



UNIVERSIDAD AUTONOMA DE SAN LUIS POTOSÍ

FACULTAD DE INGENIERÍA

**“REMOCION DE PENTACLOROFENOL PRESENTE EN AGUA
POR MEDIO DE ADSORCIÓN SOBRE CARBÓN ACTIVADO”**

TESIS

**QUE PARA OBTENER EL GRADO DE
MAESTRO EN HIDROSISTEMAS
ESPECIALIDAD EN AMBIENTAL**

PRESENTA

Q.F.B. MARTHA MA. GUADALUPE HERNÁNDEZ ORTA

SAN LUIS POTOSÍ, S.L.P.

NOVIEMBRE 2001





Julio 19, 2001

**A LA Q.F.B. MARTHA MA. GUADALUPE HERNÁNDEZ ORTA
P R E S E N T E. –**

En atención a su solicitud de Temario, presentada por el Dr. Roberto Leyva Ramos Asesor de la Tesis que desarrollará Usted, con el objeto de obtener el Grado de *Maestría en Hidrosistemas con Opción de Especialidad en Ambiental*. Me es grato comunicarle que en la Sesión de Consejo Técnico Consultivo celebrada el día 19 de julio del presente año, fue aprobado el Tema y Temario propuesto:

TEMARIO:

“REMOCIÓN DE PENTAFLUOROFENOL PRESENTE EN AGUA POR MEDIO DE ADSORCIÓN SOBRE CARBÓN ACTIVADO.”

- PRESENTACIÓN.
- APROBACIÓN.
- AGRADECIMIENTOS.
- ÍNDICE.
- RESUMEN.
- INTRODUCCIÓN.
- I. REVISIÓN BIBLIOGRÁFICA.
- II. DESCRIPCIÓN DEL PROBLEMA.
- III. APARATOS Y SUSTANCIAS.
- IV. METODOLOGÍA EXPERIMENTAL.
- V. RESULTADOS.
- VI. DISCUSIÓN DE RESULTADOS.
- CONCLUSIONES.
- REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS.
- NOMENCLATURA.
- APÉNDICES.
- BIBLIOGRAFÍA.



“MODOS ET CUNCTARUM RERUM MENSURAS AUDEBO”

**ING. JOSÉ ARNOLDO GONZÁLEZ ORTIZ
DIRECTOR**

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA
DE SAN LUIS POTOSÍ
FACULTAD DE INGENIERÍA
DIRECCIÓN

**SMH



UNIVERSIDAD AUTONOMA DE SAN LUIS POTOSÍ
FACULTAD DE INGENIERÍA
CENTRO DE INVESTIGACIÓN Y ESTUDIOS DE POSGRADO



**“REMOCION DE PENTACLOROFENOL PRESENTE EN AGUA
POR MEDIO DE ADSORCIÓN SOBRE CARBÓN ACTIVADO”**

**TESIS QUE PARA OBTENER EL GRADO DE
MAESTRO EN HIDROSISTEMAS
ESPECIALIDAD EN AMBIENTAL**

PRESENTA

Q.F.B. MARTHA MA. GUADALUPE HERNÁNDEZ ORTA

ASESORADO POR

Dr. ROBERTO LEYVA RAMOS

SINODALES

Dr. Alfredo Avila Galarza
Presidente

M.C. Cesar Posadas Leal
Secretario

Dr. Roberto Leyva Ramos
Vocal

SAN LUIS POTOSÍ, S.L.P.

NOVIEMBRE 2001

DEDICATORIA

A Dios por todo lo que me ha dado y por permitirme llegar a una de mis metas.

A mis padres: Roman y Lupita por el cariño, confianza y apoyo incondicional que siempre me han brindado.

A mis hermanos: Roman, José Luis, Luz, Vero, Eloisa, Juan y Carlos por su cariño, por estar siempre conmigo y por aceptarme como soy.

A mis sobrinos: Ari, Beto, Gaby, Alex, Juanito, Lucecita, Dany y Fer por hacer mi vida más alegre.

A mis tíos: Petra y Toño por el cariño y consejos que siempre me han brindado.

AGRADECIMIENTOS

Especialmente al Dr. Roberto Leyva Ramos por haberme dado la oportunidad de desarrollar este proyecto, por su valiosa asesoría, el apoyo y conocimientos que me brindó durante el desarrollo y la culminación satisfactoria del mismo.

A los sinodales Dr. Alfredo Avila Galarza y M.C. Cesar Posadas Leal cuyas críticas y comentarios constructivos ayudaron a la comprensión de un mejor trabajo de investigación.

A la Dra. Catalina Alfaro de la Torre por su valioso tiempo dedicado a la revisión de la Tesis, contribuyendo con acertadas sugerencias al mismo.

Al M.I. Jorge Alberto Rodríguez Robledo por el gran apoyo que me brindó durante mi estancia en la Maestría.

A mis maestros del Posgrado: Dr. Daniel Campos Aranda, M.I. Arturo Dufour Candelaria, M.C. Raymundo Rodríguez Alba, M.C. Luz Ma. Nieto Caraveo, Dr. Pedro Medellín Milán, Profesora Ma. Isabel Martínez Orta, I.C. Juan Antonio Araiza Rodríguez, Dr. Eduardo Sánchez Luna y a la M.C. Alma Montante por su enseñanza y conocimientos compartidos.

A mis amigos: Caty, Claudia, Violeta, Luis Armando, Luisito, Karen, José Luis y Manuel por su tiempo e invaluable ayuda para lograr una de mis metas.

A mis amigas del laboratorio: Laura, la Sra. Rosita, Jovita, Alma, Selene y Lety, gracias por brindarme su amistad y por sus consejos.

A mis compañeras del CIEP: Sonia, Linda, Betty, Lolis, Rosita, Rosalba, Estelita y Maribel por compartir conmigo momentos agradables.

A mis compañeros de la maestría, Maricela, Lucia, Maribel, Dinora, Alma Delia, Tito, Ricardo y Noé por todos los momentos que compartimos y el apoyo que me brindaron.

Agradezco el apoyo económico otorgado por las instituciones siguientes:

Centro de Investigación y Estudios de Posgrado
Facultad de Ciencias Químicas
Universidad Autónoma de San Luis Potosí

Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACyT)
Beca-Tesis (Convenio No. 485100-5-31338-U)

Sistema de Investigación Miguel Hidalgo (SIHGO)
Convenio No. 20000206022

INDICE

Resumen	
Introducción	1
1. Revisión Bibliográfica	3
1.1. Plaguicidas	3
1.2. Química del pentaclorofenol	4
1.2.1. Propiedades fisicoquímicas	4
1.2.2. Coeficientes de distribución	6
1.3. Toxicología del pentaclorofenol	8
1.4. Usos del pentaclorofenol	9
1.5. Fuentes de contaminación del pentaclorofenol	10
1.6. Transformación y degradación natural	11
1.7. Métodos de remoción de pentaclorofenol en soluciones acuosas	12
1.7.1. Flotación	12
1.7.2. Degradación fotocatalítica	13
1.7.3. Degradación foto-Fenton	13
1.7.4. Procesos biológicos	14
1.7.5. Adsorción sobre carbón activado y otros adsorbentes	14
1.8. Fundamentos de adsorción	16
1.8.1. Isotermas de adsorción	17
1.9. Carbón activado	19
2. Descripción del problema	23
3. Aparatos y sustancias	25
3.1. Carbón activado	25
3.2. Reactivos	26
3.3. Soluciones patrón y reactivos	26
3.4. Equipo analítico	27
3.5. Adsorbedor experimental de lote para medir la isoterma de adsorción	28
4. Metodología experimental	30
4.1. Tratamiento del carbón activado	30
4.2. Pretratamiento del carbón activado	30
4.3. Oxidación del carbón activado	30
4.4. Determinación de sitios activos	31
4.5. Método para determinar el punto de carga cero del carbón activado	32
4.6. Análisis por fisisorción de nitrógeno	32
4.7. Determinación de la densidad del carbón activado	34
4.8. Determinación de la concentración de pentaclorofenol en solución acuosa	35
4.9. Método para la obtención de datos experimentales de la isoterma de adsorción	37
4.10. Método para la obtención de datos experimentales de desorción	38

5. Resultados	39
5.1. Cálculo de la concentración de pentaclorofenol en solución acuosa	39
5.2. Datos experimentales de adsorción sobre carbón activado	40
5.3. Cálculo de la masa del pentaclorofenol adsorbido sobre el carbón activado	41
5.4. Datos experimentales de las isothermas de adsorción de pentaclorofenol sobre carbón activado a diferentes condiciones	41
5.5. Cálculo de la masa de pentaclorofenol que permanece adsorbido sobre carbón activado en un experimento de desorción	46
5.6. Datos experimentales de la desorción del pentaclorofenol adsorbido en carbón activado	47
5.7. Correlación de los datos experimentales de las isothermas de adsorción	48
5.8. Determinación del punto de carga cero	54
6. Discusión de resultados	60
6.1. Características de los carbones activados	60
6.2. Oxidación de los carbones F-300 y MG	62
6.3. Carga superficial de los carbones activados	63
6.4. Adsorción de pentaclorofenol sobre carbón activado	64
6.4.1. Isotherma de adsorción de pentaclorofenol	64
6.4.2. Efecto del tipo de carbón sobre la adsorción de pentaclorofenol	68
6.4.3. Efecto de la oxidación del carbón en la isotherma de adsorción	69
6.4.4. Efecto del pH en la isotherma de adsorción de pentaclorofenol	69
6.4.5. Efecto de la temperatura en la isotherma de adsorción de pentaclorofenol	70
6.4.6. Reversibilidad de la adsorción de pentaclorofenol sobre carbón activado	70
6.4.7. Mecanismo de adsorción de pentaclorofenol	72
6.5. Remoción de pentaclorofenol presente en solución acuosa	73
Conclusiones	78
Referencias bibliográficas	81
Nomenclatura	85
Apéndice A	Datos experimentales de las isothermas de adsorción de pentaclorofenol 87
Apéndice B	Datos experimentales de las curvas de calibración para la determinación de la concentración de pentaclorofenol en solución acuosa 114

RESUMEN

En el presente trabajo se investigó la adsorción de pentaclorofenol (PCF) en solución acuosa sobre diferentes tipos de carbones activados, así como el efecto de la temperatura, pH de la solución y oxidación sobre la isoterma de adsorción de los carbones que presentaron mayor capacidad de adsorción al PCF.

Los datos experimentales de las isotermas de adsorción de PCF sobre los carbones activados comerciales F-300, MG, F-400, VG, C y CG-700 se obtuvieron en un adsorbedor de lote. Los datos experimentales se interpretaron usando los modelos de las isotermas de Langmuir, Freundlich y Prausnitz-Radke, encontrándose que este último ajusta mejor los datos que los otros dos modelos. Comparando la máxima masa de PCF adsorbido se concluyó que la capacidad de adsorción de los carbones disminuye en el orden siguiente $MG > F-300 > F-400 > VG > C > CG-700$. Los tres carbones con las mayores capacidades de adsorción son de origen bituminoso.

Los sitios activos de todos los carbones activados sin oxidar y de los carbones F-300 y MG oxidados se determinaron utilizando el método de titulación ácido-base propuesto por Boehm. Se encontró que el carbón CG-700 tiene mayor concentración de sitios básicos que ácidos, esto indica que se trata de un carbón de tipo básico. Lo opuesto ocurre con los carbones C y VG porque son carbones de tipo ácido. Los carbones F-300 y MG tienen concentraciones de sitios ácidos y básicos muy similares y el carbón F-400 tiene ligeramente menor cantidad de sitios básicos que ácidos.

Los carbones F-300 y MG se oxidaron con ácido nítrico y se observó que aumentó la concentración de los sitios ácidos y disminuyó la de los sitios básicos. La concentración de los sitios ácidos del carbón F-300 aumentó de 2.6 a 2.9 veces y de 3 a 3.6 veces para el MG. Por otro lado, las concentraciones de los sitios básicos disminuyeron alrededor de 2.2 veces para el F-300 y de 3 a 4 veces para el MG. Comparando las máximas masas de PCF adsorbido sobre los carbones sin oxidar con las de los carbones oxidados, se notó que la capacidad de adsorción del F-300 se redujo 17.7% al oxidarlo y 31% para el MG. La máxima capacidad disminuyó muy levemente cuando el carbón oxidado se oxidó todavía más.

El diagrama de especiación del pentaclorofenol en función del pH se construyó usando la constante de equilibrio $pK_A=4.7$ y se observó que el PCF en solución acuosa se encuentra predominantemente sin disociar a pH menores de 3 y casi exclusivamente en forma disociada como pentaclorofenolato a pH mayores de 6.

El efecto de pH se estudió obteniendo las isotermas de adsorción sobre el carbón F-300 a pH de 6, 7, 8 10 y 12. A pH menores de 6 no se efectuaron experimentos de adsorción porque se formó un precipitado de color blanco. Se observó que a pH de 6 ocurre la máxima adsorción y que la capacidad disminuyó hasta 51% cuando el pH se incrementó de 6 a 12.

Para estudiar el efecto de la temperatura en la adsorción se obtuvieron las isotermas de adsorción de PCF sobre el carbón F-300 a 15 y 25°C, y se observó

que la capacidad de adsorción disminuyó en promedio 1.19 veces cuando la temperatura se incrementó de 15 a 25°C.

Los puntos de carga cero (PCC), de los carbones activados F-300 y MG se determinaron por un método de titulación ácido-base y son 6.9 y 6.6, respectivamente. La carga superficial del carbón es positiva a pH menores del PCC, neutra para pH=PCC y negativa para pH mayores que el PCC.

Los estudios de reversibilidad de la adsorción revelaron que el pentaclorofenol se adsorbe irreversiblemente sobre los carbones F-300 y MG. La adsorción es del tipo químico porque debe vencer las fuerzas de repulsión entre la superficie y el anión pentaclorofenolato.

Los carbones F-300, MG y F-400 remueven más del 98% del PCF presente en solución acuosa para concentraciones iniciales de 1, 10 y 100 mg/L, utilizando una relación m/V de 1. Se requieren masas de estos tres carbones que varían de 0.23 a 1.38 g por cada litro de solución acuosa para remover el 99% del PCF presente. Se concluyó que la adsorción sobre carbón activado se puede usar para remover eficientemente al PCF en solución acuosa.

INTRODUCCIÓN

La aplicación indiscriminada y sin control de plaguicidas puede causar serios problemas a los ecosistemas y sus componentes, entre estos se incluyen: deterioro de la flora, fauna silvestre, terrestre y acuática, y contaminación de suelos, mantos freáticos, acuíferos profundos, aguas continentales y costeras. Por otro lado, su uso sin control puede ocasionar la generación de plagas resistentes a los plaguicidas, muchos de los plaguicidas pueden causar efectos adversos a la salud humana debido a sus características de bioacumulación y de movilidad a través de la cadena trófica.

En México, no existen normas para el control de las descargas por fuentes dispersas. Sin embargo, la Comisión Intersecretarial para el Control del Proceso y Uso de Plaguicidas, Fertilizantes y Sustancias Tóxicas (CICOPLAFEST) normaliza y controla la comercialización de productos agroquímicos en México, con la finalidad de evitar que su aplicación indiscriminada ocasione daños a la salud del hombre y al medio ambiente. En 1978, se publicó el primer Catálogo Oficial de Plaguicidas, el cual se actualiza anualmente. En el Catálogo de 1995 se estableció la prohibición de algunos plaguicidas y el uso restringido de otros, exclusivamente bajo supervisión de personal autorizado y capacitado (Arévila y col., 1997).

En 1989 se aplicaron 143 tipos de plaguicidas en México clasificados en tres grupos: insecticidas y acaricidas (58), fungicidas (32) y herbicidas (53). Entre los productos prohibidos en forma total o parcial en México destacan el paratión etílico en 15 estados (casi el 50% del territorio nacional), hexaclorociclohexano (HCH) en 13, para nitroetileno (EPN) en 6 y toxafeno en 2 (Arévila y col., 1997).

Al hacer una comparación con la normatividad referente a plaguicidas en otros países, se encontró que en México están autorizados y se comercializan 7 insecticidas/acaricidas, 4 herbicidas y 3 fungicidas prohibidos, retirados o de uso muy restringido en países como U.S.A. Además, se considera como de uso restringido a otros 6 insecticidas/acaricidas, 1 herbicida y 2 fungicidas (Arévila y col., 1997).

De acuerdo con la información existente, los principales contaminantes de origen ambiental en los alimentos, principalmente productos lácteos, huevo, carne de pollo, fresa, y pescados de agua dulce, en México son los plaguicidas organoclorados y sus derivados. La presencia de estos compuestos se debe al amplio uso que se les dio en el pasado y que aún se les da. Así, en 1986 estos productos constituían todavía el 25% del total de plaguicidas usados en el país (Albert, 1988).

Otra fuente importante está en las deficientes prácticas agrícolas comunes en México ya que con frecuencia, la cosecha se recoge antes de que haya expirado el período de espera después de la última aplicación. Además, en algunos casos se hacen más aplicaciones de las necesarias o se emplean

plaguicidas inadecuados. Este es un problema potencialmente grave, tanto por la elevada toxicidad aguda de estos productos, como porque muchos de los alimentos así contaminados se consumen sin cocinar (Albert, 1988).

El uso más intensivo de los plaguicidas es en la agricultura. Se calcula que actualmente alrededor del 65% del consumo nacional de plaguicidas, se aplica para combatir y prevenir las plagas y enfermedades de los cultivos de maíz, sorgo, soya, caña de azúcar, arroz, hortalizas y pastos (Alvarado, 1996).

No todos los plaguicidas tienen el mismo potencial de contaminar ríos, acuíferos, lagos y mares; cada uno causa diferentes niveles de contaminación que dependen del tipo de suelo, formulación y condiciones de aplicación del plaguicida.

Albert y col., 1975 y Albert y Figueroa investigaron la presencia de compuestos organoclorados en carpa y charal comercializados en la ciudad de México y en 12 especies de pescado de agua dulce del Río Blanco en el estado de Veracruz, y encontraron que contenían cantidades excesivas de los plaguicidas siguientes: α hexaclorociclohexano (α HCH), β hexaclorociclohexano, (β HCH), γ hexaclorociclohexano (γ HCH), p, p'-dicloroetileno (p,p'-DDE), 1,1-dicloro-2,2-di-(p-clorofenil) etano (p, p' DDD) y 1,1,1-tricloro-2,2 di-(p-clorofenil) etano (p, p' DDT). Los resultados anteriores muestran, de manera indirecta, que los plaguicidas son una fuente importante de contaminación del agua y los sedimentos de aguas superficiales.

Las principales fuentes de contaminación de las cuencas de los ríos son aguas residuales municipales e industriales, y arrastres de productos químicos que se emplean en la agricultura, principalmente en el cultivo de la caña de azúcar. Por lo tanto, se considera importante restringir el uso de plaguicidas en la agricultura e investigar procesos para remover plaguicidas presentes en el agua.

En este trabajo se estudiará la remoción del pentaclorofenol de solución acuosa, este compuesto es un plaguicida organoclorado muy tóxico que se usa principalmente para controlar termitas, en la preservación de madera y pinturas, desinfectante, microbiocida para la piel y en la formulación de fungicidas y soluciones insecticidas. También, se ha utilizado como herbicida, molusquicida y alguicida (USDHH, 1993).

El objetivo del presente estudio es investigar la adsorción de pentaclorofenol sobre diferentes tipos de carbones activados comerciales, como una posible alternativa para remover el pentaclorofenol presente en solución acuosa, así como también analizar el efecto del pH y la temperatura de la solución en la isoterma de adsorción.

CAPITULO 1. REVISIÓN BIBLIOGRÁFICA

1.1. Plaguicidas

Un plaguicida, es cualquier sustancia o mezcla de sustancias que ayuda a controlar alguna plaga, incluidos los vectores que transmiten enfermedades humanas y de animales, las especies no deseadas que causen perjuicio o que interfieran con la producción agropecuaria y forestal; por ejemplo, las que causan daño durante el almacenamiento o transporte de los alimentos u otros bienes materiales, así como las que interfieran con el bienestar del hombre y de los animales. También se incluyen en esta definición las sustancias defoliantes y las desecantes (CICOPLAFEST, 1998).

Los plaguicidas se pueden ordenar de tres formas. Comúnmente se ordenan según el organismo que controlan en: insecticidas, fungicidas, herbicidas, nematocidas, molusquicidas, acaricidas, bactericidas, antibióticos y rodenticidas. Otra clasificación se basa en la estructura química y de acuerdo a esta se clasifican en carbamatos (Carbaril, Carbofuran, Pirimicarb), derivados del cloronitrofenol, organoclorados (DDT, Metoxicloro, Dieldrin/Endrin, Clordano, Aldrin, Heptacloro, Toxafeno), organomercuriales, compuestos organofosforados (Malation, Paration, Dipterex), compuestos orgánicos de estaño, bupiridilos (Paraquat, Diquat), derivados del ácido fenoxiacético, piretroides, derivados de triazina (Atrazina, Metrabuzin) y tiocarbamatos (Triatato, Eptam o EPTC) (Henao y Corey, 1986).

La última forma de clasificación considera el período de resistencia y los clasifica en: ligeramente persistentes (menos de cuatro semanas), poco persistentes (de cuatro a veintiséis semanas), moderadamente persistentes (de veintisiete a cincuenta y dos semanas), altamente persistentes (más de un año y menos de veinte) y permanentes (más de veinte años) (CICOPLAFEST, 1998).

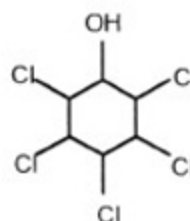
De acuerdo con la información existente, los principales contaminantes de origen ambiental en los alimentos, en México son los plaguicidas organoclorados y sus derivados; en segundo lugar, se podría colocar a los plaguicidas organofosforados; la presencia de éstos en los alimentos se debe, sobre todo, a las deficientes prácticas agrícolas comunes en México ya que con frecuencia, la cosecha se recoge antes de que haya expirado el período de espera después de la última aplicación, se hacen más aplicaciones de las necesarias o se emplean plaguicidas inadecuados. Este es un problema potencialmente grave, debido a la toxicidad aguda que causan estos productos, y muchos de los alimentos así contaminados se consumen sin cocinar; por ejemplo tomate, lechuga, chile, cebolla, pepino, plátano, papaya, piña, limón y naranja (Albert, 1988).

Algunos de los plaguicidas utilizados en México son: Aldicarb o Temik que es un insecticida o nematocida sistémico, este compuesto es transferido rápidamente a las plantas después de ser aplicado en el suelo, su desventaja es la alta toxicidad para mamíferos. Dimetoato que funciona como insecticida sistémico y acaricida efectivo contra áfidos o pulgones y arañas rojas en la mayoría de los cultivos agrícolas y hortícolas, así como las moscas de sierra del ciruelo y del peral y contra la mosca del bulbo del trigo y del olivo. Carbaril o Sevín que es efectivo contra muchos insectos plaga de frutales, hortalizas y algodón y para el control de lombrices de tierra e insectos en céspedes. Endosulfan que se utiliza como acaricida. Lindano que se emplea en el recubrimiento de semillas y es muy efectivo contra ataques de insectos del suelo, rociado es muy útil contra muchas plagas de chupadores y masticadores, y en humos para el control de las plagas de granos almacenados. Paration que tiene un muy amplio espectro de actividad insecticida pero tiene una alta toxicidad para los mamíferos. Pentaclorofenol y sus ésteres, que son ampliamente utilizados como biocidas industriales, para proteger de los ataques fungosos a materiales como madera y textiles (Cremllyn, 1990).

1.2. Química del pentaclorofenol

El PCF es un hidrocarburo aromático que tiene varios átomos de hidrógeno remplazados por átomos de cloro. Los nombres comerciales de formulaciones que contienen este compuesto organoclorado son: Chlon, Dowcide 7, Dowcide EC-7, Dura Treet II, EP 30, Fungifen, Grundier Arbezol, Lauxtol, Liroprem, Penta Concentrate, Penta Ready, Penta WR, Permasan, Santophen 20 y Woodtreat. La estructura química y la fórmula empírica del PCF son las siguientes (USDHH, 1993):

Fórmula empírica: C_6HCl_5O



2,3,4,5,6-pentaclorofenol

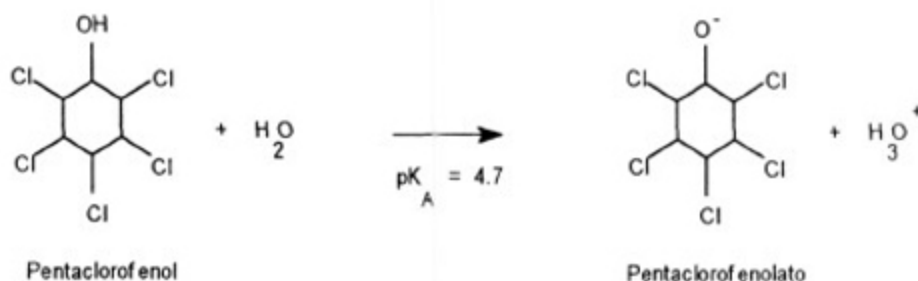
1.2.1. Propiedades fisicoquímicas

El PCF es un sólido cristalino de color blanco que tiene un peso molecular 266.35 g/mol; $pK_A=4.7$; densidad de 1.978 g/mL a 22°C/4°C; solubilidad en el agua de 14 mg/L en un intervalo de temperatura de 20-30°C; punto de fusión 190 °C; punto de ebullición 309-310°C; coeficiente de distribución entre octanol y

agua $\text{Log}K_{oa}=5.01$; coeficiente de partición carbono orgánico $\text{Log}K_{co}=4.5$; presión de vapor de 0.00011 mm Hg a $T=25^\circ\text{C}$; constante de la ley de Henry $3.4 \times 10^{-6} \text{ atm} \cdot \text{m}^3/\text{mol}$ (USDHH, 1993). El PCF es muy soluble en alcohol y éter, soluble en benceno, ligeramente soluble en éter de petróleo frío (USDHH, 1993).

El PCF es un compuesto orgánico hidrofóbico ionizable que puede existir como especie protonada o desprotonada (Stapleton, 1994). EL grupo hidroxilo del PCF participa en reacciones nucleofílicas (por ejemplo, forma ésteres con ácidos orgánicos e inorgánicos y éteres con agentes alquilantes como diazometano). El electrón retirado del anillo por los átomos de cloro origina que el PCF sea ácido y nucleófilo relativamente débil. El alto grado de cloración hace que el anillo aromático sea suficientemente electropositivo para formar complejos estables de transferencia de carga con electrones donantes, el anillo clorado es resistente a desplazamientos nucleofílicos bajo condiciones normales (Crosby, 1981).

El PCF en solución acuosa se puede encontrar disociado como pentaclorofenolato o sin disociar. La reacción que se lleva a cabo es la siguiente:



La concentración de las especies de PCF presentes en solución dependen del pH. A partir de la constante de acidez se puede construir el diagrama de especiación que muestra la distribución de las especies en solución. En la Figura 1.1 se muestra el diagrama de especiación del PCF y se nota que dependiendo del pH, el PCF puede existir en forma disociada como pentaclorofenolato y sin disociar. A pH menores de 3, más del 98% (molar) del PCF se encuentra como la especie sin disociar; a pH de 4.7, el 50% está disociado; a pH de 6, el 95.2% existe en forma disociada y a pH mayores de 7, más del 99.5% se encuentra en forma disociada.

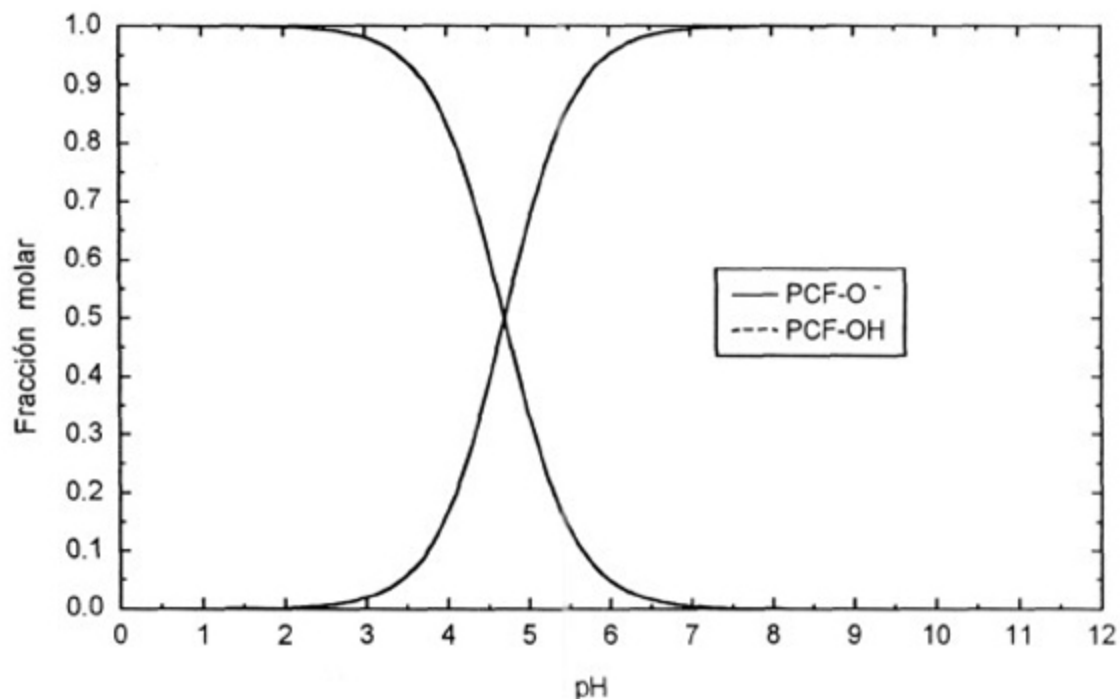


Figura 1.1. Diagrama de especiación del PCF en solución acuosa.

1.2.2. Coeficientes de distribución

El destino de los plaguicidas en el suelo depende de su distribución entre el suelo y otros elementos del medio ambiente como son aire, agua y biota. Una serie de expresiones de equilibrio o coeficientes de partición han sido desarrollados para describir la movilidad del plaguicida en el ambiente y son el coeficiente de partición suelo/agua (K_d), coeficiente de partición carbono orgánico (K_{co}), el coeficiente de partición octanol-agua (K_{oa}) y el coeficiente de partición aire/agua (K_w) (Donnelly, 1994).

La constante de sorción en el suelo, K_d , describe la distribución de un compuesto químico orgánico entre el suelo o los constituyentes de un sedimento acuático y el agua intersticial. K_d relaciona la cantidad de plaguicida adsorbido en el suelo o en el sedimento con la cantidad de plaguicida que se encuentra en el agua intersticial en equilibrio, esta constante es específica y debe ser determinada experimentalmente para cada tipo de suelo o constituyentes del sedimento (Donnelly, 1994).

El grado en el que un plaguicida se adsorbe en el suelo está determinado por las propiedades del suelo y del plaguicida. El contenido de carbono de origen orgánico (CO) es el parámetro principal para estimar la adsorción de plaguicidas en los suelos. Por esta razón, se definió el coeficiente de sorción K_{co} que describe la sorción de los contaminantes orgánicos como los plaguicidas, en base al contenido de carbono orgánico del suelo y no del tipo de suelo. Para un plaguicida en particular, el coeficiente de sorción K_{co} es independiente del tipo de

suelo. Esto sugiere que el contenido de materia orgánica del suelo es el constituyente principal del suelo al que se debe la sorción de los plaguicidas y que su función es similar en los diferentes suelos.

Los valores de K_{co} se pueden correlacionar con varias propiedades químicas y físicas de ciertos plaguicidas. Una de las propiedades que fácilmente se puede determinar es el coeficiente de partición entre octanol y agua, K_{oa} . Se considera que el octanol reproduce las propiedades adsorptivas de la materia orgánica del suelo. La relación de K_{oa} de un clorofenol con respecto a K_{co} , en el suelo se representa de la manera siguiente:

$$\log K_{co} = 0.884 \log K_{oa} - 0.199 \quad (1.1)$$

El K_{oa} puede también ser usado para estimar el factor de bioconcentración (BCF) o bioacumulación potencial de compuestos orgánicos en peces, mamíferos y biota (Donnelly, 1994).

El método más aceptado para evaluar la tendencia de un contaminante a asociarse con la fracción orgánica de la zona insaturada de un acuífero es la prueba de partición octanol agua. Si $K_{oa} < 1$, el contaminante prefiere la fase acuosa y no se asociará ampliamente con la materia orgánica. Para la mayoría de los contaminantes de agua subterránea el $K_{oa} > 100$, esto indica que la asociación con la materia orgánica es un proceso importante. En realidad, la mayoría de los contaminantes tienen un $K_{oa} > 100$; por ejemplo, el PCF $K_{oa} = 1 \times 10^5$, esto indica que es sumamente atraído por una fase hidrofóbica y se asociará fuertemente con la fracción orgánica del suelo (Bedient, 1999).

También, es importante medir la distribución de un compuesto químico entre el agua intersticial y el aire del suelo que puede ser descrita por la constante de la ley de Henry, que se representa matemáticamente como:

$$H_c = \frac{16.04(P_v)(M)}{(T)(S)} \quad (1.2)$$

Donde:

H_c	=	Constante de la ley de Henry, atm-m ³ /mol.
P_v	=	Presión de vapor del compuesto químico puro, atm.
M	=	Peso molecular del compuesto químico, g/mol.
T	=	Temperatura absoluta, °K
S	=	Solubilidad del compuesto químico en el agua, g/m ³

El recíproco de la constante de la ley de Henry $1/H_c$ se usa para describir la distribución de un compuesto orgánico entre el agua intersticial y el aire del suelo bajo condiciones de equilibrio, se conoce como coeficiente de partición aire/agua (K_w). Los compuestos químicos que tiene valores pequeños de K_w tienen una mayor tendencia a distribuirse hacia el aire del suelo y volatilizarse (Donnelly, 1994).

La volatilización de los compuestos químicos del suelo involucra la desorción del compuesto del suelo, movimiento a la superficie del suelo y vaporización dentro de la atmósfera. Los factores que influyen en la velocidad de volatilización son: la presión de vapor de los compuestos químicos en el suelo, velocidad de movimiento de los compuestos químicos a la superficie del suelo, de la interacción del compuesto con el suelo debido a la adsorción, la concentración del compuesto en el suelo con respecto a la profundidad, las propiedades del suelo y las condiciones atmosféricas (Donnelly, 1994).

1.3. Toxicología del pentaclorofenol

El PCF es un compuesto organoclorado de origen sintético, polar, lipofílico y agudamente tóxico para una gran variedad de microorganismos y mamíferos. Además, se ha encontrado que se bioacumula a niveles moderados (factor de bioconcentración < 1000), sin embargo, la biomagnificación en la cadena alimenticia no ha sido observada. En décadas recientes el PCF se ha detectado ampliamente en orina, sangre y tejido adiposo de la población.

Las principales vías de exposición son por inhalación y por contacto por la piel; por ejemplo, inhalación de aire contaminado en los lugares de trabajo, ingestión de agua y alimentos contaminados, y por contacto dérmico directo con productos de madera tratados con PCF. Después de un corto periodo de exposición a PCF, el organismo lo elimina rápidamente (estudios en seres humanos muestran que la mitad de la cantidad absorbida generalmente se elimina en 33 horas). La mayor parte de PCF absorbido no se degrada y tampoco se elimina en la orina, y una pequeña cantidad se elimina a través de las heces fecales y del aire exhalado (USDHH, 1993).

Exposiciones cortas a grandes cantidades de PCF en los lugares de trabajo o por mal uso de productos que lo contengan pueden causar efectos perjudiciales al hígado, riñones, piel, sangre, pulmones, sistema nervioso, sistema inmune y tracto gastrointestinal. La exposición a largo plazo a niveles bajos, como los que ocurren en los lugares de trabajo, puede causar daño al hígado, riñones, sangre y sistema nervioso. El tiempo de exposición y los niveles que causan efectos perjudiciales en el organismo humano no han sido bien definidos (USDHH, 1993).

La exposición a altos niveles de PCF comercial puede causar la muerte precedida por fiebre (42°C), abundante sudoración, deshidratación, pérdida de apetito, disminución de peso, sofocación, disnea, pulso rápido, náusea, vómito, dolor de cabeza, falta de coordinación, debilitamiento generalizado y coma. El PCF actúa celularmente desacoplando la fosforilación oxidativa, las enzimas blanco son la ATPasa de sodio y potasio. Los sobrevivientes frecuentemente muestran irritación del tracto respiratorio superior e irritación dérmica (Amdur, 1991).

No se ha demostrado que el PCF puro sea mutagénico. Sin embargo, cuando se encuentra presente por lo menos un microcontaminante carcinogénico como hexaclorodibenzo-p-dioxina, su potencial para causar cáncer en animales de laboratorio debe tomarse en cuenta (WHO, 1993).

El PCF y sus productos de descomposición pueden ser medidos en sangre, orina y tejido de personas expuestas. Las mejores vías para investigar si una persona ha sido expuesta son el análisis de las muestras de orina y de sangre; sin embargo, estos análisis requieren de equipo especial, estas pruebas pueden demostrar que una persona ha sido expuesta pero no puede ser usado para decir qué tan severo pueden ser los efectos a la salud. Los niveles medidos por estos análisis en sangre y orina pueden ser no específicos (USDHH, 1993).

El gobierno Federal de Estados Unidos ha fijado estándares reguladores y guías para proteger a la gente de los posibles efectos a la salud que puede ocasionar la presencia del PCF en agua de beber. La EPA determinó que la cantidad de este compuesto en el agua de tomar, no deberá ser mayor de 0.022 mg/L. Para exposiciones a corto plazo, los límites de concentración para PCF en agua para beber no deberán ser mayores de 1.0 mg/L por 1 día o 0.3 mg/L por 10 días. La Seguridad Ocupacional y Sanidad Administrativa (OSHA) ha fijado límites permisibles de 5 ppb en aire en los talleres para proteger a los trabajadores durante 8 horas y 40 horas de trabajo semanales (USDHH, 1993).

La persistencia, alta toxicidad y efectos perjudiciales a organismos acuáticos, ha llevado a la EPA a fijar el criterio de calidad de agua para el PCF de 3.2 µg/L para protección de la vida acuática (Nyssen, 1987).

1.4. Usos del pentaclorofenol

La producción mundial de PCF no se conoce con certeza pero ha sido estimada en 50 millones de kg/año. El uso de PCF en los Estados Unidos es aproximadamente de 23 millones de kg/año, del cual 11% está en forma de pentaclorofenato de sodio y potasio. En Inglaterra, el uso de PCF ha sido estimado en más de 1.25 millones de kg/año, y todos los usos fueron no agrícolas; Canadá empleó 2.5 millones de kg/año. En Japón, el PCF ha sido un importante herbicida en cultivos de arroz aunque su uso se ha regulado desde 1971, debido a que es muy tóxico para los peces (Crosby, 1981).

El principal uso de PCF es controlar termitas y frecuentemente como un éster (pentaclorofenil laurato), para proteger la madera de la putrefacción por hongos. El PCF es empleado como microbicida para la piel, en la fumigación de interiores de vagones de embarques, en la formulación de fungicidas y soluciones insecticidas (USDHH, 1993).

