



**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE SAN LUIS POTOSÍ**

**FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS**

**CENTRO DE INVESTIGACIÓN Y ESTUDIOS DE POSGRADO**

**ADSORCIÓN DE AMPICILINA Y  
TRIMETOPRIMA EN SOLUCIÓN ACUOSA SOBRE  
DIVERSOS MATERIALES CARBONOSOS**

**TESIS QUE PARA OBTENER EL GRADO DE  
MAESTRO EN CIENCIAS EN INGENIERÍA QUÍMICA**

**P R E S E N T A :**

**I.Q. ISRAEL ORTIZ ANAYA**

**DIRECTOR DE TESIS:**

**DR. ROBERTO LEYVA RAMOS**

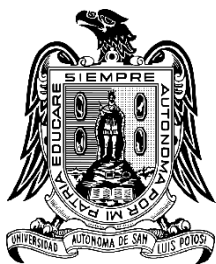


**SAN LUIS POTOSÍ, S.L.P. 22 DE OCTUBRE DEL 2020**

El programa de Maestría en Ciencias en Ingeniería Química de la Universidad Autónoma de San Luis Potosí pertenece al Programa Nacional de Posgrados de Calidad (PNPC) del CONACYT, registro 000896, en el Nivel Consolidado.  
Número de registro de la beca otorgada por CONACYT: 864069



Adsorción de Ampicilina y Trimetoprima en Solución Acuosa Sobre Diversos Materiales Carbonosos por Ortiz Anaya Israel se distribuye bajo una [Licencia Creative Commons Atribución-NoComercial-SinDerivadas 4.0 Internacional](https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/).



UNIVERSIDAD AUTONOMA DE SAN LUIS POTOSÍ

FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS

CENTRO DE INVESTIGACIÓN Y ESTUDIOS DE POSGRADO



**ADSORCIÓN DE AMPICILINA Y TRIMETOPRIMA EN  
SOLUCIÓN ACUOSA SOBRE DIVERSOS MATERIALES  
CARBONOSOS**

**TESIS QUE PARA OBTENER EL GRADO DE  
MAESTRO EN CIENCIAS EN INGENIERÍA QUÍMICA**

PRESENTA

**I.Q. ISRAEL ORTIZ ANAYA**

DIRECTOR DE TESIS

**DR. ROBERTO LEYVA RAMOS**

SINODALES

Dr. Roberto Leyva Ramos  
Presidente

---

Dra. Paola Elizabeth Díaz Flores  
Secretario

---

Dr. Raúl Ocampo Pérez  
Vocal

---

Dra. María Selene Berber Mendoza  
Vocal

---

SAN LUIS POTOSÍ, S.L.P. 22 DE OCTUBRE DEL 2020



## **DEDICATORIA**

*Dedico esta tesis a mi mamá Ma. Del Socorro Anaya Niño, que con una gran cantidad de esfuerzo, determinación y amor me dio una formación personal y académica que el día de hoy se han transformado en herramientas invaluableles; por eso, le estaré eternamente agradecido, ya que ni con todo el trabajo y esfuerzo del mundo, podre pagarle todo lo que ha invertido y renunciado por mí.*

*De igual manera, también dedico esta tesis a mi hermana Livier Ortiz Anaya, que es y ha sido un parteaguas en momentos difíciles, en los que ha sabido quien soy yo aun cuando yo mismo no lo he sabido, y que; a pesar de todo, siempre logra ver el lado positivo y sacarme una sonrisa.*

*A mi padre Federico Ortiz Monsiváis, que muy a su manera impulsó mi desarrollo personal y profesional.*



## AGRADECIMIENTOS

Las personas que nos dedicamos a estudiar como profesión, solemos perdernos. Lo hacemos con tal disfrute, goce y ganas de descubrimiento, que; a pesar de las incontables horas en los laboratorios y cubículos, realmente se siente como un breve instante. Un pequeño momento en el que se nos permite decirle adiós a nuestro yo adulto, para dar lugar a nuestro yo de niño, curiosos y soñadores, con el único deseo de salvar al mundo.

En algunas ocasiones, nos convertimos en adoradores del orden y nos volvemos gente seria. Construimos muros a nuestro alrededor y nos enfocamos en ganar medallas y diplomas, que no son más que un grito para decir, estoy aquí. En ese momento, la vida comienza a escaparse entre nuestros dedos, y en un abrir y cerrar de ojos, la vida ha sido brillante pero fugaz.

La gran tarea de todo estudioso, es precisamente encontrar el equilibrio. Hacer lo que amamos, sin abandonarnos a nosotros mismos, sin renunciar a nuestros sueños, pero afrontando la realidad. Solo así podemos convertirnos en estrellas, que aun después de marcharnos, brillan en la gente que tocamos.

A mi mamá, Ma. Del Socorro Anaya Niño, por haberme brindado su apoyo y cariño incondicional además de inculcarme los valores y competencias necesarias para desenvolverme primeramente en mi etapa de licenciatura y ahora en un posgrado.

Agradezco infinitamente a mi hermana Livier Ortiz Anaya, ya que, sin su apoyo, cariño y consejos, este trabajo no hubiera sido posible.

A mi padre, que impulso mi desarrollo académico.

A mis amigos Alejandro Bravo, Alejandro Gutiérrez, Víctor y Rodolfo, que me han acompañado a lo largo de momentos difíciles que ni siquiera se imaginan.

A mis amigos Arturo Tapia, Arturo González, Iván, Julio y Fernando, que han sabido brindarme su amistad a pesar de ser una persona tan excéntrica.

Al servicio social que me ayudó en el cuidado de los experimentos del presente trabajo, Diana Berenice Esqueda Velázquez.

A mis amigos, compañeros del laboratorio y del posgrado; Adriana, Damarys, Diana, Brenda, Génesis, Janet, Uziel, Carlos, Eyden, Elizabeth y Raúl, por acompañarme y hacerme las estadías en el laboratorio bastante amenas, a pesar de estar todos cargados de trabajo.



A las químicas Alma, Jovita y Beatriz por ofrecerme su compañía en las mañanas y las tardes, lo que hacía más ligero el trabajo.

A mi comité tutorial conformado por los Dres. Raúl, Selene y Paola, que me hicieron aportaciones importantes para el desarrollo de este trabajo.

Al Dr. Roberto Leyva Ramos y su esposa la Mtra. Rosa María Guerrero, por incluirme en su familia académica y buscar ayudarme más allá de lo que corresponde a lo académico. Son unas de las personas más maravillosas que he conocido y verdaderamente les deseo lo mejor.

A todas las personas tanto alumnos como investigadores, cuyos trabajos publicados, proporcionaron el soporte científico para la realización, justificación y fundamento de este trabajo.





### **AGRADECIMIENTOS TÉCNICOS**

A la I.Q. Araceli Juárez Martínez; Q.F.B. Alma Guadalupe De Lira Santillán; I.A. Thalia Stephanie Cadena González, por su asesoría y apoyo continuo en la realización de los experimentos del presente trabajo.

A la Dra. Adriana Isabel Moral Rodríguez, por tener la paciencia y determinación de enseñarme las metodologías experimentales y el funcionamiento de los equipos necesarios para la realización del presente trabajo.

A la Dra. Damarys Haidee Carrales Alvarado por realizar la reactivación de las fibras de carbón activado (FCA), dando como resultado a las fibras ACF800B, ACF800C y ACF800D.

A la Dra. Saraí Vega Rodríguez por su ayuda con la optimización de las moléculas de AMP y TMP en el programa Gaussian.

A las Químicas Laura Guadalupe Hernández de la Rosa y Korina Loreda Martínez, por su ayuda en el análisis de muestras de Cadmio (II) y Ampicilina por las técnicas de espectrofotometría de absorción atómica y carbono orgánico total.

Al Dr. Antonio Aragón Piña por su orientación durante los análisis de SEM de los materiales adsorbentes utilizados en este trabajo, además de su ayuda con la interpretación de los resultados obtenidos de SEM.

Al Dr. Raúl Ocampo Pérez por su ayuda con las optimizaciones de los parámetros de transporte de masa de los experimentos de velocidad de adsorción, que se realizaron en software para resolver ecuaciones diferenciales por elemento finito.





*AGRADECIMIENTOS A INSTITUCIONES*

Universidad Autónoma de San Luis Potosí (UASLP)

Centro de Investigación de Estudios de Posgrado (CIEP)

Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT)

No. CVU: 864069

Instituto de Metalurgia de la Universidad Autónoma de San Luis Potosí

Instituto de Catálisis y Petroquímica (ICP), del Consejo Superior de Investigaciones  
Científicas, Madrid (CSIC)





## RESUMEN

En el presente trabajo se estudió el equilibrio y velocidad de adsorción de Ampicilina (AMP) y Trimetoprima (TMP) en solución acuosa sobre los carbones granulares F400 y F400n, y una fibra de carbón activado (FCA). Se analizó la dependencia de la capacidad de adsorción con respecto al pH, temperatura y fuerza iónica de la solución. Además, los efectos de la concentración inicial, flujo volumétrico o velocidad de agitación, volumen de solución y masa del adsorbente sobre la velocidad de adsorción se investigaron detalladamente.

Los resultados revelaron que la capacidad de adsorción de los adsorbentes es muy dependiente del pH de la solución como consecuencia de la especiación de los adsorbatos y de la carga superficial de los adsorbentes. Por otra parte, los valores de los calores de adsorción de TMP evidenciaron que los mecanismos de adsorción son principalmente interacciones físicas; mientras que, los calores de adsorción de la AMP mostraron que se adsorbe por interacciones físicas y químicas.

Se investigó la adsorción competitiva de AMP y Cd(II) sobre el carbón F400n y la FCA. Los datos de adsorción binaria de AMP-Cd(II) sobre FCA se interpretaron satisfactoriamente por varios de los modelos de isothermas de adsorción binaria, pero ninguno de los modelos ajustó adecuadamente los datos de AMP-Cd(II) sobre F400n. Adicionalmente, se observó que la adsorción de AMP afecta ligeramente y antagónicamente la adsorción de Cd(II) sobre F400n; mientras la adsorción de Cd(II) sobre FCA influye antagónicamente la adsorción de la AMP, debido a la competencia de ambos solutos por los sitios activos.

Las velocidades de adsorción de AMP y TMP sobre la FCA son muy rápidas ya que el equilibrio se logró en 30 y 80 minutos, respectivamente; sin embargo, la velocidad de adsorción de la AMP sobre el carbón F400n resultó ser muy lenta puesto que el equilibrio se alcanzó en 3500 minutos. Las curvas de decaimiento de la concentración se interpretaron por medio de modelos difusionales, y se encontró que el transporte externo controla la velocidad de adsorción de la AMP sobre FCA. Además, la velocidad de adsorción de TMP sobre la FCA y de AMP sobre el carbón F400n, son controladas por la difusión intraparticular.

**Palabras clave:** adsorción, carbón activado, ampicilina, trimetoprima.

**ABSTRACT**

In the present work, the adsorption equilibrium and rate of Ampicillin (AMP) and Trimethoprim (TMP) in aqueous solution on granular carbons F400 and F400n, and activated carbon fiber (FCA) were studied thoroughly. The dependence of the adsorption capacity concerning the pH, temperature and ionic strength of the solution was analyzed. Furthermore, the effects of the initial concentration, volumetric flow or stirring speed, volume of solution and mass of the adsorbent on the adsorption rate were investigated in detail.

The results revealed that the adsorption capacity of the carbon materials is highly dependent on the solution pH because of the species of AMP and TMP present in the solution and the surface charge of the materials. On the other hand, the values of the heats of adsorption for TMP showed that the adsorption mechanism is mainly due to physical interactions; while, the heats of adsorption for AMP showed that it was adsorbed by physical and chemical interactions.

The competitive adsorption of AMP and Cd(II) on F400n carbon and FCA was investigated. The binary adsorption data of AMP-Cd(II) on FCA was satisfactorily interpreted by several of the binary adsorption isotherm models, but none of the models fitted the AMP-Cd(II) adsorption data on F400n adequately. Additionally, it was observed that the adsorption of AMP slightly and antagonistically affected the adsorption of Cd(II) on F400n. In contrast, the adsorption of AMP on FCA was antagonistically influenced by the adsorption of Cd(II) due to the competition of both solutes for the same active sites.

The adsorption rate of AMP and TMP on FCA was very fast since equilibrium was achieved in 30 and 80 minutes, respectively; however, the adsorption rate of AMP on the F400n carbon turned out to be very slow since equilibrium was attained in 3,500 minutes. The concentration decay curves were interpreted using the diffusional models, and it was found that the external transport controlled the adsorption rate of AMP on FCA. Besides, the adsorption rate of TMP on FCA and AMP on F400n carbon was controlled by the intraparticle diffusion.

**Key Words:** adsorption, activated carbon, ampicillin, trimethoprim.




---

**ÍNDICE**

<b>ÍNDICE DE TABLAS</b>	<b>vi</b>
<b>ÍNDICE DE FIGURAS</b>	<b>xiii</b>
<b>CAPÍTULO 1. INTRODUCCIÓN</b>	<b>1</b>
<b>CAPÍTULO 2. REVISIÓN BIBLIOGRÁFICA</b>	<b>3</b>
<b>2.1 Contaminación del Agua</b>	<b>3</b>
<b>2.2 Ampicilina</b>	<b>4</b>
2.2.1 Ampicilina en solución acuosa	5
2.2.3 Toxicidad de la Ampicilina	8
<b>2.3 Trimetoprima</b>	<b>9</b>
2.3.1 Trimetoprima en Solución Acuosa	10
2.3.2 Toxicidad de la Trimetoprima	12
<b>2.4 Presencia de Ampicilina y Trimetoprima en los Cuerpos de Agua</b>	<b>12</b>
<b>2.5 Bioacumulación de la Ampicilina y la Trimetoprima</b>	<b>14</b>
<b>2.6 Legislación Ambiental</b>	<b>15</b>
<b>2.7 Métodos de Remoción de Fármacos en Solución Acuosa</b>	<b>15</b>
2.7.1 Cloración	16
2.7.2 Ozonización	16
2.7.3 Procesos Avanzados de Oxidación	16
<b>2.8 Adsorción</b>	<b>18</b>
2.8.1 Factores que Afectan la Adsorción	18
2.8.2 Isotermas de Adsorción	19
2.8.3 Isotermas de Adsorción Multicomponente	20
<b>2.9 Materiales Adsorbentes</b>	<b>23</b>
<b>2.10 Materiales de Carbono</b>	<b>24</b>
2.10.1 Carbón Activado	25
2.10.2 Fibras de Carbón Activado	26
<b>2.11 Mecanismos de Adsorción</b>	<b>27</b>
<b>2.12 Velocidad de Adsorción</b>	<b>29</b>
<b>2.13 Modelos Difusionales</b>	<b>30</b>

2.13.1 <i>Modelo General de Difusión (MD)</i>	30
2.13.2 <i>Modelo de Difusión en el Volumen del Poro (DVP)</i>	33
2.13.3 <i>Modelo de Difusión Superficial (MDS)</i>	34
2.14 <i>Modelos Difusionales Adimensionales</i>	34
2.15 <i>Modelo de Transporte Externo de Masa (MTEM)</i>	36
2.16 <i>Modelo de Transporte Externo Adimensional</i>	36
<b>CAPÍTULO 3. JUSTIFICACIÓN, HIPÓTESIS Y OBJETIVOS</b>	<b>38</b>
<b>CAPÍTULO 4. APARATOS Y SUSTANCIAS</b>	<b>40</b>
4.1 <i>Materiales Adsorbentes</i>	40
4.2 <i>Reactivos</i>	41
4.3 <i>Soluciones Patrón</i>	42
4.4 <i>Instrumentos y Equipo Analítico</i>	43
4.5 <i>Adsorbedor Experimental de Lote</i>	45
4.6 <i>Adsorbedor de Lote de Lecho Empacado Diferencial</i>	45
4.7 <i>Adsorbedor de Lote de Tanque Agitado con Canastillas Rotatorias</i>	46
<b>CAPÍTULO 5. METODOLOGÍA EXPERIMENTAL</b>	<b>48</b>
5.1 <i>Determinación de las Propiedades de Textura de los Adsorbentes por Fisisorción de N<sub>2</sub></i>	48
5.1.1 <i>Modelo de Brunauer, Emmet y Teller (BET)</i>	48
5.1.2 <i>Modelo de Dubinin-Radushkevich (DR)</i>	49
5.1.3 <i>Modelo t-Plot</i>	50
5.1.4 <i>Propiedades de Textura Promedio</i>	51
5.2 <i>Determinación Experimental de la Fracción Hueca y la Densidad de la Partícula</i>	52
5.3 <i>Determinación de la Concentración de los Sitios Activos Superficiales</i>	52
5.4 <i>Determinación de la Distribución de la Carga Superficial y del Punto de Carga Cero</i>	54
5.5 <i>Microscopia Electrónica de Barrido (SEM)</i>	55
5.6 <i>Cuantificación de la Trimetoprima</i>	55
5.7 <i>Cuantificación de la Ampicilina</i>	56

5.7.1 <i>Determinación de la Ampicilina por HPLC</i>	56
5.7.2 <i>Determinación de la Ampicilina por TOC</i>	57
<b>5.8 <i>Cuantificación del Cadmio (II) en Solución Acuosa</i></b>	<b>57</b>
<b>5.9 <i>Método para la Obtención de los Datos Experimentales del Equilibrio Individual de Adsorción</i></b>	<b>58</b>
<b>5.10 <i>Método para la Obtención de los Datos Experimentales del Equilibrio de Adsorción Binario</i></b>	<b>59</b>
<b>5.11 <i>Velocidad de Adsorción en un Adsorbedor de Lote de Lecho Empacado</i></b>	<b>60</b>
<b>5.12 <i>Velocidad de Adsorción en un Adsorbedor de Lote de Tanque Agitado con Canastillas Rotatorias</i></b>	<b>60</b>
<b>CAPÍTULO 6. DATOS EXPERIMENTALES Y CÁLCULOS</b>	<b>62</b>
6.1 <i>Propiedades de Textura</i>	62
6.2 <i>Concentración de Sitios Activos</i>	65
6.3 <i>Distribución de la Carga Superficial y Punto de Carga Cero</i>	67
6.4 <i>Concentración de Trimetoprima, Ampicilina y Cadmio (II)</i>	69
6.5 <i>Masa Adsorbida de Trimetoprima, Ampicilina y Cadmio (II) sobre los Distintos Adsorbentes</i>	71
6.6 <i>Ajuste de los Datos Experimentales del Equilibrio de Adsorción</i>	91
6.7 <i>Calor Isostérico de Adsorción</i>	96
6.8 <i>Ajuste de los Datos Experimentales del Equilibrio de Adsorción Binaria</i>	97
6.9 <i>Datos Experimentales de la Velocidad de Adsorción</i>	98
<b>CAPÍTULO 7. RESULTADOS Y DISCUSIÓN</b>	<b>99</b>
<b>7.1 <i>Caracterización de Materiales</i></b>	<b>99</b>
7.1.1 <i>Propiedades de Textura de los Adsorbentes</i>	99
7.1.2 <i>Sitios Activos de los Adsorbentes</i>	103
7.1.3 <i>Distribución de la Carga Superficial y Punto de Carga Cero de los Adsorbentes</i>	104
7.1.4. <i>Morfología de los Materiales Adsorbentes</i>	106
<b>7.2 <i>Equilibrio de Adsorción Individual de Ampicilina y Trimetoprima</i></b>	<b>107</b>
7.2.1 <i>Comparación de las Capacidades de los Materiales F400, F400n, FCA y las Fibras de Carbón Modificadas para Adsorber Ampicilina y Trimetoprima</i>	108

7.2.2 <i>Adsorción Individual de Trimetoprima Sobre el Carbón F400</i>	111
7.2.3 <i>Adsorción Individual de Ampicilina Sobre el Carbón F400n</i>	114
7.2.4 <i>Adsorción Individual de Trimetoprima sobre la FCA</i>	116
7.2.5 <i>Adsorción Individual de Ampicilina sobre la FCA</i>	118
<b>7.3 <i>Mecanismos de Adsorción</i></b>	<b>121</b>
<b>7.4 <i>Equilibrio de Adsorción Binario</i></b>	<b>125</b>
7.4.1 <i>Superficie de Adsorción de Ampicilina y Cadmio (II) sobre la FCA</i>	127
7.4.2 <i>Superficie de Adsorción de Ampicilina y Cadmio (II) Sobre el Carbón F400n</i>	129
<b>7.5 <i>Velocidad de Adsorción de Ampicilina y Trimetoprima Sobre los Carbones F400, F400n y la FCA</i></b>	<b>131</b>
7.5.1 <i>Cálculo de los Parámetros de Transferencia de Masa</i>	131
7.5.2 <i>Velocidad de Adsorción en el Sistema AMP-FCA</i>	137
7.5.3 <i>Velocidad de Adsorción en el Sistema TMP-FCA</i>	141
7.5.4 <i>Parámetros de Transporte de Masa para los Sistemas AMP-FCA y TMP-FCA</i>	145
7.5.5 <i>Velocidad de Adsorción en el Sistema AMP-F400n</i>	148
<b>CAPÍTULO 8. CONCLUSIONES</b>	<b>152</b>
<b>REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS</b>	<b>154</b>
<b>NOMENCLATURA</b>	<b>162</b>
<b>APÉNDICE A</b>	<b>166</b>
<i>Curvas de Calibración para la Cuantificación de Ampicilina, Trimetoprima y Cadmio (II)</i>	166
<b>APÉNDICE B</b>	<b>178</b>
<i>Datos Experimentales del Equilibrio de Adsorción Individual de Trimetoprima y Ampicilina Sobre el Carbón F400, F400n, la FCA y las Fibras de Carbón Modificadas</i>	178
<b>APÉNDICE C</b>	<b>196</b>
<i>Datos Experimentales del Equilibrio Multicomponente de Ampicilina y Cadmio (II) Sobre la FCA y el Carbón F400n</i>	196



<b>APÉNDICE D</b>	<b>203</b>
<i>Datos Experimentales de las Cinéticas de Adsorción de Ampicilina y Trimetoprima</i>	<b>203</b>



*ÍNDICE DE TABLAS*

<b>Tabla 2.1.</b> Estructura optimizada de la AMP mediante DFT y el método B3LYP.	<b>5</b>
<b>Tabla 2.2.</b> Reacciones ácido-base presentes en el sistema Agua-AMP.	<b>6</b>
<b>Tabla 2.3.</b> Reacciones de formación de complejos de la AMP con metales pesados a T= 20 °C y I = 0.1 N (KNO <sub>3</sub> ).	<b>7</b>
<b>Tabla 2.4.</b> Estructura optimizada de la TMP mediante DFT y el método B3LYP.	<b>9</b>
<b>Tabla 2.5.</b> Reacciones ácido-base presentes en el sistema Agua-TMP.	<b>10</b>
<b>Tabla 2.6.</b> Reacciones de formación de complejos de la TMP con metales pesados a T = 25 °C y I = 0.1 N (KNO <sub>3</sub> ).	<b>11</b>
<b>Tabla 2.7.</b> Concentraciones de la AMP en distintos cuerpos de agua alrededor mundo.	<b>13</b>
<b>Tabla 2.8.</b> Concentraciones de la TMP en distintos cuerpos de agua alrededor mundo.	<b>13</b>
<b>Tabla 2.9.</b> Correlaciones para calcular FBA y FBC para peces con respecto a K <sub>ow</sub> .	<b>14</b>
<b>Tabla 2.10.</b> Capacidades de adsorción de diferentes adsorbentes para la AMP y TMP.	<b>24</b>
<b>Tabla 2.11.</b> Derivadas de las isothermas de adsorción.	<b>33</b>
<b>Tabla 2.12.</b> Isothermas de adsorción y derivadas en forma adimensional.	<b>35</b>
<b>Tabla 4.1.</b> Propiedades de la FCA reportadas por Kynol.	<b>40</b>
<b>Tabla 4.2.</b> Condiciones de reactivación química de las fibras de carbón activado.	<b>41</b>
<b>Tabla 4.3.</b> Reactivos y sustancias utilizados en el presente trabajo.	<b>41</b>
<b>Tabla 4.4.</b> Condiciones utilizadas en la preparación de soluciones.	<b>42</b>
<b>Tabla 4.5.</b> Instrumentos y equipo analítico.	<b>43</b>
<b>Tabla 5.1.</b> Soluciones neutralizantes y titulantes para los sitios activos.	<b>53</b>
<b>Tabla 5.2.</b> Longitudes de onda de máxima absorbancia de la TMP.	<b>56</b>



<b>Tabla 6.1.</b> Datos experimentales de la determinación de los sitios activos de los distintos materiales adsorbentes.	<b>66</b>
<b>Tabla 6.2.</b> Datos experimentales de la carga superficial del carbón F400n y la FCA.	<b>68</b>
<b>Tabla 6.3.</b> Datos experimentales de la carga superficial de las fibras ACF800B y ACF800C.	<b>68</b>
<b>Tabla 6.4.</b> Datos experimentales de la carga superficial de la ACF800D y el carbón F400.	<b>69</b>
<b>Tabla 6.5.</b> Datos experimentales del equilibrio de adsorción de AMP sobre el carbón F400. Condiciones de pH = 7, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).	<b>71</b>
<b>Tabla 6.6.</b> Datos experimentales del equilibrio de adsorción de AMP sobre la ACF800B. Condiciones de pH = 7, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).	<b>72</b>
<b>Tabla 6.7.</b> Datos experimentales del equilibrio de adsorción de AMP sobre la ACF800C. Condiciones de pH = 7, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).	<b>72</b>
<b>Tabla 6.8.</b> Datos experimentales del equilibrio de adsorción de AMP sobre la ACF800D. Condiciones de pH = 7, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).	<b>73</b>
<b>Tabla 6.9.</b> Datos experimentales del equilibrio de adsorción de TMP sobre la F400n. Condiciones de pH = 7, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).	<b>73</b>
<b>Tabla 6.10.</b> Datos experimentales del equilibrio de adsorción de TMP sobre la ACF800B. Condiciones de pH = 7, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).	<b>74</b>
<b>Tabla 6.11.</b> Datos experimentales del equilibrio de adsorción de TMP sobre la ACF800C. Condiciones de pH = 7, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).	<b>74</b>
<b>Tabla 6.12.</b> Datos experimentales del equilibrio de adsorción de TMP sobre la ACF800D. Condiciones de pH = 7, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).	<b>75</b>
<b>Tabla 6.13.</b> Datos experimentales del equilibrio de adsorción de TMP sobre el carbón F400. Condiciones de pH = 4, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).	<b>75</b>
<b>Tabla 6.14.</b> Datos experimentales del equilibrio de adsorción de TMP sobre el carbón F400. Condiciones de pH = 7, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).	<b>76</b>

<b>Tabla 6.15.</b> Datos experimentales del equilibrio de adsorción de TMP sobre el carbón F400. Condiciones de pH = 10, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).	<b>76</b>
<b>Tabla 6.16.</b> Datos experimentales del equilibrio de adsorción de TMP sobre el carbón F400. Condiciones de pH = 4, T = 25 °C y I = 0.5 N (HCl/NaOH).	<b>77</b>
<b>Tabla 6.17.</b> Datos experimentales del equilibrio de adsorción de TMP sobre el carbón F400. Condiciones de pH = 7, T = 25 °C y I = 0.5 N (HCl/NaOH).	<b>77</b>
<b>Tabla 6.18.</b> Datos experimentales del equilibrio de adsorción de TMP sobre el carbón F400. Condiciones de pH = 10, T = 25 °C y I = 0.5 N (HCl/NaOH).	<b>78</b>
<b>Tabla 6.19.</b> Datos experimentales del equilibrio de adsorción de TMP sobre el carbón F400. Condiciones de pH = 7, T = 15 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).	<b>78</b>
<b>Tabla 6.20.</b> Datos experimentales del equilibrio de adsorción de TMP sobre el carbón F400. Condiciones de pH = 7, T = 35 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).	<b>79</b>
<b>Tabla 6.21.</b> Datos experimentales del equilibrio de adsorción de AMP sobre el carbón F400n. Condiciones de pH = 5, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).	<b>79</b>
<b>Tabla 6.22.</b> Datos experimentales del equilibrio de adsorción de AMP sobre el carbón F400n. Condiciones de pH = 7, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).	<b>80</b>
<b>Tabla 6.23.</b> Datos experimentales del equilibrio de adsorción de AMP sobre el carbón F400n. Condiciones de pH = 9, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).	<b>80</b>
<b>Tabla 6.24.</b> Datos experimentales del equilibrio de adsorción de AMP sobre el carbón F400n. Condiciones de pH = 7, T = 15 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).	<b>81</b>
<b>Tabla 6.25.</b> Datos experimentales del equilibrio de adsorción de AMP sobre el carbón F400n. Condiciones de pH = 7, T = 35 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).	<b>81</b>
<b>Tabla 6.26.</b> Datos experimentales del equilibrio de adsorción de TMP sobre la FCA. Condiciones de pH = 4, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).	<b>82</b>
<b>Tabla 6.27.</b> Datos experimentales del equilibrio de adsorción de TMP sobre la FCA. Condiciones de pH = 7, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).	<b>82</b>

