRIMA Y CLORFENAMINA EN SOLUCIÓN ACUOSA SOBRE BENTONITA NATURAL Y ORGANOBENTONITA. EFECTO DE LA NATURALEZA SUPERFICIAL Y LAS PROPIEDADES FÍSICOQUÍMICAS	44
<i>U. Ortiz Ramos<sup>1</sup>, R. Leyva Ramos<sup>1</sup>, E. Mendoza Mendoza<sup>2</sup></i>	
SÍNTESIS DE NANOCOMPUESTOS BASADOS EN OXIYODURO DE BISMUTO (BIOI) EMPLEADOS EN LA ADSORCIÓN DE COMPUESTOS ORGÁNICOS EN SOLUCIÓN ACUOSA	47
<i>C. Flores Cardona<sup>1</sup>, R. Leyva Ramos<sup>1</sup>, E. Mendoza Mendoza<sup>1, 2, 3</sup></i>	
SÍNTESIS DE ARMAZONES ORGANOMETÁLICOS, SU POTENCIAL APLICACIÓN EN PROCESOS DE ADSORCIÓN DE ALCOHOLES	51
<i>N. Tiempos-Flores<sup>1</sup>, A.A. Rico-Barragán<sup>1</sup>, M. Loredó-Cancino<sup>1</sup>, J.J. Salazar-Rabago<sup>1</sup>, E. Hernández-Fernández<sup>1</sup>, O. Arillo Flores<sup>2</sup>, D.J. Michaelis<sup>3</sup>, N.E. Davila-Guzman<sup>1*</sup></i>	
APLICACIÓN DE RESIDUOS DE PET PARA LA SÍNTESIS DEL MIL-101 (Cr) COMO POSIBLE ADSORBENTE DE COV	53
<i>A.A. Rico Barragán<sup>1</sup>, N. Tiempos Flores<sup>*</sup>, M. Loredó Cancino<sup>*</sup>, J.J. Salazar Rábago<sup>*</sup>, J.A. Arcibar Orozco<sup>**</sup>, N.E. Dávila Guzmán<sup>*</sup></i>	
USO DE CARBONIZADO DE HUESO DE PEZ PLECO SINTETIZADO EN UN HORNO RURAL PARA LA REMOCIÓN DE FLUORURO Y AS EN AGUA	56
<i>S.A. Cruz-Briano<sup>1</sup>, N.A. Medellín-Castillo<sup>1,2</sup>, P. Delgado-Sánchez<sup>3</sup>, G.J. Castro-Larragoitia<sup>1</sup></i>	
ADSORCIÓN DE CADMIO (II) EN SOLUCIÓN ACUOSA SOBRE HIDROCARBONIZADO DE LIRIO ACUÁTICO SIN Y CON MODIFICACIÓN CON ÁCIDO CÍTRICO	59
<i>C. Vázquez Mendoza<sup>1</sup>, R. Leyva Ramos<sup>1*</sup>, N. A. Medellín Castillo<sup>2</sup>, A. Juárez Martínez<sup>1</sup></i>	
INMOVILIZACIÓN DE <i>P. STUTZERI</i> SOBRE CARBONES ACTIVADOS PARA LA DEGRADACIÓN DE HIDROCARBUROS PROVENIENTES DE EMULSIONES DE ACEITE EN AGUA SALADA	62
<i>K. Zapata<sup>1</sup>, B. Rojano<sup>2</sup>, C. Franco<sup>1</sup>, F. Carrasco<sup>3</sup>, F. Cortes<sup>1</sup></i>	

REMOCIÓN DE As(V) DE SOLUCIONES ACUOSAS MEDIANTE ADSORCIÓN SOBRE RESIDUOS AGROALIMENTICIOS Y SUBPRODUCTOS INDUSTRIALES RECUPERADOS	63
<i>M. S. Patterer<sup>1*</sup>, F. Medici<sup>1*</sup>, M.A. Peluso<sup>2</sup>, J.E. Sambeth<sup>2</sup></i>	
VALORIZACIÓN DE LOS RESIDUOS DE PIÑA ( <i>ANANAS COMUSUS L.</i> ) COMO BIOADSORBENTE DE METALES	66
<i>C. Valerio Cárdenas<sup>1</sup></i>	
SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE FIBRAS DE AGAVE FUNCIONALIZADAS PARA SU USO EN LA REMOCIÓN DE Cu(II) PRESENTE EN SOLUCIÓN ACUOSA	69
<i>S. M. García-Hernández<sup>1</sup>, W. M. Warren-Vega<sup>1</sup>, A. I. Zárate-Guzmán<sup>1,2</sup>, V. H. Collins-Martínez<sup>3</sup>, R. Ocampo-Pérez<sup>2</sup>, L. A. Romero-Cano<sup>1</sup></i>	
CATÁFILAS EXTERNAS DE <i>ALLIUM SATIVUM L.</i> COMO ADSORBENTE NATURAL PARA LA REMOCIÓN DE PLOMO EN AGUA UTILIZANDO UN SISTEMA FIA	72
<i>A.M. Lara Sánchez<sup>1</sup>, T.J. Ulloa Cerda<sup>1</sup>, M.S. Florencio Martínez<sup>1</sup>, I.M. de la Garza Rodríguez<sup>1</sup>, E.M. Colunga Urbina<sup>1</sup></i>	
EVALUACIÓN PRELIMINAR DE LA CÁSCARA DE NUEZ PECANERA COMO ADSORBENTE NATURAL DE CADMIO UTILIZANDO UN SISTEMA FIA	75
<i>L.E. González Rodríguez<sup>1</sup>, M.S. Florencio Martínez<sup>1</sup>, T.J. Ulloa Cerda<sup>1</sup>, E.M. Colunga Urbina<sup>1</sup>, I.M. de la Garza Rodríguez<sup>1</sup></i>	
MODELADO DE LA ISOTERMA DE ADSORCIÓN DEL COLORANTE ROJO ÁCIDO 27 POR PERIDERMIS DEL TUBÉRCULO DE JÍCAMA, <i>PACHYRHIZUS EROSUS (L.)</i> URB.	77
<i>D.A. Cruz-Reyes<sup>1</sup>, M.G. Castillo-Arenas<sup>1</sup>, P. Rodríguez-Cuamatzi<sup>1</sup>, J. García-Dávila<sup>1</sup>, L.A. Santiago-Santiago<sup>1</sup>, A.R. Netzahuatl-Muñoz<sup>1</sup></i>	
MODELAMIENTO DE LA BIOSORCIÓN DE CONTAMINANTES EN EL AGUA CON <i>SPIRULINA MAXIMA</i>	80
<i>J.E. Hernández Leos<sup>1</sup>, N.V. Pérez Aguilar<sup>1</sup>, M.I.L. Gallegos García<sup>1</sup>, S.A. Cruz Briano<sup>2</sup>, N.A. Medellín Castillo<sup>2</sup></i>	
PREDICCIÓN DE LA ADSORCIÓN DE COLORANTES SINTÉTICOS DE SOLUCIONES ACUOSAS UTILIZANDO EL MODELADO DE REDES NEURONALES ARTIFICIALES.	82
<i>A. Díaz Rivera<sup>1</sup>, J. C. Estrada Moreno<sup>1</sup>, R. E. Zavala Arce<sup>*1</sup>, J. L. García Rivas<sup>1</sup>, N. A. Rangel Vázquez<sup>2</sup>, M. L. Jiménez Núñez<sup>1</sup></i>	
<b>ÍNDICE DE AUTORES</b>	<b>85</b>



**CAPÍTULO I.  
MATERIALES  
CARBONOSOS**



## Nanotubos de carbono en la adsorción de diversos contaminantes

B. A. Ávila Camacho<sup>1</sup>, N. A. Rangel Vázquez<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Instituto Tecnológico de Aguascalientes, Av. Adolfo López Mateos 1801, Aguascalientes, 20256, México

**Palabras Clave:** Adsorción, Nanotubos de Carbono, Metales Pesados

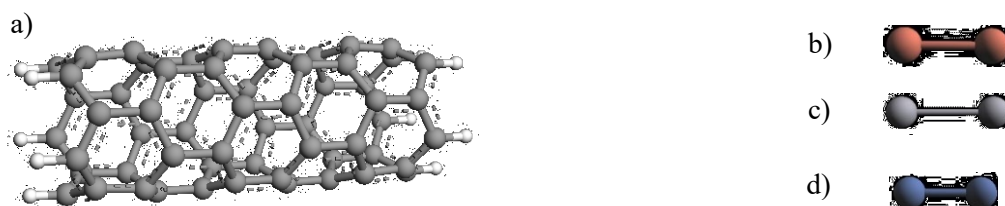
La contaminación del agua por metales pesados ha ido en constante aumento debido al incremento en las actividades mineras, en las industrias metalúrgicas y en la agricultura [1], por lo que se ha convertido en motivo de preocupación por la sociedad en general, debido a la alta toxicidad que estos presentan aún en bajas concentraciones [2]. Algunos de estos contaminantes incluyen mercurio (Hg), cobre (Cu), níquel (Ni), plomo (Pb), zinc (Zn), cadmio (Cd), cromo (Cr), entre otros. Existen diversos métodos que se utilizan para remover los metales pesados del agua [3]. La adsorción, es el más empleado, debido a que ya se ha comprobado su efectividad para la remoción de los metales pesados del agua, además de que los materiales que se emplean para la remoción (adsorbentes) pueden obtenerse y sintetizarse con un bajo costo económico [4].

En este sentido, los nanotubos de carbono (NTC) son materiales relativamente nuevos en la remoción de contaminantes del agua. [5]. El proceso de adsorción es considerado como un sistema no lineal, por lo que es importante modelarlo con las herramientas adecuadas para una correcta predicción de los posibles mecanismos de adsorción, las redes neuronales artificiales son un ejemplo de herramientas de modelado, ya que se utilizan para identificar y modelar dinámicamente sistemas no lineales [6]. El principal objetivo de este trabajo es obtener y modelar las propiedades termodinámicas del nanotubo de carbono y los metales Ni, Cu y Hg, así como analizar y modelar el proceso de adsorción de los iones metálicos en sistemas mono y multicomponente. Se empleó el software ArgusLab® para obtener las energías del nanotubo y los metales individual y simultáneamente empleando el método de Hückel extendido (EHT), por otro lado, también se obtuvieron los parámetros QSAR (del idioma inglés *Quantitative structure-activity relationship*), que se presentan en la Tabla 1.

El análisis de los datos indicó, por una parte, que el proceso de adsorción es espontáneo, ya que las energías tienen valores negativos; además, el resultado de Log P de 11.41 para el nanotubo nos indicó que este material tiene carácter hidrofóbico, es decir, nula dispersión en el agua. En la Figura 1 se muestra la simulación del NTC y los iones metálicos en el programa de ArgusLab®.

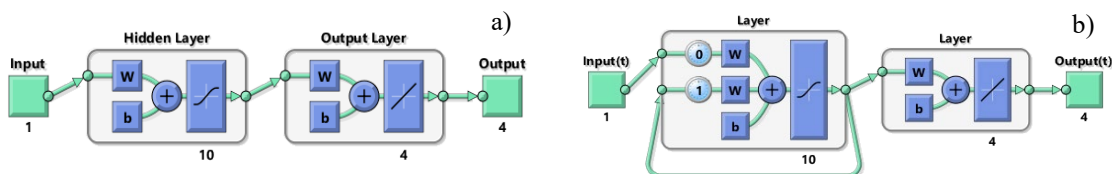
**Tabla 1.** Propiedades termodinámicas y parámetros QSAR de los sistemas NTC-metal

Sistema	Energía kcal/mol	Polarizabilidad (Å)	Área de superficie (Å)	Volumen (Å)	Log10
NTC	-90365.80	112.19	638.18	1357.08	11.41
Cu	-497.66	0.10	91.91	73.66	0
Hg	-6945.09	1.20	178.97	103.49	0
Ni	-4613-30	0.08	83.94	66.11	0
Cu-NTC	-91299.65	112.29	645.35	1367.09	11.41
Hg-NTC	-97355.66	113.99	653.99	1393.11	11.41
Ni-NTC	-95212.00	113.27	639	1359.44	11.41
Cu-Ni-NTC	-96200	113.37	648.09	1374.16	11.41
Hg-Cu-NTC	-98412.00	11.06	659.88	1398.03	11.41
Hg-Ni-NTC	-102165.74	114.09	656.99	1396.44	11.41
Hg-Cu-Ni-NTC	-103286.89	114.16	658.86	1401.01	11.41



**Figura 1.** Simulación del NTC a), Cu b), Hg c) y Ni d).

Para las redes neuronales artificiales se usó la herramienta nntool de Matlab®, se emplearon como targets los parámetros termodinámicos y QSAR previamente obtenidos y como entrada la temperatura, se utilizó una red Feedforward Backprop y una red Elman Backprop con un número variable de neuronas en la capa oculta (3-10) empleando las funciones de activación Tansig y Logsig en la capa oculta y la función purelin en la capa de salida (Figura 2). Se obtuvo un valor de  $R^2 = 0.99$ .



**Figura 2.** Redes neuronales de (a) Feedforward Backprop y (b) Elman Backprop.



En este caso la principal diferencia entre emplear una red u otra radica en las conexiones que se tienen, por ejemplo, en la red Elman se tiene una conexión de retroalimentación que sale de la salida de la capa oculta hacia la entrada de esta misma capa permitiendo generar y detectar patrones variantes en el tiempo, caso que no se ve en la red Feedforward, donde toda la información avanza hacia adelante. Sin embargo, esta última red se emplea con mayor frecuencia debido a su simplicidad y eficiencia.

Con base en los datos obtenidos, es posible modelar adecuadamente este sistema con redes neuronales artificiales, para predecir los posibles mecanismos de adsorción que puedan presentarse durante este proceso.

### **Referencias**

1. Fu, F., & Wang, Q. (2011). Removal of heavy metal ions from wastewaters: A review. *Journal Of Environmental Management*, 92, 407-418.
2. Briffa, J., Sinagra, E., & Blundell, R. (2020). Heavy metal pollution in the environment and their toxicological effects on humans. *Heliyon*, 6, 76-91.
3. Almasi, A., Falahati, M., Mohammadi, M., Pirsahab, M., & Mosavi, S. (2018). Removal of heavy metals from wastewater using cost effective method: determining optimal strategic conditions and system modeling using response surface methodology. *Desalination and water treatment*, 111, 247-257.
4. Saxena, Abhishek & Bhardwaj, Manish & Allen, Tanu & Kumar, Satish & Sahney, Rachana. (2017). Adsorption of heavy metals from wastewater using agricultural–industrial wastes as biosorbents. *Water Science*, 31, 189-197.
5. Pirard, S., Douven, S., & Pirard, J. (2017). Large-scale industrial manufacturing of carbon nanotubes in a continuous inclined mobile-bed rotating reactor via the catalytic chemical vapor deposition process. *Frontiers Of Chemical Science And Engineering*, 11, 280-289.
6. Zhang, Z. (2017). Artificial Neural Network. *Multivariate Time Series Analysis In Climate And Environmental Research*, 9, 1-35.

## Aplicación de carbón activado proveniente de residuos orgánicos para el tratamiento de aguas contaminadas con colorantes

G. Pérez Osorio<sup>1</sup>, I. Macías Juárez<sup>1</sup>, J.E.M. Gutiérrez Arias<sup>2</sup>, A. Sampieri Croda<sup>1</sup>, J. Arriola Morales<sup>1</sup>

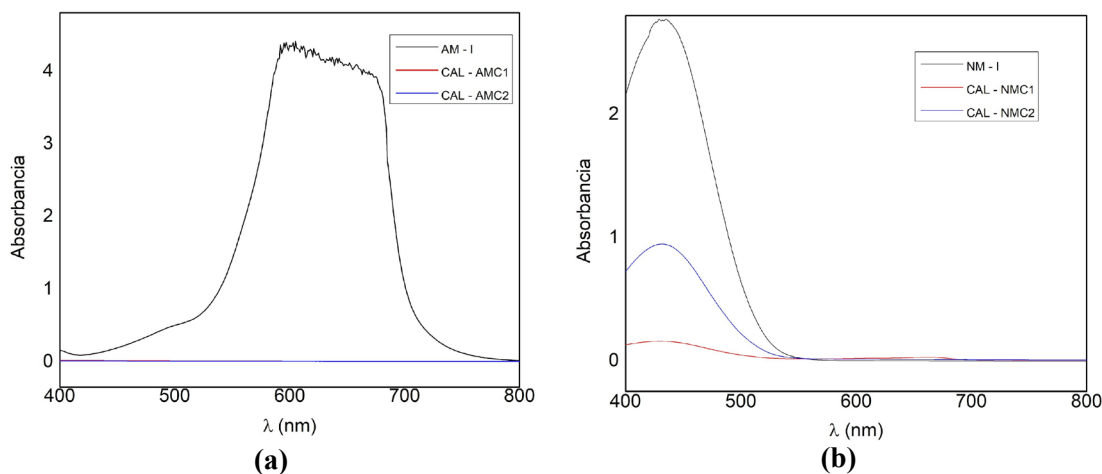
<sup>1</sup> Facultad de Ingeniería Química, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla (BUAP), Av. San Claudio S/N, Ciudad Universitaria, Col. San Manuel, C.P 72570, Puebla, México,

<sup>2</sup> Facultad de Ciencias de la Electrónica, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla (BUAP), Av. San Claudio S/N, Ciudad Universitaria, Col. San Manuel, C.P 72570, Puebla, México.

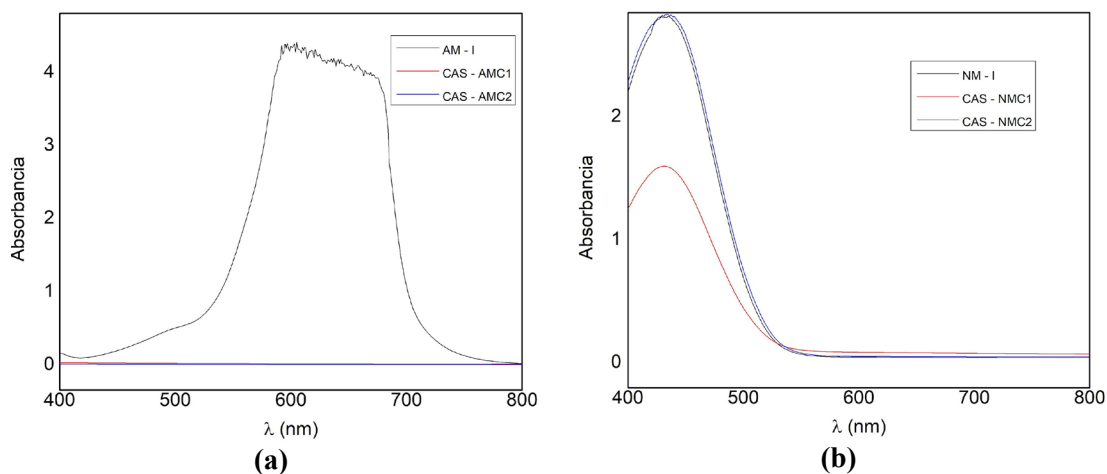
**Palabras Clave:** carbón activado, colorantes, adsorción

Los procesos de teñido de la industria de textiles de los países en desarrollo generan efluentes que difícilmente reciben tratamiento antes de su descarga, se estima que hasta el 90% de éstos se eliminan hacia cuerpos de agua [1]. La contaminación que causan es principalmente, la reducción de la penetración de la luz en el cuerpo de agua y, en consecuencia, alteración de la fotosíntesis [2]. Algunos tratamientos para degradar los colorantes, como el uso de microbios aerobios y anaerobios, coagulación, o filtración, pueden ser muy costosos y ello ha impulsado la búsqueda de otras alternativas más eficientes y económicamente atractivas [3]. En este trabajo se estudia la adsorción de carbón activado preparado con cáscara de limón (CAL) y serrín (CAS), para colorantes textiles disueltos en agua.

En las **Figuras 1 y 2** se muestra la disminución para AM  $\lambda=665$  nm [4] y NM  $\lambda=466$  nm [5],[6] que se asocia con la adsorción del colorante por el CAL o CAS. Con respecto al AM, su porcentaje de remoción es arriba de 99% en ambos ciclos de adsorción para CAL y CAS. Para el NM su porcentaje de remoción es del 94.3% en su primer ciclo y de 65.92% en su segundo ciclo utilizando CAL, mientras que, su porcentaje de remoción usando CAS es de 44.11% en su primer ciclo y de 0.16% en su segundo ciclo de adsorción.

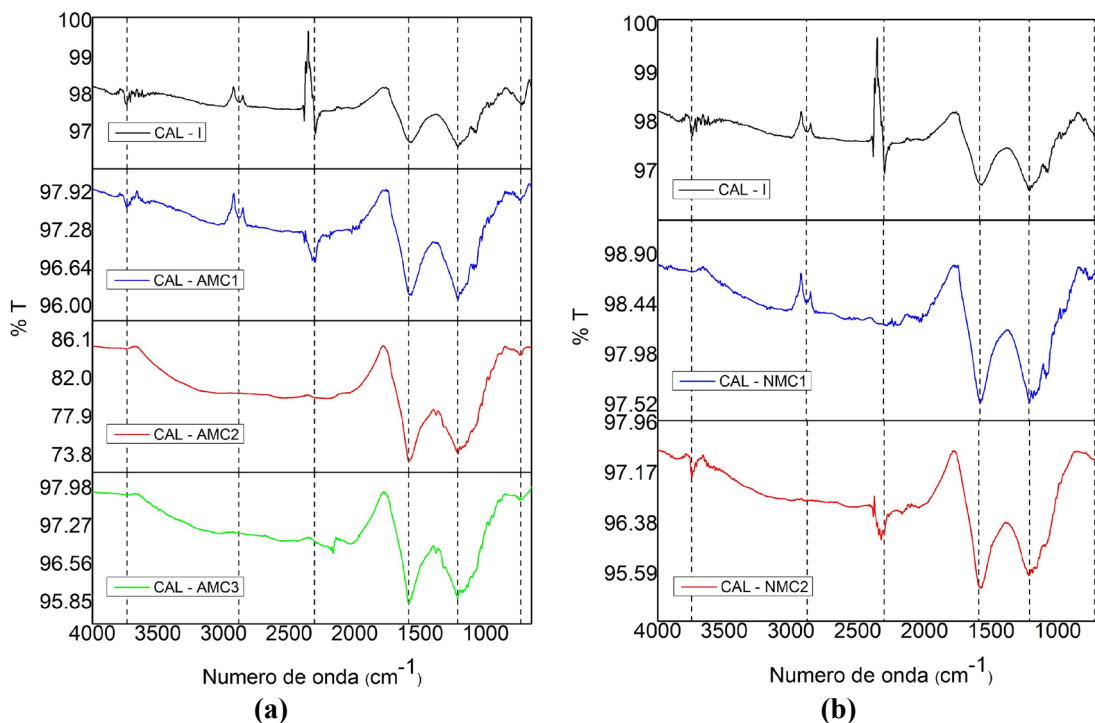


**Figura 1.** Espectros UV-Vis de la adsorción de: (a) AM por CAL, y (b) NM por CAL.



**Figura 2.** Espectros UV-Vis de la adsorción de: (a) AM por CAS, y (b) NM por CAS.

En las **Figuras 3 y 4** se observaron los resultados de los espectros FT-IR, donde la banda a  $3500\text{ cm}^{-1}$  podría indicar grupos -OH; la banda a  $2300\text{ cm}^{-1}$  podría corresponder a vibraciones de  $\text{CO}_2$ ; la banda a  $1500\text{ cm}^{-1}$  podría corresponder a vibraciones del grupo  $\text{C}=\text{C}$ ; la banda  $1613\text{ cm}^{-1}$  podría corresponder al grupo  $\text{C}=\text{O}$ ;  $1200\text{ cm}^{-1}$  podría corresponder a grupos con P, ya que su presencia puede deberse al uso del  $\text{H}_3\text{PO}_4$  como agente activante.



**Figura 3.** Espectros FT-IR de: (a) AM por CAL, y (b) NM por CAL.

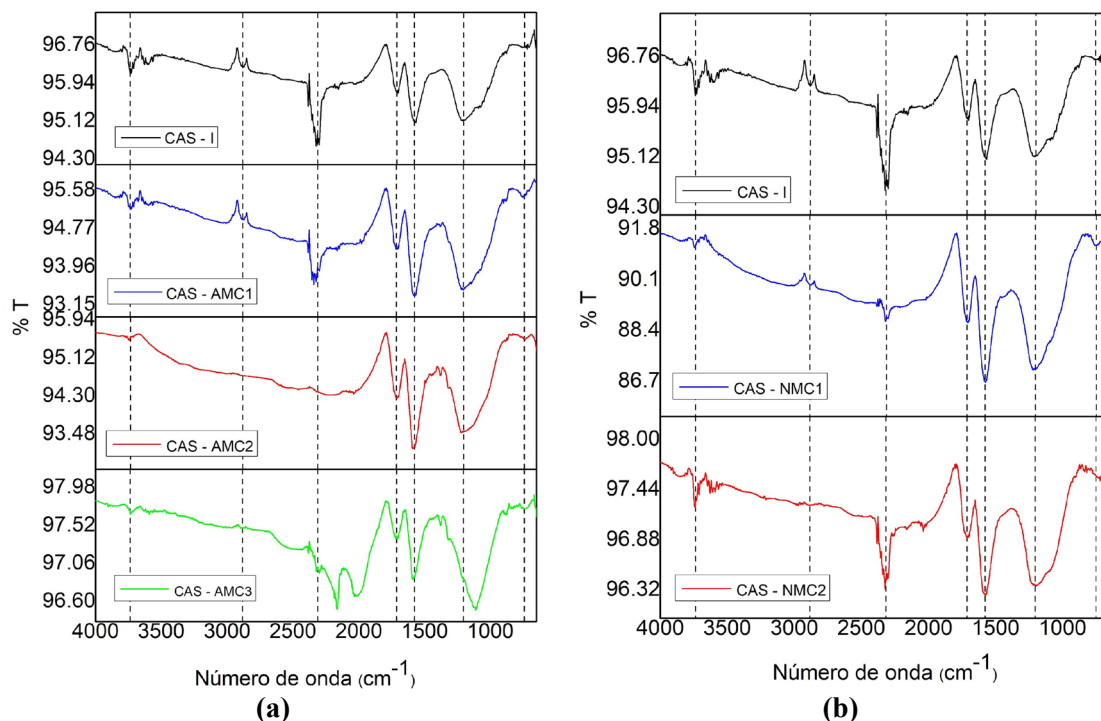


Figura 4. Espectros FT-IR de: (a) AM por CAS, y (b) NM por CAS.

Se concluye que el CAL y CAS mostraron un alto rendimiento de remoción para AM, el comportamiento se debe a una alta presencia de sitios activos que favorecen la adsorción para dicho colorante. La reducción en la disponibilidad de sitios activos disminuye, determina una mayor competencia de las moléculas del colorante, quedando moléculas en la disolución. Como fue el caso del NM, que muestra menor porcentaje de remoción desde el primer ciclo de adsorción, en comparación con AM. El uso del FT-IR permite caracterizar el CA y no registra diferencias significativas después del uso de CAL y CAS posterior a las pruebas de adsorción.

## Referencias

- Zaruma, P. E., Proal, J. B., Chaires, I. & Salas, H. I. (2018). Los colorantes textiles industriales y tratamientos óptimos de sus efluentes de agua residual: una breve revisión. *Revista de la Facultad de Ciencias Químicas*, ISSN: 1390-1869(19), 38-47.
- Daoud, M., Benturki, O., Girods, P., Donnot, A. & Fontana, S. (2019). Adsorption ability of activated carbons from *Phoenix dactylifera rachis* and *Ziziphus jujube* stones for the removal of commercial dye and the treatment of dyestuff wastewater. *Microchemical Journal*, 148(2019), 493-502.
- Ensuncho, A. E., Robles, J. R. & Carriazo, J. G. (2015). Adsorción del colorante amarillo anaranjado en solución acuosa utilizando carbones activados obtenidos a partir de desechos agrícolas. *Rev Soc Quím Perú*, 81(2), 135-147.
- Rosas, J. M. (2012). Aplicación de residuos agrícolas para el tratamiento de agua contaminada con colorantes. [Tesis de maestría]. Universidad Autónoma de Nuevo León, Monterrey.
- Mandal, S., Tichit, D., Lerner, D. A., Marcotte, N. (2009). Azoic Dye Hosted in Layered Double Hydroxide: Physicochemical Characterization of the Intercalated Materials. *Langmuir Article*, 25(18), 10980-10986.
- Ramírez, L. A., Jacobo, A., & Martínez, J. M. (2015). Adsorción del naranja de metilo en solución acuosa sobre hidróxidos dobles laminares. *Acta Universitaria*, 25(4), 25-34.



## Equilibrio y cinética de adsorción de metales pesados en solución acuosa sobre fibra de carbón activado

G. D. Valdez García<sup>1</sup>, R. Leyva Ramos<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Universidad Autónoma de San Luis Potosí, Facultad de Ciencias Químicas, Centro de Investigación y Estudios de Posgrado, Ave. Dr. Manuel Nava 6, Zona Universitaria, San Luis Potosí S.L.P. México, C.P. 28210.

**Palabras Clave:** Adsorción, Cinética, Metales

La contaminación del agua es un problema que aumenta continuamente y está incrementando la tasa de mortalidad por enfermedades atribuidas al consumo o actividades asociadas al agua contaminada. Específicamente, la contaminación del agua por metales pesados causada por fuentes antropogénicas y naturales está afectando la salud pública. Dependiendo del tipo de metal, los metales pueden causar alteraciones a nivel enzimático, renal, respiratorio y digestivo, entre otros. Uno de los procesos más eficientes para la eliminación de estos contaminantes en solución acuosa es la adsorción, que involucra la acumulación de sustancias en una superficie [1]. Los materiales carbonosos son utilizados ampliamente en la adsorción de metales pesados ya que tienen adecuadas capacidades para adsorber cationes metálicos cuando cuentan con gran cantidad de sitios activos ácidos tales como carboxílicos, fenólicos y lactónicos, en los cuales se adsorben los cationes metálicos. En este estudio se emplea la fibra de carbón activado (FCA) que tiene presentación en forma de tela o fieltro, presenta estructura mayormente microporosa con elevadas áreas específicas y es de carácter ácido. al contar con una mayor concentración de sitios ácidos que básicos. El proceso de adsorción de metales pesados sobre FCA ocurre por fisiorción y quimisorción, las interacciones electrostáticas e intercambio iónico juegan un papel importante en la adsorción.

Un material se considera como adsorbente adecuado o idóneo cuando es económicamente viable, tenga una considerable capacidad de adsorción, sea selectivo por el contaminante de interés, se pueda regenerar y presente velocidades de adsorción altas. El estudio de la cinética de adsorción es importante para determinar la eficiencia de un material adsorbente [2]. Este estudio describe la velocidad o rapidez con que se adsorben los solutos sobre la superficie del material, e identifica los mecanismos de transporte de masa que controlan la velocidad global de adsorción [3]. Por tanto, es importante evaluar la velocidad de adsorción del contaminante para diseñar los sistemas de adsorción. El objetivo de este estudio es estudiar la cinética de adsorción en solución acuosa de Cd (II), Zn (II) y Ni (II) sobre FCA e interpretar los datos experimentales por modelos difusionales.

La velocidad de adsorción se interpreta mediante modelos difusionales, que representan las etapas del transporte de masa que ocurren durante la adsorción [3]. En la primera etapa, el soluto es transportado desde el seno de la solución hasta la superficie externa del adsorbente y se conoce como transporte externo de masa. La segunda etapa es la difusión intraparticular, la cual se puede llevar a cabo por difusión en el volumen de los poros y/o difusión superficial. La última etapa es la adsorción en un sitio activo. En este trabajo, se utilizó el modelo de difusión en el volumen del poro (MDV) que considera que la difusión intraparticular es debida a la difusión en el volumen del poro, que se

representa por el coeficiente de difusión efectivo ( $D_{ep}$ ). El  $D_{ep}$  se calcula empleando la difusividad molecular, fracción hueca del material y factor de tortuosidad ( $\tau$ ). El factor de tortuosidad es un parámetro que representa la longitud de la trayectoria de difusión molecular del soluto dentro de los poros y se ha reportado que el factor de tortuosidad para carbones activados varía en un intervalo de 2 a 6.5.

Los datos experimentales de las curvas de decaimiento correspondientes a la adsorción de Cd(II), Ni(II) y Zn(II) sobre FCA se interpretaron con el modelo MDV en coordenadas cilíndricas. Este modelo supone que la difusión intrafibra del metal ocurre exclusivamente por difusión en el volumen de los poros, excluyendo la difusión superficial. En la Figura 1 se observó que el tiempo requerido para alcanzar el equilibrio de adsorción fueron de alrededor de 45 min.