El PCF han sido ampliamente usado en sistemas de agua como molusquicida para el control de biliarciasis (particularmente en el lejano oriente), fungicida para productos de mimbre, tales como cestos (Hong Kong), y desinfectante para limpieza de piso (Estados Unidos). Aproximadamente, el 80% del uso en Estados Unidos es en el tratamiento de madera comercial, mientras el 6% es en la reducción de limo en la pulpa y un 3% para propósitos no industriales tales como preservación de la pintura y control de hierba, etc. El PCF generalmente es formulado como una solución al 5% en solventes de petróleo, aunque a menudo es embarcado en forma sólida (Crosby, 1981).

En presencia de calor y humedad, la vida funcional de los productos de madera es de 5 años que puede ser incrementada 8 veces más por tratamiento con PCF, la reapiación del preservativo químico se debe frecuentemente a su rápida disipación. A pesar de que otros productos químicos (creosota, arsenicales, etc.) han sido probados como preservadores de la madera, pocos han ganado la prominencia comercial que tiene el PCF (Crosby, 1981).

Los plaguicidas "más peligrosos" que se usan en algunos de los valles agrícolas de México son: organoclorados, organofosforados y carbámicos; de esta lista los doce más peligrosos son Aldrin, Dieldrin, Heptacloro/clordano, Parathión, Pentaclorofenol, Paraquat, Galecrón, Clorodimeformo, BCP, HCH y Lindano. De todos estos se considera al Eldrin y el Galecrón como los más peligrosos y que pueden ocasionar anemia plástica.

1.5. Fuentes de contaminación del pentaclorofenol

Los compuestos fenólicos clorados se encuentran presente en efluentes acuosos de operaciones industriales, tales como producción de resinas poliméricas, refinación de aceite, fierro y acero, petróleo, pinturas, solventes, pesticidas, productos farmacéuticos y en la preservación química de la madera (Jianlong, 2000).

El PCF es el tercer pesticida más ampliamente usado en E.U. precedido por atrazina y alaclor. El PCF ha sido designado como un contaminante orgánico prioritario por la Agencia de Protección Ambiental de los Estados Unidos (USEPA, 1978).

El PCF es liberado al aire por evaporación de la superficie de productos de madera tratados con este compuesto. La liberación de PCF a aguas superficiales ocurre a través de descargas directas y de fuentes no puntuales como agua de retornos agrícolas, excedentes industriales y municipales, y lixiviados de basureros y rellenos sanitarios. Además, se ha reportado que la cloración de compuestos fenólicos durante el tratamiento del agua produce niveles de PCF detectables. Pesticidas como lindano, hexaclorobenceno, pentaclorobenceno y

pentacloronitrobenceno se pueden metabolizar a PCF por las plantas, animales y microorganismos, pero la contribución del metabolismo de estos pesticidas a niveles ambientales se desconoce (USDHH, 1993).

El PCF es liberado al suelo como resultado de su uso como herbicida, lixiviados de productos de madera tratada, deposición atmosférica, derrames accidentales industriales y en confinamientos de residuos peligrosos, los cuales generalmente se deben a otros compuestos como hexaclorobenceno que puede descomponerse en PCF (USDHH, 1993).

1.6. Transformación y degradación natural

El PCF se encuentra presente en el medio ambiente y se ha detectado en el agua superficial, sedimentos, agua de lluvia, agua potable, organismos acuáticos, suelo y alimentos (USDHH, 1993). El PCF es fácilmente degradado en el medio ambiente por procesos químicos, microbiológicos y fotoquímicos (Kaufman, 1978).

La eliminación del PCF en el aire se debe a fotólisis y reacciones con radicales hidroxilo producidos fotoquímicamente. Los principales procesos de transformación del PCF en sistemas acuáticos son fotólisis y biodegradación. Pruebas realizadas en canales demostraron que la fotólisis del PCF en agua superficial es rápida y tiene un tiempo de vida media de 0.70 horas a una profundidad de 0.5 cm. Sin embargo, la fotólisis del PCF disminuyó cuando se incrementó la profundidad a 30 cm, en estas condiciones el tiempo de vida media es de 228 horas (USDHH, 1993).

La degradación del PCF en suelos es afectada por numerosos factores químicos, físicos y biológicos. La velocidad de degradación en suelos está relacionada con la temperatura, aereación y contenido de materia orgánica. La degradación del PCF depende parcialmente del intercambio catiónico y pH del suelo, en tanto que la textura del suelo, contenido de arcilla, grado de saturación y óxidos libres de hierro no influyen en la velocidad de degradación del PCF. Se ha reportado que el PCF se degrada más rápidamente en suelos con mayor contenido de materia orgánica. A mayor temperatura, el PCF es eliminado más rápidamente del suelo bajo condiciones anaerobias que aerobias.

Varias vías de degradación han sido identificadas, la degradación del PCF en suelo es principalmente por deshalogenación a 2,3,4,5-, 2,3,5,6-, 2,3,4,6-tetraclorofenoles; 2,4,5- y 2,3,5-triclorofenoles y 3,4- y 3,5-diclorofenoles. También se ha observado la metilación del grupo fenólico del PCF a 2,3,4,5-, 2,3,5,6-, 2,3,4,6-tetracloroanisoles; 2,3,5- y 2,4,5-tricloroanisoles; y 3,4- y 3,5-dicloroanisoles y 3-cloroanisol. Otro proceso de degradación del PCF se debe a microorganismos aislados, como *Pseudomonas* sp., que degradan ¹⁴C-PFC a CO₂

por deshalogenación y desdoblamiento del anillo. Los resultados del análisis de aminoácidos de la célula bacteriana revelaron que el ^{14}C derivado de ^{14}C -PCF fue incorporado rápidamente en los constituyentes celulares de la bacteria (Kaufman, 1978). La volatilización y la fotólisis no son procesos importantes de transporte y transformación del PCF en suelos (USDHH, 1993).

1.7. Métodos de remoción de pentaclorofenol en soluciones acuosas

Varios procesos para remover compuestos orgánicos en soluciones acuosas se han desarrollado y se usan extensamente en el ámbito industrial. Estos procesos se clasifican en fisicoquímicos y biológicos. Entre los procesos fisicoquímicos sobresalen por su importancia la adsorción sobre carbón activado, la oxidación química y la oxidación térmica. En los procesos biológicos el compuesto orgánico se descompone en sustancias inertes por la acción de los microorganismos. Es importante recalcar que algunos compuestos orgánicos como el PCF, no se pueden biodegradar eficientemente porque son muy estables y tóxicos. Estos compuestos se conocen como recalcitrantes o resistentes a la biodegradación.

1.7.1. Flotación

Flotación es la operación en la que un sólido se separa de otro, basándose en que uno de ellos sobrenada en la superficie de un líquido. Gracias a las distintas propiedades superficiales de los dos sólidos, uno de los sólidos se moja perfectamente debido a que la fase acuosa se adsorbe con más facilidad y se hunde en el líquido. El otro sólido, en cambio, adsorbe de preferencia al aire, quedando recubierto total o parcialmente por la fase gaseosa; la densidad aparente de las partículas de este sólido, adheridas a las burbujas de aire, resulta menor que la del agua, por lo que el conjunto flota en la superficie del líquido, formando una espuma que puede hacerse rebozar continuamente por el borde superior de la cuba de flotación.

El PCF y otros fenoles pueden ser removidos del agua por flotación utilizando surfactantes catiónicos como bromuro de cetiltrimetilamonio (CTAB). La concentración de CTAB y el tiempo de flotación están directamente relacionados con la cantidad de PCF removido. La remoción de PCF es más eficiente a pH neutros y básicos y a baja fuerza iónica. La remoción de PCF es menos efectiva con dodecil sulfato de sodio. Se ha reportado que el principal mecanismo de remoción de los compuestos fenólicos es electrostático, ya que la más alta remoción por CTAB ocurre a valores de pH donde estos compuestos son aniones. Sin embargo, existe un mecanismo secundario ion-dipolo porque ocurre remoción menos efectiva a valores de pH bajos donde los compuestos fenólicos no están

ionizados. La flotación puede ser un método potencial de remoción de PCF y otros fenoles ácidos de aguas residuales, lodos y suelos (Nyssen, 1987).

1.7.2. Degradación fotocatalítica

Cuando los materiales semiconductores, tales como TiO_2 , Fe_2O_3 , CdS , ZnS y ZnO , son irradiados con luz ultravioleta, en presencia de oxígeno se generan propiedades de oxidación fuerte, aumentando su capacidad para destruir completamente diversos contaminantes orgánicos. Los semiconductores pueden actuar como catalizadores debido a su estructura electrónica que se caracteriza por una banda de valencia llena y una banda de conducción vacía, los electrones generados en la banda de conducción pueden actuar como agente reductor e interactuar con el oxígeno disuelto, generando las especies O_2 que son altamente reactivas y oxidantes y además, pueden oxidar al anillo aromático de los compuestos fenólicos. Los fenoles clorados han sido mineralizados usando TiO_2 irradiado en presencia de oxígeno, produciendo en todos los casos CO_2 , ácido clorhídrico y una pequeña cantidad de ácido fórmico (Villaseñor, 1998).

1.7.3. Degradación foto-Fenton

El método Fenton se basa en la propiedad que presentan algunos metales para transferir oxígeno en presencia de peróxido de hidrógeno. El caso más común es el hierro que reacciona con el peróxido de hidrógeno formando radicales hidroxilos altamente reactivos, $\cdot\text{OH}$. Los radicales hidroxilo formados en solución reaccionan con compuestos orgánicos por sustracción de átomos hidrógeno y adición a enlaces no saturados C-C.

La reacción química general del proceso foto-Fenton es



Un método alternativo para remover PCF y creosota del agua contaminada es la reacción foto-Fenton, capaz de oxidar al PCF y creosota y reducir su toxicidad en agua, es una reacción que emplea iones férricos (Fe^{3+}), peróxido de hidrógeno y luz ultravioleta. En este procedimiento se logra una extensa mineralización del carbón orgánico y una completa dechloración del PCF en 10-20 min. En general, se considera un tratamiento efectivo para una amplia variedad de contaminantes orgánicos (fenoles, formaldehído, plaguicidas, etc.) presentes en el agua contaminada (Engwall, 1999).

1.7.4. Procesos biológicos

Una variedad de procesos de tratamiento biológico aeróbicos y anaeróbicos, como estanque de estabilización facultativa, estanque de estabilización aerada, sistema lagunar aerado, reactor anaerobio de lecho de lodos con flujo ascendente (UASB) son empleados para degradar biológicamente a los clorofenoles en aguas residuales. Sin embargo, la eficiencia de estos sistemas de tratamiento son bajos debido a la toxicidad y baja biodegradabilidad de los clorofenoles. Además, la adsorción de estos compuestos por los lodos microbianos pueden complicar su manejo y disposición (Jianlong, 2000).

1.7.5. Adsorción sobre carbón activado y otros adsorbentes

En los últimos 30 años, la adsorción en carbón activado se ha usado exitosamente para el tratamiento de aguas residuales municipales e industriales y de aguas potables, y se considera como la mejor tecnología disponible para eliminar compuestos orgánicos no biodegradables y tóxicos presentes en solución acuosa (USEPA, 1991). En general, se considera que la adsorción en carbón activado presenta una excelente alternativa para remover plaguicidas de aguas residuales ya que el carbón activado tiene sitios activos donde se pueden adsorber los plaguicidas.

La sorción de fenoles clorados sobre sedimentos naturales y materiales de acuíferos fue estudiada por Schellenberg y col. (1984) y notaron que en agua que tiene una fuerza iónica pequeña ($I \leq 10^{-3}$ M), la sorción de fenoles clorados por sorbentes naturales se debe principalmente a la distribución de las especies no disociadas entre la fase acuosa y la fase orgánica contenida en el sorbente. A los valores de pH de las aguas naturales, los fenoles clorados están presentes como aniones fenolato. Para algunos fenoles clorados importantes como tetra y PCF, la sorción de fenolato no debe ser omitida, ya que a los valores del pH del medio ambiente, estos compuestos están presentes principalmente en la forma ionizada. Por eso, para estos fenoles clorados, la predicción de la distribución basada en la distribución de especies no disociadas es generalmente errónea. Existe una fuerte evidencia que la sorción de especies fenolato es predominantemente un proceso de distribución entre la fase acuosa y la fase orgánica presente en el sorbente natural. El grado de sorción de fenolato depende de la fuerza iónica en la fase acuosa.

Mollah y Robinson (1996) investigaron la adsorción y desorción de PCF en solución acuosa sobre carbón activado granular F-300, así como el efecto de la temperatura y pH de la solución. Los datos experimentales de las isotermas de adsorción se interpretaron usando los modelos de las isotermas de Langmuir, Freundlich, Prausnitz-Radke, Mathews-Weber y Fritz-Schlünder, encontrando que la de Prausnitz-Radke es la que ajustó mejor sus datos. Los estudios de

reversibilidad de la adsorción mostraron que el PCF se adsorbe reversiblemente sobre el carbón F-300. Además se notó que la masa de PCF adsorbido disminuyó cuando la temperatura se incrementó de 10 a 60°C.

El efecto del oxígeno sobre la adsorción del PCF en turba fue investigado por Tanjore y Viraraghavan (1996). Los resultados revelaron que aumentando los niveles de oxígeno disuelto de 2 a 26 mg/L, la capacidad de adsorción se incrementaba en cerca de 300%. El incremento en la capacidad de adsorción de la turba por el PCF no fue muy significativo aumentando los niveles de oxígeno disuelto de 2 a 8 mg/L. En base a los resultados anteriores, se consideró que el oxígeno molecular afecta significativamente la remoción de PCF adsorbido sobre turba. Se concluyó que la turba es un adsorbente efectivo que se puede usar para remover eficientemente el PCF de agua residual en un tiempo de cinco horas a una concentración inicial de 1 mg/L.

Los datos experimentales de las isotermas de adsorción de PCF sobre células no inducidas de *Mycobacterium chlorophenolicum* PCF-1, se interpretaron satisfactoriamente usando el modelo de Freundlich (Brandt y col., 1997). La concentración de biomasa y pH son los dos factores más importantes que afectan la capacidad de adsorción, la cuál aumenta con la disminución de la concentración de la biomasa (en un intervalo < 0.5 g/L) y con la disminución del pH, particularmente para valores de pH entre 5.4 y 7.0. La desorción de PCF adsorbido sobre *M. chlorophenolicum* PCF-1 es fuertemente afectada por el pH. A pH 5.4 la adsorción es casi completamente irreversible, mientras que a pH neutro y alcalino es casi completamente reversible. El efecto de pH sobre el comportamiento de la sorción se debe a la ionización de PCF. La irreversibilidad del PCF adsorbido es función de la concentración de PCF no disociado, mientras el PCF adsorbido reversiblemente está relacionado con la concentración de PCF iónico.

La sorción de PCF sobre una mezcla de turba-bentonita se puede usar como una barrera para detener contaminantes y proteger el agua subterránea (Viraraghavan y Slough, 1999). Estudios cinéticos mostraron que más del 90% de PCF se puede remover del agua para concentraciones de aproximadamente 1 mg/L de PCF usando una mezcla 5% turba-bentonita. El intervalo de pH óptimo para la adsorción de PCF sobre la mezcla de turba-bentonita fue de 3 a 3.5. Estudios de adsorción usando varias proporciones de bentonita en la mezcla, mostraron que la adsorción de PCF disminuyó linealmente incrementando la cantidad de bentonita en la mezcla, indicando que la adsorción de PCF sobre la porción de musgo de la turba de la mezcla fue el principal proceso. Mezclas de turba-bentonita pueden ser usadas con éxito para remover PCF de medios acuosos y como una barrera para atenuar la migración de PCF a través del suelo y sistemas de agua subterránea.

Kao y col. (2000) evaluaron la remoción de 2 clorofenol (2-CP) y 2,4-diclorofenol (2,4-DCP) en solución acuosa usando ceniza de una planta termoeléctrica que utiliza carbón como combustible y observaron que la cantidad adsorbida de estos dos clorofenoles es dependiente del pH de la solución. La eficiencia de remoción se favorece cuando el $\text{pH} < \text{pK}_a$, los valores de pK_a de 2-CP y 2,4-DCP son 8.52 y 7.85, respectivamente. Los dos clorofenoles están presentes predominantemente en su forma molecular para $\text{pH} < \text{pK}_s$. La masa adsorbida de estos clorofenoles sobre la ceniza de carbón es también afectada por el diámetro de partícula, contenido de carbón y el área superficial específica de la ceniza de carbón. Como era de esperarse, la capacidad de adsorción aumenta con el contenido de carbón de la ceniza y el área superficial específica. La adsorción de 2-CP sobre la ceniza es dependiente de la presencia del 2,4-DCP debido a varios factores, tales como la hidrofobicidad de los dos y fuertes interacciones entre la ceniza y el 2,4-CP. Los clorofenoles en el agua residual fueron removidos eficientemente usando una columna empacada con cenizas de carbón, siendo el tiempo de saturación de la columna inversamente proporcional a la velocidad de flujo.

1.8. Fundamentos de adsorción

La adsorción es un fenómeno superficial que involucra la acumulación o concentración de sustancias en una superficie o interfase. El material que está siendo adsorbido se le llama adsorbato y la fase donde se lleva a cabo la adsorción, adsorbente (Cooney, 1998).

La adsorción se clasifica en física o química dependiendo del tipo de interacción entre el soluto y la superficie. La adsorción física, o de "van der Waals" es un fenómeno reversible, es resultado de fuerzas intermoleculares de atracción débiles entre los complejos de la superficie del sólido y las moléculas del adsorbato. Las moléculas no se adsorben sobre un sitio específico en la superficie y se pueden mover libremente sobre la interfase. Esta adsorción ocurre a bajas temperaturas y se caracteriza por ser exotérmica con un calor de adsorción muy similar al calor latente de condensación/evaporación.

La adsorción química es el resultado de la interacción química entre la superficie del sólido y el adsorbato, se caracteriza porque generalmente ocurre a altas temperaturas con una elevada energía de activación; involucra enlaces químicos y por lo tanto es casi irreversible; el calor de adsorción es alto y muy similar al calor de una reacción. Además, este tipo de adsorción ocurre solamente en sitios específicos de la superficie del carbón (Cooney, 1998).

Los factores que influyen la adsorción en sistemas líquido-sólido son la temperatura, naturaleza del solvente, área superficial y estructura del poro del adsorbente, pH de la solución, presencia de sales inorgánicas, así como la

competitividad de los solutos por un mismo tipo de sitios activos (Cooney, 1998). La mayoría de los fenómenos de adsorción son combinaciones de las tres formas de adsorción que son intercambio iónico, adsorción física y adsorción química.

1.8.1. Isotermas de adsorción

La isoterma de adsorción se define como la ecuación matemática que representa la relación entre la masa del soluto adsorbido (pentaclorofenol) por unidad de masa del adsorbente (carbón activado) y la concentración del soluto en la solución (pentaclorofenol) cuando se ha alcanzado el equilibrio a una temperatura constante (Cooney, 1998).

En la literatura se han reportado varios modelos matemáticos para representar las isotermas de adsorción. El modelo propuesto por Langmuir se desarrolló teóricamente y tiene como base las siguientes suposiciones: la adsorción ocurre en sitios localizados sobre la superficie del carbón activado; cada sitio es ocupado solamente por una molécula de adsorbato; el calor de adsorción es el mismo para todos los sitios; y no existe interacción entre las moléculas adsorbidas (Do, 1998). Este modelo se representa matemáticamente como:

$$q = \frac{q_m KC}{1 + KC} \quad (1.3)$$

Donde:

- q = Masa de pentaclorofenol adsorbido por unidad de masa del carbón, mg/g.
- q_m = Masa de pentaclorofenol adsorbido cuando se ha formado la monocapa, mg/g.
- C = Concentración de pentaclorofenol en el equilibrio, mg/L.
- K = Constante relacionada con la entalpía de adsorción, L/mg.

La isoterma de adsorción de Langmuir de doble sitio es otro modelo que se utiliza en sistemas líquido-sólido. Este modelo supone que la superficie no es homogénea y que la adsorción está ocurriendo en dos tipos de sitios activos que se comportan independientemente (Guiochon, 1994). Esta isoterma se representa matemáticamente como:

$$q = \frac{q_{m_1} K_1 C}{1 + K_1 C} + \frac{q_{m_2} K_2 C}{1 + K_2 C} \quad (1.4)$$

La isoterma de adsorción de Freundlich es otro modelo ampliamente usado en sistemas líquido-sólido. Esta isoterma se obtuvo empíricamente y se ha demostrado que se puede aplicar a adsorbentes que tienen superficies energéticamente heterogéneas. Se expresa de la manera siguiente:

$$q = k_F C^{1/n} \quad (1.5)$$

Donde:

- k_F = Constante que indica la capacidad de adsorción, $mg^{1-1/n}L^{1/n}/g$.
- $1/n$ = Intensidad de la adsorción.

La isoterma de Freundlich implica que la distribución de la energía de adsorción en los sitios es esencialmente de tipo exponencial. En otras palabras la superficie no es homogénea como en el caso de la isoterma de Langmuir.

La isoterma de adsorción de Prausnitz-Radke es otro modelo que se ha utilizado para interpretar las isotermas de adsorción sobre carbón activado granular de varios sistemas de compuestos orgánicos en solución acuosa (Mollah, 1996). Esta isoterma se representa como:

$$q = \frac{aC}{1 + bC^\beta} \quad (1.6)$$

Donde:

- a, b, β = Constantes de esta isoterma

La isoterma de adsorción propuesta por Brunauer, Emmet y Teller (BET) explica que el fenómeno de adsorción puede ocurrir en múltiples capas y que además no es necesario que la formación de una capa sea completa para iniciar la formación de la otra. Se expresa de la manera siguiente (Sawyer, 1994):

$$q = \frac{bCq_m}{(C_s - C)[1 + (b - 1)C/C_s]} \quad (1.7)$$

Donde:

- C_s = Concentración de adsorbato para obtener una saturación en la superficie del adsorbente.
- b = Constante que representa la interacción energética entre el adsorbato y el adsorbente.

1.9. Carbón activado

En la naturaleza, el carbón se encuentra en tres formas que son diamante, grafito y carbón microcristalino. La estructura del diamante consiste de una cadena regular de carbón unido tetrahedricamente con simetría cúbica. La estructura del grafito es el prototipo de los compuestos aromáticos, cada capa de la estructura del grafito puede ser considerada como una macromolécula de anillos aromáticos condensados. El carbón microcristalino se conoció anteriormente como carbón amorfo y existen diversas variedades tales como carbón activado, carbón negro y coke (Boehm, 1970).

Varios estudios [Fryer, 1981 y Marsh, 1982, citados por Bansal (1988)] de microscopía electrónica de transmisión han demostrado que la estructura del carbón activado se puede visualizar como un apilamiento de láminas aromáticas enlazadas al azar. Otros estudios (Donnet, 1968; Boehm, 1970) han revelado que las láminas aromáticas contenidas en la estructura del carbón activado, tienen radicales libres o electrones no apareados. La composición de un carbón activado típico es aproximadamente 88% de C, 0.5% de H, 0.5% de N, 1% de S, entre 6 a 7% de O y el resto de cenizas de constituyentes inorgánicos. La composición de oxígeno en la estructura del carbón depende de la materia prima y del proceso de activación, y varía entre 1% y 25% (Bansal, 1988).

En la Figura 1.2 se exhibe la estructura del grafito (a) y la estructura cristalina irregular de un carbón de turba estratificada (b), los carbones activados son similares al tipo (b). Estructuralmente el carbón activado está compuesto por grupos de microcristales fijos interconectados por interacción de grupos funcionales terminales de los planos grafiticos, cada microcristal tiene alrededor de 5–15 capas de planos grafiticos. El diámetro de los planos que forman los microcristales, y la altura del apilamiento se estima entre 2-5 nm, los microcristales tienen un ancho < 10 nm.

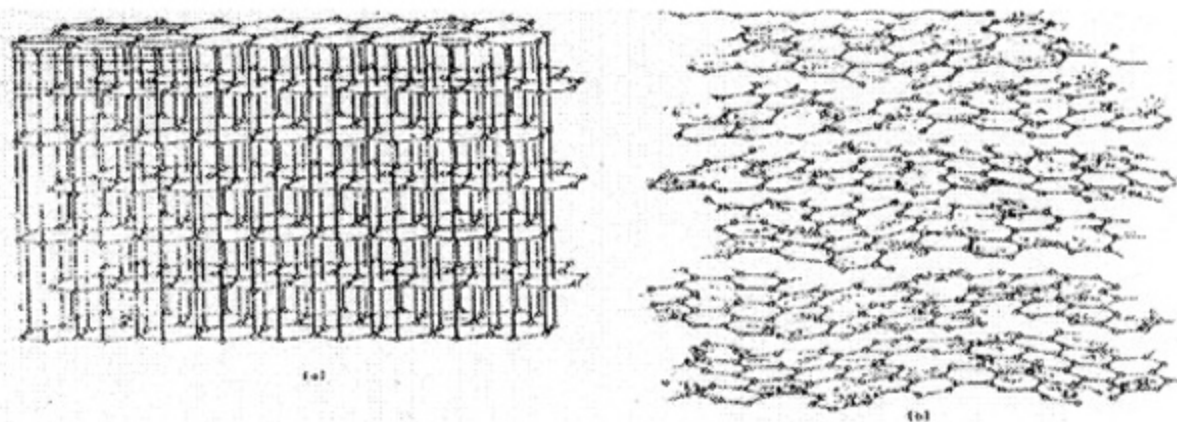


Figura 1.2. Comparación de la estructura tridimensional del grafito (a) con una estructura de carbón de turba estratificada (b) (Mattson, 1971).

Los carbones activados son excelentes adsorbentes para purificar, decolorizar, deodorizar, decolorar, también son utilizados como catalizadores y soportes catalíticos. Además, son ampliamente usados en hidrometalurgia para la recuperación de oro, plata y otros compuestos inorgánicos, y en el tratamiento de aguas residuales industriales y domésticas. Sus aplicaciones son muy diversas en la industria alimenticia, farmacéutica, química, petroquímica, minera y automotriz (Benaddi, 1999).

Cualquier material con un alto contenido de carbón, pero bajo en compuestos inorgánicos, puede ser usado como materia prima para la fabricación de carbón activado. Aunque en la práctica se emplean solamente cinco tipos de material carbonáceo para la producción comercial de carbón activado a escala industrial, siendo estos en orden de importancia y en términos de su capacidad de producción: madera 130,000 ton/año; carbón de piedra 100,000 ton/año; lignito 50,000 ton/año; concha de coco 35,000 ton/año; y turba 34,000 ton/año. Cabe destacar que la madera de pino es la materia prima más usada en la producción de carbones activados aproximadamente 70,000 ton/año, mientras todos los otros tipos de maderas contribuyen 60,000 ton/año. Los carbones bituminosos y sub-bituminosos representan el 90% de la producción de carbones activados provenientes de carbones de piedra (Bansal, 1988).

La fabricación de carbones activados consta de dos etapas: la carbonización de la materia prima a temperaturas menores a 800 °C en ausencia de oxígeno y la activación del producto carbonizado. De esta manera todos los materiales carbonáceos puede ser convertidos en carbón activado, aunque las propiedades del producto final serán diferentes, dependiendo de la naturaleza de la materia prima usada, la naturaleza del agente activante y las condiciones del proceso de activación (Suzuki, 1990).

Durante la carbonización la mayoría de los elementos no carbónicos como oxígeno e hidrógeno son eliminados como productos volátiles por la descomposición pirolítica del material. Los grupos de átomos de carbón residual se agrupan en un sistema de láminas de anillos aromáticos con cierto grado de estructura planar. El arreglo de estas láminas aromáticas es irregular por lo que se generan caminos intersticiales entre ellas, que pueden llenarse con el material producido en la pirólisis y parte de ellos pueden ser bloqueados por átomos de carbón libres. Estos espacios intersticiales crecen hasta que se forman poros, los cuales hacen a los carbones activados excelentes adsorbentes (Suzuki, 1990).

Los materiales carbonáceos puede ser convertidos en carbón activado mediante dos métodos: activación química y física. En el proceso de activación química la carbonización y activación son realizadas en una etapa por descomposición térmica de la materia prima impregnada con agentes activantes como ácido fosfórico, cloruro de zinc y ácido sulfúrico (Bansal, 1988). Estos agentes activantes actúan como agentes deshidratantes. La activación química es

generalmente realizada a temperatura entre 400 y 800°C, generalmente se recomienda cuando la materia prima es madera. La activación física es una reacción de oxidación a temperatura de 850-1100°C donde el agente oxidante es generalmente vapor de agua o dióxido de carbono. En este caso la carbonización y activación son llevadas a cabo en dos etapas diferentes (Suzuki, 1990).

El objetivo del proceso de activación es incrementar el volumen y engrandecer el diámetro de los poros que se formaron durante el proceso de carbonización. La estructura de los poros es predeterminada por la naturaleza de la materia prima y la historia de su carbonización (Cheremisinoff, 1993).

La temperatura de activación influye significativamente en la naturaleza del complejo carbón-oxígeno que se forma en la superficie. A baja temperatura de activación se forman complejos carbón-oxígeno de menor estabilidad que son removidos como dióxido de carbono por calentamiento a vacío o corriente de nitrógeno. Por otro parte, cuando la temperatura de activación es alta, los grupos funcionales formados son más estables y pueden ser removidos como monóxido de carbono a altas temperaturas (Boehm, 1970).

Dependiendo de la naturaleza de las reacciones de oxidación parcial que ocurren durante la activación de un carbón pueden resultar dos tipos de carbones: carbón H y carbón L. El carbón tipo H se produce bajo condiciones de activación normal en que se usan altas temperaturas (menores de 750°C) y exposición a vapor o dióxido de carbono, seguida por exposición a aire. Estos carbones son hidrofóbicos y adquieren una carga positiva cuando son sumergidos en agua, por adsorción de iones H^+ . Los carbones producidos por la mayoría de los fabricantes son generalmente del tipo H. El carbón tipo L resulta de la activación de carbones a bajas temperaturas (200 a 400°C) en aire. Estos carbones son hidrofílicos y tienen una carga negativa cuando son sumergidos en agua, por adsorción de iones OH^- . La diferencia entre los carbones tipo H y L puede ser explicada en términos de los procesos de oxidación que tienen lugar durante la activación y los grupos funcionales de superficie carbón/grupos oxígeno que son creados. En la superficie de los carbones tipo H predominan los óxidos básicos como: lactonas, quinonas, hidroxilos fenólicos y carboxilatos, mientras en los carbones tipo L predominan los óxidos ácidos como: carboxilos, fenólicos, hidroxilos, carbonilos (tipo quinona), carboxílicos ácidos, anhídros, lactona y grupos peróxidos cíclicos (Cooney, 1998).

En la Figura 1.3 se presentan varios grupos funcionales oxigenados que se pueden encontrar en los bordes de las capas de grafeno: a) carboxilo; b) anhídrido carboxílico; c) lactona; d) lactol; e) hidroxilo; f) carbonilo; g) quinona; y h) el oxígeno puede estar simplemente sustituyendo los átomos de carbón en los bordes (Boehm, 1994).

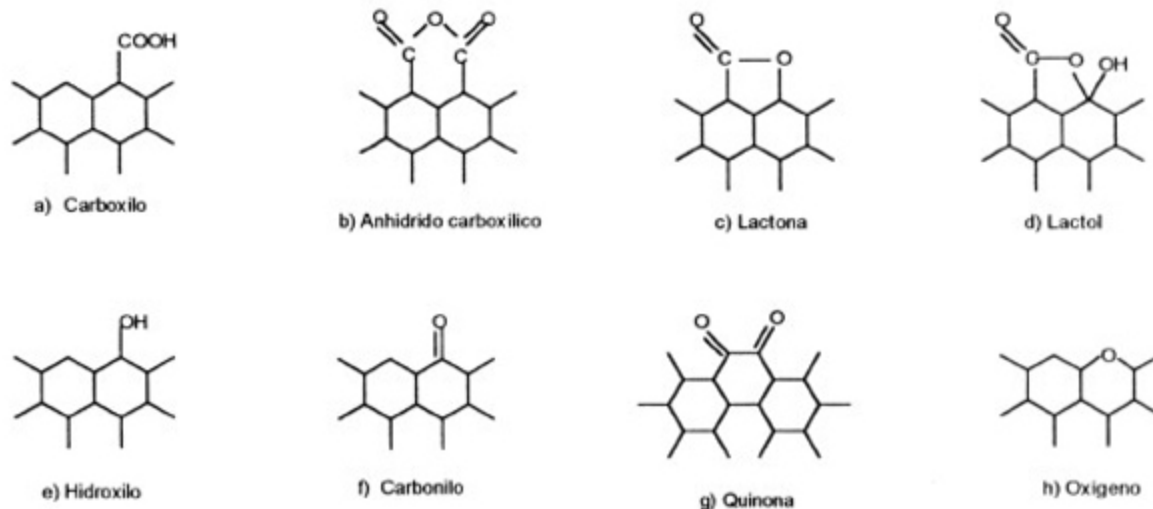


Figura 2.3. Posibles estructuras de los grupos funcionales oxigenados en la superficie (Boehm, 1994).

Las propiedades adsorbentes de los carbones activados son atribuidas fundamentalmente a su gran área superficial, a su alto grado de reactividad en la superficie y a su tamaño de poro, el cual permite que su superficie interna sea accesible e incrementa la velocidad de adsorción.

Los carbones activados comerciales más ampliamente usados tienen un área superficial del orden de 800 a 1500 m²/g. Esta área superficial está contenida predominantemente dentro de los microporos que tienen diámetros efectivos menores que 2 nm. En realidad, una partícula de carbón activado está constituida de una red compleja de poros que se clasifican en microporos (diámetro menor a 2 nm), mesoporos (diámetro entre 2 y 50 nm) y macroporos (diámetro mayores a 50 nm). Los macroporos no contribuyen mucho con el área superficial pero actúan como conducto para el paso del adsorbato al interior del mesoporo y la superficie del microporo donde la mayor parte de la adsorción tiene lugar. La distribución del tamaño de poro en un carbón depende del tipo de la materia prima y el método de fabricación (Cheremisinoff, 1993).

CAPITULO 2. DESCRIPCIÓN DEL PROBLEMA

El uso más intensivo de los plaguicidas es en la agricultura. Se estima que actualmente alrededor del 65% del consumo nacional, se aplica para combatir y prevenir plagas en diversos cultivos. El uso y manejo inapropiado e irresponsable de plaguicidas ocasiona serios problemas a la salud humana y al medio ambiente. Los problemas a la salud normalmente se pueden manifestar como intoxicaciones de grado variable y sus efectos nocivos se presentan a mediano o largo plazo, tales como carcinogénesis, teratogénesis, esterilidad y mutagénesis, entre otros.

Las principales fuentes de contaminación por plaguicidas de las cuencas de los ríos y lagos son las descargas de aguas residuales municipales e industriales, y el arrastre de los productos químicos que se emplean en la agricultura. Por lo anterior, se considera importante restringir el uso de plaguicidas en la agricultura e investigar procesos para remover los plaguicidas presentes en el agua.

Es obvio que no se puede estudiar la remoción de todos los plaguicidas que se usan en la agricultura y por otro lado, los plaguicidas organoclorados son los más tóxicos y más resistentes a la biodegradación. Por estas razones, se seleccionó el pentaclorofenol que es usado en la formulación de soluciones fungicidas e insecticidas y para la incorporación de otros compuestos en la fabricación de pesticidas.

Una extensa revisión bibliográfica sobre adsorción de pentaclorofenol en solución acuosa sobre carbón activado reveló que no se ha estudiado detalladamente y que se requiere mayor información sobre las variables que afectan a la isoterma de adsorción, entre estas variables se incluyen el pH y la temperatura de la solución y las propiedades del carbón activado. Además, se elucidará el mecanismo de adsorción que permitirá explicar los efectos de las variables anteriores en la capacidad de adsorción.

En el presente estudio se investigó la adsorción de pentaclorofenol en solución acuosa sobre carbón activado como una alternativa de remoción. Para lograr lo anterior se establecieron los objetivos y metas siguientes:

1. Evaluar la isoterma de adsorción de pentaclorofenol sobre seis diferentes tipos de carbones activados comerciales que son: F-300, F-400, C, MG, VG y CG-700. Las características de estos carbones se describen en la sección 3.1.
2. Encontrar el carbón activado que tiene mayor capacidad de adsorción por el pentaclorofenol.
3. Analizar los efectos de la temperatura y el pH de la solución en la isoterma de adsorción de pentaclorofenol sobre el mejor carbón activado y explicar estos efectos.

4. Identificar por medio del diagrama de especiación qué especies de pentaclorofenol están presentes en solución acuosa, dependiendo del pH y cuáles se adsorben sobre la superficie del carbón.
5. Medir la isoterma de adsorción de pentaclorofenol sobre carbones activados oxidados y fuertemente oxidados con ácido nítrico, y encontrar cómo afecta la oxidación a la capacidad de adsorción del carbón.
6. Evaluar la cantidad y tipo de sitios activos presentes en los carbones activados sin oxidar, oxidados y fuertemente oxidados, así cómo afectan éstos a la capacidad de adsorción del carbón.
7. Determinar el punto de carga cero del carbón activado F-300 y MG y encontrar cómo afecta la carga de la superficie de estos carbones a la isoterma de adsorción.
8. Investigar si la adsorción es reversible o irreversible con el propósito de sugerir el método de regeneración del carbón saturado con PCF.

CAPITULO 3. APARATOS Y SUSTANCIAS

En este capítulo se describen las características de los carbones activados y reactivos empleados, así como los procedimientos para la preparación de las soluciones utilizadas en este estudio. También, se incluye una descripción de los equipos analíticos y el adsorbedor de lote usado para obtener los datos experimentales.

3.1. Carbón activado

En este trabajo se emplearon seis tipos de carbones activados que se conocen comercialmente como: F-300, F-400, C, MG, VG y CG-700. Las propiedades fisicoquímicas de estos carbones se muestran en la Tabla 3.1.

Tabla 3.1. Propiedades fisicoquímicas de los carbones activados

Tipo de carbón	Área superficial (m ² /g)	Volumen de poros (cm ³ /g)	Diámetro Promedio de los poros (nm)	Densidad (g/cm ³)	Sitios ácidos (meq/g)	Sitios básicos (meq/g)
F-300	863	0.49	2.26	2.92	0.32	0.28
F-300 oxidado	882	0.50	2.27	2.90	0.93	0.13
F-300 fuertemente oxidado	923	0.53	2.29	2.90	0.82	0.13
MG	889	0.45	2.02	2.8	0.32	0.36
MG oxidado	917	0.57	2.50	2.68	0.99	0.12
MG fuertemente oxidado	938	0.59	2.52	2.71	1.16	0.09
F-400	987	0.59	2.38	3.14	0.37	0.27
C	768	0.40	2.07	1.93	1.58	0.01
VG	1115	0.78	2.81	1.79	1.36	0.06
CG-700	380	0.18	1.90	2.73	0.09	0.34

El carbón activado C es de origen vegetal, fabricado por Carbones Mexicanos S. A. a partir de desperdicios de madera (aserrín) y calcinado a altas temperaturas, empleando ácido fosfórico como catalizador. Posteriormente, se neutraliza, lavándolo con carbonato de sodio, se lava con agua destilada y finalmente, se seca.