<b>Tabla 6.28.</b> Datos experimentales del equilibrio de adsorción de TMP sobre la FCA. Condiciones de pH = 10, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).	<b>83</b>
<b>Tabla 6.29.</b> Datos experimentales del equilibrio de adsorción de TMP sobre la FCA. Condiciones de pH = 4, T = 25 °C y I = 0.5 N (HCl/NaOH).	<b>83</b>
<b>Tabla 6.30.</b> Datos experimentales del equilibrio de adsorción de TMP sobre la FCA. Condiciones de pH = 7, T = 25 °C y I = 0.5 N (HCl/NaOH).	<b>84</b>
<b>Tabla 6.31.</b> Datos experimentales del equilibrio de adsorción de TMP sobre la FCA. Condiciones de pH = 10, T = 25 °C y I = 0.5 N (HCl/NaOH).	<b>84</b>
<b>Tabla 6.32.</b> Datos experimentales del equilibrio de adsorción de TMP sobre la FCA. Condiciones de pH = 7, T = 15 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).	<b>85</b>
<b>Tabla 6.33.</b> Datos experimentales del equilibrio de adsorción de TMP sobre la FCA. Condiciones de pH = 7, T = 35 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).	<b>85</b>
<b>Tabla 6.34.</b> Datos experimentales del equilibrio de adsorción de AMP sobre la FCA. Condiciones de pH = 5, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).	<b>86</b>
<b>Tabla 6.35.</b> Datos experimentales del equilibrio de adsorción de AMP sobre la FCA. Condiciones de pH = 7, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).	<b>86</b>
<b>Tabla 6.36.</b> Datos experimentales del equilibrio de adsorción de AMP sobre la FCA. Condiciones de pH = 9, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).	<b>87</b>
<b>Tabla 6.37.</b> Datos experimentales del equilibrio de adsorción de AMP sobre la FCA. Condiciones de pH = 7, T = 15 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).	<b>87</b>
<b>Tabla 6.38.</b> Datos experimentales del equilibrio de adsorción de AMP sobre la FCA. Condiciones de pH = 7, T = 35 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).	<b>88</b>
<b>Tabla 6.39.</b> Datos experimentales del equilibrio de adsorción competitivo de AMP y Cd(II) sobre la FCA. Condiciones de pH = 5, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).	<b>88</b>
<b>Tabla 6.40.</b> Datos experimentales del equilibrio de adsorción competitivo de AMP y Cd(II) sobre el carbón F400n. Condiciones de pH = 5, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).	<b>90</b>

- Tabla 6.41.** Constantes de las isothermas de Freundlich, Langmuir y Redlich-Peterson para la adsorción de AMP sobre el carbón F400 (A), ACF800B (B), ACF800C (C) y ACF800D (D). Condiciones de pH = 7, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH). 92
- Tabla 6.42.** Constantes de las isothermas de Freundlich, Langmuir y Redlich-Peterson para la adsorción de TMP sobre el carbón F400n (A), ACF800B (B), ACF800C (C) y ACF800D (D). Condiciones de pH = 7, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH). 92
- Tabla 6.43.** Constantes de las isothermas de Freundlich, Langmuir y Redlich-Peterson para la adsorción de TMP sobre el carbón F400 a diferentes pH. Condiciones de T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH). 93
- Tabla 6.44.** Constantes de las isothermas de Freundlich, Langmuir y Redlich-Peterson para la adsorción de TMP sobre el carbón F400 a diferentes pH y fuerza iónica alta. Condiciones de T = 25 °C y I = 0.5 N (HCl/NaOH). 93
- Tabla 6.45.** Constantes de las isothermas de Freundlich, Langmuir y Redlich-Peterson para la adsorción de TMP sobre el carbón F400 a diferentes temperaturas. Condiciones de pH = 7 y I = 0.01 N (HCl/NaOH). 93
- Tabla 6.46.** Constantes de las isothermas de Freundlich, Langmuir y Redlich-Peterson para la adsorción de AMP sobre el carbón F400n a diferentes pH. Condiciones de T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH). 94
- Tabla 6.47.** Constantes de las isothermas de Freundlich, Langmuir y Redlich-Peterson para la adsorción de AMP sobre el carbón F400n a diferentes temperaturas. Condiciones de pH = 7 y I = 0.01 N (HCl/NaOH). 94
- Tabla 6.48.** Constantes de las isothermas de Freundlich, Langmuir y Redlich-Peterson para la adsorción de TMP sobre la FCA a diferentes pH. Condiciones de T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH). 94
- Tabla 6.49.** Constantes de las isothermas de Freundlich, Langmuir y Redlich-Peterson para la adsorción de TMP sobre la FCA a diferentes pH y fuerza iónica alta. Condiciones de T = 25 °C y I = 0.5 N (HCl/NaOH). 95

<b>Tabla 6.50.</b> Constantes de las isothermas de Freundlich, Langmuir y Redlich-Peterson para la adsorción de TMP sobre la FCA a diferentes temperaturas. Condiciones de pH = 7 y I = 0.01 N (HCl/NaOH).	<b>95</b>
<b>Tabla 6.51.</b> Constantes de las isothermas de Freundlich, Langmuir y Redlich-Peterson para la adsorción de AMP sobre la FCA a diferentes pH. Condiciones de T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).	<b>95</b>
<b>Tabla 6.52.</b> Constantes de las isothermas de Freundlich, Langmuir y Redlich-Peterson para la adsorción de AMP sobre la FCA a diferentes temperaturas. Condiciones de pH = 7 y I = 0.01 N (HCl/NaOH).	<b>96</b>
<b>Tabla 6.53.</b> Datos experimentales de los calores isostéricos de los distintos sistemas estudiados.	<b>97</b>
<b>Tabla 6.54.</b> Constantes de las isothermas de Freundlich, Langmuir y Redlich-Peterson para la adsorción de AMP y Cd(II) sobre el carbón F400n y la FCA. Condiciones de pH = 5, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).	<b>98</b>
<b>Tabla 6.55.</b> Parámetros de las isothermas dinámicas de los sistemas con FCA y F400n.	<b>98</b>
<b>Tabla 7.1.</b> Propiedades de textura de los materiales adsorbentes.	<b>99</b>
<b>Tabla 7.2.</b> Concentraciones de los sitios activos de los materiales adsorbentes.	<b>103</b>
<b>Tabla 7.3.</b> Propiedades de textura de los adsorbentes después del proceso de adsorción.	<b>122</b>
<b>Tabla 7.4.</b> Parámetros para la adsorción competitiva de AMP y Cd(II) sobre el carbón F400n y la FCA.	<b>125</b>
<b>Tabla 7.5.</b> Condiciones experimentales y parámetros optimizados, de las curvas de decaimiento de la concentración del sistema AMP-FCA.	<b>137</b>
<b>Tabla 7.6.</b> Condiciones experimentales y parámetros de las curvas de decaimiento de la concentración del sistema TMP-FCA.	<b>141</b>
<b>Tabla 7.7.</b> Parámetros de restricción para el sistema TMP-FCA.	<b>145</b>



**Tabla 7.8.** Condiciones experimentales y parámetros de las curvas de decaimiento de la concentración del sistema AMP-F400n.

**148**






---

**ÍNDICE DE FIGURAS**

<b>Figura 2.1.</b> Farmacóforo de las penicilinas	<b>4</b>
<b>Figura 2.2.</b> Anillo $\beta$ -lactámico.	<b>4</b>
<b>Figura 2.3.</b> Ampicilina.	<b>5</b>
<b>Figura 2.4.</b> Diagrama de especiación de la AMP en solución acuosa.	<b>6</b>
<b>Figura 2.5.</b> Diagrama de formación de complejos de sistemas individuales de AMP con metales pesados a $T = 20\text{ }^{\circ}\text{C}$ , $I = 0.1\text{ N}$ ( $\text{KNO}_3$ ) y considerando que la actividad del catión metálico igual a 1.	<b>8</b>
<b>Figura 2.6.</b> Estructura propuesta por Alekseev et al., (2006a) para la formación de complejos de la AMP con metales divalentes.	<b>8</b>
<b>Figura 2.7.</b> Estructura propuesta por Alekseev y Demskaya (2007) para la formación de complejos de la AMP con Ag(I).	<b>8</b>
<b>Figura 2.8.</b> Trimetoprima.	<b>9</b>
<b>Figura 2.9.</b> Diagrama de especiación de la TMP en solución acuosa.	<b>10</b>
<b>Figura 2.10.</b> Diagrama de complejación de sistemas individuales de TMP con metales pesados a $T = 25\text{ }^{\circ}\text{C}$ , $I = 0.1\text{ N}$ ( $\text{KNO}_3$ ) y considerando la actividad del metal como 1.	<b>11</b>
<b>Figura 2.11.</b> Estructura propuesta por Tella y Obaleye (2011) para la formación de complejos de la TMP con Cd(II) y Co(II).	<b>12</b>
<b>Figura 2.12.</b> Ionización de los grupos funcionales del carbón activado descrito por Radovic et al., (2000) y Prahas et al., (2012).	<b>26</b>
<b>Figura 2.13.</b> Intercambio iónico entre los grupos superficiales del carbón y iones metálicos. Mecanismo descrito por Stumm y Morgan, (1996)	<b>27</b>
<b>Figura 2.14.</b> Atracción electrostática entre los grupos superficiales del carbón y iones metálicos. Mecanismo descrito por Stumm y Morgan, (1996)	<b>27</b>
<b>Figura 2.15.</b> Interacciones dispersivas $\pi$ - $\pi$ entre un benceno y la superficie del carbón. Emula el esquema propuesto por Bania et al., (2013) para benceno.	<b>28</b>

<b>Figura 2.16.</b> Interacciones $\pi$ -catión entre $\text{Li}^+$ y la superficie del carbón. Emula el esquema propuesto por Bania et al., (2013) para benceno y Litio.	28
<b>Figura 2.17.</b> Interacciones hidrofóbicas entre moléculas de agua y benceno, donde éste último se acumula sobre la superficie del adsorbente. Mecanismo descrito por Stumm y Morgan, (1996)	29
<b>Figura 2.18.</b> Etapas de transferencia de masa en el proceso de adsorción. Transporte externo de masa (TE) y transporte de masa intraparticular (TMI).	30
<b>Figura 2.19.</b> Elementos diferenciales para los balances de masa en las partículas del material adsorbente.	32
<b>Figura 2.20.</b> Elemento diferencial analizado en el balance de transporte de masa intraparticular del modelo de transporte externo de masa.	36
<b>Figura 4.1</b> Resina fenólica.	40
<b>Figura 4.2.</b> Sistema experimental del adsorbedor de lote.	45
<b>Figura 4.3.</b> Sistema de adsorción de lecho empacado por lotes.	46
<b>Figura 4.4.</b> Sistema de adsorción de tanque agitado por lotes con canastillas rotatorias.	47
<b>Figura 6.1.</b> Isotherma de adsorción-desorción de $\text{N}_2$ a 77 K del carbón activado F400n.	62
<b>Figura 6.2.</b> Forma lineal de la isoterma BET del carbón F400n en el intervalo $1.42 \times 10^{-4} \leq (P/P_0) \leq 0.127$ .	62
<b>Figura 6.3.</b> Forma lineal de la isoterma de Dubinin-Radushkevich para el carbón F400n en el intervalo de $7.16 \times 10^{-6} \leq (P/P_0) \leq 0.059$ .	63
<b>Figura 6.4.</b> Modelo t-plot para el carbón F400n en el intervalo $0.151 \leq (P/P_0) \leq 0.499$ .	64
<b>Figura 6.5.</b> Titulación de sitios básicos del carbón F400n.	65
<b>Figura 6.6.</b> Método de la primera derivada para el cálculo del volumen final de titulación.	65



<b>Figura 6.7.</b> Curvas potenciométricas de referencia y característica del carbón F400n.	<b>67</b>
<b>Figura 6.8.</b> Curva de calibración de AMP a T = 25 °C, pH = 7 y I = 0.01 N.	<b>70</b>
<b>Figura 6.9.</b> Curva de calibración de AMP-TOC a T = 25 °C, pH = 7 y I = 0.01 N.	<b>70</b>
<b>Figura 6.10.</b> Curva de calibración de TMP a T = 25 °C, pH = 7 y I = 0.01 N.	<b>70</b>
<b>Figura 6.11.</b> Curva de calibración de Cd(II) a T = 25 °C, pH = 7 y I = 0.01 N.	<b>70</b>
<b>Figura 7.1.</b> Isotermas de adsorción-desorción de N <sub>2</sub> de los materiales adsorbentes.	<b>100</b>
<b>Figura 7.2.</b> Distribución del volumen de los poros contra el diámetro de poro. Obtenidas por DFT.	<b>101</b>
<b>Figura 7.3.</b> Fracción de volumen acumulado de los poros contra el diámetro de poro. Obtenidas por DFT.	<b>103</b>
<b>Figura 7.4.</b> Distribuciones de las cargas superficiales de F400n, F400 y FCA.	<b>105</b>
<b>Figura 7.5.</b> Distribuciones de las cargas superficiales de FCA, ACF800B, ACF800C y ACF800D.	<b>106</b>
<b>Figura 7.6.</b> Fotomicrografías del carbón activado granular (CAG) F400n a distintas magnificaciones. a) 150×, b) 500×.	<b>106</b>
<b>Figura 7.7.</b> Fotomicrografías de la FCA a distintas magnificaciones. a) 500×, b) 1000×.	<b>107</b>
<b>Figura 7.8.</b> Isotermas de adsorción de la AMP sobre los materiales F400, F400n, FCA y las fibras modificadas a T = 25 °C, pH = 7 y I = 0.01 N (HCl/NaOH).	<b>108</b>
<b>Figura 7.9.</b> Efecto de las propiedades textura de los materiales adsorbentes en la capacidad de los CAs (Q <sub>550</sub> ) para adsorber AMP. a) Q <sub>550</sub> vs. S <sub>BET</sub> y b) Q <sub>550</sub> vs. L <sub>0</sub> .	<b>109</b>
<b>Figura 7.10.</b> Isotermas de adsorción de TMP sobre los materiales F400, F400n, FCA y las fibras modificadas a T = 25 °C, pH = 7 y I = 0.01 N (HCl/NaOH).	<b>110</b>
<b>Figura 7.11.</b> Efecto de las propiedades textura de los materiales adsorbentes en la capacidad de los CAs (Q <sub>200</sub> ) para adsorber TMP. a) Q <sub>200</sub> vs. S <sub>BET</sub> y b) Q <sub>200</sub> vs. L <sub>0</sub> .	<b>110</b>

<b>Figura 7.12.</b> Efecto de la acidez de CAs. a) $Q_{200}$ de TMP vs. concentración de sitios ácidos por unidad de área, b) $Q_{550}$ de AMP vs. concentración de sitios ácidos por unidad de área.	111
<b>Figura 7.13.</b> Efecto del pH sobre la capacidad de F400 para adsorber TMP a $T = 25\text{ °C}$ y $I = 0.01\text{ N}$ (HCl/NaOH).	112
<b>Figura 7.14.</b> Efecto del pH sobre la capacidad de F400 para adsorber TMP a $I = 0.5\text{ N}$ (HCl/NaOH) y $T = 25\text{ °C}$ .	113
<b>Figura 7.15.</b> Efecto de la fuerza iónica sobre la capacidad de F400 para adsorber TMP a $\text{pH} = 4$ y $T = 25\text{ °C}$ .	113
<b>Figura 7.16.</b> Efecto de la temperatura sobre la capacidad de F400 para adsorber TMP a $\text{pH} = 7$ y $I = 0.01\text{ N}$ (HCl/NaOH).	113
<b>Figura 7.17.</b> Efecto del pH sobre la capacidad de F400n para adsorber AMP a $T = 25\text{ °C}$ y $I = 0.01\text{ N}$ (HCl/NaOH).	114
<b>Figura 7.18.</b> Efecto de la temperatura sobre la capacidad de F400n para adsorber AMP a $\text{pH} = 7$ y $I = 0.01\text{ N}$ (HCl/NaOH).	115
<b>Figura 7.19.</b> Efecto del pH sobre la capacidad de FCA para adsorber TMP a $T = 25\text{ °C}$ y $I = 0.01\text{ N}$ (HCl/NaOH).	116
<b>Figura 7.20.</b> Efecto del pH sobre la capacidad de FCA para adsorber TMP a $T = 25\text{ °C}$ , $I = 0.5\text{ N}$ (HCl/NaOH).	117
<b>Figura 7.21.</b> Efecto de la temperatura sobre la capacidad de FCA para adsorber TMP a $\text{pH} = 7$ y $I = 0.01\text{ N}$ (HCl/NaOH).	118
<b>Figura 7.22.</b> Efecto del pH sobre la capacidad de FCA para adsorber AMP a $T = 25\text{ °C}$ y $I = 0.01\text{ N}$ (HCl/NaOH).	119
<b>Figura 7.23.</b> Efecto de la temperatura sobre la capacidad de FCA para adsorber AMP a $\text{pH} = 7$ y $I = 0.01\text{ N}$ (HCl/NaOH).	120
<b>Figura 7.24.</b> Isotermas de adsorción-desorción de $\text{N}_2$ de los CAs saturados.	123

<b>Figura 7.25.</b> Distribución de tamaño de poro de los CAs saturados. Obtenidos por DFT.	123
<b>Figura 7.26.</b> Análisis elemental del carbón F400n después de adsorber AMP. a) Punto de análisis, b) Elementos en la superficie del carbón F400n.	124
<b>Figura 7.27.</b> Análisis elemental de la FCA después de adsorber AMP. a) Punto de análisis, b) Elementos en la superficie de la FCA.	124
<b>Figura 7.28.</b> Comparación entre la $q_{cal}$ y $q_{exp}$ para modelo FME para el sistema FCA-AMP-Cd(II).	127
<b>Figura 7.29.</b> Comparación entre la $q_{cal}$ y $q_{exp}$ para el modelo MLE para el sistema F400n-AMP-Cd(II).	127
<b>Figura 7.30.</b> Superficie de adsorción de $q_{AMP}$ sobre la FCA a concentraciones de AMP y Cd(II) a pH = 5, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).	128
<b>Figura 7.31.</b> Masa de AMP adsorbida sobre la FCA a diferentes isoconcentraciones de Cd(II) a pH = 5, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).	128
<b>Figura 7.32.</b> Superficie de adsorción de $q_{Cd}$ sobre la FCA a concentraciones de AMP y Cd(II) a pH = 5, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).	129
<b>Figura 7.33.</b> Masa de Cd(II) adsorbido sobre la FCA a diferentes isoconcentraciones de AMP a pH = 5, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).	129
<b>Figura 7.34.</b> Superficie de adsorción de $q_{AMP}$ sobre F400n a concentraciones de AMP y Cd(II) sobre el carbón F400n a pH = 5, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).	130
<b>Figura 7.35.</b> Masa de AMP adsorbida en F400n a diferentes isoconcentraciones de Cd(II) a pH = 5, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).	130
<b>Figura 7.36.</b> Superficie de adsorción de $q_{Cd}$ sobre F400n a concentraciones de AMP y Cd(II) a pH = 5, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).	130
<b>Figura 7.37.</b> Masa de Cd(II) adsorbido sobre F400n a diferentes isoconcentraciones de AMP a pH = 5, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).	130

- Figura 7.38.** Fotomicrografía de la fibra de carbón activado (FCA) utilizada en la determinación del diámetro de la fibrilla ( $d_f$ ). Magnificación de 750 $\times$ . 134
- Figura 7.39.** Comparación de las predicciones de los modelos de MTEM a) y de DVP b) para el experimento C3-FCAAMP. Las estimaciones con el modelo DVP se hicieron con el valor óptimo de  $k_L$ . 138
- Figura 7.40.** Efecto de la difusividad efectiva sobre la concentración adimensional, en el centro de la FCA ( $\xi = 0$ ) para el experimento C3-FCAAMP. 139
- Figura 7.41.** Curvas de decaimiento de la concentración de AMP sobre la FCA a diferentes concentraciones iniciales (C1-FCAAMP ( $\circ$ ), C3-FCAAMP ( $\square$ ), C4-FCAAMP ( $\diamond$ )). 139
- Figura 7.42.** Curvas de decaimiento de la concentración de AMP sobre la FCA a diferentes masas de adsorbente (C3-FCAAMP ( $\circ$ ), C9-FCAAMP ( $\square$ ) y C10-FCAAMP ( $\diamond$ )). 140
- Figura 7.43.** Curvas de decaimiento de la concentración de AMP sobre la FCA a diferentes volúmenes iniciales de solución (C3-FCAAMP ( $\square$ ), C5-FCAAMP ( $\diamond$ ) y C6-FCAAMP ( $\circ$ )). 140
- Figura 7.44.** Curvas de decaimiento de la concentración de AMP durante la adsorción sobre la FCA a diferentes flujos volumétricos (C3-FCAAMP ( $\square$ ), C7-FCAAMP ( $\diamond$ ) y C8-FCAAMP ( $\circ$ )). 140
- Figura 7.45.** Comparación entre los modelos de difusión en el volumen del poro (DVP) y de transporte externo (MTEM). Experimento C7-FCATMP ( $\circ$ ). 142
- Figura 7.46.** Efecto de la difusividad efectiva sobre la concentración adimensional, en la frontera ( $\xi = 1$ ) y en el centro de la FCA ( $\xi = 0$ ) para el experimento C7-FCATMP. 143
- Figura 7.47.** Perfiles intraparticulares de concentración adimensional de TMP, en el modelo de difusión en el volumen del poro para el experimento C7-FCATMP. 143

- Figura 7.48.** Curvas de decaimiento de la concentración de TMP sobre la FCA a diferentes concentraciones iniciales (C1-FCATMP (○), C3-FCATMP (□) y C4-FCATMP (◇)). 143
- Figura 7.49.** Curvas de decaimiento de la concentración de TMP sobre la FCA a diferentes masas de adsorbente (C3-FCATMP (○), C8-FCATMP (□) y C9-FCATMP (◇)). 143
- Figura 7.50.** Curvas de decaimiento de la concentración de TMP sobre la FCA a diferentes flujos volumétricos (C3-FCATMP (○), C6-FCATMP (□), C7-FCATMP (◇)). 144
- Figura 7.51.** Curvas de decaimiento de la concentración estimadas con la  $(D_{ep})_{prom}$  y la correlación encontrada para  $N_{Sh}$ . Experimentos C7-FCATMP (○) y C8-FCATMP (□). 147
- Figura 7.52.** Curvas de decaimiento de la concentración estimadas con la correlación encontrada para  $N_{Sh}$ . Experimentos C1-FCAAMP (○) y C8-FCAAMP (□). 147
- Figura 7.53.** Comparación entre los modelos de difusión en el volumen del poro (DVP) y el de transporte externo (MTEM) para el experimento C3-F400nAMP (○). 149
- Figura 7.54.** Perfiles intraparticulares de concentración adimensional de AMP, en el modelo de difusión en el volumen del poro en el experimento C3-F400nAMP. 150
- Figura 7.55.** Efecto de la difusividad efectiva sobre la concentración adimensional, en el centro del carbón F400n ( $\xi = 0$ ) para el experimento C3-F400nAMP. 150
- Figura 7.56.** Curvas de decaimiento de la concentración de AMP durante la adsorción sobre el carbón F400n a diferentes concentraciones iniciales (C1-F400nAMP (○), C2-F400nAMP (□) y C3-F400nAMP (◇)). 150
- Figura 7.57.** Efecto del coeficiente de transporte externo de masa sobre el experimento C3-F400nAMP (◇). 151

## *CAPÍTULO 1. INTRODUCCIÓN*

El agua es uno de los recursos más importantes para los seres vivos puesto que se requiere para la subsistencia de estos; sin embargo, la humanidad ha abusado de su explotación considerando que se trata de un recurso inagotable. Actualmente, la mayor parte de los cuerpos de agua del planeta se encuentran contaminados debido a actividades humanas tales como la agricultura, ganadería, industria metal mecánico, industria química, industria farmacéutica e industria energética, y que, aunada a la contaminación de origen natural, descargan o transportan contaminantes orgánicos e inorgánicos en los cuerpos de agua.

Los compuestos farmacéuticos y productos de cuidado personal, por sus siglas en inglés PPCPs, son un conjunto de compuestos orgánicos cuya función principal es coadyuvar en el cuidado personal del consumidor y para curar o prevenir enfermedades. La presencia de PPCPs en el agua representa un riesgo a la salud ya que son persistentes, son descargados constantemente a las aguas, y permanecen en concentraciones traza. Por esta razón, muchos de los PPCPs son considerados contaminantes emergentes. Los antibióticos pertenecen a los PPCPs y han atraído mucha atención por parte de la comunidad científica, ya que su presencia en los sistemas acuáticos modifica la microbiota de los ecosistemas y fomenta la resistencia de las bacterias. Una situación realmente alarmante, es que no hay normatividad para regular sus niveles en los cuerpos de agua en la gran mayoría de los países del mundo, y se estima que en el año 2050, las muertes anuales por enfermedades fármaco-resistentes será de 10 millones.

Dos antibióticos ampliamente utilizados son la Ampicilina (AMP) como antibiótico de amplio espectro y la Trimetoprima (TMP) como antibiótico específico para infecciones renales. Ambos antibióticos han sido detectados en los cuerpos de agua alrededor del globo terráqueo en concentraciones traza.

Normalmente, las plantas de tratamiento de aguas residuales actuales constan de tres tipos de tratamientos que se conocen como primarios, secundarios y terciarios. En general, los contaminantes orgánicos tales como los PPCPs o los pesticidas, no se descomponen o degradan eficientemente en los tratamientos biológicos para lograr un elevado grado de mineralización. Por este motivo, se han propuesto varios procesos de tratamientos terciarios para eliminar estos compuestos orgánicos persistentes. Entre estos métodos se pueden

mencionar a la cloración, ozonización, fotólisis, procesos avanzados de oxidación y adsorción.

La adsorción es apropiada para el tratamiento de aguas con contaminantes aun en concentraciones traza. Se han sintetizado o probado una gran diversidad de adsorbentes, entre los que destacan, arcillas y zeolitas naturales, alúmina activada, silicio poroso, resinas poliméricas y diversos materiales carbonosos. Las características más importantes de los materiales adsorbentes incluyen que sean económicos, que se puedan regenerar, posean altas capacidades de adsorción y que la velocidad de adsorción sea rápida.

Los materiales carbonosos se han utilizado ampliamente en la adsorción de contaminantes orgánicos por su alto grado de afinidad a estos, lo cual se debe a las interacciones químicas, electrostáticas, y principalmente a las interacciones dispersivas tipo  $\pi$ - $\pi$ .

La investigación desarrollada en este trabajo contribuye a la comprensión y optimización de los procesos de adsorción para la remoción de contaminantes emergentes de los cuerpos de agua, tales como los antibióticos. Los adsorbentes utilizados son fibra de carbón activado (FCA), tres FCA modificadas y dos carbones activados granulares denominados F400 y F400n. El objetivo principal de este estudio es evaluar el equilibrio de adsorción de AMP y TMP sobre los anteriores adsorbentes carbonosos y analizar el efecto de los distintos parámetros de operación (pH, temperatura y fuerza iónica) sobre la capacidad de adsorción. Además, se examinará el efecto de competencia de un catión metálico ( $\text{Cd}^{2+}$ ) sobre la capacidad de los materiales para adsorber AMP. También, se evaluará la velocidad de adsorción de AMP y TMP sobre la FCA, y de igual manera, de AMP sobre el carbón F400n.



## ***CAPÍTULO 2. REVISIÓN BIBLIOGRÁFICA***

### ***2.1 Contaminación del Agua***

El agua es un recurso indispensable ya que se requiere para realizar todos los procesos metabólicos involucrados en el correcto funcionamiento de la fisiología de los seres vivos; sin embargo, a lo largo del tiempo, ha sido expuesta a diversos contaminantes, tanto de origen natural, como de procedencia antropogénica, que han mermado su calidad para el consumo por los seres vivos y su uso en otras actividades.

La contaminación de tipo natural del agua se relaciona principalmente con los desastres naturales, tales como erupciones volcánicas, tornados, huracanes, terremotos e incendios forestales, que favorecen tanto la emisión como la propagación de contaminantes orgánicos como inorgánicos (Young et al., 2004).

Hoy en día, la principal fuente de contaminación en el agua es la antropogénica, y los contaminantes pueden ser sustancias orgánicas e inorgánicas. Las fuentes antropogénicas más representativas son las descargas de aguas residuales de la industria metal-mecánica, química, farmacéutica, energética y descargas de otras actividades tales como agricultura y ganadería. Entre los contaminantes inorgánicos del agua destacan los metales pesados (Cd(II), Pb(II), Mn(II), Cr(III) y Cr(VI)), algunos aniones de As(V), As(III), nitratos ( $\text{NO}_3^-$ ), nitritos ( $\text{NO}_2^-$ ) y fluoruros ( $\text{F}^-$ ) (Clifford et al., 1986). En cambio, los contaminantes orgánicos presentan gran diversidad y se clasifican de varias formas, entre las cuales destacan los compuestos Farmacéuticos y Productos de Cuidado Personal o PPCPs por sus siglas en inglés.

En general, los PPCPs se refieren a un gran número de sustancias orgánicas de gran consumo social que incluyen los siguientes compuestos: i) productos farmacéuticos de muy diversa naturaleza prescritos para el tratamiento y prevención de enfermedades en seres humanos y animales; ii) cosméticos (cremas, perfumes, fragancias, maquillaje); iii) productos para el hogar (desengrasantes, limpia cristales, detergentes). El principal problema ambiental que presentan los PPCPs es que son persistentes en el medio ambiente; es decir que los PPCPs no se descomponen o biodegradan por microorganismos. Además, estos contaminantes se están emitiendo continuamente a las fuentes de aguas y permanecen en concentraciones traza por largos periodos de tiempo. Así mismo, se desconocen los efectos tóxicos que pueden causar a los seres vivos.





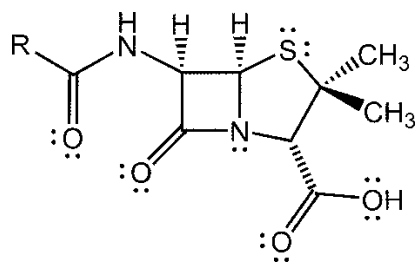
Los productos farmacéuticos y en especial los antibióticos en las aguas, han recibido gran atención ya que modifican la microbiota de los ecosistemas, fomentando la resistencia de los organismos patógenos a los seres vivos (Daughton y Ternes, 1999). Los antibióticos se definen como compuestos químicos sintetizados parcial o totalmente a través del metabolismo secundario de microorganismos vivos, que tienen la capacidad de inhibir la actividad microbiológica.

La constante descarga de antibióticos a las fuentes de agua ha generado bacterias altamente resistentes. Por ejemplo, la resistencia hacia la Bencilpenicilina (Penicilina G) ha estado aumentando en Inglaterra, ya que antes de su lanzamiento al mercado tenía una efectividad cercana al 90 % contra los *staphylococcus aureus*, y después, disminuyó hasta un 40 %. Sin embargo, hoy en día, la efectividad de este antibiótico es de únicamente 10 % (Fernandes et al., 2013).