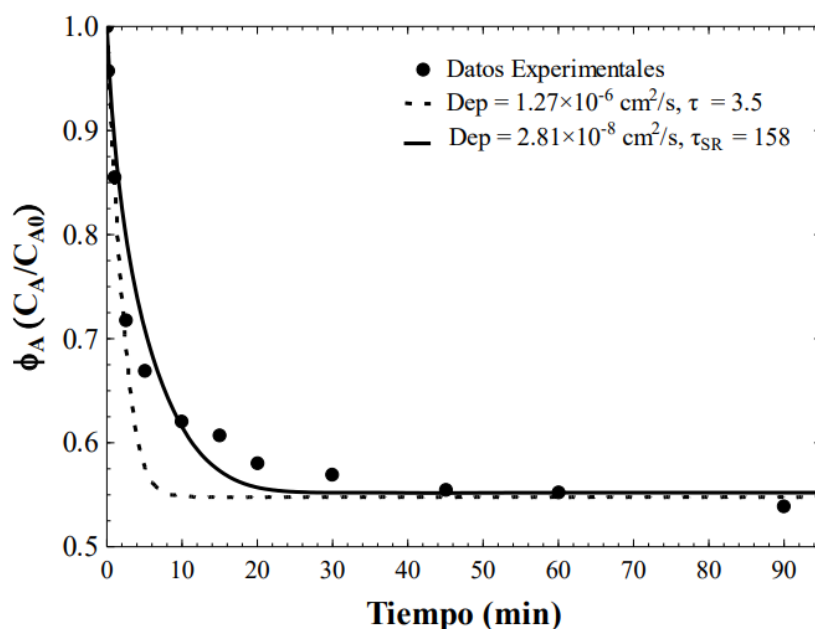


Figura 1. Curva de decaimiento de la concentración de Cd(II) durante el proceso de adsorción sobre FCA.

Por otro lado, el modelo MDV con un valor de  $\tau = 3.5$  sobreestima la caída de concentración o bien la velocidad de adsorción que predice el modelo MDV con  $D_{ep} = 1.27 \times 10^{-6} \text{ cm}^2/\text{s}$  ( $\tau = 3.5$ ) es mucho más rápida que la velocidad de adsorción experimental. Esto se ilustra en la Figura 1 puntualizando que el modelo MDV estima que el equilibrio se alcanza en cerca de 8 min, mientras que los datos experimentales muestran que el equilibrio se alcanzó en 45 min. Es decir que, la velocidad de adsorción de Cd(II) en la FCA es casi 6 veces más lenta que la estimada con el modelo MDV.

Con base en los resultados anteriores, los datos experimentales de la curva de decaimiento de cada experimento se interpretaron con el modelo de MDV, reduciendo el valor de  $D_{ep}$  o incrementando  $\tau$  hasta que el modelo MDV ajustó satisfactoriamente los datos experimentales. Se encontraron valores de  $\tau$  muy elevados para la FCA y una disminución de ( $D_{ep}$ ) óptimo al aumentar  $q_e$ . Este comportamiento indicó que la difusión de los cationes de Cd(II) dentro de los microporos se reduce



umentando la masa del soluto adsorbido ( $q_e$ ). Este efecto se puede atribuir a que los cationes de Cd(II) adsorbidos sobre la superficie de los microporos de la FCA bloquean la difusión o movimiento de los cationes de Cd(II) dentro de los microporos. Estos valores de factor de tortuosidad se corrigieron considerando efectos de difusión restringida [4] (fricción y exclusión) y obstrucción. El factor de tortuosidad corregido determinado para la FCA fue de 2.85, el cual es ligeramente mayor a los reportados en la literatura.

## **Referencias**

1. Cooney, D.O. (1998). Adsorption Design for Wastewater Treatment. Lewis Publishers, Washington, D.C. USA.
2. Aljeboree, A. M., Alshirifi, A. N., Alkaim, A. F. (2017). Kinetics and equilibrium study for the adsorption of textile dyes on coconut shell activated carbon. *Arabian Journal of Chemistry* 10, S3381-S3393.
3. Leyva Ramos, R., C.J. Geankoplis, C.J. (1994). Diffusion in liquid-filled pores of activated carbon i. pore volume diffusion, *Canadian Journal of Chemical Engineering* 72, 262-271.
4. Leyva-Ramos, R. Díaz Flores, P.E., Leyva-Ramos, J., R. A. Femat-Flores, R:A. (2007) Kinetic modeling of pentachlorophenol adsorption from aqueous solution on activated carbon fibers, *Carbon* 45(11), 2280-2289.



## Equilibrio de adsorción individual y simultánea de los fármacos, sulfametoxazol–diclofenaco en solución acuosa sobre óxido grafitico

B.A. Jiménez López<sup>1</sup>, R. Leyva Ramos<sup>1</sup>, A. Juárez Martínez<sup>1</sup>, D.H. Carrales Alvarado<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Centro de Investigación y Estudios de Posgrado, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Autónoma de San Luis Potosí, Av. Dr. M. Nava No. 6, Zona Universitaria, San Luis Potosí, S.L.P., C.P. 78210, México. rlr@uaslp.mx

<sup>2</sup>Instituto de Catálisis y Petroleoquímica, CSIC, C/Marie Curie 2, L10, Madrid, C.P. 28049, España.

**Palabras Clave:** Adsorción binaria, Fármaco, Óxido grafitico

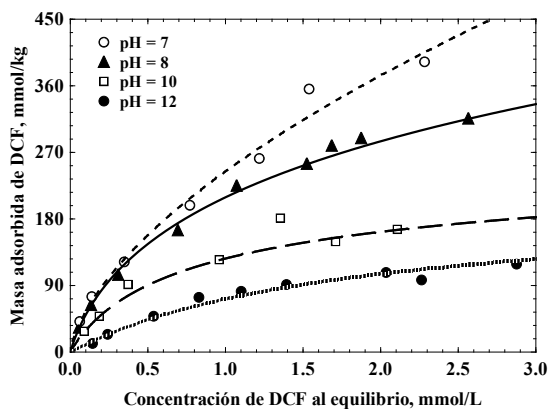
Recientemente, la contaminación del agua por compuestos farmacéuticos ha despertado gran interés debido a su poca regulación y baja degradación que se logra en las plantas de tratamiento de aguas residuales [1]. Dos de los fármacos más comúnmente encontrados en fuentes de agua son el diclofenaco (DCF) y sulfametoxazol (SMX), ya que son ampliamente prescritos contra el dolor y como agente antimicrobiano. La exposición prolongada a agua contaminada con DCF y SMX ocasiona efectos adversos como tumores tiroideos y cambios hemodinámicos [2], y por esta razón, es importante investigar métodos de eliminación en solución acuosa. Uno de los métodos más empleados es la adsorción, y los carbones activados han presentado razonables capacidades de adsorción por compuestos orgánicos. El óxido de grafito (OG) es un novedoso material de carbono, producido a partir de la modificación química del grafito. La adición de grupos oxigenados y exfoliación del OG hacen que este nanomaterial sea ampliamente utilizado para la eliminación de fármacos del agua [2]. Sin embargo, en los cuerpos de agua superficial se encuentran comúnmente varias sustancias contaminantes simultáneamente, siendo importante estudiar la adsorción bajo la presencia de diferentes fármacos. En la literatura, se han reportado pocos trabajos sobre la adsorción simultánea de DCF y SMX. Por lo anterior, el objetivo de este trabajo es analizar el equilibrio de adsorción individual y binaria de DCF y SMX en solución acuosa sobre OG, y elucidar el mecanismo de adsorción basándose en resultados experimentales.

El OG se sintetizó utilizando el método de Brodie que es el más utilizado y que consiste en la oxidación húmeda con ácido nítrico y produce grupos oxigenados más estables [3]. Se realizó la determinación de las propiedades de textura, caracterización fisicoquímica y cristalográfica del material adsorbente, con la finalidad de conocer su morfología, estructura y verificar la síntesis. Se encontró que el OG tiene un punto de carga cero ( $pH_{PCC}$ ) de 2.8, indicando que la superficie del OG está cargada negativamente a pH mayores de 2.8 y tiene carácter ácido debido a la presencia de los grupos oxigenados, principalmente carboxílicos. Además, se encontró que el OG es un material con baja área específica, pero mesoporoso, lo cual es característico de materiales de este tipo y resulta benéfico para la intercalación de moléculas orgánicas entre las láminas de grafeno. La oxidación del grafito se comprobó a través de difracción de rayos X y se encontró que las láminas de grafeno se exfoliaron después de la inserción de los grupos funcionales.

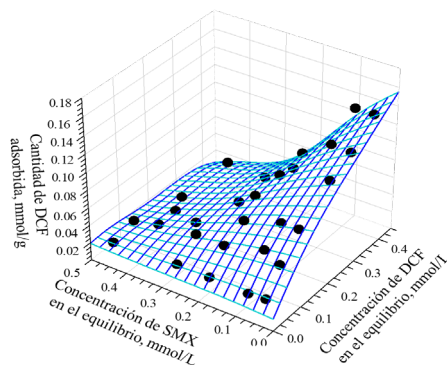
Se realizó la adsorción individual del DCF y SMX a diferentes pH y se notó que la capacidad del OG para adsorber ambos fármacos disminuye al aumentar el pH de la solución. En la Figura 1 se presenta

el efecto del pH de la solución sobre la isoterma de adsorción de DCF a pH de 7, 8, 10 y 12 y  $T = 25$  °C, y se observa que decrece hasta de 3.5 veces al incrementar el pH de 7 a 12. En este intervalo de pH, las especies predominantes de los fármacos fueron las aniónicas de  $\text{DCF}^-$  y  $\text{SMX}^-$ . El efecto del pH en la adsorción de ambos fármacos se atribuyó al incremento de la carga negativa de la superficie del OG, que aumentó la repulsión electrostática entre la superficie negativa de OG y las especies aniónicas de  $\text{DCF}^-$  y  $\text{SMX}^-$ . La importancia de la repulsión electrostática en el mecanismo de adsorción de  $\text{DCF}^-$  y  $\text{SMX}^-$  se estudió analizando el efecto de la fuerza iónica sobre la capacidad de adsorción. La capacidad del OG para adsorber  $\text{DCF}^-$  aumentó incrementando la fuerza iónica y esto corroboró que la repulsión electrostática afecta la adsorción de  $\text{DCF}^-$ . Por el contrario, la fuerza iónica de la solución no afectó la capacidad de OG para adsorber de  $\text{SMX}^-$ , demostrando que la repulsión electrostática no afecta la adsorción de  $\text{SMX}^-$ . Por lo anterior, se considera que el principal mecanismo de adsorción de ambos fármacos son las interacciones dispersivas  $\pi$ - $\pi$  y la repulsión electrostática no afecta la adsorción de  $\text{SMX}^-$ , pero sí la adsorción de  $\text{DCF}^-$  [4]. La adsorción de ambos fármacos sobre OG se comprobó mediante espectroscopia IR, donde se observó la aparición de las bandas características del DCF y SMX después de la adsorción sobre OG.

También, se llevaron a cabo experimentos de desorción de cada uno de los fármacos y se encontró que la adsorción de DCF no es reversible, mientras que la del SMX tiene un porcentaje de desorción aproximadamente del 50 %. Esto se atribuye a que el DCF presenta mayor estabilidad en la superficie del OG que en la solución, lo que previene su desorción. Por otro lado, se llevaron a cabo experimentos de adsorción simultánea de ambos fármacos sobre OG; en la Figura 2 se presenta la adsorción de DCF sobre OG en presencia de SMX a pH = 7 y  $T = 25$  °C. Este pH se eligió como el óptimo debido a que, a pH menores, el DCF se precipita. Se encontró que la adsorción de DCF en presencia SMX fue antagónica, ya que la cantidad de DCF adsorbido disminuyó con la concentración de SMX. Mientras que, la masa adsorbida de SMX en presencia de DCF aumentó con la concentración de DCF, este efecto se denomina sinérgico.



**Figura 1.** Efecto de pH en la isoterma de adsorción individual de DCF en solución acuosa sobre OG a  $T = 25$  °C.



**Figura 2.** Isoterma de adsorción binaria sobre OG a pH = 7 y  $T = 25$  °C. Adsorción de DCF en presencia de SMX.



Se concluye que el OG se puede aplicar eficientemente para la eliminación de los fármacos DCF y SMX en solución acuosa. El OG presenta mayor capacidad para adsorber DCF de forma individual, pero mayor afinidad hacia el SMX en la adsorción competitiva. También, se corrobora que la adsorción individual de DCF y SMX sobre OG ocurre por interacciones dispersivas  $\pi$ - $\pi$ . La adsorción de DCF en presencia de SMX sobre OG es antagónica, mientras que la adsorción de SMX en presencia de DCF es sinérgica.

## **Referencias**

1. Peña-Guzmán, C., Ulloa-Sánchez, S., Mora, K., Helena-Bustos, R., Lopez-Barrera, E., Alvarez, J. y Rodríguez-Pinzón, M. (2019). Emerging pollutants in the urban water cycle in Latin America: A review of the current literature. *Journal of Environmental Management* 237, 408-423.
2. Nam, S.W., Jung, C., Li, H., Yu, M., Flora, J.R.V., Boateng, L.K., Her, N., Zoh, K.D. y Yoon, Y. (2015). Adsorption characteristics of diclofenac and sulfamethoxazole to graphene oxide in aqueous solution. *Chemosphere* 136, 20-26.
3. Botas, C., Álvarez, P., Blanco, P., Granda, M., Blanco, C., Santamaría, R., Romasanta, L.J., Verdejo, R., López-Manchado, M.A. y Menéndez, R. (2013). Graphene materials with different structures prepared from the same graphite by the Hummers and Brodie methods. *Carbon* 65, 156-164.
4. D.H. Carrales-Alvarado, D.H., Ocampo-Pérez, R., Leyva-Ramos, R. y Rivera-Utrilla, J. (2014). Removal of the antibiotic metronidazole by adsorption on various carbon materials from aqueous phase, *J. of Colloid and Interface Science*, 436, 276-285.



## Obtención y aplicación del carbón derivado de MIL-101(Fe) en la adsorción de antiinflamatorios

G. Peña-Velasco<sup>1</sup>, L. Hinojosa-Reyes<sup>1</sup>, C. Palomino-Cabello<sup>2</sup>, G. Turnes-Palomino<sup>2</sup>, L. Sandoval Rangel<sup>3</sup>, J.L. Guzmán-Mar<sup>1</sup>.

<sup>1</sup>Universidad Autónoma de Nuevo León (UANL), Facultad de Ciencias Químicas, Av. Universidad S/N, Cd. Universitaria, San Nicolás de los Garza N.L. México, C.P. 66455.

<sup>2</sup>Universidad de las Islas Baleares, Departamento de Química, Cra. Valldemossa km 7.5, Palma de Mallorca, E-07122, España.

<sup>3</sup>Tecnológico de Monterrey, Escuela de Ingeniería y Ciencias, Ave. Eugenio Garza Sada 2501, 64849, Monterrey, N.L. México.

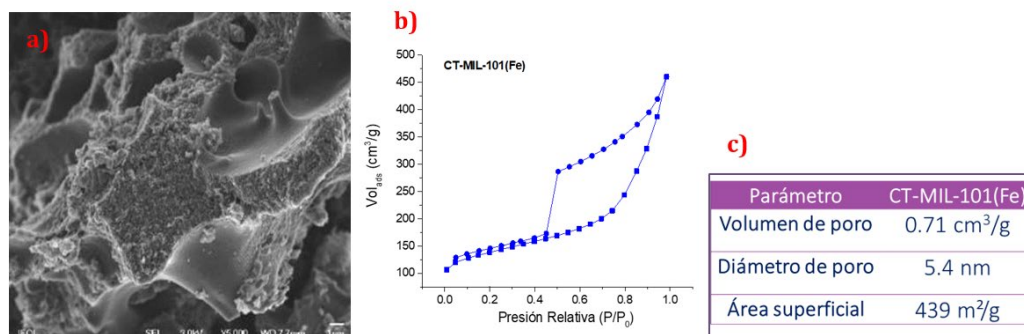
**Palabras Clave:** Carbón derivado, MIL-101(Fe), área superficial.

La presencia de contaminantes emergentes en el agua es actualmente un problema ambiental crítico, ya que su liberación al medio ambiente no se encuentra regulada. Entre los contaminantes emergentes prioritarios de estudio se encuentran los AINEs (antiinflamatorios no esteroideos), debido a que han mostrado un alto consumo en todo el mundo, además de ser asociados a riesgos ecotoxicológicos [1]. Estos han sido detectados en aguas residuales e incluso en agua potable en concentraciones de ng/L a µg/L [2]. Entre las diversas estrategias para eliminarlos de las matrices acuosas se encuentra la adsorción mediante armazones organometálicos (MOFs), sin embargo, no todas las familias de MOFs cuentan con estabilidad en agua [3], por esta razón, se ha suscitado un reciente interés en la creación de nuevos materiales carbonáceos a partir de redes metal orgánicas presentando ventajas tales como mayor estabilidad química y térmica, porosidad modulable y amplias distribuciones de tamaño de poro [4,5], características que favorecen la adsorción de contaminantes en agua.

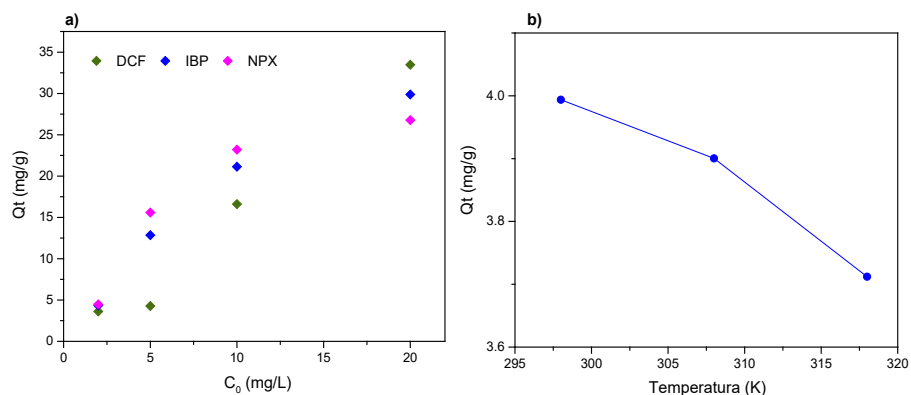
La red metal-orgánica MIL-101(Fe) fue sintetizada por un método asistido por microondas, posteriormente se sometió a calcinación directa en atmósfera de nitrógeno (800°C/3h) para la obtención del material carbonáceo, al cual se le aplicó un tratamiento ácido (HNO<sub>3</sub> 1M) por 24 h. En los experimentos de adsorción (agitación 125 rpm, pH 7 y usando solo 5 mg de material) se evaluó el efecto de la temperatura (25, 35 y 45 °C) y la concentración inicial de contaminantes (2-20 mg/L) durante 4 h siguiendo la concentración de cada disolución por cromatografía de líquidos de alta resolución.

Los resultados obtenidos mostraron que el carbón derivado de la red metal-orgánica presentó una morfología rugosa altamente porosa, una isoterma tipo IV asociada a materiales con mesoporos congruente con el diámetro de poro obtenido de 5.4 nm y un área superficial de 439 m<sup>2</sup>/g (Figura 1 a-c); previamente, se ha reportado en la literatura que estas propiedades favorecen la adsorción de contaminantes orgánicos, lo que se comprobó en la Figura 2<sup>a</sup>, donde el material alcanzó una capacidad de remoción mayor que 4mg/g para una mezcla de tres antiinflamatorios, naproxeno, diclofenaco e ibuprofeno, usados como contaminantes modelo. De igual forma se demostró que el aumento de temperatura disminuyó la capacidad de adsorción del naproxeno (Figura 2b), por lo que se estableció que el valor recomendable de temperatura para la adsorción de estos AINEs es 25 °C, favoreciendo

los costos de aplicación de estos nuevos materiales en el proceso de remoción de contaminantes emergentes presentes en agua.



**Figura 1.** Caracterización del carbón derivado de MIL-101(Fe) por a) microscopía electrónica de barrido, b-c) fisisorción de N<sub>2</sub>.



**Figura 2.** a) Efecto de la concentración inicial del contaminante y b) Efecto de la temperatura sobre la adsorción de naproxeno usando el carbón derivado de MIL-101(Fe).

Este es el primer estudio que surge sobre la obtención y el uso del carbón derivado de MIL-101(Fe) seguido de un tratamiento ácido para la formación de un nuevo material adsorbente, el cual fue exitoso. La potencial aplicación de adsorción de contaminantes en agua se atribuye principalmente al cambio en las propiedades texturales. En términos de aplicación a escala, que la temperatura solo afectara la adsorción de uno de los contaminantes también fue un hallazgo exitoso. Es necesario seguir trabajando en este campo para establecer cuáles son las familias de MOF que pueden ser utilizadas como plantilla de carbones derivados con aplicaciones potenciales de adsorción de contaminantes en el agua.



## Referencias

1. L.I. Castro-Pastrana, M.I. Baños-Medina, M. Argelia López-Luna, B.L. Torres-García. Ecofarmacovigilancia en México: perspectivas para su implementación Ecopharmacovigilance in Mexico: prospects of its implementation. *Rev Mex Cienc Farm.* 46 (2015). <http://www.redalyc.org/pdf/579/57945705003.pdf>.
2. A. Peña-Álvarez, A. Castillo-Alanís, Identificación y cuantificación de contaminantes emergentes en aguas residuales por microextracción en fase sólida-cromatografía de gases-espectrometría de masas (MEFS-CG-EM), *Tip.* 18 (2015) 29–42. <https://doi.org/10.1016/j.recqb.2015.05.003>.
3. B. Liu, K. Vikrant, K.H. Kim, V. Kumar, S.K. Kailasa, Critical role of water stability in metal-organic frameworks and advanced modification strategies for the extension of their applicability, *Environ. Sci. Nano.* 7 (2020) 1319–1347. <https://doi.org/10.1039/c9en01321k>.
4. W. Chaikittisilp, K. Ariga, Y. Yamauchi, A new family of carbon materials: Synthesis of MOF-derived nanoporous carbons and their promising applications, *J. Mater. Chem. A.* 1 (2013) 14–19. <https://doi.org/10.1039/c2ta00278g>.
5. K. Shen, X. Chen, J. Chen, Y. Li, Development of MOF-Derived Carbon-Based Nanomaterials for Efficient Catalysis, *ACS Catal.* 6 (2016) 5887–5903. <https://doi.org/10.1021/acscatal.6b01222>.

## Materiales nanoporosos de carbón como portadores en la adsorción y liberación controlada de cefalexina

K. Montiel-Centeno<sup>1</sup>, D. Barrera<sup>\*</sup>, K. Sapag<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Laboratorio de Sólidos Porosos, Instituto de Física Aplicada CONICET, Universidad Nacional de San Luis, Ejército de los Andes 950. C.P: 5700, San Luis, Argentina

**Palabras Clave:** adsorción, carbón, liberación controlada.

Los sistemas de liberación controlada de fármacos (SLC) son una alternativa a los sistemas de administración convencional, que permiten mejorar la eficiencia terapéutica y minimizar los efectos secundarios de los fármacos en los pacientes [1]. Los SLC requieren de un portador que sea capaz de almacenar el fármaco en su estructura y luego transportarlo y liberarlo de forma controlada en un sitio específico del organismo [2]. En este sentido, el desarrollo de portadores con alta capacidad de adsorción y un buen desempeño en la entrega de los fármacos, representa una necesidad urgente dentro de este campo.

Existen diferentes portadores basados en nanoestructuras que han sido empleados para estos propósitos. Algunos ejemplos son las sílices mesoporosas, arcillas, zeolitas y MOF, entre otros. Sin embargo, algunos de estos materiales presentan ciertas desventajas en cuanto a baja capacidad de adsorción, poca estabilidad o baja biocompatibilidad [3]. Por lo tanto, es de gran interés la búsqueda de otros materiales que permitan mejorar las limitaciones de los portadores existentes y que además presenten otras características distintivas. Una alternativa prometedora son los materiales nanoporosos de carbón (MNC) que poseen propiedades interesantes tales como: (i) resistencia a la variación del pH y la temperatura, que le confiere estabilidad al material durante su exposición a diferentes medios de pH fisiológico, (ii) biocompatibilidad ante células estomacales e intestinales, (iii) composición carbonosa que incluye una hibridación  $sp^2$  y (iv) propiedades texturales como alta superficie específica ( $\sim 1000 \text{ m}^2 \text{ g}^{-1}$ ), distribución estrecha del tamaño de poros, presencia de microporos y mesoporos interconectados (1.5 – 4.5 nm) que permiten tener alta capacidad de adsorción del fármaco y posteriormente una liberación controlada por su estructura porosa altamente ordenada [4].

Adicionalmente, una ventaja importante de los MNC es que su morfología puede ser diseñada a medida y presentarse en forma estética, de hilos, varillas sólidas o huecos, entre otros. De esta manera, el tipo de morfología en los MNC podría presentar diferentes comportamientos en cuanto a la capacidad de adsorción y liberación de los fármacos.

El objetivo de este trabajo fue sintetizar a través del método de *nanocasting* [5] dos MNC con diferentes tipos de morfologías, uno en forma de varillas sólidas y otro en forma de varillas huecas, denominados CMK-3 y CMK-5, respectivamente. Posteriormente, las propiedades de ambos materiales fueron estudiadas mediante adsorción-desorción de  $N_2$  a 77 K, ATG, Raman, FTIR y SEM. Estos MNC fueron utilizados como portadores en la adsorción de cefalexina (fármaco modelo). Las pruebas de adsorción se realizaron a una concentración de cefalexina de  $1 \text{ mg mL}^{-1}$ , pH 6 y  $30 \text{ }^\circ\text{C}$

durante 8 h. Estos materiales también fueron caracterizados con las técnicas previamente mencionadas, a través de las cuales se verificó la presencia del fármaco adsorbido. Finalmente, con los dos portadores (CMK-3 y CMK-5), se realizaron las pruebas de liberación controlada de cefalexina por vía oral a pH gástrico (1.2) e intestinal (6.8). La cefalexina adsorbida y liberada fue medida mediante UV-Vis a 257 y 262 nm para pH 1.2 y 6.8, respectivamente.

La cantidad de cefalexina adsorbida en los carbones CMK-3 y CMK-5 fue de 295 y 420 mg g<sup>-1</sup>, respectivamente. El CMK-5 presentó mayor capacidad de adsorción que el carbón CMK-3. Este resultado posiblemente se debe a que el CMK-5 tiene mayor superficie específica y volumen total de poros que el CMK-3 (Tabla 1), debido a la doble porosidad que proporciona la morfología de las varillas huecas del CMK-5 [6]. Después de la adsorción del fármaco ambos materiales presentaron una reducción significativa de sus propiedades texturales, como se observa en la Tabla 1. Sin embargo, esta reducción fue superior en el material CMK-5, lo cual se relaciona con la mayor capacidad de adsorción de cefalexina por parte de este material.

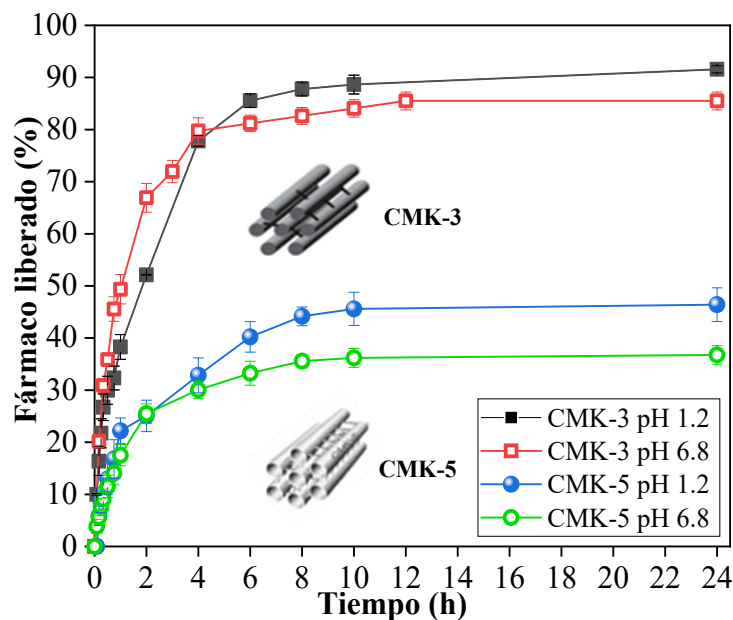
**Tabla 1.** Propiedades texturales de los MNC antes y después de la adsorción de cefalexina\*.

Materiales	$S_{BET}$ (m <sup>2</sup> g <sup>-1</sup> )	$S_{EXT}$ (m <sup>2</sup> g <sup>-1</sup> )	$V_{TP}$ (cm <sup>3</sup> g <sup>-1</sup> )	$V_{IP}$ (cm <sup>3</sup> g <sup>-1</sup> )	Fármaco adsorbido (mg g <sup>-1</sup> )
CMK-3	880	490	0.96	0.11	
CMK-3-F	330	330	0.55	0	295
CMK-5	1200	600	1.3	0.08	
CMK-5-F	360	260	0.40	0	420

\*Las propiedades texturales fueron obtenidas a partir de las isotermas de adsorción-desorción de N<sub>2</sub> a 77 K [5].

Asimismo, a través del ATG se verificó la resistencia a la temperatura de ambos materiales y a través de la microscopía Raman se encontró que tanto el CMK-3 como el CMK-5 están conformados por carbono grafitico y amorfo. Adicionalmente, a través de las micrografías SEM fue posible visualizar la morfología de ambos materiales en forma de tubos o varillas. Todas estas propiedades se mantuvieron invariables después de la encapsulación del fármaco.

Los perfiles de liberación de cefalexina simulando las condiciones gástricas e intestinales y utilizando como portadores a los carbones CMK-3 y CMK-5 se muestran en la Figura 1. Se observa que existen diferencias notables en la liberación de ambos portadores. El CMK-3 liberó mayor porcentaje de cefalexina que el CMK-5 en los dos medios de pH, pero la meseta la alcanzó dos horas antes el CMK-3 (6 h) que el CMK-5 (8 h). Esto indica que la morfología de varilla sólida del CMK-3 permite una difusión más rápida del fármaco con poca retención del mismo en su interior. Por otro lado, la morfología hueca del CMK-5 permite una liberación más lenta y además retiene al fármaco en su interior permitiendo una liberación total por debajo del 50 %.



**Figura 1.** Perfiles de liberación de cefalexina *in vitro* a pH 1.2 y 6.8 a partir de los MNC de tipo CMK-3 y CMK-5.

Como conclusión se puede destacar que los materiales de carbón sintetizados poseen alta capacidad de adsorción de cefalexina y que propiedades como la morfología en forma de varillas sólidas o huecas tiene una fuerte influencia tanto en la capacidad de adsorción como en la liberación de fármacos modelo como la cefalexina. Las varillas huecas del CMK-5 permiten mayor capacidad de adsorción, pero también limitan la liberación a porcentajes muy bajos comparados con las varillas rellenas del CMK-3.

## Referencias

1. Ávila, M. I., Alonso-Morales, N., Baeza, J. y Gilarranz, M. (2020). High load release systems based on carbon porous nanocapsule carriers. Ibuprofen case study. *Journal of Materials Chemistry B* 8 (24), 5393-5304.
2. Sánchez-Sánchez, A., Suárez-García, F., Martínez-Alonso, A. y Tascón J.M.D. (2015). pH-responsive ordered mesoporous carbons for controlled ibuprofen release. *Carbon* 94, 152-159.
3. Dipendu, S., Amanda, S., Jihua, C. y Dale, K. (2016). Controlled release of alendronate from nitrogen-doped mesoporous carbon. *Microporous and Mesoporous Materials* 229, 8-13.
4. Montiel-Centeno, K., Barrera, D., Villarroel-Rocha, J., Moreno, M. S. y Sapag, K. (2019). Hierarchical nanostructured carbons as CO<sub>2</sub> adsorbents. *Adsorption* 25 (7), 1287-1297.
5. Montiel-Centeno, K., Barrera, D., Villarroel-Rocha, J., Arroyo-Gómez, J.J., Moreno, M. S. y Sapag, K. (2019). CMK-3 nanostructured carbon: Effect of temperature and time carbonization on textural properties and H<sub>2</sub> storage. *Chemical Engineering Communications* 206 (11), 1581-1595.

## Adsorción multicomponente de fármacos de preocupación emergente

E. García-Díaz<sup>1</sup>, G. Cavazos-Juárez<sup>1</sup>, M.P. Elizalde-González<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Instituto de Ciencias, Centro de Química, Lab. de Adsorción y Cromatografía. Ciudad Universitaria, Edif. IC7. Puebla, Pue. 72570, México.

**Palabras Clave:** *adsorción multicomponente, fármacos, carbón activado, adsorción competitiva.*

Se presenta la adsorción multicomponente de cloranfenicol, diclofenaco y paracetamol empleando la ecuación de Langmuir extendida para su análisis. Se observó un comportamiento competitivo entre todos los compuestos cuando se hizo la adsorción de la mezcla ternaria, con una disminución en la cantidad adsorbida entre 40 y 50%. La adsorción de paracetamol se vio mayormente afectada, pues fue el compuesto con la cinética de adsorción más lenta. En la adsorción de diclofenaco en mezcla con otros componentes, se prevé que se alcance la misma cantidad adsorbida que en el sistema individual, pero con una interacción difícil a bajas concentraciones.

La adsorción representa una poderosa alternativa para la eliminación de contaminantes del agua, en el caso de los fármacos, contaminantes de preocupación emergente, ha demostrado tener una alta eficiencia de remoción. La mayoría de las investigaciones en el campo de la adsorción se enfocan en la eliminación efectiva de un solo componente [1], sin embargo, sabemos que las aguas residuales contienen muchos tipos de contaminantes que interfieren y compiten entre ellos en el proceso de adsorción. Para analizar sistemas multicomponentes se emplea la ecuación de Langmuir extendida que permite analizar el comportamiento en sistemas competitivos [2]. Los sistemas de adsorción que de manera individual tienen una cantidad adsorbida similar, pueden modelarse con la ecuación extendida de Langmuir con éxito [3]. En este trabajo se estudió la adsorción individual y en mezcla multicomponente de tres fármacos empleando la ecuación extendida de Langmuir.