Los carbones activados tipo F-300 y F-400 son manufacturados por Calgon Carbon Corporation a partir de carbón bituminoso. El carbón es activado en un intervalo de temperaturas de 800 a 1100°C en presencia de vapor de agua, dióxido de carbono, aire ó una mezcla de ellos.

Los carbones activados VG, CG-700 y MG son fabricados por la compañía NOBRAC. El carbón VG se elabora a partir de madera de pino y se activa mediante un proceso químico a temperaturas elevadas. El carbón activado CG-700 es fabricado a partir de concha de coco y el MG de carbón de tipo mineral bituminoso.

3.2. Reactivos

En la Tabla 3.2 se muestran los reactivos que se utilizaron para la preparación de las soluciones reactivo y patrón usadas en este estudio.

Tabla 3.2. Características de los reactivos

Substancias	Grado	Fabricante
Ácido clorhídrico	Analítico	Baker Analyzed
Hidróxido de sodio	Analítico	Analytyka
Cloruro de potasio	Analítico	Química Fisher
Solución valorada de ácido clorhídrico 0.1 N	Analítico	Merck
Solución valorada de hidróxido de sodio 0.1N	Analítico	Merck
Pentaclorofenol	Analítico	Aldrich

3.3. Soluciones patrón y reactivos

Las soluciones patrón y reactivos que se emplearon en este trabajo, se prepararon de acuerdo a los procedimientos siguientes:

Solución de hidróxido de sodio 0.1 M. Se pesaron 4 g de hidróxido de sodio deshidratado, se transfirieron a un matraz volumétrico de 1L y se disolvieron con agua desionizada aforando hasta la marca.

Solución patrón de pentaclorofenol de 4000 mg/L. Se peso 1 g de pentaclorofenol, se agregó a un matraz volumétrico de 250 mL y luego, se disolvió y aforó con hidróxido de sodio 0.1 M.

Solución patrón de 1000 mg/L de pentaclorofenol. Se midieron 25 mL de la solución patrón de 4000 mg/L, se añadieron a un matraz volumétrico de 100 mL y se aforó hasta la marca con agua desionizada.

Solución de ácido clorhídrico 0.1 M. Se midieron 2 mL de ácido clorhídrico concentrado, se agregaron a un matraz volumétrico de 250 mL y se aforó con agua desionizada.

Solución 0.04M de hidróxido de potasio-cloruro de potasio 0.1M. Se añadieron 2.24 g de hidróxido de potasio y 7.45 g de cloruro de potasio a un matraz volumétrico de 1L, enseguida se disolvieron con agua desionizada y se aforó hasta la marca.

3.4. Equipo analítico

En la Tabla 3.3 se enlistan los instrumentos y equipos empleados para la realización de este estudio.

Tabla 3.3. Características de instrumentos y equipos

Equipo	Marca	Modelo	Aplicación
Controlador de temperatura	Cole-Parmer	Circulator 1253-00	Mantener constante la temperatura del baño en que se sumerge el adsorbedor de lote.
Espectrofotómetro UV-visible	Shimadzu	UV-160	Se basa en medir la cantidad de energía absorbida por un compuesto a una longitud de onda específica y que es proporcional a la concentración de este compuesto.
Fisisorción	Micromeritics	ASAP 2010	Determinar el área superficial por medio del método de adsorción física de nitrógeno a bajas temperaturas.
Picnómetro de helio	Micromeritics	Accupyc 1330	Determinar la densidad del sólido por medio del desplazamiento de helio.

Tabla 3.3. Continuación

Equipo	Marca	Modelo	Principio
pHmetro	Orion	EA940	Medir la concentración de H^+ , basándose en la conductividad de la solución.

3.5. Adsorbedor experimental de lote para medir la isoterma de adsorción

Los datos experimentales de las isotermas de adsorción se obtuvieron en el adsorbedor experimental de lote, que se muestra en la Figura 3.1. El adsorbedor constó de un matraz Erlenmeyer de 500 mL, al cual se añadió una solución de pentaclorofenol. El carbón se colocó dentro de una canastilla de malla de Nylon y esta última se sumergió dentro de la solución de pentaclorofenol. El carbón se añadió a las canastillas para evitar que la fricción entre las partículas y la pared pudieran producir partículas finas, que interfieran en la determinación de la concentración del pentaclorofenol en solución acuosa.

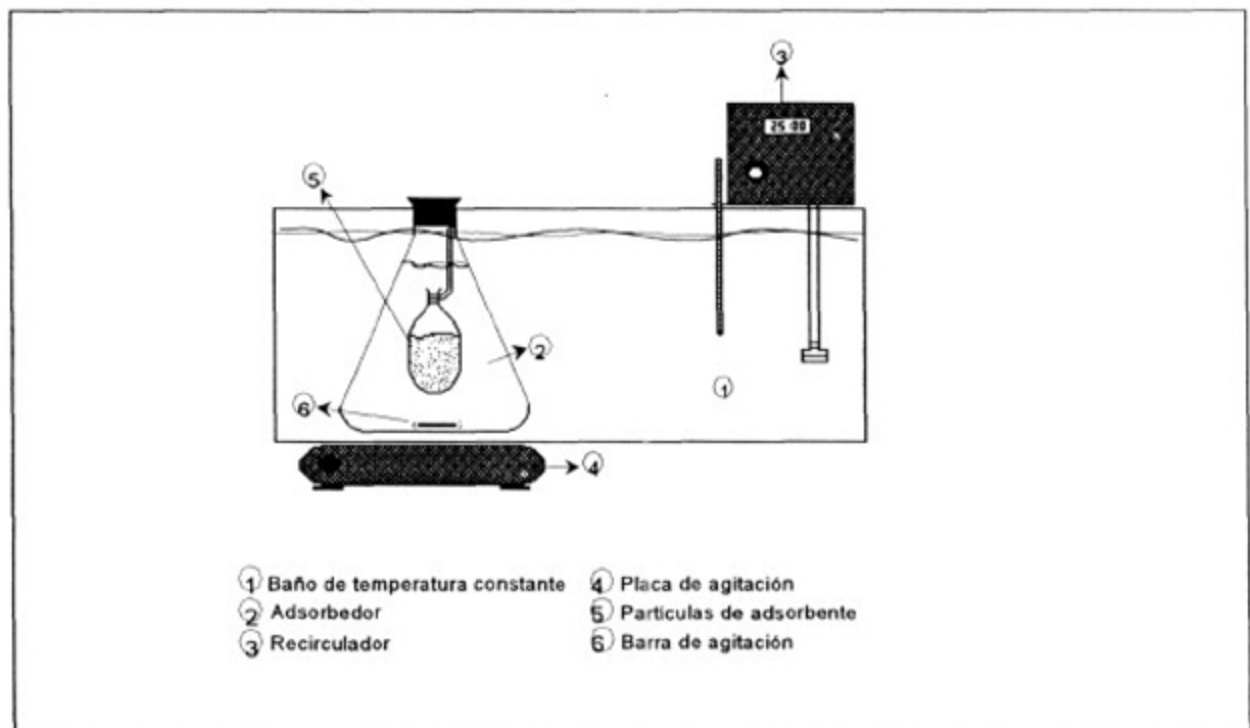


Figura 3.1 Adsorbedor experimental de lote

El adsorbedor se sumergió parcialmente en un baño para mantener constante la temperatura de la solución de pentaclorofenol que se agregó al

adsorbedor. El baño de temperatura constante consistió de un recipiente de acrílico y un recirculador de agua. La solución del adsorbedor se mantuvo en agitación usando una barra magnética de Teflón que es accionada por una placa magnética, colocada debajo del baño de temperatura constante.

CAPITULO 4. METODOLOGIA EXPERIMENTAL

4.1. Tratamiento del carbón activado

Las partículas de carbón tal como se recibieron del fabricante contienen polvo adherido y su tamaño es muy variable. Por esta razón, el carbón se tamizó en un tamizador marca AMF utilizando los tamaños de malla de 20, 30 y 50 y se obtuvieron dos fracciones de tamaño de partículas -20 +30 y -30 +50 (esto significa que las partículas pasan la primera malla - y son retenidas por la segunda malla +. Los diámetros promedio de las partículas correspondientes a estas fracciones son 0.694 y 0.418 mm respectivamente. Enseguida el carbón se lavó varias ocasiones con agua desionizada y posteriormente, se secó durante un periodo de tiempo de 24 horas en una estufa a 110°C. Finalmente, el carbón se guardó en recipientes sellados y secos.

4.2. Pretratamiento del carbón activado

Antes de efectuar cualquier experimento de adsorción, el carbón activado se pretrató para evitar que el aire pudiera quedar atrapado dentro de los poros cuando el carbón se sumerge en agua. De esta manera se aseguró que casi toda el área interna de los poros del carbón estaría disponible para la adsorción. El procedimiento consistió en pesar una masa definida de carbón activado que se colocó en canastillas de malla de Nylon y luego éstas se sumergieron en agua desionizada hirviendo durante 30 minutos. Después, las canastillas conteniendo el carbón se dejaron que se enfriaran dentro del agua y no se removieron del agua hasta que se colocaron dentro de la solución en el adsorbedor.

4.3. Oxidación del carbón activado

Los carbones activados F-300 y MG se oxidaron para observar el efecto de este tratamiento sobre la capacidad de adsorción, el procedimiento que se usó es similar al reportado por Kuzin y Strashko (1966). La oxidación del carbón se efectuó a dos niveles que se denominaron oxidado y fuertemente oxidado. En un vaso de precipitado de 1L se agregaron 40 g de carbón y luego, se adicionaron 200 mL de ácido nítrico concentrado (1:1), preparado con 100 mL de ácido nítrico concentrado y 100 mL de agua desionizada. La solución conteniendo al carbón se calentó durante 2 horas en una parrilla eléctrica, procurando que la temperatura no excediera de 50°C. Por cuestiones de seguridad, esta etapa se debe realizar dentro de una campana. La solución ácida conteniendo el carbón se dejó enfriar y luego se drenó esta solución. Para el caso del carbón oxidado, la oxidación y el drenado se realizaron una sola vez, pero para el fuertemente oxidado estas

etapas se realizaron 3 veces y cada vez con una solución nueva de ácido nítrico. Enseguida, el carbón oxidado se lavó varias veces con agua desionizada hasta que el pH del agua de lavado ya no varió durante el lavado. El carbón se secó a 110°C en una estufa por 24 horas y se guardó en recipientes de plástico cerrado. Este carbón se denominó como carbón oxidado.

4.4. Determinación de sitios activos

Los sitios activos de los carbones activados F-300, F-400, C, MG, VG y CG-700, se determinaron empleando el método de titulación ácido-base, propuesto por Boehm (1970). Los sitios ácidos se neutralizaron con una solución patrón de hidróxido de sodio, mientras que los sitios básicos con una solución patrón de ácido clorhídrico.

Los sitios activos se determinaron aforando un matraz volumétrico de 50 mL con solución neutralizante 0.1N y agregando 1 g de carbón activado. El matraz se sumergió parcialmente en un baño de temperatura constante a 25°C y se dejó por 5 días, este periodo es suficiente para que se alcance el equilibrio. El matraz se agitó manualmente cuando menos 2 veces al día. Una vez que transcurrieron los 5 días se tomó una alícuota de 10 mL y se tituló con una solución estándar de hidróxido de sodio o ácido clorhídrico 0.1 N, según el caso. La titulación se realizó por triplicado utilizando un pHmetro marca Orion, modelo EA940.

La concentración de los sitios activos en la superficie del carbón activado se obtuvo mediante la ecuación siguiente:

$$C_{sa} = \frac{V_{in}(C_{in} - C_{fn})1000}{m} \quad (4.1)$$

Donde:

- C_{sa} = Concentración de sitios activos, meq/g
- C_{in} = Concentración inicial de la solución neutralizante, eq/L
- C_{fn} = Concentración final de la solución neutralizante, eq/L
- m = Masa del carbón, g
- V_{in} = Volumen inicial de la solución neutralizante, L

La concentración final de la solución neutralizante se determinó por medio de la expresión siguiente:

$$C_{fn} = \frac{V_T C_T}{V_m} \quad (4.2)$$

Donde:

- C_T = Concentración de la solución titulante, eq/L
- V_T = Volumen gastado de la solución titulante, mL
- V_m = Volumen de la muestra de la solución neutralizante, mL

4.5. Método para determinar el punto de carga cero del carbón activado

El punto de carga cero, PCC, de los carbones activados F-300 y MG se determinó por el procedimiento de titulación ácido-base reportado por Bockris y Otagawa (1984), que se describe a continuación.

A un vaso de precipitado se adicionaron 25 mL de una solución 0.004M de hidróxido de potasio-0.01M de cloruro de potasio y 0.3 g de carbón activado con un tamaño de partícula que pasa la malla 270 (diámetro promedio menor de 0.053 mm), y se dejó en agitación por 12 horas. Enseguida, la solución conteniendo el carbón se tituló con ácido clorhídrico 0.1N. La titulación se llevó a cabo con una microbureta y en una corriente de nitrógeno para evitar que el dióxido de carbono presente en el aire se absorba en la solución y produzca bicarbonatos. En la titulación se registraron el pH de la solución y el volumen de ácido clorhídrico agregado. Por separado se realizó una titulación de la solución de hidróxido de potasio-cloruro de potasio sin carbón, siguiendo el mismo procedimiento.

La carga de la superficie del carbón se estimó usando la ecuación siguiente:

$$\Gamma = \frac{F \cdot \Delta V \cdot C_{st}}{S \cdot m} \quad (4.3)$$

Donde:

- Γ = Carga de la superficie del carbón, C/m²
- F = Constante de Faraday, F=9.65x10⁴ C/mol
- ΔV = Diferencia de volumen de la solución titulante en presencia y ausencia de carbón a un mismo pH, L
- C_{st} = Concentración de la solución titulante, mol/L
- S = Área superficial del carbón, m²/g.
- m = Masa de carbón, g

La carga de la superficie del carbón se graficó contra el pH y el PCC es el pH al cual la carga es cero.

4.6. Análisis por fisisorción de nitrógeno

El área superficial interna, el diámetro promedio de los poros y el volumen promedio de los poros se determinaron en un equipo de fisisorción, marca Micromeritics, modelo ASAP 2010, que se basa en el método de adsorción de gas nitrógeno (el adsorbato) a temperatura cercana al punto de ebullición del nitrógeno líquido (77°K). El análisis del área superficial esta basada en la teoría Brunauer, Emmett y Teller (BET). La ecuación BET linealizada es la siguiente (Sparks, 1995):

$$\frac{P}{V(P_0 - P)} = \left(\frac{1}{V_{mc}c} \right) + \left[\left(\frac{c-1}{V_{mc}c} \right) \left(\frac{P}{P_0} \right) \right] \quad (4.4)$$

Donde:

- P = Presión (P_a) de un gas en equilibrio con un sólido, atm
- P_0 = Presión de un gas requerido para la saturación a la temperatura del experimento, atm
- V = Volumen de un gas adsorbido a presión P, m^3
- V_{mc} = Volumen de gas requerido para una monocapa sobre la superficie adsorbente, m^3

$$C = \exp \frac{[E_1 - E_2]}{RT} \quad (4.5)$$

Donde:

- E_1 = Calor de adsorción de la primera capa de adsorbato, cal/g-mol
- E_2 = Calor de licuefacción del gas, cal/g-mol
- R = Constante de los gases ideales
- T = Temperatura absoluta, °K

Los datos que se obtienen son los volúmenes de nitrógeno adsorbido a diferentes presiones, estos volúmenes se corrigen a temperatura y presión normales (0°C y 1 atm) y se grafican en función de la presión para obtener la isoterma de adsorción correspondiente.

El área superficial específica de sólido se calcula a partir de V_m y conociendo el área ocupada por una molécula de nitrógeno a las condiciones a las cuales se midió la isoterma. La ecuación que se usa en este caso es:

$$S_A = \left(\frac{P_0 V_m}{RT_0} \right) N S_{N_2} \quad (4.6)$$

Donde:

- N = Número de Avogadro, molec/mol
- P_s = Presión estándar, 1 atm
- R = Constante de los gases ideales, $cm^3 \text{ atm/mol}^\circ K$
- S_{N_2} = Área ocupada por una molécula, $16.2 \text{ \AA}^2/g$
- T_0 = Temperatura estándar, $273.15^\circ K$
- v_m = Volumen de monocapa, cm^3/g

El procedimiento se describe a continuación. Se revisó que el tubo portamuestras estuviera perfectamente limpio y seco, así como su tubo de relleno. El tubo portamuestras se tapó con un tapón de hule o por medio de un "seal frit", se colocó en uno de los dos puertos de desgasificación y, enseguida, se aplicó vacío al tubo portamuestras hasta alcanzar una presión menor de 100 μm de mercurio.

Al tubo portamuestras se le introdujo gas nitrógeno y se quitó del puerto de desgasificación. Luego, el tubo portamuestras conteniendo gas nitrógeno se pesó en una balanza analítica. Por otro lado, se pesó la muestra de carbón previamente secado en una estufa a 110 °C durante 24 horas. Al tubo portamuestras se le quitó el tapón o "seal frit" y el rodillo de relleno, y se agregó la muestra. Enseguida, se colocó nuevamente el rodillo de relleno y el tapón o seal frit, y se pesó el tubo portamuestras con la muestra.

El tubo portamuestras se colocó en uno de los puertos de desgasificación y se calentó por medio de la canastilla de calentamiento a una temperatura de 150°C. Después, se procedió con la desgasificación automática de la muestra hasta alcanzar un vacío menor de 100 μm de mercurio, se requieren de 12 a 16 horas para las muestras de carbón.

El tubo portamuestras se desmontó del puerto de desgasificación, se pesó y por diferencia se calculó el peso de la muestra después de desgasificar. El tubo portamuestras se colocó en el puerto de análisis por adsorción de nitrógeno y se procedió a realizar el análisis automáticamente por medio del software del equipo de fisisorción.

4.7. Determinación de la densidad del carbón activado

La densidad del carbón se determinó por medio del desplazamiento de helio en un picnómetro, marca Micromeritics, modelo Accupyc 1330, que se basa en la inyección de helio de alta pureza a la muestra por analizar.

El procedimiento para determinar la densidad es el siguiente:

- 1) La muestra de carbón se secó en una estufa a 110°C por 24 horas para eliminar las impurezas de la muestra que pueden causar error.
- 2) La muestra caliente se colocó en la copa de muestras y esta a su vez en la cabina de análisis, y se inició el análisis.
- 3) Al término del análisis se pesó la copa con la muestra (w_1) y después la copa sin muestra (w_2).
- 4) El picnómetro reportó el volumen promedio de la muestra y la densidad se cálculo con la ecuación siguiente:

$$\rho = \frac{w_1 - w_2}{v} \quad (4.7)$$

Donde

- ρ = Densidad absoluta del carbón, g/mL
- w_1 = Peso de la copa con la muestra, g
- w_2 = Peso de la copa, g
- v = Volumen promedio, mL

Se hicieron 3 mediciones, repitiendo los pasos del 1 al 4 y promediando las tres densidades absolutas para obtener una densidad absoluta promedio

4.8. Determinación de la concentración de pentaclorofenol en solución acuosa.

La concentración del pentaclorofenol en solución acuosa se determinó por un método espectrofotométrico UV-Visible. Este método se fundamenta en la absorción de energía radiante por compuestos en la región ultravioleta-visible, debida a la transferencia de electrones del estado basal o normal a estados de mayor energía.

Primeramente se efectuó un barrido en un intervalo de longitud de onda de 200 a 780 nm para determinar las longitudes de onda a las cuales se observan picos en la absorbancia. El barrido se efectuó en un espectrofotómetro de doble haz, marca Shimadzu modelo UV-160, usando una solución de pentaclorofenol de 20 mg/L y una solución de hidróxido de sodio 0.1M como blanco. El barrido se muestra en la Figura 4.1 y se nota que los picos en la absorbancia ocurren a las longitudes de onda de 223, 250 y 320 nm.

Para seleccionar las longitudes de onda a las que se trabajó, se prepararon dos curvas de calibración, una concentraciones entre 10 y 100 mg/L y otra a concentraciones entre 2 y 10 mg/L, y se midieron las absorbancias de los estándares a longitudes de onda de 223 nm, 250 nm y 320 nm. A 223 nm se observó la máxima absorbancia, pero también se tiene mayor error (% Desv. = 2.11%). En base a esto, el análisis para concentraciones de 2-10 mg/L se realizó a 250 nm y para 10-100 mg/L a 320 nm.

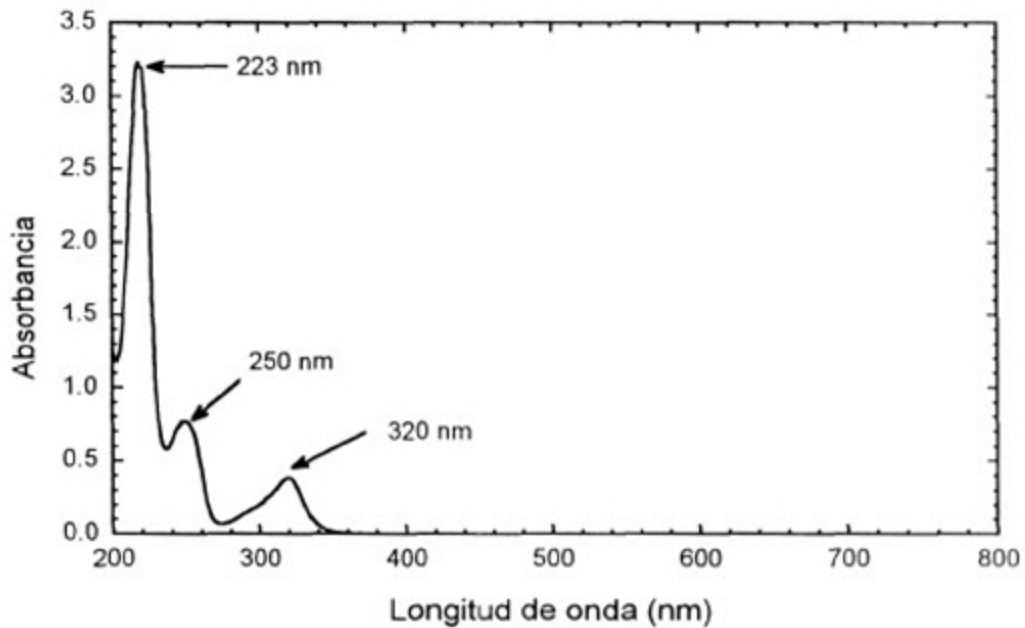


Figura 4.1. Espectro de absorción del pentaclorofenol en solución acuosa.

El pentaclorofenol en solución se determinó cuantitativamente por medio de una curva de calibración que se preparó con 7 a 9 soluciones estándares midiendo la absorbancia en un espectrofotómetro UV-Visible de doble haz, marca Shimadzu, modelo UV-160. El espectrofotómetro se debe calibrar a cero usando como blanco la solución buffer que se usa para preparar la solución de pentaclorofenol.

La curva de calibración se preparó al mismo pH de las muestras. Para lograr esto los estándares se prepararon diluyendo una alícuota de la solución patrón de pentaclorofenol con solución buffer y ajustando el pH al valor deseado. Los datos de la curva de calibración, concentración contra absorbancia, se correlacionaron por medio de la ecuación siguiente:

$$C = k * Abs + b \quad (4.8)$$

Donde:

- C = Concentración, mg/L
- Abs = Absorbancia
- k y b = Constantes de ajuste

Dependiendo de la concentración de la muestra se usó la curva de calibración para concentraciones en el intervalo 0.1-10 mg/L, y otra para concentraciones en el intervalo 10 -100 mg/L. La concentración de pentaclorofenol en las muestras se determinó empleando la ecuación de la curva de calibración apropiada.

4.9. Método para la obtención de datos experimentales de la isoterma de adsorción

Los datos experimentales de las isotermas de adsorción se obtuvieron en un adsorbedor de lote por el procedimiento que se describe a continuación. Se preparó una solución de pentaclorofenol de concentración conocida en un matraz volumétrico de 500 mL y se tomó una muestra de 10 o 20 mL que se analizó posteriormente para corroborar la concentración inicial de la solución de pentaclorofenol. La solución restante se transfirió al adsorbedor de lote y se colocó la canastilla de malla de Nylon conteniendo el carbón (ver sección 3.5). El adsorbedor se sumergió parcialmente en un baño de temperatura constante.

La solución y el carbón activado se dejaron en contacto hasta que alcanzaron el equilibrio, generalmente un periodo de 10 a 19 días fue suficiente. Para los experimentos en que se mantuvo el pH constante, el pH de la solución se midió empleando un pHmetro y se ajustó diariamente utilizando soluciones de ácido clorhídrico e hidróxido de sodio 0.1, 0.05 y 0.01N. Es necesario registrar el volumen total de las soluciones ácida y básica que se agregaron al adsorbedor para calcular el volumen total final de la solución.

Después de un cierto periodo de tiempo, se muestreó la solución del adsorbedor y se determinó la concentración de pentaclorofenol por espectrofotometría UV-Visible. Se consideró que se había alcanzado el equilibrio cuando las concentraciones de dos muestras sucesivas ya no variaron entre sí.

La masa de pentaclorofenol adsorbido se calculó mediante un balance de masa, la expresión matemática para efectuar este cálculo se presenta enseguida:

$$q = \frac{V_o C_o - V_f C_f - \sum_{i=1}^N V_i C_i}{m} \quad (4.9)$$

$$V_f = V_o - \sum V_i + V_a \quad (4.10)$$

Donde:

- C_o = Concentración inicial del pentaclorofenol, mg/L
- C_f = Concentración final del pentaclorofenol, mg/L
- C_i = Concentración del pentaclorofenol en la muestra número i , mg/L
- m = Masa del carbón, g
- N = Número de muestras
- q = Masa de pentaclorofenol adsorbido, mg/g
- V_o = Volumen inicial, L
- V_f = Volumen final, L
- V_i = Volumen de la muestra número i , L
- V_a = Volumen total de las soluciones de ácido clorhídrico e hidróxido de sodio que se agregaron al adsorbedor para ajustar el pH, L

4.10. Método para la obtención de datos experimentales de desorción

Los datos experimentales de desorción se obtuvieron efectuando primero un experimento de adsorción de pentaclorofenol, como se describió anteriormente. El proceso de adsorción se invirtió removiendo la canastilla conteniendo el carbón saturado con pentaclorofenol y sumergiéndola en una solución buffer pH=7 que no contenía pentaclorofenol. Bajo estas condiciones, si la adsorción es reversible, parte del pentaclorofenol se desorbe y se difunde a la solución para alcanzar un nuevo equilibrio de adsorción. En el caso de que la adsorción sea completamente reversible, el nuevo equilibrio corresponde a la isoterma de adsorción.

A continuación se describe el procedimiento seguido para realizar los experimentos de desorción. Primeramente se efectuó un experimento de adsorción como se describió en la sección anterior y una vez que se alcanzó el equilibrio, la canastilla conteniendo el carbón saturado con pentaclorofenol se removió de la solución de pentaclorofenol que se encontraba en el adsorbedor de lote. De inmediato esta canastilla se lavó rápidamente con solución buffer pH=7 para remover la solución de pentaclorofenol que estaba atrapada o adherida entre las partículas de carbón empacadas en la canastilla. El lavado se efectuó sumergiendo la canastilla en solución buffer por espacio de 10 segundos y sacudiéndola para remover el exceso de solución buffer. Contiguamente, la canastilla se introdujo en un adsorbedor de lote, al cual previamente se le habían agregado 500 mL de una solución buffer pH=7 sin pentaclorofenol. La solución se muestreó cada determinado período de tiempo y se determinó la concentración de pentaclorofenol en las muestras. El carbón y la solución se mantuvieron en contacto hasta que alcanzaron un nuevo equilibrio de adsorción, esto ocurrió cuando la concentración de dos muestras consecutivas permaneció constante. La masa de pentaclorofenol que permaneció adsorbido se estimó por un balance de masa que se representa por la ecuación siguiente:

$$q = \frac{q_0 m - V_f C_f - \sum_{i=1}^N C_i V_i}{m} \quad (4.11)$$

Donde q_0 = Masa de pentaclorofenol adsorbido en el carbón activado al inicio, mg/g.

CAPITULO 5. RESULTADOS

5.1. Cálculo de la concentración de pentaclorofenol en solución acuosa

La determinación de la concentración de pentaclorofenol en solución acuosa se efectuó siguiendo el procedimiento que se describió en la sección 4.8. Los datos experimentales de las curvas de calibración se reportan en el Apéndice B y se ajustaron mediante la ecuación 4.5. Las constantes de esta ecuación se obtuvieron usando un método de mínimos cuadrados que se basa en un algoritmo de optimización. Los valores de las constantes de la curva de calibración se muestran al final de cada una de las tablas de los datos de las curvas de calibración.

En las Figuras 5.1 y 5.2 se muestran los datos experimentales de las curvas de calibración 1a y 1b, respectivamente (ver Apéndice B). En estas figuras también se graficó la ecuación 4.5 empleando los valores de los parámetros de ajuste respectivos.

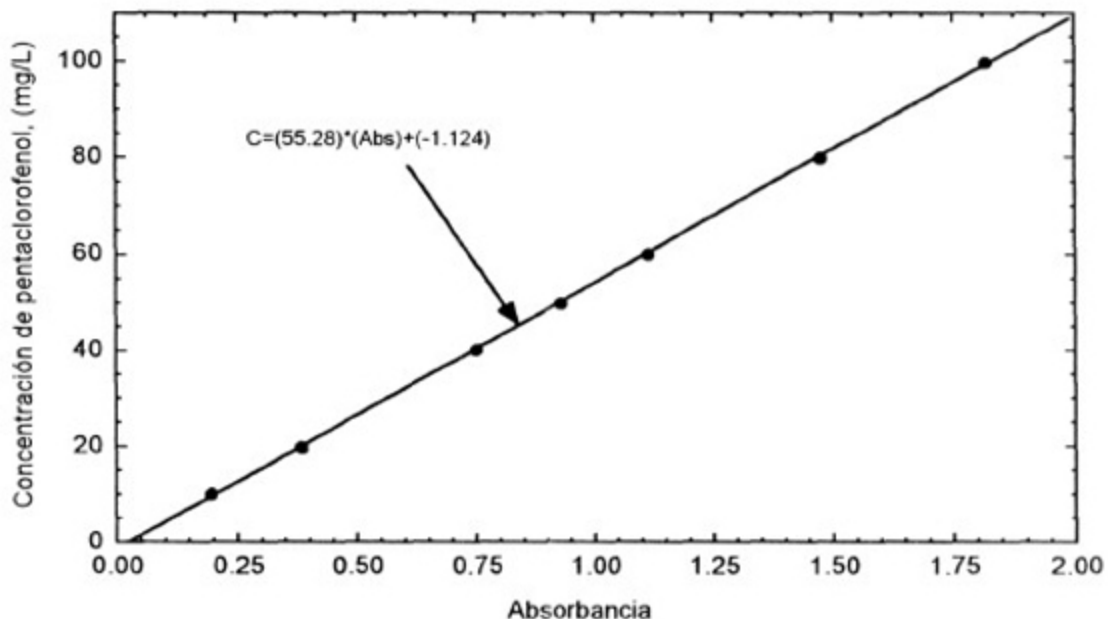


Figura 5.1. Curva de calibración 1a para la determinación de pentaclorofenol en solución acuosa. Intervalo de concentración de 10 a 100 mg/L.

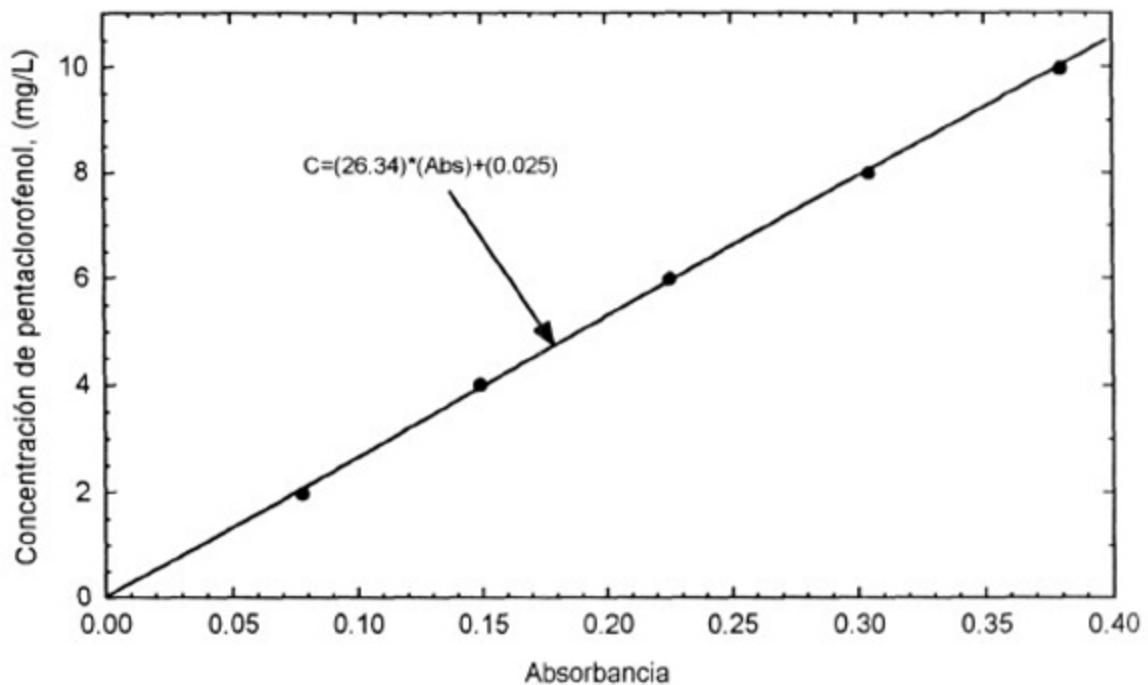


Figura 5.2. Curva de calibración 1b para la determinación de pentaclorofenol en solución acuosa. Intervalo de concentración de 2 a 10 mg/L.

En las tablas del Apéndice B también se reporta el porcentaje de desviación para cada uno de los datos y éste parámetro se calculó empleando la ecuación siguiente:

$$\%Desv = \left| \frac{C_{real} - C_{cal}}{C_{real}} \right| * 100 \quad (5.1)$$

Además, se evaluó el porcentaje de desviación promedio para cada curva de calibración que se definió como:

$$\overline{\%Desv} = \frac{1}{N_i} \sum |\%Desv| \quad (5.2)$$

Donde N_i es el número de datos experimentales. El porcentaje de desviación promedio también se incluyó en las tablas del Apéndice B.

5.2. Datos experimentales de adsorción sobre carbón activado

Los datos experimentales de las isotermas de adsorción de pentaclorofenol en solución acuosa y sin control de pH sobre los carbones activados F-300, F-400, C, MG, VG y CG-700, se encuentran reportados en las Tablas A.1 a A.6; los datos de las isotermas de adsorción sobre los carbones F-300 y MG oxidados y

fuertemente oxidados se muestran en las Tablas A.7 a A.10. Los datos de adsorción de pentaclorofenol sobre el carbón activado F-300, a diferentes pH y temperaturas, se muestran en las Tablas A.11 a A.15 y A.17 a A.18; en la Tabla A.16 se reportan los datos experimentales de la isoterma de adsorción sobre el carbón activado MG a pH=7 y T=25°C. Los datos experimentales de desorción del pentaclorofenol adsorbido sobre los carbones F-300 y MG se encuentran reportados en las Tablas A.19 a A.22.

En las Tablas A.1 a A.22 se reporta el volumen inicial de la solución, la masa de carbón, los tiempos de muestreo y los volúmenes de las muestras, así como sus absorbancias y concentraciones. También, se indica que curva de calibración se usó para estimar la concentración y el factor de dilución respectivo.

5.3. Cálculo de la masa del pentaclorofenol adsorbido sobre el carbón activado

La masa de pentaclorofenol adsorbido sobre el carbón se calculó mediante la ecuación 4.6. Este cálculo se ejemplifica usando los datos del experimento 11F-400100 que se encuentran en la Tabla A.2 del Apéndice A:

$$\begin{aligned} C_o &= 98.98 \text{ mg/L} \\ C_1 &= 5.515 \text{ mg/L} \\ C_f &= 4.005 \text{ mg/L} \\ V_o &= 0.480 \text{ L} \\ V_f &= 0.440 \text{ L} \\ V_i &= 0.020 \text{ L} \end{aligned}$$

$$q = \frac{0.480 \text{ L}(98.98 \text{ mg/L}) - (0.440 \text{ L})(4.005 \text{ mg/L}) - [0.020(5.515 \text{ mg/L} + 4.005 \text{ mg/L})]}{0.3602 \text{ g}}$$

$$q = 126.5 \text{ mg/g}$$

Este valor se encuentra en la Tabla 5.1. Los datos experimentales de las isotermas de adsorción, q vs. C, se reportan en las Tablas 5.1 a 5.6.

5.4. Datos experimentales de las isotermas de adsorción de pentaclorofenol sobre carbón activado a diferentes condiciones

En la Tabla 5.1 se exhiben los datos experimentales de las isotermas de adsorción de pentaclorofenol en solución acuosa, q vs. C, sobre los carbones activados F-300, F-400, C, MG, VG y CG-700 a T=25°C y sin ajuste de pH; en la Tabla 5.2 se muestran los datos experimentales de las isotermas de adsorción sobre los carbones F-300 y MG oxidados y fuertemente oxidados. Los datos de

adsorción de pentaclorofenol sobre el carbón activado F-300, a diferentes pH y temperaturas se muestran en las Tablas 5.3 y 5.5; en la Tabla 5.4 se reportan los datos experimentales de la isoterma de adsorción a pH=7 y T=25°C sobre el carbón activado MG. Los resultados experimentales de desorción de pentaclorofenol sobre los carbones F-300 y MG se encuentran reportados en la Tabla 5.6.

Tabla 5.1. Datos experimentales de las isotermas de adsorción de pentaclorofenol sobre los carbones activados F-300, F-400, C, MG, VG y CG-700. T=25°C y sin ajuste de pH.