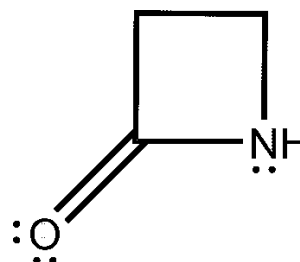
## 2.2 Ampicilina

En 1928, Alexander Fleming observó por primera vez la naturaleza bactericida de la penicilina en una muestra contaminada de *staphylococcus aureus* usando *penicillium notatum*. Posteriormente, se realizaron las primeras pruebas de este medicamento en 1940 y esto originó el término antibiótico. Las primeras penicilinas se sintetizaban mediante fermentaciones y eran una combinación de Fenoximetilpenicilina (Penicilina V) y Bencilpenicilina (Penicilina G) (Fernandes et al., 2013).

El aumento en la resistencia de las bacterias impulsó el desarrollo de otros medicamentos, dando origen a nuevas generaciones de penicilinas con estructuras muy similares a las de sus predecesoras, entre las cuales se encuentran la Ampicilina ( $C_{16}H_{19}N_3O_4S$ ) y Amoxicilina ( $C_{16}H_{19}N_3O_5S$ ). El núcleo activo de las penicilinas también conocido como farmacóforo (Ver Figura 2.1) tiene  $\beta$ -lactama o anillo  $\beta$ -lactámico (Figura 2.2).



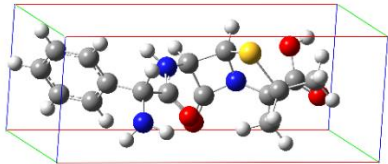
**Figura 2.1.** Farmacóforo de las penicilinas.

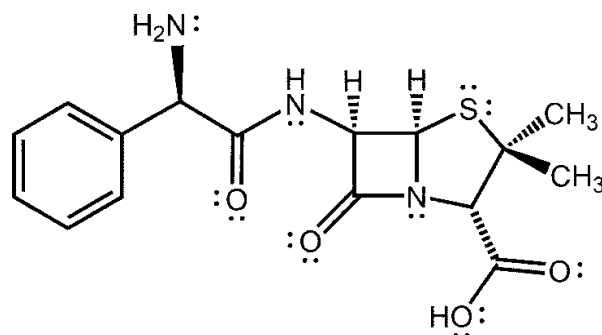


**Figura 2.2.** Anillo  $\beta$ -lactámico.

La Ampicilina (AMP) se diferencia de la Bencilpenicilina únicamente en la adición de un grupo amino a la estructura, que hace que también sea efectiva contra bacterias de tipo gramnegativa, denominándose como antibiótico de amplio espectro. La fórmula química de este fármaco (Ver Figura 2.3) está compuesta por tres estructuras principales que son: un anillo de tiazolidina, un grupo bencilamida y una  $\beta$ -lactama; por esta última, a las penicilinas se les conoce como antibióticos  $\beta$ -lactámicos (Raynor, 1997). La estructura química optimizada de la AMP se reporta en la Tabla 2.1.

**Tabla 2.1.** Estructura optimizada de la AMP mediante DFT y el método B3LYP.

<i>Compuesto</i>	<i>Estructura Química</i>	<i>Fórmula Molecular</i>	<i>Tamaño (nm)</i>
Ampicilina		$C_{16}H_{19}N_3O_4S$	X = 1.356 Y = 0.509 Z = 0.627



**Figura 2.3.** Ampicilina.

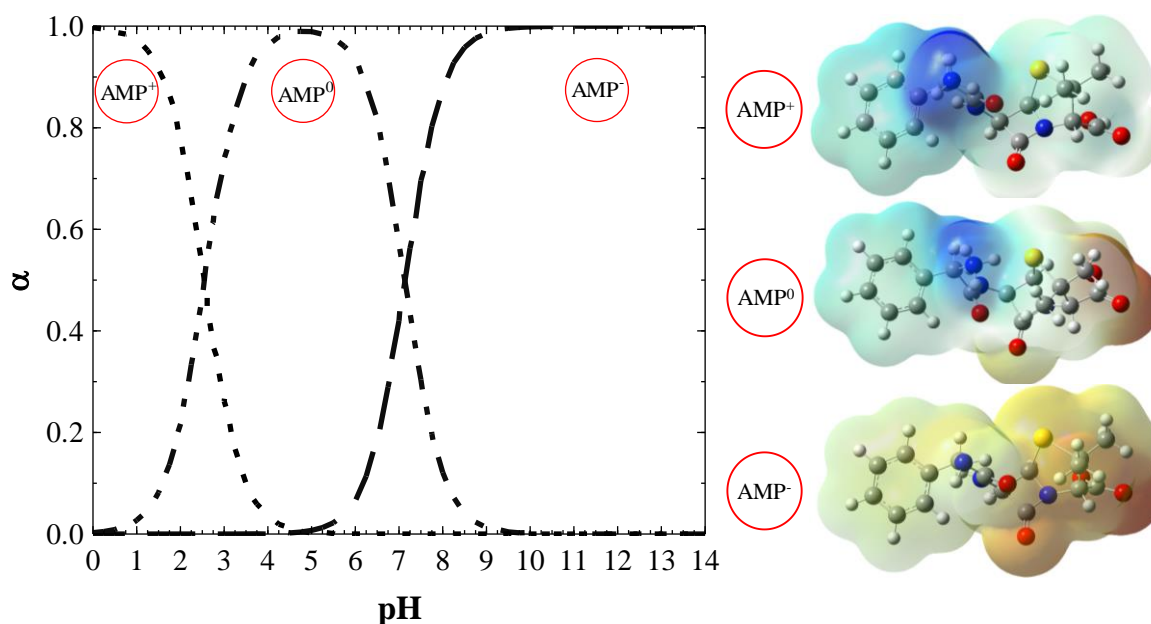
### 2.2.1 Ampicilina en solución acuosa

La solubilidad de la AMP en solución acuosa es de 7500 mg/L (Azanu et al., 2018) por lo que se puede asumir que se encuentra presente en los cuerpos de agua sin precipitarse. Además, la AMP cuenta con distintos grupos funcionales con la capacidad de aceptar o donar protones, por esta razón, puede estar cargada de distinta manera dependiendo del pH de la solución. El grupo amino más próximo al anillo aromático tiene la capacidad de aceptar protones, mientras que los grupos carboxilo y amino unidos al anillo de tiazolidina pueden donarlos. En el caso particular de este último grupo amino, no se considera en la especiación debido a que el pH de la gran mayoría de los cuerpos de agua (lagos, ríos y estanques) varía en el intervalo de 6-8 (Simate y Ndlovu, 2014).

A pH inferior de 7.14, la molécula de AMP puede aceptar un protón en el grupo amino próximo al anillo aromático, por lo que se puede afirmar que está cargada positivamente; sin embargo, simultáneamente, a pH mayor de 2.55, el grupo carboxilo unido al anillo de tiazoladina, cede su protón, ocasionando que la molécula este cargada negativamente en esa parte de su estructura. Esto promueve la formación de un zwitterión ( $\text{AMP}^\pm$ ) (ion dipolar) en el intervalo de pH de 2.55-7.14; por otra parte, la AMP está en forma catiónica ( $\text{AMP}^+$ ) a pH inferiores a 2.55 y en forma aniónica ( $\text{AMP}^-$ ) a pH superiores a 7.14. A pH superiores a 11.97, el grupo amina unido al anillo  $\beta$ -lactámico cede su protón, y la molécula de AMP está en forma aniónica divalente ( $\text{AMP}^{2-}$ ) y con carga negativa en dos sitios distintos. La Tabla 2.2 muestra las reacciones ácido-base antes descritas y la Figura 2.4 ilustra el diagrama de especiación.

**Tabla 2.2.** Reacciones ácido-base presentes en el sistema Agua-AMP.

<i>Reacción</i>	<i>pK<sub>a</sub></i>	<i>Referencia</i>
$\text{C}_{16}\text{H}_{19}\text{N}_3\text{O}_4\text{S}^+ - \text{H}^+ \rightarrow \text{C}_{16}\text{H}_{18}\text{N}_3\text{O}_4\text{S}^\pm$	2.55	(Babić et al., 2007)
$\text{C}_{16}\text{H}_{18}\text{N}_3\text{O}_4\text{S}^\pm - \text{H}^+ \rightarrow \text{C}_{16}\text{H}_{17}\text{N}_3\text{O}_4\text{S}^-$	7.14	



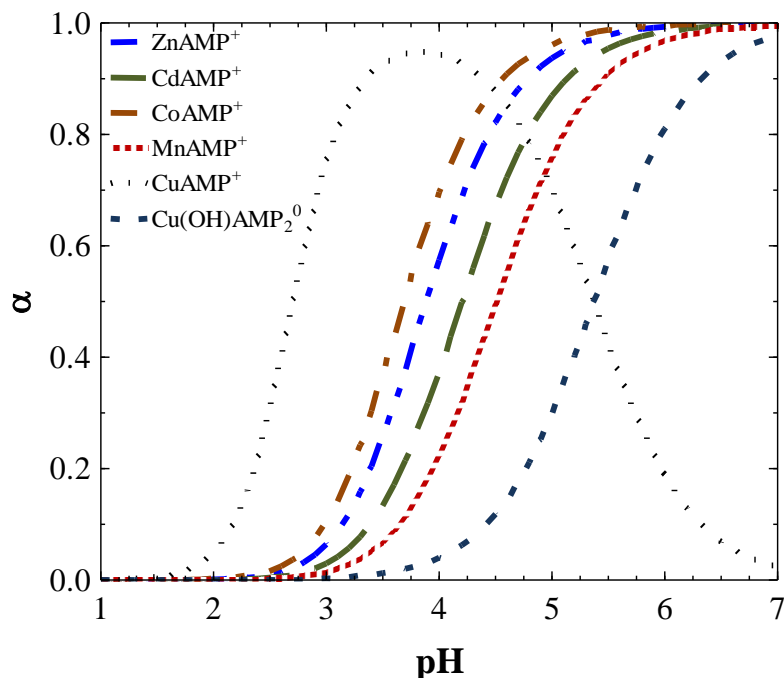
**Figura 2.4.** Diagrama de especiación de la AMP en solución acuosa.

Un aspecto sumamente importante es que la AMP en solución acuosa puede experimentar diversos cambios en su estructura ocasionando efectos adversos, mermando o modificando por completo su actividad antibacteriana. Los principales efectos que puede presentar la AMP en solución acuosa son la formación de complejos con metales, rompimiento del anillo  $\beta$ -lactámico por efecto del pH y temperatura, además de la formación de biopolímeros como resultado del rompimiento del anillo antes mencionado.

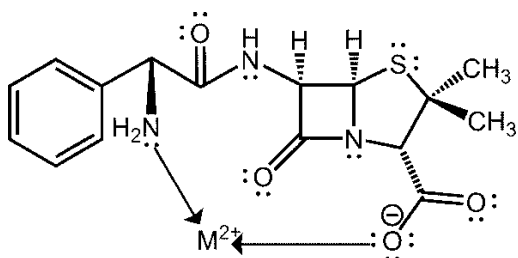
Se ha reportado que la AMP puede formar complejos con una gran diversidad de metales en solución, modificando su estructura, carga y en ocasiones sus propiedades terapéuticas. Las reacciones de formación de complejos del fármaco con metales pesados se enlistan en Tabla 2.3 y se llevan a cabo únicamente por medio de sus especies zwitteriónica y aniónica, que se presentan a pH superiores a 2.55; mientras que, los cationes metálicos se forman a pH ácidos, logrando formarse estos complejos a pH ligeramente neutros y ácidos. En la Figura 2.5 se exhibe el diagrama de formación de los complejos de la AMP con diversos cationes metálicos y en las Figuras 2.6 y 2.7 las formulas propuestas para estos.

**Tabla 2.3.** Reacciones de formación de complejos de la AMP con metales pesados a  $T=20\text{ }^{\circ}\text{C}$  y  $I=0.1\text{ N}$  ( $\text{KNO}_3$ ).

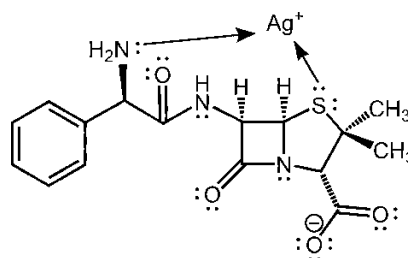
<i>Ligando</i> (L)	<i>Metal</i> (M)	<i>Reacción</i>	<i>Log(<math>\beta_i</math>)</i>	<i>Referencia</i>	
AMP <sup>-</sup>	Cu(II)	$\text{M}^{2+} + \text{L}^- \rightarrow \text{ML}^+$	5.1	(Lapshin y Alekseev, 2009)	
		$\text{M}^{2+} + 2\text{L}^- + \text{OH}^- \rightarrow \text{M}(\text{OH})\text{L}_2^0$	13.9		
	Zn(II)		3.45	(Alekseev et al., 2006a)	
	Cd(II)		3.1		
	Co(II)	$\text{M}^{2+} + \text{L}^- \rightarrow \text{ML}^+$	3.68	(Alekseev et al., 2006b)	
	Mn(II)		2.78		
	Ni(II)		4.25		
		$\text{M}^{2+} + 2\text{L}^- \rightarrow \text{M}(\text{L})_2^0$	7.54		
	Ag(I)		$\text{M}^+ + \text{L}^- \rightarrow \text{ML}^0$	3.37	(Alekseev y Demskaya, 2007)
			$\text{M}^+ + 2\text{L}^- \rightarrow \text{M}(\text{L})_2^-$	6.24	



**Figura 2.5.** Diagrama de formación de complejos de sistemas individuales de AMP con metales pesados a  $T = 20\text{ }^{\circ}\text{C}$ ,  $I = 0.1\text{ N}$  ( $\text{KNO}_3$ ) y considerando que la actividad del catión metálico igual a 1.



**Figura 2.6.** Estructura propuesta por Alekseev et al., (2006a) para la formación de complejos de la AMP con metales divalentes.



**Figura 2.7.** Estructura propuesta por Alekseev y Demskaya (2007) para la formación de complejos de la AMP con  $\text{Ag(I)}$ .

### 2.2.3 Toxicidad de la Ampicilina

A pesar de que las aminopenicilinas son relativamente no tóxicas, los principales efectos adversos suelen deberse a reacciones alérgicas y/o de hipersensibilización. Las penicilinas son los medicamentos que más comúnmente exhiben reacciones alérgicas,

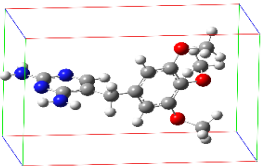
presentándose entre el 3 y 10 % de la población en general (Raynor, 1997). Estas se deben a que los grupos nucleofílicos ( $\text{OH}^-$  y  $\text{SH}^-$ ) que componen a algunas proteínas dentro del cuerpo humano, pueden interactuar con el anillo  $\beta$ -lactámico, formando complejos AMP-Proteína, e induciendo una respuesta inmunológica muy agresiva, mejor conocida como alergia (Fernandes et al., 2013).

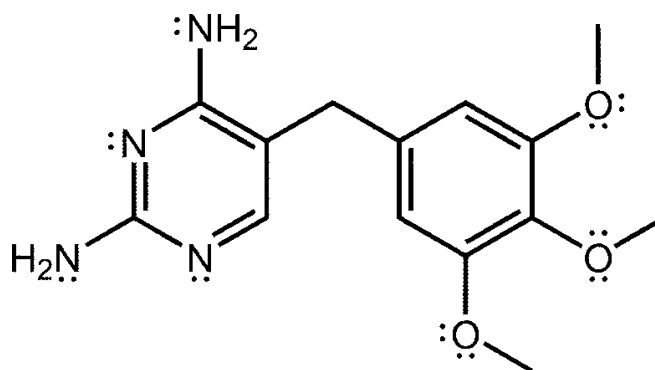
### 2.3 Trimetoprima

La Trimetoprima ( $\text{C}_{14}\text{H}_{18}\text{N}_4\text{O}_3$ ) es un antibiótico sintético que fue utilizado por primera vez en humanos en el año de 1962 (Huovinen et al., 1995), su actividad como antibiótico se resume a bacterias aerobias grampositivas y gramnegativas (Brogden et al., 1982). En 1972, se introdujo la Trimetoprima (TMP) en Finlandia para el tratamiento de infecciones renales (Eliopoulos y Huovinen, 2001).

La fórmula química de la TMP (Ver Figura 2.8) está constituida por dos estructuras principales, que son un anillo de pirimidina con dos aminas primarias en las posiciones 2,4 (2,4-diaminopirimidina) y un anillo aromático con sustituyentes metil éter en las posiciones meta y para (1,2,3-trimetoxibenceno). La estructura química optimizada de la TMP se reporta en la Tabla 2.4.

**Tabla 2.4.** Estructura optimizada de la TMP mediante DFT y el método B3LYP.

<i>Compuesto</i>	<i>Estructura Química</i>	<i>Fórmula Molecular</i>	<i>Tamaño (nm)</i>
Trimetoprima		$\text{C}_{14}\text{H}_{18}\text{N}_4\text{O}_3$	X 1.253 Y 0.704 Z 0.842



**Figura 2.8.** Trimetoprima.

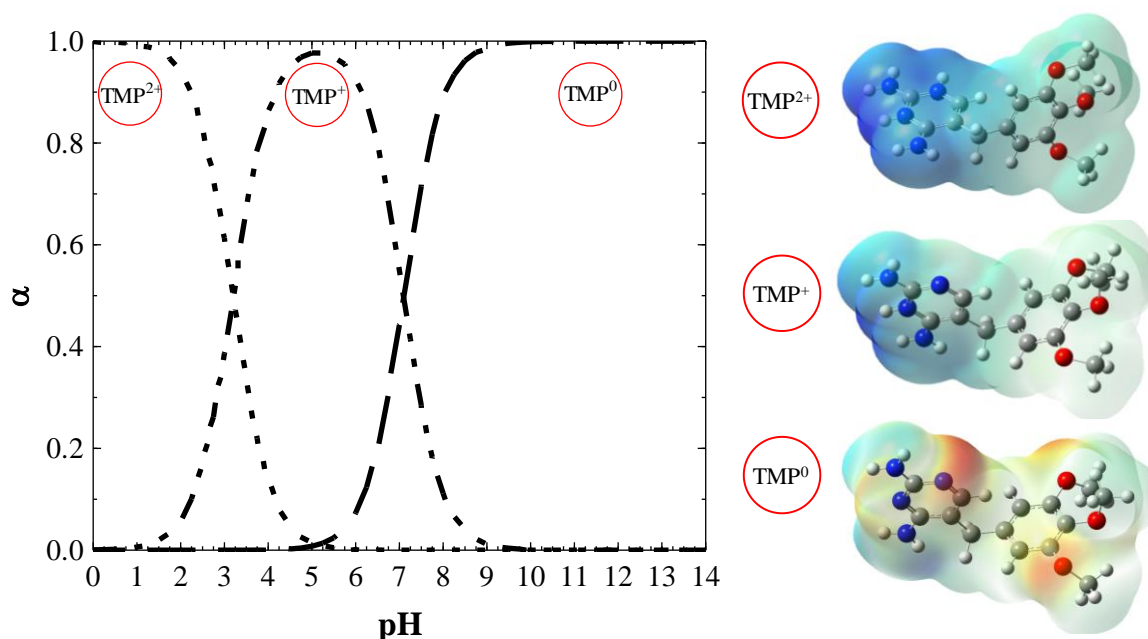
### 2.3.1 Trimetoprima en Solución Acuosa

La TMP tiene una solubilidad de 400 mg/L en solución acuosa (Azanu et al., 2018), por lo tanto, cabe la posibilidad de encontrarla en los cuerpos de agua. Además, la TMP tiene distintos grupos en su estructura con la capacidad de aceptar y donar protones, por esto puede hallarse cargada de distintas maneras dependiendo del pH de la solución.

Los nitrógenos del anillo de pirimidina tienen la capacidad para aceptar y donar un protón. A pH inferiores a 3.2, ambos nitrógenos pueden aceptar un protón ocasionando que la molécula tenga forma catiónica divalente ( $\text{TMP}^{2+}$ ); mientras que, a pH superiores, esos mismos nitrógenos pueden ceder los protones, quedando la molécula sin carga ( $\text{TMP}^0$ ) a partir de  $\text{pH} = 7.1$ . La Figura 2.9 exhibe el diagrama de especiación de la TMP y las reacciones ácido-base se presentan en la Tabla 2.5.

**Tabla 2.5.** Reacciones ácido-base presentes en el sistema Agua-TMP.

<i>Reacción</i>	<i>pK<sub>a</sub></i>	<i>Referencia</i>
$\text{C}_{14}\text{H}_{20}\text{N}_4\text{O}_3^{2+} - \text{H}^+ \rightarrow \text{C}_{14}\text{H}_{19}\text{N}_4\text{O}_3^+$	3.2	(Dodd y Huang, 2007)
$\text{C}_{14}\text{H}_{19}\text{N}_4\text{O}_3^+ - \text{H}^+ \rightarrow \text{C}_{14}\text{H}_{18}\text{N}_4\text{O}_3^0$	7.1	



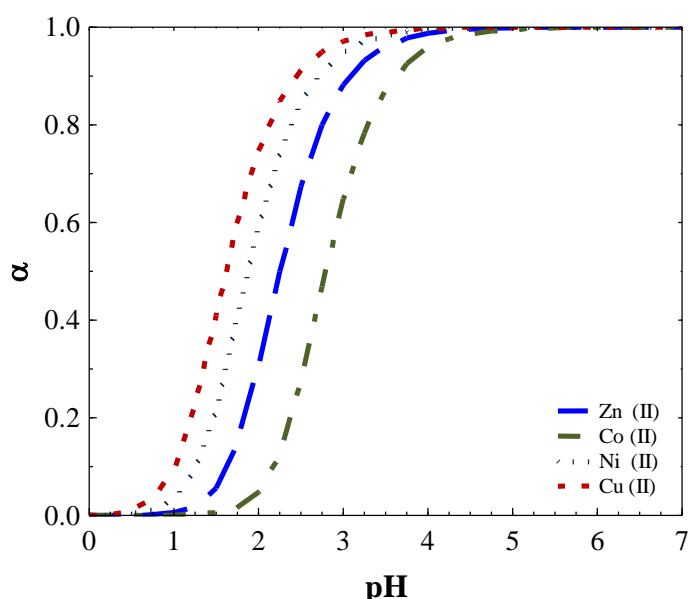
**Figura 2.9.** Diagrama de especiación de la TMP en solución acuosa.

La molécula de la TMP es sumamente estable en solución acuosa, y únicamente es susceptible a ser degradada bajo ciertas condiciones, como lo son exposición directa al sol y altas temperaturas (Bergh et al., 1989). A pesar de que la molécula de la TMP es sumamente estable, se puede fotodegradar catalíticamente (Luo et al., 2012).

La TMP en solución acuosa puede formar complejos con metales pesados que tienen formulas químicas que se muestran en la Figura 2.11 y Tabla 2.6. Los complejos resultantes son bastante estables a presión atmosférica; sin embargo, son poco solubles en agua y se precipitan inmediatamente después de que se forman (Tella y Obaleye, 2011). La Figura 2.10 ilustra el diagrama de formación de los complejos de TMP con metales pesados en solución acuosa.

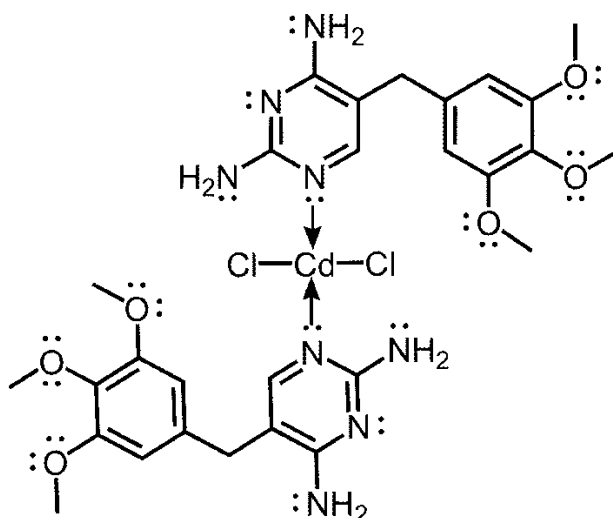
**Tabla 2.6.** Reacciones de formación de complejos de la TMP con metales pesados a  $T = 25\text{ }^{\circ}\text{C}$  y  $I = 0.1\text{ N}$  ( $\text{KNO}_3$ ).

<i>Ligando (L)</i>	<i>Metal (M)</i>	<i>Reacción</i>	<i>Log(<math>\beta_i</math>)</i>	<i>Referencia</i>
TMP	Cu (II)	$\text{MX}_2 \cdot n\text{H}_2\text{O} + 2\text{L} \rightarrow \text{ML}_2\text{X}_2 + n\text{H}_2\text{O}$	11.27	(Tella y Obaleye, 2010)
	Zn (II)		10	
	Ni (II)		10.75	
	Co (II)		8.92	



**Figura 2.10.** Diagrama de complejación de sistemas individuales de TMP con metales pesados a  $T = 25\text{ }^{\circ}\text{C}$ ,  $I = 0.1\text{ N}$  ( $\text{KNO}_3$ ) y considerando la actividad del metal como 1.





**Figura 2.11.** Estructura propuesta por Tella y Obaleye (2011) para la formación de complejos de la TMP con Cd(II) y Co(II).

### 2.3.2 Toxicidad de la Trimetoprima

La presencia del fármaco directamente en las aguas puede ocasionar la disminución de las poblaciones de cianobacterias y crustáceos como las *Dafnias* (Kolar et al., 2014); mientras que la ocurrencia en aguas cuyo destino final son los suelos, puede dificultar la respiración de los mismos, retardar la germinación de las semillas presentes y el crecimiento de las plantas (Liu et al., 2009).

### 2.4 Presencia de Ampicilina y Trimetoprima en los Cuerpos de Agua

Una de las primeras detecciones de productos farmacéuticos en aguas de tratamiento se registró en 1976, en la ciudad de Kansas, Estados Unidos. Subsecuentemente se realizaron detecciones de 25 fármacos en el río Lee, ubicado en el Reino Unido, y posteriormente se encontró que estos compuestos estaban presentes en una gran cantidad de cuerpos de agua a lo largo del globo terráqueo (Fekadu et al., 2019).

La AMP y la TMP no se han encontrado en concentraciones importantes que pudiesen causar daños directos a la salud; no obstante, si se han encontrado en diversos cuerpos de agua a lo largo del mundo, sobre todo en aguas tratadas y efluentes provenientes de hospitales, como se puede observar en las Tablas 2.7 y 2.8.

**Tabla 2.7.** Concentraciones de la AMP en distintos cuerpos de agua alrededor mundo.

<i>Concentración (ng/L)</i>	<i>Localización</i>	<i>Referencia</i>
33	Plantas de tratamiento al sur de la India	(Prabhasankar et al., 2016)
370	Planta de tratamiento de agua Kumamoto, Japón	(Matsuo et al., 2011)
700	Descarga de agua de hospital Eldorant, Kenya	(Kimosop et al., 2016)
17100	Planta de tratamiento de aguas en Morelia, México	(Zacarías et al., 2017)
238080	Planta de tratamiento de aguas en Pensilvania, Estado Unidos	(Kibuye et al., 2019)
324	Descarga de agua de hospitales en Kusami, Ghana	(Azanu et al., 2018)
50	Planta de tratamiento de aguas en el atlántico medio, Estados Unidos	(Kulkarni et al., 2017)

**Tabla 2.8.** Concentraciones de la TMP en distintos cuerpos de agua alrededor mundo.

<i>Concentración (ng/L)</i>	<i>Localización</i>	<i>Referencia</i>
123.7	Cuenca del río Paraopeba, Brasil	(de Barros et al., 2018)
360	Planta de tratamiento de agua Bogotá, Colombia	(Serna-Galvis et al., 2019)
1066	Plantas de tratamiento al sur de la India	(Prabhasankar et al., 2016)
50	Planta de tratamiento de agua Kumamoto, Japón	(Matsuo et al., 2011)
9800	Planta de tratamiento en Pensilvania, Estado Unidos	(Kibuye et al., 2019)
11383	Kenya	(Fekadu et al., 2019)
949	Planta de tratamiento de aguas en Taipe, Taiwan	(Lin et al., 2009)

### 2.5 Bioacumulación de la Ampicilina y la Trimetoprima

Se denomina bioacumulación al proceso en que una sustancia, ya sea orgánica o inorgánica, es absorbida por un organismo vivo por cualquier medio de exposición natural o antropogénico. También, se puede definir como el resultado de procesos competitivos de absorción (dieta y respiración) de una sustancia con respecto a los procesos de excreción de ella misma (respiración, excreción fecal, dilución por crecimiento y transformaciones metabólicas). Existe un término sumamente similar a la bioacumulación denominado bioconcentración; sin embargo, ambos términos difieren en que la bioacumulación toma en cuenta la absorción a través de la dieta del organismo vivo, mientras que la bioconcentración no (Arnot y Gobas, 2006).

Los factores de bioacumulación (FBA) y de bioconcentración (FBC) son parámetros específicos que se pueden determinar experimentalmente para cada organismo y sustancia. Por esta razón, se usan los peces como una referencia para estimar el grado de consumo del contaminante por el ser humano. Una vez que se dispone de información sobre estos factores, se han desarrollado ecuaciones empíricas para relacionarlos con el coeficiente de partición octanol-agua ( $K_{ow}$ ). El  $k_{ow}$  es el parámetro más aceptado para evaluar la afinidad de un contaminante por la fracción orgánica de un acuífero. El contaminante prefiere a la fase acuosa cuando  $K_{ow} < 1$  y no se asociará a la fase orgánica; mientras que la asociación con la materia orgánica es altamente importante si  $K_{ow} > 100$  (Bedient et al., 1999).

Los logaritmos coeficientes de partición octanol-agua,  $\log(K_{ow})$  de la TMP y la AMP son 0.91 y 1.35, respectivamente (Azanu et al., 2018) y substituyendo estos valores en la correlaciones registradas en la Tabla 2.9 se determina que el factor de bioacumulación de ambos compuestos es menor a la unidad. Esto indica que la concentración de ambos antibióticos es menor en los peces con relación a la concentración del agua que habitan, por lo que se puede suponer que ambos antibióticos son poco bioacumulables.