Carbón activado obtenido a partir de residuos agro-industriales de jamaica, con una superficie específica de  $353 \text{ m}^2\text{g}^{-1}$ , fue empleado para estudiar la adsorción multicomponente de los siguientes fármacos: cloranfenicol (CL), diclofenaco (DI) y paracetamol (PA). El comportamiento cinético y de equilibrio de adsorción se determinó bajo los siguientes parámetros: temperatura =  $25^\circ\text{C}$ , relación masa/volumen = 0.01, concentración inicial de 0.05 a 2 mM. Los sistemas se agitaron horizontalmente a 180 oscilaciones  $\text{min}^{-1}$  y se filtraron con filtros de nylon de  $0.2 \mu\text{m}$ . Los fármacos se emplearon en concentraciones equimolares para tener el mismo número de moléculas compitiendo por los sitios activos de adsorción.

La concentración de los fármacos se determinó por LC-DAD utilizando una columna Agilent Zorbax Eclipse XDB (2.1 x 150 mm) C18 ( $5 \mu\text{m}$ ). La fase móvil fue buffer pH 6.8 de fosfato de potasio monobásico (A) y acetonitrilo (B) 5% en el tiempo 0 y de 55% en 8 minutos a una velocidad de flujo de  $0.3 \text{ mL min}^{-1}$ . La detección se realizó a 220, 243 y 275 nm. La adsorción multicomponente fue evaluada con la ecuación extendida de Langmuir y mediante regresión no lineal se obtuvieron los parámetros correspondientes, empleando el software Origin 8.1.

$$q_{e,i} = \frac{q_{m,i} K_{L,i} C_{e,i}}{1 + \sum_{j=1}^N K_{L,j} C_{e,j}}$$

Dónde:

$q_{m,i}$  ( $\text{mmol g}^{-1}$ ), cantidad adsorbida en la monocapa

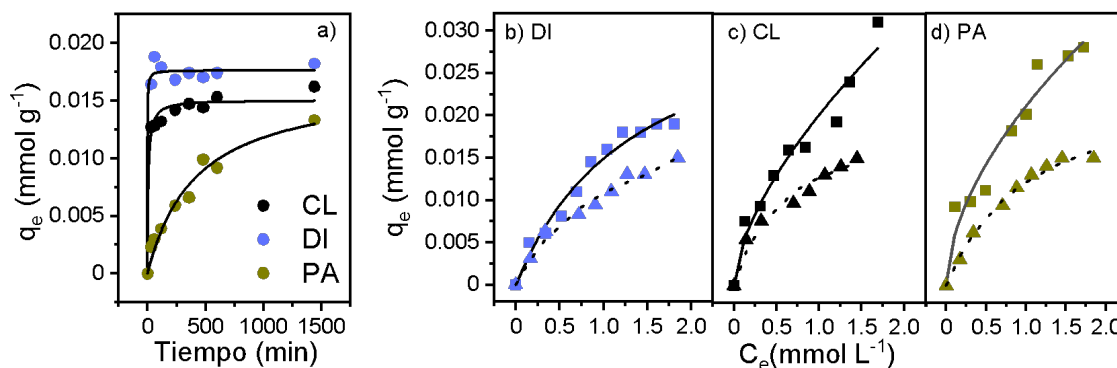
$K_{L,i}$  ( $\text{L mmol}^{-1}$ ), constante de Langmuir del fármaco  $i$

$K_{L,j}$  ( $\text{L mmol}^{-1}$ ), constante de Langmuir del fármaco  $j$

$C_{e,i}$  ( $\text{mmol L}^{-1}$ ), concentración de equilibrio del fármaco  $i$

$C_{e,j}$  ( $\text{mmol L}^{-1}$ ), concentración de equilibrio del fármaco  $j$

El comportamiento cinético (Figura 1) mostró que el PA tiene la adsorción más lenta, mientras que, para el CL y DI, el equilibrio se alcanzó a las 4 h de contacto. En la Figura 1 y Tabla 1 se muestran las isotermas de adsorción y los parámetros de adsorción individuales y multicomponente.



**Figura 1.** a) Cinética de los fármacos individuales descritos por ec. de *pseudo*-segundo orden (línea continua). Isotermas de adsorción de b) diclofenaco, c) clorfenicol y d) paracetamol en sistemas individuales (línea continua ec. de Langmuir) y en mezclas ternarias, (línea punteada, ec. extendida de Langmuir).

La cantidad adsorbida en la monocapa  $q_m$  del CL y PA en mezcla se redujo entre 40-50% con respecto a la adsorción individual. El DI que tuvo un cambio en la forma de isoterma, pero la  $q_m$  calculada prevé que se alcanzará la misma cantidad adsorbida que en la adsorción individual. El comportamiento competitivo se confirmó con los valores de  $K_{L,i}$  del compuesto seleccionado como principal, pues son significativamente altos con respecto a los otros componentes. Sin embargo, para el DI la constante  $K_L$  tuvo una alta desviación, por lo que no se puede concluir el efecto competitivo. El PA fue el más afectado por la competencia, debido a que tuvo una cinética de adsorción más lenta.

**Tabla 1.** Parámetros de la ec. de Langmuir y ec. extendida de Langmuir para los sistemas individuales y ternarios, respectivamente. Los valores sombreados corresponden al compuesto elegido como principal

Parámetro	Sistema individual			Sistema CL/DI/PA		
	CL	DI	PA	CL	DI	PA
$q_{m,i}$	0.054±0.018	0.04±0.005	0.05±0.01	0.02±2E-3	0.04±4E-2	0.02 ±3E-3
$K_L^1$	0.62±0.33	0.718±0.19	0.81±0.4	1.7±0.6	4±0.96	3E-17±0
$K_L^2$				8E-16±0	0.51±0.44	3E-16±0
$K_L^3$				3E-16±0	2E-13±0.6	0.97±0.2
$R^2$	0.889	0.957	0.891	0.935	0.973	0.985
$\chi^2$	7.8E-6	1.36E-6	7.9E-6	1.4E-6	7.3E-7	4.9E-7

Se observó un comportamiento competitivo en la adsorción de los fármacos estudiados, sin embargo, el modelo competitivo de Langmuir tiene limitaciones para describir los datos experimentales, sobre todo a bajas concentraciones, no siempre es posible hacer una interpretación adecuada por la amplia desviación estándar de los parámetros.

## Referencias

1. L. Nielsen, T.J. Bandosz, (2016) Analysis of the competitive adsorption of pharmaceuticals on waste derived materials, *Chemical Engineering Journal* **287**, 139-147.
2. A.H. Ali, (2014) Removal of Cd<sup>2+</sup>, Cu<sup>2+</sup>, and Ni<sup>2+</sup> metals from simulated wastewater in single and competitive systems using local iraqi phosphate rocks, *Chem. Eng. Commun.* **210**, 1620–1644
3. T.R.C. Van Assche, G.V. Baron, J.F.M. Denayer, (2018) An explicit multicomponent adsorption isotherm model: accounting for the size-effect for components with Langmuir adsorption behavior. *Adsorption* **24**, 517–530.

## Adsorción de emisiones de gasolina en nanotubos de carbono sintetizados sobre un biochar macroporoso

J. J. Gutiérrez-Martínez<sup>1</sup>, J. R. Rangel-Méndez<sup>1</sup>

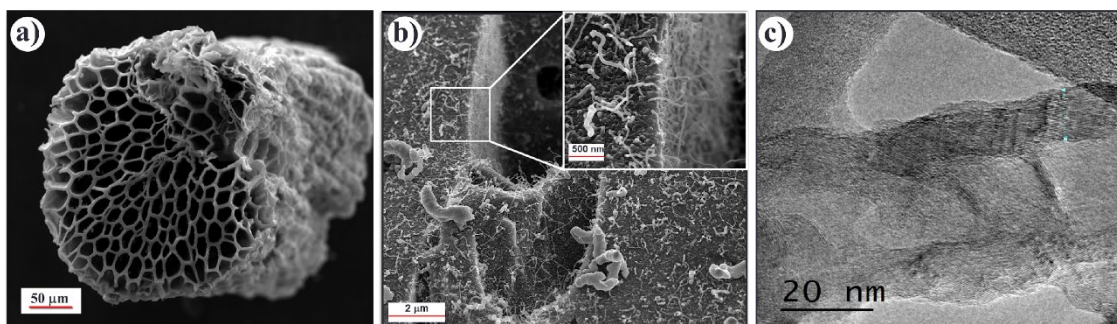
<sup>1</sup>División de Ciencias Ambientales, Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica. Camino a la Presa San José 2055. Col. Lomas 4ta sección CP. 78216. San Luis Potosí, México.

E-mail: [joel.gutierrez@ipicvt.edu.mx](mailto:joel.gutierrez@ipicvt.edu.mx)

**Palabras Clave:** biochar, nanotubos de carbono, adsorción de COV.

Las emisiones de la gasolina almacenada en los vehículos han sido reconocidas como un serio problema de contaminación atmosférica ya que están conformada principalmente por compuestos orgánicos volátiles (COVs) [1]. En la actualidad, los vehículos están equipados con un dispositivo conocido como “cánister”, el cual consiste en un recipiente empacado de carbón activado microporoso. La alta área específica del carbón activado lo convierte en el adsorbente más utilizado para la remoción de COVs. Sin embargo, su microporosidad presenta serias restricciones difusionales durante la adsorción de COVs, así como su regeneración *in situ* [2]. Por otra parte, la síntesis de un biochar macroporoso a partir de residuos de bagazo de agave permite obtener cinéticas de adsorción más rápidas que un carbón activado comercial. Con base en lo anterior, el objetivo de este proyecto es mejorar la capacidad de adsorción de COVs de gasolina incrementando el área específica expuesta del biochar mediante el crecimiento de nanotubos de carbono (NTC) sobre los canales macroporoso del biochar, además de incrementar la velocidad de adsorción de cuatro COVs representativos de las emisiones de gasolina.

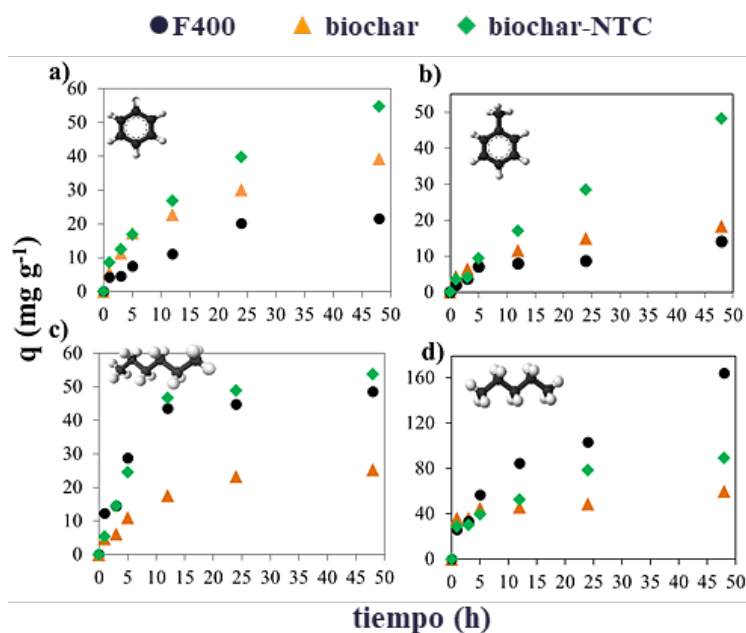
El crecimiento NTC por deposición química de vapor es desarrollado comúnmente a temperaturas igual o mayores a 700 °C. Así mismo, desarrollar este proceso mediante el uso de un sustrato poroso a base de carbono, ha sido escasamente explorado [3]. En este proyecto, el crecimiento de nanotubos de carbono a 600 °C favoreció el crecimiento de NTC sobre la superficie del biochar. El análisis de MEB muestra una amplia distribución de NTC sobre la superficie y dentro de los canales del biochar (Figura 1b). Es importante resaltar que el crecimiento de NTC con morfología tipo bambú y diámetros menores a 100 nm (Figura 1c) fue favorable a 600 °C.



**Figura 1.** Imágenes MEB de biochar macroporoso a) previo y b) posterior a la síntesis de NTC por DQV, y c) MET de CNT mostrando morfología tipo bambú.

Para evaluar el desempeño de este material como adsorbente en un cánister automotriz, se investigó la cinética de adsorción de cuatro COVs representativos de gasolina. Estos estudios de adsorción fueron evaluados considerando el cambio en peso de la masa del adsorbente durante 48 h. Como se observa en la Figura 2, las cinéticas de adsorción de los COVs están restringidas por la porosidad del adsorbente y el tamaño del adsorbato. Es decir, el benceno y tolueno al ser moléculas aromáticas de mayor tamaño, presentan una difusión más lenta desde el bulk del líquido al espacio de cabeza de la botella y finalmente a la superficie del material, esto debido, principalmente, a las presiones de vapor menores que moléculas alifáticas de bajo peso molecular como el pentano y el hexano. En este sentido, las moléculas aromáticas presentaron una cinética de adsorción más lenta en el carbón activado bituminoso (CAG), debido a su alta microporosidad (Tabla 1), donde su tamaño restringió la difusión en los microporos.

El incremento en la cinética de adsorción para biochar y el biochar-NTC se debió a la nula restricción difusional que presentan los macroporos en el biochar y a la mayor área expuesta de los NTC, además de favorecer la adsorción de estas moléculas no polares mediante fuerzas de dispersión. Finalmente, la alta volatilidad de las moléculas alifáticas de bajo peso molecular permitió una difusión prácticamente instantánea en el F400, lo cual refleja un aprovechamiento de su alta área específica ( $776 \text{ m}^2 \text{ g}^{-1}$ ), concentrada en los microporos. Mientras que el biochar-CNT también puede competir con el F400 en velocidades de adsorción para moléculas de menor peso molecular a pesar de presentar un área específica mucho menor ( $240 \text{ m}^2 \text{ g}^{-1}$ ).



**Figura 2.** Cinéticas de adsorción en fase gas de a) benceno, b) tolueno, c) hexano y d) pentano at 25 °C y ~1 atm de presión barométrica.

**Tabla 1.** Propiedades de textura de los adsorbentes a base de carbono.

ID muestra	$S_{BET}$ ( $m^2 g^{-1}$ )	$V_{total}$ ( $cm^3 g^{-1}$ )	$V_{micro}$ ( $cm^3 g^{-1}$ )	$V_{meso}$ ( $cm^3 g^{-1}$ )
Carbón activado F400	776	0.416	0.270	0.130
Biochar	120	0.056	0.041	0.015
Biochar-NTC	240	0.110	0.088	0.02

Este trabajo muestra el crecimiento de nanotubos de carbono con morfología tipo bambú sobre biochar a 600 °C, duplicando el área específica de 120 a 240  $m^2 g^{-1}$ . Biochar-CNT puede ser usado como potencial adsorbente de COVs de gasolina, reemplazando al carbón activado comercial, ya que presenta cinéticas de adsorción de COVs más rápidas.

## Referencias

1. L. Jia, et al. *Environ Sci Pollut Res* vol. 163, pp. 3756–3763 (2014.)
2. B. Li, et al. *Atmos. Environ.*, vol. 161, pp. 1–12, (2017).
3. Gutierrez-Martínez et al. *Separation and Purification Technology* 257 (2021) 117956

## Caracterización fisicoquímica y transformación hidrotérmica de *Byrsonima crassifolia* y su aplicación en la remoción de metformina del agua

J.M. Sánchez Silva<sup>1</sup>, R. Ocampo Pérez<sup>1</sup>, E. Padilla Ortega<sup>1</sup>, N. A. Medellín Castillo<sup>2</sup>, V. H. Collins Martínez<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Centro de Investigación y Estudios de Posgrado, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Autónoma de San Luis Potosí, Av. Salvador Nava No.6, San Luis Potosí, SLP 78210, México.,

<sup>2</sup>Centro de Investigación y Estudio de Posgrado, Facultad de Ingeniería, Universidad Autónoma de San Luis Potosí, Av. Salvador Nava No. 8 Zona Universitaria, San Luis Potosí, SLP 78290, México.,

<sup>3</sup>Ingeniería y Química de Materiales, Centro de Investigación en Materiales Avanzados, S.C., Miguel de Cervantes #120, Complejo Industrial Chihuahua, Chih., C.P. 31136, México.

**Palabras Clave:** Hidrocarbón, Metformina, Hidrocarbonización.

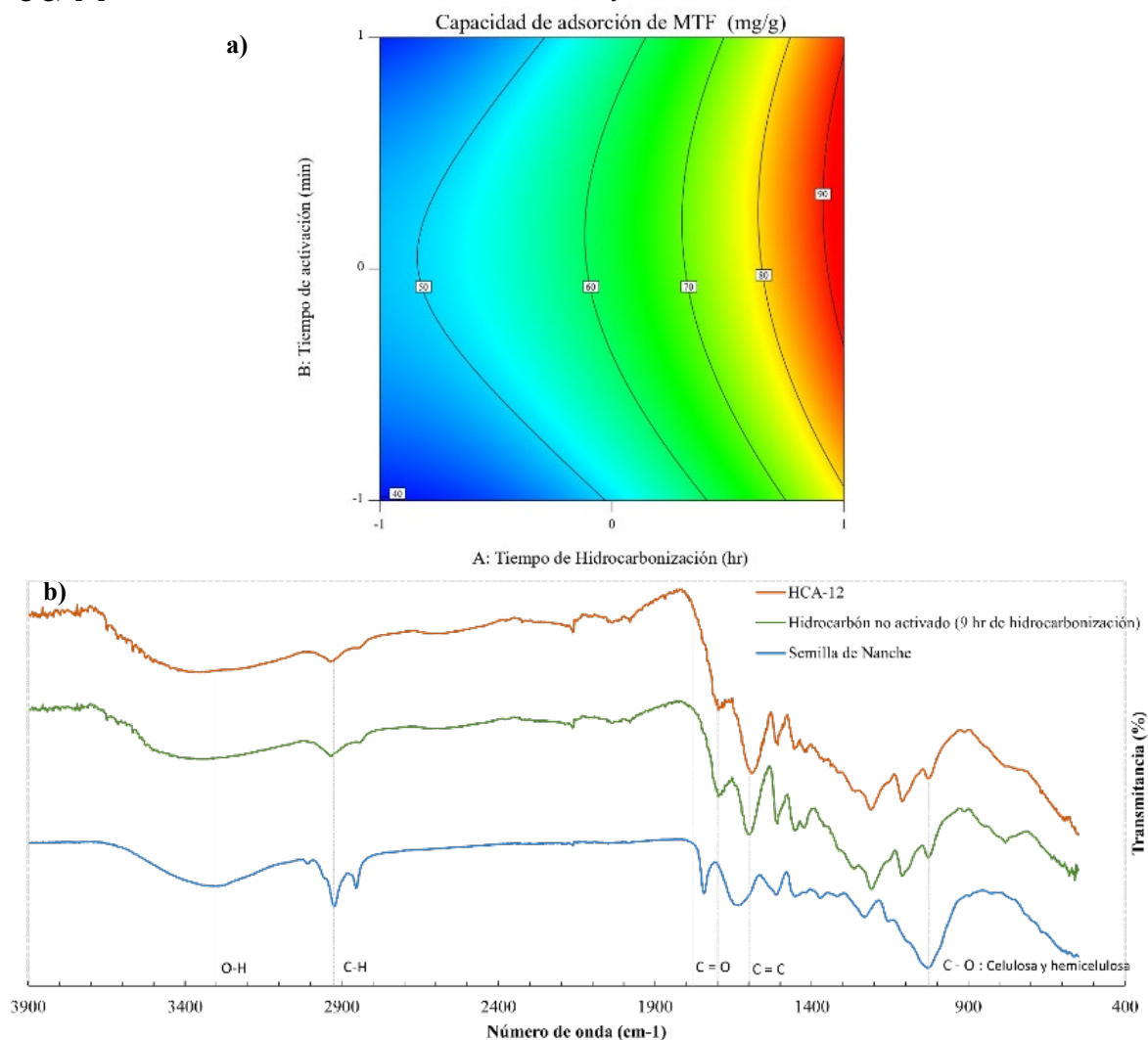
La Metformina (MTF) es uno de los principales fármacos utilizados en el tratamiento de la diabetes tipo 2, para controlar la glucosa sin riesgo de hipoglucemia o aumento de peso, además, es un compuesto de bajo costo que puede reducir el riesgo de eventos cardiovasculares y la muerte, y utilizarse en el tratamiento de trastornos endocrinos, como el síndrome de ovario poliquístico [1,2]. El aumento de casos de obesidad y diabetes desde el año 2000 ha producido un aumento en su consumo [3]. Una vez administrado, menos de la mitad de este fármaco se metaboliza en el organismo y alrededor del 52 % se excreta a través de la orina [2,4]; se han reportado concentraciones en influentes de plantas de tratamiento de aguas residuales de hasta 100 µg/L [5,6]. También se ha detectado en el agua potable en una concentración máxima de 160 ng/L [7]. Una alternativa para remover la metformina del agua es el uso de hidrocarbones modificados químicamente, y a la vez, reducir la cantidad de residuos agroindustriales que se generan actualmente. El objetivo del presente estudio es evaluar la hidrocarbonización-activación química de la semilla de nanche (*Byrsonima crassifolia*) y su capacidad de adsorción de metformina en medio acuoso mediante un diseño experimental de superficie de respuesta del tipo *Box-Behnken* evaluando los parámetros mostrados en la Tabla 1.

**Tabla 1.** Parámetros del diseño experimental Box-Behnken utilizado para la obtención de los materiales adsorbentes

Parámetro	Unidades	Bajo (-1)	Alto (1)
Tiempo de hidrocarbonización	A   Horas	3	9
Tiempo de activación	B   Minutos	30	90
Concentración de NaOH	C   mol/L	0.5	1.5

A partir de los puntos de equilibrio de adsorción de metformina para los 15 materiales sintetizados se obtuvo el análisis de varianza (ANOVA) para el diseño experimental propuesto, obteniendo un valor de  $P = 0.4242$  para la falta de ajuste indicando que el modelo de regresión puede describir la relación entre los factores experimentales y la variable de respuesta. De igual manera, el Anova indicó que los factores individuales A y B se relacionaron con un efecto significativo en la capacidad de adsorción de MTF, así como los factores cuadráticos  $A^2$ ,  $B^2$  y  $C^2$ . Como se observó en la Figura 1.a, un aumento en A y B incrementó la respuesta, obteniendo una capacidad de adsorción máxima

experimental de hasta 91 mg/g para las condiciones siguientes; A (1): 9 horas, B (0): 60 minutos y C (0): 1 mol/L. Este resultado obtenido se comparó con diversos materiales como: biocarbón de hoja de alcachofa (30.3 mg/g) [5], biocarbón de *Sterculia striata* (45.4 mg/g) [8] y óxido de grafeno (47.1 mg/g) [9], siendo la de este estudio de 1 a 3 veces mayor.



**Figura 1.** a) Gráfica de contorno del tiempo de hidrocbonización vs tiempo de activación (concentración de NaOH constante = 1 mol/L). b) Espectros infrarrojo del hidrocarbón activado (HCA-12) y no activado (HC - 9 hr) y semilla de nanche.

De acuerdo con la Figura 1.b donde se muestran los espectros infrarrojos por transformada de Fourier (FTIR) del hidrocarbón activado (HCA-12), hidrocarbón no activado (HC-9 hr) y la semilla de nanche, cuando el tiempo de hidrocbonización es de 9 horas el pico asociado a la matriz de celulosa-hemicelulosa ( $1000-1050\text{ cm}^{-1}$ ) disminuye y aumenta un pico ubicado a  $1700\text{ cm}^{-1}$  que es característico de grupos carboxílicos y lactonas. En general, estos dos cambios en los espectros infrarrojos son los más característicos y que se pueden asociar a una mayor capacidad de adsorción de MTF, ya que, se obtuvieron capacidades de adsorción de 90.7, 19.3 y 9.1 mg/g para los adsorbentes HCA-12, HC-9 hr y semilla de nanche respectivamente, es importante señalar, que al realizar la activación del hidrocarbón se aumenta la capacidad de adsorción 4.5 veces. Este estudio permitió



sintetizar un hidrocarbón a partir de biomasa residual y es preciso señalar que, mediante el método de activación propuesto se logró aumentar significativamente la capacidad de adsorción de metformina en comparación con diversos materiales carbonosos obtenidos generalmente por pirólisis, finalmente el diseño experimental propuesto relaciona adecuadamente el efecto de los parámetros evaluados siendo el tiempo de hidrocarbonización el más relevante.

## Referencias

1. Foretz, M., Guigas, B., Bertrand, L., Pollak, M., & Benoit, V. (2014). Metformin: from mechanisms of action to therapies. *Cell Metabolism*, 20, 953-966.
2. Mallik R., & Chowdhury T. A. (2018). Metformin in cancer. *Diabetes Research and Clinical Practice*, 143,409-419.
3. Oliveira, T. S., Murphy, M., Mendiola, N., Wong, V., Carlson, D., & Waring, L. (2015). Characterization of Pharmaceuticals and Personal Care products in hospital effluent and wastewater influent/effluent by direct-injection LC-MS-M. *Science of the total environment*, 518, 459-478.
4. Elizalde-Velázquez, G. A., & Gómez-Oliván, L. (2020). Occurrence, toxic effects, and removal of metformin in the aquatic environments in the world: Recent trends and perspectives. *Science of the Total Environment*, 702, 134924.
5. Mahmoud, M. E., El-Ghanam, A. M., Saad, S. R., & Mohamed, R. H. (2020). Promoted removal of metformin hydrochloride anti-diabetic drug from water by fabricated and modified nanobiochar from artichoke leaves. *Sustainable Chemistry and Pharmacy*, 18, 100336.
6. De Jesus Gaffney, V., Cardoso, V. V., Cardoso, E., Teixeira, A. P., Martins, J., Benoliel, M. J., & Almeida, C. M. M. (2017). Occurrence and behavior of pharmaceutical compounds in a Portuguese wastewater treatment plant: Removal efficiency through conventional treatment processes. *Environmental Science and Pollution Research*, 24(17), 14717-14734.
7. Briones, Rowena M.; Sarmah, Ajit K.; Padhye, Lokesh P. (2016). A global perspective on the use, occurrence, fate and effects of anti-diabetic drug metformin in natural and engineered ecosystems. *Environmental Pollution*, 219, 1007-1020.
8. Beatriz-Quesada, H., Peixoto de Araújo, T., Cusioli, L. F., Simoes Dornellas de Barros, M. A., Gutierrez Gomes, R., & Bergamasco, R. (2021). Evaluation of novel activated carbons from chichá-do-cerrado (*Sterculia striata* St. Hil. et Naud) fruit shells on metformin adsorption and treatment of a synthetic mixture. *Journal of Environmental Chemical Engineering*, 9(1), 104914
9. Zhu, S., Liu, Y., Liu, S., Zeng, G., Jiang, L., Tan, X., Zhou, L., Li, T., Yang, C. (2017). Adsorption of emerging contaminant metformin using graphene oxide. *Chemosphere*, 179, 20-28.



## Carbón activado obtenido del residuo agroindustrial de jamaica

G. Cavazos-Juárez<sup>1</sup>, E. García-Díaz<sup>1</sup>, M.P. Elizalde-González<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Instituto de Ciencias, Centro de Química, Lab. de Adsorción y Cromatografía. Ciudad Universitaria, Edif. IC7. Puebla, Pue. 72570, México.

**Palabras Clave:** *Hibiscus Sabdariffa* Linn, saborizante, carbonización

El uso de la flor de jamaica para la preparación de extracto y agua saborizada produce abundantes residuos desprovistos de una aplicación específica. Los desechos orgánicos agroindustriales son fuentes de contaminación y afectan a los ecosistemas y a la comunidad humana [1]. Actualmente, se utilizan distintos residuos lignocelulósicos como precursores para obtener carbón activado, implementando la activación física y química [2]. Tanto la porosidad como la química superficial dependen del tipo y concentración del agente activante, siendo los materiales activados químicamente los que tienen un mayor rendimiento [3]. En el país, se producen anualmente 5300 toneladas de flor de jamaica (FJ) (*Hibiscus Sabdariffa* L.), siendo Guerrero el principal estado productor con el 78% de producción nacional y no existen reportes de su empleo para la producción de carbón activado [4].

En este trabajo se presenta la caracterización del residuo de FJ, y la obtención y caracterización de carbón activado química y físicamente a partir de este importante residuo. Este residuo se caracterizó y se usó como precursor para preparar carbón activado física y químicamente. Se usaron dos hornos con diferente capacidad con el objetivo de estudiar la escalabilidad del proceso y se determinaron la distribución de grupos funcionales, el punto de carga cero y parámetros texturales de los carbones. El rendimiento fluctuó de 23 a 45%. Los carbones obtenidos tienen un  $\text{pH}_{\text{pzc}}$  ácido. El mayor volumen total de poro se obtuvo en el carbón activado físicamente. Todas las muestras presentaron microporosidad y la superficie específica fue menor con la activación química. La activación química produce grupos carboxilo, lactona y con fósforo, mientras que la física conserva los grupos fenólicos.

Los residuos de FJ fueron obtenidos en la Integradora agroindustrial de Chiautla de Tapia, Puebla. Se secaron a temperatura ambiente, posteriormente fueron cortados y tamizados. Se determinó la humedad y el contenido de cenizas, así como la composición elemental por fluorescencia de Rayos. Los grupos funcionales se identificaron por espectroscopía FTIR y se realizó un análisis termogravimétrico. Para la preparación de carbón activado se utilizó un gradiente de  $5\text{ }^{\circ}\text{C min}^{-1}$  y una temperatura máxima de  $800^{\circ}\text{C}$ . En la activación química se usó  $\text{H}_3\text{PO}_4$  al 50% aplicado por inmersión y aspersión. Se obtuvieron carbones empleando distintas escalas, 50 g en un horno tubular GSL-1100X (E1) y 200 g en horno rotatorio OTF-1200X (E2). La distribución de grupos funcionales y el punto de carga cero de los materiales se obtuvieron por método potenciométrico. La superficie específica se determinó a partir de isothermas de adsorción de nitrógeno a 77 K.

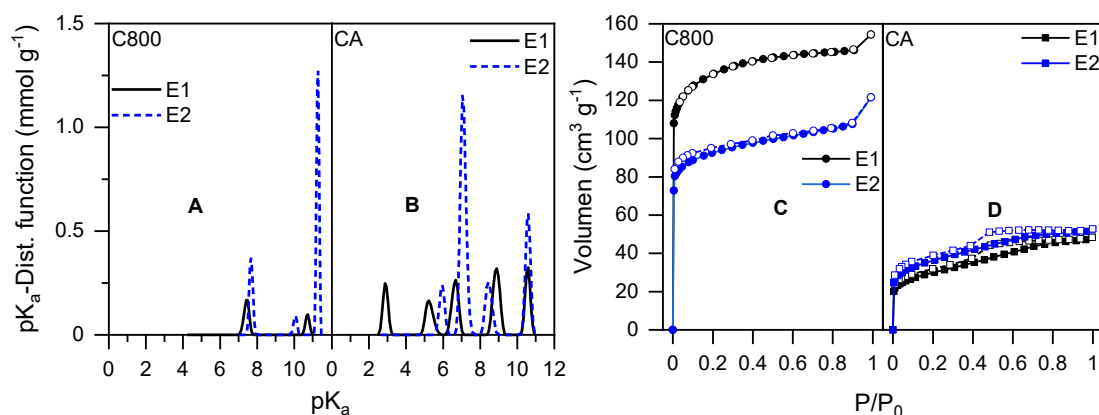
El contenido de celulosa y lignina de la FJ fue similar al de la jamaica sin procesar, 46 y 23% respectivamente, y el contenido de humedad y de materia inorgánica fueron bajos. Del análisis elemental se observó que el 98% corresponde a elementos volátiles y el resto a elementos pesados. Los termogramas mostraron las siguientes etapas: la deshidratación ( $T < 100\text{ }^{\circ}\text{C}$ ), la carbonización

primaria hasta 237 °C con pérdida de masa del 40%, la mayor pérdida ocurre a 326 °C con la degradación de los materiales lignocelulósicos y la carbonización de los materiales restantes a una temperatura mayor a 326 °C [5]. Las principales características de los carbones obtenidos se presentan en la Tabla 1. En los carbones activados con ácido fosfórico, se identificaron además otros grupos funcionales: ácidos fosfonos ( $pK_a$  3-4.5), fosfinas ( $pK_a$  3-6.5), ácidos fosfónicos ( $pK_a$  7-9), y amonio ( $pK_a$  4-5.5 y 9) (Figura 1A y B) [6].

**Tabla 1.** Características de muestras de carbón activado.

Carbón activado	$S_{BET}$ $m^2 g^{-1}$	Rendimiento, %	$pH_{pzc}$	Distribución de grupos funcionales, $mmol g^{-1}$ (%)		
				Carboxilo	Lactona	Fenol
C800 <sup>E1</sup>	501	23	5.4			0.09 (100)
C800 <sup>E2</sup>	353	24	5.6		0.09 (26)	0.25 (74)
CA <sup>E1</sup>	105	26	2.5	0.29 (52)	0.15 (28)	0.11 (20)
CA <sup>E2</sup>	127	43	2.6	0.09 (10)	0.55 (67)	0.2 (23)

Por FTIR las bandas más importantes fueron estiramientos C=O de ésteres, grupos carboxílicos, lactonas y cetonas. La flexión O-H perteneciente a los fenoles y el estiramiento C-O de compuestos como alcoholes o ésteres. También se encontraron bandas de los estiramientos de P-O-C en complejos de ésteres carbón-fosfato. Los carbones C800 muestran una isoterma tipo Ib, mientras que en CA se observa una isoterma tipo IVa, donde el lazo de histéresis se presenta en carbones con poros de un tamaño igual o mayor a 4 nm. El proceso de carbonización fue escalado hasta 10 veces en cantidad de masa, se mejoró el rendimiento y se disminuyó el costo de carbonización.