Tipo de carbón	Experimento No.	Concentración de pentaclorofenol en el equilibrio (mg/L)	Masa de pentaclorofenol adsorbido (mg/g)
F-300*	15F-300100	0.46	74.38
	16F-300100	1.30	104.9
	07F-300100	2.60	128.5
	17F-300100	11.2	164.5
	18F-300100	20.4	179.4
	09F-300100	23.5	184.3
	19F-300100	47.8	196.2
	20F-300100	57.0	209.7
	21F-300100	84.6	219.3
F-400**	22F-400100	1.17	74.50
	23F-400100	1.53	103.8
	11F-400100	4.00	126.5
	11F-400100	4.52	126.1
	24F-400100	12.4	135.5
	25F-400100	22.8	142.6
	12F-400100	15.3	146.2
	12F-400100	15.8	143.5
	13F-400100	36.0	152.3
	14F-400100	60.0	157.8
C*	29C60	1.85	27.88
	30C80	4.97	35.30
	31C100	15.6	38.87
	32C150	57.8	43.19
	33C200	93.6	55.24

Tabla 5.1. (Continuación)

Tipo de carbón	Experimento No.	Concentración de pentaclorofenol en el equilibrio (mg/L)	Masa de pentaclorofenol adsorbido (mg/g)
MG*	58MG100	0.71	48.22
	70MG100	1.06	85.38
	59MG100	3.88	126.1
	60MG100	13.5	156.0
	61MG100	22.8	181.3
	62MG200	53.4	211.9
	63MG200	81.7	220.6
	71MG200	117	224.4
	72MG250	167	239.0
VG***	67VG100	13.4	34.26
	46VG100	31.7	50.97
	47VG100	58.6	54.01
	48VG100	67.2	58.58
	49VG100	73.5	60.70
	68VG100	96.9	71.46
	69VG100	125	75.02
	50VG200	144	81.76
	51VG200	155	82.09
CG-700****	65CG-700100	39.2	23.24
	52CG-700100	69.9	21.87
	53CG-700100	82.1	22.12
	54CG-700100	83.2	28.66
	55CG-700100	90.0	20.53
	66CG-700100	133	28.05
	56CG-700200	182	23.83
	57CG-700200	184	27.21

* Diámetro promedio de la partícula = 0.694 mm

** Diámetro promedio de la partícula = 0.418 mm

*** Diámetro promedio de la partícula = 0.805 mm

**** Diámetro promedio de la partícula = 0.868 mm

Tabla 5.2. Datos experimentales de la isoterma de adsorción de pentaclorofenol sobre los carbones activados F-300 y MG oxidados y fuertemente oxidados. T=25°C y sin ajuste de pH.

Tipo de carbón	Experimento No.	Concentración de pentaclorofenol en el equilibrio (mg/L)	Masa de pentaclorofenol adsorbido (mg/g)
F-300 oxidado	95F-300100	3.41	71.44
	96F-300100	14.3	110.8
	97F-300100	31.7	123.1
	98F-300100	39.2	139.4
	99F-300200	83.7	168.1
	100F-300200	113	160.9
F-300 f. oxid.	135F300100	3.37	71.63
	136F300100	19.7	104.3
	137F300100	33.9	120.3
	138F300100	45.6	125.4
	139F300100	91.5	156.0
	140F300100	115	158.3
MG oxidado	101MG100	5.10	69.20
	102MG100	22.9	97.92
	103MG100	47.2	115.5
	104MG200	91.6	153.2
	105MG200	119	145.6
	106MG200	142	146.1
MG f. oxid.	141MG100	8.79	67.04
	142MG100	26.5	93.94
	143MG100	51.0	107.4
	144MG200	103	137.9
	145MG200	124	137.2
	146MG200	145	138.8

Tabla 5.3. Datos experimentales de la isoterma de adsorción de pentaclorofenol sobre el carbón activado F-300 T=25°C a diferentes valores de pH.

pH	Experimento No.	Concentración de pentaclorofenol en el equilibrio (mg/L)	Masa de pentaclorofenol adsorbido (mg/g)
12	34F-300100	0.17	75.08
	35F-300100	1.02	130.6
	36F-300100	4.77	173.2
	37F-300100	14.8	201.3
	38F-300200	46.0	221.6
	39F-300200	79.0	226.1
10	40F-300100	0.16	75.28
	41F-300100	0.68	131.5
	42F-300100	2.29	178.8
	43F-300100	10.6	213.1
	44F-300200	25.8	253.6
	45F-300200	57.7	269.8
8	75F-300100	0.19	180.9
	76F-300100	1.51	231.9
	77F-300200	4.08	280.5
	79F-300100	9.27	313.3
	78F-300200	18.6	340.0
	80F-300200	41.3	359.1
	81F-300200	68.1	377.0
7	113F300100	0.08	176.4
	114F300100	0.37	228.4
	115F300200	2.12	282.5
	116F300200	16.8	337.6
	145F300200	34.2	350.6
	146F300200	51.6	377.9
	118F300200	89.7	377.3
6	108F30050	0.05	128.8
	109F30050	0.05	179.2
	131F300100	0.16	228.4
	110F300100	0.08	230.6
	111F300100	0.27	279.1
	112F300100	1.89	356.6
	161F300200	20.1	443.2
	162F300200	34.5	467.0
	134F300200	65.1	455.4

Tabla 5.4. Datos experimentales de la isoterma de adsorción de pentaclorofenol sobre el carbón activado MG. T=25°C a pH=7.

Experimento No.	Concentración de pentaclorofenol en el equilibrio (mg/L)	Masa de pentaclorofenol adsorbido (mg/g)
119MG100	0.29	175.9
120MG100	2.14	224.3
121MG200	10.0	266.3
122MG200	34.5	301.1
123MG200	52.3	325.3
124MG200	100	334.6

Tabla 5.5. Datos experimentales de la isoterma de adsorción de pentaclorofenol sobre el carbón activado F-300. T=15°C a pH=12.

Experimento No.	Concentración de pentaclorofenol en el equilibrio (mg/L)	Masa de pentaclorofenol adsorbido (mg/g)
84F-300100	1.07	128.8
85F-300100	2.96	177.6
86F-300100	11.7	206.1
87F-300100	39.8	233.8
88F-300100	70.0	245.6

5.5. Cálculo de la masa de pentaclorofenol que permanece adsorbido sobre carbón activado en un experimento de desorción

Los datos de los experimentos de desorción se encuentran en las Tablas A.19 y A.20. El cálculo de la masa de pentaclorofenol que permanece adsorbido en un experimento de desorción se realizó empleando la ecuación siguiente:

$$q = \frac{(mq_0) - (V_f C_f) - \sum_{i=1}^n V_i C_i}{m} \quad (5.3)$$

Este cálculo se ejemplifica usando los datos de desorción del experimento 151F-300100d que se encuentra en la Tabla A.20. Previamente a este

experimento, se efectuó el experimento de adsorción 151F-300100a y la masa de pentaclorofenol adsorbido al inicio, q_0 , correspondiente a este experimento está reportada en la Tabla 5.6. Los datos son:

$$\begin{aligned}
 C_0 &= 0.000 \text{ mg/L} \\
 C_1 &= 0.272 \text{ mg/L} \\
 C_f &= 0.220 \text{ mg/L} \\
 m &= 0.2007 \text{ g} \\
 V_0 &= 0.48 \text{ L} \\
 V_1 &= V_2 = 0.02 \text{ L} \\
 V_f &= 0.445 \text{ L} \\
 q &= 234.8 \text{ mg/g (Tabla 6.6)}
 \end{aligned}$$

$$q = \frac{(0.2007\text{g})(234.8\text{mg/L}) - (0.445 \text{ L})(0.22\text{mg/L}) - 0.02\text{L}(0.272\text{mg/L} + 0.220\text{mg/L})}{0.2007\text{g}}$$

$$q = 234.3 \text{ mg/g}$$

Este valor se reporta en la Tabla 5.7.

5.6. Datos experimentales de la desorción del pentaclorofenol adsorbido en carbón activado

Los datos experimentales de adsorción y desorción de pentaclorofenol se encuentra en las Tablas 5.6 y 5.7.

Tabla 5.6. Datos experimentales de los experimentos de adsorción de pentaclorofenol sobre los carbones activados F-300 y MG. T=25°C y sin ajuste de pH.

Tipo de carbón	Experimento No.	Concentración de pentaclorofenol en el equilibrio (mg/L)	Masa de pentaclorofenol adsorbido (mg/g)
F-300	164F300400a	0.169	192.5
	151F300100a	0.433	234.8
	152F300200a	17.44	346.6
	153F300200a	55.55	383.2
	154F300200a	85.54	418.2
	163F300400a	136.1	421.7

Tabla 5.6. (Continuación)

Tipo de carbón	Experimento No.	Concentración de pentaclorofenol en el equilibrio (mg/L)	Masa de pentaclorofenol adsorbido (mg/g)
	166MG400a	1.320	191.0
	156MG200a	13.54	269.4
	157MG200a	59.45	325.8
	158MG200a	102.2	350.6
	165MG400a	173.9	350.6

Tabla 5.7. Datos experimentales de los experimentos de desorción de pentaclorofenol (PCF) sobre carbón activado F-300 y MG, T=25°C y sin ajuste de pH.

Tipo de carbón	Experimento No.	Masa de PCF adsorbido al inicio (mg/g)	Concentración de PCF en el equilibrio (mg/L)	Masa de PCF adsorbido (mg/g)
F-300	164F300400d	192.5	0.160	192.4
	151F300100d	234.8	0.220	234.3
	152F300200d	346.6	3.032	340.7
	153F300200d	383.2	7.269	363.4
	154F300200d	418.2	7.860	388.8
	163F300400d	421.7	12.48	401.7
MG	155MG100d	181.8	0.336	181.2
	166MG400d	191.0	0.391	190.8
	156MG200d	269.4	3.880	263.6
	157MG200d	325.8	8.900	304.8
	158MG200d	350.6	9.747	314.1
	165MG400d	350.6	15.55	325.6

5.7. Correlación de los datos experimentales de las isotermas de adsorción.

Los datos experimentales de las isotermas de adsorción se ajustaron mediante las isotermas de Langmuir (Ec. 1.3), Freundlich (Ec. 1.5) y de Prausnitz-Radke (Ec. 1.6). Los parámetros de estas isotermas se evaluaron usando un método de mínimos cuadrados que se basa en el algoritmo de optimización de Rosenbrock-Newton, el cual emplea la función objetivo siguiente:

$$R = \sum (q_{\text{exp}} - q_{\text{cal}})^2 = \text{Mínimo} \quad (5.4)$$

También se calculó el porcentaje de desviación promedio para cada isoterma, por medio de la ecuación siguiente:

$$\%Desv = \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left| \frac{q_{exp} - q_{cal}}{q_{exp}} \right| \right) * 100 \quad (5.5)$$

Donde N es el número de datos experimentales.

En la Tabla 5.8 se muestran los valores de los parámetros y los porcentajes de desviación de las isotermas de Langmuir, Freundlich y Prausnitz-Radke y en las Figuras 5.3 a 5.10 se muestran los datos experimentales de las isotermas de adsorción y de desorción.

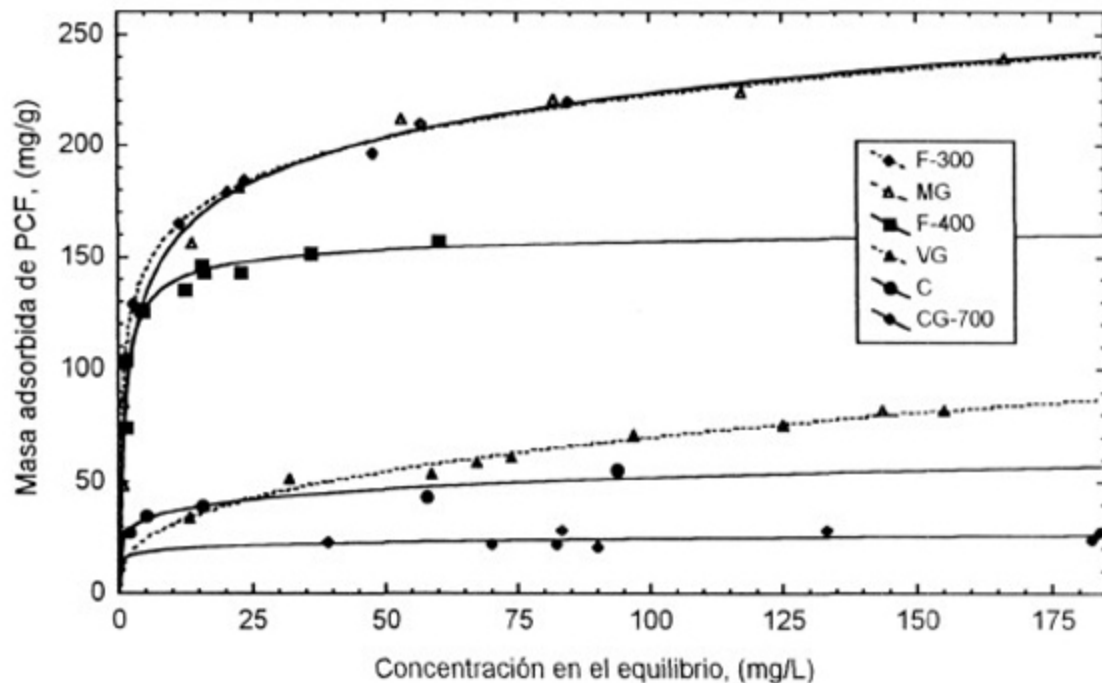


Figura 5.3. Isotermas de adsorción de pentaclorofenol sobre los carbones activados F-300, MG, F-400, VG, C y CG-700. T=25°C y sin ajuste de pH. Las líneas representan la isoterma de adsorción de Prausnitz-Radke.

Tabla 5.8 Valores de los parámetros de ajuste de las isothermas de Langmuir, Freundlich y Prausnitz-Radke para la adsorción de pentaclorofenol sobre los carbones activados F-300, MG, F-400, C, VG y CG-700.

Tipo de carbón	T (°C)	pH	Langmuir			Freundlich			Prausnitz-Radke			
			q _m (L/g)	K (L/mg)	%Desv.	k (L ^{1/n} mg ^{-1-1/n} g ⁻¹)	n	%Desv.	A	b	β	%Desv.
F-300	25	S/A*	201	0.83	7.60	101.9	5.61	4.83	464	3.7	0.87	1.02
		6	434	9.40	11.9	290.7	7.86	12.7	7362	20.8	0.93	7.71
		7	348	8.35	10.2	248.8	9.95	3.61	10855	40.6	0.92	1.41
		8	357	2.81	14.1	226.9	7.55	2.96	63599	279	0.87	2.94
		10	250	1.64	10.9	138.0	5.64	9.07	1033	6.0	0.89	1.84
		12	213	1.93	10.5	126.0	6.79	8.98	936	6.0	0.91	1.98
	15	12	238	1.02	3.11	143.0	7.52	5.10	394	2.1	0.94	1.51
F-300 ox.	25	S/A*	165	0.16	7.96	58.08	4.39	5.04	88	1.2	0.83	3.27
F-300 f. ox.	25	S/A*	153	0.17	11.2	52.45	4.25	1.76	656235	12344	0.77	1.64
MG	25	S/A*	223	0.35	8.87	86.58	4.79	12.1	160	1.2	0.88	5.77
		7	303	3.67	9.84	205.1	9.08	1.34	12202	58.1	0.90	0.93
MG ox.	25	S/A*	154	0.11	9.24	47.35	4.21	3.52	148	2.8	0.78	3.81
MG f. ox.	25	S/A*	150	0.07	5.77	39.21	3.84	2.55	46	0.9	0.79	1.91
F-400	25	S/A*	154	1.02	4.09	95.87	7.46	6.82	179	1.2	0.98	4.04
C	25	S/A*	48.3	0.61	9.30	25.99	6.63	5.47	397424	15300	0.85	5.46
VG	25	S/A*	94.6	0.03	7.63	13.46	2.79	3.38	489	35.7	0.65	3.38
CG-700	25	S/A*	26.8	0.12	10.3	15.54	10.1	9.81	57977	3664	0.91	9.80

*S/A = Sin ajuste de pH

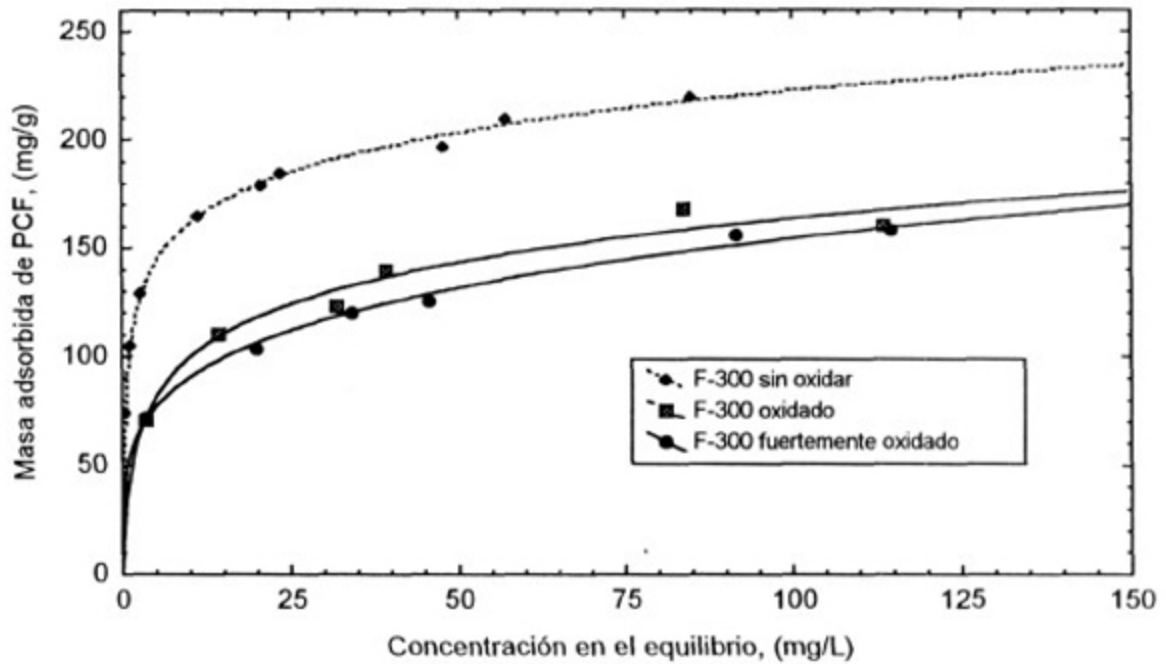


Figura 5.4. Isothermas de adsorción de pentaclorofenol sobre el carbón activado F-300 sin oxidar, oxidado y fuertemente oxidado. $T=25^{\circ}\text{C}$ y sin ajuste de pH. Las líneas representan la isoterma de adsorción de Prausnitz-Radke.

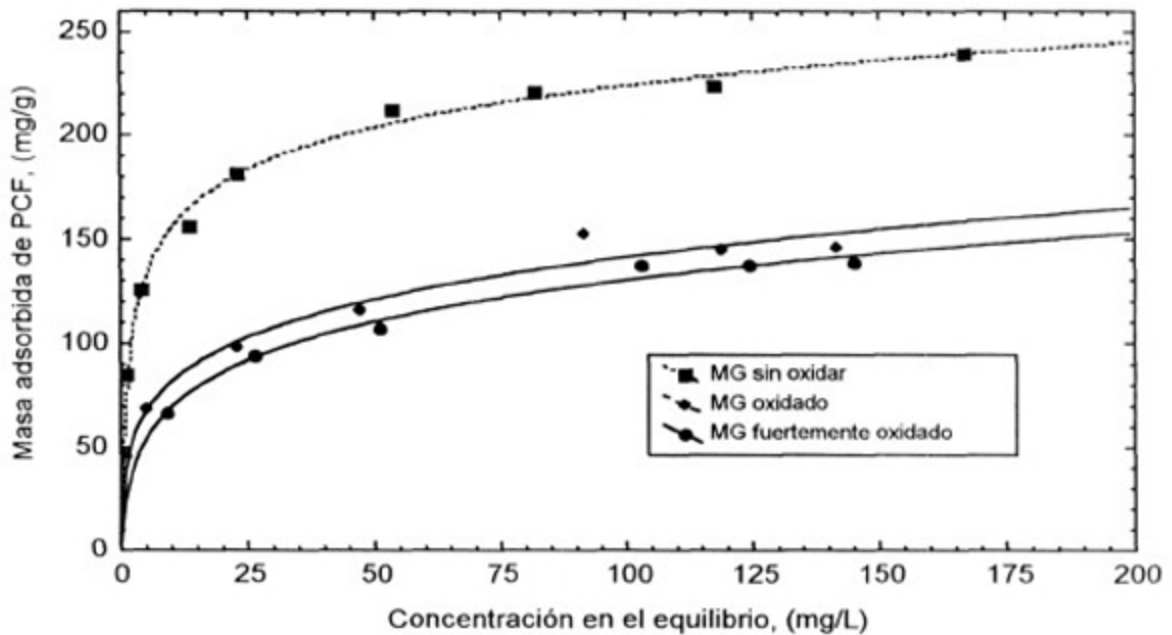


Figura 5.5. Isothermas de adsorción de pentaclorofenol sobre el carbón activado MG sin oxidar, oxidado y fuertemente oxidado. $T=25^{\circ}\text{C}$ y sin ajuste de pH. Las líneas representan la isoterma de adsorción de Prausnitz-Radke.

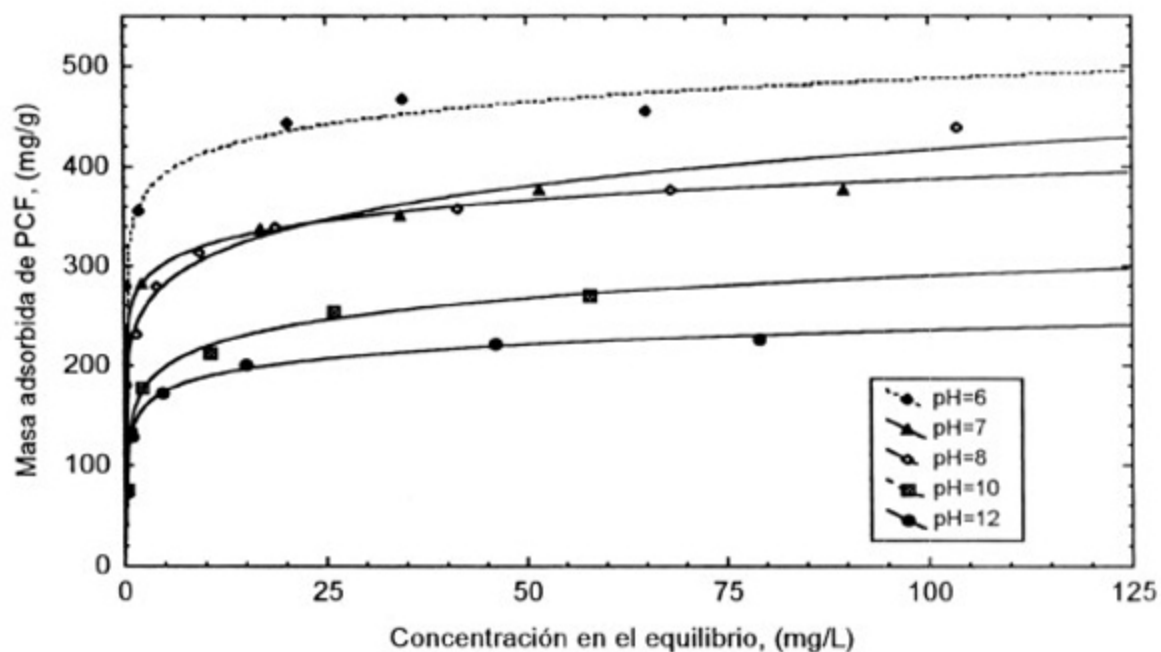


Figura 5.6. Isothermas de adsorción de pentaclorofenol sobre el carbón activado F-300 a varios valores de pH y $T=25^{\circ}\text{C}$. Las líneas representan la isoterma de adsorción de Prausnitz-Radke.

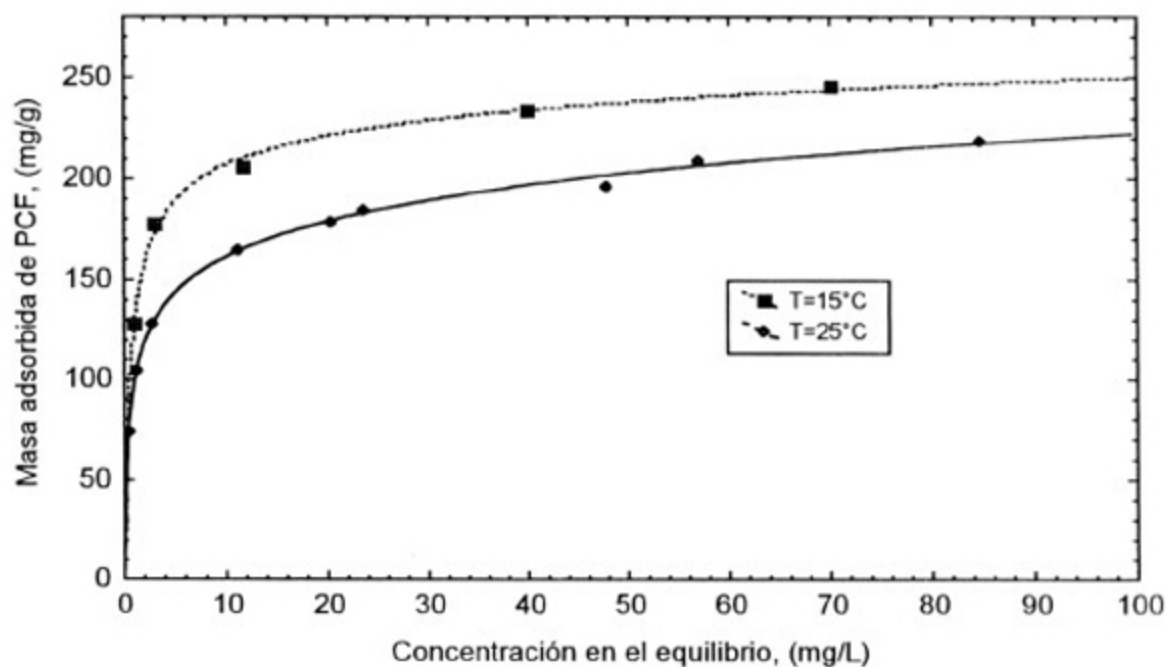


Figura 5.7. Isothermas de adsorción de pentaclorofenol sobre el carbón activado F-300 a diferentes temperaturas y $\text{pH}=12$. Las líneas representan la isoterma de adsorción de Prausnitz-Radke.

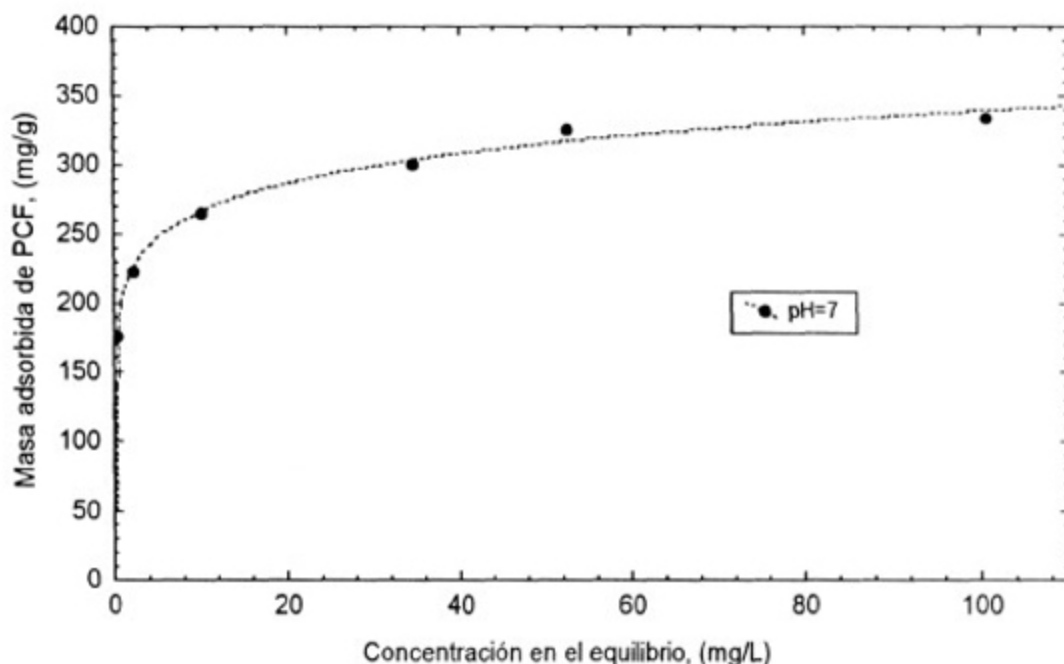


Figura 5.8. Isotermas de adsorción de pentaclorofenol sobre el carbón activado MG a pH=7. Las líneas representan la isoterma de adsorción de Prausnitz-Radke.

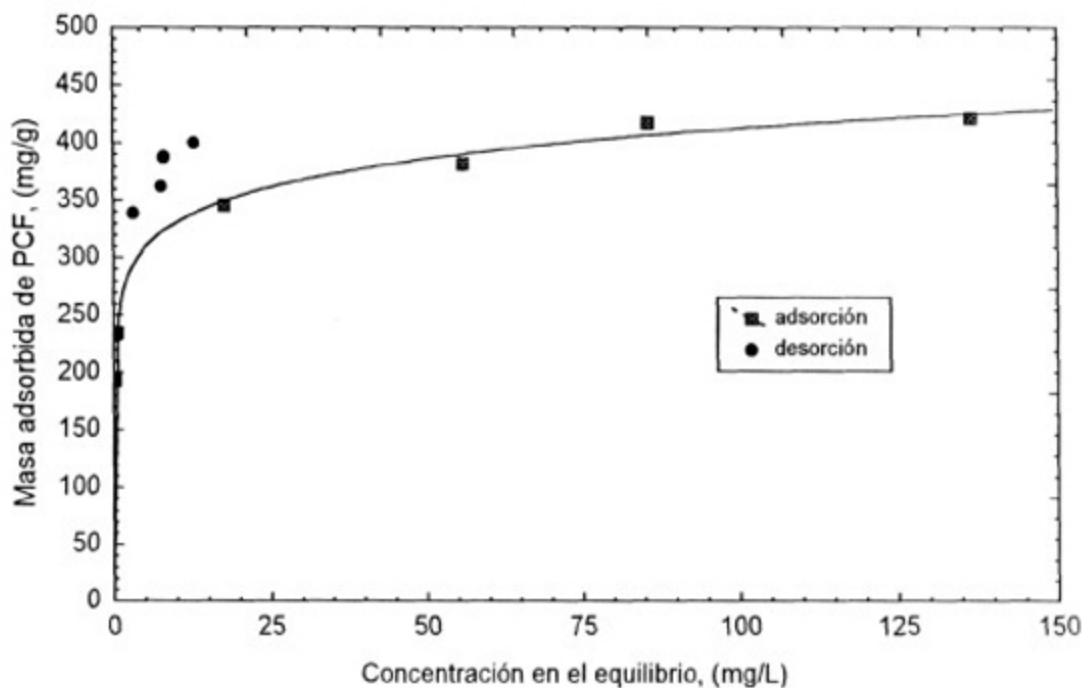


Figura 5.9. Isotermas de adsorción-desorción de pentaclorofenol sobre el carbón activado F-300 a pH=7. Las líneas representan la isoterma de adsorción de Prausnitz-Radke.

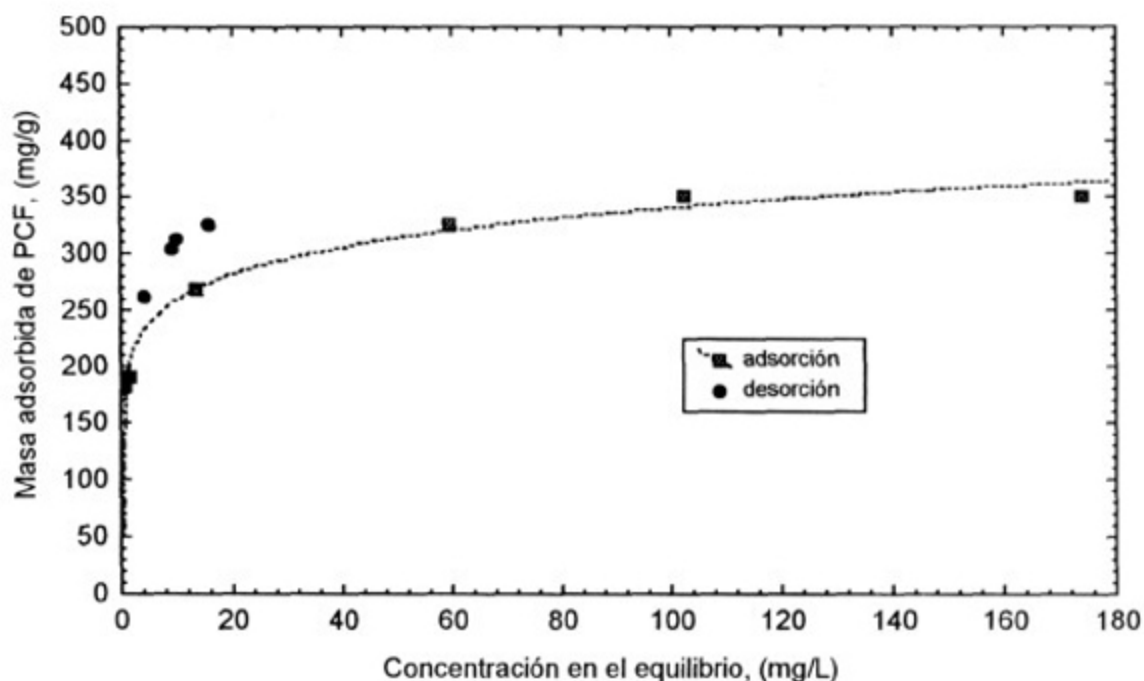


Figura 5.10. Isotermas de adsorción-desorción de pentaclorofenol sobre el carbón activado MG a pH=7. Las líneas representan la isoterma de adsorción de Prauznitz-Radke.

5.8. Determinación del punto de carga cero

Los datos experimentales necesarios para determinar el punto de carga cero (PCC) se obtuvieron por el procedimiento que se describió en la Sección 4.5. En las Tablas 5.9 y 5.10 se reportan los datos de pH de la solución y el correspondiente volumen del titulante que se agregó. En ambas tablas se muestran los datos para la solución con carbón y la solución sin carbón.

El PCC de los carbones activados F-300 y MG se puede determinar graficando el pH de la solución contra el volumen de la solución titulante para la solución sin carbón y la solución con carbón, y el punto de intersección de estas curvas corresponde al PCC. Este método gráfico se ilustra en las Figuras 5.11 y 5.12.

El PCC también se evaluó calculando la carga de la superficie por medio de la ecuación 4.3 y usando los datos de las Tablas 5.9 y 5.10. En este caso el PCC corresponde al pH de la solución, en el cual la carga de la superficie es igual a cero. Para usar la ecuación 4.3 se requiere de calcular el ΔV que es la diferencia entre el volumen del titulante para la solución con carbón y el volumen del titulante para la solución sin carbón a un mismo pH de la solución. Este

término se estimó ajustando los datos del volumen del titulante contra el pH de la solución por medio de la ecuación siguiente:

$$\text{pH} = \frac{A_1 - A_2}{\left\{ 1 + \exp \left[\frac{V_T - B}{dx} \right] \right\}} + C \quad (5.6)$$

Esta ecuación se le conoce como la función de Boltzman y es la que mejor ajusta los datos experimentales. Las constantes A_1 , A_2 , B , dx y C son parámetros de ajuste.

Tabla 5.9 Datos experimentales para la determinación del punto de carga cero del carbón activado F-300. Masa de carbón = 0.3000 g.

Solución sin carbón		Solución con carbón	
Volumen de HCl agregado (mL)	pH	Volumen de HCl agregado (mL)	pH
0.00	11.36	0.00	11.08
0.10	11.28	0.10	10.91
0.20	11.21	0.20	10.65
0.30	11.08	0.30	10.27
0.40	10.90	0.40	9.79
0.50	10.59	0.45	9.41
0.60	10.04	0.50	8.67
0.65	9.60	0.53	8.21
0.70	8.25	0.60	8.13
0.73	7.20	0.65	7.60
0.74	7.11	0.67	7.29
0.75	7.00	0.90	6.45
0.76	6.87	0.95	5.98
0.78	6.56	1.00	5.06
0.80	6.16	1.05	4.72
0.83	5.65	1.10	4.41
0.85	4.53	1.15	3.97
0.86	4.23	1.20	3.76
0.87	4.04	1.26	3.54
0.88	3.86	1.40	3.19
0.90	3.71	1.50	3.09
0.91	3.66	1.60	3.03
0.93	3.58	1.70	2.95
0.95	3.49	1.80	2.89

Tabla 5.9. (Continuación)

Solución sin carbón		Solución con carbón	
Volumen de HCl agregado (mL)	pH	Volumen de HCl agregado (mL)	pH
1.00	3.36	1.90	2.84
1.10	3.18	2.00	2.80
1.50	2.98	2.20	2.72
2.01	2.76	2.40	2.61
2.30	2.73	2.50	2.59
2.50	2.69		

Tabla 5.10. Datos experimentales para la determinación del punto de carga cero del carbón activado MG. Masa de carbón = 0.3000 g.

Solución sin carbón		Solución con carbón	
Volumen de HCl agregado (mL)	pH	Volumen de HCl agregado (mL)	pH
0.00	11.48	0.00	11.13
0.10	11.41	0.10	11.06
0.20	11.32	0.20	10.97
0.30	11.23	0.30	10.83
0.40	11.10	0.40	10.58
0.45	11.02	0.50	10.19
0.50	10.92	0.55	9.90
0.55	10.82	0.57	9.79
0.60	10.68	0.58	9.73
0.65	10.44	0.59	9.65
0.67	10.37	0.60	9.58
0.69	10.26	0.61	9.49
0.70	10.20	0.62	9.39
0.72	10.02	0.63	9.26
0.74	9.78	0.65	8.98
0.75	9.63	0.66	8.79
0.76	9.52	0.67	8.63
0.77	9.18	0.68	8.45
0.78	8.85	0.69	8.33
0.79	7.83	0.70	8.11
0.80	7.11	0.72	7.97

Tabla 5.10. (Continuación)

Solución sin carbón		Solución con carbón	
Volumen de HCl agregado (mL)	pH	Volumen de HCl agregado (mL)	pH
0.81	6.40	0.73	7.91
0.82	6.17	0.74	7.87
0.83	5.66	0.75	7.74
0.85	4.39	0.77	7.51
0.86	4.09	0.78	7.30
0.87	3.92	0.79	7.18
0.88	3.85	0.80	7.08
0.89	3.68	0.81	6.95
0.91	3.59	0.82	6.81
0.93	3.48	0.85	6.47
0.95	3.39	0.86	6.19
1.00	3.26	0.87	6.05
1.10	3.07	0.88	5.93
1.20	2.95	0.89	5.49
1.30	2.88	0.90	5.00
1.40	2.81	0.91	4.78
1.50	2.76	0.92	4.52
1.60	2.72	0.93	4.28
1.70	2.68	0.94	4.24
1.80	2.65	0.95	4.11
1.90	2.61	0.97	3.90
2.00	2.58	0.99	3.74
2.50	2.51	1.00	3.71
		1.02	3.62
		1.04	3.54
		1.10	3.38
		1.15	3.28
		1.20	3.21
		1.30	3.10
		1.40	3.00
		1.50	2.93
		1.60	2.88
		1.70	2.84
		1.80	2.80
		1.90	2.77
		2.00	2.73

Tabla 5.11. Ecuaciones que mejor ajustaron los datos experimentales de pH de la solución y volumen del titulante para la solución sin carbón y con carbón F-300 y MG.