**Tabla 2.9.** Correlaciones para calcular FBA y FBC para peces con respecto a  $K_{ow}$ .

<i>Correlación</i>	<i>Definición matemática</i>	<i>Rango de Validez</i>	<i>Referencia</i>
$\log(\text{FBA}) = -0.75 + 0.98 \log(K_{ow})$ (2.1)	$\text{FBA} = \frac{C. \text{pez}}{C. \text{agua}}$ (2.2)	$K_{ow} > 1$	(Arnot y Gobas, 2006)
$\log(\text{FBC}) = 0.27 + 0.46 \log(K_{ow})$ (2.3)	$\text{FBC} = \frac{C. \text{pez}}{C. \text{agua}}$ (2.4)		



### ***2.6 Legislación Ambiental***

Los productos farmacéuticos, pesticidas, solventes y las demás sustancias orgánicas de procedencia antropogénica, representan un conjunto de sustancias que pueden ser biológicamente activas y altamente estables, lo que las convierte en sustancias potencialmente peligrosas al acumularse en los cuerpos de agua e interactuar con la flora y fauna. Por este motivo en 2001, la Unión Europea desarrolló una lista de 33 contaminantes orgánicos prioritarios (Decisión No 2455/2001/CE). Posteriormente, en 2004 comenzó a requerirse un análisis de impacto ambiental para todos los fármacos de consumo humano (Directiva 2004/27/CE), y actualmente la Directiva para el Marco del Agua (WFD por sus siglas en inglés) tiene tres programas permanentes para el control en la calidad del agua. Estos consisten en el monitoreo cada 6 años de los cuerpos de agua en la unión europea, control operativo en las plantas de tratamiento para 53 tipos de contaminantes entre los que no se encuentra ningún producto farmacéutico, y la investigación de contaminaciones accidentales (Caviedes et al., 2017).

Hoy en día no se dispone como tal de una normatividad ambiental en ninguna parte del mundo para este tipo de contaminantes en las aguas, salvo el convenio de Estocolmo sobre contaminantes orgánicos persistentes en 2004; no obstante, únicamente regula algunos compuestos órgano-clorados entre los que se encuentran pesticidas como el Mirex y el Hexaclorobenceno.

La red de laboratorios europeos Norman (Norman Network) se ha dedicado a recopilar una lista de 1036 compuestos orgánicos emergentes que se han encontrado en muestras ambientales, lo que puede fundamentar en un futuro una normatividad para los mismos.

### ***2.7 Métodos de Remoción de Fármacos en Solución Acuosa***

Las plantas de tratamiento de aguas residuales actuales constan de las 4 etapas principales siguientes: pretratamiento, tratamiento primario para disminuir el contenido de grasas, aceites y sólidos gruesos, tratamiento secundario que fomenta la degradación de desechos biológicos y una cuarta etapa utilizada para disminuir la carga orgánica residual. Aun cuando se usan estas cuatro etapas para el tratamiento de efluentes contaminados, no son suficientes a causa de que los contaminantes orgánicos como PPCPs o pesticidas, no se descomponen hasta lograr un grado alto de mineralización. Terminando estos contaminantes



descargados en los cuerpos de agua. Por este motivo, se ha propuesto una quinta etapa para el tratamiento de compuestos orgánicos persistentes, algunos de estos métodos son la cloración, ozonización, fotólisis, procesos avanzados de oxidación, adsorción, entre otros.

### **2.7.1 Cloración**

La cloración es un método de tratamiento de aguas comúnmente utilizado para la desinfección de las mismas, algunos de los desinfectantes típicamente utilizados son el ácido hipocloroso (HOCl), dióxido de cloro (ClO<sub>2</sub>), cloramina (NH<sub>2</sub>Cl), que inhiben el desarrollo y proliferación de bacterias inactivando las enzimas requeridas para realizar sus procesos metabólicos (Benarde et al., 1967).

Las moléculas orgánicas de bajo peso molecular por lo general se logran oxidar y terminan en las aguas como compuestos inorgánicos clorados no dañinos; sin embargo, las moléculas orgánicas de alto peso molecular no se logran descomponer completamente.

### **2.7.2 Ozonización**

El ozono fue descubierto en el año de 1785, pero se comenzó a utilizar en el tratamiento de aguas de consumo de los Países Bajos en 1893. El ozono es un oxidante sumamente fuerte, incluso más que el peróxido de hidrogeno (H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>), dióxido de cloro (ClO<sub>2</sub>), oxígeno (O<sub>2</sub>) e hipoclorito de sodio (NaClO). Sin embargo, su uso fue limitado en países como Estados Unidos, puesto que se sustituyó por la cloración en los años 20 (Blaney, 2014).

El ozono es una especie altamente reactiva con la capacidad de reaccionar con especies con alta densidad electrónica, como lo son grupos con dobles enlaces y las aminas (Eggen y Vogelsang, 2015). En aguas residuales sin tratar, la dosis de ozono administrada oscila entre 5 y 15 mg/L para el tratamiento de fármacos; sin embargo, como resultado se puede lograr una oxidación parcial, produciendo compuestos biológicamente activos (Moral-Rodríguez, 2019). Por ejemplo, la TMP no logra descomponer por completo.

### **2.7.3 Procesos Avanzados de Oxidación**

Los procesos avanzados de oxidación (POAs) son métodos de degradación química que pretenden mineralizar los compuestos orgánicos de alto peso molecular a compuestos como agua, dióxido de carbono, o en su defecto en compuestos inorgánicos no dañinos (Andreozzi, 1999). Los PAOs más representativos son los siguientes:

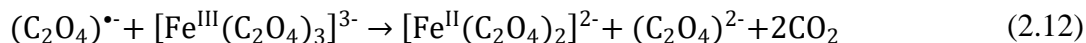
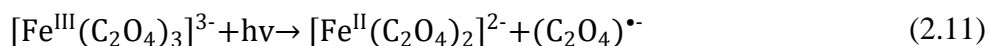
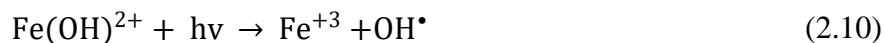
Procesos oxidativos O<sub>3</sub>/H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> y O<sub>3</sub>/UV. Son procesos cuya implementación requiere de un medio alcalino, de lo contrario se tienen tiempos de vida media muy cortos para los radicales. El ozono es una especie que se descompone debido a los iones hidroxilo, pero favorece la formación de radicales con el agua cuando se le irradia con luz ultravioleta (254nm). Las reacciones (2.5) - (2.7) muestran el mecanismo de formación de radicales; mientras que, la reacción (2.8) demuestra la degradación de ozono (Andreozzi, 1999).



Proceso Fenton. Este fue descubierto por Henry John Horstman Fenton en 1984 y se ha estudiado ampliamente a causa de su factibilidad de uso en tratamiento de aguas residuales. El método se fundamenta en la formación de radicales hidroxilo OH<sup>•</sup> y iones hidroxilo OH<sup>-</sup>, que son especies altamente reactivas. Se ha demostrado que tiene la capacidad de destruir herbicidas y compuestos fenólicos (Andreozzi, 1999).



Proceso Foto-Fenton y Foto-Fenton-Mejorado. Son modificaciones del método Fenton, la diferencia para Foto-Fenton radica en que se utiliza luz ultravioleta, peróxido de hidrogeno (H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>) como agente oxidante y una sal de hierro como fotocatalizador, generando una gran cantidad de radicales, como se aprecia en la reacción (2.10). El método Foto-Fenton-Mejorado involucra a las reacciones (2.11) - (2.13). Se utiliza un complejo de hierro (Ferrioxalato), luz ultravioleta y H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> para generar un suministro constante de radicales.



Fotooxidación. Este método se fundamenta en la formación de radicales hidroxilo mediante peróxido de hidrogeno y luz ultravioleta, que tienen un alto poder oxidante sobre la materia orgánica (Ecuación 2.7). El principal inconveniente de esta técnica es que no se puede utilizar la luz solar como fuente de luz ultravioleta, ya que la mayor cantidad de ésta, es retenida por la capa de ozono, es imperativo contar con un suministro (Kurt et al., 2017).



## 2.8 Adsorción

La adsorción es la acumulación preferencial de una sustancia sobre la superficie de un sólido normalmente poroso. La sustancia adsorbida se le llama adsorbato y puede ser un ion o una molécula; por otra parte, la superficie sólida donde ocurre el proceso de adsorción se denomina adsorbente. La adsorción se fundamenta en el desequilibrio de las fuerzas intermoleculares que existen entre la superficie de un sólido como el carbón activado y un soluto, propiciando la atracción o repulsión de las moléculas que se encuentran en la interfase.

El proceso de adsorción se puede clasificar como físico o fisisorción y como químico o quimisorción, dependiendo del tipo de interacciones que estén involucradas. La adsorción física en general es un proceso reversible que involucra interacciones intermoleculares débiles entre el soluto y la superficie del adsorbente; mientras que, la adsorción química implica la formación y el rompimiento de enlaces químicos, que son fuertes en comparación con las interacciones físicas, resultando en un proceso regularmente irreversible (Leyva-Ramos, 2017).

### 2.8.1 Factores que Afectan la Adsorción

La adsorción en fase líquida se rige por interacciones ya sea de tipo físicas o químicas entre el adsorbato y el adsorbente, que son influenciadas por las condiciones de operación del sistema (Leyva-Ramos, 2017). Las condiciones más destacadas son:

Propiedades de textura. Son todas aquellas características morfológicas y estructurales que caracterizan al adsorbente (área específica, diámetro de poro y volumen de poro). Debido a que la adsorción es un fenómeno superficial, es importante que el adsorbente disponga de una alta área específica donde se adsorba el soluto. Además, el diámetro y volumen de poro deben ser suficientemente grandes para que las moléculas del soluto puedan entrar en los mismos.

Carga superficial y sitios activos del adsorbente. La carga superficial del adsorbente se presenta únicamente al estar sumergido en solución. Los grupos funcionales en la superficie del adsorbente ceden o aceptan protones, produciendo carga en la superficie del material dependiendo de la naturaleza del mismo (acidez o basicidad del material). La aceptación y donación de protones por parte de la superficie del material es completamente dependiente del pH de la solución, los iones en solución, así como de la temperatura. A la



carga neta generada por los sitios activos (grupos funcionales que han cedido o aceptado un protón) se le conoce como carga superficial del adsorbente.

Carga del adsorbato: El adsorbato puede presentar varias constantes de acidez (pKa), lo que indica que puede aceptar o donar protones, adquiriendo el soluto diferentes cargas que son dependientes del pH de la solución y la temperatura.

Temperatura: El equilibrio químico que alcanzan el soluto acumulado en la superficie del adsorbente y el soluto en la solución generalmente se rige por una constante de equilibrio, que es completamente dependiente de la temperatura. El incremento de la temperatura puede no afectar (sin efecto), desfavorecer (proceso exotérmico) o favorecer (proceso endotérmico) la capacidad de adsorción.

### 2.8.2 *Isotermas de Adsorción*

Al equilibrio al que llegan el adsorbato y el adsorbente a temperatura constante, se le conoce como equilibrio de adsorción; mientras que, a la representación matemática que relaciona la masa de soluto adsorbida por unidad de masa del adsorbente con respecto a la concentración en equilibrio a una determinada temperatura se le denomina isoterma de adsorción. Los modelos más utilizados para representar el equilibrio de adsorción son Henry, Freundlich, Langmuir y Prausnitz-Radke/Redlich Peterson (Leyva-Ramos, 2010).

Isoterma de Henry o lineal. Describe el equilibrio de adsorción únicamente a concentraciones bajas, de tal manera que las moléculas adsorbidas se encuentran extremadamente separadas unas de otras (Ayawei et al., 2017).

$$q = k_H C \quad (2.14)$$

Donde  $q$  es la masa de soluto adsorbido en el equilibrio, mg/g;  $C$  es la concentración del soluto en el equilibrio, mg/L;  $k_H$  es la constante de la isoterma de Henry, L/g.

Isoterma de adsorción de Freundlich. Este modelo fue propuesto por el físico ruso Yakóv Borisóvich Zeldóvich, asumiendo que la energía de adsorción en los sitios activos disminuye exponencialmente; sin embargo, es termodinámicamente inconsistente ya que no es lineal a bajas concentraciones, y por otro lado, la capacidad de adsorción aumenta sostenidamente con la concentración del soluto. La isoterma de Freundlich es aplicable para adsorbentes cuya superficie es energéticamente heterogénea (Leyva-Ramos, 2010).

$$q = k_f C^{\frac{1}{n}} \quad (2.15)$$



Donde  $k_f$  es la constante de la isoterma de Freundlich relacionada con la capacidad de adsorción,  $\text{mg}^{1-1/n} \text{L}^{1/n}/\text{g}$ ;  $n$  es la intensidad de adsorción.

Isoterma de adsorción de Langmuir. Esta isoterma se dedujo por el químico estadounidense Irving Langmuir en 1916 y haciendo las siguientes suposiciones (Foo y Hameed, 2010):

- i) La adsorción ocurre específicamente en sitios localizados sobre la superficie del adsorbente.
- ii) Cada sitio interactúa únicamente con una molécula del adsorbato.
- iii) No se presentan interacciones entre moléculas adsorbidas circundantes.
- iv) El calor de adsorción es el mismo para todos los sitios.

$$q = \frac{q_m KC}{1 + KC} \quad (2.16)$$

Donde  $q_m$  es la constante de la isoterma de Langmuir que indica la máxima capacidad de adsorción del adsorbente,  $\text{mg}/\text{g}$ ;  $K$  es la constante de equilibrio de adsorción que se puede relacionar con el calor de adsorción,  $\text{L}/\text{mg}$ .

Isoterma de adsorción de Redlich-Peterson. Es un modelo de isoterma híbrida con respecto a los isotermas de Henry, Freundlich y Langmuir, que es completamente empírica y que no tiene fundamento teórico que lo sustente; no obstante, puede ser muy versátil para describir el equilibrio de adsorción (Foo y Hameed, 2010).

$$q = \frac{aC}{1 + bC^\beta} \quad (2.17)$$

Donde  $a$  es una constante de la isoterma de Redlich-Peterson,  $\text{L}/\text{g}$ ;  $b$  es una constante de la isoterma de Redlich-Peterson,  $\text{L}^\beta/\text{mg}^\beta$ ;  $\beta$  es una constante de la isoterma de Redlich-Peterson.

### 2.8.3 Isotermas de Adsorción Multicomponente

Cuando en una matriz acuosa se encuentra más de un soluto, se puede presentar competencia por los sitios activos entre todos los solutos existentes. La competencia puede afectar el equilibrio de adsorción, y como consecuencia, las isotermas individuales de adsorción se tienen que convertir en isotermas de adsorción multicomponente. Los modelos de las isotermas multicomponentes normalmente son extensiones de los modelos de las isotermas individuales (Girish, 2017).

Modelo de Langmuir Multicomponente sin Modificar (NMLM). Este modelo retoma las mismas suposiciones de la isoterma individual de Langmuir, pero se aplica para sistemas multicomponentes. La ecuación siguiente representa al modelo NMLM:

$$q_i = \frac{q_{m,i} K_i C_i}{1 + \sum_{j=1}^n K_j C_j} \quad (2.18)$$

Donde  $q_i$  es la cantidad adsorbida del componente  $i$  en el equilibrio, mmol/g;  $C_i$  es la concentración del soluto  $i$  en el equilibrio, mmol/L;  $q_{m,i}$  es la constante de la isoterma individual de Langmuir del componente  $i$ , mmol/g;  $K_i$  es la constante de equilibrio de adsorción de la isoterma individual de Langmuir del componente  $i$ , L/mmol.

Modelo de Langmuir Multicomponente Modificado (MLM $\eta_i$ ). El modelo NMLM se modifica incluyendo parámetros de interacción que pretenden describir la competencia de los adsorbatos involucrados por los sitios activos de adsorción. Este modelo se representa con la ecuación siguiente:

$$q_i = \frac{q_{m,i} K_i \left(\frac{C_i}{\eta_i}\right)}{1 + \sum_{j=1}^n K_j \left(\frac{C_j}{\eta_j}\right)} \quad (2.19)$$

Donde  $\eta_i$  es un parámetro de interacción que corrige las concentraciones en equilibrio del adsorbato,  $i$ .

Modelo de Langmuir Extendido (MLE). Es un modelo que considera que todos los sitios de adsorción son energéticamente iguales y todos los solutos compiten por ellos. La ecuación siguiente es el modelo MLE:

$$q_i = \frac{q_{\max} K_{e,i} C_i}{1 + \sum_{j=1}^n K_{e,j} C_j} \quad (2.20)$$

Donde  $q_{\max}$  es la constante de Langmuir que representa la máxima capacidad de adsorción del sistema multicomponente, mmol/g;  $K_{e,i}$  es un parámetro de la isoterma de Langmuir multicomponente del componente  $i$ , L/mmol.

Modelo de Freundlich Multicomponente Modificado o Modelo de Sheindorf-Rebuhn-Sheintuch (SRS). Es un modelo completamente empírico que describe el equilibrio de adsorción para superficies heterogéneas (Abdehagh et al., 2016). La representación matemática de este modelo se muestra enseguida:

$$q_i = k_{fi} C_i \left( \sum_{j=1}^n a_{ij} C_j \right)^{\left(\frac{1}{n_i}\right) - 1} \quad (2.21)$$

Donde  $k_{fi}$  es la constante de la isoterma individual de Freundlich relacionada con la capacidad de adsorción del componente  $i$ ,  $\text{mmol}^{1-1/n} \text{L}^{1/n}/\text{g}$ ;  $n_i$  es la intensidad de adsorción de la isoterma individual de Freundlich del componente  $i$ ;  $a_{ij}$  es un parámetro que representa la inhibición en la adsorción del componente  $i$  como consecuencia de la presencia del componente  $j$ .

Modelo de Freundlich Multicomponente Extendido para la Adsorción Binaria (FME):

Es un modelo utilizado para superficies heterogéneas y se consideran interacciones con moléculas adsorbidas adyacentes (Girish, 2017). El FME se expresa matemáticamente de la manera siguiente:

$$q_1 = \frac{k_{f1} C_1^{\left(\frac{1}{n_1}\right) + x_1}}{C_1^{x_1} + y_1 C_2^{z_1}} \quad (2.22) \quad q_2 = \frac{k_{f2} C_2^{\left(\frac{1}{n_2}\right) + x_2}}{C_2^{x_2} + y_2 C_1^{z_2}} \quad (2.23)$$

Donde  $x_i$  y  $z_i$  son exponentes de ajuste del componente  $i$ ;  $y_i$  es un parámetro de corrección de la concentración,  $(\text{mmol/L})^{x_i-z_i}$ .

Modelo de Redlich-Peterson no Modificado (NMRPM). Al igual que el modelo NMLM, el NMRPM es una extensión del modelo individual, que no considera competencia por los sitios activos de adsorción.

$$q_i = \frac{a_i C_i}{1 + \sum_{j=1}^n b_j C_j^{\beta_j}} \quad (2.24)$$

Donde  $a_i$  es una constante de la isoterma individual de Redlich-Peterson del componente  $i$ ,  $\text{L/g}$ ;  $b_i$  es una constante de la isoterma individual de Redlich-Peterson del componente  $i$ ,  $\text{L}^\beta/\text{mmol}^\beta$ ;  $\beta_j$  es una constante de la isoterma individual de Redlich-Peterson.

Modelo de Redlich-Peterson con Factores de Interacción (MRPM $\eta_i$ ). El modelo de Redlich-Peterson se modifica con dos parámetros de interacción, uno por cada adsorbato involucrado, y que representa la competencia de cada adsorbato sobre todo el sistema.

$$q_i = \frac{a_i \left(\frac{C_i}{\eta_i}\right)}{1 + \sum_{j=1}^n b_j \left(\frac{C_j}{\eta_j}\right)^{\beta_j}} \quad (2.25)$$

Donde  $\eta_i$  es un parámetro de interacción que corrige las concentraciones en equilibrio del adsorbato,  $i$ .

## 2.9 Materiales Adsorbentes

Los materiales usados como adsorbentes deben disponer de una alta afinidad por los contaminantes en solución que se desea remover. Existen una gran diversidad de adsorbentes, y entre estos destacan las arcillas, zeolitas, alúmina activada, silicio poroso, resinas poliméricas y materiales carbonosos (Moral-Rodríguez, 2014). En la Tabla 2.10 se presentan las máximas capacidades de diferentes tipos de materiales para adsorber AMP y TMP. Las propiedades deseables de los adsorbentes son:

Selectividad. Los adsorbentes deben ser afines al tipo de contaminante que se desee remover de un cuerpo de agua.

Alta capacidad de adsorción. Los materiales deben tener una alta capacidad de adsorción, de lo contrario, sería necesaria una gran cantidad del mismo para el tratamiento del cuerpo de agua contaminado.

Altas velocidades de adsorción. La adsorción tiene que ser un proceso rápido, de tal manera que no se requieran tiempos de residencia excesivamente largos para el tratamiento del agua contaminada.

Regeneración del adsorbente. El adsorbente de preferencia debe ser recuperable, esto con la finalidad de optimizar el uso tanto del mismo como de los recursos económicos que implican su adquisición.

Propiedades mecánicas deseables. El material debe ser lo suficiente rígido para que sea fácil de transportar sin una apreciable cantidad de pérdidas.

Bajo costo. Debe ser económicamente viable la compra del adsorbente para el tratamiento de grandes volúmenes de agua.

Fácil separación del sólido de la solución acuosa. El adsorbente no debe formar suspensiones en solución acuosa, puesto que la separación del adsorbente de la solución es más complicada.

Alta disponibilidad. El material tiene que estar disponible en cantidades industriales para su uso a gran escala.

**Tabla 2.10.** Capacidades de adsorción de diferentes adsorbentes para la AMP y TMP.

<i>Adsorbente</i>	<i>Adsorbato</i>	<i>q<sub>max</sub> (mg/g)</i>	<i>Condiciones</i>	<i>Referencia</i>
Carbón de lodos y residuos de pescado		8.7	pH variable T = 30 °C	(Nielsen y Bandosz, 2016)
Amberlite XAD-7	TMP	91.7	pH = 9 T = 20 °C I = 0.01 M	(Domínguez et al., 2011)
Carbón de tallo de loto		345.3	T = 25 °C	(Liu et al., 2012)
Montmorillonita KSF pilareada con aluminio		58.064	pH = 5.08 T = 38 °C	(Bekçi Molu y Yurdakoc, 2010)
Carbón activado sintetizado de residuos de uva		1.87	pH=7 T = 23 ± 2 °C	(Chitongo et al., 2019)
Biomasa modificada con líquidos iónicos	AMP	73.57	T = 25 °C	(Lawal y Moodley, 2017)
Nanopartículas de Montmorillonita		134.48	T = 25 °C	(Balarak et al., 2017)
Organo-Montmorillonita		38.43	pH = 7.8 T = 30 °C	(Anggraini et al., 2014)

### 2.10 Materiales de Carbono

Los átomos de carbono pueden adoptar los tres tipos de hibridación de orbitales  $sp^3$ ,  $sp^2$  y  $sp$ , y tienen una versatilidad incomparable para interactuar con otros elementos y formar estructuras moleculares tanto orgánicas como inorgánicas. El elemento carbono tiene la particularidad de adoptar diferentes formas alotrópicas tales como el carbón (láminas desordenadas), grafito (láminas ordenadas), diamante (estructura cristalina cubica centrada en las caras), fullerenos (estructuras elípticas), nanotubos de carbono (estructura cilíndrica), grafeno (lamina hexagonal bidimensional) y otras más. Cada una de las formas alotrópicas del carbono tiene propiedades y por consiguiente, aplicaciones distintas que les ha permitido jugar un papel importante en el desarrollo industrial y tecnológico en el mundo.

### 2.10.1 Carbón Activado

Carbón activado (CA) es el nombre colectivo de un grupo de materiales carbonosos porosos fabricados por la carbonización de precursores constituidos principalmente por carbono y activación química o física. El resultado de este proceso es un material con un alto grado de porosidad y una elevada área específica (Rodríguez-Reinoso, 1997).

Los CAs son preparados a través de dos etapas. La primera etapa es la carbonización, que se efectúa en un reactor de pirólisis calentando la materia prima a temperaturas cercanas a los 800 °C y en ausencia de oxígeno. En esta etapa se elimina la materia volátil, quedando únicamente el material carbonizado; sin embargo, éste no tiene poros o se encuentran completa o parcialmente bloqueados. En la etapa de activación, el carbonizado se introduce a un reactor de gasificación a temperaturas entre 750 y 1000 °C, donde se suministra un flujo de CO<sub>2</sub> ocasionando la formación, ensanchamiento o desbloqueo de poros.

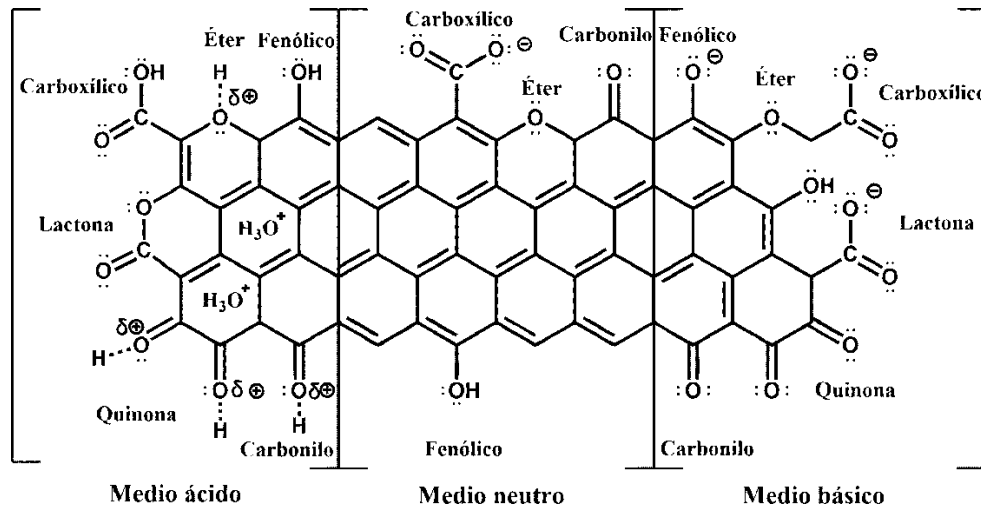
El CA se puede sintetizar a través de cualquier materia prima con alto contenido de carbono. La materia de baja densidad como la madera, y con alto contenido volátil, produce carbones activados con gran volumen de poros, pero con una baja densidad aparente; mientras que, materias primas más densas como las cáscaras de coco y nuez producen CAs con altas densidades aparentes y en forma granular (Rodríguez-Reinoso, 1997).

La composición elemental promedio en peso de los CAs es aproximadamente de 90 % C, 0.5 % H, 6 % O, 0.5 % S y el resto es cenizas. Cabe recalcar que la cantidad de heteroátomos (Oxígeno, Nitrógeno, Azufre e Hidrogeno, entre otros) en la composición química de los carbones es bastante apreciable, y depende del material precursor, proceso de activación y tratamientos posteriores (Radovic et al., 2000).

La estructura general de los CAs consiste en pequeñas láminas de grafeno que se entrecruzan entre sí, y cuyos huecos entre láminas son conocidos como microporos. Existen tres tipos de poros en los adsorbentes de acuerdo a la IUPAC, los microporos con diámetros que no exceden los 2 nm, los mesoporos con diámetros entre 2-50 nm y los macroporos con diámetros mayores a los 50 nm (Thommes et al., 2015). En un gran número de casos los procesos de adsorción suceden en los microporos.

Una propiedad sumamente importante de los CAs es su carácter anfótero que solamente sucede al estar en solución (Figura 2.12). Los distintos grupos funcionales en la superficie del carbón pueden aceptar o donar protones dependiendo del pH de la solución,

permitiendo que el carbón pueda comportarse como un ácido o como una base. Éste proceso es altamente dependiente de la constante de ionización ( $pK_a$ ) de cada grupo superficial. Los grupos ácidos como los carboxílicos, lactónicos y fenólicos tienen sus constantes de acidez en intervalos de pH de 3-6, 7-9 y 8-11, respectivamente (Carrales-Alvarado, 2014). El CA se encuentra en el pH del punto de carga cero ( $pH_{PCC}$ ) cuando la carga eléctrica neta que generan los sitios ácidos y básicos es igual a cero.



**Figura 2.12.** Ionización de los grupos funcionales del carbón activado descrito por Radovic et al., (2000) y Prahas et al., (2012).

### 2.10.2 Fibras de Carbón Activado

La fibra de carbón activado (FCA) es un tipo de CA que tiene la presentación de tela o fieltro. El material precursor de una FCA puede ser tela o fieltro de un material polimérico tal como Nylon, rayón, poliacrilonitrilo, celulosa, resinas poliméricas (Carrales-Alvarado, 2014), fibra de lino, fibra de palma de aceite, fibra de coco, fibra de yute (Li et al., 2015), etc. Las FCAs se desarrollaron en los años 70's carbonizando fibras de rayón y actualmente, se sabe que poseen ciertas ventajas sobre los carbones activados en forma granular. Algunas de sus características favorables son sus altas áreas específicas, flexibilidad mecánica, conductividad eléctrica, fácil transporte, altas capacidades de adsorción, adsorción rápida (2-50 veces más rápida que un CA) y la generación de bajas caídas de presión en lechos empacados (Díaz-Flores, 2006).

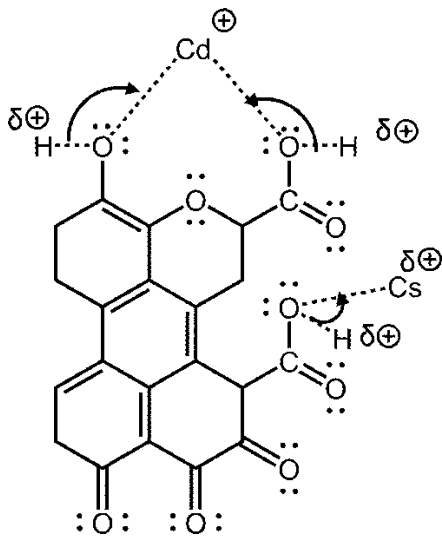
La porosidad de las FCAs depende del método de activación y del material precursor; no obstante, los poros son bastante uniformes (entre 0.5 y 2.1 nm de diámetro). Alrededor del 90 % del volumen acumulado de poros es de microporos (Díaz-Flores, 2006).