**Figura 1.** Distribución de grupos funcionales (A, B) e Isotermas de adsorción de nitrógeno (C, D). La letra E indica la escala a la que se obtuvo el carbón.

## Referencias

1. Yusuf, M. (2017) Agro-Industrial Waste Materials and their Recycled Value-Added Applications: Review. Handbook of Ecomaterials. 1–11.
2. Hernández, V., García, J. and Bueno, J.I. (2012) Lignocellulosic Precursors Used in the Elaboration of Activated Carbon. InTech. 20-38.
3. Molina-Sabio, M. and Rodríguez-Reinoso F. (2004) Role of chemical activation in the development of carbon porosity. Colloids Surf. A. 241, 15-25.



Asociación Mexicana de Adsorción

## Capítulo 1. Materiales carbonosos

4. Cid, O., Guerrero, J. A. (2012) Propiedades funcionales de la Jamaica (*Hibiscus Sabdariffa L.*). Temas selectos de Ingeniería de alimentos. 6, 47-63.
5. Benaddi, H., Bandosz, T. J., Jagiello, J., Schwarz, J. A., Rouzaud, J. N., Legras, D. and Béguin, F. (2000) Surface functionality and porosity of activated carbons obtained from chemical activation of wood. Carbon 38, 669-674.
6. Barkauskas, J. and Dervinyte, M. (2004) An investigation of the functional groups on the surface of activated carbons. J. Serb. Chem. Soc. 69, 363–375.

## Tratamiento de un carbón activado con plasma frío

P.R. Aldaba Lucio<sup>1</sup>, N.V. Pérez Aguilar<sup>1</sup>, R.I. Narro Céspedes<sup>1</sup>, E. Oyervides Muñoz<sup>1</sup>

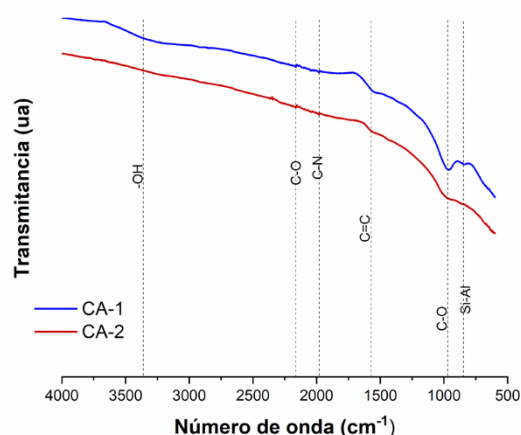
<sup>1</sup>Universidad Autónoma de Coahuila, Facultad de Ciencias Químicas, Maestría en Ciencia y Tecnología Química, Boulevard Venustiano Carranza y José Cárdenas Valdés, C.P. 25280, Saltillo, Coahuila, México

**Palabras Clave:** Carbón activado, Plasma, Modificación superficial.

El carbón activado es un material carbonoso, microcristalino, preparado por métodos de activación física o química para desarrollar porosidad e incrementar la superficie interna. Cerca del 60% de los carbones activados a nivel mundial se obtienen a partir de carbón mineral y se utilizan en aplicaciones como materiales funcionales en electrodos, capacitores, catalizadores y adsorbentes [1,2]. No obstante, la tecnología ha alcanzado su máximo auge en las últimas décadas por lo que se han incorporado diversas técnicas de modificación del carbón activado para aumentar la eficiencia de sus propiedades, ejemplo de ello ha sido el plasma.

El estado de plasma se alcanza cuando una parte de las partículas que lo componen alcanzan tanta energía como para que sea posible su ionización, liberando electrones. El plasma frío ha ganado interés para modificar la superficie de materiales porque es un proceso altamente confiable que no implica costos por eliminación y no genera vapor, el tratamiento es suave, rápido y modifica solo la superficie externa del material, conservando sus propiedades centrales [3]. En esta investigación se preparó un carbón activado con un método de pre-activación química y térmica que se identificó como CA-1; posteriormente, este carbón se sometió a un tratamiento con plasma para modificar su química superficial, la muestra resultante se nombró CA-2. Para caracterizar las propiedades de las dos muestras se utilizaron análisis por espectroscopia Infrarroja con transformada de Fourier en modo de Reflectancia Total Atenuada (FTIR-ATR), titulación de Boehm para cuantificar los grupos funcionales y también se determinó el punto de carga cero (pcc).

Después de la modificación con plasma, las muestras de carbón se analizaron con FTIR-ATR, los espectros se muestran en la Figura 1, las señales principales en CA-1 en  $3352\text{ cm}^{-1}$  sugieren la presencia de grupos hidroxilo (-OH), en  $2173\text{ cm}^{-1}$  se atribuyó al enlace C-O, en  $1969\text{ cm}^{-1}$  se presentó la tensión C-N, en  $1559\text{ cm}^{-1}$  se obtuvo una señal de baja intensidad que se asignó al enlace C=C, mientras que en  $964$  y  $839\text{ cm}^{-1}$  se observaron señales de enlaces C-O y Si-Al respectivamente. Por otra parte, en CA-2 las señales fueron semejantes, sin embargo, en esta última muestra se observó la ausencia de grupos hidroxilo (-OH) y las señales restantes corresponden al mismo caso que CA-1, pero con señales de menor intensidad, probablemente la atmósfera inerte con nitrógeno provocó la reducción de los grupos oxigenados superficiales que existían antes de la modificación con plasma.



**Figura 1.** Espectro FTIR-ATR del carbón mineral utilizado como precursor, CA1 y el carbón activado modificado con plasma, CA-2.

Por otra parte, el ensayo para medir el pH del punto de carga cero de cada muestra, mostró que para CA-1 fue de 7 y para CA-2 de 8.4, lo que significa que la carga neutra del material se desplazó hacia un valor alcalino, como resultado del tratamiento con el plasma. Este resultado se complementó con la determinación de los grupos funcionales por la técnicas de titulación de Boehm (Tabla 1), en la que se observó la reducción de la concentración de grupos ácidos de tipo carboxílico y el incremento de grupos lactónicos y fenólicos en el carbón tratado con plasma y atmósfera inerte de nitrógeno, aunque los sitios básicos totales también disminuyeron y los sitios ácidos totales se incrementaron.

**Tabla 1.** Titulaciones Boehm (CA-1 y CA-2).

Muestra	Sitios ácidos totales	Sitios básicos totales	Sitios carboxílicos	Sitios lactónicos	Sitios fenólicos
CA-1	$7.46 \times 10^{-4}$	$5.13 \times 10^{-3}$	$1.61 \times 10^{-5}$	$8.20 \times 10^{-7}$	$7.29 \times 10^{-4}$
CA-2	$8.86 \times 10^{-4}$	$4.66 \times 10^{-3}$	$1.55 \times 10^{-5}$	$9.27 \times 10^{-7}$	$8.70 \times 10^{-4}$

El plasma frío con atmósfera de nitrógeno es un tratamiento capaz de modificar la química de la superficie de un material de carbón activado, en estas condiciones los grupos oxigenados pueden reducirse y alterar sus propiedades fisicoquímicas, específicamente el punto de carga cero, lo que determinará su reactividad en soluciones acuosas. Pero además, este tipo de grupos ofrecerían una alternativa de reactividad química para una modificación química posterior del material, de una manera sencilla y sin la generación de residuos que requieran una disposición final especializada.

**Agradecimientos:** Al COECYT de Coahuila por el financiamiento a través del proyecto COAH-2021-C15-C115, al CONACYT por la beca de maestría No. 1038621.



## **Referencias**

1. Widiyastuti, W., Mahardika Fahrudin, Rois., N.M.I.P, Suari. (2020) Activated carbon nanofibers derived from coconut shell charcoal for dye removal application. *Advanced Powder Technology*, 31, 3267-3273.
2. Widiy, W., He, Yanga., L, Yang, L., Haoquan, H., Hua, D., Xiangfei, B. (2019) Effect of mineral in coal on preparation of activated carbon for methane decomposition to hydrogen. *Fuel*, 016-2361.
3. Dufay, M., Jimenez, M., Degoutin, S. (2020) Effect of Cold Plasma Treatment on Electrospun Nanofibers Properties: A Review. *Biomaterials*, 3, 4696-4716.



## Elucidación de los mecanismos fisicoquímicos presentes en la remoción de clorfenamina y ciprofloxacino sobre carbones activados

J.J. Salazar Rábago<sup>1</sup>, L.A. Cavazos Cuello<sup>1</sup>, C.B. García Reyes<sup>1</sup>, R. Ocampo Pérez<sup>2</sup>, N.E. Dávila Guzmán<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Universidad Autónoma de Nuevo León, Facultad de Ciencias Químicas, Departamento de Ingeniería Química y Ambiental. Av. Universidad, S/N, Cd. Universitaria, San Nicolás de los Garza, N.L: México, C.P. 66455.

<sup>2</sup>Centro de Investigación y Estudios de Posgrado, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Autónoma de San Luis Potosí, Av. Dr. M. Nava, San Luis Potosí, S.L.P., 78210, México.

**Palabras Clave:** Clorfenamina, ciprofloxacino, carbón activado, mecanismos fisicoquímicos.

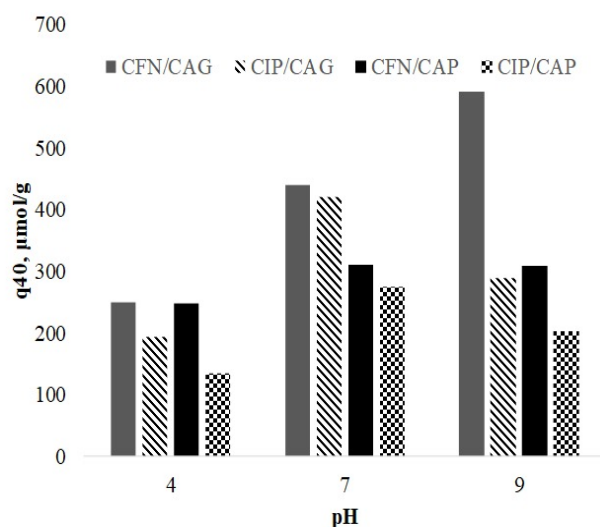
La contaminación del agua por fármacos surge debido a diversas actividades antropogénicas, su creciente detección en cuerpos de agua superficial ha impulsado el desarrollo de tecnologías especializadas en su remoción. Dentro de los fármacos que se han detectado en cuerpos de agua superficial se encuentran la clorfenamina (CFN) y el ciprofloxacino (CIP) los cuales se emplean ampliamente como antihistamínico y antibiótico, respectivamente. El consumo de ambos fármacos se ha asociado a daños renales, afectaciones al sistema endócrino e incluso efectos teratogénicos [1]. Contaminantes como los fármacos han sido removidos exitosamente a través de procesos de adsorción empleando diversos materiales [2, 3]. Sin embargo, en la mayoría de los casos no indagamos sobre los diversos mecanismos que se desarrollan en el proceso adsorptivo, es por ello, que en el presente trabajo se analizará la remoción de los fármacos CFN y CIP sobre dos carbones activados de diversa química superficial desde una perspectiva mecanística, para ello se evaluará el equilibrio de adsorción bajo diversas condiciones experimentales.

Los carbones activados (CAs) seleccionados fueron de geometría granular (CAG) y en forma de pellet cilíndrico (CAP), ambos fueron caracterizados texturalmente, empleando fisisorción de N<sub>2</sub>, y fisicoquímicamente, empleando diversos métodos potenciométricos para la cuantificación de sitios activos y el pH de punto de carga cero (pH<sub>pcc</sub>). La CFN y el CIP se cuantificaron mediante espectroscopía UV-Vis a 262 y 270 nm respectivamente. Los experimentos de equilibrio se llevaron a cabo en adsorbedores de lote, manteniendo pH, temperatura y agitación constante hasta alcanzar el equilibrio. La Tabla 1 desglosa la caracterización de los CAs empleados, denotando que el CAG y CAP presenta un carácter ácido y básico, respectivamente, según lo indica la cuantificación de los sitios activos, así como el pH<sub>pcc</sub>, los cuales se encuentran en torno a 2 y 10, respectivamente. Por otro lado, la caracterización textural reveló que ambos materiales presentan áreas específicas similares entorno a los 925 m<sup>2</sup>/g.

**Tabla 1.** Resultados de caracterización textural y fisicoquímica superficial de los CAs.

Carbón	Sitios ácidos totales, meq/L	Sitios básicos totales, meq/L	S <sub>BET</sub> , m <sup>2</sup> /g	pH <sub>pcc</sub>
CAG	1.50	0.30	940	2.75
CAP	0.13	1.8	911	10.48

Por otra parte, en la Figura 1 se presentan las capacidades de adsorción de los CAs a una concentración al equilibrio de 40  $\mu\text{mol/L}$  predichas con el modelo de Freundlich. En el caso de la remoción de los fármacos sobre el CAG se puede observar una tendencia a incrementar la cantidad removida de CFN conforme incrementa el pH, mientras que el CIP presenta un óptimo a pH 7. En el caso del material CAP este presentó, en general, una menor capacidad de remoción y una máxima capacidad de remoción a un pH neutro para ambos adsorbatos. Considerando las características fisicoquímicas de los adsorbatos y CAs, los resultados pueden relacionarse con mecanismos de apilamiento  $\pi$ - $\pi^*$ , interacciones electrostáticas de atracción-repulsión y en algunos casos posible quimisorción.



**Figura 1.** Efecto del pH sobre la capacidad de adsorción al equilibrio de CFN y CIP sobre los CAs.

La caracterización fisicoquímica superficial de los CAs seleccionados, junto con las consideraciones de las especies químicas formadas por los compuestos farmacéuticos bajo las diversas condiciones experimentales y los resultados obtenidos del equilibrio de adsorción han permitido dilucidar los diversos mecanismos fisicoquímicos desarrollados en el proceso de remoción. En el caso de la remoción de CFN y CIP sobre los materiales carbonosos seleccionados se han encontrado evidencias para proponer que los principales mecanismos asociados al proceso son las interacciones dispersivas del tipo  $\pi$ - $\pi^*$  así como interacciones electrostáticas de atracción-repulsión.

## Referencias

1. R. M. Galvin, "Contaminación emergente: sustancias prioritarias y preferentes, productos farmacéuticos, drogas de abuso, disruptores endócrinos, microplásticos y patógenos emergentes," pp. 66–77, 2017.
2. Xia, C., Lv, G., Mei, L., Song, K., Li, Z., Wang, X., Xing, X., & Xu, B. (2014). Removal of chlorpheniramine from water by birnessite. *Water, Air, and Soil Pollution*, 225(9). <https://doi.org/10.1007/s11270-014-2131-6>
3. Lin, C. H., Li, C. M., Chen, C. H., & Chen, W. H. (2019). Removal of chlorpheniramine and variations of nitrosamine formation potentials in municipal wastewaters by adsorption onto the GO-Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>. *Environmental Science and Pollution Research*, 26(20), 20701–20711. <https://doi.org/10.1007/s11356-019-05278-9>



## Oxidación de carbón activado con plasma para incrementar su capacidad de adsorción

M.N. Elías Zuñiga<sup>1</sup>, N.V. Pérez Aguilar<sup>1\*</sup>, E. Oyervides Muñoz<sup>1</sup>, M.A. García Lobato<sup>1</sup>, R.I. Narro Céspedes<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Universidad Autónoma de Coahuila, Facultad de Ciencias Químicas, Maestría en Ciencia y Tecnología Química. Boulevard Venustiano Carranza y José Cárdenas Valdés, CP 25280, Saltillo, Coahuila, México.

**Palabras Clave:** Carbón mineral, carbón activado, plasma.

El carbón mineral en el estado de Coahuila en México es uno de los recursos minerales no metálicos de mayor relevancia regional, actualmente se utiliza en la producción de energía eléctrica a través de su combustión, esto se ha reconocido como un mal necesario, porque es un proceso altamente contaminante debido a la emisión de gases de efecto invernadero. Ante la tendencia de eliminar el uso de combustibles fósiles en un futuro cercano, se buscan nuevas formas para su aprovechamiento y una alternativa es la producción de adsorbentes [1].

Es de especial interés investigar las condiciones en que el carbón de esta región puede ser procesado para obtener un material altamente poroso y con características y propiedades que permitan utilizarlo en la eliminación de contaminantes del agua, por ejemplo, colorantes catiónicos como el azul de metileno o incluso, metales pesados como el plomo. Para ello se propone utilizar una metodología de activación con un ácido y calentamiento para generar una estructura porosa [2], pero también se investiga el efecto del tratamiento de esta superficie con plasma, una técnica que es sencilla y simplifica el proceso de modificación porque no requiere el uso de reactivos químicos adicionales [3].

El objetivo de esta investigación es evaluar las propiedades físicas, químicas y de textura que pueden obtenerse con un carbón sub-bituminoso cuando se activa con ácido fosfórico y calentamiento a alta temperatura, y su posterior modificación química con plasma para incrementar los grupos oxidados en su superficie, de manera que tenga una alta capacidad para la adsorción de contaminantes catiónicos.

Se utilizó una muestra de carbón sub-bituminoso como precursor (CST) y un carbón activado de Sigma-Aldrich como material de referencia (CR). El CST se impregnó con ácido fosfórico, posteriormente, se calentó hasta 800°C durante 1 h en un horno tubular, utilizando atmósfera de aire (CHA). A esta muestra se le realizó un tratamiento en un reactor de plasma con atmósfera de aire para incrementar la oxidación de su superficie (CHAP). Para comparar las propiedades de estas muestras se realizó la caracterización por FTIR, SEM, densidad aparente y adsorción de azul de metileno en solución acuosa. La densidad aparente se presenta en la Tabla 1, en la que se observó que en la muestra CHA fue menor que en el CST, probablemente por la eliminación de compuestos de bajo y mediano peso molecular, pero en comparación con CR, registró mayor densidad. Sin embargo, en la muestra de CHAP la densidad aumentó, esto pudo ocurrir siempre y cuando los poros

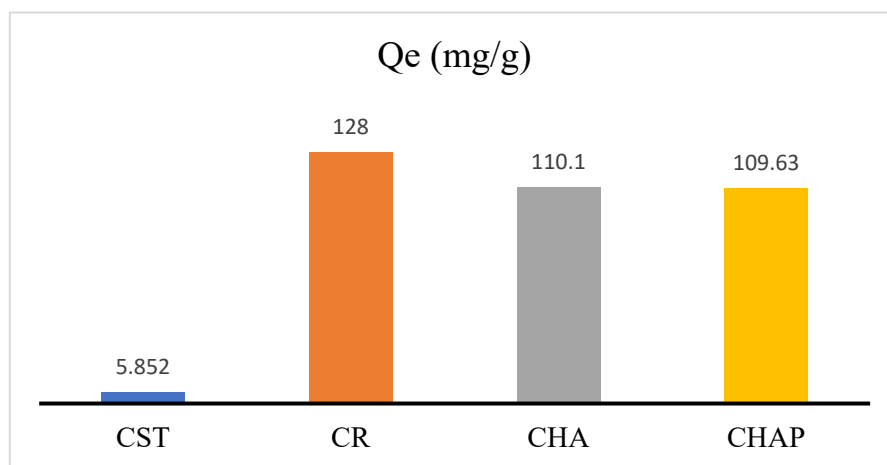
formados se hubieran destruido por acción del plasma, lo que pudiera sugerir que el material carbonoso tendría baja resistencia mecánica.

**Tabla 1.** Densidad aparente de los carbones

Muestra	CST	CR	CHA	CHAP
g/cm <sup>3</sup>	0.630	0.374	0.435	0.635

Otro ensayo que permitió identificar la modificación de las propiedades fisicoquímicas fue el pH del punto de lodo o slurry point, ya que en CST fue de 5, y el CHA 4.2, un valor que sugiere que se trata de un carbón ácido, pero en CHAP este valor fue de 6.5, por lo que es probable que parte de los grupos superficiales ácidos se hayan destruido durante el tratamiento con plasma.

Finalmente, se realizó la adsorción de azul de metileno en solución acuosa en concentración inicial de 150 mg/L. El CST tuvo la menor capacidad de adsorción, registró 5.8 mg/g cerca de 20 veces menor que el CHA y CHAP, que reportaron 110 y 109.6 mg/g respectivamente, estos valores fueron poco menores que el CR, que registró 128 mg/g.



**Figura 2.** Capacidad de adsorción de azul de metileno en solución acuosa a pH 5 para los carbones activados preparados a partir de un carbón mineral sub-bituminoso

La adsorción con azul de metileno sugiere que el tratamiento con ácido fosfórico y calentamiento permite desarrollar una estructura con mesoporos en el CHA y le dan capacidad para la adsorción del colorante catiónico azul de metileno. Es probable que las condiciones del tratamiento de activación puedan optimizarse y tener mayor porosidad y capacidad de adsorción. En cuanto al CHAP,

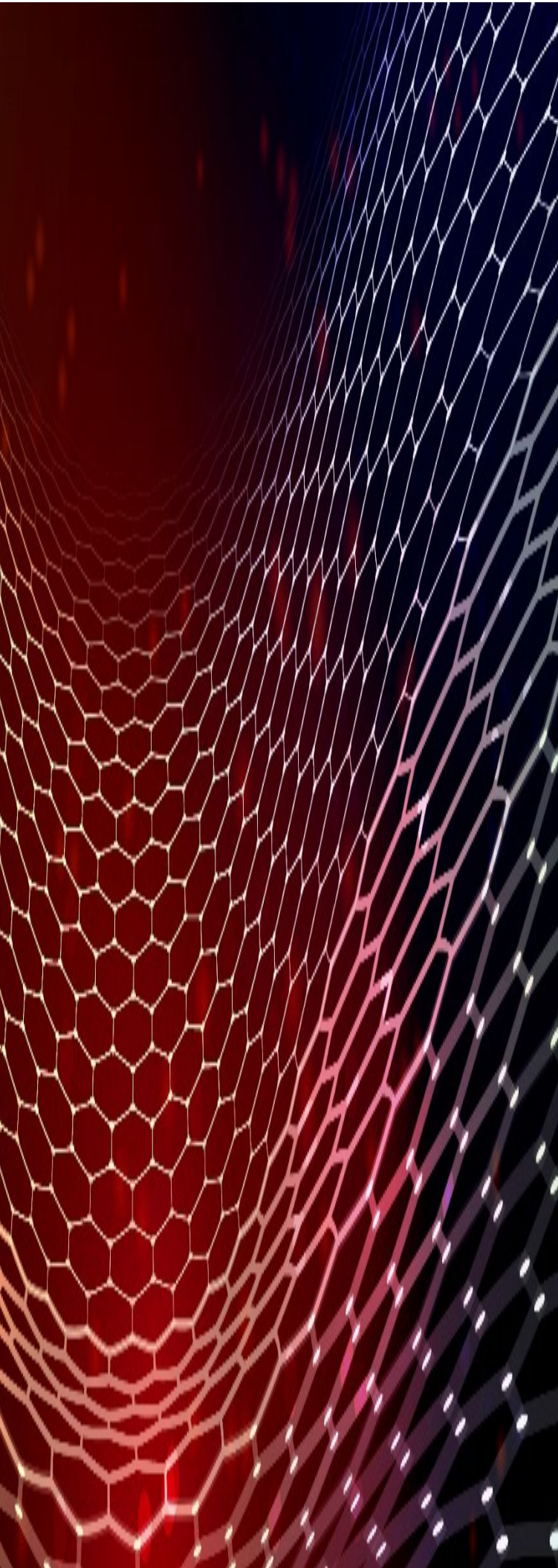


aparentemente el tratamiento con plasma no incrementó de manera significativa la capacidad de adsorción del carbón.

El carbón sub-bituminoso puede procesarse con un método químico y térmico para la obtención de un material con una capacidad de adsorción similar a la de un carbón activado de grado analítico, aunque las condiciones de procesamiento podrían optimizarse.

## Referencias

1. Secretaría de Energía. (2017). Perfil de mercado de carbón. 1–6. [https://www.gob.mx/cms/uploads/attachment/file/287796/Perfil\\_Carbon\\_2017.pdf](https://www.gob.mx/cms/uploads/attachment/file/287796/Perfil_Carbon_2017.pdf)
2. Rojas-Morales, J. L., Gutiérrez-González, E. C., & Colina-Andrade, G. de J. (2016). Obtención y caracterización de carbón activado obtenido de lodos de plantas de tratamiento de agua residual de una industria avícola. *Ingeniería, Investigación y Tecnología*, 17(4), 453–462. <https://doi.org/10.1016/j.riit.2016.11.005>
3. Patel, H. (2020). Batch and continuous fixed bed adsorption of heavy metals removal using activated charcoal from neem (*Azadirachta indica*) leaf powder. *Scientific Reports*, 10(1), 1–12. <https://doi.org/10.1038/s41598-020-72583-6>
4. Surip, S. N., Abdulhameed, A. S., Garba, Z. N., Syed-Hassan, S. S. A., Ismail, K., & Jawad, A. H. (2020). H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>-treated Malaysian low rank coal for methylene blue dye decolorization and cod reduction: Optimization of adsorption and mechanism study. *Surfaces and Interfaces*, 21(July), 100641. <https://doi.org/10.1016/j.surfin.2020.100641>



**CAPÍTULO II.**  
**MATERIALES**  
**DIVERSOS**

## Modificación de una bentonita con nanopartículas de Fe-Cu para la remoción de verde malaquita en solución acuosa

A. Blanco Flores<sup>1</sup>, H. P. Toledo Jaldin<sup>1</sup>, D. M. Ávila Márquez<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Tecnológico de Estudios Superiores de Tianguistenco, Carretera Tenango, Santiago - La Marquesa 22, CP 52650 Santiago Tilapa, México.

<sup>2</sup>Universidad Autónoma de San Luis Potosí, Instituto de Metalurgia, Av. Sierra Leona 550, Lomas de San Luis CP 78210 San Luis Potosí, México

**Palabras Clave:** Bentonita, nanopartículas, verde malaquita.

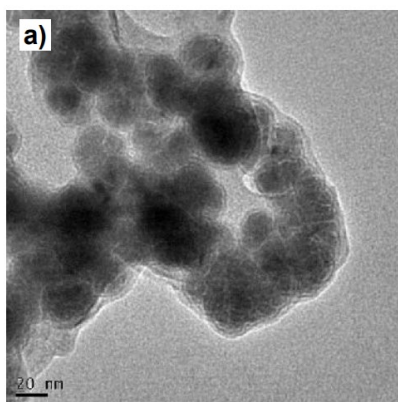
El incremento de la población y de sus actividades industriales provoca la generación de grandes volúmenes de residuales líquidos. En las naciones en vías de desarrollo un 70% de los residuos que se generan en las fábricas se vierten al agua sin ningún tipo de tratamiento previo, contaminando así los recursos hídricos disponibles [1]. En la mayoría de estos aparecen colorantes, como el verde malaquita usado en las industrias textil, acuífera y agroquímica. Este colorante es mutagénico, cancerígeno y causa microtoxicidad en los peces que es transferida a los humanos a través de la cadena alimenticia [2]. En el tratamiento de aguas con colorantes se potencia el método de adsorción. En la actualidad se recurre al empleo de minerales y residuos sólidos ya que disminuyen el costo del proceso en sí. Al usar nanopartículas metálicas depositadas en materiales arcilloso y con propiedades magnéticas, los procesos de separación son favorecidos. El objetivo de la investigación fue evaluar la capacidad de remoción de verde malaquita por una bentonita modificada con nanopartículas de Fe-Cu, explicando el mecanismo de eliminación del colorante presente en solución acuosa

El material arcilloso (BEN) fue lavado con solución de HCl 0.1 M: Se pusieron en contacto 10 g de material con 250 mL de solución ácida, agitando por 24h. Transcurrido este tiempo se separaron las fases y se dejó secando en una estufa a 100 °C por 24 h. La obtención de los nanocompositos se realizó in situ siguiendo el método químico de reducción de sales metálicas, considerando los resultados obtenidos en el diseño experimental. Los nanocompositos se obtuvieron utilizando los materiales soporte sin previo tratamiento (N) y con pretratamiento (L). La preparación de los nanocompositos se llevó a cabo mezclando 2.0 g del material soporte, en 100 mL de la solución bimetálica de Fe-Cu 75-25 % a partir de sus precursores y con la misma concentración que para la síntesis de las nanopartículas. La mezcla se agitó por 1 h a 300 rpm evitando la formación de vórtices. Transcurrido el tiempo de contacto establecido, se ajustó el pH a un valor de 7 adicionando gotas de una solución 0.5 M de NaOH. Para la reducción de las partículas bimetálicas, se adicionó 10 mL de una solución de NaBH<sub>4</sub> a 0.08 M. Una vez que cesó el burbujeo de la mezcla provocado por la adición del agente reductor, esta se filtró al vacío, se lavó con abundante agua destilada y acetona para eliminar las impurezas, residuos y desplazar el agua remanente. Por último, los nanocompositos obtenidos se secaron a 60 °C durante 24 h y se almacenaron en una desecadora.

Para llevar a cabo la cinética de adsorción, se prepararon una serie de frascos, en los cuales se colocaron 10 mg de material con 10 mL de una solución de 50 mg/L del colorante, a diferentes

tiempos de contacto. Las pruebas de equilibrio se realizaron con 10 mL de cada solución de concentración inicial diferente, en contacto con 10 mg de cada material durante el tiempo de equilibrio determinado en la cinética de adsorción. Una vez transcurrido ese tiempo, se separaron las fases y se determinó la concentración del colorante adsorbido (mg/g). Todos los experimentos se realizaron por duplicado, la agitación fue de 120 rpm, la temperatura ambiente y para cada caso los valores de pH después del contacto se midieron.

La difracción de rayos X en todos los nanocompositos mostraron la presencia de Fe formando varias especies. De acuerdo al TEM (Figura 1), todas las nanopartículas están conectadas entre sí formando aglomeraciones de las mismas. Esto quizás se deba a que la concentración de los precursores fue mayor que la cantidad de estas que debieron ocupar los poros estrechos del material soporte. El histograma obtenido para el nanocomposito, permitieron encontrar que el tamaño promedio de las nanopartículas fue de 10 nm para las que tienen forma esferoidal. La composición química del nanocomposito fue obtenida por mapeo químico y perfil de composición lineal desde la técnica de STEM. En este se confirma la presencia de nanopartículas de Fe-Cu en forma de nanoaleación. Los resultados del análisis elemental por EDS-TEM confirman la presencia de Fe y Cu. Las imágenes de SEM evidenciaron que, aunque se hayan soportado las nanopartículas la morfología no cambió mucho (Figura 2).



**Figura 1.** TEM de nanopartículas soportadas en la bentonita

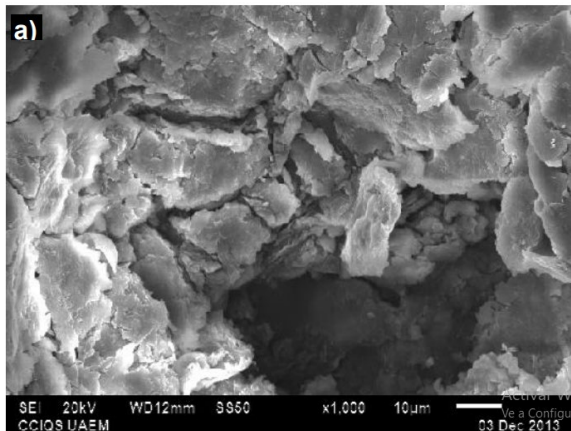


Figura 2. SEM del compuesto de bentonita con las nanopartículas

Para el nanocompuesto el proceso tuvo lugar a través de una quimisorción porque se observó mejor ajuste con el modelo de pseudo segundo orden. El equilibrio se alcanzó en 40 min. Al aplicar los modelos de isoterma de adsorción se encontró que el modelo que mejor ajustó fue el modelo de Langmuir-Freundlich (Figura 3). Esto podría sugerir que la adsorción ocurrió por varios mecanismos o combinación de procesos. El valor de la capacidad máxima de adsorción que se alcanzó con el material fue de 214.91 mg/g. Nuevamente, no es posible interpretar que existe relación directa entre la intensidad de la atracción adsorbato-adsorbente y la masa removida. En el nanocompuesto la intensidad de la adsorción fue baja, comparada con otros. Para el nanocompuesto el proceso de remoción del colorante se clasificó como favorable por el valor de  $1/n$  del modelo de Freundlich.