Tipo de carbón	Ecuación de ajuste	
	Blanco	Muestra
F-300	$\text{pH} = \frac{11.06 - 2.87}{1 + \exp\left(\frac{\text{mL} - 0.77}{0.07}\right)} + 2.87$	$\text{pH} = \frac{11.11 - 2.81}{1 + \exp\left(\frac{\text{mL} - 0.70}{0.18}\right)} + 2.81$
MG	$\text{pH} = \frac{10.97 - 2.85}{1 + \exp\left(\frac{\text{mL} - 0.81}{0.036}\right)} + 2.85$	$\text{pH} = \frac{10.86 - 2.77}{1 + \exp\left(\frac{\text{mL} - 0.80}{0.12}\right)} + 2.77$

Estas ecuaciones se graficaron en las Figuras 5.11 y 5.12 junto con los datos experimentales. El cálculo de la carga de la superficie (Γ) se efectuó por medio del programa EES (Engineering Equation Solver) que resuelve ecuaciones simultáneas, a este programa se alimentan las ecuaciones que se reportan en la tabla 5.11 para cada carbón.

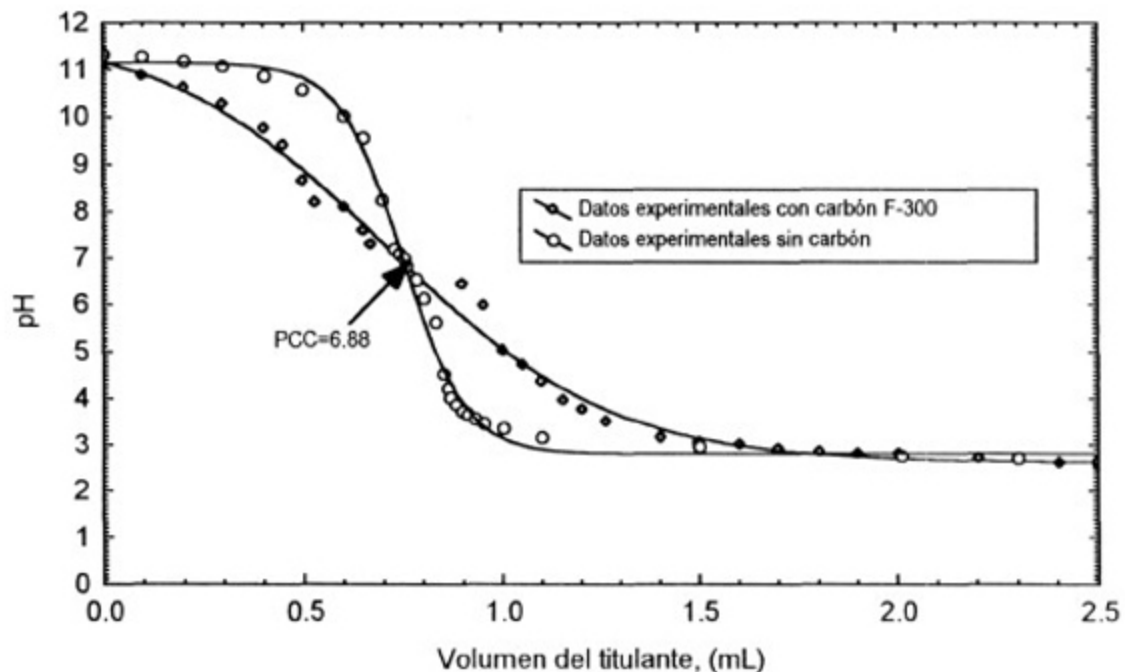


Figura 5.11. Determinación gráfica del PCC del carbón activado F-300.

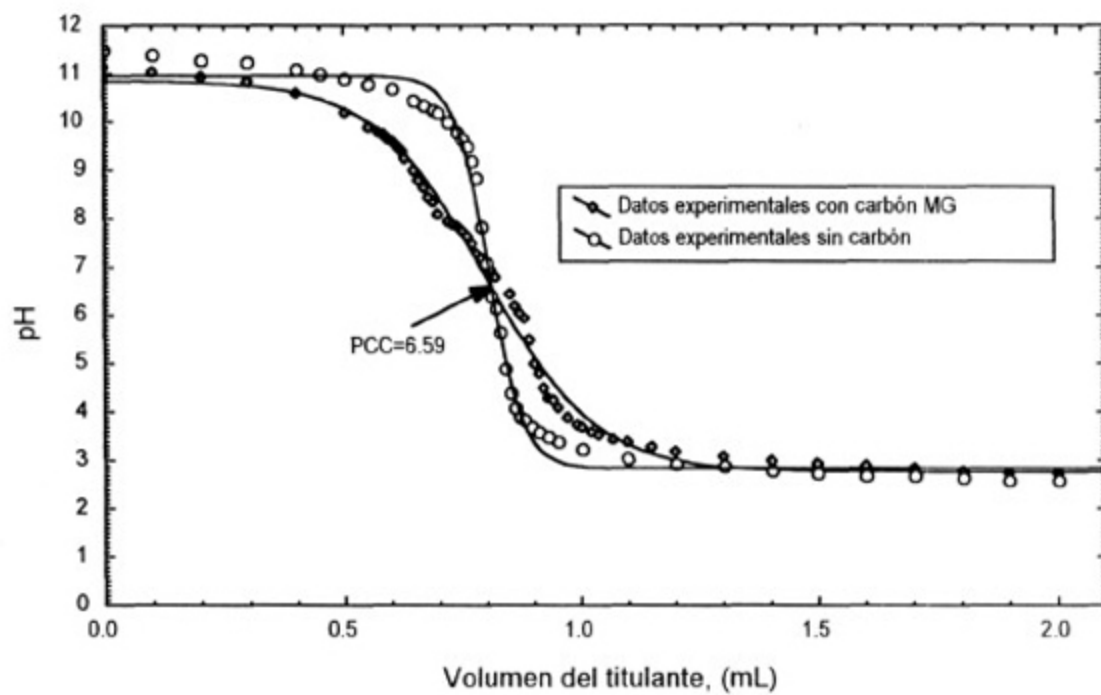


Figura 5.12. Determinación gráfica del PCC del carbón activado MG.

CAPITULO 6. DISCUSION DE RESULTADOS

6.1. Características de los carbones activados

En los experimentos de adsorción se usaron los seis carbones activados comerciales siguientes: F-300, MG, F-400, VG, C y CG-700. Los carbones F-300, MG y F-400 se fabrican a partir de carbón bituminoso, el VG de madera de pino, el C de madera (aserrín) y el CG-700 de concha de coco.

Los carbones activados se caracterizaron por el método de fisisorción de nitrógeno a bajas temperaturas (método BET) y de picnometría de helio (desplazamiento de helio). El área superficial, el volumen de poros y el diámetro promedio de los poros se determinó por el primer método y la densidad del sólido por el segundo método. Los resultados de esta caracterización se muestran en la Tabla 6.1 para los carbones activados sin oxidar, oxidados y fuertemente oxidados.

Tabla 6.1. Propiedades físicas de los carbones activados sin oxidar, oxidados y fuertemente oxidados.

Tipo de carbón	Área superficial (m ² /g)	Volumen de poros (cm ³ /g)	Diámetro promedio de los poros (nm)	Densidad (g/cm ³)
F-300	863	0.49	2.26	2.92
F-300 oxidado	882	0.50	2.27	2.90
F-300 fuertemente oxidado	923	0.53	2.29	2.90
MG	889	0.45	2.02	2.80
MG oxidado	917	0.57	2.50	2.68
MG fuertemente oxidado	938	0.59	2.52	2.71
F-400	987	0.59	2.38	3.14
C	768	0.40	2.07	1.93
VG	1115	0.78	2.81	1.79
CG-700	380	0.18	1.90	2.73

En la Tabla 6.1 se nota que las áreas superficiales de los carbones activados sin modificar varían de 380 a 1115 m²/g. El carbón activado CG-700 tiene la menor área superficial 380 m²/g y el carbón VG tiene la mayor área superficial 1115 m²/g. Estos valores indican que las propiedades del carbón activado dependen de la materia prima que se utilizó para prepararlo, así como del procedimiento de activación. Los datos muestran que el volumen de poros aumenta al incrementarse el área superficial. Esto era de esperarse, el área

superficial y el volumen de poros esta directamente relacionados entre sí porque el área superficial de un carbón granular se debe principalmente a los poros que tiene. El intervalo de valores de las áreas superficiales, volúmenes de poros, diámetros promedio de los poros y densidades de los carbones activados reportados en este trabajo son muy similares a los valores reportados en la literatura (Cheremisinoff, 1993), a excepción del área superficial y el volumen de poro del carbón CG-700 que son relativamente bajos.

En la Tabla 6.2 se reportan las concentraciones de los sitios activos de los carbones F-300, F-400, C, MG, VG, y CG-700 sin oxidar, que se determinaron usando el método de titulación ácido-base (Sección 4.4). Como se observa en esta tabla, el carbón CG-700 tiene mayor concentración de sitios básicos que ácidos, esto indica que se trata de un carbón de tipo básico. Lo opuesto ocurre con los carbones C y VG porque son carbones de tipo ácido. Los carbones F-300 y MG tienen concentraciones de sitios ácidos y básicos muy similares y el carbón F-400 tiene ligeramente menor cantidad de sitios básicos que ácidos. Con base a lo anterior, el orden decreciente de la concentración de sitios ácidos es el siguiente: $C > VG > F-400 > F-300 = MG > CG-700$ y de la concentración de sitios básicos es $MG > CG-700 > F-300 > F-400 > VG > C$. En este trabajo la concentración de sitios ácidos y básicos de los carbones activados sin oxidar varían de 0.09 a 1.58 meq/g y de 0.01 a 0.36 meq/g, respectivamente. Las concentraciones de sitios ácidos y básicos se encuentran dentro del intervalo de valores reportados en la literatura para carbones activados (Bohem, 1994).

Tabla 6.2. Concentraciones de sitios activos de los carbones activados

Tipo de carbón	Sitios	
	Ácidos meq/g	Básicos meq/g
F-300	0.32	0.28
F-300 oxidado	0.93	0.13
F-300 fuertemente oxidado	0.82	0.13
MG	0.32	0.36
MG oxidado	0.99	0.12
MG fuertemente oxidado	1.16	0.09
F-400	0.37	0.27
VG	1.36	0.06
C	1.58	0.01
CG-700	0.09	0.34

6.2. Oxidación de los carbones F-300 y MG

En este estudio los carbones activados F-300 y MG se modificaron por medio de oxidación con ácido nítrico para investigar como afecta a la capacidad de adsorción. Se seleccionaron estos dos carbones porque son los que presentaron la mayor capacidad de adsorción por el pentaclorofenol. La oxidación de los carbones se realizó a dos niveles que se denominaron oxidado y fuertemente oxidado. La designación de estos niveles depende de la duración de la oxidación, el nivel fuertemente oxidado dura el doble de tiempo que el nivel oxidado.

En la Tabla 6.1 se reportan las propiedades físicas de los carbones oxidados. Los resultados revelan que la oxidación causa un aumento leve en el área superficial de los dos carbones y que el área superficial se incrementa muy ligeramente con el nivel de oxidación; en otras palabras, el área superficial del carbón fuertemente oxidado es levemente mayor que la del oxidado. El volumen de los poros también aumenta muy ligeramente con la oxidación y el nivel de ésta, esta tendencia se debe a que el área superficial depende del volumen del poro y viceversa. El aumento del área superficial con la oxidación se puede atribuir a que parte de la estructura sólida del carbón se consumió durante la oxidación por la acción del ácido nítrico ocasionando la formación de más poros que incrementaron el área superficial y el volumen de los poros. Otra posible alternativa es que parte de la pared de los poros que ya existían, se consumió aumentando el tamaño de los poros, esto provocaría un aumento en el volumen de poros pero una reducción del área superficial.

Las concentraciones de los sitios activos de los carbones F-300 y MG oxidados y fuertemente oxidados están reportadas en la Tabla 6.2. La oxidación de los carbones F-300 y MG aumentó la concentración de los sitios ácidos y disminuyó la de los sitios básicos. Bernal Jácome (1999) oxidó los carbones C y F-400 con ácido nítrico y reportó la misma tendencia. Excepto para el carbón F-300, esta tendencia se mantuvo con el nivel de oxidación. Las concentraciones de los sitios ácidos aumentaron 2.6 a 2.9 veces para el carbón F-300 y alrededor de 3 a 3.6 veces para el MG. Por otro lado, las concentraciones de los sitios básicos disminuyeron alrededor de 2.2 veces para el F-300 y de cerca de 3 a 4 veces para el MG. La explicación de esta tendencia se basa en que la oxidación de los carbones con ácido nítrico induce la formación de grupos funcionales conteniendo oxígeno sobre la superficie del carbón oxidado. Estos grupos son ácidos y su presencia afecta de manera decisiva a la capacidad de adsorción del carbón (Slawomir, 1987).

En este trabajo las concentraciones de sitios ácidos y básicos de los carbones oxidados variaron de 0.82 a 1.16 meq/g y de 0.09 a 0.13 meq/g, respectivamente. Estos valores están dentro del intervalo de valores reportados en la literatura para carbones oxidados con ácido nítrico (Bandosz, 1992).

6.3. Carga superficial de los carbones activados

Al agregar carbón activado a una solución acuosa, se genera una carga en la superficie del carbón como resultado de las interacciones entre los iones presentes en la solución y la superficie. La carga es función del tipo de iones presentes, las características de la superficie, naturaleza del sólido y del pH de la solución. La distribución de la carga superficial con respecto al pH de la solución es una información importante porque permite explicar la adsorción de iones y ayudar a esclarecer el mecanismo de adsorción.

La carga de la superficie del carbón se determinó utilizando el método de titulación ácido-base (Sección 4.5) y se muestra en la Figura 6.1 para el carbón F-300 y Figura 6.2 para el MG. En estas figuras se señala el punto de carga cero PCC que es el pH al cual la carga neta de la superficie es cero. Los PCC de los carbones F-300 y MG son 6.9 y 6.6, respectivamente. A este pH las concentraciones de H^+ y OH^- adsorbido sobre la superficie son iguales y por lo tanto, la carga de la superficie es neutra (Bockris y Otagawa, 1984). Analizando las Figuras 6.1 y 6.2 se observa que la carga superficial del carbón es positiva para pH menores del PCC, neutra para $pH=PCC$ y negativa para pH mayores del PCC. Este comportamiento es típico de los carbones activados y ha sido reportado en varios trabajos (Minguan, 1994; Ruiz Salazar, 2000).

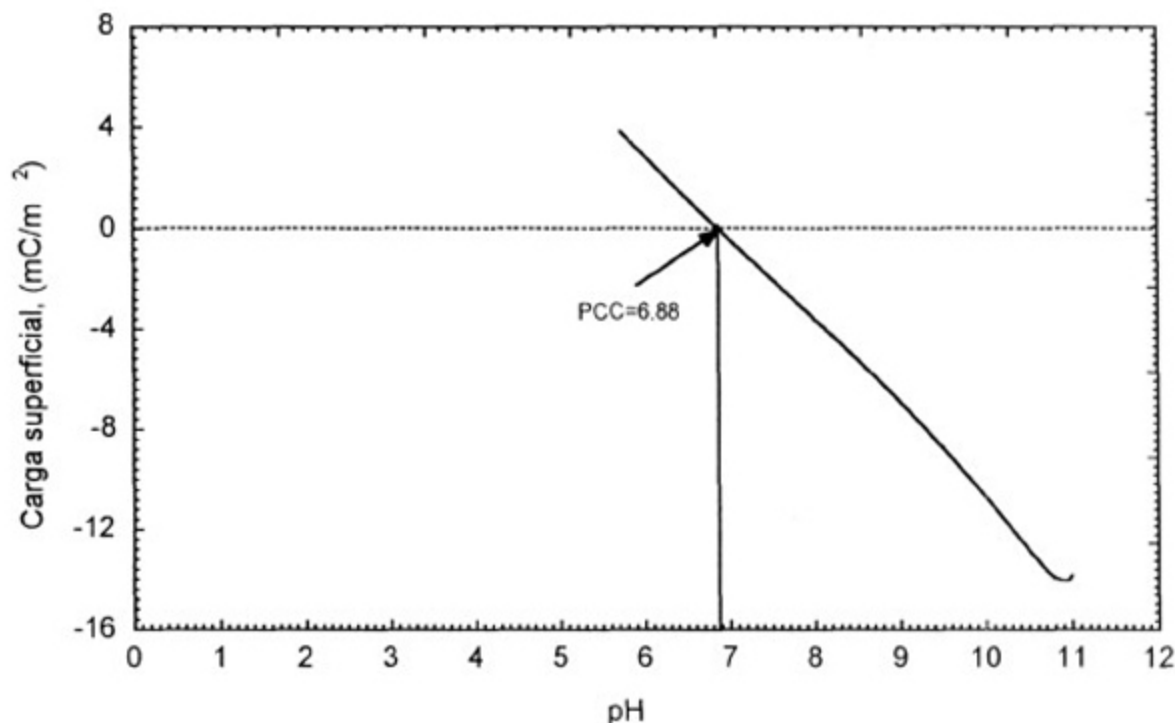


Figura 6.1 Carga de la superficie del carbón activado F-300.

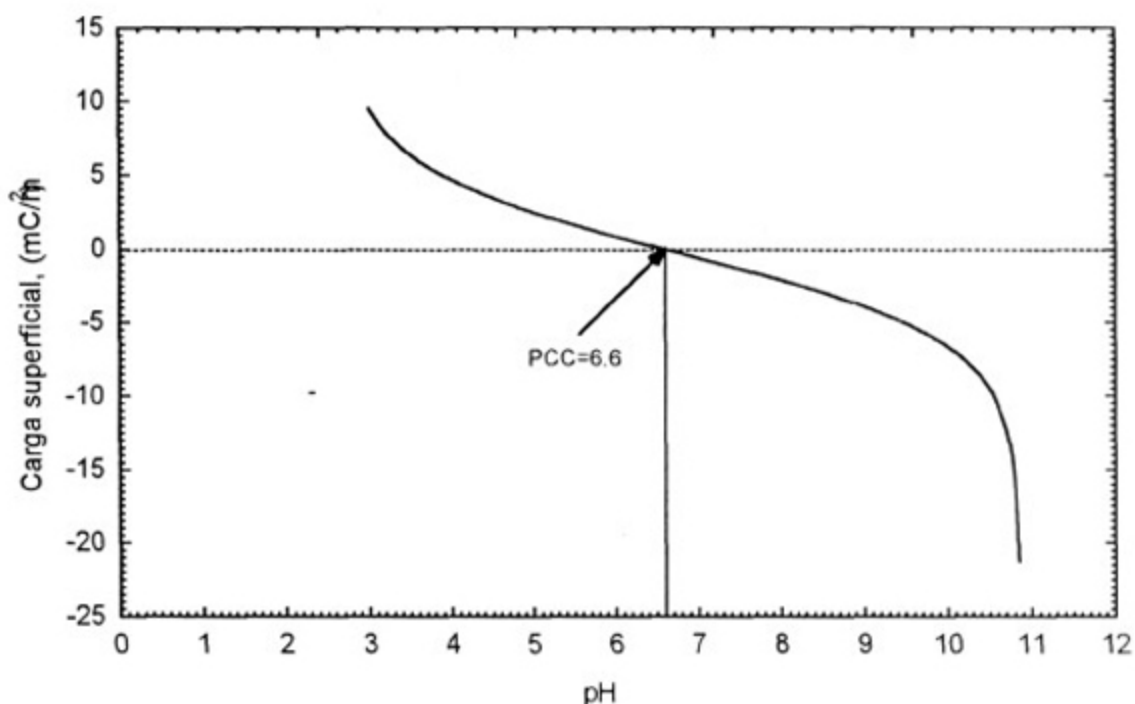


Figura 6.2 Carga de la superficie del carbón activado MG.

6.4. Adsorción de pentaclorofenol sobre carbón activado

6.4.1. Isotherma de adsorción de pentaclorofenol

Los datos experimentales de las isothermas de adsorción de pentaclorofenol sobre los carbones activados F-300, MG, F-400, VG, C y CG-700 sin ajuste de pH y a $T=25^{\circ}\text{C}$, se muestran en la Tabla 5.1; sobre los carbones F-300 y MG oxidados y fuertemente oxidados en la Tabla 5.2; sobre el carbón activado F-300 a diferentes pH y temperaturas en las Tablas 5.3 y 5.5, respectivamente; y sobre el carbón activado MG a $\text{pH}=7$ y $T=25^{\circ}\text{C}$ en la Tabla 5.4.

Los datos experimentales se ajustaron usando los modelos de las isothermas de adsorción de Langmuir, Freundlich y Prausnitz-Radke y los valores de las constantes de estas isothermas, se estimaron usando un método de mínimos cuadrados. Los valores de las constantes, así como los porcentos de desviación promedio, se exhiben en la Tabla 5.8. Los porcentos de desviación variaron de 3.11 a 14.1% para la isoterma de Langmuir, de 1.34 a 12.7% para la isoterma de Freundlich y de 0.93 a 9.8% para la isoterma de Prausnitz-Radke. La isoterma de Prausnitz-Radke ajusta mejor los datos que las otras dos isothermas debido a que esta isoterma tiene tres constantes o parámetros de ajuste mientras que las otras solamente dos. Además, las isothermas de Langmuir y Freundlich son casos especiales de la isoterma de Prausnitz-Radke.

Los datos experimentales no se interpretaron bien por la isoterma de Langmuir porque a altas concentraciones de pentaclorofenol, los datos no tienen el comportamiento asintótico que exhibe la isoterma de Langmuir. A altas concentraciones, la masa de pentaclorofenol adsorbido tiende a crecer levemente con el aumento en la concentración (ver Figuras 5.3 a 5.8). Este comportamiento se puede analizar mejor linealizando la isoterma de Langmuir en la forma siguiente:

$$\frac{q}{C} = -Kq + q_m K \quad (6.1)$$

Los datos experimentales q vs. C también se grafican como q/C vs. q . Esta forma de representar los datos y la isoterma se conoce como la gráfica de Scatchard (Guiochon, 1994), en la Figura 6.3 se muestra la gráfica de Scatchard para la adsorción de pentaclorofenol sobre el carbón F-300 a $T=25^\circ\text{C}$ y sin ajuste de pH.

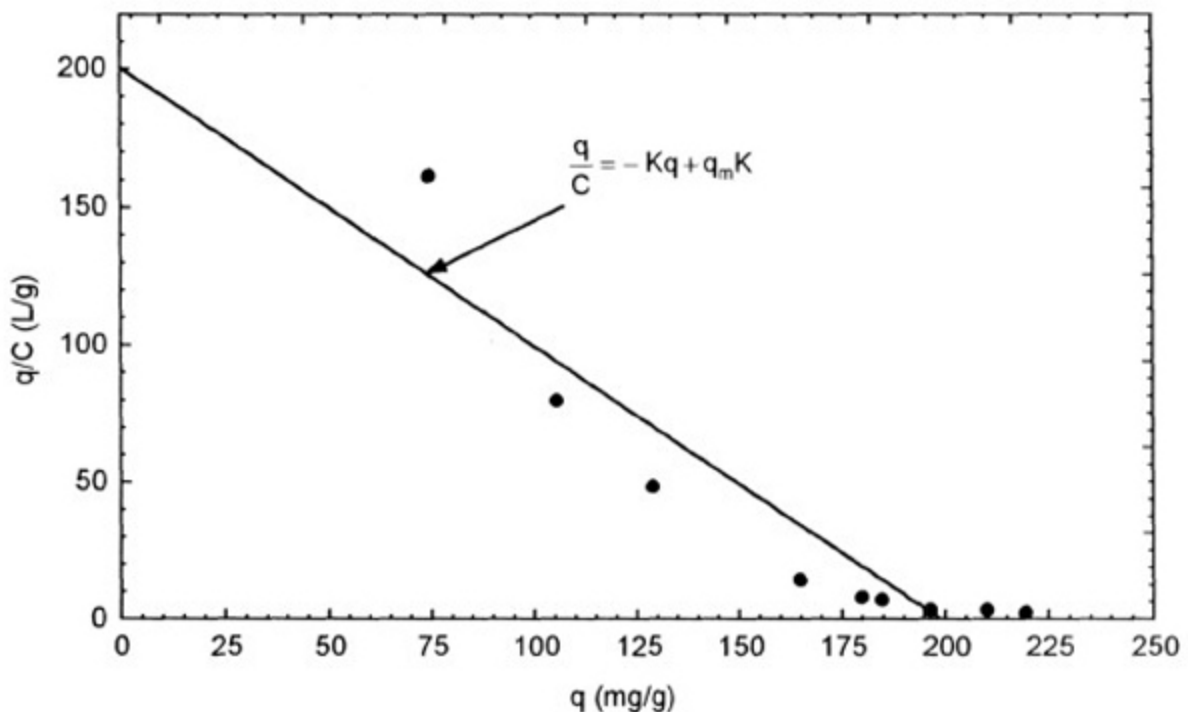


Figura 6.3 Linealización de la isoterma de adsorción de pentaclorofenol sobre carbón activado F-300. $T=25^\circ\text{C}$ y sin ajuste de pH.

Los datos experimentales en la gráfica de Scatchard no tienen un comportamiento lineal sino más bien es curvilíneo. Por lo general, si los datos experimentales exhiben una tendencia curvilínea en la gráfica de Scatchard, se considera que la isoterma de Langmuir no representa los datos experimentales. Bajo estas condiciones se supone que la adsorción está ocurriendo en dos tipos

de sitios activos y la isoterma de Langmuir de doble sitio se representa matemáticamente como (Guiochon, 1994):

$$q = \frac{q_{m1}K_1C}{1+K_1C} + \frac{q_{m2}K_2C}{1+K_2C} \quad (6.2)$$

La primera parte del lado derecho representa la cantidad de pentaclorofenol que se adsorbe en un tipo de sitio y la segunda en el otro tipo.

Los valores de los cuatro parámetros de la isoterma de Langmuir de doble sitio se calcularon por un método de mínimos cuadrados. En la Figura 6.4 se exhiben los datos experimentales y la isoterma de Langmuir de doble sitio, esta última se graficó usando los mejores valores de los parámetros. Como se nota en la Figura 6.4, la isoterma de Langmuir de doble sitio interpreta bastante bien los datos experimentales y para este caso se obtuvo un % Desv. = 1.6. Sin embargo, para este mismo caso con la isoterma Prausnitz-Radke se obtuvo un % Desv. = 1.02. Por lo tanto, la isoterma de Prausnitz-Radke que tiene 3 parámetros de ajuste interpreta mejor los datos que la de Langmuir de doble sitio, aunque esta última tiene 4 parámetros (Ec. 6.2).

En la Figura 6.4 también se graficó la isoterma de adsorción del pentaclorofenol que corresponde a cada tipo de sitio. Los sitios activos se denominaron de acuerdo a la clasificación arbitraria siguiente:

$$\text{Sitio tipo I:} \quad q = \frac{309.2 * C}{1 + 2.20 * C} \quad (6.3)$$

$$\text{Sitio tipo II:} \quad q = \frac{3.286 * C}{(1 + 0.031 * C)} \quad (6.4)$$

La comparación de estas dos isotermas permite suponer que para concentraciones de pentaclorofenol en el equilibrio menores de 3 mg/L, la adsorción ocurre principalmente en los sitios tipo I. A concentraciones mayores de 10 mg/L, los sitios tipo I están completamente saturados con pentaclorofenol y si la masa de pentaclorofenol adsorbido aumenta con la concentración de pentaclorofenol se debe a que éste se adsorbe en los sitios tipo II que todavía están vacantes.

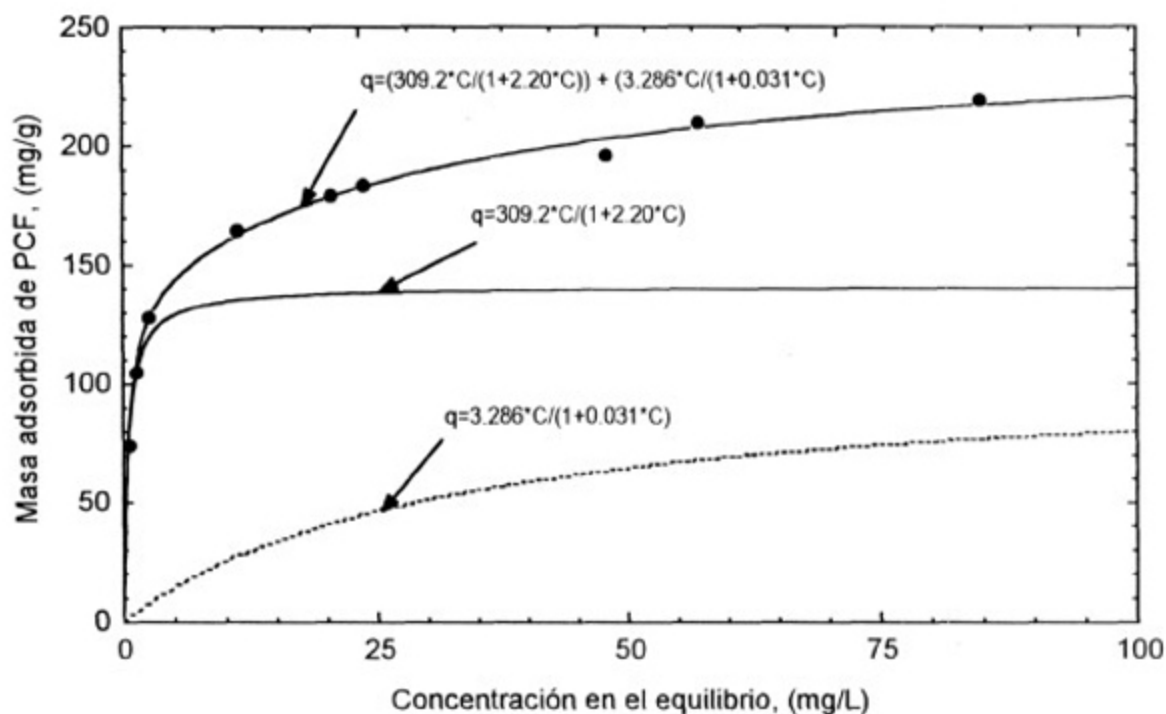


Figura 6.4. Isotherma de adsorción de pentaclorofenol sobre carbón activado F-300. T=25°C y sin ajuste de pH. Las líneas representan la isoterma de adsorción de Langmuir de doble sitio.

Los resultados anteriores revelan que en todos los casos investigados en este trabajo, excepto para el carbón MG oxidado, la isoterma de Prausnitz-Radke es la que ajusta mejor los datos, considerando que la isoterma que mejor interpreta los datos es aquella que tiene el menor porcentaje de desviación promedio. Con base a esto se decidió seleccionar a la isoterma de Prausnitz-Radke para interpretar las isotermas de adsorción de pentaclorofenol sobre carbón activado. En las Figuras 5.3 a 5.8 se muestran los datos experimentales y las isotermas de Prausnitz-Radke, estas últimas se graficaron usando los mejores valores de las constantes de la isoterma de Prausnitz-Radke (Tabla 5.8).

Es importante mencionar que cada uno de los cuatro modelos de isotermas se fundamentan en suposiciones teóricas. El hecho de que un determinado modelo de isoterma interprete mejor los datos no significa que la adsorción ocurre de acuerdo a esos fundamentos teóricos. Es decir, el ajuste de datos es meramente un método matemático-estadístico y no una corroboración de que la adsorción ocurre de acuerdo a los fundamentos que sustentan el modelo que mejor ajusta los datos.

6.4.2. Efecto del tipo de carbón sobre la adsorción de pentaclorofenol

En esta sección se comparan las capacidades de adsorción de los carbones F-300, MG, F-400, VG, C y CG-700 para remover pentaclorofenol de solución acuosa a $T=25^{\circ}\text{C}$ y sin ajuste del pH de la solución, las isothermas de adsorción del pentaclorofenol sobre estos carbones se exhiben en la Figura 6.3. Observando estas isothermas se nota que el pentaclorofenol se adsorbe considerablemente sobre los carbones F-300, MG y F-400 pero levemente sobre los carbones VG, C y CG-700. Los primeros son fabricados a partir de carbón bituminoso y los segundos de madera y concha de coco. Esto revela que la capacidad de adsorción del carbón activado depende significativamente de la materia prima y el proceso de activación que se usó para prepararlo. En todo el intervalo de concentraciones de pentaclorofenol en el equilibrio, las isothermas de adsorción de pentaclorofenol sobre los carbones MG y F-300 son muy similares. Esto significa que poseen casi la misma capacidad de adsorción por el pentaclorofenol. A concentraciones de pentaclorofenol en el equilibrio menores de 5 mg/L, las capacidades de adsorción de los carbones MG, F-300 y F-400 son muy similares. En general, el carbón activado fabricado a partir de carbón bituminoso adsorbe mucho más pentaclorofenol de solución acuosa que los carbones fabricados de madera y de concha de coco.

La comparación de las capacidades se puede realizar calculando la máxima cantidad de pentaclorofenol que se adsorbe sobre cada tipo de carbón, esta cantidad corresponde a q_m de la isoterma de Langmuir (Ec. 1.3) y sus valores de q_m están reportados en la Tabla 5.8. Estimando la relación o cociente entre q_m del carbón MG y q_m de los demás carbones se obtiene que la capacidad de adsorción del carbón MG es aproximadamente 1.1 veces mayor que la del carbón activado F-300, 1.4 veces mayor que la del F-400, 2.4 veces mayor que la del VG, 4.6 veces mayor que la del C y 8.3 veces mayor que la del CG-700. Con base a lo anterior, el orden decreciente de la capacidad de los carbones activados es $\text{MG} \approx \text{F-300} > \text{F-400} > \text{VG} > \text{C} > \text{CG-700}$. Excepto por el carbón CG-700, la capacidad de adsorción decrece en el mismo orden en que desciende la concentración de sitios básicos (Ver Tabla 6.2) sugiriendo que la magnitud de la adsorción esta relacionada a la concentración de los sitios básicos.

Los valores de las áreas superficiales de los carbones activados se reportan en la Tabla 6.1 y decrecen en el orden siguiente: $\text{VG} > \text{F-400} > \text{MG} > \text{F-300} > \text{C} > \text{CG-700}$ pero las capacidades de adsorción no decrecen en el mismo orden. En otras palabras, el carbón VG que posee la mayor área superficial no tiene la mayor capacidad de adsorción. Esto se puede explicar considerando que la adsorción de pentaclorofenol es parcialmente específica y por eso no depende exclusivamente del área superficial.

En base al resultado anterior se consideró que la materia prima del carbón activado afecta considerablemente la capacidad de adsorción por pentaclorofenol

y que el carbón activado de origen bituminoso adsorbe mucho más que los de madera y de concha de coco.

6.4.3. Efecto de la oxidación del carbón en la isoterma de adsorción

Las isotermas de adsorción del pentaclorofenol sobre los carbones F-300 y MG sin oxidar, oxidado y fuertemente oxidado se exhiben en las Figuras 5.4 y 5.5 respectivamente. En estas figuras se observa que la capacidad de adsorción de ambos carbones disminuye con la oxidación y también con el nivel de oxidación.

La máxima capacidad de adsorción de un carbón se puede considerar como la máxima masa de pentaclorofenol adsorbido, q_m . Comparando las máximas capacidades de adsorción, q_m (ver Tabla 5.8) de los carbones sin oxidar con las de los carbones oxidados, la máxima capacidad se redujo 17.7% para el carbón F-300 y 31% para el MG. La máxima capacidad disminuyó muy levemente cuando el carbón oxidado se oxidó todavía más, este carbón se denominó fuertemente oxidado. Por ejemplo, la máxima capacidad del carbón MG oxidado decreció 2.5% cuando se convirtió a MG fuertemente oxidado.

Como se menciona en la sección 6.2, la oxidación del carbón incrementó la concentración de los sitios ácidos pero disminuyó la de los básicos. Basándose en esto, la disminución en la capacidad de adsorción por la oxidación se puede explicar suponiendo que el pentaclorofenol se adsorbe principalmente en los sitios básicos. En la sección 6.4.2 se afirmó que la capacidad de adsorción del carbón activado por el pentaclorofenol es función de la concentración de sitios básicos, esto corrobora todavía más la suposición anterior.

6.4.4. Efecto del pH en la isoterma de adsorción de pentaclorofenol

Este efecto se investigó determinando la isoterma de adsorción del pentaclorofenol sobre el carbón activado F-300 a pH de 6, 7, 8, 10 y 12, los resultados se graficaron en la Figura 5.6. A pH menores de 6 no se efectuaron experimentos de adsorción porque se formó un precipitado de color blanco. En esta figura se nota que el pH afecta significativamente la adsorción del pentaclorofenol sobre el carbón activado F-300 y que la capacidad de adsorción del carbón F-300 disminuye incrementando el pH. Además, los resultados revelan que a pH=6 ocurre la máxima adsorción y que la capacidad de adsorción disminuyó 51% incrementando el pH de 6 a 12.

Es importante mencionar que durante la adsorción de pentaclorofenol, el pH de la solución varió y para mantenerlo constante fue necesario adicionar solución de ácido clorhídrico 0.01N o NaOH 0.01 N. En los experimentos de pH 6 y 7, el pH siempre aumentó durante la adsorción pero siempre disminuyó ligeramente para pH de 10 y 12. La explicación es que en medios ácidos el ión H_3O^+ se adsorbe sobre el carbón ocasionando un aumento del pH y en medio básico el ión OH^- se

adsorbe provocando una disminución del pH. Este comportamiento se debe a que el carbón activado es anfotérico porque tiene sitios ácidos y básicos. Por lo tanto, el carbón activado se comporta como base en medio ácido y viceversa.

En la Figura 1.1 se muestra el diagrama de especiación del pentaclorofenol y se nota que dependiendo del pH, puede existir en forma disociada como pentaclorofenolato, sin disociar como pentaclorofenol, o bien como las dos especies. A pH menores de 3, el 98% (molar) del pentaclorofenol está sin disociar y el resto está disociado; a pH de 6, el 95.2% existe en forma disociada; y a pH mayores de 7, más del 99.5% se encuentra en forma disociada. En virtud de que la adsorción del pentaclorofenol se determinó a pH entre 6 y 12, entonces se puede asegurar que el pentaclorofenol se está adsorbiendo como pentaclorofenolato sobre el carbón F-300.