### 2.11 Mecanismos de Adsorción

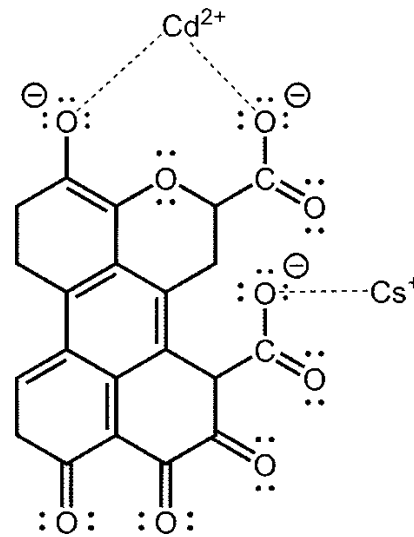
Se denomina mecanismo de adsorción al conjunto de interacciones ya sean físicas o químicas que ocurren entre el adsorbato y la superficie del adsorbente. En la adsorción, pueden intervenir generalmente uno o más mecanismo de manera simultánea. Los mecanismos individuales más representativos se ilustran en las Figuras 2.13 - 2.17 y se describen a continuación.

Intercambio iónico. La estructura intrínseca del material contiene protones, cationes y aniones que se pueden intercambiar por otros iones con la misma carga, pero que presenten mayor afinidad por los sitios activos con respecto a los iones originales. El intercambio iónico se ilustra en la Figura 2.13.

Interacciones electrostáticas. La superficie del adsorbente puede ceder y aceptar protones al estar en solución acuosa, generando una carga superficial en el material dependiendo el pH de la solución. Si la especie química del adsorbato presenta la misma carga que la de la superficie del adsorbente, se tienen interacciones electrostáticas repulsivas reduciendo la capacidad de adsorción; por el contrario, si se tienen cargas electrostáticas opuestas, ocurre atracción electrostática aumentando la capacidad de adsorción. Esto se observa en la Figura 2.14.



**Figura 2.13.** Intercambio iónico entre los grupos superficiales del carbón y iones metálicos. Mecanismo descrito por Stumm y Morgan, (1996)

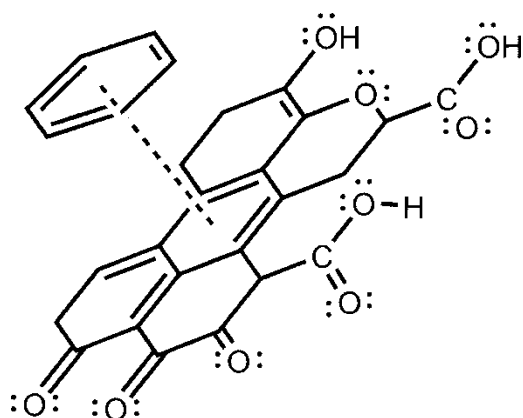


**Figura 2.14.** Atracción electrostática entre los grupos superficiales del carbón y iones metálicos. Mecanismo descrito por Stumm y Morgan, (1996)



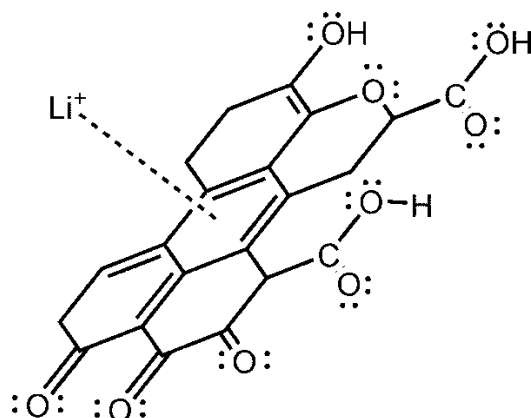
Interacciones dispersivas  $\pi$ - $\pi$ . Las interacciones dispersivas son el resultado de la interacción de los electrones  $\pi$  de un anillo aromático de la superficie del adsorbente y de los electrones  $\pi$  de un anillo aromático de la molécula del adsorbato. Los electrones  $\pi$  del adsorbente se mueven hacia el orbital de los electrones  $\pi$  del adsorbato, y simultáneamente los electrones tipo  $\pi$  del adsorbato se mueven al orbital de los electrones  $\pi$  del adsorbente. En la Figura 2.15 se muestra como el anillo aromático del adsorbato se ancla a los anillos aromáticos de la superficie del adsorbente.

Interacciones  $\pi$ -catión. El anillo aromático de la superficie de un adsorbente es una zona con alta densidad electrónica, a causa de la resonancia de los electrones  $\pi$  a lo largo de los anillos del carbón. Los cationes (adsorbato) en solución acuosa son atraídos por esta zona de alta densidad electrónica y por lo tanto se adsorben en la superficie. Cabe recalcar que éste mecanismo también se puede llevar a cabo entre un adsorbente con cationes superficiales y un soluto con anillos aromáticos. En la Figura 2.16 se ejemplifica éste mecanismo.



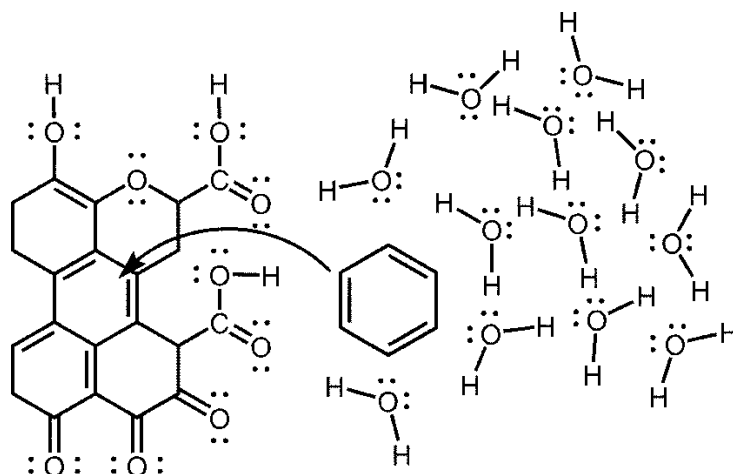
**Figura 2.15.** Interacciones dispersivas  $\pi$ - $\pi$  entre un benceno y la superficie del carbón.

Emula el esquema propuesto por Bania et al., (2013) para benceno.



**Figura 2.16.** Interacciones  $\pi$ -catión entre  $\text{Li}^+$  y la superficie del carbón. Emula el esquema propuesto por Bania et al., (2013) para benceno y Litio.

Interacciones hidrofóbicas. La hidrofobicidad de un soluto puede disminuir la solubilidad del soluto como consecuencia de la reducción de las interacciones de las moléculas del agua con el soluto. Las interacciones hidrofóbicas hacen que el soluto se acumule parcialmente sobre la superficie del adsorbente, aumentando la capacidad de adsorción. El mecanismo de interacciones hidrofóbicas se aprecia en la Figura 2.17.



**Figura 2.17.** Interacciones hidrofóbicas entre moléculas de agua y benceno, donde éste último se acumula sobre la superficie del adsorbente. Mecanismo descrito por Stumm y Morgan, (1996)

### 2.12 Velocidad de Adsorción

La velocidad de adsorción representa la rapidez con que se adsorben los solutos en la superficie de un material, y se analiza a través de estudios cinéticos. Estos últimos permiten identificar los mecanismos de transporte de masa que controlan la velocidad global de adsorción. Las etapas presentes en la velocidad global de adsorción en estado dinámico ocurren de manera sucesiva, se exhiben en la Figura 7.18 y se describen enseguida (Leyva-Ramos y Geankoplis, 1985).

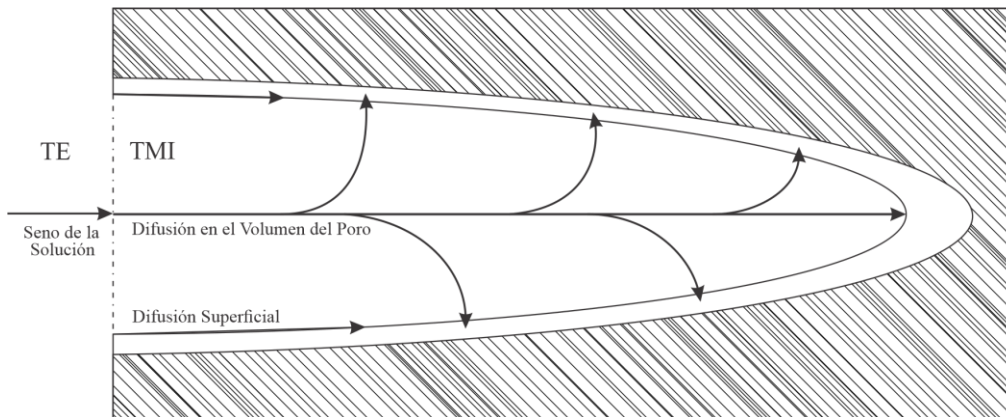
Trasporte Externo de Masa. En esta primera etapa, las moléculas del soluto se encuentran en el seno de la solución y se transportan por medio de difusión molecular y transporte convectivo hasta la superficie externa del adsorbente.

Difusión Intraparticular. En esta etapa del proceso, las moléculas de soluto se difunden desde la boca del poro, dentro de los poros y hasta los sitios activos de adsorción en el interior de los mismos. Esta etapa puede ocurrir por difusión Fick en el volumen del poro o por difusión superficial.

Velocidad de Adsorción en un Sitio Activo. Es la etapa final en el proceso de adsorción y las moléculas interactúan con un sitio activo y se acumulan en la superficie del adsorbente.

Generalmente los modelos más utilizados para la interpretación de los datos cinéticos son los modelos cinéticos de primer y segundo orden. En estos modelos se asume que una

reacción química en la superficie es la etapa controlante del proceso; sin embargo, si el adsorbente es altamente microporoso, ésta suposición es muy cuestionable en virtud de que la mayor cantidad de sitios activos se encuentran en los microporos (Leyva-Ramos et al., 2005). Por lo anterior, los modelos difusionales son más apropiados para describir los procesos de adsorción en materiales porosos.



**Figura 2.18.** Etapas de transferencia de masa en el proceso de adsorción. Transporte externo de masa (TE) y transporte de masa intraparticulador (TMI).

### 2.13 Modelos Difusionales

Los modelos difusionales se desarrollan realizando balances de masa en estado inestable sobre un elemento diferencial, que describen el transporte de masa desde el seno de la solución hasta la superficie de un material (transporte externo), así como el transporte desde la superficie del material hasta los sitios activos dentro de los poros de este.

Las principales suposiciones que conllevan estos modelos son las siguientes:

- i) Dependiendo de la morfología de cada material, se asume que son laminas, cilindros o esferas perfectas.
- ii) La adsorción en los sitios activos localizados en los poros tiene una alta velocidad de adsorción, y por lo tanto, se considera que se alcanza el equilibrio instantáneamente.
- iii) La adsorción ocurre mayoritariamente a través de una sola dirección espacial.

#### 2.13.1 Modelo General de Difusión (MD)

El modelo general de difusión considera las dos etapas para la velocidad global de adsorción relacionadas con los mecanismos de transporte de masa. El soluto se transfiere desde la solución hasta el sitio activo dentro de los poros del material adsorbente.

En estado inestable, se efectúa un balance de masa en la solución que se representa con la ecuación siguiente:

$$\left\{ \begin{array}{c} \text{Entrada de} \\ \text{Masa} \end{array} \right\}^0 + \left\{ \begin{array}{c} \text{Salida de} \\ \text{Masa} \end{array} \right\}^0 + \left\{ \begin{array}{c} \text{Generación de} \\ \text{Masa} \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{c} \text{Acumulación de} \\ \text{Masa} \end{array} \right\} \quad (2.26)$$

Al substituir el transporte externo de masa, se obtiene como resultado la ecuación diferencial que describe el balance de masa en la solución para partículas en forma esférica o cilíndrica:

$$-mSk_L(C_A - C_{Ar}|_{r=R}) = V \frac{dC_A}{dt} \quad (2.27)$$

La condición inicial necesaria para resolver la ecuación anterior es:

$$t = 0, \quad C_A = C_{A0} \quad (2.28)$$

Donde  $C_A$  es la concentración del soluto en solución acuosa, mg/L;  $C_{A0}$  es la concentración inicial del soluto en solución acuosa, mg/L;  $C_{Ar}|_{r=R}$  es la concentración del soluto en la superficie externa de la partícula, mg/L;  $k_L$  es el coeficiente de transporte externo de masa en fase líquida, cm/s;  $m$  es la masa del adsorbente, g;  $S$  es el área externa por unidad de masa del adsorbente, cm<sup>2</sup>/g;  $V$  es el volumen de la solución, mL.

Efectuado un balance de masa del soluto en un elemento diferencial dentro de la partícula del adsorbente que se ilustra en la Figura 2.19 en estado inestable. Las ecuaciones siguientes representan este balance de masa para el caso de partículas esféricas:

$$\left\{ \begin{array}{c} \text{Entrada de} \\ \text{Materia} \end{array} \right\} + \left\{ \begin{array}{c} \text{Salida de} \\ \text{Materia} \end{array} \right\} + \left\{ \begin{array}{c} \text{Generación de} \\ \text{Materia} \end{array} \right\}^0 = \left\{ \begin{array}{c} \text{Acumulación de} \\ \text{Materia} \end{array} \right\} \quad (2.29)$$

$$4\pi r^2 N_{Ap}|_r - 4\pi r^2 N_{Ap}|_{r+\Delta r} + 4\pi r^2 N_{As}|_r - 4\pi r^2 N_{As}|_{r+\Delta r} = 4\pi r^2 \Delta r \varepsilon_p \frac{\partial C_{Ar}}{\partial t} + 4\pi r^2 \Delta r \rho_p \frac{\partial q}{\partial t} \quad (2.30)$$

Dividiendo la ecuación anterior entre  $4\pi r^2 \Delta r$  y tomando límites cuando  $\Delta r \rightarrow 0$ , la ecuación se convierte en la siguiente expresión matemática:

$$\frac{1}{r^2} \frac{4\pi r^2 N_{Ap}|_r - 4\pi r^2 N_{Ap}|_{r+\Delta r} + 4\pi r^2 N_{As}|_r - 4\pi r^2 N_{As}|_{r+\Delta r}}{\lim_{\Delta r \rightarrow 0} \Delta r 4\pi} = \frac{4\pi r^2 \Delta r \varepsilon_p \frac{\partial C_{Ar}}{\partial t} + 4\pi r^2 \Delta r \rho_p \frac{\partial q}{\partial t}}{\lim_{\Delta r \rightarrow 0} 4\pi r^2 \Delta r} \quad (2.31)$$

$$-\frac{1}{r^2} \frac{\partial [r^2 (N_{Ap} + N_{As})]}{\partial r} = \varepsilon_p \frac{\partial C_{Ar}}{\partial t} + \rho_p \frac{\partial q}{\partial t} \quad (2.32)$$

Al introducir la definición del flujo de difusión superficial y difusión en el volumen del poro en la ecuación anterior, se obtiene como resultado la ecuación diferencial siguiente que describe el transporte de masa intraparticular:

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r^2 \left( D_{ep} \frac{\partial C_{Ar}}{\partial r} + D_{es} \rho_p \frac{\partial q}{\partial r} \right) \right] = \varepsilon_p \frac{\partial C_{Ar}}{\partial t} + \rho_p \frac{\partial q}{\partial t} \quad (2.33)$$

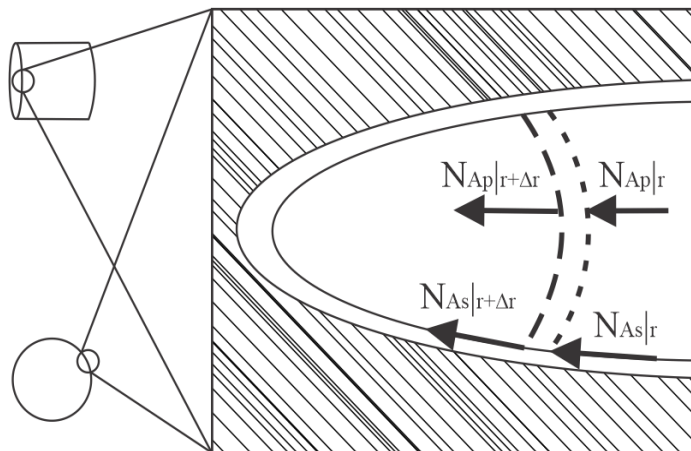
Las condiciones iniciales y frontera para resolver la ecuación diferencial anterior son:

$$C_{Ar} = 0, \quad t = 0, \quad 0 \leq r \leq R \quad (2.34)$$

$$\left. \frac{\partial C_{Ar}}{\partial r} \right|_{r=0} = 0 \quad (2.35)$$

$$D_{ep} \frac{\partial C_{Ar}}{\partial r} + D_{es} \rho_p \frac{\partial q}{\partial r} = k_L (C_A - C_{A|r=R}) \quad (2.36)$$

Donde  $C_{Ar}$  es la concentración del soluto dentro de los poros de la partícula a una distancia  $r$ , mg/L;  $D_{ep}$  es el coeficiente de difusión efectivo,  $\text{cm}^2/\text{s}$ ;  $D_{es}$  es el coeficiente de difusión superficial,  $\text{cm}^2/\text{s}$ ;  $\varepsilon_p$  es la fracción hueca de las partículas, 1;  $\rho_p$  es la densidad de las partículas del adsorbente,  $\text{g}/\text{cm}^3$ ;  $q$  es la masa del soluto adsorbida, mg/g;  $r$  es la distancia radial, cm.



**Figura 2.19.** Elementos diferenciales para los balances de masa en las partículas del material adsorbente.

La ecuación del modelo MD para geometría cilíndrica es la subsecuente:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r \left( D_{ep} \frac{\partial C_{Ar}}{\partial r} + D_{es} \rho_p \frac{\partial q}{\partial r} \right) \right] = \varepsilon_p \frac{\partial C_{Ar}}{\partial t} + \rho_p \frac{\partial q}{\partial t} \quad (2.37)$$

Las condiciones frontera e inicial para resolver la ecuación anterior son las mismas que las de la geometría esférica.

Considerando que la velocidad de adsorción sobre los sitios activos se efectúa rápidamente, es decir que se alcanza el equilibrio instantáneamente. La relación entre  $q$  y  $C_{Ar}$  se representa por la isoterma de adsorción y se expresa como sigue:

$$q = f(C_{Ar}) \quad (2.38)$$

La ecuación diferencial de transporte externo (Ecuación 2.27), así como la ecuación diferencial de transporte intraparticular (Ecuaciones 2.33 y 2.37), sus respectivas condiciones iniciales y de frontera (Ecuaciones 2.28, 2.34, 2.35 y 2.36), además de la expresión matemática de la isoterma de adsorción (Ver Tabla 2.11), representan en conjunto el modelo general de difusión.

**Tabla 2.11.** Derivadas de las isotermas de adsorción.

<i>Modelo</i>	$q$	$\frac{\partial q}{\partial C_{Ar}}$
<i>Henry</i>	$k_H C_{Ar} \quad (2.39)$	$k_H \quad (2.40)$
<i>Freundlich</i>	$k_f C_{Ar}^{\frac{1}{n}} \quad (2.41)$	$\frac{k_f C_{Ar}^{\frac{1}{n}-1}}{n} \quad (2.42)$
<i>Langmuir</i>	$\frac{q_m K C_{Ar}}{1 + K C_{Ar}} \quad (2.43)$	$\frac{q_m K}{(1 + K C_{Ar})^2} \quad (2.44)$
<i>Redlich-Peterson</i>	$\frac{a C_{Ar}}{1 + b C_{Ar}^\beta} \quad (2.45)$	$\frac{a [1 + b(C_{Ar}^\beta - \beta C_{Ar}^\beta)]}{(1 + b C_{Ar}^\beta)^2} \quad (2.46)$

### 2.13.2 Modelo de Difusión en el Volumen del Poro (DVP)

El modelo DVP es una simplificación del modelo MD, suponiendo que la difusión superficial es despreciable en comparación con la difusividad en el volumen del poro. Por lo anterior, en el modelo MD se eliminan todos los términos relacionados a la difusividad superficial. Las ecuaciones del modelo DVP para la geometría esférica son:

$$-mSk_L(C_A - C_{Ar}|_{r=R}) = V \frac{dC_A}{dt} \quad (2.27)$$

$$t = 0 \quad C_A = C_{A0} \quad (2.28)$$

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r^2 \left( D_{ep} \frac{\partial C_{Ar}}{\partial r} \right) \right] = \varepsilon_p \frac{\partial C_{Ar}}{\partial t} + \rho_p \frac{\partial q}{\partial t} \quad (2.47)$$

$$C_{Ar} = 0 \quad t = 0 \quad 0 \leq r \leq R \quad (2.34)$$

$$\left. \frac{\partial C_{Ar}}{\partial r} \right|_{t=0} = 0 \quad (2.35)$$

$$D_{ep} \frac{\partial C_{Ar}}{\partial r} = k_L (C_A - C_{Ar}|_{r=R}) \quad (2.48)$$

### 2.13.3 Modelo de Difusión Superficial (MDS)

El modelo MDS es otra simplificación del modelo MD y se considera que la difusividad en el volumen del poro es despreciable en comparación con la difusividad superficial. El modelo MD se simplifica eliminando los términos relacionados a la difusividad en el volumen del poro. Enseguida, se presentan las ecuaciones del modelo MDS para el caso de geometría esférica:

$$-mSk_L(C_A - C_{Ar}|_{r=R}) = V \frac{dC_A}{dt} \quad (2.27)$$

$$t = 0 \quad C_A = C_{A0} \quad (2.28)$$

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r^2 \left( D_{es} \rho_p \frac{\partial q}{\partial r} \right) \right] = \varepsilon_p \frac{\partial C_{Ar}}{\partial t} + \rho_p \frac{\partial q}{\partial t} \quad (2.49)$$

$$C_{Ar} = 0 \quad t = 0 \quad 0 \leq r \leq R \quad (2.34)$$

$$\left. \frac{\partial C_{Ar}}{\partial r} \right|_{t=0} = 0 \quad (2.35)$$

$$D_{es} \rho_p \frac{\partial q}{\partial r} = k_L (C_A - C_A|_{r=R}) \quad (2.50)$$

### 2.14 Modelos Difusionales Adimensionales

Los modelos difusionales se pueden expresar en forma adimensional haciendo uso de los siguientes parámetros adimensionales:

$$\Phi_A = \frac{C_A}{C_{A0}} \quad (2.51) \quad \xi = \frac{r}{R} \quad (2.52) \quad \theta = \frac{D_{AB}t}{R^2} \quad (2.53)$$

$$\eta_A = \frac{C_{Ar}}{C_{A0}} \quad (2.54) \quad \alpha = \frac{3V}{mSR} \quad (2.55) \quad \omega = \frac{1000\rho_p q_0}{C_{A0}} \quad (2.56)$$

$$\chi_1 = \frac{D_{ep}}{D_{AB}} \quad (2.57) \quad \chi_2 = \frac{D_{es}}{D_{AB}} \quad (2.58) \quad N_{Sh} = \frac{2k_L R}{D_{AB}} \quad (2.59)$$

Donde  $D_{AB}$  es la difusividad molecular del componente A en el solvente B,  $\text{cm}^2/\text{s}$ ;  $q_0$  es la masa del soluto adsorbida a la concentración inicial,  $\text{mg/g}$ ;  $R$  es el radio total de la partícula,  $\text{cm}$ .

Como consecuencia de expresar en forma adimensional los modelos difusionales, también las isothermas de adsorción se deben adimensionar. La isoterma de adsorción adimensional es la siguiente:

$$\frac{q}{q_0} = F(\eta_A) \quad (2.60)$$

$$q_0 = F(C_{A0}) \quad (2.61)$$

En la Tabla 2.12 se presentan las isothermas y sus derivadas en forma adimensional.

**Tabla 2.12.** Isotermas de adsorción y derivadas en forma adimensional.

<i>Modelo</i>	$q$	$F(\eta_A)$	$F'(\eta_A)$
<b>Henry</b>	$k_H C_{Ar}$ (2.62)	$\eta_A$ (2.63)	1 (2.64)
<b>Freundlich</b>	$k_f C_{Ar}^{\frac{1}{n}}$ (2.65)	$\eta_A^{\frac{1}{n}}$ (2.66)	$\frac{1}{n} \eta_A^{\frac{1}{n}-1}$ (2.67)
<b>Langmuir</b>	$\frac{q_m K C_{Ar}}{1 + K C_{Ar}}$ (2.68)	$\frac{\gamma_L \eta_A}{1 + \eta_A(\gamma_L - 1)}$ (2.69)	$\frac{\gamma_L}{[1 + \eta_A(\gamma_L - 1)]^2}$ (2.70)
<b>Redlich-Peterson</b>	$\frac{a C_{Ar}}{1 + b C_{Ar}^\beta}$ (2.71)	$\frac{\gamma_p \eta_A}{1 + \eta_A^\beta(\gamma_p - 1)}$ (2.72)	$\frac{\gamma_p [1 + \eta_A^\beta(\gamma_p - 1)(1 - \beta)]}{[1 + \eta_A^\beta(\gamma_p - 1)]^2}$ (2.73)

Los parámetros  $\gamma_L$  y  $\gamma_p$  se definen como:

$$\gamma_L = 1 + K C_{A0} \quad (2.74)$$

$$\gamma_p = 1 + b C_{A0}^\beta \quad (2.75)$$

El modelo MD en forma adimensional se representa por las ecuaciones siguientes para coordenadas esféricas y cilíndricas:

La ecuación que describe el transporte externo y su condición inicial son:

$$\frac{d\phi_A}{d\theta} = -\frac{3N_{Sh}}{2\alpha} (\phi_A - \eta_A)|_{\xi=1} \quad (2.76)$$

$$\theta = 0 \quad \phi_a = 1 \quad (2.77)$$

Las ecuaciones que describen el transporte intraparticular para la geometría cilíndrica y esférica, además de sus condiciones iniciales y de frontera son:

$$\text{Geometría Cilíndrica} \quad \frac{1}{\xi} \frac{\partial}{\partial \xi} \left[ \xi \frac{\partial \eta_A}{\partial \xi} (\chi_1 + \chi_2 \omega F'(\eta_A)) \right] = \frac{\partial \eta_A}{\partial \theta} (\varepsilon_p + \omega F'(\eta_A)) \quad (2.78)$$

$$\text{Geometría Esférica} \quad \frac{1}{\xi^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left[ \xi^2 \frac{\partial \eta_A}{\partial \xi} (\chi_1 + \chi_2 \omega F'(\eta_A)) \right] = \frac{\partial \eta_A}{\partial \theta} (\varepsilon_p + \omega F'(\eta_A)) \quad (2.79)$$

$$\eta_A = 0 \quad \theta = 0 \quad 0 \leq \xi \leq 1 \quad (2.80)$$

$$\left. \frac{\partial \eta_A}{\partial \xi} \right|_{\xi=0} = 0 \quad (2.81)$$

$$\left. \frac{\partial \eta_A}{\partial \xi} (\chi_1 + \chi_2 \omega F'(\eta_A)) \right|_{\xi=1} = \frac{N_{Sh}(\phi_A - \eta_A)|_{\xi=1}}{2} \quad (2.82)$$

Las ecuaciones (2.76) - (2.82) en conjunto con la forma adimensional de la isoterma de adsorción (Ver Tabla 2.12) representan el modelo MD adimensional.



### 2.15 Modelo de Transporte Externo de Masa (MTEM)

El modelo MTEM considera que la velocidad global de adsorción es controlada por el transporte externo de masa y la difusión intraparticular es rápida. El balance diferencial de masa en la solución (Ecuación 2.27) es el mismo que los modelos difusionales; empero el balance de masa en la partícula difiere.

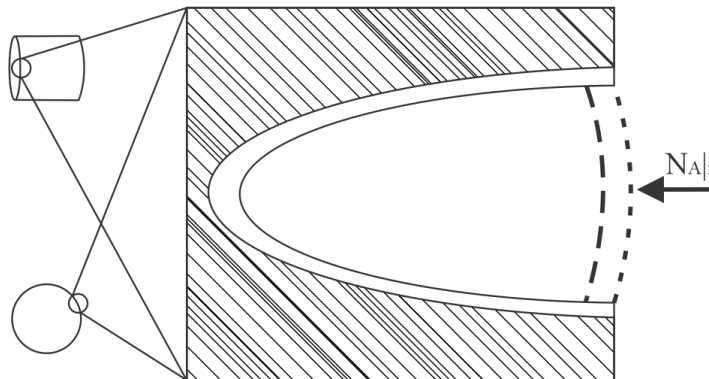
Realizando un balance de masa del soluto en la partícula del adsorbente, en estado inestable (Figura 2.20) y para el caso de partículas esféricas y cilíndricas:

$$\left\{ \begin{array}{c} \text{Entrada de} \\ \text{Masa} \end{array} \right\}^0 + \left\{ \begin{array}{c} \text{Salida de} \\ \text{Masa} \end{array} \right\}^0 + \left\{ \begin{array}{c} \text{Generación de} \\ \text{Masa} \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{c} \text{Acumulación de} \\ \text{Masa} \end{array} \right\} \quad (2.83)$$

$$mSk_L(C_A - C_{Ar}|_{r=R}) = m \frac{\epsilon_p}{\rho_p} \frac{\partial C_{Ar}}{\partial t} + m \frac{\partial q}{\partial t} \quad (2.84)$$

La condición inicial para la ecuación diferencial ordinaria que describe el transporte intraparticular en el modelo de transporte externo es:

$$C_{Ar}|_{r=R} = 0 \quad t = 0 \quad (2.85)$$



**Figura 2.20.** Elemento diferencial analizado en el balance de transporte de masa intraparticular del modelo de transporte externo de masa.

El modelo MTEM es representado por las ecuaciones (2.27), (2.28), (2.84) y (2.85), en conjunto con la isoterma de adsorción (Ver Tabla 2.11).