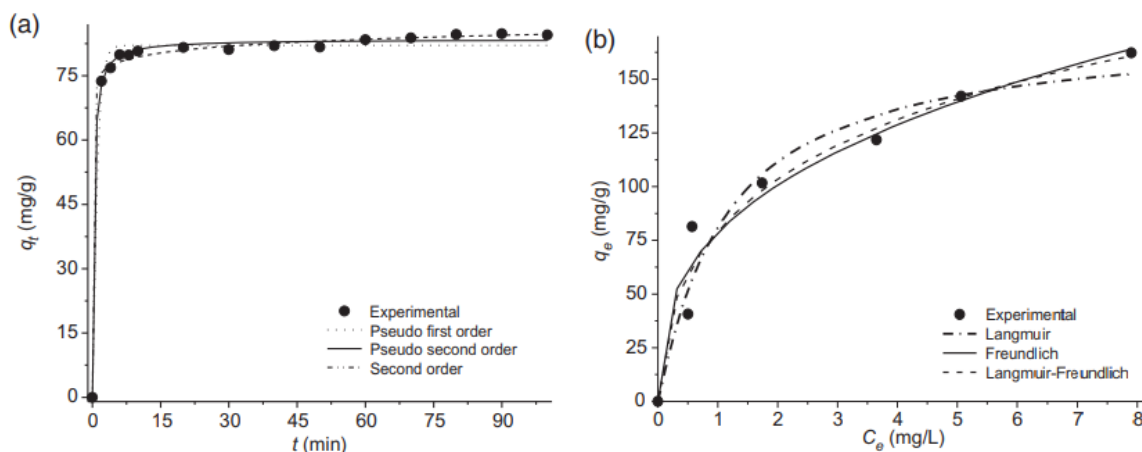


Figura 3. Curvas de adsorción e isothermas con los modelos matemáticos de ajuste correspondientes.

## Referencias

1. Departamento de Asuntos Económicos y Sociales de las Naciones Unidas (ONU- DAES). Agua y ciudades. Disponible en: [http://www.un.org/spanish/waterforlifedecade/water\\_cities.shtml](http://www.un.org/spanish/waterforlifedecade/water_cities.shtml), marzo. Accedido: 15 de septiembre 2019
2. Portela, A. 2012. Principal residuo en acuicultura: Verde malaquita, situación legal. Disponible en: [http://www.ipacuicultura.com/edicion\\_impresa/21/48/articulo\\_tecnico/1075/principal\\_resi\\_duo\\_en\\_acuicultura\\_verde\\_malaquita\\_situacion\\_legal-p1.html](http://www.ipacuicultura.com/edicion_impresa/21/48/articulo_tecnico/1075/principal_resi_duo_en_acuicultura_verde_malaquita_situacion_legal-p1.html). Fecha de ingreso: 3 de enero 2020



## Adsorción de diclofenaco, sulfametoxazol, trimetoprima y clorfenamina en solución acuosa sobre bentonita natural y organobentonita. Efecto de la naturaleza superficial y las propiedades fisicoquímicas

U. Ortiz Ramos<sup>1</sup>, R. Leyva Ramos<sup>1</sup>, E. Mendoza Mendoza<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Centro de Investigación y Estudios de Posgrado, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Autónoma de San Luis Potosí (UASLP), Dr. Manuel Nava 6, 78210 San Luis Potosí, S.L.P., México.

<sup>2</sup>Cátedras-CONACYT, México.

**Palabras Clave:** Adsorción, arcillas, fármacos.

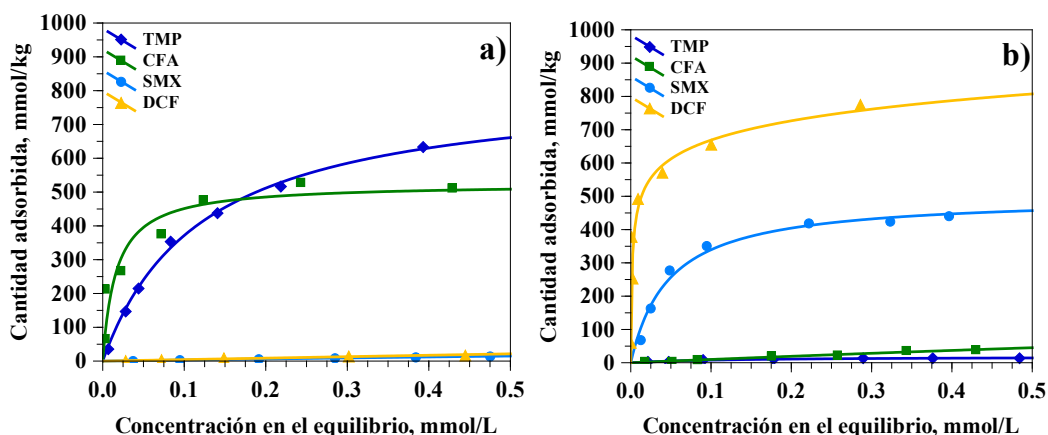
Hoy en día, se ha generado una gran preocupación debido a la detección de contaminantes farmacéuticos en fuentes de agua. El diclofenaco (DCF), sulfametoxazol (SMX), trimetoprima (TMP) y clorfenamina (CFA) son fármacos muy eficaces que han sido prescritos por décadas para el tratamiento de enfermedades. Esto ha incrementado sus niveles en aguas superficiales y en efluentes de plantas de tratamiento de aguas residuales en concentraciones de 0-48  $\mu\text{g/L}$  y 0.01-70  $\mu\text{g/L}$ , respectivamente [1,2], representando un serio riesgo para la salud humana. La adsorción es una técnica prometedora que permite la eliminación de contaminantes presentes en solución acuosa. La bentonita (Bent) es una arcilla natural compuesta por montmorillonita que pertenece al grupo de esmectitas, posee una morfología trilaminar y capacidad de hinchamiento e intercambio catiónico. La carga negativa de la arcilla es balanceada por cationes interlaminares ( $\text{Na}^+$ ,  $\text{Ca}^{2+}$ ,  $\text{Mg}^{2+}$ ,  $\text{K}^+$ ) que ocasionan que la arcilla sea hidrofílica y provoca bajas capacidades de adsorción hacia algunos compuestos orgánicos. La organobentonita (OBent) es un adsorbente novedoso sintetizado a partir de la adsorción de surfactantes sobre la superficie de Bent, que modifica la naturaleza de la superficie de la arcilla de hidrofílica a hidrofóbica y organofílica, elevando las capacidades de adsorción hacia ciertos compuestos farmacéuticos.

En estudios anteriores se ha encontrado que la capacidad de OBent para adsorber de fármacos se incrementó, y en otros estudios se han reportado que las capacidades para adsorber algunos fármacos disminuyen al modificar la naturaleza superficial de Bent. Por lo anterior, y debido a que no se han realizado trabajos que analicen detalladamente, y de forma simultánea las interacciones de fármacos en Bent y OBent, el objetivo de este trabajo es investigar los factores que influyen la adsorción de fármacos sobre Bent y OBent, estudiando el efecto de la naturaleza superficial y las propiedades fisicoquímicas de DCF, SMX, TMP y CFA.

La organoarcilla (OBent) se sintetizó adsorbiendo el surfactante catiónico bromuro de hexadeciltrimetilamonio (HDTMA) sobre Bent. Las arcillas Bent y OBent se caracterizaron por las técnicas de DRX, FT-IR, TGA, fisisorción de  $\text{N}_2$  y potencial Zeta. La dependencia de la capacidad de adsorción de Bent y OBent hacia los fármacos se evaluó a través del estudio detallado de los efectos del pH, fuerza iónica y temperatura de la solución, también se analizó la reversibilidad del proceso de adsorción.

La caracterización de Bent y OBent mostró que la adsorción de HDTMA ocurrió en el espacio interlaminar y en la superficie externa de la arcilla. La distancia basal correspondiente al plano (001) incrementó desde 1.50 hasta 1.94 nm y su área superficial específica disminuyó de 44.5 hasta 5.2 m<sup>2</sup>/g. Además, OBent mostró una distribución de carga superficial positiva en todo el intervalo de pH demostrando que la presencia de HDTMA modificó considerablemente la naturaleza química y superficial de Bent.

Las isothermas de adsorción de DCF, SMX, TMP y CFA sobre Bent y OBent a pH = 6 y T = 25 °C se presentan en la Figura 1. A una concentración en el equilibrio de 0.4 mmol/L, Bent presentó elevadas capacidades para adsorber TMP y CFA, de 630.4 y 504.5 mmol/kg, respectivamente, y nulas capacidades de adsorción por DCF y SMX. Por el contrario, al modificar la naturaleza superficial de Bent, OBent mostró un incremento importante en la capacidad para adsorber DCF y SMX de 787.2 y 447.1 mmol/kg, respectivamente. No obstante, las capacidades de adsorción de TMP y CFA disminuyeron significativamente posterior a la modificación.



**Figura 1.** Isothermas de adsorción de SMX, DCF, TMP y CFA sobre a) Bent y b) OBent a pH = 6 y T = 25°C. Las líneas representan el modelo de isoterma de adsorción que mejor predice los datos.

Los resultados mostraron que la adsorción de TMP y CFA sobre Bent ocurrió en la superficie externa y en el espacio interlaminar, y mecanismos físicos y químicos controlan la adsorción. Las distancias basales (001) se incrementaron de acuerdo con los tamaños moleculares de TMP y CFA. La elevada capacidad de adsorción está relacionada con el intercambio catiónico entre los cationes interlaminares, principalmente Ca<sup>2+</sup>, y las especies catiónicas de TMP<sup>+</sup> y CFA<sup>+</sup>, así como las atracciones electrostáticas entre la carga negativa de Bent y TMP<sup>+</sup> y CFA<sup>+</sup>. Por el contrario, la adsorción de DCF y SMX en OBent se llevó a cabo sobre la superficie externa y a través de mecanismos físicos. La partición debido a la interacción hidrofóbica está presente por la naturaleza no polar e hidrofobicidad de DCF y SMX y las cadenas de HDTMA. También, las atracciones electrostáticas entre las especies aniónicas de DCF y SMX y la superficie cargada positivamente de OBent juegan un papel fundamental en la capacidad de adsorción. La disminución en las capacidades de adsorción de CFA y TMP en OBent se ha atribuido a la repulsión electrostática entre la carga positiva de OBent y las especies catiónicas, así como a la ausencia del carácter hidrofílico de Bent por la inexistencia de los cationes interlaminares.



En conclusión, las capacidades de adsorción de DCF, SMX, TMP y CFA sobre Bent y OBent son afectadas por la naturaleza superficial y arreglo estructural de la arcilla, la capacidad de hinchamiento, el tamaño molecular y las propiedades fisicoquímicas de los fármacos. Los efectos de pH, temperatura, fuerza iónica y reversibilidad revelaron la presencia de mecanismos de adsorción electrostáticos. Además, mostraron que la adsorción es endotérmica y parcialmente reversible, confirmando que los mecanismos de adsorción pueden ser físicos y químicos.

## **Referencias**

1. Martínez-Costa, J.I., Maldonado-Rubio, M.I., Leyva-Ramos, R. (2020). Degradation of emerging contaminants diclofenac, sulfamethoxazole, trimethoprim and carbamazepine by bentonite and vermiculite at a pilot solar compound parabolic collector. *Catalysis Today* 341, 26-36.
2. Mar-Ortiz, A.F., Salazar-Rábago, J.J., Sánchez-Polo, M., Rozalen, M., Cerino-Córdova, F.J., Loredocancino, M. (2020). Photodegradation of antihistamine chlorpheniramine using a novel iron-incorporated carbon material and solar radiation. *Environmental Science Water Research Technology* 6(9), 2607-2618.

## Síntesis de nanocompuestos basados en oxioduro de bismuto (BiOI) empleados en la adsorción de compuestos orgánicos en solución acuosa

C. Flores Cardona<sup>1</sup>, R. Leyva Ramos<sup>1</sup>, E. Mendoza Mendoza<sup>1, 2, 3</sup>

<sup>1</sup>Centro de Investigación y Estudios de Posgrado, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Autónoma de San Luis Potosí.

<sup>2</sup>Centro de Investigación en Ciencias de la Salud y Biomedicina, Universidad Autónoma de San Luis Potosí

<sup>3</sup>Cátedras CONACYT

**Palabras Clave:** Fármacos, colorantes, BiOI.

El agua es fundamental para la vida de todos los seres vivos. De acuerdo con la ONU, más de 40 % de la población es afectada por el acceso a este vital líquido [1]. El consumo de diversos compuestos químicos en las actividades antropogénicas genera contaminantes farmacéuticos como tetraciclina (TC), y colorantes como la rodamina B (RhB). Por lo anterior, se han utilizado diversas técnicas para eliminación, entre las que destaca la adsorción. En el presente trabajo se sintetizaron nanocompuestos (NCs) basados en BiOI (N-G/BiOI, Ag/BiOI, Ag/N-G/BiOI) y se estudió su capacidad para adsorber de TC y RhB. Se sintetizaron cuatro NCs: NC 1. BiOI, NC 2. N-G/BiOI 3% peso, NC 3. Ag/BiOI 1.5%, y NC 4. Ag/N-G/BiOI. Los NCs se sintetizaron usando etilenglicol para disolver  $\text{Bi}(\text{NO}_3)_3$  (solución A) y KI (solución B), que fueron mezcladas (solución C) y colocadas dentro de un recipiente de PTFE para someterse a un tratamiento térmico a 120 °C por 12 h. Posteriormente, se lavaron en agua desionizada (DI) y etanol, y el NC (BiOI) se secó a 60 °C 24 h. La deposición de Ag se realizó por fotoreducción en DI y metanol, usando LEDs blancos, Ag/BiOI. Las partículas de grafeno dopado con nitrógeno (N-G) se prepararon por un método hidrotermal, a partir de una solución de glucosa, CTAB e hidróxido de amonio y depositada en un recipiente de PPL/autoclave y sometida a 250 °C por 4 h. En seguida se realizaron los lavados con DI y secado a 60 °C durante 64 h. El N-G/BiOI se obtuvo de manera análoga a BiOI, pero adicionando el N-G en la solución A. Finalmente, para el Ag/N-G/BiOI se usó 1 g de N-G/BiOI y se realizó la fotodeposición de Ag como en el Ag/BiOI.

El agua es fundamental para la vida de todos los seres vivos. De acuerdo con la ONU, más de 40 % de la población es afectada por el acceso a este vital líquido [1]. El consumo de diversos compuestos químicos en las actividades antropogénicas genera contaminantes farmacéuticos como tetraciclina (TC), y colorantes como la rodamina B (RhB). Por lo anterior, se han utilizado diversas técnicas para eliminación, entre las que destaca la adsorción. En el presente trabajo se sintetizaron nanocompuestos (NCs) basados en BiOI (N-G/BiOI, Ag/BiOI, Ag/N-G/BiOI) y se estudió su capacidad para adsorber de TC y RhB.

Se sintetizaron cuatro NCs: NC 1. BiOI, NC 2. N-G/BiOI 3% peso, NC 3. Ag/BiOI 1.5%, y NC 4. Ag/N-G/BiOI. Los NCs se sintetizaron usando etilenglicol para disolver  $\text{Bi}(\text{NO}_3)_3$  (solución A) y KI (solución B), que fueron mezcladas (solución C) y colocadas dentro de un recipiente de PTFE para someterse a un tratamiento térmico a 120 °C por 12 h. Posteriormente, se lavaron en agua desionizada (DI) y etanol, y el NC (BiOI) se secó a 60 °C 24 h. La deposición de Ag se realizó por fotoreducción en DI y metanol, usando LEDs blancos, Ag/BiOI. Las partículas de grafeno dopado con nitrógeno (N-G) se prepararon por un método hidrotermal, a partir de una solución de glucosa, CTAB e

hidróxido de amonio y depositada en un recipiente de PPL/autoclave y sometida a 250 °C por 4 h. En seguida se realizaron los lavados con DI y secado a 60 °C durante 64 h. El N-G/BiOI se obtuvo de manera análoga a BiOI, pero adicionando el N-G en la solución A. Finalmente, para el Ag/N-G/BiOI se usó 1 g de N-G/BiOI y se realizó la fotodeposición de Ag como en el Ag/BiOI. Los NCs se caracterizaron por las técnicas de Difracción de Rayos X (DRX), fisisorción de N<sub>2</sub> y potencial Z. Los resultados de DRX se presentan en la Figura 1, en que se incorporó el estándar de BiOI. En los difractogramas experimentales se confirmó la existencia de las reflexiones BiOI, sin que se observen reflexiones adicionales.

Los datos de las propiedades de textura se concentraron en la Tabla 1 y las isothermas de adsorción-desorción de N<sub>2</sub> sobre tres NCs se grafican en la Figura 3. Las isothermas son del tipo son tipo IIb con lazo de histéresis tipo H3, que de acuerdo con la clasificación de la IUPAC [2] es característico de materiales mesoporosos. El área superficial ( $S_{BET}$ ) de los NCs fue de 62.82, 60.22 y 57.91 para BiOI, N-G/BiOI y Ag/BiOI, respectivamente. El diámetro promedio de poro en BiOI resultó de 8.65 nm, mientras que el de N-G/BiOI fue de 9.01 nm, En el caso de Ag/BiOI, el diámetro promedio aumentó a 9.94 nm. La distribución del potencial Zeta de los cuatro NCs en el intervalo de pH de 2 a 12 se exhibe en la Figura 2, y observa que el punto isoeléctrico ( $pH_{PIE}$ ) de N-G/BiOI fue 2.3, mientras que el  $pH_{PIE}$  de BiOI, Ag/BiOI y Ag/N-G/BiOI es menor de  $pH = 2$ , siendo la carga superficial de los NCs negativa para todos los valores de pH analizados. Los datos experimentales del equilibrio de adsorción de RhB sobre los NCs fueron interpretados por los modelos de isothermas de adsorción de Freundlich, Langmuir y Redlich-Peterson. La determinación de los parámetros que mejor ajustaron los datos se realizó empleando una función de optimización por mínimos cuadrados. Para el caso de las isothermas de adsorción de RhB, el modelo que presentó el mejor ajuste fue el de Freundlich, mientras que para la adsorción de TC resultó el de Redlich-Peterson. Los datos experimentales del equilibrio de adsorción se enlistan en la Tabla 2, y los valores de las constantes de las isothermas de adsorción de adsorción de RhB y TC sobre los cuatro NCs se muestran en la Tabla 2 y 3.

Cuatro NCs basados en BiOI se prepararon por medio de síntesis solvotermal. El análisis de XRD confirmó la presencia de la fase BiOI en los NCs. Los NCs sintetizados mostraron cargas superficiales negativas en el intervalo de pH analizado, mientras que el  $pH_{PIE}$  en N-G/BiOI fue de 2.3. Se encontró que los tres NCs sintetizados son mesoporosos, que el área el  $S_{BET}$  disminuyó al adicionar N-G y Ag al BiOI. Además, el tamaño de poro aumentó ligeramente desde 8.65 hasta 9.94 nm. Los NCs sintetizados presentaron capacidades muy similares entre ellos, de 26 mg/g para RhB y 83-86 mg/g para TC.

**Tabla 1.** Propiedades de textura de NCs preparados.

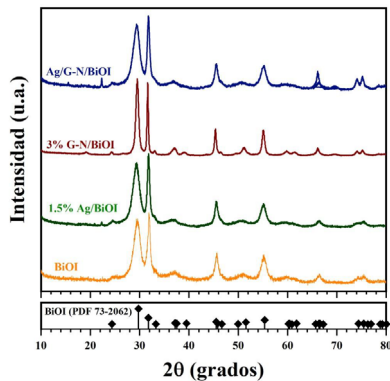
Material	Área específica, $S_{BET}$ (m <sup>2</sup> /g)	Volumen de poro, $V_p$ (cm <sup>3</sup> /g)	Diámetro promedio de poro, $D_p$ (nm)
BiOI	63	0.136	8.7
N-G/BiOI	60	0.136	9.0
Ag/BiOI	58	0.144	9.9

**Tabla 2.** Datos experimentales del equilibrio de adsorción de RhB sobre los cuatro NCs en solución acuosa a pH = 7, I = 0.01 N y T = 25 °C.

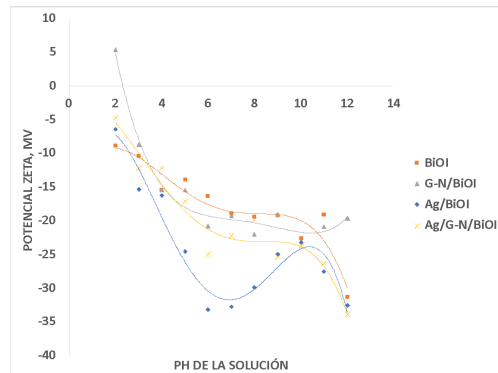
Ci (mg/L)	BIOI		N-G/BIOI		Ag/BIOI		Ag/N-G/BIOI	
	Ce (mg/L)	q (mg/g)	Ce (mg/L)	q (mg/g)	Ce (mg/L)	q (mg/g)	Ce (mg/L)	q (mg/g)
15	0.04	11.44	0.02	11.43	0.15	11.31	0.13	11.29
20	0.21	16.04	0.20	16.11	0.42	15.90	0.42	15.87
25	0.47	18.92	0.47	18.99	0.94	18.51	0.94	18.62
30	1.34	24.09	1.35	23.99	1.91	23.45	1.51	23.86
35	3.47	26.69	3.63	26.56	4.39	25.96	3.67	26.53

**Tabla 3.** Datos experimentales del equilibrio de adsorción de TC sobre los cuatro NCs en solución acuosa a pH = 5, I = 0.01 N y T = 25 °C.

Ci (mg/L)	BIOI		N-G/BIOI		Ag/BIOI		Ag/N-G/BIOI	
	Ce (mg/L)	q (mg/g)	Ce (mg/L)	q (mg/g)	Ce (mg/L)	q (mg/g)	Ce (mg/L)	q (mg/g)
15	0.07	11.89	0.04	11.91	0.07	11.91	0.11	11.84
45	0.51	36.21	0.51	36.36	0.95	35.93	2.12	35.08
60	2.15	46.01	2.37	45.93	2.62	45.73	2.43	45.88
90	14.90	60.53	14.96	60.48	17.19	58.34	20.49	55.94
120	33.87	68.83	32.33	69.92	41.56	62.56	43.45	61.30
180	83.96	76.88	85.22	75.57	88.04	73.61	88.67	72.97
250	144.89	84.92	143.00	86.43	147.40	82.91	145.20	84.67



**Figura 1.** Difractogramas de rayos-X de los NCs preparados.



**Figura 2.** Distribución del potencial Zeta de los NCs preparados. Las líneas representan el ajuste polinomial de los datos.

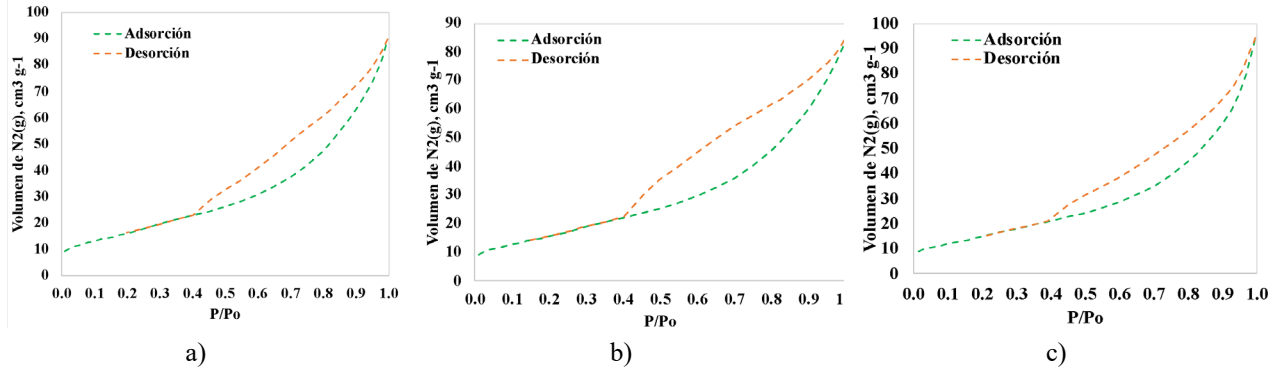


Figura 3. Isotermas de adsorción-desorción de a) BIOI, b) N-G/BIOI y c) Ag/BIOI

## Referencias

1. ONU. (2015). Agua y saneamiento. Desarrollo Sostenible. <https://www.un.org/sustainabledevelopment/es/water-and-sanitation/>
2. Sing, K. S. W. (1985). Reporting physisorption data for gas/solid systems with special reference to the determination of surface area and porosity. *Pure Appl. Chem.*, 54(11), 2201–2218.

## Síntesis de armazones organometálicos, su potencial aplicación en procesos de adsorción de alcoholes

N. Tiempos-Flores<sup>1</sup>, A.A. Rico-Barragán<sup>1</sup>, M. Loredó-Cancino<sup>1</sup>, J.J. Salazar-Rabago<sup>1</sup>, E. Hernández-Fernández<sup>1</sup>, O. Arillo Flores<sup>2</sup>, D.J. Michaelis<sup>3</sup>, N.E. Davila-Guzman<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup>Universidad Autónoma de Nuevo León, Facultad de Ciencias Químicas, Pedro de Alba s/n, Ciudad Universitaria, 66455, San Nicolás de los Garza, Nuevo León, México.

<sup>2</sup>Universidad Autónoma de Querétaro, Querétaro, México.

<sup>3</sup>Department of Chemistry and Biochemistry, Brigham Young University, 84602, Provo, Utah, United States.

\*email: nancy.davilagz@uanl.edu.mx

**Palabras Clave:** MOF, alcohol, DFT

Los armazones organometálicos o MOF (por sus siglas en inglés) son una nueva clase de materiales adsorbentes con una elevada área superficial específica, estabilidad química y térmica [1,2]. Las estructuras zeolíticas de imidazol, mejor conocidas como ZIF (por sus siglas en inglés), las cuales están formadas por iones metálicos enlazados a átomos de nitrógeno derivados de la molécula de imidazol, con estructuras similares a las zeolitas (Figura 1) [3]. Debido a sus características texturales y sus funcionalidades, las ZIF han sido estudiadas en diferentes procesos de adsorción [4]. Durante los últimos años, debido al creciente interés en la producción de biocombustibles ha generado que varios grupos de investigación han examinado la adsorción de alcoholes en MOF. Por otra parte, solo algunos grupos de investigación han realizado estudios de simulación sobre la adsorción de alcoholes en ZIF, que permitan analizar las interacciones energéticas, sitios preferenciales y finalmente el mecanismo de adsorción. Por lo anterior, el objetivo de este proyecto fue sintetizar y evaluar el desempeño de armazones organometálicos en la adsorción de alcoholes en solución acuosa, así como elucidar el mecanismo de adsorción mediante simulación molecular.

Se sintetizó el ligante 4-bromo-5-cloroimidazol (HBrClIm) y se evaluaron diferentes condiciones de reacción para la obtención de los armazones organometálicos hidrofóbicos (Tabla 1).

**Tabla 1.** Condiciones de reacción para las síntesis de los MOF con el ligante HBrClIm.

Reacción	Sal Zn <sup>2+</sup>	Base	Disolvente	Condiciones	Nombre del compuesto
1	Zn(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub>	-----	CH <sub>3</sub> OH	T. amb, 24 h, sin agitación y con activación térmica.	ZIF-BrClIm
2	Zn(C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub>	NaCHO <sub>2</sub>	CH <sub>3</sub> OH	T. amb, 24 h, sin agitación y con activación térmica.	ZIF45-BrClIm

El área superficial específica para el ZIF-BrClIm y ZIF45-BrClIm es de 559 y 1527 m<sup>2</sup>/g respectivamente. El ZIF45-BrClIm es estable térmicamente hasta valores de 375 °C. El patrón de difracción de rayos X del compuesto ZIF-BrClIm y ZIF45-BrClIm mostraron sólidos cristalinos

donde el pico más intenso se encuentra a  $4.35^\circ$  que corresponde a una estructura con topología RHO isoestructural al ZIF-71.

Para los estudios de simulación molecular, la estructura del MOF y de los alcoholes fueron optimizados por separado a través de DFT con el funcional GGA y un conjunto base DZP. Finalmente, la energía de interacción fue calculada por

$$\Delta E = E_{AB} - (E_A + E_B)$$

Dónde A y B representan las energías del adsorbato y adsorbente respectivamente.

**Tabla 2.** Resultados de las interacciones del ZIF45-BrClIm con diferentes alcoholes.

Adsorbato/Adsorbente	Orientación	Total de energía de interacción Kcal/mol
ZIF45-BrClIm/metanol	Grupo metilo hacia el ligante imidazol	-3.84
ZIF45-BrClIm/metanol	Grupo hidroxilo el ligante imidazol	-11.63
ZIF45-BrClIm/butanol	Grupo butilo hacia el ligante imidazol	-5.36
ZIF45-BrClIm/butanol	Grupo hidroxilo el ligante imidazol	-13.35

En conclusión, se sintetizaron dos armazones organometálicos con potencial aplicación en procesos de adsorción. La síntesis del ZIF-BrClIm donde se utilizó el  $\text{NaCHO}_2$  como base favorece la obtención de una alta área superficial específica ( $1527 \text{ m}^2\text{g}^{-1}$ ) de acuerdo con el análisis BET y *t*-plot. Además, el método de DFT con el funcional GGA y un conjunto base DZP muestran preferentemente una interacción del alcohol hacia el armazón organometálico a través del grupo hidroxilo.

## Referencias

1. H. Furukawa, K. E. Cordova, M. O’Keeffe, and O. M. Yaghi, vol. 341, no. 6149, 2013.
2. F. Gándara, *An. la Real Soc. Española Química*, vol. 108, no. 3, pp. 190–196, 2012.
3. B. Chen, Z. Yang, Y. Zhu, and Y. Xia, *J. Mater. Chem. A*, vol. 2, no. 40, pp. 16811–16831, 2014.
4. N. Abdehagh, F. H. Tezel, and J. Thibault, *Biomass and Bioenergy*, vol. 60, pp. 222–246, 2013.
5. D. Fairén-Jiménez, *An. la Real Soc. Española Química*, vol. 106, no. 3, pp. 183–190, 2010.



## Aplicación de residuos de PET para la síntesis del MIL-101 (Cr) como posible adsorbente de COV

A.A. Rico Barragán<sup>1</sup>, N. Tiempos Flores\*, M. Loredo Cancino\*, J.J. Salazar Rábago\*, J.A. Arcibar Orozco\*\*, N.E. Dávila Guzmán\*

<sup>1</sup>Universidad Autónoma de Nuevo León, Facultad de Ciencias Químicas, Avenida Universidad s/n, Ciudad Universitaria, San Nicolás de los Garza, Nuevo León, México.

<sup>2</sup>CIATEC A.C., Omega no. 201 Col. Industrial Delta, C.P. 37545 León, Guanajuato, México.

**Palabras Clave:** MIL-101(Cr), adsorción, PET.

Respirar aire que presenta diferentes tipos de contaminantes tiene diversas consecuencias en la salud de la población. La Organización Mundial de la Salud (2019) dicta que cerca del 90% de la población del mundo vive en áreas donde los niveles de contaminación del aire sobrepasan los límites establecidos por la misma organización, se tiene un registro que cerca de 3.8 millones de personas mueren debido a contaminación del aire en ambientes cerrados. Gran parte de los compuestos orgánicos volátiles (COV) son contaminantes del aire considerados como tóxicos y cancerígenos para la población que tenga contacto con dichos compuestos. De igual manera, los COV son precursores de contaminantes secundarios como el O<sub>3</sub> [1]. Por lo general, la eliminación de COV se puede llevar a cabo mediante el uso de un adsorbente comercial como carbones activados, zeolitas, aunque se sigue desarrollando nuevos materiales.

Las estructuras organometálicas (MOF) son una clase de materiales sólidos cristalinos sintetizados por la combinación de ligantes orgánicos y iones metálicos para producir redes extendidas que presentan poros y cavidades de tamaños y formas ajustables. El MIL-101(Cr), ha sido aplicado como adsorbente de COV, además el cual es sintetizado a partir de ácido teraftálico (H<sub>2</sub>BDC) como ligante orgánico, y como centro metálico se utiliza el Cr (III), teniendo como resultado un MOF estable ante la humedad [2][3]. La síntesis convencional del MIL-101(Cr) utiliza sustancias tóxicas y/o corrosivas como el HF o H<sub>2</sub>BDC, con lo que se han estado investigando una serie de modificaciones, como el uso de agentes menos corrosivos o la utilización de residuos que contengan el ligante orgánico.

El objetivo por lo tanto es realizar una síntesis que involucre utilizar una combinación de residuos PET como fuente de ligante orgánico y el uso de agentes menos corrosivos como HNO<sub>3</sub>, CH<sub>3</sub>COOH, evitando el uso de las sustancias convencionales.

Se realizaron un total de 8 síntesis del MIL-101 (Cr) modificando la fuente de ligante orgánico (Comercial o PET) y el uso de HNO<sub>3</sub>, CH<sub>3</sub>COOH o H<sub>2</sub>O evitando el uso de HF dentro de la formación del MOF, como fuente metálica se utilizó nitrato de cromo nonahidratado. La caracterización del material se desarrolló por análisis de fisisorción de nitrógeno, FTIR y SEM.