6.4.5. Efecto de la temperatura en la isoterma de adsorción de pentaclorofenol

La isoterma de adsorción representa el equilibrio entre el pentaclorofenol adsorbido y el pentaclorofenol en solución y por esta razón es dependiente de la temperatura. La isoterma de adsorción del pentaclorofenol se determinó a las temperaturas de 15 y 25 °C, manteniendo el pH de la solución constante en 12. En la Figura 5.7 se muestran las isotermas de adsorción del pentaclorofenol sobre el carbón F-300 y se observa que la capacidad de adsorción disminuye al incrementarse la temperatura de 15 a 25°C. Comparando las máximas masas de pentaclorofenol adsorbido, q_m , reportados en la Tabla 5.8, la capacidad de adsorción disminuye 1.19 veces en promedio cuando la temperatura se incrementa de 15 a 25°C. El comportamiento anterior se puede atribuir a que al aumentar la temperatura las moléculas en solución poseen más energía, requiriendo más energía para adsorberse. Además, la energía vibracional de las moléculas adsorbidas crece elevando la temperatura y entonces más moléculas adsorbidas se pueden desorber (Cooney, 1998). Por lo anterior, a mayor temperatura se adsorben menor número de moléculas.

6.4.6. Reversibilidad de la adsorción de pentaclorofenol sobre carbón activado

Los datos experimentales de desorción se obtuvieron adsorbiendo primero PCF sobre carbón activado y luego se desorbió invirtiendo el gradiente de concentración al contactar el carbón saturado con una solución que no contenía pentaclorofenol. En las Figuras 6.5 y 6.6 se exhiben los datos de desorción del PCF para los carbones F-300 y MG, respectivamente, así mismo se graficaron los datos de adsorción y sus respectivas isotermas.

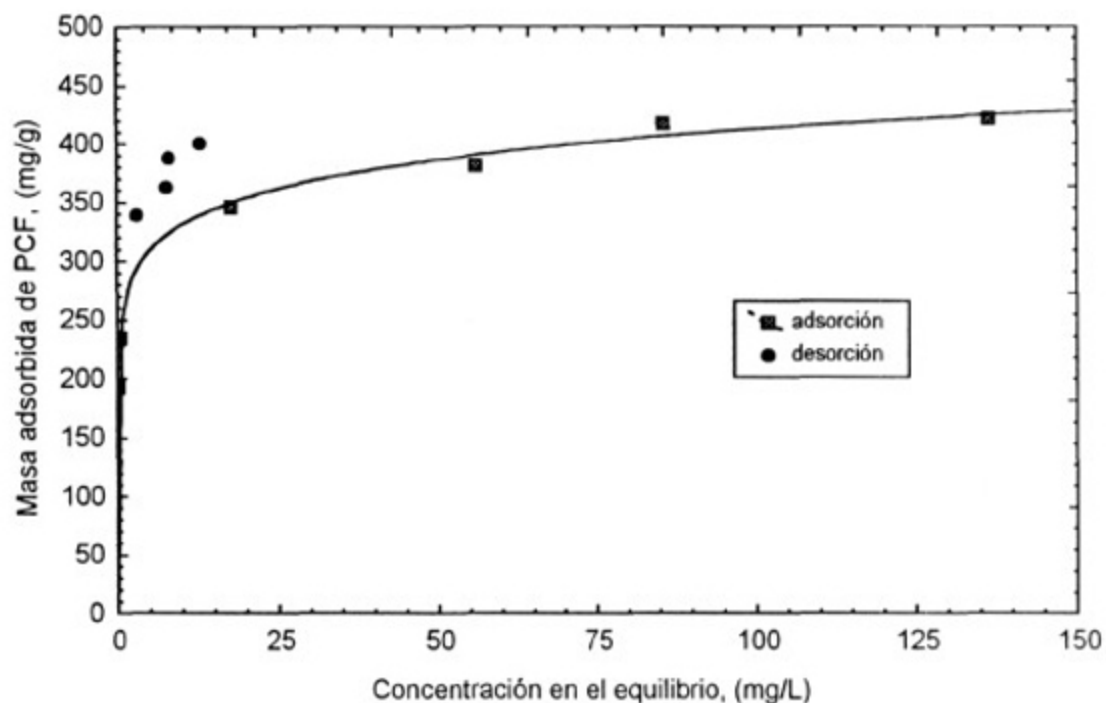


Figura 6.5. Isothermas de adsorción-desorción de pentaclorofenol sobre el carbón activado F-300 a pH=7 y T=25°C. La línea representa la isoterma de Prausnitz-Radke.

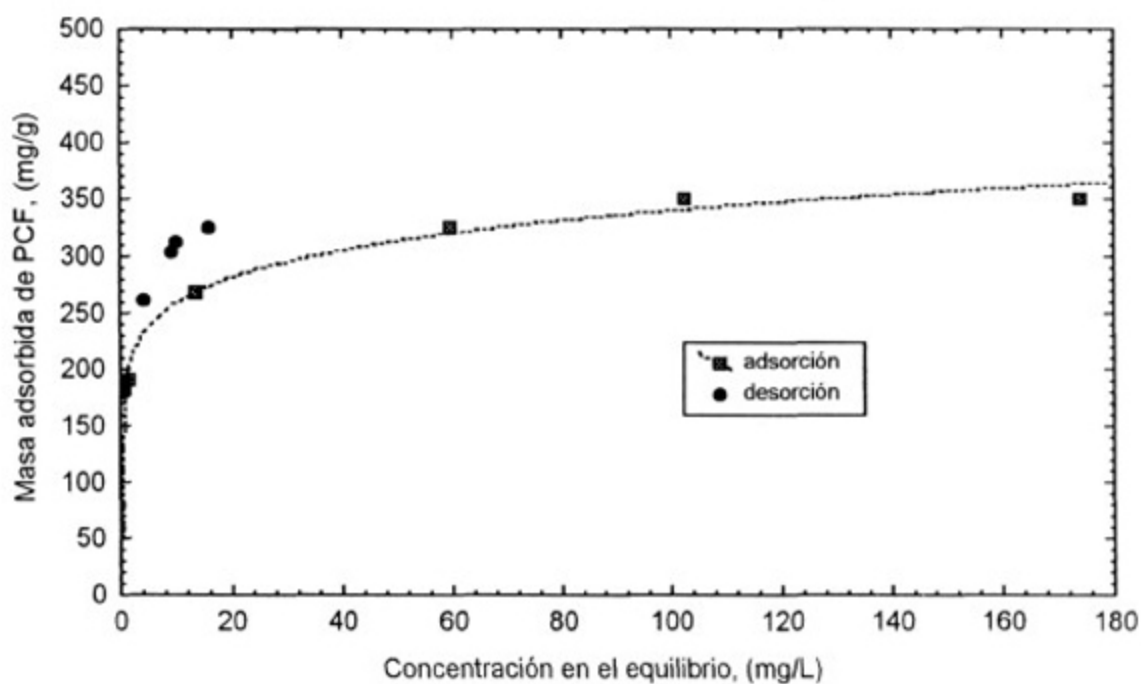


Figura 6.6. Isothermas de adsorción-desorción de pentaclorofenol sobre el carbón activado MG a pH=7 y T=25°C. La línea representa la isoterma de Prausnitz-Radke.

En la desorción el PCF se desorbe y se transfiere a la solución hasta que se alcanza un nuevo equilibrio. La adsorción se considera reversible si el nuevo equilibrio esta en la isoterma de adsorción, sino es irreversible. Si no es reversible entonces el nuevo equilibrio se encuentra por encima de la isoterma de adsorción. En las Figuras 6.5 y 6.6 se observa que los datos de desorción del PCF para los carbones F-300 y MG se encuentran por encima de la isoterma de adsorción, lo que indica que la adsorción de PCF es irreversible.

La reversibilidad de la adsorción se puede evaluar estimando el porcentaje de desorción que se define como:

$$\% \text{Desorción} = \left[\frac{q_0 - q_{\text{exp}}}{q_0 - q_T} \right] * 100\% \quad (6.5)$$

Donde:

- q_0 = Masa de pentaclorofenol adsorbida en el carbón al inicio, mg/g.
- q_{exp} = Masa experimental de pentaclorofenol adsorbida en el carbón después de la desorción, mg/g.
- q_T = Masa teórica de pentaclorofenol adsorbida en el carbón después de la desorción, mg/g.

El numerador es la masa de PCF que se desorbio realmente y el denominador es la masa de PCF que se desorbería si la adsorción fuera reversible. Este ultimo termino se evalúa realizando un balance de masa en la desorción y empleando la isoterma de adsorción.

Los porcentajes de desorción para el carbón F-300 varían de 34.4 a 51.3% y para el carbón MG de 46.4 a 56.9%. Los valores de los porcentajes de desorción ponen de manifiesto que la adsorción es irreversible y que gran parte del pentaclorofenol adsorbido no se desorbió. Esto se puede explicar considerando que el pentaclorofenol se quimisorbe sobre ambos carbones, formando un enlace químico muy fuerte con los complejos superficiales del carbón.

6.4.7. Mecanismo de adsorción de pentaclorofenol

El objetivo de esta sección es proponer un mecanismo que permita interpretar la adsorción de PCF sobre los carbones F-300 y MG, para lograr esto es necesario comprender las interacciones entre el pentaclorofenol en solución con los sitios de la superficie de los carbones activados.

En la sección 5.8 se reportó que los puntos de carga cero (PCC) para los carbones F-300 y MG son 6.9 y 6.6, respectivamente. Recordando la definición del PCC, a pH menores de este valor, la superficie del carbón esta cargada positivamente mientras a pH mayores esta cargada negativamente. Excepto por

los experimentos realizados a pH=6, la adsorción se estudió a pH mayores del PCC y en estas condiciones el anión pentaclorofenolato es repelido por la superficie porque ambos están cargados negativamente. La adsorción es del tipo químico porque debe vencer las fuerzas de repulsión entre la superficie y el anión pentaclorofenolato. A medida que se aumenta el pH, la carga de la superficie se hace más negativa y se requiere de mucho más energía para que el pentaclorofenolato se adsorba. Esto explica porque la isoterma de adsorción decrece cuando se incrementa el pH de la solución de 7 a 12.

A pH de 6 la superficie esta cargada positivamente y el anión pentaclorofenolato es atraído a la superficie. De acuerdo a esto, el pentaclorofenolato se acumula en la superficie del carbón por atracciones electrostáticas y luego se quimisorbe. A pH de 6, las atracciones electrostáticas favorecen la adsorción y por esta razón, el pentaclorofenol se adsorbe más a este pH que a los demás pH.

Así mismo, los estudios de reversibilidad de la adsorción revelaron que el pentaclorofenol se adsorbe irreversiblemente sobre los carbones F-300 y MG. De acuerdo a lo anterior, se propone que el pentaclorofenol se adsorbe químicamente formando un enlace covalente con los sitios básicos presentes en el carbón, tales como lactonas, quinonas, hidroxilos fenólicos y carboxilatos (Cooney 1998).

6.5. Remoción de pentaclorofenol presente en solución acuosa

La capacidad del carbón para adsorber al pentaclorofenol se evaluó determinando la isoterma de adsorción y se concluyó que el PCF se adsorbe considerablemente sobre los carbones F-300, MG y F-400. Además de conocer la isoterma, es necesario evaluar la aplicación de la adsorción sobre carbón en la remoción de PCF en solución acuosa.

La eficiencia de la adsorción en la remoción de PCF se puede evaluar calculando el porcentaje de remoción que se definió como:

$$\% \text{Remoción} = \left[\frac{C_0 - C_e}{C_0} \right] * 100\% \quad (6.6)$$

Donde:

C_0 = Concentración inicial del pentaclorofenol, mg/L.

C_e = Concentración final del pentaclorofenol en el equilibrio, mg/L.

La concentración C_e se evaluó por medio de un balance de masa que se representa como:

$$V_s C_0 = V_s C_e + m q_e \quad (6.7)$$

Donde:

- V_s = Volumen de la solución, L.
- m = Masa de carbón, g.
- q_e = Masa de pentaclorofenol adsorbida en el equilibrio, mg/g.

El término del lado izquierdo representa la masa de PCF que había al inicio en la solución. El primer término del lado derecho es la masa de PCF que permaneció en la solución y el segundo corresponde a la masa de PCF que se adsorbió sobre el carbón.

En el equilibrio la masa de PCF adsorbido se relaciona con la concentración del PCF que se encuentra en solución, usando la isoterma de Prausnitz-Radke:

$$q_e = \frac{aC_e}{1 + bC_e} \quad (6.8)$$

Substituyendo la ecuación 6.8 en la ecuación 6.7, se obtiene la ecuación siguiente que permite calcular C_e .

$$C_0 = C_e + \frac{m}{V} \left[\frac{aC_e}{1 + bC_e} \right] \quad (6.9)$$

Existen dos formas de analizar la aplicación de la adsorción, la primera consiste en estimar el porcentaje de remoción que se logra para determinadas condiciones de pH, temperatura, concentración inicial de PCF, relación (m/V) y tipo de carbón. En este caso C_e se calcula resolviendo la ecuación (6.9). Otra forma de calcular C_e es por un procedimiento gráfico que consiste en graficar la isoterma, (Ec. 6.8), y el balance de masa, (Ec. 6.7), que se expresa de la manera siguiente:

$$q_e = -\frac{V}{m} C_e + \frac{V}{m} C_0 \quad (6.10)$$

Esta última ecuación se representa gráficamente como una línea recta que tiene una pendiente de $-V/m$. La concentración C_e es la intersección de la línea curva que representa la isoterma con la línea recta que corresponde al balance de masa (ver Figura 6.7). En la Tabla 6.3 se exhiben los porcentajes de remoción que se obtienen para valores de C_0 de 1, 10 y 100 mg/L y relaciones (m/V) de 0.1 y 1 g/L.

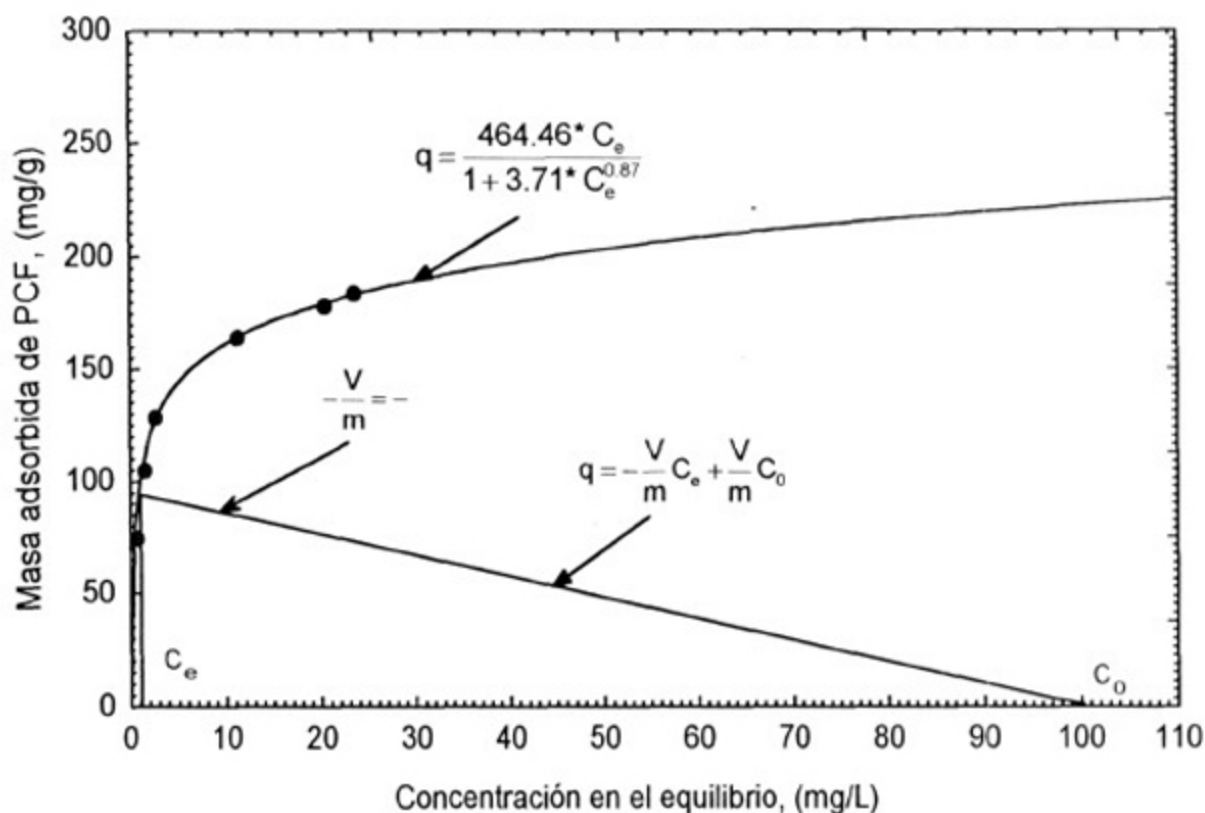


Figura 6.7. Ilustración del procedimiento gráfico para calcular C_e Adsorción de PCF sobre el carbón activado F-300. pH sin ajustar.

Tabla 6.3. Porcentaje de remoción para los carbones F-300, MG y F-400 para las concentraciones iniciales de PCF de 1, 10 y 100 mg/L utilizando relaciones m/V de 0.1 y 1 g/L. pH sin ajustar.

C_0 (mg/L)	F-300		MG		F-400	
	$\frac{m}{V} = 1$	$\frac{m}{V} = 0.1$	$\frac{m}{V} = 1$	$\frac{m}{V} = 0.1$	$\frac{m}{V} = 1$	$\frac{m}{V} = 0.1$
1	99.78	97.60	99.37	93.5	99.44	94.32
10	99.75	91.95	99.31	85.63	99.40	87.47
100	98.99	21.57	98.02	21.67	98.28	15.62

En la Tabla 6.3 se observa que los tres carbones remueven eficientemente al PCF para las concentraciones iniciales de 1, 10 y 100 mg/L utilizando una relación m/V de 1. En estas condiciones los porcentajes de remoción son mayores de 98% independiente del tipo de carbón. Por otro lado, cuando se utilizó una

relación m/V de 0.1 se nota que los porcentajes de remoción disminuyen comparados con los que se logran para $(m/V)=1$, esto se debe a que se emplea menor masa de carbón, reduciendo la relación (m/V) . Además, los tres carbones remueven al PCF bastante bien para las concentraciones iniciales de 1 y 10 mg/L, lográndose porcentajes de remoción mayores de 85%. Sin embargo, para la concentración de 100 mg/L se obtienen porcentajes de remoción entre 15 y 22% que son bajos. Esto se ilustra en la Figura 6.8.

La segunda forma de analizar la aplicación de la adsorción consiste en estimar la masa de adsorbente requerido para remover 90 y 99% del PCF presente en un litro de una solución acuosa que tiene la concentración inicial de pentaclorofenol de 1, 10 y 100 mg/L. En este caso C_e se evalúa por medio de la ecuación del porcentaje de remoción, (Ec. 6.6) y la masa de carbón se estima empleando la ecuación (6.9). En la Tabla 6.4 se exhibe la masa de carbón necesaria para lograr porcentajes de remoción de 90 y 99% cuando C_0 es 1, 10 y 100 mg/L.

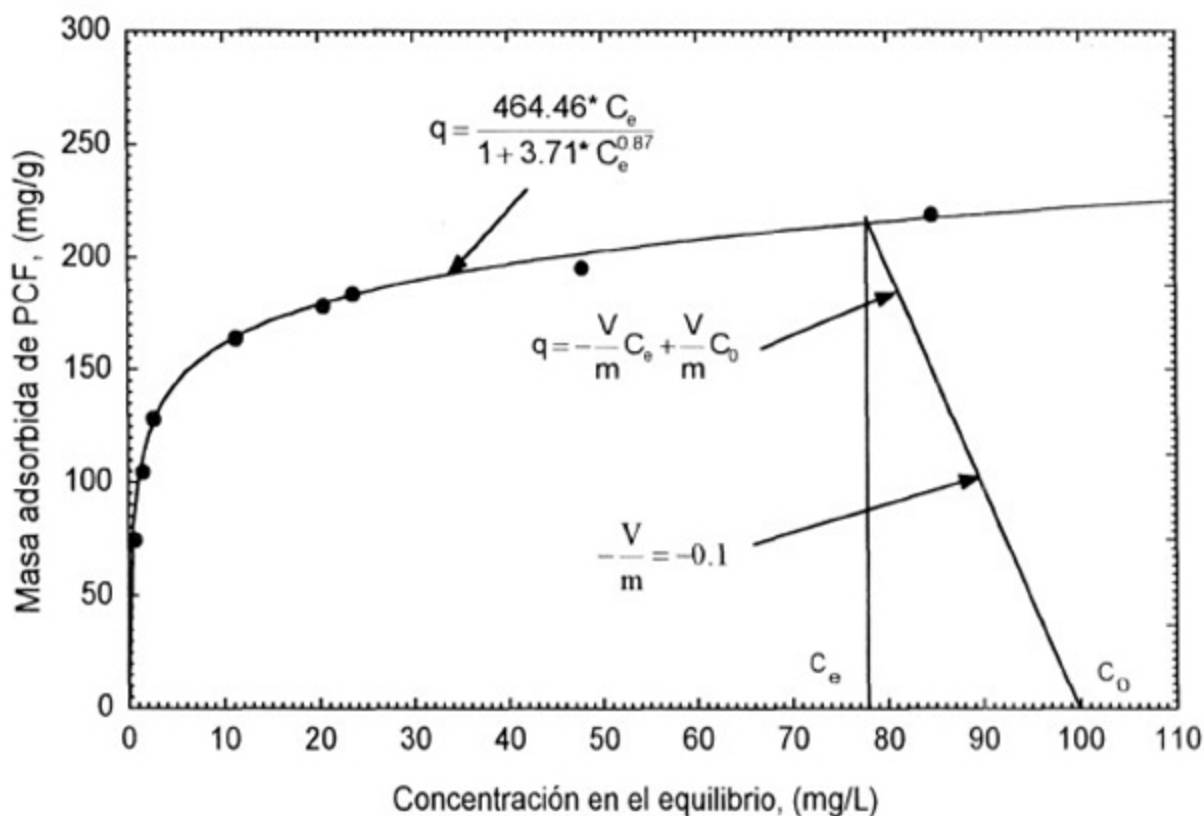


Figura 6.8. Ilustración del procedimiento gráfico para calcular C_e . Adsorción de PCF sobre el carbón activado F-300. pH sin ajustar.

Tabla 6.4. Masa de los carbones F-300, MG y F-400 necesaria para lograr 90 y 99 % de remoción de PCF en un litro de solución. pH sin ajustar.

C ₀ (mg/L)	F-300		MG		F-400	
	90%	99%	90%	99%	90%	99%
1	0.03	0.23	0.07	0.63	0.06	0.56
10	0.09	0.32	0.13	0.72	0.11	0.62
100	0.56	1.00	0.58	1.38	0.65	1.25

Los datos de la Tabla 6.4 indican que los tres carbones utilizados remueven eficientemente al PCF para las concentraciones iniciales de 1, 10 y 100 mg/L, requiriéndose masas que varían de 0.03 a 1.38 g por cada litro de solución acuosa. Independientemente del porcentaje de remoción y C₀, la eficiencia de los carbones disminuye en el orden siguiente: F-300 > F-400 > MG. Además, para lograr mayor porcentaje de remoción se requiere más masa del carbón. Esto es obvio porque entre más carbón se agregue más PCF se puede eliminar.

CONCLUSIONES

Comparando las isotermas de adsorción del PCF sobre los carbones activados comerciales: F-300, MG, F-400, VG, C y CG-700, se encontró que el PCF se adsorbió considerablemente sobre los carbones de origen bituminoso F-300, MG y F-400 y levemente sobre los carbones VG, C y CG-700 fabricados a partir de madera y de concha de coco. Esto demostró que la capacidad de adsorción del carbón activado depende significativamente de la materia prima y el proceso de activación que se use para prepararlo.

Los datos experimentales se ajustaron usando los modelos de las isotermas de adsorción de Langmuir, Freundlich y Prausnitz-Radke. La isoterma de Prausnitz-Radke ajustó mejor los datos que las otras dos isotermas debido a que esta isoterma tiene tres parámetros de ajuste mientras que las otras solamente dos. La isoterma de Langmuir no interpretó adecuadamente los datos experimentales debido que a altas concentraciones de PCF, los datos no exhiben el comportamiento asintótico que es típico de esta isoterma. A altas concentraciones, la masa de PCF adsorbido tiende a crecer ligeramente con el aumento en la concentración.

La determinación de los sitios activos de los carbones activados reveló que el carbón CG-700 tiene mayor concentración de sitios básicos que ácidos, esto indica que se trata de un carbón de tipo básico. Lo opuesto ocurre con los carbones C y VG porque son carbones de tipo ácido. Los carbones F-300 y MG tienen concentraciones de sitios ácidos y básicos muy similares y el carbón F-400 tiene ligeramente menor cantidad de sitios básicos que ácidos. Con base a lo anterior, el orden decreciente de la concentración de sitios ácidos es el siguiente: $C > VG > F-400 > F-300 = MG > CG-700$ y de la concentración de sitios básicos es: $MG > CG-700 > F-300 > F-400 > VG > C$.

La oxidación de los carbones F-300 y MG con solución de ácido nítrico se realizó a dos niveles que se denominaron oxidado y fuertemente oxidado. La oxidación de los carbones F-300 y MG aumentó la concentración de los sitios ácidos y disminuyó la de los sitios básicos. Excepto para el carbón F-300, esta tendencia se mantuvo con el nivel de oxidación. Las concentraciones de los sitios ácidos aumentaron 2.6 a 2.9 veces para el carbón F-300 y alrededor de 3 a 3.6 veces para el MG. Por otro lado las concentraciones de los sitios básicos disminuyeron alrededor de 2.2 veces para el F-300 y de cerca de 3 a 4 veces para el MG. La explicación de este comportamiento se basa en que la oxidación del carbón con ácido nítrico induce la formación de grupos funcionales conteniendo oxígeno sobre la superficie del carbón oxidado. Estos grupos son ácidos y su presencia afecta de manera decisiva a la capacidad de adsorción del carbón.

Comparando las máximas masas de PCF adsorbido sobre los carbones F-300 y MG sin oxidar con las de los carbones oxidados, se observó que la máxima

capacidad de adsorción del F-300 se redujo 17.7% al oxidarlo y para el MG 31%. La máxima capacidad disminuyó muy levemente cuando el carbón oxidado se oxidó todavía más. En base a los resultados anteriores, la disminución en la capacidad de adsorción por la oxidación se puede explicar suponiendo que el PCF se adsorbe principalmente en los sitios básicos.

El pH de la solución juega un papel muy importante en la adsorción del PCF sobre el carbón activado F-300. Se observó que a pH=6 ocurre la máxima adsorción y que la capacidad disminuyó un 51% cuando el pH se incrementó de 6 a 12. A pH menores de 6 no se efectuaron experimentos de adsorción porque se formó un precipitado de color blanco.

El diagrama de especiación del PCF mostró que dependiendo del pH, el PCF se encuentra en solución acuosa en forma disociada como pentaclorofenolato, sin disociar o bien en las dos especies. A pH menores de 3, más del 98% (molar) del pentaclorofenol está sin disociar y el resto está disociado; a pH de 6, el 95.2% existe en forma disociada, y a pH mayores de 7, más del 99.5% se encuentra en forma disociada. En virtud de que la adsorción del pentaclorofenol se determinó a pH entre 6 y 12, entonces se puede asegurar que el PCF se está adsorbiendo principalmente como pentaclorofenolato sobre el carbón F-300.

La temperatura afectó levemente la isoterma de adsorción, observándose que la capacidad de adsorción disminuye 1.19 veces en promedio cuando la temperatura se incrementó de 15 a 25°C. Este comportamiento se puede atribuir a que la energía vibracional de las moléculas adsorbidas aumenta elevando la temperatura y entonces más moléculas adsorbidas se pueden desorber.

Los puntos de carga cero (PCC) de los carbones F-300 y MG son 6.9 y 6.6, respectivamente. La carga superficial del carbón es positiva a pH menores del PCC, neutra para pH=PCC y negativa para pH mayores que el PCC. Excepto por los experimentos realizados a pH de 6 la adsorción se efectuó a pH mayores del PCC y en estas condiciones el anión pentaclorofenolato es repelido por la superficie porque ambos están cargados negativamente. La adsorción es del tipo químico porque debe vencer las fuerzas de repulsión entre la superficie y el anión pentaclorofenolato. A medida que se aumenta el pH, la carga de la superficie se hace más negativa y se requiere de mucho más energía para que el pentaclorofenolato se adsorba. Esto explica porque la isoterma de adsorción decrece incrementando el pH de la solución de 7 a 12. A pH de 6 la superficie está cargada positivamente y el anión pentaclorofenolato es atraído a la superficie. El pentaclorofenolato se acumula en la superficie del carbón por atracciones electrostáticas y luego se quimisorbe. A pH de 6, las atracciones electrostáticas favorecen la acumulación del PCF en la superficie del carbón y por esta razón, el PCF se adsorbe más a este pH que a los demás pH.

Los estudios de reversibilidad de la adsorción revelaron que el PCF se adsorbe irreversiblemente sobre los carbones F-300 y MG. En base a lo anterior, se propone que el PCF se adsorbe químicamente formando un enlace covalente

con los sitios básicos presentes en el carbón, tales como lactonas, quinonas, hidroxilos fenólicos y carboxilatos.

Los resultados obtenidos muestran que los carbones F-300, MG y F-400 remueven más del 98% del PCF presente en solución acuosa para concentraciones iniciales de 1, 10 y 100 mg/L, utilizando una relación m/V de 1. Se requieren masas de estos tres carbones que varían de 0.23 a 1.38 g por cada litro de solución acuosa para remover el 99% del PCF presente. Independientemente del porcentaje de remoción y la concentración inicial del PCF, la eficiencia de los carbones disminuye en el orden siguiente: F-300 > F-400 > MG.

En base, a los resultados anteriores se concluye que la adsorción sobre carbón activado se puede usar para remover eficientemente al PCF en solución acuosa.

REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS

- Albert, A. L., 1988, Contaminación de los alimentos por productos químicos, Instituto Nacional de Investigaciones sobre Recursos Bióticos, Xalapa, Veracruz, México.
- Alvarado Rodríguez, F.L., (1996). El Uso de plaguicidas en la industria azucarera. Caso San Luis Potosí, Coordinación de Ecología y Gestión Ambiental, Gobierno del Estado de San Luis Potosí.
- Arévila, A., Ramos, J., y Jiménez, B., (1997). Evaluación de la contaminación dispersa por agroquímicos en México, Ingeniería Ambiental, Num. 31, enero-marzo.
- Amdur, M. O., Doull, J. y Klaassen, C. D. (Eds.), 1991, (Casarett and Doull's), Toxicology, The Basic Science of Poisons, Fourth Edition, Capitulo 18, Pergamon Press, Inc. New York, 565-621.
- Bandosz, J. T., Jagiello, J. y Schawarz, A. J., 1992, Comparison of Methods to Assess Surface Acidic Groups on Activated Carbons, Anal. Chem. 64, 891-895.
- Bansal, C. R., Donnet, J. B. y Stoeckli, F., 1988, Active Carbon, Marcel Dekker, Inc. New York, USA.
- Bedient, B. P., Rifai, S. H. y Newell J. C., 1999, Ground Water Contamination, Transport and Remediation, Second Edition, Prentice Hall PTR
- Benaddi, H., Bandosz, T. J., Jagiello, J., Schwarz, J. A., Rouzaud, J.N., Legras, D. y Béguin, F., 2000, Surface functionality and porosity of activated carbons obtained from chemical activation of wood, Carbón, 38, 669-674.
- Bernal Jácome, L.A., 1999, Adsorción y Difusión Intraparticular de Zinc (II) en solución Acuosa sobre Carbón Activado, Tesis de Maestría, UASLP, S.L.P., México.
- Bockris, J. O'M. y Otagawa, T., 1984, The Electrocatalysis of Oxygen Evolution on Perovskites, J. Electrochem. Soc., Electrochemical Science and Technol., 131 (2), 290-302.
- Boehm, H. P., 1970, Chemical Identification of Surface Groups, Heidelberg, Germany.

- Boehm, H. P., 1994, Some aspects of the surface chemistry of carbon blacks and other carbons, Carbon, **32** (5), 759-769.
- Brandt, S., Zeng, P. A. y Deckwer, D. W., 1997, Adsorption and Desorption of Pentachlorophenol on Cells of *Mycobacterium chlorophenolicum* PCP-1, Biotechnol. and Bioeng., **55** (3), 480-489.
- Cheremisinoff, P. N., y Cheremisinoff, N. P., 1993, Carbon Adsorption for Pollution Control, Editorial Prentice Hall.
- CICOPLAFEST, 1998, Catalogo Oficial de Plaguicidas, SEMARNAP, SECOFI, SAGAR y SSA. México, D.F.
- Cooney, D. O., 1998, Adsorption Design for Wastewater Treatment, Lewis Publishers, Washington, D.C., USA.
- Cremlyn, R., 1990, Plaguicidas modernos y su acción bioquímica, Editorial Limusa.
- Crosby, D. G., 1981, Environmental Chemistry of Pentachlorophenol, Pure Appl. Chem., **53**, 1051-1080.
- Do, D. D., 1998, Adsorption Analysis: Equilibria and Kinetics, Series on Chemical Engineering, Imperial College Press, Vol. 2.
- Donnelly, C. K., Anderson, S. C., Barbee, C. G., y Manek, J. D., 1994, Soil Toxicology, en Basic Environmental Toxicology, Cockerham, G. L., y Shane, S. B., (Eds), Capitulo 12, CRC Press, 321-351.
- Donnet, J. B., 1968, The Chemical Reactivity of Carbons, Carbon, **6**, 161-176.
- Engwall, M. A., Pignatello, J. J., y Grasso, D., 1999, Degradation and detoxification of the wood preservatives creosote and pentachlorophenol in water by the photo-Fenton reaction, Wat. Res., **33** (5), 1151-1158.
- Guiochon, G., Shirazi, G. S. y Katti, M. A., 1994, Fundamentals of Preparative and Nonlinear Chromatography, Academic Press.
- Henaó, H. S. y Corey, O. G., 1986, Plaguicidas organofosforados y carbámicos, Centro Panamericano de Ecología Humana y Salud, Organización Panamericana de la Salud, Organización Mundial de la Salud. México.
- Jianlong, W., Yi, Q., Horan, N. y Stentiford, E., 2000, Bioadsorption of pentachlorophenol (PCP) from aqueous solution by activated sludge biomass, Biores. Technol., **75**, 157-161.

- Kao, C. P., Tzeng, H. J. y Huang, L. T., 2000, Removal of chlorophenols from aqueous solution by fly ash, Journal of Hazardous Materials, **76**, 237-249.
- Kaufman, D. D., 1978, Degradation of Pentachlorophenol in Soil, and by Soil Microorganisms. In: Rao KR, ed. Pentachlorophenol: Chemistry, Pharmacology, and Environmental Toxicology. New York, NY: Plenum Press, 27-39.
- Mattson, S. J. y Mark, B. H., 1971, Activated Carbon, Marcel Dekker, Inc., New York.
- Minguan, D., 1994, The Effect of Zeta Potential of Activated Carbon on the Adsorption of Dyes from Aqueous Solution, Journal of Colloid and Interf., **164**, 223-228.
- Mollah, H. A. y Robinson, C. W., 1996, Pentachlorophenol Adsorption and Desorption Characteristics of Granular Activated Carbon-I Isotherms, Wat. Res., **30** (12), 2901-2906.
- Nyssen, G. A., Lovell, G.S., Simon, A. A., Smith, J. G. y Tolar, B. K., 1987, Removal of Trace Levels of Phenols from Aqueous Solution by Foam Flotation, Sep. Sci. Technol., **22** (11), 2127-2141.
- Ruiz Salazar, C.V., 2000, Equilibrio y Velocidad de Adsorción de Selenio (IV) y Selenio (VI) en solución Acuosa sobre Carbón Activado, Tesis de Maestría, UASLP, S.L.P., México.
- Sawyer, N. C., McCarty, L. P., y Parkin F. G., 1994, Chemistry for Environmental Engineering, Fourth Edition, McGraw-Hill, Inc., Series in Water Resources and Environmental Engineering.
- Schellenberg, K., Leuenberger, C. y Schwarzenbach, P. R., 1984, Sorption of Chlorinated Phenols by Natural Sediments and Aquifer Materials, Environ. Sci. Technol., **18** (9), 652-657.
- Slawomir, N., 1987, Evaluation of the pH-metric method for the determination of acidic groups on the surface of oxidized carbons, Carbon, **25** (3), 441-443.
- Sparks, L. D., 1995, Environmental Soil Chemistry, Academic Press.
- Stapleton, G. M., Sparks, L. D., y Dentel, K. S., 1994, Sorption of Pentachlorophenol to HDTMA-Clay as a Function of Ionic Strength and pH, Environ. Sci. Technol., **28**, 2330-2335

- Suzuki, M., 1990, Adsorption Engineering, Chemical Engineering Monographs 25. Copublished by Kodansha LTD., Tokyo y Elsevier Science Publishers B.V., Amsterdam.
- WHO, 1993. Guidelines for drinking-water quality, World Health Organization Geneva. Vol. 1, Recomendations.
- USDHHS, 1993, Toxicological Profile for Pentachlorophenol, U.S. Department of Health & Human Services, Agency for Toxic Substances and Disease Registry, Atlanta Georgia.
- Villaseñor, J., Reyes P. y Pecchi, G., 1998, Photodegradation of Pentachlorophenol on ZnO, J. Chem. Technol. Biotechnol., **72**, 105-110.
- Viraraghavan, T. y Slough, K., 1999, Sorption of Pentachlorophenol on Peat-Bentonite Mixtures, Chemosphere, **39** (9), 1487-1496.
- USEPA, 1978, Fate and Impact of Pentachlorophenol in Freshwater Ecosystem, EPA-600/3-78/063, U.S., Environmental Protection Agency, Washington, D.C.
- USEPA, 1991, Granular Activated Carbon Treatment, EPA-540/2-91/024, U. S., Environmental Protection Agency, Washington, D.C.