### 2.16 Modelo de Transporte Externo Adimensional

La ecuación de transporte externo adimensional, es la misma que la de los modelos difusionales (Ecuación 2.76). Se introduce un nuevo parámetro adimensional que es:

$$\psi = \frac{m}{\rho_p V} \quad (2.86)$$

Las ecuaciones que describen el transporte intraparticular para la geometría cilíndrica y esférica, además de su condición inicial en forma adimensional son:

$$\frac{d\eta_A|_{r=R}}{d\theta} = \frac{3N_{Sh}}{2\alpha\psi} \frac{(\phi_A - \eta_A|_{r=R})}{(\varepsilon_p + \omega F'(\eta_A|_{r=R}))} \quad (2.87)$$

$$\theta = 0 \quad \eta_A|_{r=R} = 0 \quad (2.88)$$

Las ecuaciones (2.76), (2.77), (2.88) y (2.89), en conjunto con la isoterma de adsorción en forma adimensional (Ver Tabla 2.12), forman el modelo MTEM adimensional.



### ***CAPÍTULO 3. JUSTIFICACIÓN, HIPÓTESIS Y OBJETIVOS***

Hoy en día, con los avances en la medicina moderna y el desarrollo de nuevos medicamentos, la esperanza de vida de los seres humanos se ha incrementado hasta una edad media de 76 años para los habitantes de América y 83 años para los habitantes de Europa. Un resultado inesperado propiciado por el aumento de la vida media y de la población en el planeta, es el aumento de la descarga de microcontaminantes o contaminantes emergentes en las aguas superficiales. Los fármacos y en especial los antibióticos son considerados contaminantes emergentes y son emitidos continuamente a ríos y lagos a través efluentes municipales, hospitalarios e industriales. Mas aún, los antibióticos afectan la microbiota de los cuerpos de agua y fomentan la resistencia de bacterias altamente patógenas para los seres humanos. Actualmente, se han estimado 700,000 muertes anuales por enfermedades fármaco-resistentes; sin embargo, la ONU considera que, en 2050, se tendrán 10 millones de muertes anuales por esta causa.

En general, no existe legislación ambiental para regular los niveles de este tipo de contaminantes en las aguas. No obstante, un esfuerzo por parte de una red de laboratorios europeos denominada “Norman Network” ha estado clasificando compuestos orgánicos emergentes encontrados en muestras ambientales, y hasta ahora, se han catalogado 1036.

Los procesos normalmente disponibles en las plantas de tratamiento de aguas residuales no son eficientes para eliminar contaminantes orgánicos tales como los fármacos o pesticidas, ya que no se logran descomponer con elevados grados de mineralización. Entre los procesos de tratamiento convencionales, los procesos de adsorción usando materiales carbonosos han probado ser bastante efectivos y selectivos para remover compuestos orgánicos en general; pero sobre todo, aquellos que contienen anillos aromáticos en su estructura molecular. Las características del adsorbente ideal incluyen las siguientes: alta capacidad de adsorción, rápida velocidad de adsorción, capacidad de regeneración, propiedades mecánicas deseables y bajo costo.

Por lo antes mencionado, se plantea utilizar a la adsorción como un método de remoción selectivo hacia antibióticos comunes como la Ampicilina y la Trimetoprima. Puesto que ambos contaminantes son orgánicos, el uso de adsorbentes carbonosos con diferentes características texturales y fisicoquímicas es altamente deseable. Por lo tanto, se plantean los siguientes objetivos:





El objetivo principal de este trabajo es investigar detalladamente el equilibrio y velocidad de adsorción de Ampicilina (AMP) y Trimetoprima (TMP) sobre una fibra de carbón activado (FCA), tres FCAs modificadas y dos carbones activados granulares denominados F400 y F400n.

Los objetivos específicos se describen a continuación:

- Evaluar el equilibrio de adsorción individual de AMP sobre el carbón activado granular F400n y la fibra de carbón activado FCA.
- Investigar el equilibrio de adsorción individual de TMP sobre el carbón activado granular F400 y la fibra de carbón activado FCA.
- Evaluar el efecto de las modificaciones realizadas a la FCA y sus repercusiones sobre la capacidad de adsorción de AMP y TMP.
- Elucidar los mecanismos de adsorción individuales de AMP y TMP sobre los diversos sistemas adsorción planteados.
- Estudiar la adsorción competitiva de AMP y Cd(II) sobre los materiales carbonosos FCA y F400n.
- Obtener curvas de decaimiento de la concentración y analizar la velocidad de adsorción de AMP y TMP sobre la FCA.
- Investigar la velocidad de adsorción de AMP sobre el carbón activado granular F400n.



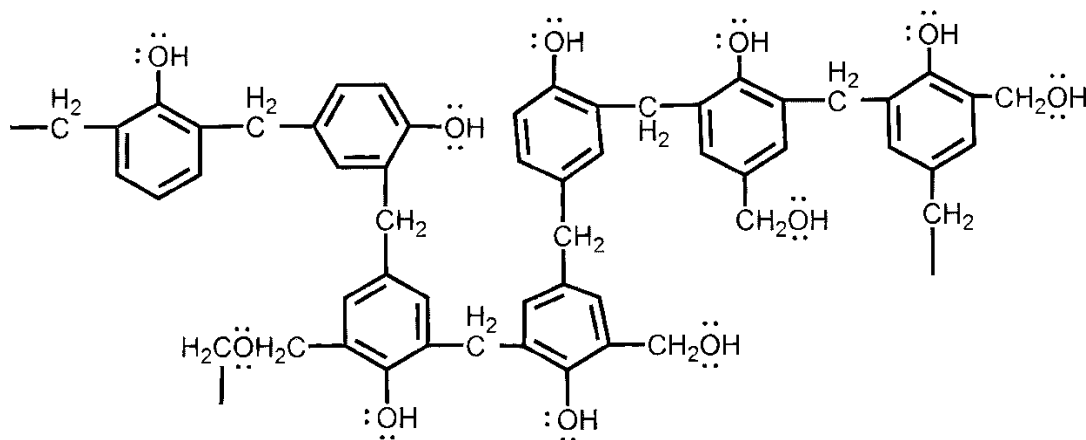
**CAPÍTULO 4. APARATOS Y SUSTANCIAS**

**4.1 Materiales Adsorbentes**

En el presente trabajo se utilizaron seis materiales carbonosos: una fibra de carbón activada comercial (FCA), tres FCAs sintetizadas modificando la FCA usando flujos de CO<sub>2</sub> (ACF800B, ACF800C y ACF800D) y dos carbones activados granulares (F400 y F400n) con distinta fecha de fabricación.

Los carbones activados F400 y F400n son fabricados industrialmente por la empresa Carbon Calgon, Corp., a partir de carbón bituminoso. En el proceso de fabricación, el carbón es pulverizado y se le agrega un pegamento o adhesivo para aglomerar las partículas, y luego se realiza la activación. El carbón activado queda permanentemente aglomerado y con una estructura sumamente porosa. El diámetro de las partículas varía en el intervalo 0.55-0.75 mm.

La FCA se conoce comercialmente como ACN-211-15 y es producida industrialmente por la empresa Kynol, a partir de resinas fenólicas denominadas Novoloid, cuya estructura química se ilustra en la Figura 4.1. La composición elemental aproximada de las fibras es de 76 % C, 18 % O y 6 % H. Las propiedades de textura de la FCA se presentan en la Tabla 4.1.



**Figura 4.1** Resina fenólica.

**Tabla 4.1.** Propiedades de la FCA reportadas por Kynol.

<i>Nombre Comercial</i>	<i>Área Específica (m<sup>2</sup>/g)</i>	<i>Espesor del hilo(mm)</i>
ACN-211-15	>1300	1.8

Las FCAs y los carbones activados granulares se lavaron dos veces con agua desionizada, con el objetivo de remover polvo e impurezas que pudieran contener.

En las instalaciones del Instituto de Catálisis y Petroquímica (ICP), del Consejo Superior de Investigaciones Científicas, Madrid, se efectuó la reactivación química de la FCA mediante flujos de CO<sub>2</sub>. Las condiciones de la reactivación se presentan en la Tabla 4.2.

**Tabla 4.2.** Condiciones de reactivación química de las fibras de carbón activado.

<i>Fibra Modificada</i>	<i>Temperatura de Activación (°C)</i>	<i>Rampa de Calentamiento (°C/min)</i>	<i>Flujo de CO<sub>2</sub> (100 mL/min)</i>	<i>Tiempo de Activación (min)</i>
ACF800B				300
ACF800C	800	10	100	450
ACF800D				150

#### 4.2 Reactivos

En la Tabla 4.3 se enlistan los reactivos y sustancias utilizados en la preparación de las soluciones necesarias para realizar los experimentos del presente trabajo.

**Tabla 4.3.** Reactivos y sustancias utilizados en el presente trabajo.

<i>Sustancia o Reactivo</i>	<i>% Pureza o Concentración</i>	<i>Fabricante</i>
Hidróxido de Sodio (NaOH)	98.7 %	Fermont
Ácido Fosfórico (H <sub>3</sub> PO <sub>4</sub> )	85.3%	
Acetonitrilo (C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> N)	99.9 % HPLC	TEDIA
Ácido Fórmico (CH <sub>2</sub> O <sub>2</sub> )	98-100 % HPLC	EMSURE
Ácido Clorhídrico (HCl)	36-38 %	J.T. Baker
Cloruro de Sodio (NaCl)	99.8 %	
Acetona (C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> O)	99.5 %	
Metanol (CH <sub>3</sub> OH)	99.9 % HPLC	
Ácido Clorhídrico (HCl)	0.01 N	
Hidróxido de Sodio (NaOH)	0.01 N	Golden Bell
Bicarbonato de Sodio (NaHCO <sub>3</sub> )	0.01 N	

**Tabla 4.3.** (Continuación)

<i>Sustancia o Reactivo</i>	<i>% Pureza o Concentración</i>	<i>Fabricante</i>
Carbonato de Sodio (Na <sub>2</sub> CO <sub>3</sub> )	0.01 N	
Trimetoprima (C <sub>14</sub> H <sub>18</sub> N <sub>4</sub> O <sub>3</sub> )	98 %	Sigma-Aldrich
Ampicilina (C <sub>16</sub> H <sub>19</sub> N <sub>3</sub> O <sub>4</sub> S)	96-100 %	
Cloruro de Cadmio (CdCl <sub>2</sub> )	79.5-81 %	Productos Químicos Monterrey

### 4.3 Soluciones Patrón

Las soluciones patrón utilizadas en este estudio se prepararon en matraces volumétricos y se aforaron con agua desionizada ultra pura. Las diferentes soluciones se enlistan en la Tabla 4.4.

**Tabla 4.4.** Condiciones utilizadas en la preparación de soluciones.

<i>Solución</i>	<i>Masa o Volumen del Reactivo</i>	<i>Concentración</i>	<i>Volumen Preparado</i>
Patrón de Ampicilina	1 g	1000 mg/L	1 L
Patrón de Trimetoprima	0.3 g	300 mg/L	1 L
Patrón de Cloruro de Cadmio	5.08 g	5000 mg/L	0.5 L
Patrón de Cloruro de Sodio	5.844 g	0.1 N	1 L
Patrón de Hidróxido de Sodio	10 g	1 N	0.25 L
Patrón de Ácido Clorhídrico	20.18 mL	1 N	0.25 L
Solución de Baja Fuerza Iónica (NaOH/HCl)	(0.4 g)/(0.807 mL)	0.01 N	1 L
Solución de Alta Fuerza Iónica (NaOH/HCl)	(20 g)/(40.37 mL)	0.5 N	1 L
Solución de Ácido Fosfórico 3% v/v	30 mL	1.57 N	1 L
Solución de Ácido Fórmico 0.1% v/v	1 mL	0.0265 mol/L	1 L

#### 4.4 Instrumentos y Equipo Analítico

El equipo analítico e instrumentos utilizados en la caracterización y realización de los experimentos de este estudio se muestra en la Tabla 4.5.

**Tabla 4.5.** Instrumentos y equipo analítico.

<i>Instrumento/ Equipo</i>	<i>Modelo</i>	<i>Marca</i>	<i>Aplicación</i>
Espectrofotómetro de Absorción Atómica	SpectrAA-220	Varian	Cuantificación del Cadmio (II) en solución acuosa
Espectrofotómetro UV-Vis	UV-1800	Shimadzu	Cuantificación de la Trimetoprima en solución acuosa
Carbono Orgánico Total	TOC-LCSN ASI-L	Shimadzu	Cuantificación del Carbono orgánico total
Cromatógrafo de Líquidos de Alta Resolución	Prominence	Shimadzu	Cuantificación de la Ampicilina en solución acuosa
Columna para Cromatógrafo de Líquidos	Nova-Pak ®C18	Supelco Analytical	
Fisisorción de Nitrógeno	ASAP 2020	Micromeritics	Determinación de las propiedades de textura de los materiales adsorbentes
Microscopio Electrónico de Barrido	JSM-6610LV	JEOL	Observación de la morfología de los materiales adsorbentes

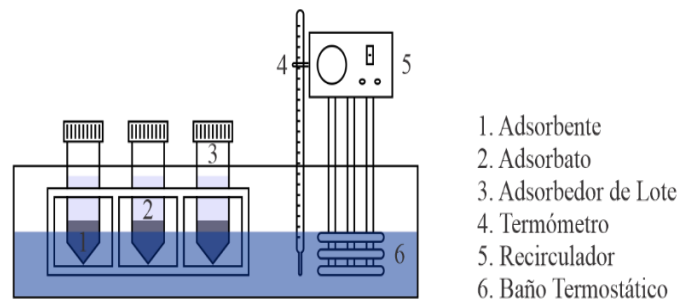


Tabla 4.5. (Continuación)

<i>Instrumento/ Equipo</i>	<i>Modelo</i>	<i>Marca</i>	<i>Aplicación</i>
Picnómetro de Helio	Accupyc 1330	Micromeritics	Determinación de la densidad del sólido de los materiales adsorbentes
Balanza Analítica	AE200	Mettler	Cuantificación de la masa de reactivos y adsorbentes
Potenciómetro	420A+	Thermo Electron	Medición del pH de soluciones
Agitador Orbital	OS 2 basic	Yellow Line	Agitación de los adsorbentes de lote.
Horno de Secado	DHG9140A	Luzeren	Secado de materiales adsorbentes y material de vidrio
Baño de Refrigeración	LCB-R13	DAIHAN LABTECH	Recirculación de agua en baños termostáticos a bajas temperaturas
Bomba Peristáltica	7519-06	Cole Parmer	Bombeo de solución en cinéticas de adsorción por lotes
Agitador de Precisión	HST20	Glas-Col	Agitación de solución en cinéticas de adsorción por lotes
Sonicador	2510R-MTH	BANSONIC	Sonicación de soluciones patrón
Recirculador	MX-CA11B	PolyScience	Recirculación de agua en baños termostáticos
Placa de Agitación y Calentamiento	3P46925	Barnstead Thermolyne	Agitación de soluciones

#### 4.5 Adsorbedor Experimental de Lote

Los experimentos de equilibrio de adsorción se realizaron en el adsorbedor de lote que se muestra en la Figura 4.2. Los adsorbedores de lote constan de un tubo falcón de 50 mL (3 en Figura 4.2), al cual se agrega la masa del adsorbente (1) junto con un volumen de una solución de concentración conocida del contaminante (2). El adsorbedor de lote se sumerge en un baño termostático (6) para mantener la temperatura constante, y se deja hasta que alcance el equilibrio. La temperatura del baño se mantiene constante con ayuda de un recirculador (5), que dispone de una resistencia interna, para aumentar y mantener la temperatura en el baño.



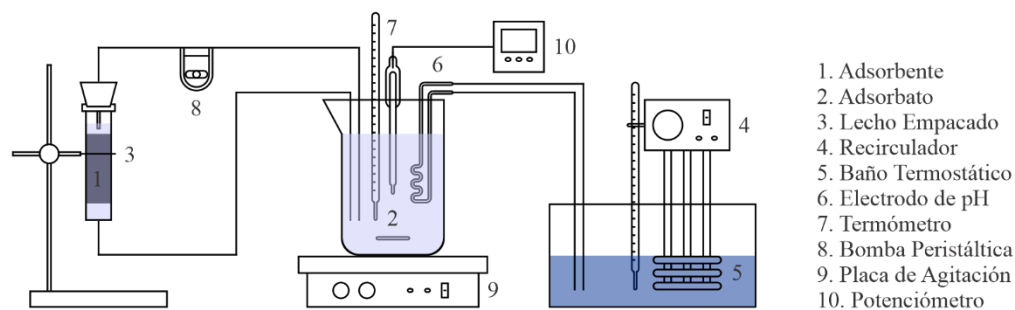
**Figura 4.2.** Sistema experimental del adsorbedor de lote.

#### 4.6 Adsorbedor de Lote de Lecho Empacado Diferencial

El sistema de adsorción de lecho empacado diferencial se ilustra en la Figura 4.3 y se utilizó para estudiar la velocidad de adsorción de Trimetoprima y Ampicilina sobre la FCA. El adsorbedor diferencial de lecho fijo consta de una columna de polietileno (1.98 cm de diámetro interno y 8.4 cm de altura) y de un vaso de precipitado que funciona como recipiente de la alimentación. El empaque (3) del lecho fijo consta de tres capas. La primera y última capas se forman empacando esferas de vidrio Pyrex<sup>®</sup> y malla de acero inoxidable. Estas capas permiten homogenizar el flujo de la solución acuosa a través del lecho empacado. La capa de en medio es la FCA (1) que se cortó en círculos y se empaco en la columna. La parte superior e inferior del lecho están conectadas por medio de mangueras de plástico (diámetro de 1.79 mm) al recipiente de la alimentación y una bomba peristáltica (8), alimentando la solución del contaminante al lecho y recirculando el efluente del lecho al recipiente de alimentación.

La temperatura de la solución de alimentación se mantiene constante por medio de un serpentín sumergido en el recipiente de la alimentación y por el cual se recircula agua a una temperatura específica. Además, el pH de la solución se mide con un potenciómetro (10) y un electrodo de pH (6), y se ajusta adicionando gotas de soluciones de NaOH o HCl 0.01 N.

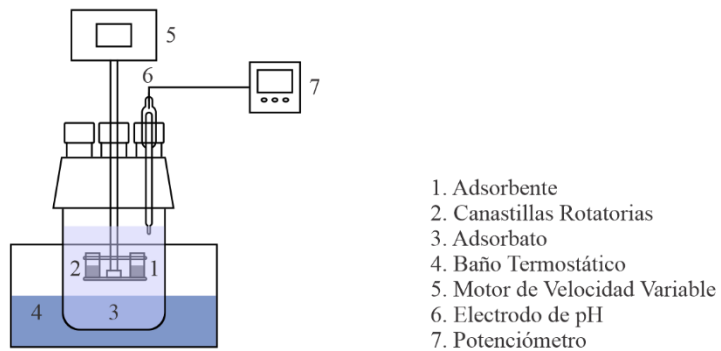
La solución del recipiente de alimentación se mantiene en agitación constante por medio de una barra magnética recubierta de Teflón<sup>®</sup> y que es accionada por una placa de agitación (9) ubicada justamente debajo del recipiente de la alimentación. De esta manera, la concentración del fármaco en la solución de alimentación no varía con respecto a la posición.



**Figura 4.3.** Sistema de adsorción de lecho empacado por lotes.

#### ***4.7 Adsorbedor de Lote de Tanque Agitado con Canastillas Rotatorias***

Un adsorbedor de tanque agitado con canastillas rotatorias se utilizó para realizar experimentos de velocidad de adsorción de Ampicilina sobre carbón activado granular (F400n), este adsorbedor se ilustra en la Figura 4.4. El adsorbedor de tanque agitado consta de un recipiente de vidrio Pyrex<sup>®</sup> de aproximadamente 1 L y un motor de velocidad variable (5) que mueve la flecha de un agitador. Las aspas del agitador se remplazan por canastillas cilíndricas de malla de acero inoxidable (2), donde se empaca al carbón granular (1). Durante el experimento, el adsorbedor se sumerge parcialmente en un baño termostático (4), y está cubierto con una tapa de vidrio con tres bocas, las cuales son utilizadas para la toma de muestra, el control de pH con ayuda de un electrodo de pH (6) y un potenciómetro (7). En la boca del centro se inserta la flecha del agitador que está conectada al motor de velocidad variable.



**Figura 4.4.** Sistema de adsorción de tanque agitado por lotes con canastillas rotatorias.

## CAPÍTULO 5. METODOLOGÍA EXPERIMENTAL

### 5.1 Determinación de las Propiedades de Textura de los Adsorbentes por Fisisorción de N<sub>2</sub>

Las propiedades de textura de los materiales adsorbentes (F400, F400n, FCA, ACF800B, ACF800C y ACF800D) se determinaron por medio de las isotermas de adsorción-desorción de nitrógeno, que se procuraron en un equipo de fisisorción, marca Micromeritics, modelo ASAP 2020.

El análisis de fisisorción se lleva a cabo a una temperatura de 77 K, que es la temperatura de ebullición del nitrógeno líquido, y todos los datos de equilibrio están referidos a la temperatura y presión estándares (0°C y 1atm). El método se describe brevemente enseguida. La muestra se trata previamente en un proceso de desgasificación para eliminar gases y agua que estén dentro de los poros, y luego, se inyecta un volumen conocido de N<sub>2</sub>, de tal manera que se alcance una presión de equilibrio (P) y se pueda cuantificar la cantidad de N<sub>2</sub> adsorbido. Esta etapa se repite hasta que el volumen del gas inyectado no ocasione variaciones de presión en el sistema. La acumulación de la masa adsorbida o desorbida a diferentes presiones, da como resultado la isoterma de adsorción-desorción de N<sub>2</sub>.

#### 5.1.1 Modelo de Brunauer, Emmet y Teller (BET)

Al comienzo de la fisisorción de N<sub>2</sub>, las moléculas del gas entran libremente hacia los microporos y comienzan a llenarlos, formando una capa uniforme de moléculas de N<sub>2</sub>; posteriormente, las moléculas se comienzan a apilar unas sobre otras, similar a un proceso de licuefacción. Los autores de este modelo dedujeron una ecuación que permite obtener el volumen ocupado por las moléculas del N<sub>2</sub> cuando se forma una monocapa, y a partir de esta información se calcula el área específica del material.

A continuación, se presenta la forma lineal de la ecuación BET (Thommes et al., 2015):

$$\frac{1}{V_{N_2} \left( \frac{P}{P_0} - 1 \right)} = \left( \frac{1}{V_m C} \right) + \left( \frac{C - 1}{C V_m} \right) \left( \frac{P}{P_0} \right) \quad (5.1)$$

$$m_{BET} = \left( \frac{C - 1}{C V_m} \right) \quad (5.2)$$

$$b_{BET} = \left( \frac{1}{V_m C} \right) \quad (5.3)$$

Donde  $m_{\text{BET}}$  es la pendiente de la ecuación linealizada del modelo BET,  $\text{g/cm}^3$ ;  $b_{\text{BET}}$  es la intersección con el eje de la ecuación linealizada del modelo BET,  $\text{g/cm}^3$ ;  $P$  es la presión de  $\text{N}_2$  en el equilibrio, atm;  $P_0$  es la presión de vapor del  $\text{N}_2$  a 77K y 1atm, atm;  $V_{\text{N}_2}$  es el volumen de  $\text{N}_2$  gas adsorbido a una determinada presión de equilibrio,  $\text{cm}^3/\text{g}$ ;  $V_m$  es el volumen de  $\text{N}_2$  adsorbido que forma una monocapa,  $\text{cm}^3/\text{g}$ ;  $C$  es un parámetro adimensional relacionado con la energía de adsorción y licuefacción. La ecuación BET se aplica en el intervalo de presiones relativas ( $P/P_0$ ) restringido entre 0.0001 y 0.3.

El área BET o área específica se calcula a partir de las siguientes ecuaciones, derivadas a partir del modelo BET.

$$C = \frac{m_{\text{BET}}}{b_{\text{BET}}} + 1 \quad (5.4)$$

$$V_m = \frac{1}{b_{\text{BET}} C} \quad (5.5)$$

$$S_{\text{BET}} = \frac{1 \times 10^{-18} P V_m N_A A_p}{RT} \quad (5.6)$$

Donde  $S_{\text{BET}}$  es el Área BET,  $\text{m}^2/\text{g}$ ;  $N_A$  es el número de Avogadro, moléculas/mol;  $A_p$  es el área proyectada de la molécula del  $\text{N}_2$ ,  $\text{nm}^2/\text{molécula}$ ;  $R$  es la constante de los gases ideales,  $(82.0574 \text{ cm}^3 \text{ atm})/(\text{mol K})$ ;  $T$  es temperatura de 273.15 K;  $P$  es la presión de 1 atm, atm.

### 5.1.2 Modelo de Dubinin-Radushkevich (DR)

En fisisorción de  $\text{N}_2$ , la adsorción y llenado los microporos de  $\text{N}_2$  se puede describir por el modelo empírico de Dubinin-Radushkevich. El gas de  $\text{N}_2$  se adsorbe llenando por completo los microporos del material y este modelo se puede emplear para determinar las propiedades de los microporos de los materiales.

Enseguida, se muestra la forma lineal de la ecuación de Dubinin-Radushkevich (Lowell et al., 2004):

$$\ln(W) = \ln(W_0) - \left(\frac{RT}{\beta E_0}\right)^2 \left(\ln\left(\frac{P}{P_0}\right)\right)^2 \quad (5.7)$$

$$m_{\text{DR}} = \left(\frac{RT}{\beta E_0}\right)^2 \quad (5.8)$$

$$b_{\text{DR}} = \ln(W_0) \quad (5.9)$$

Donde  $m_{DR}$  es la pendiente de la ecuación lineal del modelo de DR;  $b_{DR}$  es la intersección con el eje de la ecuación linealizada del modelo de DR,  $\ln(\text{cm}^3/\text{g})$ ;  $W$  es el volumen de  $N_2$  líquido adsorbido a una determinada presión de equilibrio,  $\text{cm}^3/\text{g}$ ;  $W_0$  es el volumen total de los microporos,  $\text{cm}^3/\text{g}$ ;  $E_0$  es la energía de adsorción,  $\text{kJ}/\text{mol}$ ;  $\beta$  es el parámetro de afinidad del adsorbato, siendo  $1/3$  para  $N_2$ ;  $R$  es la constante de los gases ideales, ( $8.3144 \times 10^{-3} \text{ kJ}/(\text{mol K})$ ). El intervalo de operación en el que se puede aplicar el modelo empírico de DB en la isoterma de adsorción-desorción de  $N_2$  está restringido a presiones relativas ( $P/P_0$ ) entre 0 y 0.05.

Las propiedades de textura de los microporos se calculan por medio de la ecuación propuesta por Stoeckli y Ballerini, (1991) y deducidas a partir del modelo DR.

$$W_0 = e^{(b_{DR})} \quad (5.10)$$

$$E_0 = \frac{1}{\beta} \sqrt{\frac{1}{-m_{DR}}} \quad (5.11)$$

Si  $E_0 > 20 \text{ kJ}/\text{mol}$

$$L_0 = \frac{24}{E_0} \quad (5.12.1)$$

Si  $E_0 < 20 \text{ kJ}/\text{mol}$

$$L_0 = \frac{10.8}{E_0 - 11.4} \quad (5.12.2)$$

$$S_{\text{micDR}} = \frac{2000(W_0)}{L_0} \quad (5.13)$$

Donde  $S_{\text{micDR}}$  es el área de los microporos DR,  $\text{m}^2/\text{g}$ ;  $L_0$  es la anchura de microporos, nm.

### 5.1.3 Modelo t-Plot

El modelo t-plot fue propuesto por Lippens y de Boer (1965). Tiene como principio el comparar una isoterma tipo II (materiales sin poros o únicamente con macroporos) de un material de referencia, con una isoterma del material utilizado (Lowell et al., 2004). Las curvas de referencia (t-referencia) son específicas para materiales con ciertas características y son dependientes de la presión relativa de la isoterma de fisisorción, al igual que del adsorbato utilizado. Algunas de las ecuaciones para calcular t son las ecuaciones (5.14) - (5.16).

*Adsorción de N<sub>2</sub> Sobre  
Carbones*

$$t = 0.088 \left(\frac{P}{P_0}\right)^2 + 0.645 \left(\frac{P}{P_0}\right) + 0.298 \quad (5.14)$$

*Adsorción de N<sub>2</sub> Sobre  
Materiales poco Porosos y  
Superficies Oxidadas*

$$t = \left(\frac{1}{10}\right) \left(\frac{13.99}{\log\left(\frac{P_0}{P}\right) + 0.034}\right)^{\frac{1}{2}} \quad (5.15)$$

*Adsorción de N<sub>2</sub> Sobre  
Superficies Oxidadas*

$$t = 0.60533 \left(\frac{1}{\ln\left(\frac{P_0}{P}\right)}\right)^{\frac{1}{3}} \quad (5.16)$$

La cantidad adsorbida del adsorbato utilizado, en este caso N<sub>2</sub>, debe ser graficada en contra de t, en un rango de presiones relativas (P/P<sub>0</sub>) aproximado de 0.15 a 0.5 para carbones activados. Se forma una relación lineal. A partir ésta línea recta puede determinarse el volumen de los microporos y el área de microporos tomando como base el área externa (mesoporos anchos+ macroporos), como lo indican las ecuaciones (5.17) - (5.19).

$$S_{ext} = 1.547m_t \quad (5.17)$$

$$S_{mic2} = S_{BET} - S_{ext} \quad (5.18)$$

$$V_{mic} = \frac{1.547b_t}{1000} \quad (5.19)$$

Donde m<sub>t</sub> es la pendiente de la ecuación del método t-Plot, (cm<sup>3</sup> de N<sub>2</sub> gas)/(g nm); b<sub>t</sub> es la intersección con el eje de la ecuación del método t-Plot, (cm<sup>3</sup> de N<sub>2</sub> gas)/g; S<sub>ext</sub> es el área externa, m<sup>2</sup>/g; S<sub>mic2</sub> es el área de los microporos t-Plot, m<sup>2</sup>/g; V<sub>mic</sub> es el volumen de los microporos, cm<sup>3</sup>/g.