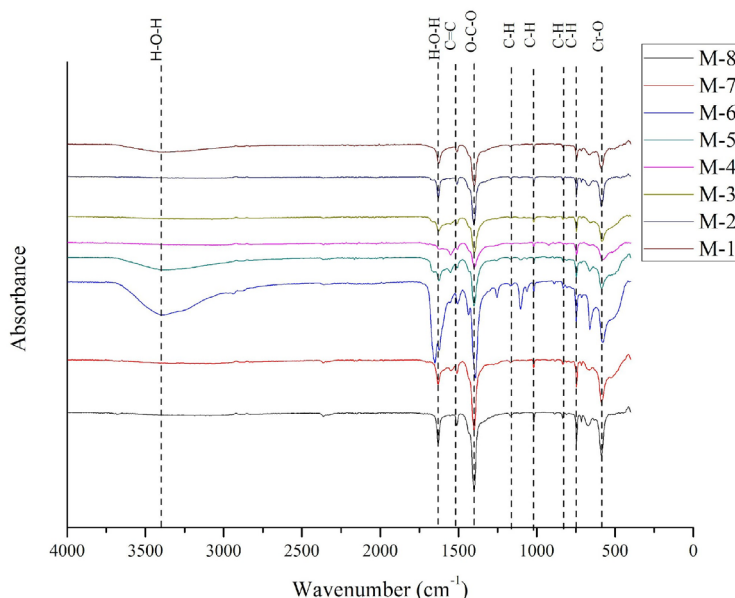
La Tabla 1 muestra las diversas síntesis desarrolladas para el MIL-101 (Cr) y su caracterización mediante fisisorción de nitrógeno. Se obtienen valores de área superficial variable, aunque los valores más altos se ubican cuando se utiliza el ligante orgánico comercial, lo cual indica que no se llevó por completo una reacción mediante el PET y el nitrato de cromo debido a los valores más bajos

mostrados en el área superficial. El uso de N-dimetilformamida (DMF) en el proceso de purificación facilita el proceso de eliminación de ligante orgánico que no reaccionó.

**Tabla 1.** Síntesis del MIL-101 (Cr) y caracterización superficial

MOF	Modulador	Ligante	Purificación	Área Superficial BET (m <sup>2</sup> /g)	Volumen de Poro (cm <sup>3</sup> /g)	Diámetro de Poro BJH (nm)
M-1	H <sub>2</sub> O	H <sub>2</sub> BDC	EtOH- H <sub>2</sub> O	1985.05	1.01	2.93
M-2	H <sub>2</sub> O	H <sub>2</sub> BDC	DMF-EtOH- H <sub>2</sub> O	3053.6	1.57	2.31
M-3	CH <sub>3</sub> COOH	H <sub>2</sub> BDC	DMF-EtOH- H <sub>2</sub> O	3072.37	1.54	2.24
M-4	HNO <sub>3</sub>	H <sub>2</sub> BDC	DMF-EtOH- H <sub>2</sub> O	3147.41	1.67	2.37
M-5	HNO <sub>3</sub>	PET	DMF-EtOH- H <sub>2</sub> O	1567.41	1.46	6.23
M-6	CH <sub>3</sub> COOH	PET	DMF-EtOH- H <sub>2</sub> O	1385.84	1.24	6.46
M-7	H <sub>2</sub> O	PET	DMF-EtOH- H <sub>2</sub> O	1782.75	1.03	3.18
M-8	H <sub>2</sub> O	PET	EtOH- H <sub>2</sub> O	1664.93	1.25	4.79

El análisis de FTIR muestra los diferentes espectros de las muestras sintetizadas mediante diversas metodologías (Figura 1). Se observan los picos característicos de la formación del MIL-101, a los 570 cm<sup>-1</sup> corresponde a la vibración Cr-O, la cual indica una conexión entre el Cr y los grupos carboxilo del ligante orgánico. Los picos entre 600 y 1600 cm<sup>-1</sup> son atribuidos al ácido teraftálico y sus anillos aromáticos; mientras que los picos en 750, 880, 1016, 1150 cm<sup>-1</sup> corresponden a la vibración C-H. El pico localizado cerca de los 1400 cm<sup>-1</sup> es debido a la tensión simétrica de O-C-O. La banda señalada a la longitud de onda de 1517 cm<sup>-1</sup> se relaciona con la tensión C=C. Los picos observados a valores de 1623 y 3400 cm<sup>-1</sup> son característicos de moléculas de agua adsorbidas dentro del MOF.



**Figura 1.** Caracterización por FTIR de las diversas síntesis del MIL-101 Cr.



En conclusión, se realizaron un total de 8 diferentes síntesis del MIL-101 (Cr), los espectros mediante FTIR muestran similitud a estudios ya reportados, a su vez la variabilidad en los resultados de fisisorción es debido a la utilización del PET y al uso de DMF como agente de purificación.

## **Referencias**

1. Organización Mundial de la Salud, Ambient (outdoor) Air Pollution (AQGs), 2019, [https://www.who.int/news-room/fact-sheets/detail/ambient-\(outdoor\)-air-quality-and-health](https://www.who.int/news-room/fact-sheets/detail/ambient-(outdoor)-air-quality-and-health).
2. Kumar, V., Kumar, S., Kim, K. H., Tsang, D. C. W., & Lee, S. S. (2019). Metal organic frameworks as potent treatment media for odorants and volatiles in air. *Environmental Research*, 168(October 2018), 336–356. <https://doi.org/10.1016/j.envres.2018.10.002>.
3. Zhao, Z., Li, X., Huang, S., Xia, Q., & Li, Z. (2011). Adsorption and Diffusion of Benzene on Chromium-Based Metal Organic Framework MIL-101 Synthesized by Microwave Irradiation. 2254–2261.

## Uso de carbonizado de hueso de pez pleco sintetizado en un horno rural para la remoción de fluoruro y As en agua

S.A. Cruz-Briano<sup>1</sup>, N.A. Medellín-Castillo<sup>1,2</sup>, P. Delgado-Sánchez<sup>3</sup>, G.J. Castro-Larragoitia<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Programa Multidisciplinario en Ciencias Ambientales, Universidad Autónoma de San Luis Potosí, Av. Dr. M Nava No. 221, Zona Universitaria S.L.P., 78290, México.

<sup>2</sup>Centro de Investigación y Estudios de Posgrado, Facultad de Ingeniería, Universidad Autónoma de San Luis Potosí, Av. Dr. M Nava No. 8, Zona Universitaria, S.L.P., 78290, México.

<sup>3</sup>Facultad de Agronomía, Universidad Autónoma de San Luis Potosí, Km. 14.5 Carr. San Luis - Matehuala Palma de la Cruz, Soledad de Graciano Sánchez, S.L.P., 78321, México

**Palabras Clave:** Adsorción, carbonizado de hueso, pez pleco

La contaminación del agua de consumo humano por fluoruros y arsénico ha tomado mucha importancia en los últimos años debido a los daños que provocan en la salud como la fluorosis dental y esquelética en el caso del fluoruro [1] y cáncer en la piel por el arsénico [2]. La adsorción es una de las técnicas más simples y versátiles para la remoción de contaminantes debido a sus bajos costos de instalación, operación y mantenimiento [1,3], además, de tener la disponibilidad de una amplia gama de adsorbentes, entre ellos, los carbonizados de hueso [3]. La materia prima en este proyecto son los peces pleco, originarios de la Cuenca del Amazonas [4]. En México, son considerados una plaga, por su significativa proliferación y por su adaptación a los cambios de las condiciones del agua. Actualmente, existe un solo estudio reportado sobre su aprovechamiento como adsorbentes para remover contaminantes del agua. El objetivo de este trabajo es investigar la efectividad de los carbonizados de huesos de peces pleco preparados en un horno rural, como adsorbentes en la remoción de fluoruro y arsénico en agua.

Los huesos de peces se sintetizaron en un horno rural a temperaturas de entre 300-600 °C, durante 1.5 h. El área específica, volumen de los poros y el diámetro promedio de los poros, se determinaron por medio de un equipo de fisisorción, Micromeritics, modelo ASAP 2020. Los espectros de FTIR se realizaron en un espectrofotómetro marca Thermo Scientific, modelo Nicolet iS10, los TGA en un Analizador Termogravimétrico, Perkin Elmer, modelo Pyris Diamond GA/DTA y la DRX con un difractor de rayos X, marca Bruker, modelo Da Vinci. Los sitios ácidos y básicos se obtuvieron mediante el método propuesto por Boehm [5]. La adsorción de fluoruro y arsénico sobre CH se llevó a cabo en lote, donde se pusieron en contacto 0.2 g de CH con un volumen de 90 mL de una solución con concentraciones de 10-100 ppm y 100-1200 ppb para fluoruros y arsénico, respectivamente, a temperatura de 25 °C.

La masa de fluoruro y As adsorbido,  $q$ , en los carbonizados de hueso se calculó por medio de un balance de materia de acuerdo con la siguiente ecuación

$$q = \frac{(C_0 - C_f)V}{m}$$

El área específica y el volumen de poros es de 154 m<sup>2</sup>/g y 0.381 cm<sup>3</sup>/g, respectivamente, los cuales son mayores a los valores reportados por otros autores [6, 7]. La concentración de sitios básicos (1.22

meq/g) fue mayor que la de sitios ácidos (0.2 meq/g), además el PCC es de 7.75, lo anterior indica que es un material de carácter básico.

La adsorción de fluoruro (Figura 1) y arsénico reveló que la capacidad de adsorción en CH es dependiente del pH de la solución. Para el fluoruro, el CH aumentó su capacidad de adsorción al disminuir el pH por debajo del PCC (7.75), debido a la atracción por las fuerzas electrostáticas entre la superficie de CH cargada positivamente y la carga negativa del fluoruro. Por otro lado, la capacidad de CH para adsorber As mostró lo contrario, ya que ésta aumentó al elevar el pH de la solución. Este mismo comportamiento lo observaron otros autores [8,9]. La razón de la mayor eficiencia de adsorción de As a pH más alto puede ser a la coprecipitación entre el arseniato de hidrógeno cálcico y la hidroxiapatita y al intercambio iónico entre iones hidroxilo y As (V) [8]

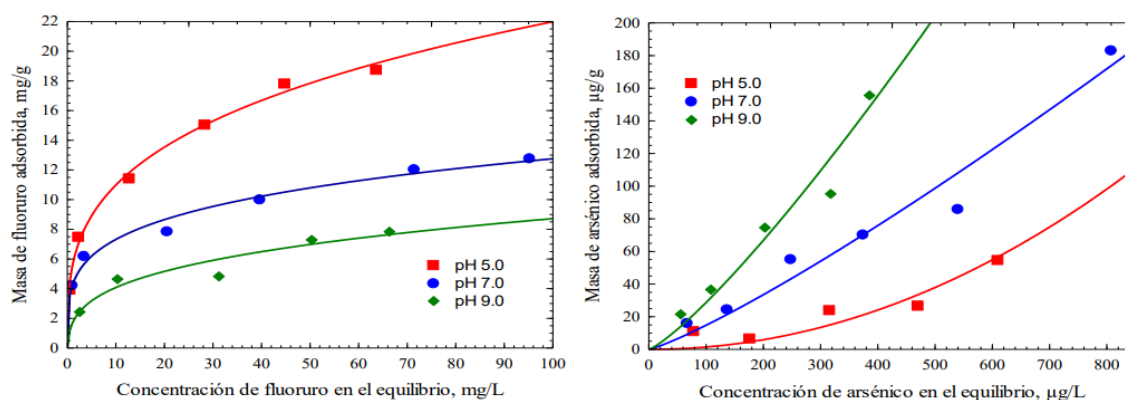


Figura 1. Efecto del pH sobre la isoterma de adsorción de fluoruro y arsénico sobre CH, T=25 °C.

La síntesis en el horno rural dio como resultado un carbonizado de hueso con una mayor área específica comparada con otros carbonizados de huesos que se han reportado en literatura y puede ser considerado un adsorbente alternativo para la remoción de fluoruro y As en agua.

## Referencias

1. Collivignarelli, M.C., Abbà, A., Carnevale Miino, M., Torretta, V., Rada, E.C., Caccamo F.M. y Sorlini. (2020). Adsorption of Fluorides in Drinking Water by Palm Residues. *Sustainability* 12, 3786.
2. Kumar, A., Kumar, A. y Adarsh, A. (2020). Analytical study on the removal of arsenic species and its compound by applying magnetic field. *International Journal of Scientific & Engineering*.
3. Medellín-Castillo, N.A., Cruz-Briano, S.A., Leyva-Ramos, R., Moreno-Piraján, J.C., Torres-Dosal, A., Giraldo-Gutiérrez, L., Labrada-Delgado, G.J., Pérez, R.O., Rodríguez-Estupiñán, J.P., Reyes Lopez, S.Y., Berber-Mendoza, M.S. (2020). Use of bone char prepared from an invasive species, pleco fish (*Pterygoplichthys* spp.), to remove fluoride and Cadmium(II) in water. *J. Environ. Manag.* 256, 109956.
4. Ramírez-Albores, E.O., Méndez-Lau, N., Castañon-González, J.H., Lagunas-Rivera, S., Farrera-Alcázar, R., Rosales-Quintero, A. y Villalobos-Maldonado, J.J. (2018). ¿Es comestible el pez diablo (*Hypostomus Plecostomus* L.), que habita en el ecosistema de plan de Ayala, Ostuacán, Chiapas??. *Agroproductividad* 11(12), 85-90.
5. Boehm, H.P. (1994). Some aspects of the surface chemistry of carbon blacks and other carbons. *Carbon* 32, 759-69.



6. Alkurdi, S.S.A., Al-Jubooria, R.A, Bundschuha, J. y Hamawand, I. (2019). Bone char as a green sorbent for removing health threatening fluoride from drinking water. *Environment International* 127, 704–719.
7. Villela-Martínez, D.E., Leyva-Ramos, R., Aragón-Piña, A. y Navarro-Tovar, R. (2020). Arsenic Elimination from Water Solutions by Adsorption on Bone Char. Effect of Operating Conditions and Removal from Actual Drinking Water. *Water, Air, & Soil Pollution* 231(5).
8. Chen, Y.N., Chai, L.Y. Shu, Y.D. (2008). Study of arsenic(V) adsorption on bone char from aqueous solution. *J. Haz. Mat.*, 160, 168-172.
9. Liu, J., He, L., Dong, F., Hudson-Edwards, K.A. (2016). The role of nano-sized manganese coatings on bone char in removing arsenic(V) from solution: Implications for permeable reactive barrier technologies. *Chemosphere* 153, 146-154

## Adsorción de cadmio (II) en solución acuosa sobre hidrocarbonizado de lirio acuático sin y con modificación con ácido cítrico

C. Vázquez Mendoza<sup>1</sup>, R. Leyva Ramos<sup>1\*</sup>, N. A. Medellín Castillo<sup>2</sup>, A. Juárez Martínez<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Centro de Investigación y Estudios de Posgrado, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Autónoma de San Luis Potosí, México.

<sup>2</sup>Facultad de Ingeniería, Universidad Autónoma de San Luis Potosí, San Luis Potosí, México.

**Palabras clave:** Cadmio, lirio acuático, hidrocarbonizado.

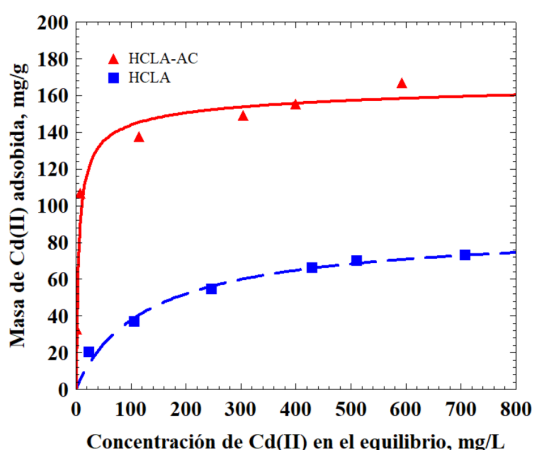
La contaminación por metales pesados en México es un problema que ha estado aumentando debido a las actividades antropogénicas, particularmente la minería. Los metales contaminantes más importantes en México, dada su toxicidad y abundancia son: mercurio, plomo, cadmio y cromo. Estos metales causan efectos adversos al ser humano provocando alteraciones a nivel enzimático, renal, respiratorio y digestivo. Además, pueden ser transportados largas distancias gracias al viento y las corrientes y fuentes de agua. En México, se han caracterizado varias especies vegetales con capacidad para bioacumular metales pesados tales como *Jatropha dioica*, *Eichhornia crassipes* y *Amaranthus hybridus*. El lirio acuático (*Eichhornia crassipes*) es una planta invasiva, la cual puede causar un impacto negativo en lagos y charcas, si no se mantienen bajo control. Esta planta presenta alta capacidad de biosorción de metales pesados tales como Cd(II), Cr(III), Co(II), Ni(II), Pb(II) y Hg(II), y puede ser utilizada para la biorremediación de aguas residuales industriales y suelos contaminados [1]. En la carbonización hidrotermal (CHT), la materia orgánica se descompone bajo la influencia de la temperatura y en presencia de agua. El agua se encuentra a una temperatura por encima de su punto de ebullición y la presión del sistema es autógena, es un proceso exotérmico capaz de reducir la cantidad de oxígeno e hidrógeno del material carbonoso generado respecto al del material precursor, donde se transforma casi todo el carbono del material vegetal en un material carbonoso. El hidrocarbonizado (HC) tiene mayores relaciones H/C. El HC tiene muchas aplicaciones ya que puede ser utilizado para propósitos energéticos, procesos de mejoramiento del suelo, y también, como adsorbentes, catalizadores y materiales nanoestructurados [2]. El objetivo principal de este trabajo es sintetizar un hidrocarbonizado de lirio acuático (HCLA) por medio de un tratamiento hidrotermal del lirio acuático natural (LAN) y modificar el HCLA con solución de ácido cítrico (AC) 1 M para incrementar la capacidad para adsorber Cd(II). El HCLA modificado con ácido cítrico se designó como HCLA-AC.

La caracterización fisicoquímica de HCLA y HCLA-AC mostró que el área específica varió entre 0.9 y 3.3 m<sup>2</sup>/g y el diámetro promedio de poro de 33 nm. La cuantificación de los sitios ácidos reveló que el HCLA posee principalmente sitios fenólicos, y su superficie tiene carácter ácido. Después del proceso de modificación con ácido cítrico, se incrementaron los sitios ácidos alrededor de 16 veces en el siguiente orden: sitios carboxílicos > fenólicos > lactónicos. La presencia e incremento de los sitios carboxílicos se corroboró por espectroscopía en el infrarrojo (FTIR) [3] (Ver Figura 2). La morfología de la superficie de HCLA se examinó por microscopía electrónica de barrido y se notó que está conformado por aglomeraciones poco porosas y estrías. El análisis de fluorescencia de rayos X demostró que

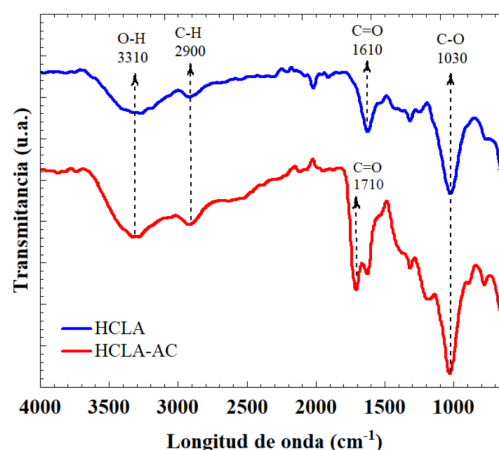
el Cd(II) a pH = 6 se adsorbió sobre toda la superficie del HCLA. En el análisis termogravimétrico se presentaron 3 etapas en las cuales se descompone el HCLA, siendo en la segunda la descomposición más importante de los compuestos orgánicos.

El efecto del pH (Ver Figura 1) y la temperatura de la solución sobre la capacidad de adsorción reveló que la masa de Cd(II) adsorbida sobre el HCLA y HCLA-AC aumentó, debido al aumento de las atracciones electrostáticas entre la superficie de los materiales y el catión  $Cd^{2+}$  en solución[4]. Los experimentos realizados a diferentes temperaturas demostraron que la adsorción de Cd(II) sobre HCLA es un proceso endotérmico y con un calor isostérico de adsorción de 37.71 KJ/mol.

La reversibilidad del proceso de adsorción de Cd(II) sobre HCLA y HCLA-AC confirmó los mecanismos físicos y químicos, ya que se logró 80 % de desorción de Cd(II). El principal mecanismo de adsorción de Cd(II) sobre HCLA y HCLA-AC fueron las interacciones electrostáticas. Los estudios de adsorción de diversos metales sobre HCLA y HCLA-AC revelaron que estos materiales se pueden utilizar para remover diversos metales pesados tales como Cu(II) y Zn(II). Además, estos biomateriales presentaron mayor capacidad para adsorber Cd(II) que otros adsorbentes tradicionales tales como bentonita y fibras de carbón activado.



**Figura 1.** Isotermas de adsorción de Cd(II) sobre HCLA y HCLA-AC a T = 25 °C, I=0.01 N y pH 6. Las líneas representan el modelo de Redlich-Peterson



**Figura 2.** Espectro en el infrarrojo de HCLA y HCLA-AC.

## Referencias

1. Gaurav, G. K., Mehmood, T., Cheng, L., Klemeš, J. J., Shrivastava, D. K. (2020). Water hyacinth as a biomass: a review. *Journal of Cleaner Production* 277, 122214, 1-62.



2. Liu, Z., Wang, Z., Chen, H., Cai, T., Liu, Z. (2020). Hydrochar and pyrochar for sorption of pollutants in wastewater and exhaust gas: a critical review. *Environmental Pollution* 268, 115910, 1-19.
3. Emam, A. A., Faraha, S. A. A., Kamal, F. H., Gamal, A. M., Basseem, M. (2020). Modification and characterization of Nano cellulose crystalline from Eichhornia, *Carbohydrate Polymers* 240, 116202, 1-11.
4. Liu, C., Ye, J., Lin, Y., Wu, J., Price, G. W., Burton, D., Wang, Y. (2020). Removal of Cadmium (II) using water hyacinth (*Eichhornia crassipes*) biochar alginate beads in aqueous solutions. *Environmental Pollution* 264, 114785, 1-9.

## Inmovilización de *P. stutzeri* sobre carbonos activados para la degradación de hidrocarburos provenientes de emulsiones de aceite en agua salada

K. Zapata<sup>1</sup>, B. Rojano<sup>2</sup>, C. Franco<sup>1</sup>, F. Carrasco<sup>3</sup>, F. Cortes<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Procesos y Energía, Universidad Nacional de Colombia, Sede Medellín, Cra 80 N° 65 – 223, Medellín, 050034, Colombia

<sup>2</sup>Escuela de Química, Universidad Nacional de Colombia, Sede Medellín, Cra 65 N° 59A – 110, Medellín, 050034, Colombia

<sup>3</sup> Departamento de Química Inorgánica, Universidad de Granada, Av. del Hospicio, 1. Granada, 18010, España

**Palabras Clave:** Degradación de hidrocarburos, Carbón activado, Residuos agroindustriales.

El agua de producción es el subproducto más grande de la industria petrolera, y debe tratarse antes de su disposición, ya sea para ser reutilizada en procesos de reinyección o vertimiento final, con el propósito de eliminar el crudo emulsionado y evitar problemas operativos y tóxicos asociados con su presencia [1-3]. Este trabajo tuvo como objetivo inmovilizar una cepa hidrocarburo-degradante en carbonos activados obtenidos a partir de residuos agroindustriales, con el fin de evaluar su capacidad para biorremediar hidrocarburos a partir de sistemas emulsionados aceite en salmuera (O/W), que simulen las aguas de producción. Para el cumplimiento del objetivo, se prepararon carbonos a partir de semillas de aceitunas y activación química y se estimaron sus propiedades químicas y porosas. A continuación, se elaboraron biomateriales y se realizaron pruebas de desempeño, a través de la cuantificación de crudo biorremediado, así como la determinación de los productos de catálisis (hidrocarburos livianos y/o gases). Los carbonos básicos y neutros inmovilizaron bacterias por fisisorción en los espacios macroporosos e interacciones electrostáticas ( $10^8$  - $10^9$  UFC·g<sup>-1</sup>), sin embargo, materiales con superficie acida fueron biocidas. La eliminación de hidrocarburos aromáticos fue más eficiente utilizando materiales (60% - 93%) y biomateriales (16% - 84%) que el microorganismo libre (1% - 47%), y las eficiencias de biorremediación de crudo ligero fueron 22% y 48% para la bacteria libre y los biomateriales, respectivamente. La presencia de hidrocarburos menores solo cuando la bacteria hidrocarburo-degradante estuvo presente libre o inmovilizada confirmó el proceso de biocatálisis adicional a los procesos adsorptivos. Al mejor de nuestro conocimiento, no se ha realizado ninguna investigación sobre la inmovilización de microorganismos en carbonos activados para la eliminación de hidrocarburos miscibles aguas de producción, de modo que los resultados del presente trabajo son un hallazgo y aportan información novedosa a la comunidad científica.

### Referencias

1. Franco, C., Martínez, M., Benjumea, P., Patiño, E. y Cortés, F. (2004). Water Remediation Based on Oil Adsorption Using Nanosilicates Functionalized with a Petroleum Vacuum Residue. *Adsorpt. Sci. Technol.* 32, 197–208.
2. Duke, N., Burns, K.A., Swannell, R.P., Dalhaus, O. y Rupp, R.J. (2000). Dispersant Use and a Bioremediation Strategy as Alternate Means of Reducing Impacts of Large Oil Spills on Mangroves: The Gladstone Field Trials, *Mar. Pollut. Bull.* 41, 403–412.

## Remoción de As(V) de soluciones acuosas mediante adsorción sobre residuos agroalimenticios y subproductos industriales recuperados

M. S. Patterer<sup>1\*</sup>, F. Medici<sup>1\*</sup>, M.A. Peluso<sup>2</sup>, J.E. Sambeth<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Department of Chemical Engineering, Materials and Environment, Faculty of Civil and Industrial Engineering, Sapienza University of Rome, Via Eudossiana 18, 0184 Rome, Italy.

<sup>2</sup>Centro de Investigación y Desarrollo en Ciencias Aplicadas, “Dr. Jorge J. Ronco” CINDECA (UNLP – CONICET CCT La Plata), 47 N. 257, La Plata, Buenos Aires, Argentina.  
e-mail: \* franco.medici@uniroma1.it, mspatterermartin@gmail.com

**Palabras Clave:** adsorción, arsénico, óxidos de manganeso.

El arsénico encabeza la lista de los elementos más tóxicos en la naturaleza [1] y puede ocasionar serios daños a la salud de los seres humanos, incluyendo cáncer [2]. Por ello, en los últimos años, se han impuesto límites cada vez más restrictivos para este elemento, especialmente en lo que a agua potable se refiere. De hecho, la Organización Mundial de la Salud (OMS) recomienda un límite de  $10 \mu\text{g L}^{-1}$  de As en el agua destinada al consumo humano. En este trabajo, se estudió el potencial de los fondos de café (SCG, del inglés Spent Coffee Grounds), de los residuos del prensado de la oliva (OP, del inglés olive pomace) y de los óxidos de manganeso ( $\text{MnO}_x$ ) como adsorbentes para la remoción del arsénico de agua sintéticamente contaminada. Mientras que los SCG y la OP son residuos provenientes de la alimentación y de la agricultura, respectivamente, con reconocida capacidad adsorbente [3-5], los  $\text{MnO}_x$  constituyen un subproducto industrial. Ellos son recuperados de las pilas alcalinas y de Zn/C a partir de un proceso bio-hidrometalúrgico que involucra su precipitación con permanganato de potasio ( $\text{KMnO}_4$ ) [6]. Dichos óxidos presentan una estructura de tipo túnel, vacancias de oxígeno y manganeso en diferentes estados de oxidación. Todo esto hace que sean adsorbentes potenciales de metales pesados de las aguas [7].

Los tres adsorbentes investigados son particularmente económicos (siendo residuos) y no requieren un pretratamiento para su uso, excepto por el hecho de que deben ser lavados y secados previos a su utilización. Esto significa que el proceso resulta de bajo costo y de fácil implementación. El objetivo del presente trabajo fue verificar la eficiencia de remoción del ion As(V) de soluciones acuosas sintéticamente contaminadas, utilizando los fondos de café, la pulpa de oliva y los óxidos de manganeso, para describir el equilibrio y la cinética de la adsorción, así como estudiar la termodinámica del proceso.

Se llevaron a cabo pruebas de tipo *batch* sobre los adsorbentes no tratados, a diferentes temperatura ( $10, 25$  y  $40^\circ\text{C}$ ), con concentraciones iniciales de adsorbato entre  $5$  y  $100 \text{ mg L}^{-1}$ , tiempos de contacto de hasta  $180$  minutos, relación S/L de  $1/100 \text{ g mL}^{-1}$ , agitación rotacional de  $250 \text{ rpm}$  y granulometría entre  $149-74 \mu\text{m}$ . Las técnicas empleadas para medir la concentración residual de As(V) en solución fueron XRF para los bioadsorbentes e ICP-OES para el adsorbente inorgánico.

Los resultados obtenidos mostraron que el equilibrio del arsénico sobre los  $\text{MnO}_x$  ( $S_{\text{BET}}=66 \text{ m}^2 \text{ g}^{-1}$ ) se alcanzó luego de los  $45$  minutos, mientras que fue alcanzado luego de los  $180$  minutos sobre los SCG ( $S_{\text{BET}}=4.3 \text{ m}^2 \text{ g}^{-1}$ ) y los OP ( $S_{\text{BET}}=0.139 \text{ m}^2 \text{ g}^{-1}$ ) (Figura 1). Se evaluaron cuatro modelos de isoterma

de adsorción: Langmuir, Freundlich, Dubinin-Radushkevich (D-R) y Temkin. La isoterma de Langmuir fue la que mejor correlacionó los datos del proceso de adsorción en todos los casos, con una capacidad de adsorción máxima de  $5.17 \text{ mg g}^{-1}$  para  $T=10^\circ\text{C}$  sobre los óxidos de manganeso (Tabla 1).

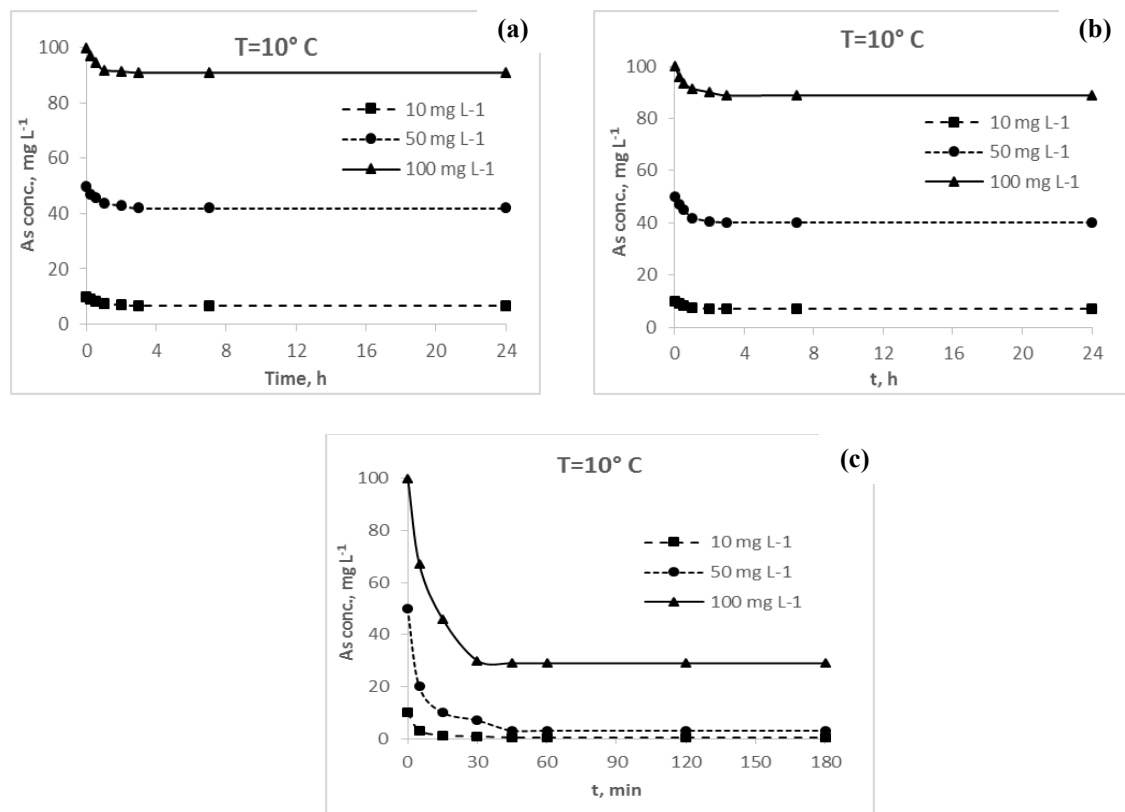


Figura 1. Tiempo de equilibrio de la adsorción de As(V) sobre SCG (a), OP (b) y  $\text{MnO}_x$  (c) para algunas de las concentraciones iniciales estudiadas a  $T=10^\circ\text{C}$ .