NOMENCLATURA

a	=	Parámetro de ajuste
Abs	=	Absorbancia
b	=	Parámetro de ajuste
B	=	Constante que representa la interacción energética entre el adsorbato y el adsorbente
C	=	Concentración, mg/L
C _{st}	=	Concentración de la solución titulante, mol/L
C _e	=	Concentración de pentaclorofenol en el equilibrio (mg/L)
C _f	=	Concentración final del pentaclorofenol, mg/L
C _{fn}	=	Concentración final de la solución neutralizante, eq/L
C _i	=	Concentración del pentaclorofenol en la muestra número i, mg/L
C _{in}	=	Concentración inicial de la solución neutralizante, eq/L
C _o	=	Concentración inicial del pentaclorofenol, mg/L
C _s	=	Concentración de adsorbato para obtener una saturación en la superficie del adsorbente
C _{sa}	=	Concentración de sitios activos, meq/g
C _T	=	Concentración de la solución titulante, eq/L
E ₁	=	Es el calor de adsorción de la primera capa de adsorbato
E ₂	=	Es el calor de licuefacción del gas
F	=	Constante de Faraday, F=9.65x10 ⁴ C/mol
H _c	=	Constante de la ley de Henry, atm·m ³ /mol
K	=	Constante relacionada con la entalpía de adsorción, L/mg
k _F	=	Constante que indica la capacidad de adsorción, mg ^{1-1/n} L ^{1/n} /g
k	=	Constante de ajuste
m	=	Masa del carbón, g
M	=	Peso molecular del compuesto químico, g/mol
N	=	Número de Avogadro, molec/mol
N _i	=	Número de datos experimentales
1/n	=	Intensidad de la adsorción
%Desv	=	Porcentaje de desviación
P	=	Presión (P _a) de un gas en equilibrio con un sólido
P _o	=	Presión de un gas requerido para la saturación a la temperatura del experimento
P _s	=	Presión estándar, 1 atm
P _v	=	Presión de vapor del compuesto químico puro, atm
q	=	Masa de pentaclorofenol adsorbido por unidad de masa del carbón, mg/g
q _e	=	Masa de pentaclorofenol adsorbida en el equilibrio, mg/g
q _{exp}	=	Masa experimental de pentaclorofenol adsorbida en el carbón después de la desorción, mg/g
q _m	=	Masa de pentaclorofenol adsorbido cuando se ha formado la monocapa (mg/g)
q _o	=	Masa del pentaclorofenol adsorbida en el carbón al inicio, mg/g

q_T	=	Masa teórica de pentaclorofenol adsorbida en el carbón después de la desorción, mg/g
R	=	Constante de los gases, $\text{cm}^3 \text{ atm/mol}^\circ\text{K}$
S	=	Solubilidad del compuesto químico en el agua, g/m^3
S_A	=	Area superficial del carbón, m^2/g
S_{N_2}	=	Area ocupada por una molécula, $16.2 \text{ \AA}^2/\text{g}$
T	=	Temperatura absoluta
T_0	=	Temperatura estándar, 273.15°K
v	=	Volumen promedio, mL
V	=	Volumen de un gas adsorbido a presión P , m^3
V_a	=	Volumen total de las soluciones de HCl y NaOH que se agregaron al adsorbedor para ajustar el pH, L
V_f	=	Volumen final, L
V_i	=	Volumen de la muestra número i , L
V_{in}	=	Volumen inicial de la solución neutralizante, L
V_o	=	Volumen inicial, L
V_m	=	Volumen de la muestra de la solución titulante, mL
V_{mc}	=	Volumen de gas requerido para una monocapa sobre la superficie adsorbente, m^3
v_m	=	Volumen de monocapa, cm^3/g
V_s	=	Volumen de la solución, L
V_T	=	Volumen gastado de la solución titulante, mL
V_{Tsc}	=	Volumen del titulante añadido al blanco mL
V_{Tc}	=	Volumen del titulante añadido a la muestra, mL
w_1	=	Peso de la copa con la muestra, g
w_2	=	Peso de la copa, g

Letras Griegas

β	=	Parámetros de ajuste
Γ	=	Carga de la superficie, C/m^2 .
ΔV	=	Diferencia de volumen de la solución titulante en presencia y ausencia de carbón a un mismo pH, mL.
ρ	=	Densidad absoluta del carbón, g/mL

APENDICE A

**Datos experimentales de las isothermas de
adsorción de pentaclorofenol**

Tabla A.1. Datos experimentales de la adsorción de pentaclorofenol sobre carbón activado F-300. Diámetro de partícula = 0.694 mm, T=25°C, sin ajuste de pH, volumen inicial = 490 mL y volumen de la muestra = 10 mL.

Muestra No.	Masa de carbón (g)	Volumen inicial (mL)	Tiempo (días)	Absorbancia	Factor de dilución	Conc.* (mg/L)
15F-3001001**	0.6336	480	0	1.816		98.63 ^{1e}
15F-3001002			7	0.020		0.537 ^{1f}
15F-3001003			10	0.018		0.459 ^{1f}
16F-3001001	0.4550	490	0	1.817		98.71 ^{1e}
16F-3001002			7	0.070		1.866 ^{1f}
16F-3001003			10	0.049		1.293 ^{1f}
07F-3001001**	0.3605	480	0	1.812		99.07 ^{1a}
07F-3001002			5	0.163		4.311 ^{1b}
07F-3001003			7	0.122		3.233 ^{1b}
07F-3001004			10	0.095		2.602 ^{1d}
17F-3001001	0.2609	490	0	1.818		98.77 ^{1e}
17F-3001002			7	0.244		12.40 ^{1e}
17F-3001003			10	0.221		11.17 ^{1e}
18F-3001001	0.2143	490	0	1.820		98.85 ^{1e}
18F-3001002			7	0.422		22.20 ^{1e}
18F-3001003			10	0.389		20.35 ^{1e}
09F-3001001	0.2007	490	0	1.812		99.04 ^{1a}
09F-3001002			5	0.500		26.55 ^{1a}
09F-3001003			7	0.467		24.69 ^{1a}
09F-3001004			10	0.441		23.49 ^{1c}
19F-3001001	0.1272	490	0	1.817		98.71 ^{1e}
19F-3001002			7	0.911		49.01 ^{1e}
19F-3001003			10	0.888		47.75 ^{1e}
20F-3002001	0.3266	490	0	1.812	1:2	196.9 ^{1e}
20F-3002002			7	1.116		60.28 ^{1e}
20F-3002003			10	1.057		57.04 ^{1e}

* El superíndice indica la curva de calibración que se usó para determinar la concentración del pentaclorofenol en solución acuosa.

** Volumen de la muestra = 20 mL.

Tabla A.1. Continuación

Muestra No.	Masa de carbón (g)	Volumen inicial (mL)	Tiempo (días)	Absorbancia	Factor de dilución	Conc.* (mg/L)
21F-3002001	0.2501	490	0	1.809	1:2	196.6 ^{1e}
21F-3002002			7	1.589		86.20 ^{1e}
21F-3002003			10	1.560		84.60 ^{1e}

* El superíndice indica la curva de calibración que se usó para determinar la concentración del pentaclorofenol en solución acuosa.

Tabla A.2. Datos experimentales de la adsorción de pentaclorofenol sobre carbón activado F-400. Diámetro de partícula = 0.418 mm, T=25°C, sin ajuste de pH, volumen inicial = 480 mL y volumen de la muestra = 20 mL.

Muestra No.	Masa de carbón (g)	Volumen inicial (mL)	Tiempo (días)	Absorbancia	Factor de dilución	Conc.* (mg/L)
22F-4001001	0.6337	480	0	1.821		99.52 ^{1g}
22F-4001002			7	0.049		1.222 ^{1h}
22F-4001003			10	0.047		1.169 ^{1h}
23F-4001001	0.4527	480	0	1.819		99.42 ^{1g}
23F-4001002			7	0.075		1.924 ^{1h}
23F-4001003			10	0.060		1.527 ^{1h}
11F-4001001	0.3602	480	0	1.811		98.98 ^{1g}
11F-4001002			7	0.207		5.515 ^{1h}
11F-4001003			10	0.151		4.005 ^{1h}
11F-4001001	0.3604	480	0	1.812		99.04 ^{1a}
11F-4001002**			5	0.229		6.069 ^{1b}
11F-4001003**			7	0.195		5.171 ^{1b}
11F-4001004**			10	0.167		4.517 ^{1d}
24F-4001001	0.3085	480	0	1.819		99.44 ^{1g}
24F-4001002			7	0.253		12.97 ^{1g}
24F-4001003			10	0.242		12.35 ^{1g}
12F-4001001**	0.2803	490	0	1.811		98.96 ^{1a}
12F-4001002**			5	0.349		18.19 ^{1a}
12F-4001003**			7	0.313		16.19 ^{1a}
12F-4001004**			10	0.291		15.25 ^{1c}
12F-4001001	0.2801	480	0	1.821		99.58 ^{1g}
12F-4001002			7	0.331		17.23 ^{1g}
12F-4001003			10	0.304		15.75 ^{1g}
25F-4001001	0.2578	480	0	1.819		99.44 ^{1g}
25F-4001002			7	0.456		24.16 ^{1g}
25F-4001003			10	0.431		22.79 ^{1g}

* El superíndice indica la curva de calibración que se usó para determinar la concentración del pentaclorofenol en solución acuosa.

** Volumen de la muestra = 10 mL.

Tabla A.2. Continuación

Muestra No.	Masa de carbón (g)	Volumen inicial (mL)	Tiempo (días)	Absorbancia	Factor de dilución	Conc.* (mg/L)
13F-4001001	0.2001	480	0	1.821		99.52 ^{1g}
13F-4001002			7	0.680		36.51 ^{1g}
13F-4001003			10	0.671		36.03 ^{1g}
14F-4001001	0.1202	480	0	1.821		99.52 ^{1g}
14F-4001002			7	1.124		61.05 ^{1g}
14F-4001003			10	1.104		59.97 ^{1g}

* El superíndice indica la curva de calibración que se usó para determinar la concentración del pentaclorofenol en solución acuosa.

Tabla A.3. Datos experimentales de la adsorción de pentaclorofenol sobre carbón activado C. Diámetro de partícula = 0.694 mm, T=25°C, sin ajuste de pH, volumen inicial = 480 mL y volumen de la muestra = 20 mL.

Muestra No.	Masa de carbón (g)	Volumen inicial (mL)	Tiempo (días)	Absorbancia	Factor de dilución	Conc.* (mg/L)
29C601	1.0002	480	0	1.116		60.62 ^{1g}
29C602			7	0.227		11.52 ^{1g}
29C603			10	0.270		7.225 ^{1h}
29C604			15	0.109		2.932 ^{1j}
29C605			22	0.067		1.847 ¹ⁱ
30C801	1.0002	480	0	1.474		80.35 ^{1g}
30C802			7	0.524		27.91 ^{1g}
30C803			10	0.395		20.76 ^{1g}
30C804			15	0.379		10.15 ^{1j}
30C805			22	0.182		4.976 ¹ⁱ
31C1001	1.0001	480	0	1.811		98.98 ^{1g}
31C1002			7	0.791		42.63 ^{1g}
31C1003			10	0.672		36.11 ^{1g}
31C1004			15	0.481		25.49 ¹ⁱ
31C1005			22	0.301		15.60 ^{1k}
32C1501	1.0001	480	0	1.378	1:2	150.1 ^{1g}
32C1502			7	1.522		83.05 ^{1g}
32C1503			10	1.442		78.60 ^{1g}
32C1504			15	1.254		68.68 ¹ⁱ
32C1505			22	1.072		57.78 ^{1k}
33C2001	1.0000	480	0	1.802	1:2	196.9 ^{1g}
33C2002			7	1.149		124.9 ^{1g}
33C2003			10	1.102		119.7 ^{1g}
33C2004			15	0.997		108.7 ¹ⁱ
33C2005			22	1.727		93.55 ^{1k}

* El superíndice indica la curva de calibración que se usó para determinar la concentración del pentaclorofenol en solución acuosa.

Tabla A.4. Datos experimentales de la adsorción de pentaclorofenol sobre carbón activado MG. Diámetro de partícula = 0.694 mm, T=25°C, sin ajuste de pH, volumen inicial = 480 mL y volumen de la muestra = 20 mL.

Muestra No.	Masa de carbón (g)	Volumen inicial (mL)	Tiempo (días)	Absorbancia	Factor de dilución	Conc.* (mg/L)
58MG1001	0.6336	480	0	1.812		98.47 ^{2a}
58MG1002			7	0.034		1.031 ^{2b}
58MG1003			10	0.022		0.715 ^{2b}
70MG1001	0.5506	480	0	1.837		98.99 ^{2c}
70MG1002			7	0.039		1.056 ^{2d}
70MG1003			10	0.039		1.056 ^{2d}
59MG1001	0.3602	480	0	1.814		98.58 ^{2a}
59MG1002			7	0.200		5.497 ^{2b}
59MG1003			10	0.140		3.877 ^{2b}
60MG1001	0.2610	480	0	1.812		98.47 ^{2a}
60MG1002			7	0.340		17.89 ^{2a}
60MG1003			10	0.259		13.45 ^{2a}
61MG1001	0.2001	480	0	1.812		98.47 ^{2a}
62MG1002			7	0.495		26.36 ^{2a}
63MG1003			10	0.429		22.75 ^{2a}
62MG2001	0.3267	480	0	1.821	1:2	197.9 ^{2a}
62MG2002			7	0.536	1:2	57.15 ^{2a}
62MG2003			10	0.501	1:2	53.41 ^{2a}
63MG2001	0.2502	480	0	1.812	1:2	196.9 ^{2a}
63MG2002			7	0.795	1:2	85.54 ^{2a}
63MG2003			10	0.760	1:2	81.74 ^{2a}
71MG2001	0.1714	480	0	1.833	1:2	197.5 ^{2c}
71MG2002			7	1.105	1:2	118.4 ^{2c}
71MG2003			10	1.094	1:2	117.3 ^{2c}
72MG2501	0.1674	480	0	1.549	1:3	250.0 ^{2c}
72MG2502			7	1.037	1:3	166.6 ^{2c}
72MG2503			10	1.037	1:3	166.6 ^{2c}

* El superíndice indica la curva de calibración que se usó para determinar la concentración del pentaclorofenol en solución acuosa.

Tabla A.5. Datos experimentales de la adsorción de pentaclorofenol sobre carbón activado VG. Diámetro de partícula = 0.805 mm, T=25°C, sin ajuste de pH, volumen inicial = 480 mL y volumen de la muestra = 20 mL.

Muestra No.	Masa de carbón (g)	Volumen inicial (mL)	Tiempo (días)	Absorbancia	Factor de dilución	Conc.* (mg/L)
67VG501	0.5122	480	0	0.936		50.02 ^{2c}
67VG502			7	0.296		15.29 ^{2c}
67VG503			10	0.261		13.38 ^{2c}
46VG1001	0.6369	480	0	1.825		99.14 ^{2a}
46VG1002			7	0.655		35.13 ^{2a}
46VG1003			10	0.592		31.68 ^{2a}
47VG1001	0.3602	480	0	1.824		99.11 ^{2a}
47VG1002			7	1.090		58.91 ^{2a}
47VG1003			10	1.083		58.57 ^{2a}
48VG1001	0.2609	480	0	1.823		99.06 ^{2a}
48VG1002			7	1.249		67.60 ^{2a}
48VG1003			10	1.241		67.20 ^{2a}
49VG1001	0.2000	480	0	1.819		98.82 ^{2a}
49VG1002			7	1.366		74.01 ^{2a}
49VG1003			10	1.356		73.51 ^{2a}
68VG2001	0.6761	480	0	1.834	1:2	197.7 ^{2c}
68VG2002			7	0.925	1:2	98.93 ^{2c}
68VG2003			10	1.799		96.92 ^{2c}
69VG2001	0.4675	480	0	1.837	1:2	197.9 ^{2c}
69VG2002			7	1.166	1:2	125.1 ^{2c}
69VG2003			10	1.164	1:2	124.9 ^{2c}
50VG2001	0.3268	480	0	1.831	1:2	198.9 ^{2a}
50VG2002			7	1.330	1:2	144.1 ^{2a}
50VG2003			10	1.325	1:2	143.5 ^{2a}
51VG2001	0.2500	480	0	1.820	1:2	197.7 ^{2a}
51VG2002			7	1.431	1:2	155.1 ^{2a}
51VG2003			10	1.429	1:2	155.0 ^{2a}

* El superíndice indica la curva de calibración que se usó para determinar la concentración del pentaclorofenol en solución acuosa.

Tabla A.6. Datos experimentales de la adsorción de pentaclorofenol sobre carbón activado CG-700. Diámetro de partícula = 0.868 mm, T=25°C, sin ajuste de pH, volumen inicial = 480 mL y volumen de la muestra = 20 mL.

Muestra No.	Masa de carbón (g)	Volumen inicial (mL)	Tiempo (días)	Absorbancia	Factor de dilución	Conc. * (mg/L)
65CG7001001	1.2346	480	0	1.840		99.15 ^{2c}
65CG7001002			7	0.812		43.34 ^{2c}
65CG7001003			10	0.736		39.20 ^{2c}
52CG7001001	0.6338	480	0	1.819		98.84 ^{2a}
52CG7001002			7	1.333		72.20 ^{2a}
52CG7001003			10	1.290		69.87 ^{2a}
53CG7001001	0.3600	480	0	1.818		98.79 ^{2a}
53CG7001002			7	1.542		83.66 ^{2a}
53CG7001003			10	1.514		82.14 ^{2a}
54CG7001001	0.2609	480	0	1.818		98.79 ^{2a}
54CG7001002			7	1.557		84.46 ^{2a}
54CG7001003			10	1.533		83.15 ^{2a}
55CG7001001	0.2001	480	0	1.814		98.55 ^{2a}
55CG7001002			7	1.666		90.45 ^{2a}
55CG7001003			10	1.657		89.97 ^{2a}
66CG7002001	1.1136	480	0	1.841	1:2	198.4 ^{2c}
66CG7002002			7	1.274	1:2	136.8 ^{2c}
66CG7002003			10	1.240	1:2	133.1 ^{2c}
56CG7002001	0.3268	480	0	1.826	1:2	198.4 ^{2a}
56CG7002002			7	1.682	1:2	182.7 ^{2a}
56CG7002003			10	1.677	1:2	182.1 ^{2a}
57CG7002001	0.2501	480	0	1.822	1:2	198.0 ^{2a}
57CG7002002			7	1.701	1:2	184.8 ^{2a}
57CG7002003			10	1.692	1:2	183.8 ^{2a}

* El superíndice indica la curva de calibración que se usó para determinar la concentración del pentaclorofenol en solución acuosa.

Tabla A.7. Datos experimentales de la adsorción de pentaclorofenol sobre carbón activado F-300 oxidado. Diámetro de partícula = 0.694 mm, T=25°C, sin ajuste de pH, volumen inicial = 480 mL y volumen de la muestra = 20 mL.

Muestra No.	Masa de carbón (g)	Volumen inicial (mL)	Tiempo (días)	Absorbancia	Factor de dilución	Conc. * (mg/L)
95F-3001001	0.6336	480	0	1.777		97.77 ^{3a}
95F-3001002			7	0.178		4.739 ^{3b}
95F-3001003			10	0.128		3.411 ^{3b}
96F-3001001	0.3601	480	0	1.773		97.55 ^{3a}
96F-3001002			7	0.339		17.60 ^{3a}
96F-3001003			10	0.280		14.31 ^{3a}
97F-3001001	0.2556	480	0	1.770		97.42 ^{3a}
97F-3001002			7	0.653		35.14 ^{3a}
97F-3001003			10	0.592		31.71 ^{3a}
98F-3001001	0.2001	480	0	1.770		97.42 ^{3a}
98F-3001002			7	0.793	42.95 ^{3a}	
98F-3001003			10	0.726	39.16 ^{3a}	
99F-3002001	0.3200	480	0	1.780	1:2	195.9 ^{3a}
99F-3002002			7	1.596		87.67 ^{3a}
99F-3002003			10	1.524		83.70 ^{3a}
100F-3002001	0.2448	480	0	1.777	1:2	195.6 ^{3a}
100F-3002002			7	1.067		116.4 ^{3a}
100F-3002003			10	1.040		113.4 ^{3a}

* El superíndice indica la curva de calibración que se usó para determinar la concentración del pentaclorofenol en solución acuosa.

Tabla A.8. Datos experimentales de la adsorción de pentaclorofenol sobre carbón activado F-300 fuertemente oxidado. Diámetro de partícula = 0.694 mm, T=25°C, sin ajuste de pH, volumen inicial = 480 mL y volumen de la muestra = 20 mL.

Muestra No.	Masa de carbón (g)	Volumen inicial (mL)	Tiempo (días)	Absorbancia	Factor de dilución	Conc.* (mg/L)
135F3001001	0.6336	480	0	1.777		97.96 ^{10a}
135F3001002			10	0.163		4.409 ^{10b}
135F3001003			14	0.124		3.366 ^{10b}
136F3001001	0.3600	480	0	1.779		98.07 ^{10a}
136F3001002			10	0.425		22.50 ^{10a}
136F3001003			14	0.375		19.69 ^{10a}
137F3001001	0.2556	480	0	1.779		98.07 ^{10a}
137F3001002			10	0.678		36.64 ^{10a}
137F3001003			14	0.629		33.89 ^{10a}
138F3001001	0.2001	480	0	1.777		97.96 ^{10a}
138F3001002			10	0.877		47.73 ^{10a}
138F3001003			14	0.839		45.61 ^{10a}
139F3002001	0.3200	480	0	1.773	1:2	195.5 ^{10a}
139F3002002			10	1.692		93.21 ^{10a}
139F3002003			14	1.661		91.47 ^{10a}
140F3002001	0.2449	480	0	1.773	1:2	195.5 ^{10a}
140F3002002			10	1.063	1:2	116.3 ^{10a}
140F3002003			14	1.049	1:2	114.7 ^{10a}

* El superíndice indica la curva de calibración que se usó para determinar la concentración del pentaclorofenol en solución acuosa.

Tabla A.9. Datos experimentales de la adsorción de pentaclorofenol sobre carbón activado MG oxidado. Diámetro de partícula = 0.694 mm, T=25°C, sin ajuste de pH, volumen inicial = 480 mL y volumen de la muestra = 20 mL.

Muestra No.	Masa de carbón (g)	Volumen inicial (mL)	Tiempo (días)	Absorbancia	Factor de dilución	Concentración* (mg/L)
101MG1001	0.6336	480	0	1.755		96.55 ^{3a}
101MG1002			7	0.279		7.446 ^{3b}
101MG1003			10	0.191		5.103 ^{3b}
102MG1001	0.3600	480	0	1.754		96.49 ^{3a}
102MG1002			7	0.516		27.49 ^{3a}
102MG1003			10	0.433		22.86 ^{3a}
103MG1001	0.2042	480	0	1.754		96.49 ^{3a}
103MG1002			7	0.937		50.98 ^{3a}
103MG1003			10	0.870		47.19 ^{3a}
104MG2001	0.3201	480	0	1.762	1:2	193.9 ^{3a}
104MG2002			7	1.711		94.12 ^{3a}
104MG2003			10	1.666		91.62 ^{3a}
105MG2001	0.2449	480	0	1.758	1:2	193.5 ^{3a}
105MG2002			7	1.116	1:2	121.9 ^{3a}
105MG2003			10	1.091	1:2	119.1 ^{3a}
106MG2001	0.1714	480	0	1.761	1:2	193.8 ^{3a}
106MG2002			7	1.310	1:2	143.4 ^{3a}
106MG2003			10	1.292	1:2	141.5 ^{3a}

* El superíndice indica la curva de calibración que se usó para determinar la concentración del pentaclorofenol en solución acuosa.

Tabla A.10. Datos experimentales de la adsorción de pentaclorofenol sobre carbón activado MG fuertemente oxidado. Diámetro de partícula = 0.694 mm, T=25°C, sin ajuste de pH, volumen inicial = 480 mL y volumen de la muestra = 20 mL.

Muestra No.	Masa de carbón (g)	Volumen inicial (mL)	Tiempo (días)	Absorbancia	Factor de dilución	Conc.* (mg/L)
141MG1001	0.6337	480	0	1.767		97.38 ^{10a}
141MG1002			10	0.400		10.73 ^{10b}
141MG1003			14	0.327		8.790 ^{10b}
142MG1001	0.3600	480	0	1.762		97.14 ^{10a}
142MG1002			10	0.597		32.09 ^{10a}
142MG1003			14	0.496		26.45 ^{10a}
143MG1001	0.2042	480	0	1.757		96.84 ^{10a}
143MG1002			10	0.981		53.57 ^{10a}
143MG1003			14	0.936		51.03 ^{10a}
144MG2001	0.3200	480	0	1.770	1:2	195.1 ^{10a}
144MG2002			10	0.968	1:2	105.7 ^{10a}
144MG2003			14	0.945	1:2	103.0 ^{10a}
145MG2001	0.2448	480	0	1.763	1:2	194.4 ^{10a}
145MG2002			10	1.151	1:2	126.0 ^{10a}
145MG2003			14	1.136	1:2	124.4 ^{10a}
146MG2001	0.1715	480	0	1.766	1:2	194.7 ^{10a}
146MG2002			10	1.325	1:2	145.5 ^{10a}
146MG2003			14	1.322	1:2	145.1 ^{10a}

* El superíndice indica la curva de calibración que se usó para determinar la concentración del pentaclorofenol en solución acuosa.

Tabla A.11. Datos experimentales de la adsorción de pentaclorofenol sobre carbón activado F-300. Diámetro de partícula = 0.694 mm, T=25°C, pH=12, volumen inicial = 480 mL y volumen de la muestra = 20 mL.

Muestra No.	Masa de carbón (g)	Volumen inicial (mL)	Tiempo (días)	Absorbancia	Factor de dilución	Conc.* (mg/L)
34F-3001001	0.6336	480	0	1.809		99.29 ^{4a}
34F-3001002			7	0.007		0.183 ^{4b}
34F-3001003			10	0.007		0.170 ^{4b}
35F-3001001	0.3606	480	0	1.806		99.13 ^{4a}
35F-3001002			7	0.046		1.244 ^{4b}
35F-3001003			10	0.038		1.019 ^{4b}
36F-3001001	0.2609	480	0	1.804		99.02 ^{4a}
36F-3001002			7	0.215		5.820 ^{4b}
36F-3001003			10	0.176		4.772 ^{4b}
37F-3001001	0.2007	480	0	1.805		99.10 ^{4a}
37F-3001002			7	0.317		16.67 ^{4a}
37F-3001003			10	0.284		14.80 ^{4a}
38F-3002001	0.3267	480	0	1.796	1:2	197.2 ^{4a}
38F-3002002			7	0.892		48.51 ^{4a}
38F-3002003			10	0.847		46.02 ^{4a}
39F-3002001	0.2501	480	0	1.795	1:2	197.1 ^{4a}
39F-3002002			7	1.468		80.41 ^{4a}
39F-3002003			10	1.442		79.00 ^{4a}

* El superíndice indica la curva de calibración que se usó para determinar la concentración del pentaclorofenol en solución acuosa.

Tabla A.12. Datos experimentales de la adsorción de pentaclorofenol sobre carbón activado F-300. Diámetro de partícula = 0.694 mm, T=25°C, pH=10, volumen inicial = 480 mL y volumen de la muestra = 20 mL.

Muestra No.	Masa de carbón (g)	Volumen inicial (mL)	Tiempo (días)	Absorbancia	Factor de dilución	Conc. * (mg/L)
40F-3001001	0.6337	480	0	1.839		99.56 ^{5a}
40F-3001002			7	0.012		0.236 ^{5b}
40F-3001003			10	0.009		0.157 ^{5b}
41F-3001001	0.3601	480	0	1.835		99.34 ^{5a}
41F-3001002			7	0.048		1.197 ^{5b}
41F-3001003			10	0.029		0.684 ^{5b}
42F-3001001	0.2609	480	0	1.838		99.50 ^{5a}
42F-3001002			7	0.118		3.079 ^{5b}
42F-3001003			10	0.088		2.289 ^{5b}
43F-3001001	0.2001	480	0	1.839		99.58 ^{5a}
43F-3001002			7	0.280	14.41 ^{5a}	
43F-3001003			10	0.209	10.55 ^{5a}	
44F-3002001	0.3267	480	0	1.835	1:2	198.7 ^{5a}
44F-3002002			7	0.541		28.68 ^{5a}
44F-3002003			10	0.489		25.83 ^{5a}
45F-3002001	0.2502	480	0	1.835	1:2	198.7 ^{5a}
45F-3002002			7	1.113		59.93 ^{5a}
45F-3002003			10	1.072		57.69 ^{5a}

* El superíndice indica la curva de calibración que se usó para determinar la concentración del pentaclorofenol en solución acuosa.

Tabla A.13. Datos experimentales de la adsorción de pentaclorofenol sobre carbón activado F-300. Diámetro de partícula = 0.694 mm, T=25°C, pH=8, volumen inicial = 480 mL y volumen de la muestra = 20 mL.

Muestra No.	Masa de carbón (g)	Volumen inicial (mL)	Tiempo (días)	Absorbancia	Factor de dilución	Conc.* (mg/L)
75F-3001001	0.2609	480	0	1.776		98.58 ^{6a}
75F-3001002			7	0.032		0.714 ^{6b}
75F-3001003			10	0.023		0.489 ^{6b}
75F-3001004			14	0.008		0.187 ^{6d}
76F-3001001	0.2008	480	0	1.778		98.69 ^{6a}
76F-3001002			7	0.146		3.818 ^{6b}
76F-3001003			10	0.104		2.677 ^{6b}
76F-3001004			14	0.062		1.671 ^{6d}
76F-3001005			19	0.058		1.506 ^{6f}
77F-3002001	0.3267	480	0	1.763	1:2	195.7 ^{6a}
77F-3002002			7	0.485		13.02 ^{6a}
77F-3002003			10	0.315		8.420 ^{6b}
77F-3002004			14	0.207		5.630 ^{6d}
77F-3002005			19	0.150		4.084 ^{6f}
79F-3001001	0.1351	480	0	1.744		97.60 ^{6g}
79F-3001002			10	0.222		10.95 ^{6g}
79F-3001003			14	0.348		9.271 ^{6h}
78F-3002001	0.2501	480	0	1.776	1:2	197.2 ^{6a}
78F-3002002			7	0.625		34.00 ^{6a}
78F-3002003			10	0.513		27.73 ^{6a}
78F-3002004			14	0.400		21.30 ^{6c}
78F-3002005			19	0.349		18.63 ^{6e}
80F-3002001	0.2044	480	0	1.747	1:2	195.5 ^{6g}
80F-3002002			10	0.953		52.53 ^{6g}
80F-3002003			14	0.830		45.56 ^{6g}
80F-3002004			19	0.756		41.34 ⁶ⁱ

* El superíndice indica la curva de calibración que se usó para determinar la concentración del pentaclorofenol en solución acuosa.

Tabla A.13. Continuación

Muestra No.	Masa de carbón (g)	Volumen inicial (mL)	Tiempo (días)	Absorbancia	Factor de dilución	Conc. * (mg/L)
81F-3002001	0.1581	480	0	1.732	1:2	193.9 ^{6g}
81F-3002002			10	1.384		77.11 ^{6g}
81F-3002003			14	1.288		71.60 ^{6g}
81F-3002004			19	1.232		68.10 ⁶ⁱ
82F-3002001	0.1000	480	0	1.757	1:2	196.6 ^{6g}
82F-3002002			10	1.010	1:2	111.6 ^{6g}
82F-3002003			14	0.975	1:2	107.6 ^{6g}
82F-3002004			19	0.942	1:2	103.6 ⁶ⁱ

* El superíndice indica la curva de calibración que se usó para determinar la concentración del pentaclorofenol en solución acuosa.

Tabla A.14. Datos experimentales de la adsorción de pentaclorofenol sobre carbón activado F-300. Diámetro de partícula = 0.694 mm, T=25°C, pH=7, volumen inicial = 480 mL y volumen de la muestra = 20 mL.

Muestra No.	Masa de carbón (g)	Volumen inicial (mL)	Tiempo (días)	Absorbancia	Factor de dilución	Conc.* (mg/L)
113F3001001	0.2609	480	0	1.753		95.94 ^{9a}
113F3001002			14	0.005		0.120 ^{9b}
113F3001003			19	0.004		0.081 ^{9b}
114F3001001	0.2008	480	0	1.753		95.94 ^{9a}
114F3001002			14	0.022		0.564 ^{9b}
114F3001003			19	0.015		0.368 ^{9b}
115F3002001	0.3268	480	0	1.777	1:2	194.5 ^{9a}
115F3002002			14	0.155		4.111 ^{9b}
115F3002003			19	0.080		2.116 ^{9b}
116F3002001	0.2500	480	0	1.764	1:2	193.0 ^{9a}
116F3002002			14	0.428		22.59 ^{9a}
116F3002003			19	0.323		16.75 ^{9a}
147F3002001	0.2177	480	0	1.762	1:2	194.0 ^{9c}
147F3002002			14	0.760		41.22 ^{9c}
147F3002003			19	0.634		34.23 ^{9c}
148F3002001	0.1766	480	0	1.739	1:2	191.5 ^{9c}
148F3002002			14	1.058		57.81 ^{9c}
148F3002003			19	0.946		51.58 ^{9c}
118F3002001	0.1283	480	0	1.754	1:2	192.0 ^{9a}
118F3002002			14	1.728		94.51 ^{9a}
118F3002003			19	1.641		89.70 ^{9a}

* El superíndice indica la curva de calibración que se usó para determinar la concentración del pentaclorofenol en solución acuosa.

Tabla A.15. Datos experimentales de la adsorción de pentaclorofenol sobre carbón activado F-300. Diámetro de partícula = 0.694 mm, T=25°C, pH=6, volumen inicial = 480 mL y volumen de la muestra = 20 mL.

Muestra No.	Masa de carbón (g)	Volumen inicial (mL)	Tiempo (días)	Absorbancia	Factor de dilución	Conc. * (mg/L)
108F300501	0.1802	480	0	0.888		48.40 ^{8a}
108F300502			7	0.007		0.156 ^{8b}
108F300503			10	0.003		0.052 ^{8b}
109F300501	0.1279	480	0	0.878		47.85 ^{8a}
109F300502			7	0.032		0.832 ^{8b}
109F300503			10	0.005		0.117 ^{8b}
109F300504			14	0.004		0.052 ^{8c}
131F3001001	0.2000	480	0	1.793		95.36 ^{8e}
131F3001002			14	0.033		0.893 ^{8f}
131F3001003			19	0.006		0.159 ^{8f}
110F300501	0.1000	480	0	0.883		48.15 ^{8a}
110F300502			7	0.026		0.663 ^{8b}
110F300503			10	0.007		0.169 ^{8b}
110F300504			14	0.005		0.078 ^{8c}
111F3001001	0.1601	480	0	1.689		93.69 ^{8a}
111F3001002			7	0.261		6.916 ^{8b}
111F3001003			10	0.060		1.573 ^{8b}
111F3001004			14	0.019		0.430 ^{8c}
111F3001005			19	0.012		0.271 ^{8d}
112F3001001	0.1224	480	0	1.692		93.85 ^{8a}
112F3001002			7	0.322		16.44 ^{8a}
112F3001003			10	0.349		9.256 ^{8b}
112F3001004			14	0.165		4.347 ^{8c}
112F3001005			19	0.073		1.890 ^{8d}
161F3002001	0.1895	480	0	1.862	1:2	195.7 ^{8g}
161F3002002			14	0.560		28.99 ^{8g}
161F3002003			19	0.393		20.13 ^{8g}

* El superíndice indica la curva de calibración que se usó para determinar la concentración del pentaclorofenol en solución acuosa.

Tabla A.15. Continuación

Muestra No.	Masa de carbón (g)	Volumen inicial (mL)	Tiempo (días)	Absorbancia	Factor de dilución	Conc.* (mg/L)
162F3002001	0.1649	480	0	1.861	1:2	195.6 ^{8g}
162F3002002			14	0.820		42.73 ^{8g}
162F3002003			19	0.664		34.47 ^{8g}
134F3002001	0.1285	480	0	1.771	1:2	188.4 ^{8e}
134F3002002			14	1.493		79.34 ^{8e}
134F3002003			19	1.226		65.05 ^{8e}

* El superíndice indica la curva de calibración que se usó para determinar la concentración del pentaclorofenol en solución acuosa.

Tabla A.16. Datos experimentales de la adsorción de pentaclorofenol sobre carbón activado MG. Diámetro de partícula = 0.694 mm, T=25°C, pH=7, volumen inicial = 480 mL y volumen de la muestra = 20 mL.

Muestra No.	Masa de carbón (g)	Volumen inicial (mL)	Tiempo (días)	Absorbancia	Factor de dilución	Conc. * (mg/L)
119MG1001	0.2609	480	0	1.752		95.89 ^{9a}
119MG1002			14	0.017		0.420 ^{9b}
119MG1003			19	0.012		0.290 ^{9b}
120MG1001	0.2009	480	0	1.756		96.10 ^{9a}
120MG1002			14	0.121		3.198 ^{9b}
120MG1003			19	0.081		2.142 ^{9b}
121MG2001	0.3268	480	0	1.751	1:2	191.7 ^{9a}
121MG2002			14	0.264		13.50 ^{9a}
121MG2003			19	0.202		10.04 ^{9a}
122MG2001	0.2500	480	0	1.754	1:2	192.0 ^{9a}
122MG2002			14	0.737		39.69 ^{9a}
122MG2003			19	0.643		34.45 ^{9a}
123MG2001	0.2044	480	0	1.752	1:2	191.7 ^{9a}
123MG2002			14	1.056		57.32 ^{9a}
123MG2003			19	0.965		52.32 ^{9a}
124MG2001	0.1284	480	0	1.750	1:2	191.5 ^{9a}
124MG2002			14	0.976	1:2	105.8 ^{9a}
124MG2003			19	0.930	1:2	100.7 ^{9a}

* El superíndice indica la curva de calibración que se usó para determinar la concentración del pentaclorofenol en solución acuosa.

Tabla A.17. Datos experimentales de la adsorción de pentaclorofenol sobre carbón activado F-300. Diámetro de partícula = 0.694 mm, T=15°C, pH=12, volumen inicial = 480 mL y volumen de la muestra = 20 mL.

Muestra No.	Masa de carbón (g)	Volumen inicial (mL)	Tiempo (días)	Absorbancia	Factor de dilución	Conc. * (mg/L)
84F-3001001	0.3601	480	0	1.761		97.89 ^{7a}
84F-3001002			7	0.160		4.281 ^{7b}
84F-3001003			10	0.073		1.940 ^{7b}
84F-3001004			14	0.041		1.075 ^{7d}
85F-3001001	0.2557	480	0	1.759		97.78 ^{7a}
85F-3001002			7	0.229		6.161 ^{7b}
85F-3001003			10	0.140		3.755 ^{7b}
85F-3001004			14	0.111		2.962 ^{7d}
86F-3001001	0.2001	480	0	1.763		97.97 ^{7a}
86F-3001002			7	0.330		17.13 ^{7a}
86F-3001003			10	0.260		13.19 ^{7a}
86F-3001004			14	0.227		11.66 ^{7c}
87F-3002001	0.3202	480	0	1.769	1:2	196.6 ^{7a}
87F-3002002			7	0.898		49.20 ^{7a}
87F-3002003			10	0.792		43.22 ^{7a}
87F-3002004			14	0.739		39.83 ^{7c}
88F-3002001	0.2448	480	0	1.767	1:2	196.4 ^{7a}
88F-3002002			7	1.416		78.38 ^{7a}
88F-3002003			10	1.324		73.20 ^{7a}
88F-3001004			14	1.288		70.04 ^{7c}

* El superíndice indica la curva de calibración que se usó para determinar la concentración del pentaclorofenol en solución acuosa.

Tabla A.18. Datos experimentales de la adsorción de pentaclorofenol sobre carbón activado F-300. Diámetro de partícula = 0.694 mm, T=40°C, pH=12, volumen inicial = 480 mL y volumen de la muestra = 20 mL.