#### 5.1.4 Propiedades de Textura Promedio

Las propiedades de textura promedio del material se calculan a través de las ecuaciones (5.20) y (5.21):

$$V_p = \frac{1.547V_{ads}}{1000} \quad (5.20)$$

$$D_p = \frac{4000V_p}{S_{BET}} \quad (5.21)$$

Donde V<sub>p</sub> es el volumen promedio de poros, cm<sup>3</sup>/g; V<sub>ads</sub> es el volumen de N<sub>2</sub> gas adsorbido cuando P/P<sub>0</sub> = 0.98, cm<sup>3</sup>/g; D<sub>p</sub> es el diámetro promedio de poros, nm.



### 5.2 Determinación Experimental de la Fracción Hueca y la Densidad de la Partícula

La densidad del sólido se determinó utilizando el principio de Arquímedes con ayuda de un picnómetro de Helio, marca Micromeritics, modelo Accupyc 1330. La fracción hueca y densidad de partícula (densidad aparente) se evaluaron a partir de las siguientes ecuaciones:

$$\rho_p = \frac{\rho_s}{1 + V_p \rho_s} \quad (5.22)$$

$$\varepsilon_p = \frac{V_p}{V_p + \frac{1}{\rho_s}} \quad (5.23)$$

Donde  $\rho_s$  es la densidad del sólido,  $\text{cm}^3/\text{g}$ .

### 5.3 Determinación de la Concentración de los Sitios Activos Superficiales

Los grupos funcionales en las superficies de los adsorbentes se determinaron por el método de titulación ácido-base propuesto por Bohem (1994). El método consiste en contactar al material con soluciones ácidas y básicas para que neutralicen los sitios activos, y posteriormente, titularlas para determinar por diferencia las concentraciones de los sitios ácidos (carboxílicos, fenólicos y lactónicos) y básicos.

El procedimiento experimental se describe a continuación. En tubos de centrifuga de 50 mL, se colocó una masa de 1 g del material adsorbente y se añadieron 50 mL de la solución neutralizante valorada. Los tubos se dejaron cerrados por un periodo de 7 días en un baño termostático a 25 °C, y se agitaron por un periodo de 15 minutos diariamente. Después, se midieron dos alícuotas de 20 mL cada una y se titularon. Las titulaciones se realizaron de manera manual con buretas de 50 mL.

Los sitios ácidos y básicos son neutralizados y posteriormente titulados de acuerdo a la Tabla 5.1. Las concentraciones de los sitios Lactónicos y Fenólicos se calculan de manera indirecta por medio de diferencias, las cuales se representan por las ecuaciones (5.24) - (5.26).

$$\text{Ácidos Totales} = \text{Carboxílicos} + \text{Lactónicos} + \text{Fenólicos} \quad (5.24)$$

$$\text{Lactónicos} = (\text{Carboxílicos} + \text{Lactónicos}) - \text{Carboxílicos} \quad (5.25)$$

$$\text{Fenólicos} = \text{Ácidos Totales} - \text{Carboxílicos} - \text{Lactónicos} \quad (5.26)$$

**Tabla 5.1.** Soluciones neutralizantes y titulantes para los sitios activos.

<i>Sitio Activo</i>	<i>Sitios Activos</i>	<i>Solución Neutralizante</i>	<i>Solución Titulante</i>
Ácido	Ácidos totales	Solución de NaOH 0.01 N	Solución de HCl 0.01 N
	Carboxílicos	Solución de NaHCO <sub>3</sub> 0.01 N	Solución de HCl 0.01 N
	Lactónicos + Carboxílicos	Solución de Na <sub>2</sub> CO <sub>3</sub> 0.01 N	Solución de HCl 0.01 N
Básico	Básicos totales	Solución de HCl 0.01 N	Solución de NaOH 0.01 N

Los volúmenes finales de titulación se determinaron a través del método de la primera derivada. Este método consiste en aproximar la derivada del pH con respecto al volumen utilizado del titulante. El volumen promedio donde se presenta un máximo o un mínimo, es el volumen en el que se neutralizó por completo la solución. A continuación, se presentan las ecuaciones utilizadas para el método de la primera derivada:

$$\frac{d(\text{pH})}{dV} \approx \frac{\Delta(\text{pH})}{\Delta V} = \frac{\text{pH}_{i+1} - \text{pH}_i}{V_{i+1} - V_i} \quad (5.27)$$

$$\bar{V} = \frac{V_{i+1} + V_i}{2} \quad (5.28)$$

Donde pH<sub>i</sub> es el potencial de hidrogeno “i”,  $-\log(\{H^+\})$ ; V<sub>i</sub> es el volumen de titulante en el punto “i”, mL;  $\bar{V}$  es el volumen promedio de solución titulante, mL.

Las ecuaciones para obtener la concentración de los sitios activos se presentan a continuación.

$$C_{ft} = \frac{V_T C_T}{V_m} \quad (5.29)$$

$$C_{S_{act}} = \frac{1000V_{in}(C_{in} - C_{ft})}{m} \quad (5.30)$$

Donde C<sub>ft</sub> es la concentración final de la solución neutralizante, eq /L; C<sub>in</sub> es la concentración inicial de la solución neutralizante, eq /L; C<sub>S<sub>act</sub></sub> es la concentración de los sitios activos, (meq)/g; C<sub>T</sub> es la concentración de la solución titulante, eq /L; V<sub>in</sub> es el volumen inicial de la solución neutralizante, L; V<sub>T</sub> es el volumen requerido de la solución titulante, mL; V<sub>m</sub> es el volumen de la muestra, mL; m es la masa del adsorbente, g.

#### 5.4 Determinación de la Distribución de la Carga Superficial y del Punto de Carga Cero

El  $pH_{PCC}$  y la distribución de carga superficial ( $C_S$ ) de los adsorbentes se determinaron por el método de titulación ácido-base propuesto por Babic y cols. (1999). A partir de soluciones valoradas de HCl e NaOH 0.1 N se prepararon 17 soluciones neutralizantes, adicionando volúmenes de 0.5 a 10 mL. Estas se aforaron con una solución de NaCl 0.1 N, consiguiéndose una serie de soluciones neutralizantes con pH entre 2 y 12. A estas soluciones se les denominó blancos y se les midió el pH a las mismas. Luego, se graficó el pH de la solución contra el volumen del ácido/base utilizado y se obtuvo la curva potenciométrica de referencia.

Adicionalmente, masas de 0.05 g ó 0.15 g (dependiendo la disponibilidad del material) del adsorbente se agregaron a 17 tubos Falcon de 50 mL y luego, se añadieron 20 mL de las soluciones blanco previamente preparadas. Los tubos sellados se colocaron en un baño termostático a 25 °C por un periodo de 7 días, y las soluciones se agitaban 15 minutos diariamente colocando los tubos en un agitador orbital. Una vez transcurrido el tiempo de equilibrio de 7 días, se midió el pH final, y de igual manera se graficó la curva de titulación potenciométrica característica del material. La intersección entre las curvas de titulación potenciométricas del material y de referencia, da como resultado el  $pH_{PCC}$ .

La carga superficial del material adsorbente,  $C_S$ , se obtuvo mediante el siguiente procedimiento gráfico. Gráficamente, se determinó el volumen requerido para que el pH en las curvas de titulación potenciométricas del material y de referencia sea el mismo. Al volumen requerido para alcanzar el equilibrio en la curva potenciométrica de referencia se le denominó  $V_B$ ; mientras que, al de la curva potenciométrica del material se le denominó  $V_A$ .

La masa de protones adsorbidos y la  $C_S$  se calcularon con las siguientes ecuaciones:

$$q_{H^+} = \frac{C_N(V_B - V_A)}{1000m} \quad (5.31)$$

$$C_S = \frac{q_{H^+}F}{S_{BET}} \quad (5.32)$$

Donde  $q_{H^+}$  es la concentración de protones adsorbidos a un cierto pH, mol/g;  $C_N$  es la concentración de la solución neutralizante, mol/L;  $m$  es la masa del adsorbente, g;  $V_B$  es el volumen de la solución valorada de HCl/NaOH necesario para alcanzar el equilibrio en la curva de referencia, mL;  $V_A$  es el volumen de la solución valorada de HCl/NaOH necesario

para alcanzar el equilibrio en la curva potenciométrica del material, mL;  $C_s$  es la carga superficial, C/m<sup>2</sup>; F es la constante de Faraday, C/mol.

### **5.5 Microscopia Electrónica de Barrido (SEM)**

La superficie del material y su morfología se examinaron por microscopia electrónica de barrido (SEM), en un microscopio marca JEOL, modelo JSM-6610LV. La técnica se fundamenta en el uso de un haz de electrones que irradia a la muestra, generando señales de respuesta por parte de los átomos afectados. Las señales de respuesta más comunes son los rayos X, electrones secundarios, electrones retro dispersados y electrones Auger. En conjunto estas señales permiten evaluar la morfología y composición elemental de la superficie de un material.

Previo al análisis, los materiales se secaron en una estufa por 72 horas. Aquellos que se encontraban saturados, se secaron a una temperatura de 40 °C. En tanto que, las muestras sin saturar se secaron a una temperatura de 105 °C. Para el análisis de las muestras no se requirió recubrimiento de las mismas. Se colocaron en un disco porta muestras, se alinearon para evitar que estuvieran a diferentes alturas y se selló el compartimiento en el que se introdujeron. Se encendió la bomba de vacío y la presión en la cámara del equipo se estabilizó a  $1 \times 10^{-4}$  Torr en aproximadamente dos minutos. Finalmente, se establecieron las condiciones de trabajo apropiadas para cada muestra (distancia de trabajo, tamaño de abertura, voltaje de aceleración y corriente de la muestra).

### **5.6 Cuantificación de la Trimetoprima**

La concentración de TMP en solución acuosa se determinó por espectrofotometría UV-Visible, en un espectrofotómetro de doble haz, marca Shimadzu, modelo UV-1800. En esta técnica se evalúa la cantidad de energía adsorbida por las moléculas a una longitud de onda específica. La absorbancia se relaciona directamente con la concentración.

Se prepararon 8 soluciones de TMP en un intervalo de concentraciones de 0.45-60 mg/L a diferentes pH y fuerzas iónicas. Después, se realizaron barridos en intervalos de longitud de onda de 200-350 nm para determinar la longitud de onda de máxima absorbancia. Se encontró que la longitud de onda de mayor absorbancia era función tanto del pH como de la fuerza iónica, y éstas se enlistan en la Tabla 5.2.

Las curvas de calibración se ajustaron con el modelo lineal siguiente:

$$C_{\text{TMP}} = Fd(m_{\text{TMP}}\text{Abs}) \quad (5.33)$$

Donde  $C_{\text{TMP}}$  es la concentración de TMP, mg/L;  $Fd$  es un factor de dilución;  $\text{Abs}$  es la absorbancia, uA;  $m_{\text{TMP}}$  es la pendiente de la curva de calibración de TMP, mg/(L uA).

**Tabla 5.2.** Longitudes de onda de máxima absorbancia de la TMP.

<i>pH</i>	<i>Fuerza Iónica, I</i>	
	<i>0.01 N</i>	<i>0.5 N</i>
<i>4</i>	272 nm	276 nm
<i>7</i>	281 nm	281 nm
<i>10</i>	287 nm	287 nm

## 5.7 Cuantificación de la Ampicilina

### 5.7.1 Determinación de la Ampicilina por HPLC

La concentración de AMP en solución acuosa se cuantificó por cromatografía de líquidos de alta resolución (HPLC), en un cromatógrafo de líquidos, marca Shimadzu Prominence, equipado con un detector de UV-Visible. Esta técnica, permite evaluar la concentración de un componente a partir de la intensidad de los picos provenientes de los cromatogramas. La concentración se puede correlacionar con la altura de pico como con el área bajo la curva.

La columna cromatográfica utilizada fue una Nova-Pak ®C18 (tamaño de partícula de 3- $\mu\text{m}$  y dimensiones de 4.6 $\times$ 50 mm). La fase móvil consistió en una mezcla de ácido fosfórico/agua en una relación al 3 % en v/v y acetonitrilo puro, que se introducían al sistema en un flujo de 1.2 mL/min por gradientes de presiones en una relación 30/70, respectivamente. La longitud de onda del detector se fijó en 205 nm y el volumen de inyección fue de 10  $\mu\text{L}$ . El tiempo de retención de la AMP fue de aproximadamente 30 segundos y presentó un pico característico simétrico y bien definido.

Se prepararon 9 estándares de AMP en un intervalo de concentraciones de 1-300 mg/L, no se presentaron desviaciones en el método por efecto del pH o la concentración del fármaco. Los estándares fueron ajustados con el modelo lineal siguiente:

$$C_{\text{AMP}} = Fd(m_{\text{AMP}}A_r + b_{\text{AMP}}) \quad (5.34)$$

Donde  $C_{AMP}$  es la concentración de AMP, mg/L;  $F_d$  es un factor de dilución;  $A_r$  es el área de pico, uA;  $m_{AMP}$  es la pendiente de la curva de calibración de AMP, mg/(L uA);  $b_{AMP}$  es la intersección de la línea recta de calibración de AMP, mg/L.

### 5.7.2 Determinación de la Ampicilina por TOC

La concentración de AMP en solución acuosa se determinó por la técnica del carbono orgánico total (TOC), en un analizador TOC, marca Shimadzu, modelo LCSH/CSN, equipado con un detector de infrarrojo no dispersivo. Esta técnica permite evaluar el TOC (carbono enlazado con oxígeno o hidrogeno que forma compuestos orgánicos) a partir de la diferencia entre el carbono inorgánico (IC) y el carbono total (TC). Las muestras de TC son calcinadas, y la señal proveniente del  $CO_2$  resultante de la combustión es correlacionado directamente con la concentración de TC. Mientras que, las muestras de IC son acidificadas con HCl hasta tener un pH de 3 o inferior, lo que propicia la descomposición de los carbonatos y bicarbonatos en  $CO_2$ .

Se prepararon 9 estándares de AMP en un intervalo de concentraciones de 1-350 mg/L y se determinó la concentración de TOC. Esto permitió relacionar la concentración de AMP con la concentración de TOC por medio de la siguiente ecuación:

$$C_{AMP} = F_d(m_{TOC-AMP}TOC + b_{TOC-AMP}) \quad (5.35)$$

Donde  $F_d$  es un factor de dilución; TOC es la concentración de carbono orgánico total, mg/L TOC;  $m_{TOC-AMP}$  es la pendiente de la curva de calibración de TOC-AMP, mg/(L mg TOC/L);  $b_{TOC-AMP}$  es la intersección con el eje de la curva de calibración de TOC-AMP, mg/L.

### 5.8 Cuantificación del Cadmio (II) en Solución Acuosa

La concentración del ion  $Cd^{2+}$  en solución acuosa se determinó por espectrofotometría de absorción atómica de doble haz, en un espectrofotómetro, marca Varian, modelo SpectrAA-220. La técnica se fundamenta en medir la energía radiante absorbida por los átomos de un metal específico en su estado basal. En primera instancia, la muestra se nebulizada por una mezcla de óxido nitroso/acetileno. Subsecuentemente, las gotas nebulizadas entran a un quemador, donde se evapora el solvente y el metal se reduce hasta su estado atómico. Los átomos del metal absorben la luz emitida por una lámpara de cátodo hueco específica para ese metal, y la concentración del metal es relacionada con la luz absorbida. Se utilizó una lámpara de cátodo hueco de Cd(II) con una corriente de operación

de 4 mA y un paso de ancho de luz de 0.5 nm. La longitud de onda de mayor absorbancia fue de 326.1 nm.

Se prepararon entre 8-9 estándares en el intervalo de 5-620 mg/L para las curvas de calibración de Cd(II). La concentración y la absorbancia se correlacionaron con la siguiente ecuación:

$$C_{Cd} = Fd \left( \frac{Abs}{aAbs^2 + bAbs + c} \right) \quad (5.36)$$

Donde  $C_{Cd}$  es la concentración de Cd(II), mg/L; Abs es la absorbancia, uA, Fd es un factor de dilución;  $a$  es un parámetro de ajuste de la curva de calibración de Cd(II), L/(mg uA);  $b$  es un parámetro de ajuste de la curva de calibración de Cd(II), L/mg;  $c$  es un parámetro de ajuste de la curva de calibración de Cd(II), (uA L)/mg.

### ***5.9 Método para la Obtención de los Datos Experimentales del Equilibrio Individual de Adsorción***

Primeramente, se prepararon 1 L de las soluciones patrón de 300 y 1000 mg/L de TMP y AMP, respectivamente, que se aforaron con soluciones a pH y fuerza iónica previamente determinados para cada caso.

Los datos experimentales del equilibrio de adsorción de TMP y AMP sobre los materiales carbonosos se obtuvieron en un adsorbedor de lote (Ver sección 4.5). Las soluciones de concentración de fármaco conocidas se prepararon en matraces volumétricos de 25 mL, adicionando una alícuota de la solución patrón y aforando hasta la marca con la solución de fuerza iónica y pH apropiados para cada experimento. Se tomó una alícuota de 5 mL para analizar y corroborar la concentración inicial. Posteriormente, a cada adsorbedor se añadió una masa de 0.025 g del adsorbente y 20 mL de la solución de fármaco de concentración inicial conocida. Enseguida, los adsorbedores de lote se sumergieron parcialmente en un baño termostático para mantener la temperatura constante. Los adsorbedores se abstraen del baño por periodos de 15 min para agitarlos y ajustar el pH de cada adsorbedor al de referencia. Los ajustes de pH de los adsorbedores se realizaron con soluciones con fuerza iónica de 0.01 N y 0.1 N (HCl/NaOH), procurando ocupar el menor volumen posible de las mismas.

Las soluciones y el adsorbente permanecieron en contacto por un periodo de 10 días, lo que permitió asegurar que se había alcanzado el equilibrio. Una vez finalizado este periodo,

se tomó una alícuota de 5 mL de la solución de cada adsorbedor. Subsecuentemente se procedió a cuantificar las concentraciones iniciales y finales de cada adsorbedor de lote.

La capacidad de adsorción se determinó con ayuda del siguiente balance de masa del adsorbato:

***Balance General de Masa***

$$q = \frac{V_0 C_0 - V_f C_f - \sum_{i=1}^n V_i C_i}{m} \quad (5.37)$$

***Balance de Masa Simplificado***

$$q = \frac{V(C_0 - C_f)}{m} \quad (5.38)$$

$$V_f = V_0 - \sum_{i=1}^n V_i + V_a \quad (5.39)$$

$$V_0 = V_f, V_i = V_a = 0 \quad (5.40)$$

Donde q es la masa del soluto adsorbida, mg/g; m es la masa del adsorbente en el adsorbedor, g; C<sub>0</sub> es la concentración inicial del soluto, mg/L; C<sub>f</sub> es la concentración final del soluto en el equilibrio de adsorción, mg/L; C<sub>i</sub> es la concentración del soluto en la muestra i, mg/L; V<sub>0</sub> ó V es el volumen inicial de solución, L; V<sub>f</sub> es el volumen final de solución en el equilibrio de adsorción, L; V<sub>i</sub> es el volumen de la muestra i, L; V<sub>a</sub> es el volumen añadido debido a ajustes de pH, L.

***5.10 Método para la Obtención de los Datos Experimentales del Equilibrio de Adsorción Binario***

Se prepararon soluciones patrón de 1000 y 5000 mg/L de AMP y Cd(II), respectivamente. Las soluciones binarias de los mismos contaminantes se prepararon agregando alícuotas de estas soluciones patrón a matraces volumétricos de 50 mL, que se aforaron con soluciones de pH y fuerza iónica previamente establecidas. Las concentraciones de las soluciones binarias variaron en el intervalo de 50-300 mg/L.

Las soluciones binarias se prepararon fijando la concentración de uno de los contaminantes en 50 mg/L y variando la concentración del otro contaminante a partir de 50 mg/L en incrementos de 50 mg/L hasta llegar a 300 mg/L. Posteriormente, se incrementó la concentración del primer contaminante a 100 mg/L, y comenzó a variarse la concentración del segundo contaminante de la misma manera antes descrita. Como resultado se obtuvieron 36 soluciones con diferentes concentraciones binarias, más 12 adicionales de las concentraciones individuales.



En tubos de centrifuga se contactaron 50 mg del adsorbente con 40 mL de la solución binaria de los contaminantes. Los adsorbedores se mantuvieron en un baño termostático, de donde se les retiraba únicamente para agitación durante 15 minutos y ajustes de pH. Al finalizar el periodo de equilibrio de 10 días, la solución se filtró y se analizó para cuantificar las concentraciones de Cd(II) y AMP en el equilibrio. La masa de cada contaminante adsorbida sobre el material se calculó realizando un balance de masa de cada contaminante.

### ***5.11 Velocidad de Adsorción en un Adsorbedor de Lote de Lecho Empacado***

Los datos experimentales de las curvas de decaimiento de la concentración durante la adsorción sobre FCA, se obtuvieron en el sistema que se muestra en la sección 4.6. La FCA se recortó en pequeños círculos, cuyo diámetro era ligeramente inferior al diámetro de la columna. Subsecuentemente, el empaque del lecho del adsorbedor consistió de tres capas. La primera (3 cm de altura) fue de esferas de vidrio (0.5 cm de diámetro), la segunda (dependiendo de la masa, la altura es 0.3-1 cm) de una cierta masa de círculos de FCA y la tercera (2.5 cm de altura) fue nuevamente de esferas de vidrio. Se estimó la alícuota de la solución patrón para preparar la concentración inicial previamente definida, así como el volumen de solución para aforar. El volumen de la solución para aforar se agregó al recipiente de alimentación y se arrancó la bomba peristáltica para que esta solución fluyera a través del lecho del adsorbente. El objetivo de esta etapa es llenar los poros de la FCA y estabilizar el pH de la solución agregando soluciones de I de 0.01 y 0.1 N (HCl/NaOH).

Una vez controlado el pH de la solución, se substrajo una alícuota de la solución del recipiente de alimentación, y se añadió la misma alícuota de solución patrón para obtener la concentración inicial previamente fijada. La solución se muestreo para corroborar la concentración inicial, y se arrancó la bomba peristáltica; sin embargo, el cronometro se inició, hasta que la solución empezó a fluir a través del lecho del adsorbente. Los cambios de pH a lo largo del experimento se controlaron agregando gotas de soluciones de I de 0.01 y 0.1 N (HCl/NaOH). La solución del recipiente se muestreo en tiempos preestablecidos, y el volumen de cada muestra fue de 1 mL.

### ***5.12 Velocidad de Adsorción en un Adsorbedor de Lote de Tanque Agitado con Canastillas Rotatorias***

Los datos experimentales de las curvas de decaimiento de la concentración durante la adsorción sobre F400n, se obtuvieron en el sistema que se muestra en la sección 4.7.



Inicialmente, se estimó la alícuota de la solución patrón para preparar la solución de concentración inicial conocida, así como el volumen de solución para aforar. Se agregó una cierta masa de F400n al adsorbedor de canastillas rotatorias, y luego, se adicionó el volumen de solución para aforar. Ambos se dejaron en contacto durante 15 minutos para que los poros del F400n se llenaran. El pH de la solución se ajustó hasta que se mantuvo constante. Esto último se efectuó agregando gotas de soluciones de I de 0.01 y 0.1 N (HCl/NaOH). Una vez que se estabilizó el pH de la solución, se añadió la alícuota de la solución patrón y rápidamente se tomó una muestra de 1 mL de la solución y se inició el cronómetro. La muestra se analizó posteriormente para corroborar la concentración inicial y se considera que no existe un error significativo en la determinación de la concentración inicial, puesto que los procesos de adsorción en los carbones activados granulares son generalmente lentos. Los cambios de pH a lo largo del experimento se controlaron como ya se mencionó anteriormente. La solución del adsorbedor se muestreo en tiempos preestablecidos, y el volumen de cada muestra fue de 1 mL. Las muestras se analizaron posteriormente para determinar las concentraciones de las mismas.

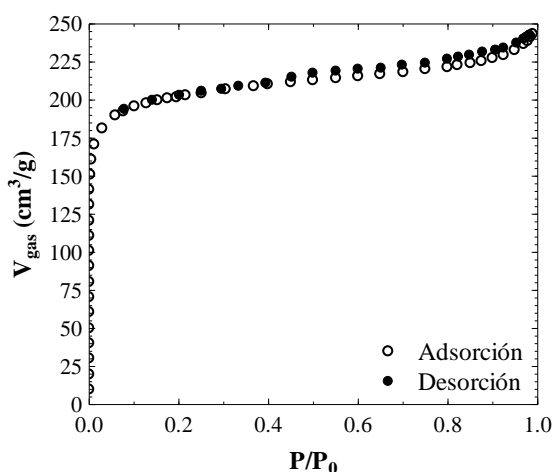


## CAPÍTULO 6. DATOS EXPERIMENTALES Y CÁLCULOS

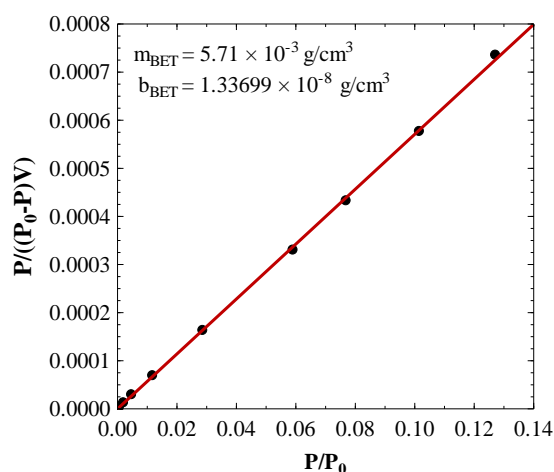
## 6.1 Propiedades de Textura

De acuerdo a lo descrito en la sección 5.1, se realizaron los experimentos de fisorción de  $N_2$  a 77 K de los materiales adsorbentes, y se interpretaron por los métodos de Dubinin-Radushkevich, BET y t-Plot. A continuación, se ejemplifican los cálculos efectuados para la determinación de las propiedades de textura del carbón activado F400n.

En el caso del modelo BET, la isoterma de adsorción de  $N_2$  (Figura 6.1) se grafica en forma lineal como se muestra en la Figura 6.2.



**Figura 6.1.** Isotherma de adsorción-desorción de  $N_2$  a 77 K del carbón activado F400n.



**Figura 6.2.** Forma lineal de la isoterma BET del carbón F400n en el intervalo

$$1.42 \times 10^{-4} \leq \frac{P}{P_0} \leq 0.127.$$

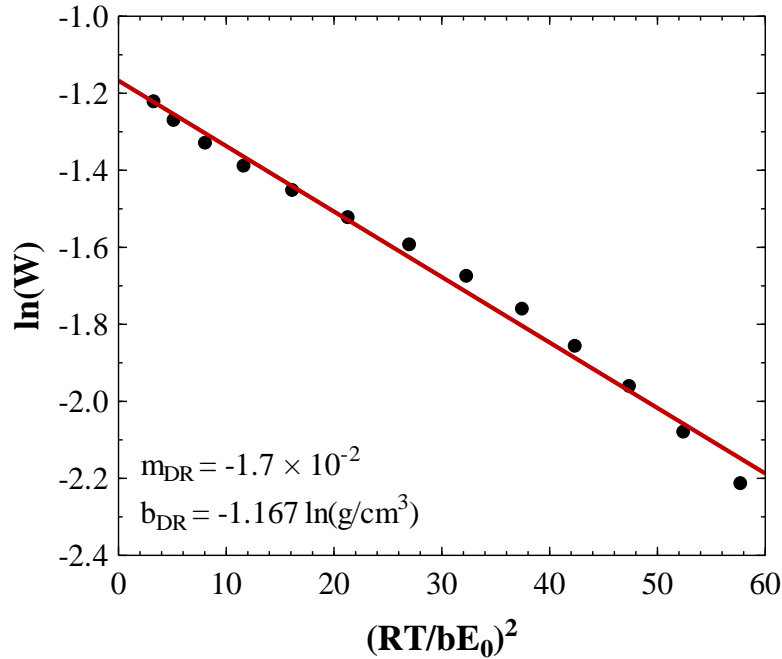
Los parámetros de la isoterma BET se calculan a través de un método de mínimos cuadrados y empleando las ecuaciones (5.4) - (5.6), como se ilustra enseguida:

$$C = \frac{5.71 \times 10^{-3} \frac{\text{g}}{\text{cm}^3}}{1.3369 \times 10^{-8} \frac{\text{g}}{\text{cm}^3}} + 1 = 4.27 \times 10^5$$

$$V_m = \frac{1}{\left(1.3369 \times 10^{-8} \frac{\text{g}}{\text{cm}^3}\right) (4.27 \times 10^5)} = 175.17 \frac{\text{cm}^3}{\text{g}}$$

$$S_{\text{BET}} = \frac{\left(1 \times 10^{-18} \frac{\text{m}^2}{\text{nm}^2}\right) (1 \text{ atm}) \left(175.17 \frac{\text{cm}^3 \text{ gas}}{\text{g adsorbente}}\right) \left(6.023 \times 10^{23} \frac{\text{moleculas}}{\text{mol}}\right) \left(0.162 \frac{\text{nm}^2}{\text{molecula}}\right)}{\left(82.05746 \frac{\text{cm}^3 \text{ gas atm}}{\text{mol K}}\right) (273.15 \text{ K})} = 763 \frac{\text{m}^2}{\text{g}}$$

En el modelo de Dubinin-Radushkevich, el volumen de N<sub>2</sub> adsorbido se convierte a volumen de N<sub>2</sub> líquido adsorbido en condiciones estándar, y posteriormente, se expresa en forma lineal así como se presenta en la Figura 6.3.



**Figura 6.3.** Forma lineal de la isoterma de Dubinin-Radushkevich para el carbón F400n en el intervalo de  $7.16 \times 10^{-6} \leq \frac{P}{P_0} \leq 0.059$ .