Tabla 1. Parámetros de las isotermas de adsorción de As(V) sobre  $\text{MnO}_x$  a diferentes temperaturas

T (°C)	LANGMUIR			FREUNDLICH			D-R			TEMKIN				
	$q_{\text{max}}$ , mg g <sup>-1</sup>	b, L mg <sup>-1</sup>	R <sup>2</sup>	$K_F$ , mg <sup>1-1/n</sup> L <sup>1/n</sup> g	n	R <sup>2</sup>	$q_{\text{max}}$ , mg g <sup>-1</sup>	B, mol <sup>2</sup> kJ <sup>-2</sup>	E, kJ mol <sup>-1</sup>	R <sup>2</sup>	$A_T$ , L g <sup>-1</sup>	$B_T$	$b_T$ , kJ mol <sup>-1</sup>	R <sup>2</sup>
10	5.2	0.85	0.992	1.78	2.0	0.930	4.15	0.09	2.41	0.832	8.59	1.3	1.83	0.966
25	4.4	1.23	0.955	1.53	2.6	0.963	3.73	0.06	2.83	0.869	12.9	0.9	2.85	0.965
40	3.0	0.71	0.952	0.98	1.9	0.991	2.89	0.11	2.11	0.674	3.32	1.1	2.37	0.924

El estudio termodinámico se efectuó a partir de la ecuación de Van't Hoff y la relación  $\Delta G^\circ = \Delta H^\circ - T\Delta S^\circ$ . El proceso arrojó valores negativos de  $\Delta G^\circ$  y  $\Delta H^\circ$ , y valores positivos de  $\Delta S^\circ$  para los tres adsorbentes. Se estudió la cinética del proceso a través del modelo *Linear Drivig Force* (LDF) y se calculó la constante cinética para las distintas temperaturas y los diferentes adsorbentes. El valor de la misma siguió el siguiente orden:  $\text{MnO}_x > \text{SCG} > \text{OP}$  y fue de  $0.0984 \text{ min}^{-1}$  cuando la adsorción se efectuó sobre los óxidos de manganeso a  $T=40^\circ\text{C}$ .



La energía de activación se calculó mediante la ecuación de Arrhenius. En todos los casos se obtuvo un valor de  $E_a < 40 \text{ kJ mol}^{-1}$ , lo que significa que el proceso fue de naturaleza física [4].

La cinética de adsorción, en términos de la constante cinética, resultó mayor en los  $\text{MnO}_x$ , seguidos por los SCG y luego por la OP. El tiempo de equilibrio fue menor para los óxidos de manganeso mientras que fue de igual orden para los fondos de café y la pulpa de oliva. Las isothermas que mejor describieron el fenómeno, en orden de frecuencia fueron: Langmuir, Temkin, Freundlich. El mejor adsorbente, en términos de  $q_{\text{max}}$  fueron los  $\text{MnO}_x$ , seguidos por la OP y en tercer lugar los SCG. El proceso fue exotérmico, espontáneo y con aumento de entropía. Las bajas energías de activación involucradas indicaron que la adsorción fue físicamente controlada en todos los casos.

En conclusión, los resultados de la investigación respaldan firmemente el uso de los  $\text{MnO}_x$  como un adsorbente efectivo y económico para la remoción del arsénico del agua.

## Referencias

1. Agency for Toxic Substances and Disease Registry. (2012). Toxicological profile for arsenic. Department of Health and Human Services. Public Health Service, USA.
2. International Agency for Research on Cancer. (2018). IARC Monographs on the Evaluation of Carcinogenic Risks to Humans, USA. Vol. 1-122.
3. Lavecchia R., Medici F., Patterer M.S. y Zuorro A. (2016). Lead Removal from Water by Adsorption on Spent Coffee Grounds. *Chemical Engineering Transactions* 47, 295-300.
4. Patterer M.S., Bavasso I., Medici F. y Sambeth J.E. (2017). Cadmium Removal from Aqueous Solution by Adsorption on Spent Coffee Grounds. *Chemical Engineering Transactions* 60, 157-162.
5. Uzunkavak, O., Patterer, M.S., Medici, F., Özdemir, G. (2019). Modeling of single and binary adsorption of lead and cadmium ions onto modified olive pomace. *Desalination and Water Treatment* 162, pp. 278–289.
6. Gallegos M.V., Peluso M.A. y Sambeth J.E. (2018). Preparation and characterization of manganese and zinc oxides recovered from spent alkaline and Zn/C batteries using biogenerated sulfuric acid as leaching agent. *The Minerals, Metals & Materials Society. Technical Communication* 1-8.
7. Gallegos M.V., Falco L., Peluso M.A., Sambeth J.E. y Thomas H. J. (2013). Recovery of manganese oxides from spent alkaline and zinc-carbon batteries. An application as catalysts for VOCs elimination. *Waste Management* 33(6), 1483-1490.

## Valorización de los residuos de piña (*Ananas comusus L.*) como bioadsorbente de metales

C. Valerio Cárdenas<sup>1</sup>

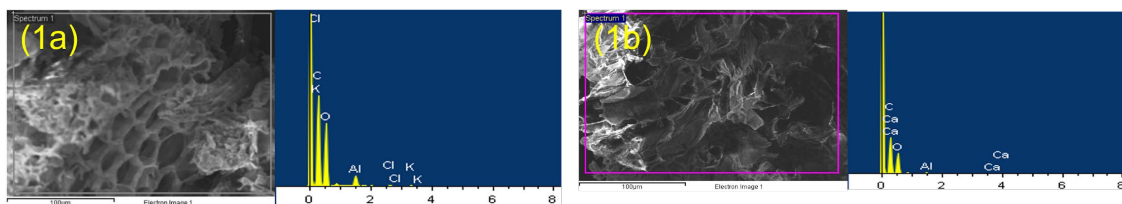
<sup>1</sup>Universidad Popular de la Chontalpa, Carretera Cárdenas-Huimanguillo Km 2, Cárdenas, Tabasco, México.

**Palabras Clave:** Cáscaras de piña, adsorbente, metales.

Actualmente, en México se siembra piña en una superficie de 44,182 ha, produciendo un total de 1,041,161 ton. [1] Sin embargo, solo se consumen 780 ton para el consumo del producto fresco, en jugo o para la producción de mermeladas y conservas.[2] Esta diferencia entre producción y consumo conlleva a un problema ambiental y económico debido a la generación de una gran cantidad de residuos de piña no aprovechados entre los que se encuentran la cáscara, corona y pulpa. Por lo que es necesario buscar alternativas que contribuyan al aprovechamiento de estos residuos, a partir de técnicas que puedan ser empleadas eficazmente, para contribuir a la disminución del impacto ambiental que genera la mala disposición final de estos residuos. Las cáscaras de frutas poseen grupos funcionales que facilitan su uso como adsorbentes de metales [3, 4,], por lo que en esta investigación se estudia la capacidad de la cáscara de piña (*Ananas comusus L.*) modificada químicamente con NaOH/CaCl<sub>2</sub>, como adsorbente de Cu (II) y Fe (III) en agua mediante la técnica de Microscopía Electrónica de Barrido.

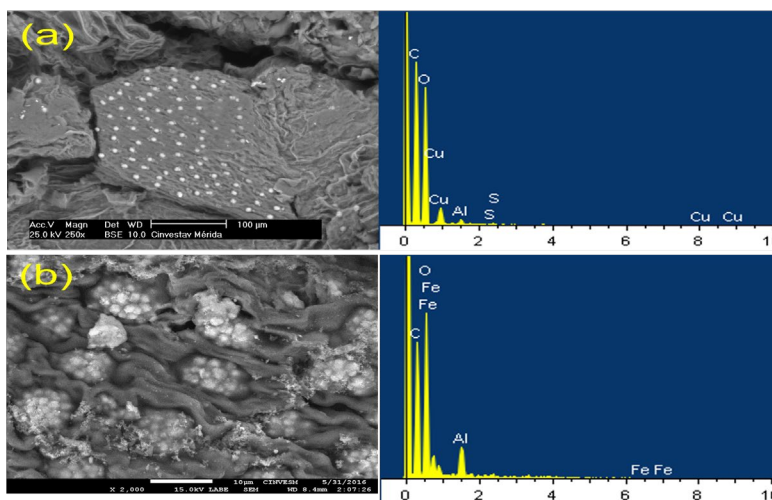
La preparación del bioadsorbente consistió en cortar trozos pequeños de cáscara de piña y secarlos 24 h a 60°C en un horno de convección. Posteriormente, se trituró y se tamizó con una malla de 40 mesh. Posteriormente, se agregó una solución de NaOH 0.2 M. La mezcla se dejó en agitación por 2 hora, después de este tiempo se lavó con agua destilada para eliminar el exceso de NaOH y se secó en un horno a 60°C por 2 horas. En seguida, el material seco se agregó a una solución de CaCl<sub>2</sub> 0.2 M, ajustando el pH a 5. La mezcla se dejó en agitación a 200 rpm por 24 h. Finalmente, el material se filtró y se lavó con agua desionizada para eliminar el exceso de calcio y se secó en una estufa a 60°C por 6 h. Por otra parte, se prepararon soluciones acuosas de CuSO<sub>4</sub> y Fe<sub>2</sub>(SO<sub>4</sub>)<sub>3</sub> en concentración inicial de 10 mg/L. Finalmente, se realizaron los ensayos de adsorción e intercambio iónico con 0.1 g de bioadsorbente en contacto con un volumen conocido de las soluciones de iones metálicos, manteniendo en contacto 2 h, a pH 5 y temperatura ambiente.

En la Figura 1a se muestra la superficie de la cáscara de piña sin modificación, donde se observó una superficie porosa con un tamaño de poro de aproximadamente 14µm. Constituida por cloro (0.14%), carbono (50.22%), oxígeno (47.40%), aluminio (1.89%) y potasio (0.35%). La figura 1b presenta la superficie de la cáscara de piña modificada químicamente, la cual está constituida por calcio (0.09%), carbono (58.33%), oxígeno (48.20%) y aluminio (0.48%). Este resultado demuestra que la cáscara de piña es capaz de adsorber a los iones Ca<sup>2+</sup> en su interior.



**Figura 1.** SEM-EDX de la superficie de la cáscara de piña: (1a) sin modificación química; (1b) modificada químicamente.

En la Figura 2a y 2b se presentan las micrografías de la superficie de la cáscara de piña después del proceso de adsorción, donde se observa que hubo un intercambio de iones  $\text{Ca}^{2+}$  por iones  $\text{Cu}^{2+}$  y  $\text{Fe}^{3+}$ , respectivamente. Las partículas metálicas se observan brillantes y alojadas dentro de las cavidades del bioadsorbente. El análisis elemental muestra la presencia de cobre en una composición de 1.8% y de hierro en una composición de 0.07%. Estudios previos realizados por Ahmad y col., reportaron la capacidad de la cáscara de piña modificada con  $\text{H}_2\text{SO}_4/\text{KMnO}_4$  para adsorber metales [5], en el presente trabajo quedó demostrado que la modificación de la cáscara de piña con  $\text{NaOH}/\text{CaCl}_2$  puede ser una alternativa para su uso como adsorbente de metales.



**Figura 2.** SEM-EDX de la superficie de la cáscara de piña: (a) con partículas de  $\text{Cu(II)}$ ; (b) con partículas de  $\text{Fe(III)}$ .

Con el análisis realizado por SEM-EDX se demostró que la cáscara de piña tiene potencial para utilizarse como material adsorbente de metales. Por lo que, la valorización de los residuos de piña como bioadsorbente de metales en agua, tendrá beneficios asociados a la disminución de los impactos ambientales que provoca su acumulación a cielo abierto.

## Referencias

1. SIAP (2020). Sistema de Información Agropecuaria y Pesquera. Cierre de la producción agrícola por estado. SIAP-SAGARPA. Disponible en: <https://www.siap.gob.mx/agricultura-producción-anual>



2. Vélez-Izquierdo, A., Espinosa-García, J.A., Uresti-Gil, J., Jolalpa-Barrera, J.L., Rangel-Quintos, J., Uresti-Duran, D. (2020). Estudio técnico-económico para identificar áreas con potencial para producir piña en el trópico húmedo de México. *Revista Mexicana Ciencias Agrícolas* 11(7), 1619-1632.
3. Romero Cano, L.A., (2018). Preparación y caracterización de materiales adsorbentes a partir de cáscara de frutas para su uso en la remoción de metales y aplicación a procesos ambientales. Tesis de Doctorado. Centro de Investigación y Desarrollo Tecnológico en Electroquímica S.C. Santiago de Querétaro, México
4. Fernández, M., Flores, M., Yactayo, M., Lovera, D., Quispe, J., Landauro, C., Pardave, W. (2020). Remoción de metales pesados desde efluentes mineros, mediante cáscaras de frutas. *Revista de investigación, administración e ingeniería* 8(1):21-28.
5. Ahmad, A., Khatoon, A., Mohd-Setapar, S.H., Kumar, R. (2015). Chemically oxidized pineapple fruit peel for the biosorption of heavy metals from aqueous solutions. *Desalination and Water Treatment*, 57(14), 6432-6442.

## Síntesis y caracterización de fibras de agave funcionalizadas para su uso en la remoción de Cu(II) presente en solución acuosa

S. M. García-Hernández<sup>1</sup>, W. M. Warren-Vega<sup>1</sup>, A. I. Zárate-Guzmán<sup>1,2</sup>, V. H. Collins-Martínez<sup>3</sup>, R. Ocampo-Pérez<sup>2</sup>, L. A. Romero-Cano<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Universidad Autónoma de Guadalajara, Grupo de Investigación en Materiales y Fenómenos de Superficie. Av. Patria 1201, C.P. 45129. Zapopan, Jalisco, México.

<sup>2</sup>Universidad Autónoma de San Luis Potosí, Facultad de Ciencias Químicas, Centro de Investigación y Estudios de Posgrado, San Luis Potosí, México.

<sup>3</sup>Centro de Investigación en Materiales Avanzados, S.C., Departamento de Ingeniería y Química de Materiales. Miguel de Cervantes 120, Complejo Industrial Chihuahua, Chihuahua, Chih., México.

**Palabras Clave:** Fibra de agave, adsorción de cobre, adsorbentes alternativo, funcionalización hidrotermal.

La producción de Tequila tiene como consecuencia la generación de grandes cantidades de residuos agroindustriales tales como bagazo y hojas de agave (producto de la jima de la planta) los cuales presentan problemas para su disposición final generando problemas económicos y ambientales dentro de la cadena de producción de tequila, debido a que se desechan en el campo posterior a la jima (Figura 1a). Por consecuencia, estas hojas llegan a ser un contaminante en los suelos, ya que el proceso de biodegradación por microorganismos y enzimas es complejo debido a su elevado contenido de lignina [1]. En este sentido, se han comenzado a estudiar diferentes usos del residuo para lograr su valorización. Han sido probados procesos de fermentación para obtener biopolímeros por medio de procesos microbiológicos, sin embargo, los procesos de cultivo del microorganismo, el pretratamiento que hay que realizar a las hojas para convertirlas en un sustrato afín y el proceso de remoción de productos secundarios, hacen que esta estrategia de valorización sea demasiado compleja e impráctica económicamente, además de que seguirán prevaleciendo residuos del fermento [2]. Otra estrategia de reúso recientemente publicada propone el empleo de las hojas para la producción de biocombustibles [1] sin embargo, los diferentes tratamientos fisicoquímicos que deben ser aplicados para la deslignificación e hidrólisis de azúcares, encarece el proceso convirtiéndolo en una alternativa costosa. Debido a lo anterior, en la actualidad aún se encuentran en estudio estrategias que permitan aprovechar este residuo otorgándole un valor agregado que permita a la industria tequilera contar con una economía circular, procesos de producción sustentables y amigables con el medio ambiente. En el presente trabajo de investigación se muestra una alternativa innovadora para la valorización de este residuo. A través de un método sencillo, el cual consiste en un desfibrado mecánico, es posible transformar las hojas de agave a fibras con un alto contenido de carbono las cuales pueden funcionalizarse con grupos oxigenados para favorecer la adsorción de Cu(II) en solución, mostrando así un material adsorbente alternativo útil en procesos de tratamiento de aguas residuales.

Se tiene conocimiento que el proceso de adsorción se encuentra fuertemente ligado con interacciones electroestáticas entre el catión en solución y el  $\text{pH}_{\text{pzc}}$  del adsorbente, por tal razón la funcionalización del material permitirá una mejora considerable en la capacidad de adsorción y por ende en la remoción del contaminante presente en el agua.

Recolección y tratamiento de la muestra. Se recolectaron hojas de agave *tequilana* Weber variedad azul posterior al proceso de jimado de la planta. La extracción de la fibra consistió en un tratamiento



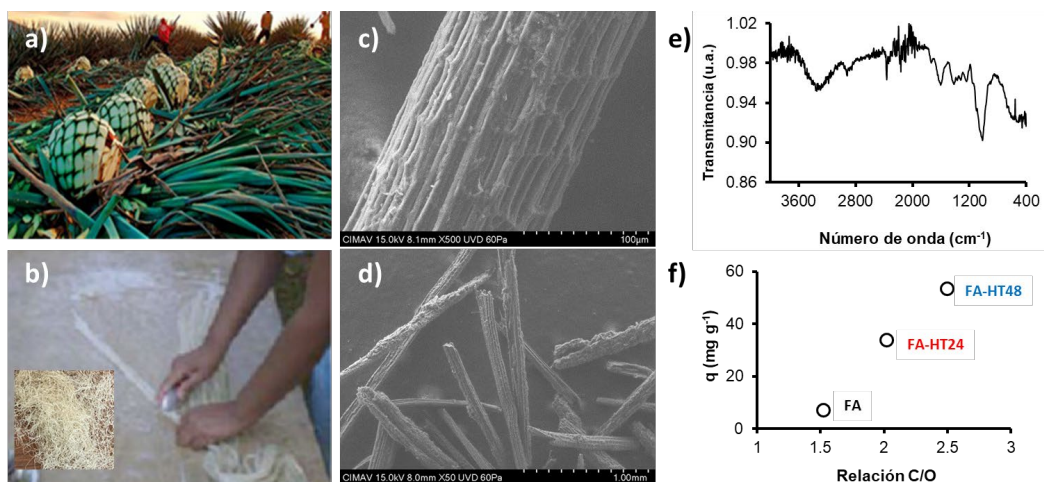
mecánico para eliminar toda la pulpa, posteriormente se empleó un cepillo de fibras para retirar la cobertura de la hoja y obtener fibras delgadas (Figura 1b). Las fibras se limpiaron de forma manual retirando las impurezas, se lavaron con agua destilada, se secaron a 105 °C durante 12 h y se etiquetaron como *FA*. La funcionalización del material se realizó a través de un tratamiento hidrotermal en un recipiente de teflón y autoclave de acero inoxidable a 200 °C por 24 h (material *FA-HT24*) y 48 h (material *FA-HT48*).

Caracterización fisicoquímica. Con la finalidad de conocer las propiedades de los materiales sintetizados se realizó su caracterización empleando microscopía electrónica de barrido (SEM-EDX), fisisorción de nitrógeno, espectroscopia FTIR y análisis termogravimétrico.

Estudios de adsorción de cobre en modo estático. Para los estudios de adsorción se prepararon soluciones a diferentes concentraciones de Cu(II) (en un rango de 50 a 1000 mg L<sup>-1</sup>) empleando CuSO<sub>4</sub>·5H<sub>2</sub>O. como adsorbato. Los experimentos se realizaron en un agitador orbital y las condiciones experimentales fueron: 25 °C, pH 5.0 (debido a que en esta condición el adsorbente presenta carga parcial negativa: p*H*<sub>pzc</sub> 3.5 < pH 5; la solución se reguló empleando soluciones de NaOH y HCl 0.1 M), 0.02 g de adsorbente, 10 mL de adsorbato y 180 rpm. Las capacidades de adsorción se obtuvieron a partir de un balance de masa entre la concentración inicial y final del Cu(II) en solución:  $q = (C_0 - C_f)(V/m)$ . La concentración de Cu(II) se determinó por espectroscopia UV-Vis mediante la formación de un complejo amoniacal de cobre de color azul intenso a una  $\lambda = 611$  nm.

El largo de las fibras fue de 10 cm en promedio con un diámetro de 108.00 ± 6.55 μm. Las imágenes SEM más representativas se muestran en la Figura 1c y 1d. En todos los casos se observa una estructura ensamblada en varias capas con canales bien definidos e interconectados a lo largo de la fibra. La figura 1e muestra el espectro FTIR de *FA-HT48*, el cual es común para todos los materiales estudiados, evidenciando la presencia de enlaces -OH (3600 cm<sup>-1</sup>) y C-OH (1010 cm<sup>-1</sup>) atribuibles a la celulosa del material. A partir del análisis EDX se obtuvo la composición elemental en la superficie de los materiales, se concluye que a medida que incrementa el tiempo de funcionalización aumenta la relación C/O, lo cual se relaciona linealmente con la capacidad de adsorción de Cu(II), para el caso del material *FA-HT48* se obtienen capacidades de adsorción de 53.35 mg g<sup>-1</sup>, lo que corresponde a 7.6 veces más que la fibra sin funcionalizar, este valor puede considerarse competitivo contra estudios previamente reportados en la literatura [3].

El aumento en la capacidad de adsorción del material puede describirse debido a que el proceso hidrotermal modifica la estructura de las fibras incrementando su área superficial, promoviendo la formación de una monocapa en la superficie del adsorbente en la cual interaccionan los grupos oxigenados que presentan, carga parcial negativa p*H*<sub>pzc</sub> 3.5 < pH 5, y el catión en solución a través de interacciones electrostáticas.



**Figura 1.** a) Fotografía de hojas y piñas de agave tequilana Weber variedad azul posterior a la jima, b) Fibra obtenida a partir de hojas de agave, c y d) Fotografías SEM de FA-HT48, e) espectro FTIR de FA-HT48 y f) Relación C/O vs. capacidad de adsorción de Cu(II) en solución acuosa.

## Referencias

1. Ávila-Gaxiola, E., Ávila-Gaxiola, J., Velarde-Escobar, O., Ramos-Brito, F., Atondo-Rubio, G., & Yee-Rendon, C. (2017). "Effect of Drying Temperature on Agave tequilana Leaves: A Pretreatment for Releasing Reducing Sugars for Biofuel Production". *Journal of Food Process Engineering*, 40(3), 1–8.
2. González-García, Y., Grieve, J., Meza-Contreras, J. C., Clifton-García, B., & Silva-Guzman, J. A. (2019). "Tequila Agave Bagasse Hydrolysate for the Production of Polyhydroxy butyrate by *Burkholderia sacchari*". *Bioengineering*, 6(4), 115.
3. Bilal, M., Shah, J. A., Ashfaq, T., Gardazi, S. M. H., Tahir, A. A., Pervez, A., ... & Mahmood, Q. (2013). Waste biomass adsorbents for copper removal from industrial wastewater—a review. *Journal of hazardous materials*, 263, 322-333.

## Catáfilas externas de *Allium sativum* L. como adsorbente natural para la remoción de plomo en agua utilizando un sistema FIA

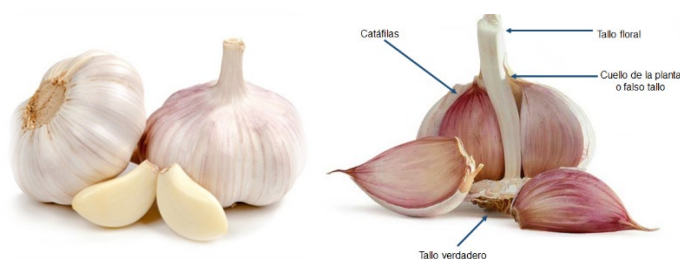
A.M. Lara Sánchez<sup>1</sup>, T.J. Ulloa Cerda<sup>1</sup>, M.S. Florencio Martínez<sup>1</sup>, I.M. de la Garza Rodríguez<sup>1</sup>, E.M. Colunga Urbina<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Universidad Autónoma de Coahuila, Facultad de Ciencias Químicas, Departamento de Química Analítica., Boulevard Venustiano Carranza y Cárdenas Valdez S/N, Col. República Oriente, C.P. 25280, Saltillo, Coahuila, México.

Autor para correspondencia: ecolunga@uadec.edu.mx

**Palabras Clave:** *Allium sativum* L, plomo, FIA

El origen de *Allium sativum* L. se sitúa en Asia Central [1], en México, la zona del Bajío es considerada como una de las principales productoras de *Allium sativum* L., sin embargo, también se producen en Aguascalientes, Sonora, Baja California, Nuevo León y Zacatecas [2], *Allium sativum* L. (Figura 1), perteneciente a la familia *Liliaceae*, la planta puede llegar a medir alrededor de 30 hasta 90 cm de altura, es una planta que contiene un bulbo prolífero y odorífero, de ahí se tienen los dientes que se encuentran unidos a una base en donde se forman las axilas de las hojas, conocidas como hojas fértiles y éstas le sirven para almacenar nutrientes de reserva [3]. Las hojas estarán formadas por una vaina y por un limbo que es aplanado, estrecho, fistuloso y largo, además tiene un nervio central que es desarrollado y puntiagudo al final [4]. También cuenta con un tallo falso que es corto y erecto y está formado por las vainas de las hojas. En la base, están las hojas en donde no se acumulan sustancias nutritivas y que al morir se convierten en la cáscara del bulbo, conocida como catáfila o túnica [3]. Cada bulbo, que se encuentra compuesto de varios dientes, estarán envueltos por capas, catáfilas interiores, que les sirve de protección y que a su vez estarán unidos en la base; mientras que el bulbo es envuelto por varias catáfilas exteriores membranosas de diferentes coloraciones que pueden variar, por ejemplo, el blanco, púrpura o rojo [3, 4].



**Figura 1.** *Allium sativum* L. y las partes que componen un bulbo

*Allium sativum* L. es una hortaliza, que contiene compuestos bioactivos, fibra y micronutrientes [1], Esta planta se caracteriza por su distintivo olor, que es consecuencia de varias reacciones bioquímicas complejas. Los compuestos responsables que le brindan sabor y olor, son los aminoácidos no volátiles que contienen azufre, como: tiosulfínatos como la aliína o S-alil-cisteína sulfóxico. Existen otros compuestos azufrados volátiles, que poseen propiedades bioactivas como: aliína, alicina (que es el compuesto principal); 1,2-vinilditina, alixina y S-alil-cisteína y otros subproductos como dialil-



sulfuros, metil alil-sulfuros y dipropil mono-sulfuros, di-sulfuros, tri-sulfuros, y tetra-sulfuros, que son el resultado de la descomposición de los tiosulfatos. Una vez que se cosechan los ajos, las catáfilas exteriores se secan y son desechadas, pero aún conservan algunos compuestos [5]. Estas catáfilas pueden ser utilizadas como adsorbentes naturales para la remoción de metales pesados.

La adsorción de los metales sobre la superficie de minerales y sustancias húmicas asociadas a la materia orgánica es uno de los procesos geoquímicos más importantes para el destino, transporte y biodisponibilidad de metales en el agua, provocando una acumulación de dichos metales en los constituyentes químicos de los sedimentos, donde permanecen estables hasta que se produce un cambio en las condiciones físicas y químicas del medio [6]. La recuperación de metales pesados de mantos acuíferos puede llevarse a cabo de acuerdo con diferentes tratamientos, entre ellos se encuentran las técnicas convencionales más utilizadas son: precipitación química, intercambio iónico, tecnologías de membranas, etc. [7-9]. La adsorción ha tenido un gran auge ya que es considerada una tecnología limpia y de bajo costo ya que es el resultado de la atracción entre las moléculas de la superficie del biosólido y los metales pesados presentes en el agua contaminada [10].

Los sistemas FIA (Análisis de Inyección de Flujo) fueron desarrollados por J. Ruzicka y E.H. Hansen en 1975, con estos sistemas se pueden controlar algunos de los componentes como: el tamaño del reactor (adsorbente empacado), diámetro interno de las tuberías, caudal del sistema, etc. [11] y esto nos permite tener un sistema que nos permita optimizar rápidamente [12] el proceso de adsorción utilizando adsorbente natural. El objetivo de este trabajo fue evaluar la capacidad de *Allium sativum L* como adsorbente natural de plomo presente en muestras acuosas mediante un sistema FIA.

Se realizó un diseño factorial ( $2^4$ , variables estudiadas: tamaño de partícula (1x1 mm y 2x2 mm), caudal (0.8 y 1 ml/min), concentración de estándar (1 y 2 mg/L), volumen de estándar (6 y 12 ml) utilizando 0.01 g de adsorbente y después de obtener las concentraciones de plomo de las disoluciones acuosas que se pasaron por el sistema FIA con el adsorbente de cada tratamiento, se realizó el ANOVA y con los resultados del análisis de varianza se obtuvieron p-valores mayores de 0.05 obtenemos los valores óptimos de las variables de estudio: tamaño de partícula óptimo 1x1 mm, caudal de 0.8 ml/min, concentración de estándar de 1 mg/L y volumen de estándar de 6 ml, con estos valores óptimos se removió más del 91% de plomo. Por lo que se realizó otro tratamiento en donde se varió la cantidad de adsorbente (0.01, 0.015 y 0.02 g de adsorbente) y las otras cuatro variables se mantuvieron constantes, encontrando que al utilizar 0.015 g de adsorbente podemos remover más del 96% del plomo presente en la disolución acuosa.

Con los resultados de obtenidos podemos concluir que las catáfilas de *Allium sativum L* pueden ser utilizadas para remover plomo de soluciones acuosas de una forma rápida con el uso de sistemas FIA, utilizando las variables óptimas alcanzando a remover más de 0.96 mg/L de plomo.

## Referencias

1. Burba, J. (2003). Producción de Ajo, Instituto de Tecnología Agropecuaria, Mendoza. Argentina. 6-11.
2. Zamora, E. (2016). El cultivo del ajo., Universidad de Sonora, Hermosillo-Sonora. Mexico. pp. 1-7.



3. Reveles, M., Velásquez, R., Bravo, A. (2009). Tecnología Para Cultivar Ajo En Zacatecas. *Instituto Nacional de Investigaciones Forestales, Agrícolas y Pecuarias.*, 11, pp. 40-45. Calera-Zacatecas. México
4. Sarita, V. (1995). Cultivo de Ajo., *Fundación de Desarrollo Agropecuario, Inc.* 2, pp. 1-8.
5. Martins, N., Petropoulos, S., y Ferreira, I. (2016). Chemical composition and bioactive compounds of garlic (*Allium sativum* L.) as affected by pre- and post-harvest conditions: A review. *Food Chemistry*, 211, pp. 41–50.
6. Carretero, M.I., Poza M. (2008). Mineralogía aplicada. Salud y medioambiente: Salud y medioambiente. Editorial Thomson, España.
7. Zhu, Y., Sengupta, A. (1992). *Environmental Science. Technology.* pp.26.
8. Volesky, B. (2001). Detoxification of metal-bearing effluents: biosorption for the next century. *Hydrometallurgy.* 59, pp. 203-216.
9. Mallevialle J., Wiener M. (1998). Tratamiento del agua por procesos de membrana. primera ed. España: Mc Graw Hill.
10. Prieto, J., González, C., Román, A., y Prieto, F. (2009). Contaminación y Fitotoxicidad en Plantas por Metales Pesados Provenientes de Suelos y Agua. *Tropical and Subtropical Agroecosystems*, 10, pp. 29–44.
11. Ranger, C. B. (1981). Flow Injection Analysis. *Analytical Chemistry*, 53, pp. 20-22.
12. Růžička J. (1983). Flow Injection Analysis. *Analytical Chemistry* 55 [11] 1040A- 1053A.

## Evaluación preliminar de la cáscara de nuez pecanera como adsorbente natural de cadmio utilizando un sistema FIA

L.E. González Rodríguez<sup>1</sup>, M.S. Florencio Martínez<sup>1</sup>, T.J. Ulloa Cerda<sup>1</sup>, E.M. Colunga Urbina<sup>1</sup>, I.M. de la Garza Rodríguez<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Autónoma de Coahuila, Facultad de Ciencias Químicas, Departamento de Química Analítica., Boulevard Venustiano Carranza y Cárdenas Valdez S/N, Col. República Oriente, C.P. 25280, Saltillo, Coahuila, México.

Autor para correspondencia: [ilianagarza@uadec.edu.mx](mailto:ilianagarza@uadec.edu.mx)

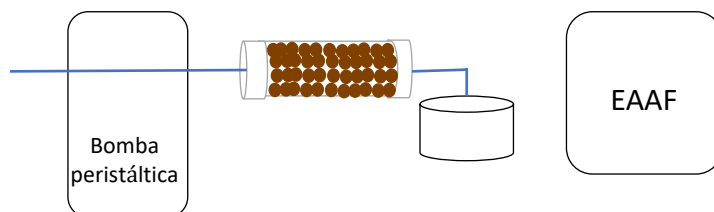
**Palabras Clave:** nuez, adsorbente natural, cadmio.

La remoción de metales pesados es una de las principales problemáticas para el tratamiento de aguas ya que la presencia de éstos aumenta constantemente debido a una gran variedad de procesos naturales y antropogénicos. Los metales pesados pueden llegar a los diferentes reservorios de agua disminuyendo la calidad de ésta [1]. La presencia o la descarga de metales pesados a cuerpos de agua puede tener consecuencias fatales sobre el medio ambiente y las poblaciones aledañas a la fuente de agua, ya que al consumir agua con presencia de metales pesados estos se bioacumulan en las plantas, evitando su crecimiento normal y en los seres vivos provocan enfermedades neurológicas [2]. Existen diversos métodos para la eliminación de metales pesados del medio acuoso como la precipitación química, intercambio iónico, filtración por membrana, técnicas de coagulación y floculación y el uso de materiales porosos [2]. El uso de materiales porosos como los adsorbentes naturales se ha incrementado en los últimos años principalmente debido a su bajo costo, que es insignificante en comparación con el costo de las resinas de intercambio iónico y el carbón activado, usados como adsorbentes sintéticos. Existe una amplia variedad de adsorbentes como la cáscara de arroz, material celulósico, trigo, corteza, aserrín de nuez, cáscara de nuez de castaño o de indias verdes, cáscara de nuez pecanera, cáscara de calabaza, desechos de la industria de té. El contenido de lignina y otros grupos funcionales presentes en la superficie de estos materiales son responsables de la adsorción de metales y no-metales de la solución acuosa [2]. El árbol del *nogal pecanero* pertenece a la familia de las *Juglandaceae*, su cultivo está distribuido al sur de Estados Unidos y al norte de México, su fruto es la *nuez pecanera*, que se caracteriza por su cáscara gruesa y dura [3]: la variedad *Carya illinoensis* Wichita se cultiva al sur de Coahuila, en el municipio de Parras de la Fuente.