Muestra No.	Masa de carbón (g)	Volumen inicial (mL)	Tiempo (días)	Absorbancia	Factor de dilución	Conc. * (mg/L)
89F-3001001	0.6337	480	0	1.735		96.40 ^{7a}
89F-3001002			7	0.027		0.704 ^{7b}
89F-3001003			10	0.021		0.546 ^{7b}
90F-3001001	0.3601	480	0	1.730		96.16 ^{7a}
90F-3001002			7	0.096		2.558 ^{7b}
90F-3001003			10	0.061		1.624 ^{7b}
91F-3001001	0.2557	480	0	1.731		96.18 ^{7a}
91F-3001002			7	0.315		8.475 ^{7b}
91F-3001003			10	0.228		6.108 ^{7b}
92F-3001001	0.2001	480	0	1.733		96.29 ^{7a}
92F-3001002			7	0.340	17.68 ^{7a}	
92F-3001003			10	0.284	14.54 ^{7a}	
93F-3002001	0.3201	480	0	1.723	1:2	191.5 ^{7a}
93F-3002002			7	0.951		52.15 ^{7a}
93F-3002003			10	0.867		47.44 ^{7a}
94F-3002001	0.2448	480	0	1.730	1:2	192.3 ^{7a}
94F-3002002			7	1.479		81.99 ^{7a}
94F-3002003			10	1.425		78.93 ^{7a}

* El superíndice indica la curva de calibración que se usó para determinar la concentración del pentaclorofenol en solución acuosa.

Tabla A.19. Datos experimentales de adsorción de pentaclorofenol sobre carbón activado F-300. Diámetro de partícula = 0.694 mm, pH=7, T=25°C, volumen inicial = 480 mL y volumen de la muestra = 20 mL.

Muestra No.	Masa de carbón (g)	Volumen inicial (mL)	Tiempo (días)	Absorbancia	Factor de dilución	Conc.* (mg/L)
164F3004001a	1.0000	480	0	1.513	1:5	401.1 ^{11c}
164F3004002a			14	0.009		0.221 ^{11d}
164F3004003a			19	0.007		0.169 ^{11d}
151F3001001a	0.2007	480	0	1.849		98.63 ^{11a}
151F3001002a			14	0.019		0.484 ^{11b}
151F3001003a			19	0.017		0.433 ^{11b}
152F3002001a	0.2500	480	0	1.859	1:2	198.4 ^{11a}
152F3002002a			14	0.444		23.31 ^{11a}
152F3002003a			19	0.335		17.44 ^{11a}
153F3002001a	0.1767	480	0	1.850	1:2	197.4 ^{11a}
153F3002002a			14	1.143		60.79 ^{11a}
153F3002003a			19	1.045		55.55 ^{11a}
154F3002001a	0.1282	480	0	1.859	1:2	198.4 ^{11a}
154F3002002a			14	1.674		89.28 ^{11a}
154F3002003a			19	1.604		85.54 ^{11a}
163F3004001a	0.3000	480	0	1.515	1:5	401.5 ^{11c}
163F3004002a			14	1.386		146.9 ^{11c}
163F3004003a			19	1.285		136.1 ^{11c}

* El superíndice indica la curva de calibración que se usó para determinar la concentración del pentaclorofenol en solución acuosa.

Tabla A.20. Datos experimentales de la desorción de pentaclorofenol sobre carbón activado F-300. Diámetro de partícula = 0.694 mm, pH=7, T=25°C, volumen inicial = 480 mL y volumen de la muestra = 20 mL.

Muestra No.	Masa de carbón (g)	Volumen inicial (mL)	Tiempo (días)	Absorbancia	Factor de dilución	Conc.* (mg/L)
164F3004001d	1.0000	480	0	0.000		0.000 ^{12c}
164F3004002d			7	0.007		0.160 ^{12c}
164F3004003d			13	0.007		0.160 ^{12c}
151F3001001d	0.2007	480	0	0.000		0.000 ^{12a}
151F3001002d			7	0.010		0.272 ^{12a}
151F3001003d			13	0.010		0.220 ^{12b}
152F3002001d	0.2500	480	0	0.000		0.000 ^{12a}
152F3002002d			7	0.136		3.564 ^{12a}
152F3002003d			13	0.117		3.032 ^{12b}
153F3002001d	0.1767	480	0	0.000		0.000 ^{12a}
153F3002002d			7	0.267		7.009 ^{12a}
153F3002003d			13	0.278		7.269 ^{12b}
154F3002001d	0.1282	480	0	0.000		0.000 ^{12a}
154F3002002d			7	0.271		7.125 ^{12a}
154F3002003d			13	0.300		7.860 ^{12b}
163F3004001d	0.3000	480	0	0.000		0.000 ^{12c}
163F3004002d			7	0.253		13.03 ^{12d}
163F3004003d			13	0.243		12.48 ^{12d}

* El superíndice indica la curva de calibración que se usó para determinar la concentración del pentaclorofenol en solución acuosa.

Tabla A.21. Datos experimentales de adsorción de pentaclorofenol sobre carbón activado MG. Diámetro de partícula = 0.694 mm, pH=7, T=25°C, volumen inicial = 480 mL y volumen de la muestra = 20 mL.

Muestra No.	Masa de carbón (g)	Volumen inicial (mL)	Tiempo (días)	Absorbancia	Factor de dilución	Conc.* (mg/L)
155MG1001a	0.2610	480	0	1.863		99.42 ^{11a}
155MG1002a			14	0.028		0.741 ^{11b}
155MG1003a			19	0.021		0.548 ^{11b}
166MG4001a	1.0002	480	0	1.506	1:5	399.3 ^{11c}
166MG4002a			14	0.074		1.928 ^{11d}
166MG4003a			19	0.051		1.320 ^{11d}
156MG2001a	0.3268	480	0	1.848	1:2	197.2 ^{11a}
156MG2002a			14	0.320		16.65 ^{11a}
156MG2003a			19	0.262		13.54 ^{11a}
157MG2001a	0.2044	480	0	1.864	1:2	198.9 ^{11a}
157MG2002a			14	1.192		63.41 ^{11a}
157MG2003a			19	1.118		59.45 ^{11a}
158MG2001a	0.1285	480	0	1.848	1:2	197.2 ^{11a}
158MG2002a			14	1.002		106.4 ^{11a}
158MG2003a			19	1.915		102.2 ^{11a}
165MG4001a	0.3000	480	0	1.490	1:5	395.0 ^{11c}
165MG4002a			14	1.715		181.9 ^{11c}
165MG4003a			19	1.639		173.9 ^{11c}

* El superíndice indica la curva de calibración que se usó para determinar la concentración del pentaclorofenol en solución acuosa.

Tabla A.22. Datos experimentales de la desorción de pentaclorofenol sobre carbón activado MG. Diámetro de partícula = 0.694 mm, pH=7, T=25°C, volumen inicial = 480 mL y volumen de la muestra = 20 mL.

Muestra No.	Masa de carbón (g)	Volumen inicial (mL)	Tiempo (días)	Absorbancia	Factor de dilución	Conc.* (mg/L)
155MG1001d	0.2610	480	0	0.000		0.000 ^{12a}
155MG1002d			7	0.017		0.451 ^{12a}
155MG1003d			13	0.014		0.336 ^{12b}
166MG4001d	1.0002	480	0	0.000		0.000 ^{12c}
166MG4002d			7	0.028		0.726 ^{12c}
166MG4003d			13	0.016		0.391 ^{12c}
156MG2001d	0.3268	480	0	0.000		0.000 ^{12a}
156MG2002d			7	0.187		4.921 ^{12a}
156MG2003d			13	0.149		3.880 ^{12b}
157MG2001d	0.2044	480	0	0.000		0.000 ^{12a}
157MG2002d			7	0.374		9.814 ^{12a}
157MG2003d			13	0.340		8.900 ^{12b}
158MG2001d	0.1285	480	0	0.000		0.000 ^{12a}
158MG2002d			7	0.376		9.878 ^{12a}
158MG2003d			13	0.372		9.747 ^{12b}
165MG4001d	0.3000	480	0	0.000		0.000 ^{12c}
165MG4002d			7	0.333		17.30 ^{12d}
165MG4003d			13	0.300		15.55 ^{12d}

* El superíndice indica la curva de calibración que se usó para determinar la concentración del pentaclorofenol en solución acuosa.

APENDICE B

Datos experimentales de las curvas de calibración
para la determinación de la concentración del
pentaclorofenol en solución acuosa

Tabla B.1. Datos de las curvas de calibración para la determinación del pentaclorofenol en solución acuosa a T=25°C y sin ajuste de pH.

Curva 1a. Intervalo de concentración de pentaclorofenol de 10 a 100 mg/L

Concentración real (mg/L)	Absorbancia	Concentración calculada mg/L	%Desviación	% Desviación promedio
10	0.192	9.490	5.11	1.15
20	0.382	19.99	0.04	
40	0.749	40.28	-0.70	
50	0.927	50.12	-0.24	
60	1.113	60.40	-0.67	
80	1.476	80.47	-0.58	
100	1.816	99.26	0.74	

k=55.28 b=-1.123 r=0.9999

Curva 1b. Intervalo de concentración de pentaclorofenol de 2 a 10 mg/L

Concentración real mg/L	Absorbancia	Concentración calculada mg/L	% Desviación	% Desviación promedio
2	0.077	2.054	-2.68	1.04
4	0.149	3.950	1.24	
6	0.225	5.953	0.79	
8	0.304	8.034	-0.42	
10	0.379	10.01	-0.10	

k=26.34 b=0.025 r=0.9998

Curva 1c. Intervalo de concentración de pentaclorofenol de 10 a 60 mg/L

Concentración real (mg/L)	Absorbancia	Concentración calculada mg/L	%Desviación	% Desviación promedio
10	0.191	9.807	1.93	0.66
20	0.381	20.18	-0.92	
40	0.746	40.12	-0.30	
50	0.927	50.00	-0.01	
60	1.108	59.89	0.19	

k=54.61 b=-0.624 r=0.9999

Curva 1d. Intervalo de concentración de pentaclorofenol de 2 a 10 mg/L

Concentración real mg/L	Absorbancia	Concentración calculada mg/L	% Desviación	% Desviación promedio
2	0.075	2.065	-3.25	1.22
4	0.146	3.950	1.25	
6	0.222	5.968	0.53	
8	0.297	7.960	0.51	
10	0.376	10.06	-0.57	

k=26.55 b=0.073 r=0.9998

Curva 1e. Intervalo de concentración de pentaclorofenol de 10 a 100 mg/L

Concentración real (mg/L)	Absorbancia	Concentración calculada mg/L	%Desviación	% Desviación promedio
10	0.190	9.464	5.36	1.19
20	0.385	20.16	-0.78	
40	0.753	40.34	-0.84	
50	0.929	49.99	0.03	
60	1.121	60.52	-0.86	
80	1.473	79.82	0.23	
100	1.836	99.72	0.28	

k=54.84 b=-0.955 r=0.9999

Curva 1f. Intervalo de concentración de pentaclorofenol de 0.4 a 10 mg/L

Concentración real mg/L	Absorbancia	Concentración calculada mg/L	% Desviación	% Desviación promedio
0.4	0.017	0.438	-9.55	2.66
0.8	0.032	0.839	-4.87	
2.0	0.075	1.988	0.61	
4.0	0.149	3.965	0.88	
6.0	0.221	5.888	1.86	
8.0	0.301	8.026	-0.32	
10.0	0.377	10.06	-0.56	

k=26.72 b=-0.016 r=0.9998

Curva 1g. Intervalo de concentración de pentaclorofenol de 10 a 100 mg/L

Concentración real (mg/L)	Absorbancia	Concentración calculada mg/L	%Desviación	% Desviación promedio
10	0.190	9.490	5.10	1.29
20	0.381	20.04	-0.18	
40	0.740	39.86	0.36	
50	0.933	50.51	-1.03	
60	1.111	60.34	-0.57	
80	1.480	80.72	-0.89	
100	1.812	99.05	0.95	

k=55.21 b=-1.000 r=1.0000

Curva 1h. Intervalo de concentración de pentaclorofenol de 0.4 a 10 mg/L

Concentración real mg/L	Absorbancia	Concentración calculada mg/L	% Desviación	% Desviación promedio
0.4	0.019	0.413	-3.13	1.54
0.8	0.033	0.793	0.93	
2.0	0.080	2.068	-3.42	
4.0	0.150	3.969	0.79	
6.0	0.222	5.923	1.28	
8.0	0.297	7.959	0.51	
10.0	0.375	10.08	-0.76	

k=27.15 b=-0.103 r=1.0000

Curva 1i. Intervalo de concentración de pentaclorofenol de 10 a 100 mg/L

Concentración real (mg/L)	Absorbancia	Concentración calculada mg/L	%Desviación	% Desviación promedio
10	0.191	9.263	7.37	1.60
20	0.383	19.99	0.05	
40	0.748	40.38	-0.96	
50	0.930	50.55	-1.10	
60	1.104	60.27	-0.45	
80	1.464	80.39	-0.48	
100	1.800	99.16	0.84	

k=55.87 b=-1.408 r=0.9998

Curva 1j. Intervalo de concentración de pentaclorofenol de 0.4 a 10 mg/L

Concentración real mg/L	Absorbancia	Concentración calculada mg/L	% Desviación	% Desviación promedio
0.4	0.016	0.416	-3.90	1.18
0.8	0.030	0.791	1.17	
2.0	0.075	1.996	0.19	
4.0	0.149	3.979	0.53	
6.0	0.227	6.068	-1.14	
8.0	0.296	7.917	1.04	
10.0	0.375	10.03	-0.33	

k=26.79 b=-0.013 r=0.9999

Curva 1k. Intervalo de concentración de pentaclorofenol de 10 a 100 mg/L

Concentración real (mg/L)	Absorbancia	Concentración calculada mg/L	%Desviación	% Desviación promedio
10	0.190	9.526	4.74	1.07
20	0.385	20.19	-0.96	
40	0.748	40.05	-0.11	
50	0.933	50.16	-0.33	
60	1.118	60.28	-0.47	
80	1.484	80.30	-0.37	
100	1.835	99.50	0.51	

k=54.69 b=-0.870 r=0.9999

Curva 1l. Intervalo de concentración de pentaclorofenol de 0.4 a 6 mg/L

Concentración real mg/L	Absorbancia	Concentración calculada mg/L	% Desviación	% Desviación promedio
0.4	0.015	0.403	-0.85	0.70
0.8	0.029	0.785	1.84	
2.0	0.074	2.013	-0.63	
4.0	0.147	4.004	-0.10	
6.0	0.220	5.995	0.09	

k=26.28 b=-0.006 r=0.9999

Tabla B.2. Datos de las curvas de calibración para la determinación del pentaclorofenol en solución acuosa a T=25°C y sin ajuste de pH.

Curva 2a. Intervalo de concentración de pentaclorofenol de 10 a 100 mg/L

Concentración real (mg/L)	Absorbancia	Concentración calculada mg/L	%Desviación	% Desviación promedio
10	0.191	9.726	2.75	0.77
20	0.381	20.12	-0.62	
40	0.750	40.32	-0.80	
50	0.924	49.84	0.32	
60	1.108	59.91	0.15	
80	1.482	80.38	-0.48	
100	1.835	99.70	0.30	

k=54.73 b=-0.727 r=0.9999

Curva 2b. Intervalo de concentración de pentaclorofenol de 0.4 a 10 mg/L

Concentración real mg/L	Absorbancia	Concentración calculada mg/L	% Desviación	% Desviación promedio
0.4	0.120	0.418	-4.53	2.81
0.8	0.029	0.877	-9.59	
2.0	0.071	2.010	-0.49	
4.0	0.141	3.898	2.54	
6.0	0.217	5.949	0.86	
8.0	0.291	7.945	0.69	
10.0	0.371	10.10	-1.03	

k=26.98 b=0.094 r=0.9998

Curva 2c. Intervalo de concentración de pentaclorofenol de 10 a 100 mg/L

Concentración real (mg/L)	Absorbancia	Concentración calculada mg/L	%Desviación	% Desviación promedio
10	0.193	9.689	3.12	0.86
20	0.386	20.17	-0.84	
40	0.750	39.93	0.17	
50	0.936	50.03	-0.07	
60	1.120	60.02	-0.04	
80	1.504	80.87	-1.09	
100	1.843	99.28	0.72	

k=54.30 b=-0.791 r=0.9999

Curva 2d. Intervalo de concentración de pentaclorofenol de 0.4 a 10 mg/L

Concentración real mg/L	Absorbancia	Concentración calculada mg/L	% Desviación	% Desviación promedio
0.4	0.016	0.431	-7.69	2.53
0.8	0.031	0.836	-4.46	
2.0	0.075	2.023	-1.18	
4.0	0.146	3.940	1.49	
6.0	0.219	5.911	1.48	
8.0	0.295	7.963	0.46	
10.0	0.374	10.10	-0.96	

k=27.00 b=-0.001 r=0.9999

Tabla B.3. Datos de las curvas de calibración para la determinación del pentaclorofenol en solución acuosa a T=25°C y sin ajuste de pH.

Curva 3a. Intervalo de concentración de pentaclorofenol de 10 a 100 mg/L

Concentración real (mg/L)	Absorbancia	Concentración calculada mg/L	%Desviación	% Desviación promedio
10	0.191	9.329	6.71	1.67
20	0.381	19.92	0.39	
40	0.739	39.88	0.30	
50	0.937	50.92	-1.84	
60	1.110	60.56	-0.94	
80	1.466	80.41	-0.51	
100	1.799	98.98	1.03	

k=55.75 b=-1.319 r=0.9998

Curva 3b. Intervalo de concentración de pentaclorofenol de 2 a 10 mg/L

Concentración real mg/L	Absorbancia	Concentración calculada mg/L	% Desviación	% Desviación promedio
2.0	0.076	2.010	-0.54	0.28
4.0	0.150	3.984	0.40	
6.0	0.226	6.011	-0.18	
8.0	0.300	7.984	0.20	
10.0	0.376	10.01	-0.11	

k=26.67 b=-0.016 r=0.9999

Tabla B.4. Datos de las curvas de calibración para la determinación del pentaclorofenol en solución acuosa a T=25°C y pH=12.

Curva 4a. Intervalo de concentración de pentaclorofenol de 10 a 100 mg/L

Concentración real (mg/L)	Absorbancia	Concentración calculada mg/L	%Desviación	% Desviación promedio
10	0.189	9.528	4.72	1.16
20	0.378	20.00	0.00	
40	0.745	40.33	-0.83	
50	0.917	49.86	0.28	
60	1.109	60.50	-0.83	
80	1.471	80.56	-0.69	
100	1.808	99.23	0.77	

k=55.40 b=-0.943 r=0.9999

Curva 4b. Intervalo de concentración de pentaclorofenol de 0.2 a 10 mg/L

Concentración real mg/L	Absorbancia	Concentración calculada mg/L	% Desviación	% Desviación promedio
0.2	0.008	0.206	-2.75	2.51
0.4	0.016	0.423	-5.72	
0.8	0.032	0.858	-7.21	
2.0	0.074	1.999	0.05	
4.0	0.145	3.928	1.79	
6.0	0.219	5.939	1.01	
8.0	0.293	7.950	0.62	
10.0	0.372	10.10	-0.97	

k=27.17 b=-0.012 r=0.9999

Tabla B.5. Datos de las curvas de calibración para la determinación del pentaclorofenol en solución acuosa a T=25°C y pH=10.

Curva 5a. Intervalo de concentración de pentaclorofenol de 10 a 100 mg/L

Concentración real (mg/L)	Absorbancia	Concentración calculada mg/L	%Desviación	% Desviación promedio
10	0.191	9.534	4.66	1.07
20	0.385	20.13	-0.64	
40	0.752	40.17	-0.43	
50	0.936	50.22	-0.44	
60	1.115	60.00	0.01	
80	1.492	80.58	-0.73	
100	1.836	99.37	0.63	

k=54.61 b=-0.896 r=0.9999

Curva 5b. Intervalo de concentración de pentaclorofenol de 0.2 a 10 mg/L

Concentración real mg/L	Absorbancia	Concentración calculada mg/L	% Desviación	% Desviación promedio
0.2	0.012	0.216	-7.93	1.68
0.4	0.019	0.405	-1.13	
0.8	0.034	0.809	-1.10	
2.0	0.079	2.022	-1.08	
4.0	0.150	3.935	1.62	
6.0	0.226	5.983	0.28	
8.0	0.301	8.005	-0.06	
10.0	0.376	10.03	-0.26	

k=26.95 b=-0.108 r=1.0000

Tabla B.6. Datos de las curvas de calibración para la determinación del pentaclorofenol en solución acuosa a T=25°C y pH=8.

Curva 6a. Intervalo de concentración de pentaclorofenol de 10 a 100 mg/L

Concentración real (mg/L)	Absorbancia	Concentración calculada mg/L	%Desviación	% Desviación promedio
10	0.189	9.54	4.64	1.10
20	0.374	19.91	0.43	
40	0.738	40.33	-0.83	
50	0.916	50.32	-0.63	
60	1.093	60.24	-0.41	
80	1.449	80.21	-0.26	
100	1.792	99.45	0.55	

k=56.09 b=-1.065 r=0.9999

Curva 6b. Intervalo de concentración de pentaclorofenol de 0.2 a 10 mg/L

Concentración real mg/L	Absorbancia	Concentración calculada mg/L	% Desviación	% Desviación promedio
0.2	0.013	0.189	5.19	1.74
0.4	0.021	0.407	-1.74	
0.8	0.036	0.814	-1.81	
2.0	0.078	1.955	2.23	
4.0	0.156	4.074	-1.86	
6.0	0.226	5.976	0.40	
8.0	0.299	7.959	0.51	
10.0	0.375	10.02	-0.24	

k=27.17 b=-0.163 r=0.9990

Curva 6c. Intervalo de concentración de pentaclorofenol de 10 a 60 mg/L

Concentración real (mg/L)	Absorbancia	Concentración calculada mg/L	%Desviación	% Desviación promedio
10	0.189	9.661	3.38	1.36
20	0.381	20.23	-1.14	
40	0.744	40.20	-0.51	
50	0.930	50.44	-0.88	
60	1.094	59.47	0.89	

k=55.03 b=-0.739 r=0.9998

Curva 6d. Intervalo de concentración de pentaclorofenol de 0.1 a 10 mg/L

Concentración real mg/L	Absorbancia	Concentración calculada mg/L	% Desviación	% Desviación promedio
0.1	0.009	0.195	-94.7	17.24
0.2	0.012	0.277	-38.7	
0.4	0.015	0.360	9.98	
0.8	0.029	0.746	6.74	
2.0	0.073	1.959	2.04	
4.0	0.144	3.917	2.09	
6.0	0.219	5.984	0.26	
8.0	0.294	8.052	-0.65	
10.0	0.369	10.01	-0.10	

k=27.57

b=-0.053

r=0.9998

Curva 6e. Intervalo de concentración de pentaclorofenol de 10 a 50 mg/L

Concentración real (mg/L)	Absorbancia	Concentración calculada mg/L	%Desviación	% Desviación promedio
10	0.189	9.941	0.59	0.32
20	0.375	20.04	-0.19	
40	0.745	40.12	-0.31	
50	0.925	49.90	0.21	

k=54.29

b=-0.319

r=0.9999

Curva 6f. Intervalo de concentración de pentaclorofenol de 0.1 a 6 mg/L

Concentración real mg/L	Absorbancia	Concentración calculada mg/L	% Desviación	% Desviación promedio
0.1	0.008	0.125	-25.1	5.50
0.2	0.010	0.181	9.65	
0.4	0.018	0.403	-0.79	
0.8	0.032	0.792	0.94	
2.0	0.076	2.016	-0.80	
4.0	0.146	3.962	0.94	
6.0	0.220	6.020	-0.34	

k=27.81

b=-0.097

r=0.9999

Curva 6g. Intervalo de concentración de pentaclorofenol de 10 a 100 mg/L

Concentración real (mg/L)	Absorbancia	Concentración calculada mg/L	%Desviación	% Desviación promedio
10	0.192	9.194	8.06	2.26
20	0.380	19.90	0.51	
40	0.742	40.51	-1.27	
60	1.103	61.06	-1.77	
80	1.446	80.59	-0.74	
100	1.765	98.75	1.25	

k=56.93 b=-1.737 r=0.9997

Curva 6h. Intervalo de concentración de pentaclorofenol de 2 a 10 mg/L

Concentración real mg/L	Absorbancia	Concentración calculada mg/L	% Desviación	% Desviación promedio
2.0	0.076	1.996	0.20	0.66
4.0	0.150	3.974	0.65	
6.0	0.229	6.086	-1.43	
8.0	0.298	7.930	0.88	
10.0	0.376	10.02	-0.15	

k=26.73 b=-0.035 r=0.9998

Curva 6i. Intervalo de concentración de pentaclorofenol de 10 a 80 mg/L

Concentración real (mg/L)	Absorbancia	Concentración calculada mg/L	%Desviación	% Desviación promedio
10	0.192	9.641	3.59	1.19
20	0.380	20.20	-1.00	
40	0.736	40.19	-0.48	
60	1.094	60.30	-0.50	
80	1.439	79.67	0.41	

k=56.16 b=-1.141 r=0.9999

Tabla B.7. Datos de las curvas de calibración para la determinación del pentaclorofenol en solución acuosa a T=15 y 40°C y pH=12.

Curva 7a. Intervalo de concentración de pentaclorofenol de 10 a 100 mg/L

Concentración real (mg/L)	Absorbancia	Concentración calculada (mg/L)	%Desviación	% Desviación promedio
10	0.192	9.306	6.94	1.82
20	0.378	19.80	0.99	
40	0.741	40.29	-0.72	
50	0.924	50.61	-1.23	
60	1.099	60.49	-0.82	
80	1.457	80.69	-0.87	
100	1.778	98.81	1.19	

k=56.43 b=-1.529 r=0.9997

Curva 7b. Intervalo de concentración de pentaclorofenol de 0.1 a 10 mg/L

Concentración real (mg/L)	Absorbancia	Concentración calculada (mg/L)	% Desviación	% Desviación promedio
0.1	0.004	0.074	26.10	4.82
0.2	0.008	0.181	9.19	
0.4	0.016	0.397	0.74	
0.8	0.032	0.828	-3.49	
2.0	0.075	1.986	0.70	
4.0	0.153	4.086	-2.16	
6.0	0.223	5.971	0.47	
8.0	0.297	7.964	0.45	
10.0	0.373	10.01	-0.11	

k=26.93 b=-0.033 r=0.9999

Curva 7c. Intervalo de concentración de pentaclorofenol de 10 a 80 mg/L

Concentración real (mg/L)	Absorbancia	Concentración calculada (mg/L)	%Desviación	% Desviación promedio
10	0.192	9.695	3.05	0.92
20	0.379	19.99	0.05	
40	0.744	40.09	-0.21	
50	0.929	50.27	-0.54	
60	1.116	60.57	-0.94	
80	1.458	79.39	0.76	

k=55.06 b=-0.876 r=0.9999

Curva 7d. Intervalo de concentración de pentaclorofenol de 0.4 a 10 mg/L

Concentración real (mg/L)	Absorbancia	Concentración calculada (mg/L)	% Desviación	% Desviación promedio
0.4	0.180	0.442	-10.59	2.30
0.8	0.032	0.818	-2.27	
2.0	0.076	1.999	0.04	
4.0	0.149	3.959	1.03	
6.0	0.223	5.945	0.92	
8.0	0.298	7.958	0.52	
10	0.377	10.08	-0.79	

k=26.84 b=-0.041 r=0.9999

Tabla B.8. Datos de las curvas de calibración para la determinación del pentaclorofenol en solución acuosa a T=25°C y pH=6.

Curva 8a. Intervalo de concentración de pentaclorofenol de 10 a 100 mg/L

Concentración real (mg/L)	Absorbancia	Concentración calculada (mg/L)	%Desviación	% Desviación promedio
10	0.191	8.991	10.1	2.49
20	0.382	19.79	1.07	
40	0.746	40.36	-0.90	
50	0.930	50.76	-1.52	
60	1.114	61.16	-1.93	
80	1.454	80.37	-0.47	
100	1.776	98.57	1.43	

k=56.52 b=-1.805 r=0.9996

Curva 8b. Intervalo de concentración de pentaclorofenol de 0.1 a 10 mg/L

Concentración real (mg/L)	Absorbancia	Concentración calculada (mg/L)	% Desviación	% Desviación promedio
0.1	0.005	0.092	8.29	3.10
0.2	0.010	0.225	-12.4	
0.4	0.017	0.411	-2.81	
0.8	0.032	0.811	-1.33	
2.0	0.077	2.009	-0.44	
4.0	0.150	3.953	1.18	
6.0	0.225	5.950	0.84	
8.0	0.303	8.027	-0.33	
10	0.378	10.02	-0.24	

k=26.63 b=-0.041 r=1.0000

Curva 8c. Intervalo de concentración de pentaclorofenol de 0.1 a 10 mg/L

Concentración real (mg/L)	Absorbancia	Concentración calculada (mg/L)	%Desviación	% Desviación promedio
0.1	0.006	0.080	20.1	5.38
0.2	0.009	0.160	19.9	
0.4	0.018	0.401	-0.20	
0.8	0.034	0.829	-3.59	
2.0	0.080	2.059	-2.94	
4.0	0.153	4.011	-0.28	
6.0	0.225	5.937	1.06	
8.0	0.303	8.022	-0.28	
10	0.377	10.00	-0.01	

k=26.74 b=-0.081 r=1.0000

Curva 8d. Intervalo de concentración de pentaclorofenol de 0.1 a 4 mg/L

Concentración real (mg/L)	Absorbancia	Concentración calculada (mg/L)	% Desviación	% Desviación promedio
0.1	0.005	0.089	10.6	4.57
0.2	0.010	0.221	-10.7	
0.4	0.016	0.380	5.11	
0.8	0.032	0.802	-0.20	
2.0	0.078	2.015	-0.75	
4.0	0.153	3.993	0.17	

k=26.38 b=-0.042 r=1.0000

Curva 8e. Intervalo de concentración de pentaclorofenol de 10 a 100 mg/L

Concentración real (mg/L)	Absorbancia	Concentración calculada (mg/L)	%Desviación	% Desviación promedio
10	0.192	9.788	2.12	0.51
20	0.382	19.94	0.30	
40	0.763	40.30	-0.75	
50	0.945	50.02	-0.05	
60	1.134	60.12	-0.21	
80	1.506	80.00	0.00	
100	1.877	99.83	0.17	

k=53.43 b=-0.472 r=1.000

Curva 8f. Intervalo de concentración de pentaclorofenol de 0.1 a 10 mg/L

Concentración real (mg/L)	Absorbancia	Concentración calculada (mg/L)	%Desviación	% Desviación promedio
0.1	0.004	0.094	6.27	1.72
0.2	0.008	0.201	-0.55	
0.4	0.015	0.389	2.75	
0.8	0.031	0.819	-2.32	
2.0	0.076	2.027	-1.33	
4.0	0.148	3.959	1.02	
6.0	0.225	6.026	-0.44	
8.0	0.297	7.959	0.51	
10	0.374	10.03	-0.26	

k=26.84 b=-0.014 r=1.0000

Curva 8g. Intervalo de concentración de pentaclorofenol de 10 a 100 mg/L

Concentración real (mg/L)	Absorbancia	Concentración calculada (mg/L)	%Desviación	% Desviación promedio
10	0.196	9.717	2.83	0.68
20	0.390	19.98	0.08	
40	0.769	40.04	-0.11	
50	0.961	50.20	-0.41	
60	1.149	60.15	-0.26	
80	1.532	80.42	-0.53	
100	1.892	99.48	0.52	

k=52.92 b=-0.656 r=1.0000

Tabla B.9. Datos de las curvas de calibración para la determinación del pentaclorofenol en solución acuosa a T=25°C y pH=7.

Curva 9a. Intervalo de concentración de pentaclorofenol de 10 a 100 mg/L

Concentración real (mg/L)	Absorbancia	Concentración calculada (mg/L)	%Desviación	% Desviación promedio
10	0.190	9.404	5.96	1.44
20	0.379	19.86	0.68	
40	0.746	40.18	-0.44	
50	0.937	50.75	-1.50	
60	1.113	60.49	-0.82	
80	1.464	79.92	0.10	
100	1.816	99.40	0.60	

k=55.35 b=-1.112 r=0.9999

Curva 9b. Intervalo de concentración de pentaclorofenol de 0.1 a 10 mg/L

Concentración real (mg/L)	Absorbancia	Concentración calculada (mg/L)	%Desviación	% Desviación promedio
0.1	0.005	0.096	4.47	2.59
0.2	0.008	0.176	12.2	
0.4	0.016	0.389	2.66	
0.8	0.032	0.817	-2.10	
2.0	0.076	1.992	0.39	
4.0	0.153	4.049	-1.23	
6.0	0.226	5.999	0.01	
8.0	0.301	8.003	-0.03	
10	0.375	9.979	0.21	

k=26.71 b=-0.038 r=1.0000

Curva 9c. Intervalo de concentración de pentaclorofenol de 10 a 100 mg/L

Concentración real (mg/L)	Absorbancia	Concentración calculada (mg/L)	%Desviación	% Desviación promedio
10	0.189	9.430	5.70	1.63
20	0.375	19.79	1.06	
40	0.738	40.00	-0.01	
50	0.933	50.86	-1.73	
60	1.101	60.22	-0.37	
80	1.474	80.99	-1.24	
100	1.792	98.70	1.30	

k=55.69 b=-1.096 r=0.9997

Tabla B.10. Datos de las curvas de calibración para la determinación del pentaclorofenol en solución acuosa a T=25°C y sin ajuste de pH.

Curva 10a. Intervalo de concentración de pentaclorofenol de 10 a 100 mg/L

Concentración real (mg/L)	Absorbancia	Concentración calculada (mg/L)	%Desviación	% Desviación promedio
10	0.190	9.364	6.36	1.41
20	0.380	19.97	0.16	
40	0.740	40.06	-0.15	
50	0.931	50.72	-1.44	
60	1.105	60.43	-0.72	
80	1.460	80.24	-0.30	
100	1.800	99.22	0.78	

k=55.81 b=-1.239 r=0.9999

Curva 10b. Intervalo de concentración de pentaclorofenol de 2 a 10 mg/L

Concentración real (mg/L)	Absorbancia	Concentración calculada (mg/L)	%Desviación	% Desviación promedio
2.0	0.075	2.043	-2.16	0.77
4.0	0.147	3.966	0.86	
6.0	0.222	5.968	0.53	
8.0	0.298	7.997	0.04	
10	0.374	10.03	-0.26	

k=26.70 b=0.041 r=0.9999

Tabla B.11. Datos de las curvas de calibración para la determinación del pentaclorofenol en solución acuosa a T=25°C y pH=7.

Curva 11a. Intervalo de concentración de pentaclorofenol de 10 a 100 mg/L

Concentración real (mg/L)	Absorbancia	Concentración calculada (mg/L)	%Desviación	% Desviación promedio
10	0.195	9.930	0.70	0.24
20	0.382	19.96	0.20	
40	0.755	39.97	0.09	
50	0.947	50.26	-0.53	
60	1.128	59.97	0.05	
80	1.501	79.98	0.03	
100	1.873	99.93	0.07	

k=53.64 b=-0.529 r=1.0000

Curva 11b. Intervalo de concentración de pentaclorofenol de 0.1 a 10 mg/L

Concentración real (mg/L)	Absorbancia	Concentración calculada (mg/L)	%Desviación	% Desviación promedio
0.1	0.005	0.112	-12.0	3.53
0.2	0.009	0.217	-8.73	
0.4	0.016	0.402	-0.48	
0.8	0.033	0.850	-6.24	
2.0	0.076	1.983	0.84	
4.0	0.150	3.933	1.67	
6.0	0.227	5.963	0.62	
8.0	0.303	7.966	0.43	
10	0.383	10.07	-0.74	

k=26.35 b=-0.020 r=0.9999

Curva 11c. Intervalo de concentración de pentaclorofenol de 20 a 100 mg/L

Concentración real (mg/L)	Absorbancia	Concentración calculada (mg/L)	%Desviación	% Desviación promedio
20	0.384	20.09	-0.44	0.39
40	0.755	39.85	0.38	
60	1.130	59.82	0.30	
80	1.518	80.48	-0.60	
100	1.880	99.76	0.24	

k=53.26 b=-0.362 r=1.0000

Curva 11d. Intervalo de concentración de pentaclorofenol de 0.1 a 10 mg/L

Concentración real (mg/L)	Absorbancia	Concentración calculada (mg/L)	%Desviación	% Desviación promedio
0.1	0.005	0.092	7.53	1.94
0.2	0.009	0.198	0.80	
0.4	0.016	0.384	4.05	
0.8	0.032	0.808	-0.94	
2.0	0.078	2.026	-1.29	
4.0	0.151	3.959	1.02	
6.0	0.231	6.078	-1.30	
8.0	0.302	7.958	0.52	
10	0.379	9.997	0.03	

k=26.48 b=-0.040 r=1.0000

Tabla B.12. Datos de las curvas de calibración para la determinación del pentaclorofenol en solución acuosa a T=25°C y pH=7.

Curva 12a. Intervalo de concentración de pentaclorofenol de 0.1 a 10 mg/L

Concentración real (mg/L)	Absorbancia	Concentración calculada (mg/L)	%Desviación	% Desviación promedio
0.1	0.004	0.092	7.63	2.06
0.2	0.008	0.197	1.35	
0.4	0.015	0.381	4.76	
0.8	0.031	0.801	-0.09	
2.0	0.078	2.034	-1.69	
4.0	0.155	4.054	-1.35	
6.0	0.226	5.917	1.39	
8.0	0.306	8.015	-0.19	
10	0.382	10.01	-0.09	

k=26.23 b=-0.013 r=1.0000

Curva 12b. Intervalo de concentración de pentaclorofenol de 0.1 a 10 mg/L

Concentración real (mg/L)	Absorbancia	Concentración calculada (mg/L)	%Desviación	% Desviación promedio
0.1	0.005	0.091	8.80	1.69
0.2	0.009	0.196	1.82	
0.4	0.017	0.407	-1.67	
0.8	0.032	0.801	-0.13	
2.0	0.078	2.010	-0.51	
4.0	0.153	3.982	0.45	
6.0	0.229	5.980	0.33	
8.0	0.309	8.083	-1.04	
10	0.380	9.950	0.50	

k=26.29 b=-0.040 r=1.0000

Curva 12c. Intervalo de concentración de pentaclorofenol de 0.1 a 10 mg/L

Concentración real (mg/L)	Absorbancia	Concentración calculada (mg/L)	%Desviación	% Desviación promedio
0.1	0.005	0.097	3.47	1.28
0.2	0.009	0.202	-1.03	
0.4	0.018	0.413	-3.28	
0.8	0.033	0.809	-1.11	
2.0	0.077	1.996	0.19	
4.0	0.152	3.975	0.63	
6.0	0.230	6.033	-0.55	
8.0	0.302	7.932	0.84	
10	0.382	10.04	-0.43	

k=26.38 b=-0.035 r=1.0000

Curva 12d. Intervalo de concentración de pentaclorofenol de 10 a 60 mg/L

Concentración real (mg/L)	Absorbancia	Concentración calculada (mg/L)	%Desviación	% Desviación promedio
10	0.193	9.795	2.05	0.73
20	0.387	20.22	-1.10	
40	0.757	40.11	-0.26	
50	0.940	49.94	0.12	
60	1.126	59.94	0.10	

k=53.74 b=-0.578 r=1.0000