El objetivo de este trabajo fue evaluar la capacidad de la cáscara de *nuez pecanera* variedad *Wichita* como adsorbente natural de cadmio presente en muestras acuosas mediante un sistema FIA. Los sistemas FIA (Análisis de Inyección de Flujo) permiten controlar algunos de sus componentes como: el tamaño del reactor (adsorbente empacado), diámetro interno de las tuberías, caudal del sistema, etc., [4] esto nos permite optimizar rápidamente el proceso de adsorción de metales presentes en agua [5] utilizando adsorbentes naturales.

Se realizó un diseño factorial de tipo 2<sup>4</sup>, las variables estudiadas fueron el caudal con 2 y 4 ml/min, la masa de adsorbente, 0.01 y 0.02 g, la concentración del estándar, 0.5 y 1 mg/L, el volumen del estándar, 10 y 15 ml. Para cada tratamiento, se midió la concentración de cadmio en solución en el flujo de salida del sistema FIA (Figura 1), los datos se analizaron con ANOVA y con los resultados

del análisis de varianza y de acuerdo a los p-valores obtenidos se obtuvieron los valores óptimos de las variables del caudal (4 ml/min) y la masa de adsorbente (0.02g). Después se estudiaron las otras dos variables, la concentración de estándar de cadmio (0.3 y 0.5 mg/L) y el volumen del estándar a valores inferiores (8 y 10 mL), quedando como valor óptimo 0.5 mg/L y el volumen de estándar de 8 ml, más del 99.5%.



**Figura 1.** Diseño del sistema FIA, se utilizó una bomba peristáltica de 4 canales, tubería de teflón (0.8 mm D.I.), el reactor de 4 cm empacado de tubería teflón (1.5 mm D.I.), la detección se realizó con un Espectrofotómetro de Absorción Atómica con Flama.

Una de las conclusiones de la investigación demuestra que la cáscara de nuez puede utilizarse como adsorbente natural en un sistema FIA, utilizando una masa de 0.02 g de adsorbente se remueve más de 0.497 mg/L de cadmio presente en 8ml de una solución acuosa de concentración inicial 0.5 mg/L, utilizando un caudal de inyección de 4 ml/min.

## Referencias

1. Galzerano, B., Aprea, P., Liguori, B., Verdolotti, L. (2018). Removal of Cd (II) from wastewater by sustainable absorber: Composite diatomitebased foams. *American Institute of Physics*, 1981,1-4.
2. Pavan, G., Avinash, K., Yerra, B., Rao, K. (2019). Removal of Cu (II) using three low-cost adsorbents and prediction of adsorption using artificial neural networks. *Applied Water Science*, 44, 1-9.
3. Reyes-M., Lavín-A. 2014. Frutales de Nuez Cinco Alternativas no Tradicionales para el Secano Interior del Maule. *Boletín INIA*. **301**, 81-103.
4. Ranger, C. B. (1981). Flow Injection Analysis. *Analytical Chemistry*, 53, pp. 20-22.
5. Růžička J. (1983). Flow Injection Analysis. *Analytical Chemistry* **55** [11] 1040A- 1053A.

## Modelado de la isoterma de adsorción del colorante rojo ácido 27 por peridermis del tubérculo de jícama, *Pachyrhizus erosus* (L.) Urb.

D.A. Cruz-Reyes<sup>1</sup>, M.G. Castillo-Arenas<sup>1</sup>, P. Rodríguez-Cuamatzi<sup>1</sup>, J. García-Dávila<sup>1</sup>, L.A. Santiago-Santiago<sup>1</sup>, A.R. Netzahuatl-Muñoz<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Universidad Politécnica de Tlaxcala. Av. Universidad Politécnica No. 1, C.P. 90180, San Pedro Xalcaltzinco, Tepeyanco, Tlaxcala, México.

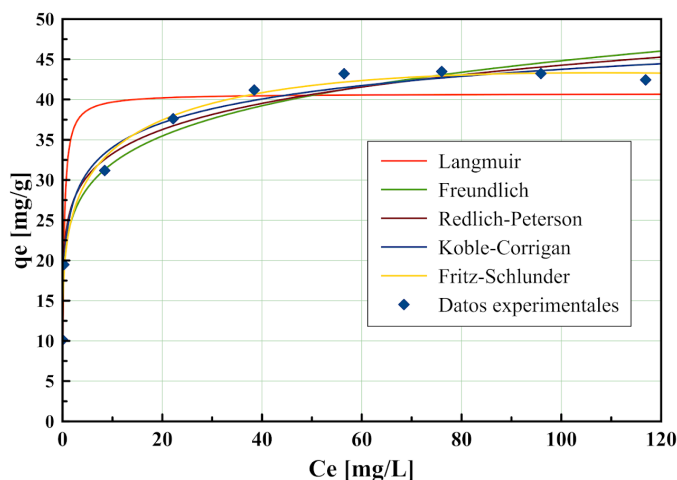
**Palabras Clave:** colorantes textiles, isotermas de adsorción, *Pachyrhizus erosus*.

Los colorantes orgánicos son moléculas producidas a gran escala principalmente para las industrias textil, de pinturas, plásticos, papel y tintas de impresión. Los colorantes sintéticos han sido diseñados para ser altamente resistentes a los agentes químicos, luz solar y al ataque microbiano, por este motivo se consideran moléculas recalcitrantes una vez que son descargados al ambiente [1]. La biosorción es una tecnología que ha sido empleada con éxito en la remoción de metales tóxicos de aguas contaminadas y tiene un alto potencial en la remoción de compuestos orgánicos recalcitrantes. *Pachyrhizus erosus* (L.) Urb. es una leguminosa originaria de México y Centroamérica [2], sus tubérculos tienen alto valor comercial principalmente en estado fresco y la piel que lo cubre es un subproducto que se desecha y que puede ser aprovechado como material biosorbente. El objetivo de la investigación es evaluar la capacidad de peridermis de jícama para remover por adsorción el colorante azoico rojo ácido 27 de soluciones acuosas mediante la obtención de la isoterma de adsorción y su modelado matemático. El material adsorbente consistió en partículas de peridermis del tubérculo de jícama pretratadas con ácido (HCl 0.5 N por 24 h). con tamaño de 300 a 500  $\mu\text{m}$  Los estudios de biosorción se llevaron a cabo empleando concentraciones iniciales de colorante entre 10 y 160  $\text{mg L}^{-1}$  a pH 2.0. La concentración del biosorbente fue de 1  $\text{g L}^{-1}$ . El sistema se mantuvo en agitación constante (130 ciclos/min) durante 24 h a  $25\pm 2$  °C. La concentración del colorante se determinó por medición de la absorbancia a 520 nm y empleando una curva de calibración de 10 puntos.

La Figura 1 muestra la isoterma de adsorción obtenida en la remoción de rojo ácido 27, la capacidad de biosorción en el equilibrio ( $q_e$ ) aumentó al incrementarse la concentración en el equilibrio del colorante ( $C_e$ ) en el intervalo comprendido entre 0 y 40  $\text{mg L}^{-1}$ , a concentraciones superiores de colorante la capacidad de biosorción tendió a un valor máximo experimental de 43  $\text{mg g}^{-1}$  indicando un estado de saturación de los sitios de adsorción. La capacidad de biosorción alcanzada por peridermis de jícama es comparable a la obtenida por hojas de *Eichornia crassipes* (43.1  $\text{mg g}^{-1}$ ) y superior a la reportada para cáscara de cacahuete (14.90  $\text{mg g}^{-1}$ ) y soya desgrasada (28  $\text{mg g}^{-1}$ ) [3].

Los modelos de Langmuir, Freundlich, Redlich-Petersen, Koble-Corrigan y Fritz-Schlunder [4, 5] se emplearon para describir la isoterma obtenida experimentalmente, el ajuste se realizó por regresión no lineal empleando MagicPlot 3.0.1. Los valores de los parámetros obtenidos en la descripción matemática de la isoterma se reportan en la Tabla 1. Los modelos de Koble-Corrigan, Redlich-

Petersen y Fritz-Schlunder fueron los que presentaron valores del coeficiente de determinación ( $R^2$ ) más altos y valores más bajos de la raíz del error cuadrático medio (RMSE), además como se observa en la Figura 1 estos modelos describen bien la tendencia de los datos experimentales.



**Figura 1.** Isoterma de adsorción de rojo ácido 27 y su ajuste con diferentes modelos matemáticos.

Los tres modelos mencionados se consideran formas de isotermas híbridas Langmuir-Freundlich, siendo el modelo de Koble-Corrigan aplicado generalmente a sorbentes de superficie heterogénea [4]. El valor de la constante  $g$  del modelo de Redlich-Peterson fue de 0.8767 siendo el valor de 1.0 el que representa a la isoterma de Langmuir [4]. El modelo de Langmuir presentó el menor valor de  $R^2$  y mayor de RMSE, además la capacidad de biosorción máxima ( $Q_0$ ) fue ligeramente menor a la experimental lo que refuerza la suposición del biosorbente presenta una superficie de adsorción heterogénea.

**Tabla 1.** Modelos matemáticos empleados y valor de los parámetros obtenidos en el ajuste de la isoterma de adsorción de rojo ácido 27 por peridermis de jícama

Modelo	Ecuación	Parámetros de la isoterma
Langmuir	$q_e = Q_0 b C_e / (1 + b C_e)$	$B = 3.733 \text{ L mg}^{-1}$ , $Q_0 = 40.74 \text{ mg g}^{-1}$ $R^2 = 0.8645$ , $RMSE = 4.779$
Freundlich	$q_e = k_F C_e^{1/n_F}$	$k_F = 22.943 \text{ (mg g}^{-1}) \text{ (mg L}^{-1})^{-1/n_F}$ , $n_F = 6.879$ $R^2 = 0.9728$ , $RMSE = 2.141$
Koble-Corrigan	$q_e = a C_e^{n_K} / (1 + b C_e^{n_K})$	$a = 38.27 \text{ L g}^{-1}$ , $n_K = 0.2802$ , $b_{KC} = 0.5995 \text{ (mg L}^{-1})^{-n_K}$ $R^2 = 0.9879$ , $RMSE = 1.540$
Redlich-Petersen	$q_e = K_{RP} C_e / (1 + a_{RP} C_e^g)$	$K_{RP} = 1556.6 \text{ L g}^{-1}$ , $a_{RP} = 62.03 \text{ (L mg}^{-1})^g$ , $g = 0.8767$ $R^2 = 0.9839$ , $RMSE = 1.780$
Fritz-Schlunder	$q_e = A_{FS} C_e^{B_{FS}} / (1 + B_{FS} C_e^{B_{FS}})$	$A_{FS} = 22.66 \text{ (mg g}^{-1}) \text{ (mg L}^{-1})^{-\alpha_{FS}}$ , $B = 0.02 \text{ (mg L}^{-1})^{-\beta_{FS}}$ , $\alpha_{FS} = 0.181$ , $\beta_{FS} = 1.0$ $R^2 = 0.9928$ , $RMSE = 1.192$



El peridermis del tubérculo de *Pachyrhizus erosus* (L.) Urb. alcanzó una capacidad de adsorción de  $43 \text{ mg g}^{-1}$  del colorante azoico rojo ácido 27 a pH 2.0. La isoterma de adsorción fue bien descrita por modelos tipo Langmuir-Freundlich lo que sugiere una superficie heterogénea.

## Referencias

1. Dias, A. A., Sampaio, A., y Bezerra, R. M. (2007). Environmental applications of fungal and plant systems: decolourisation of textile wastewater and related dyestuffs. En *Environmental Bioremediation Technologies*, pp. 445-463. Springer, Berlin, Heidelberg.
2. Reyes-Matamoros, J., Martínez-Moreno, D., Rueda-Luna, R., y Maldonado-Morales, A. (2016). Prevención de plagas y prácticas culturales en jícama en la comunidad de Alpoyecá, México. *Revista Iberoamericana de Ciencias*, 3(1), 1-9.
3. Guerrero-Coronilla, I., Morales-Barrera, L., Villegas-Garrido, T. L., y Cristiani-Urbina, E. (2014). Biosorption of amaranth dye from aqueous solution by roots, leaves, stems and the whole plant of *E. crassipes*. *Environmental Engineering & Management Journal (EEMJ)*, 13(8).
4. Rangabhashiyam, S., Anu, N., Nandagopal, M. G., y Selvaraju, N. (2014). Relevance of isotherm models in biosorption of pollutants by agricultural byproducts. *Journal of Environmental Chemical Engineering*, 2(1), 398-414.
5. Berber-Villamar, N. K., Netzahuatl-Muñoz, A. R., Morales-Barrera, L., Chávez-Camarillo, G. M., Flores-Ortiz, C. M., y Cristiani-Urbina, E. (2018). Corn cob as an effective, eco-friendly, and economic biosorbent for removing the azo dye Direct Yellow 27 from aqueous solutions. *PLoS One*, 13(4), e0196428.



## Modelamiento de la biosorción de contaminantes en el agua con *Spirulina maxima*

J.E. Hernández Leos<sup>1</sup>, N.V. Pérez Aguilar<sup>1</sup>, M.I.L. Gallegos García<sup>1</sup>, S.A. Cruz Briano<sup>2</sup>, N.A. Medellín Castillo<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Universidad Autónoma de Coahuila, Facultad de Ciencias Químicas, Departamento de Ingeniería Química. Boulevard Venustiano Carranza y José Cárdenas Valdés, CP 25280, Saltillo, Coahuila, México.

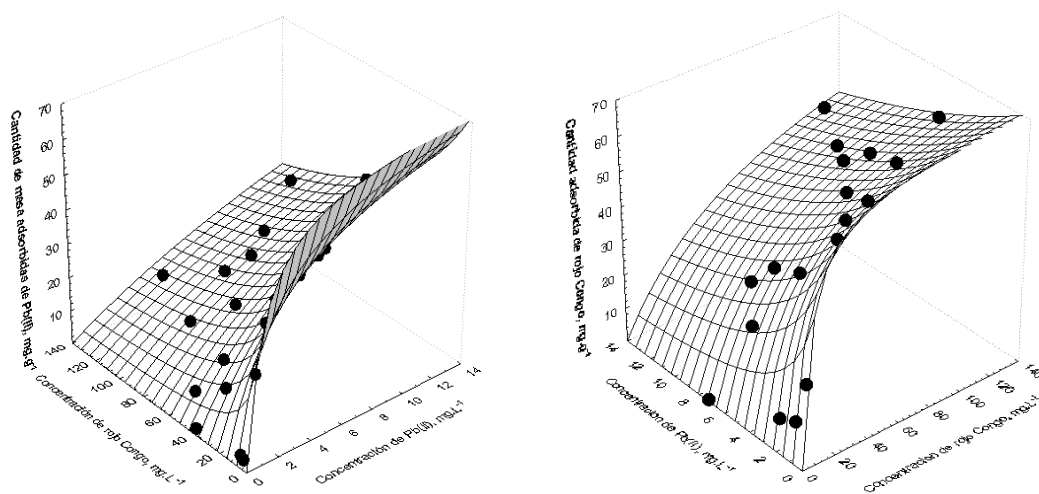
<sup>2</sup>Universidad Autónoma de San Luis Potosí, Facultad de Ingeniería, Av. Manuel Nava No.8, Col. Zona Universitaria Poniente, CP. 78290, San Luis Potosí, SLP., México

**Palabras Clave:** Biosorción, modelamiento de adsorción, microalgas.

La contaminación del agua por colorantes y metales pesados es uno de los problemas más importantes que perjudican al medio ambiente y el desarrollo de los ecosistemas. Este tipo de contaminantes no son biodegradables, por lo que fácilmente pueden bioacumularse por los organismos vivos causando impactos negativos por su toxicidad. Con frecuencia, la carga de estos contaminantes en los efluentes industriales ha superado los límites de concentración máxima permitida (LMP), por lo que sus efectos se han multiplicado rápidamente debido al notable crecimiento de la industria en años recientes (Gómez García et al., 2016). Para resolver esta situación se han hecho estudios de métodos de remoción de estas sustancias con biosorbentes de diferente tipo, uno de ellos es la microalga *Spirulina maxima*, la cual se cultiva de manera sencilla, por su crecimiento en ambientes que pueden contener contaminantes y además es de bajo costo, tiene buena capacidad de biosorción de sustancias tóxicas, por lo cual son una excelente alternativa para aplicarlos con este objetivo (Al-Ghouti et al., 2010; Wang et al., 2020). Este trabajo presenta resultados preliminares de la biosorción sobre *Spirulina maxima* del colorante rojo congo (RC) y del ión plomo ( $Pb^{2+}$ ) de manera simultánea. Los datos experimentales se analizaron con tres modelos de isotermas multicomponente: el modelo extendido de Langmuir (ELMI), la isoterma multicomponente no-modificada de Langmuir (NLMI) y la isoterma multicomponente no-modificada de Redlich-Peterson (NRPMI). El promedio de la desviación de los datos fue 40%; la isoterma multicomponente mostró principalmente un efecto de antagonismo, que fue más pronunciado en bajas concentraciones de plomo y del colorante RC.

La biomasa de la microalga *Spirulina maxima* removió al ión  $Pb^{2+}$  y RC en solución. Los datos experimentales de las isotermas multicomponente de biosorción se analizaron con los modelos de isotermas multicomponente, como el modelo de isoterma multicomponente de Langmuir extendido (ELMI), isoterma multicomponente no-modificada de Langmuir (NLMI) y la isoterma multicomponente no-modificada de Redlich-Peterson (NRPMI). Debe mencionarse que solo se presentan los datos de la isoterma multicomponente de Langmuir extendido (ELMI), ya que este modelo representó con mejor ajuste a los datos del laboratorio, reportando una desviación de los datos de 40% en la isoterma multicomponente. En la Figura 1 se muestra el conjunto de varias isotermas de biosorción de soluciones bicomponentes conteniendo  $Pb^{2+}$  y RC, los datos experimentales se analizaron para cada adsorbato y posteriormente se modeló con la isoterma de Langmuir extendido.

Al analizar el comportamiento de los datos, se puede sugerir que la presencia de los dos contaminantes en la solución da lugar a dos efectos en función de la concentración. Cuando los dos contaminantes se encuentran en concentración mayor a 20 mg/L, se observó que la masa retenida tiene un comportamiento sinérgico entre la molécula de RC y el ion de  $Pb^{+2}$ .



**Figura 1.** Isothermas de Adsorción de Rojo congo (izquierda) y del ión plomo (derecha), a pH 5 y 25°C. Las líneas representan la tendencia de los datos modelados con la ecuación de ELMI.

En conclusión, se observa que el efecto de biosorción para el plomo y el colorante rojo Congo fue principalmente antagonismo, este efecto es más pronunciado cuando la concentración de cada especie en solución es mayor que 6 mg/L, y puede estar determinado por el gradiente de concentración y el tamaño del ión  $Pb^{+2}$  con respecto al de la molécula del RC. Las isothermas de adsorción de plomo y del rojo Congo presentan menor desviación cuando se utiliza el modelo ELMI.

## Referencias

1. Gómez García, M., Tovar, R., & Hernández Eudave, M. (2016). Adsorción en continuo del colorante ab25 y el metal cadmio en soluciones binarias sobre carbón modificado. *Con Ciencia Tecnológica*, 52, 35–41.
2. Al-Ghouti, M. A., Li, J., Salamh, Y., Al-Laqtah, N., Walker, G., & Ahmad, M. N. M. (2010). Adsorption mechanisms of removing heavy metals and dyes from aqueous solution using date pits solid adsorbent. *Journal of Hazardous Materials*, 176(1–3), 510–520. <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2009.11.059>
3. Wang, J., Huang, J., Xu, M., Li, Z., Fan, L., & Chen, R. (2020). A composite FeOOH@microalgae for heavy metals and Congo red removal from aqueous solution. *Desalination and Water Treatment*, 191, 263–284. <https://doi.org/10.5004/dwt.2020.25656>

## Predicción de la adsorción de colorantes sintéticos de soluciones acuosas utilizando el modelado de redes neuronales artificiales.

**A. Díaz Rivera<sup>1</sup>, J. C. Estrada Moreno<sup>1</sup>, R. E. Zavala Arce<sup>\*1</sup>, J. L. García Rivas<sup>1</sup>, N. A. Rangel Vázquez<sup>2</sup>, M. L. Jiménez Núñez<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>División de Estudios de Posgrado e Investigación, Tecnológico Nacional de México/Instituto Tecnológico de Toluca, Av. Tecnológico s/n, Col. Agrícola Bellavista, CP 52149 Metepec, EdoMex, México, Aguascalientes, Ags., México

<sup>2</sup>Instituto Tecnológico de Aguascalientes, Av. Adolfo LópezMateos No.101 Ote., CP 20256

[1rzavala@toluca.tecnm.mx](mailto:1rzavala@toluca.tecnm.mx)

**Palabras Clave:** RNA, adsorción, colorantes sintéticos.

Uno de los problemas a nivel mundial es la contaminación del agua, ya que reduce la disponibilidad de agua dulce o potable. Algunos contaminantes en solución acuosa como los colorantes sintéticos son capaces de alterar las propiedades físicas y químicas del suelo, deteriorando los cuerpos de agua, dañando la flora y la fauna en el medio ambiente, así como la salud humana. Entre los métodos para tratar aguas residuales destaca la adsorción debido a su viabilidad técnica, flexibilidad y simplicidad de operación. La adsorción es la acumulación preferencial de una sustancia en fase líquida o gaseosa (adsorbato) sobre la superficie de un sólido (adsorbente) [1]. Los absorbentes más utilizados son carbonos activados, arcillas y biopolímeros. Actualmente, existe un gran interés en la búsqueda de nuevos materiales adsorbentes para la remoción de contaminantes, destacando las hidrotalcitas por su alta capacidad de retención de colorantes, fáciles de sintetizar, se pueden regenerar, su gran espacio interlamilar, alta capacidad de intercambio aniónico, resistencia al agua y alta estabilidad térmica [2 y 3].

La red neuronal artificial (RNA) es un modelo computacional que puede introducir funciones matemáticas, se basan en el funcionamiento de las redes neuronales biológicas del cerebro humano, su campo de aplicación va en aumento por su sencillez, robustez, fiabilidad y crean una relación no lineal entre variables independientes y dependientes basadas en un conjunto de datos experimentales. Las RNA son empleadas para resolver y modelar el pronóstico de series de tiempo, el reconocimiento de patrones, control de procesos, tratamiento de agua y para predecir la capacidad de remoción de contaminantes de un proceso de adsorción [4 y 5].

Para el diseño de la RNA se tomaron los resultados experimentales reportados por Estrada (2021), para el uso de hidrotalcitas de MgAl para la adsorción de los colorantes azul no.1, rojo no.2 y amarillo no. 5 en solución acuosa [6].

Se realizaron 3 topologías de RNA (A, B y C) donde el número de capas ocultas fueron determinadas por medio de prueba y error, hasta obtener el coeficiente de determinación más alto. La Tabla 1 muestra los parámetros para las variables de entrada y salida de la RNA. En total se desarrollaron 30 redes para cada uno de los modelos con función de entrenamiento *Levenberg-Marquardt*, las redes emplearon el 70 % de los datos para entrenamiento, un 15% para prueba y el restante 15% para validación.

**Tabla 1.** Parámetros para las variables de entrada y salida de la RNA

<b>Entrada</b>	
<b>Variable</b>	<b>Rango</b>
Concentración inicial (mg/L)	50-6000
Temperatura (°C)	30 y 50
Tiempo (min)	5-360
pH inicial	3-12
<b>Salida</b>	

En la topología A y B se establecieron dos variables de entrada y en la topología C se establecieron cuatro variables de entrada: para cada topología se establecieron tres variables de salida (capacidad de adsorción para cada colorante). En los tres diseños de las RNA se propuso una red Feedforward backprop y las funciones de transferencia Tansig para las capas ocultas y purelin para la capa de salida, variando el número de capas ocultas de 1 a 5 y el número de neuronas de 5 a 10. El rendimiento de la red se evaluó mediante a la fórmula estadística de coeficiente de determinación ( $R^2$ ) [6]. En la topología A se realizó el entrenamiento de los datos experimentales con las variables de entrada pH y tiempo de contacto, en la topología B las variables de entrada fue la concentración inicial del colorante y temperatura y en la topología C se establecieron 4 variables de entrada: concentración inicial de los colorantes, tiempo de contacto, temperatura y pH inicial; al igual que las topologías A y B se evaluaron 3 variables de salida para cada colorante. En la Tabla 2 se muestran las redes cuyo entrenamiento mostró el mayor coeficiente de determinación para cada colorante.

**Tabla 2.** Rendimiento de las RNA para las diferentes topologías

<b>RNA</b>	<b>No. de capas</b>	<b>No. de neuronas</b>	<b>R2 (azul)</b>	<b>R2 (rojo)</b>	<b>R2 (amarillo)</b>
A	1	6	0.9602	0.9868	0.9980
B	4	5	0.9999	0.9997	0.9995
C	3	9	0.9968	0.9970	0.9856

El modelado de la RNA permitió conocer predecir el comportamiento del proceso de las cinéticas de adsorción de los colorantes azul no1, rojo no.2 y amarillo no.5, bajo diferentes condiciones; el 99% de los colorantes en la solución de 250 mg / L se puede eliminar en las siguientes condiciones: pH de 6, tiempo de contacto de 60 min y 30 ° C. El ajuste de los datos de las cinéticas de adsorción a los modelos cinéticos arrojó que estos se ajustan al modelo de pseudo primer orden. Los datos de las



isotermas de adsorción en las diferentes temperaturas (30 y 50 °C) se entrenaron también en la RNA ajustando a los modelos de isotermas de Langmuir y Freundlich, con un mejor ajuste al modelo de Langmuir y se predijo la capacidad máxima de adsorción la cual dio de 1191.527 mg/g para azul no.1, para el rojo no.2 de 1118.809 mg/g y para el amarillo no. 5 de 673.974 mg/g. En comparación con los resultados experimentales el método de RNA se pueden aplicar con éxito para la predicción de la capacidad de adsorción para los colorantes azul no. 1, rojo no 2 y amarillo no. 5; teniendo como beneficios reducir tiempo, costos y reducción de desechos en la experimentación ya que arroja resultados confiables para evitar el proceso de prueba y error en los experimentos de adsorción.

## Referencias

1. Vega Sánchez P., Martínez Luévanos A., Cano Salazar L. F., Claudio Rizo J. A., Burciaga Montemayor N. G. (2020), "Compósitos en estado hidrogel con aplicación en la adsorción de metales pesados presentes en aguas residuales", TIP Revista Especializada en Ciencias Químico Biológicas, 23(1):1-13
2. Ouassif H., Moujahid E. M., Lakhale R., Sadik R., Bouragba F. Z., Diouri M. (2020), "Zinc-Aluminum layered double hydroxide: High efficient removal by adsorption of tartrazine dye from aqueous solution", Surfaces and Interfaces, 18: 100401, DOI: 10.1016/j.surfin.2019.100401.
3. Gidado S. M., Akanyeti I. (2020), "Comparison of Remazol Brilliant Blue Reactive Adsorption on Pristine and Calcined ZnAl, MgAl, ZnMgAl Layered Double Hydroxides", Water, Air, and Soil Pollution, 231(4):1-18 DOI: 10.1007/s11270-020-04522-0
4. Daneshvar, N., Khataee, A. R., & Djafarzadeh, N. (2006). "The use of artificial neural networks (ANN) for modeling of decolorization of textile dye solution containing CI Basic Yellow 28 by electrocoagulation process". Journal of hazardous materials, 137(3), 1788-1795. DOI: 10.1016/j.jhazmat.2006.05.042
5. Ghaedi, A. M., & Vafaei, A. (2017). "Applications of artificial neural networks for adsorption removal of dyes from aqueous solution: a review". Advances in colloid and interface science, 245, 20-39.
6. E. M. J. Cesar. (2021), "Evaluación de los hidróxidos dobles laminares MgAl en la sorción de los colorantes azul no.1, rojo no.2 y amarillo no. 5 en solución acuosa", Tesis de Maestría en Ciencias en Ingeniería Ambiental, Instituto Tecnológico de Toluca

## Índice de Autores

<i>Nombre</i>	<i>Página</i>
Aldaba Lucio, Paola del Rosario	32
Arcibar Orozco, Javier Antonio	53
Arillo Flores, Oscar	51
Arriola Morales, Janette	5
Ávila Camacho, Billy Alberto	2
Ávila Márquez, Delia Monserrat	41
Barrera, D.	17
Blanco Flores, Alien	41
Carrales Alvarado, Damarys Haidee	11
Carrasco-Marín, Francisco	62
Castillo-Arenas, María Guadalupe	77
Castro-Larragoitia, Guillermo Javier	56
Cavazos Cuello, Luis Alfonso	35
Cavazos-Juárez, Gonzalo	20, 29
Collins Martínez, Virginia Hidolina	26, 69
Colunga Urbina, Edith Madaí	72, 75
Cortes Correa, Farid	62
Cruz Briano, Sergio Armando	56, 80
Cruz-Reyes, Dulce Alejandra	77
Dávila Guzmán, Nancy Elizabeth	35, 51, 53
de la Garza Rodríguez, Iliana Margarita	72, 75
Delgado-Sánchez, Pablo	56
Díaz Rivera, Alejandra	82
Elías Zuñiga, Marco Neftalí	37
Elizalde-González, María de la Paz	20, 29
Estrada Moreno, Julio César	82
Florencio Martínez, Mara Sarahí	72, 75
Flores Cardona, Cecilia	47
Franco, Camilo	62
Gallegos García, María Irene Liliana	80
García Lobato, Marco Antonio	37
García Reyes, Cinthia Berenice	35
García Rivas, José Luis	82
García-Dávila, Jorge	77
García-Díaz, Esmeralda	20, 29
García-Hernández, Sara Mariana	69
González Rodríguez, Luis Ervey	75
Gutiérrez Arias José Eligio Moisés	5
Gutiérrez-Martínez, Joel	23

<i>Nombre</i>	<i>Página</i>
Guzmán-Mar, Jorge Luis	14
Hernández Leos, Joana Elizabeth	80
Hernández-Fernández, Eugenio	51
Hinojosa-Reyes, Laura	14
Jiménez López, Brenda Azharel	11
Jiménez Núñez, María de la Luz	82
Juárez Martínez, Araceli	11, 59
Lara Sánchez, Alejandra Maritza	72
Leyva Ramos, Roberto	8, 11, 44, 47, 59
Loredo Cancino, Margarita	51, 53
Macías Juárez, Ismael	5
Medellín Castillo, Nahum Andrés	26, 56, 59, 80
Medici, Franco	63
Mendoza Mendoza, Esmeralda	44, 47
Michaelis, David J.	51
Montiel-Centeno, Kiara	17
Narro Céspedes, Rosa Idalia	32, 37
Netzahuatl-Muñoz, Alma Rosa	77
Ocampo Pérez, Raúl	26, 35, 69
Ortiz Ramos, Uziel	44
Oyervides Muñoz, Ernesto	32, 37
Padilla Ortega, Erika	26
Palomino-Cabello, Carlos	14
Patterer, María Silvina	63
Peluso, Miguel Andrés	63
Peña-Velasco, Gabriela	14
Pérez Aguilar, Nancy Verónica	32, 37, 80
Pérez Osorio, Gabriela	5
Rangel Vázquez, Norma Aurea	2, 82
Rangel-Méndez, José René	23
Rico Barragán, Alan Antonio	51, 53
Rodríguez-Cuamatzi, Patricia	77
Rojano, Benjamín	62
Romero-Cano, Luis Alberto	69
Salazar Rábago, Jacob Josafat	35, 51, 53
Sambeth, Jorge Enrique	63
Sampieri Croda, Álvaro	5
Sánchez Silva, Jonathan Michel	26
Sandoval Rangel, Ladislao	14
Santiago-Santiago, Luis Alberto	77
Sapag, Karim	17
Tiempos Flores, Norma	51, 53
Toledo Jaldin, Helen Paola	41

<i>Nombre</i>	<i>Página</i>
Turnes-Palomino, Gemma	14
Ulloa Cerda, Tiffany Jireh	72, 75
Valdez García, Génesis Derith	8
Valerio Cárdenas, Cintya	66
Vázquez Mendoza, Carolina	59
Warren-Vega, W.M.	69
Zapata Acosta, Karol	62
Zárate-Guzmán, A.I.	69
Zavala Arce, Rosa Elvira	82

**AVANCES EN ADSORCIÓN Y FENÓMENOS DE SUPERFICIE**  
**Primer Foro de Adsorción en México**

**Primera edición**

**Se terminó de compilar y editar en diciembre de 2022**  
**en formato electrónico como e-book-PDF**  
**en San Nicolás de los Garza, Nuevo León, México.**

**ISBN: 978-607-59537 0-0**



ASOCIACIÓN MEXICANA DE ADSORCIÓN



**UANL**

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN



**Universidad  
Autónoma  
de Coahuila**



**Anton Paar**



**BUAP**



**UASLP**  
Universidad Autónoma  
de San Luis Potosí



**Anyover**

Instrumentación científica