Los parámetros de este modelo se estiman con un método de mínimos cuadrados, y usando las ecuaciones (5.10) - (5.13):

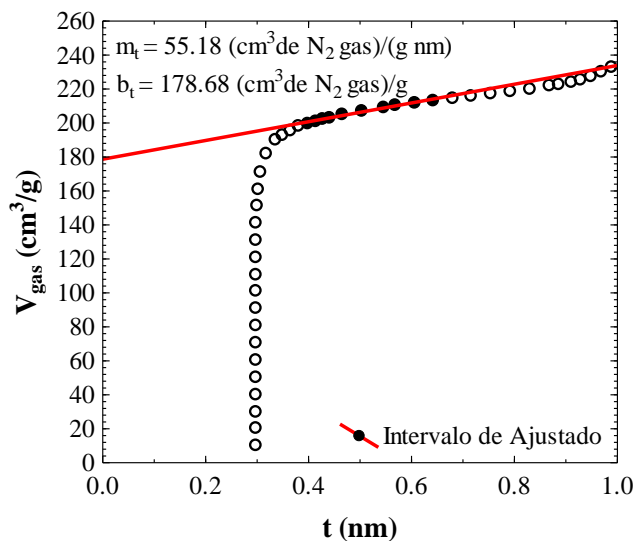
$$W_0 = e^{\left(-1.167 \ln\left(\frac{\text{cm}^3}{\text{g}}\right)\right)} = 0.31 \frac{\text{cm}^3}{\text{g}}$$

$$E_0 = 3 \sqrt{\frac{1}{-(-1.7 \times 10^{-2})}} = 23.24 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$$

$$L_0 = \frac{10.8}{23.24 \text{ kJ/mol} - 11.4} = 0.91 \text{ nm}$$

$$S_{\text{micDR}} = \frac{2000(0.31 \text{ cm}^3/\text{g})}{0.91 \text{ nm}} = 683 \frac{\text{m}^2}{\text{g}}$$

La ecuación apropiada para calcular  $t$  del modelo t-Plot es la ecuación (5.14) que se puede analizar como volumen de  $N_2$  gas o volumen de  $N_2$  líquido. En la Figura 6.4 se exhibe la gráfica t-plot.



**Figura 6.4.** Modelo t-plot para el carbón F400n en el intervalo  $0.151 \leq \frac{P}{P_0} \leq 0.499$ .

Los datos de esta figura se interpretan con un método de mínimos cuadrados y se evalúan las constantes de ajuste. Las propiedades de textura se estiman con las ecuaciones (5.17) - (5.19) y el cálculo se ilustra enseguida:

$$S_{\text{ext}} = 1.547 \left( 55.184 \frac{\text{cm}^3 \text{ de } N_2 \text{ gas}}{\text{g nm}} \right) = 85 \frac{\text{m}^2}{\text{g}}$$

$$S_{\text{mic2}} = 762.58 \frac{\text{m}^2}{\text{g}} - 85.37 \frac{\text{m}^2}{\text{g}} = 677 \frac{\text{m}^2}{\text{g}}$$

$$V_{\text{mic}} = \frac{1.547 \left( 178.68 \frac{\text{cm}^3 \text{ de } N_2 \text{ gas}}{\text{g}} \right)}{1000} = 0.27 \frac{\text{cm}^3}{\text{g}}$$

Las propiedades de textura promedio se calcularon sustituyendo valores en las ecuaciones (5.20) y (5.21) tal como se muestra enseguida:

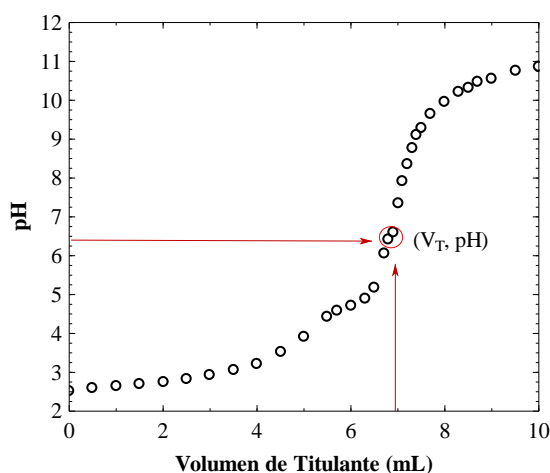
$$V_p = \frac{1.547 \left( 243.71 \frac{\text{cm}^3 \text{ de } N_2 \text{ gas}}{\text{g}} \right)}{1000} = 0.37 \frac{\text{cm}^3}{\text{g}}$$

$$D_p = \frac{4000(0.375 \text{ nm})}{762.58 \frac{\text{m}^2}{\text{g}}} = 1.97 \text{ nm}$$

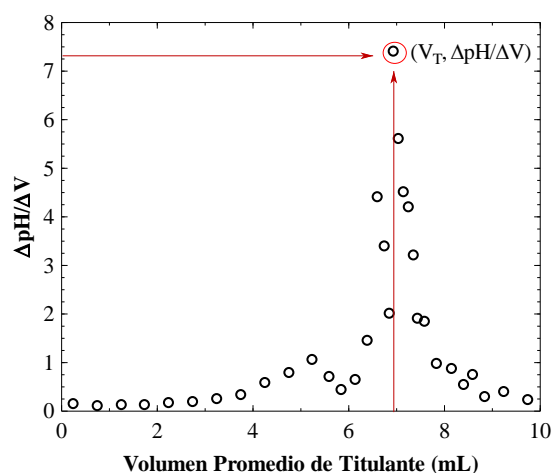
## 6.2 Concentración de Sitios Activos

Los sitios activos de los materiales adsorbentes fueron neutralizados y subsecuentemente titulados para calcular su concentración (Ver sección 5.3). A continuación, se ejemplifican los cálculos efectuados para la determinación de la concentración de los sitios básicos del carbón activado F400n.

Primeramente, se determinó el volumen final de la titulación con el método de la primera derivada (Ecuaciones 5.27 y 5.28). Las Figuras 6.5 y 6.6 presentan la curva de titulación para los sitios básicos y su primera derivada, respectivamente.



**Figura 6.5.** Titulación de sitios básicos del carbón F400n.



**Figura 6.6.** Método de la primera derivada para el cálculo del volumen final de titulación.

Enseguida, los valores de  $V_T$  se sustituyeron en las ecuaciones (5.29) y (5.30), usando los datos siguientes  $V_m = 2 \text{ mL}$ ,  $C_T = 0.01 \text{ eq/L}$ ,  $V_T = 6.95 \text{ mL}$ ,  $m = 1.0031 \text{ g}$ ,  $V_{in} = 0.05 \text{ L}$  y  $C_{in} = 0.01 \text{ eq/L}$ .

$$C_{ft} = \frac{\left(0.01 \frac{\text{eq}}{\text{L}}\right) (6.95 \text{ mL})}{20 \text{ mL}} = 3.475 \times 10^{-3} \frac{\text{eq}}{\text{L}}$$

$$C_{S_{act}} = \frac{(0.05 \text{ L}) \left(0.01 \frac{\text{eq}}{\text{L}} - 3.475 \times 10^{-3} \frac{\text{eq}}{\text{L}}\right) \left(1000 \frac{\text{m}(\text{eq})}{\text{eq}}\right)}{1.0031 \text{ g}} = 0.325 \frac{\text{meq}}{\text{g}}$$

De manera análoga, se calcularon las concentraciones de los sitios ácidos y básicos totales para el resto de los materiales. También, las concentraciones de los sitios lactónicos y fenólicos se calcularon con las ecuaciones (5.24) - (5.26). Es importante mencionar que

estos sitios solo se determinaron para los materiales F400n y FCA. En el caso de la titulación de los sitios carboxílicos + lactónicos, se hizo evidente la presencia de dos puntos de inflexión, se consideró el segundo como el volumen final de titulación. Los sitios activos del carbón F400 fueron reportados previamente por Moral-Rodríguez (2014). En la Tabla 6.1 se presentan los datos experimentales utilizados en la determinación de los sitios activos de los adsorbentes.

**Tabla 6.1.** Datos experimentales de la determinación de los sitios activos de los distintos materiales adsorbentes.

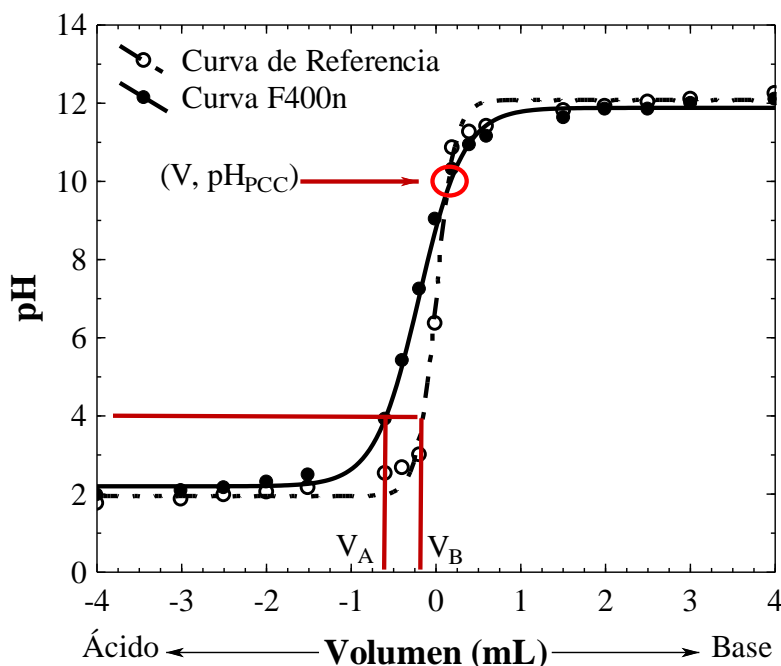
<i>Material</i>	<i>Sitios</i>	<i>Volumen de Solución Neutralizante (mL)</i>	<i>Masa (g)</i>	<i>Volumen de Solución Titulante (mL)</i>
FCA	Ácido totales	50	1.0017	7.15
	Básico totales	50	1.0014	11.95
	Carboxílicos + Lactónicos	50	1.0015	14.1
	Carboxílicos	50	1.0007	16.25
	Fenólicos	*N/A	*N/A	*N/A
	Lactónicos	*N/A	*N/A	*N/A
	F400n	Ácido totales	50	1.0027
Básico totales		50	1.0031	6.95
Carboxílicos + Lactónicos		50	1.0013	19.1
Carboxílicos		50	1.0009	19.5
Fenólicos		*N/A	*N/A	*N/A
Lactónicos		*N/A	*N/A	*N/A
ACF800B		Ácido totales	50	0.2507
	Básico totales	50	0.2511	12.65
ACF800C	Ácido totales	50	0.2528	17.15
	Básico totales	50	0.2532	12.75
ACF800D	Ácido totales	50	0.2507	18.85
	Básico totales	50	0.2527	12.4

\*N/A = No aplicable puesto que se determinaron de forma indirecta.

### 6.3 Distribución de la Carga Superficial y Punto de Carga Cero

La carga superficial ( $C_s$ ) y el  $\text{pH}_{\text{PCC}}$  de los materiales adsorbentes se determinaron como se describe en la sección 5.4. A continuación, se ejemplifican los cálculos efectuados para la determinación el punto de carga cero y la carga superficial del carbón activado F400n.

La  $C_s$  se determinó usando las ecuaciones (5.31) y (5.32), los valores de  $V_B$  y  $V_A$  de las curvas potenciométricas se exhiben en Figura 6.7, y las condiciones experimentales a  $\text{pH} = 4$  son  $C_N = 0.1 \text{ eq/L}$ ,  $V_A = -0.1354 \text{ mL}$ ,  $V_B = -0.5892 \text{ mL}$ ,  $m = 0.15 \text{ g}$ ,  $F = 96485 \text{ C/mol}$ ,  $S_{\text{BET}} = 763 \text{ m}^2/\text{g}$ .



**Figura 6.7.** Curvas potenciométricas de referencia y característica del carbón F400n.

$$q_{\text{H}^+} (\text{pH } 4) = \frac{\left(0.1 \frac{\text{eq}}{\text{L}}\right) (-0.1354 \text{ mL} - (-0.5892 \text{ mL})) \left(1 \frac{\text{mol}}{\text{eq}}\right)}{\left(1000 \frac{\text{mL}}{\text{L}}\right) (0.15 \text{ g})} = 3.028 \times 10^{-4} \frac{\text{mol}}{\text{g}}$$

$$C_s (\text{pH } 4) = \frac{\left(3.028 \times 10^{-4} \frac{\text{mol}}{\text{g}}\right) \left(96485 \frac{\text{C}}{\text{mol}}\right)}{762.58 \frac{\text{m}^2}{\text{g}}} = 0.038 \frac{\text{C}}{\text{m}^2}$$

La gráfica completa de la carga superficial del adsorbente contra el pH se obtiene repitiendo el cálculo anterior a distintos valores de pH. En las Tablas 6.2 - 6.4 se presentan los datos experimentales utilizados para el cálculo de la distribución de carga superficial de los adsorbentes.



**Tabla 6.2.** Datos experimentales de la carga superficial del carbón F400n y la FCA.

<i>pH</i>	<i>FCA</i>			<i>F400n</i>		
	$V_B$ (mL)	$V_A$ (mL)	$C_S$ (C/m <sup>2</sup> )	$V_B$ (mL)	$V_A$ (mL)	$C_S$ (C/m <sup>2</sup> )
2	-2.28	-3.00	0.036	-2.28	-3.70	0.119
3	-0.19	-0.47	0.014	-0.19	-1.19	0.084
4	-0.13	-0.13	0.000	-0.13	-0.58	0.038
5	-0.08	0.032	-0.006	-0.08	-0.45	0.030
6	-0.02	0.21	-0.012	-0.02	-0.33	0.025
7	0.01	0.42	-0.020	0.01	-0.22	0.020
8	0.07	0.71	-0.032	0.07	-0.11	0.016
9	0.12	1.01	-0.045	0.12	0.0018	0.010
10	0.16	1.35	-0.060	0.16	0.15	0.001
11	0.29	2.00	-0.086	0.29	0.47	-0.015
12	2.24	-----	-----	2.24	3.12	-0.074

**Tabla 6.3.** Datos experimentales de la carga superficial de las fibras ACF800B y ACF800C.

<i>pH</i>	<i>ACF800B</i>			<i>ACF800C</i>		
	$V_B$ (mL)	$V_A$ (mL)	$C_S$ (C/m <sup>2</sup> )	$V_B$ (mL)	$V_A$ (mL)	$C_S$ (C/m <sup>2</sup> )
2	-2.22	-2.56	0.034	-2.22	-3.41	0.105
3	-0.26	-0.57	0.031	-0.26	-0.57	0.027
4	-0.15	-0.37	0.022	-0.15	-0.35	0.018
5	-0.10	-0.30	0.019	-0.10	-0.26	0.014
6	-0.05	-0.23	0.018	-0.05	-0.17	0.010
7	-0.0029	-0.13	0.013	-0.0029	-0.08	0.007
8	0.04	-0.02	0.006	0.04	0	0.003
9	0.09	0.10	-0.001	0.09	0.11	-0.002
10	0.15	0.27	-0.012	0.15	0.26	-0.009
11	0.27	0.68	-0.040	0.27	0.62	-0.030

**Tabla 6.4.** Datos experimentales de la carga superficial de la ACF800D y el carbón F400.

<i>pH</i>	<i>ACF800D</i>			<i>F400</i>		
	$V_B$ ( <i>mL</i> )	$V_A$ ( <i>mL</i> )	$C_S$ ( <i>C/m</i> <sup>2</sup> )	$V_B$ ( <i>mL</i> )	$V_A$ ( <i>mL</i> )	$C_S$ ( <i>C/m</i> <sup>2</sup> )
2	-2.22	-3.45	0.158	-1.5	-2.82	0.278
3	-0.26	-0.67	0.051	-0.2	-0.44	0.051
4	-0.15	-0.37	0.029	-0.12	-0.20	0.017
5	-0.10	-0.30	0.025	-0.05	-0.13	0.015
6	-0.05	-0.22	0.022	0	-0.09	0.019
7	-0.0029	-0.12	0.016	0.05	-0.03	0.017
8	0.04	-0.0067	0.006	0.08	0.03	0.010
9	0.09	0.12	-0.003	0.10	0.10	0.000
10	0.15	0.30	-0.019	0.16	0.20	-0.008
11	0.27	0.70	-0.054	0.18	0.43	-0.052

#### 6.4 Concentración de Trimetoprima, Ampicilina y Cadmio (II)

Las concentraciones de TMP, AMP y Cd(II) en solución acuosa se determinaron de acuerdo con lo descrito en las secciones 5.6, 5.7 y 5.8, respectivamente. Los parámetros de ajuste de las curvas de calibración se determinaron por optimización matemática basándose en la ecuación (6.1). Las curvas de calibración se encuentran reportadas en el Apéndice A.

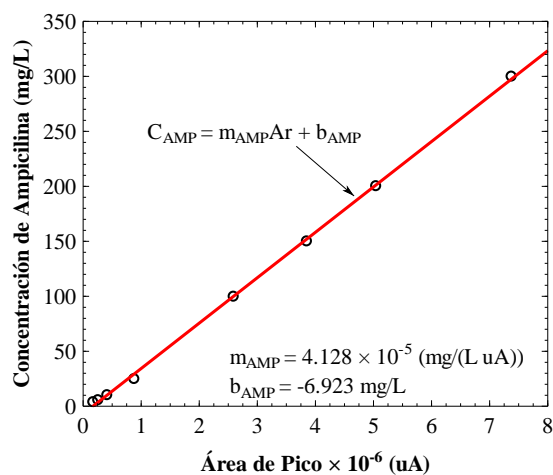
$$\text{Función objetivo} = \sum_{i=1}^n (C_{\text{exp } i} - C_{\text{cal } i})^2 \quad (6.1)$$

Donde  $C_{\text{exp } i}$  es la concentración del dato experimental “i”, mg/L;  $C_{\text{cal } i}$  es la concentración calculada del dato experimental “i”, mg/L; n es el número de datos experimentales.

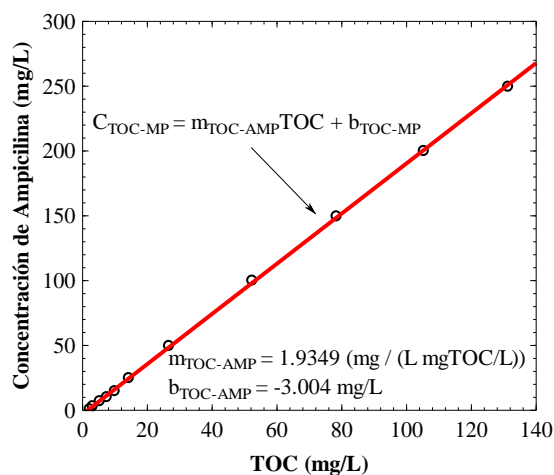
Los porcentajes de desviación entre las concentraciones experimentales y las concentraciones reales se obtuvieron con la ecuación (6.2), mientras que el porcentaje de desviación promedio se determinó con la ecuación (6.3). En las Figuras 6.8 - 6.11 se ilustran las curvas de calibración C2AM, C4AM, C4TM y C3Cd utilizadas en la cuantificación de AMP, TMP y Cd(II).

$$\%D = \left| \frac{C_{\text{exp } i} - C_{\text{cal } i}}{C_{\text{exp } i}} \right| \times 100 \% \quad (6.2) \quad \% \bar{D} = \left( \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left| \frac{C_{\text{exp } i} - C_{\text{cal } i}}{C_{\text{exp } i}} \right| \right) \times 100 \% \quad (6.3)$$

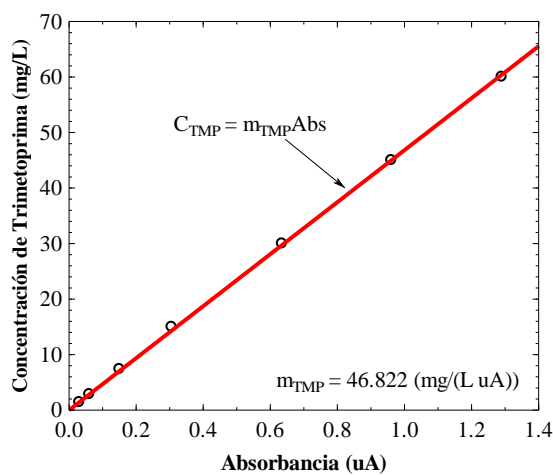
Donde %D es el porcentaje de desviación del datos experimental i;  $\% \bar{D}$  es el porcentaje de desviación promedio de la curva de calibración.



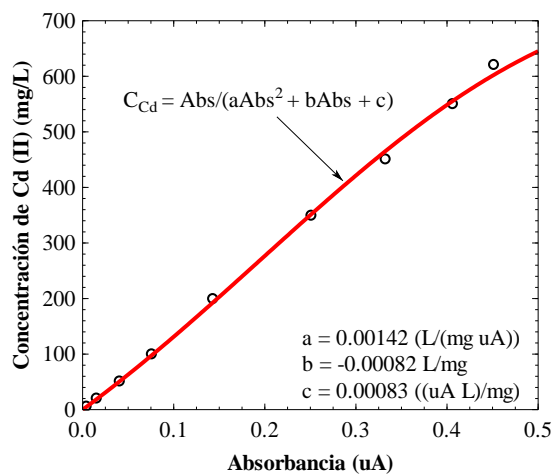
**Figura 6.8.** Curva de calibración de AMP a T = 25 °C, pH = 7 y I = 0.01 N.



**Figura 6.9.** Curva de calibración de AMP-TOC a T = 25 °C, pH = 7 y I = 0.01 N.



**Figura 6.10.** Curva de calibración de TMP a T = 25 °C, pH = 7 y I = 0.01 N.



**Figura 6.11.** Curva de calibración de Cd(II) a T = 25 °C, pH = 7 y I = 0.01 N.

### 6.5 Masa Adsorbida de Trimetoprima, Ampicilina y Cadmio (II) sobre los Distintos Adsorbentes

La masa adsorbida de los contaminantes sobre los adsorbentes se determinó con ayuda del balance de masa (Ecuación 5.37). A continuación, se ejemplifica el cálculo realizado para el experimento F400nTMP-Ad7-9, donde los datos utilizados son  $C_0 = 292.31$  mg/L,  $C_f = 219.35$  mg/L,  $m = 0.0246$  g,  $V = V_0 = V_f = 0.08$  L y  $V_i = V_a = 0$ .

$$q = \frac{(0.08 \text{ L}) \left( 292.31 \frac{\text{mg}}{\text{L}} - 219.35 \frac{\text{mg}}{\text{L}} \right)}{0.0246 \text{ g}} = 237.27 \frac{\text{mg}}{\text{g}}$$

En el Apéndice B y C, se encuentran en forma de tabla los datos experimentales del equilibrio de adsorción de todos los sistemas estudiados. Las tablas incluyen el nombre del experimento, la absorbancia o área de pico, concentración inicial, concentración en el equilibrio, masa del adsorbente, volumen de solución, así como también, la curva de calibración utilizada para cuantificar la concentración de cada muestra.

En las Tablas 6.5 - 6.40 de la presente sección, se muestran los datos experimentales correspondientes al equilibrio de adsorción de los distintos sistemas de análisis, al igual que las diferentes condiciones a las que se realizaron.

**Tabla 6.5.** Datos experimentales del equilibrio de adsorción de AMP sobre el carbón F400. Condiciones de pH = 7, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).

<i>Experimento No.</i>	<i>Concentración de AMP en el Equilibrio (mg/L)</i>	<i>Masa de AMP Adsorbida (mg/g)</i>
F400AMP-Ad7-1	4.66	71.63
F400AMP-Ad7-2	27.73	135.92
F400AMP-Ad7-3	62.32	183.59
F400AMP-Ad7-4	108.94	229.23
F400AMP-Ad7-5	211.30	302.52
F400AMP-Ad7-6	363.43	329.81
F400AMP-Ad7-7	550.33	351.77
F400AMP-Ad7-8	652.70	338.12
F400AMP-Ad7-9	721.19	345.70

**Tabla 6.6.** Datos experimentales del equilibrio de adsorción de AMP sobre la ACF800B. Condiciones de pH = 7, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).

<i>Experimento No.</i>	<i>Concentración de AMP en el Equilibrio (mg/L)</i>	<i>Masa de AMP Adsorbida (mg/g)</i>
ACF800BAMP-Ad7-1	9.66	234.36
ACF800BAMP-Ad7-2	67.94	403.22
ACF800BAMP-Ad7-3	141.72	510.21
ACF800BAMP-Ad7-4	248.46	569.52
ACF800BAMP-Ad7-5	358.07	734.98
ACF800BAMP-Ad7-6	513.38	722.61

**Tabla 6.7.** Datos experimentales del equilibrio de adsorción de AMP sobre la ACF800C. Condiciones de pH = 7, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).

<i>Experimento No.</i>	<i>Concentración de AMP en el Equilibrio (mg/L)</i>	<i>Masa de AMP Adsorbida (mg/g)</i>
ACF800CAMP-Ad7-1	4.03	154.67
ACF800CAMP-Ad7-2	19.43	225.57
ACF800CAMP-Ad7-3	87.27	378.58
ACF800CAMP-Ad7-4	180.55	491.24
ACF800CAMP-Ad7-5	265.28	567.42
ACF800CAMP-Ad7-6	366.72	704.51
ACF800CAMP-Ad7-7	506.75	733.26

**Tabla 6.8.** Datos experimentales del equilibrio de adsorción de AMP sobre la ACF800D. Condiciones de pH = 7, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).

<i>Experimento No.</i>	<i>Concentración de AMP en el Equilibrio (mg/L)</i>	<i>Masa de AMP Adsorbida (mg/g)</i>
ACF800DAMP-Ad7-1	17.22	230.12
ACF800DAMP-Ad7-2	64.32	409.42
ACF800DAMP-Ad7-3	175.36	493.44
ACF800DAMP-Ad7-4	200.48	598.21
ACF800DAMP-Ad7-5	404.49	662.51
ACF800DAMP-Ad7-6	534.89	682.57

**Tabla 6.9.** Datos experimentales del equilibrio de adsorción de TMP sobre la F400n. Condiciones de pH = 7, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).

<i>Experimento No.</i>	<i>Concentración de TMP en el Equilibrio (mg/L)</i>	<i>Masa de TMP Adsorbida (mg/g)</i>
F400nTMP-Ad7-1	2.67	21.69
F400nTMP-Ad7-2	11.74	59.22
F400nTMP-Ad7-3	37.14	107.34
F400nTMP-Ad7-4	47.19	142.22
F400nTMP-Ad7-5	72.49	173.09
F400nTMP-Ad7-6	115.99	177.74
F400nTMP-Ad7-7	148.73	200.22
F400nTMP-Ad7-8	180.53	220.91
F400nTMP-Ad7-9	219.35	237.27

**Tabla 6.10.** Datos experimentales del equilibrio de adsorción de TMP sobre la ACF800B. Condiciones de pH = 7, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).

<i>Experimento No.</i>	<i>Concentración de TMP en el Equilibrio (mg/L)</i>	<i>Masa de TMP Adsorbida (mg/g)</i>
ACF800BTMP-Ad7-1	2.81	231.10
ACF800BTMP-Ad7-2	5.87	457.38
ACF800BTMP-Ad7-3	32.83	635.10
ACF800BTMP-Ad7-4	50.51	777.78
ACF800BTMP-Ad7-5	125.34	816.35
ACF800BTMP-Ad7-6	167.90	829.13
ACF800BTMP-Ad7-7	186.61	886.76

**Tabla 6.11.** Datos experimentales del equilibrio de adsorción de TMP sobre la ACF800C. Condiciones de pH = 7, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).

<i>Experimento No.</i>	<i>Concentración de TMP en el Equilibrio (mg/L)</i>	<i>Masa de TMP Adsorbida (mg/g)</i>
ACF800CTMP-Ad7-1	2.99	240.38
ACF800CTMP-Ad7-2	8.42	471.90
ACF800CTMP-Ad7-3	44.38	614.75
ACF800CTMP-Ad7-4	115.05	624.46
ACF800CTMP-Ad7-5	161.36	645.53
ACF800CTMP-Ad7-6	192.22	670.80
ACF800CTMP-Ad7-7	210.93	700.60

**Tabla 6.12.** Datos experimentales del equilibrio de adsorción de TMP sobre la ACF800D. Condiciones de pH = 7, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).

<i>Experimento No.</i>	<i>Concentración de TMP en el Equilibrio (mg/L)</i>	<i>Masa de TMP Adsorbida (mg/g)</i>
ACF800DTMP-Ad7-1	1.17	238.94
ACF800DTMP-Ad7-2	8.14	470.44
ACF800DTMP-Ad7-3	29.42	633.16
ACF800DTMP-Ad7-4	73.90	715.39
ACF800DTMP-Ad7-5	142.65	740.12
ACF800DTMP-Ad7-6	179.60	742.42
ACF800DTMP-Ad7-7	199.71	797.95

**Tabla 6.13.** Datos experimentales del equilibrio de adsorción de TMP sobre el carbón F400. Condiciones de pH = 4, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).

<i>Experimento No.</i>	<i>Concentración de TMP en el Equilibrio (mg/L)</i>	<i>Masa de TMP Adsorbida (mg/g)</i>
F400TMP-Ad4-1	1.64	94.00
F400TMP-Ad4-2	8.44	132.39
F400TMP-Ad4-3	32.93	160.62
F400TMP-Ad4-4	81.46	158.59
F400TMP-Ad4-5	139.58	169.92
F400TMP-Ad4-6	166.41	177.88
F400TMP-Ad4-7	190.25	215.84



**Tabla 6.14.** Datos experimentales del equilibrio de adsorción de TMP sobre el carbón F400. Condiciones de pH = 7, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).

<i>Experimento No.</i>	<i>Concentración de TMP en el Equilibrio (mg/L)</i>	<i>Masa de TMP Adsorbida (mg/g)</i>
F400TMP-Ad7-1	0.80	65.40
F400TMP-Ad7-2	0.89	137.69
F400TMP-Ad7-3	3.89	183.40
F400TMP-Ad7-4	17.93	224.41
F400TMP-Ad7-5	41.67	257.72
F400TMP-Ad7-6	80.07	305.38
F400TMP-Ad7-7	131.57	331.51
F400TMP-Ad7-8	183.08	365.59

**Tabla 6.15.** Datos experimentales del equilibrio de adsorción de TMP sobre el carbón F400. Condiciones de pH = 10, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).

<i>Experimento No.</i>	<i>Concentración de TMP en el Equilibrio (mg/L)</i>	<i>Masa de TMP Adsorbida (mg/g)</i>
F400TMP-Ad10-1	0.45	90.94
F400TMP-Ad10-2	1.47	137.27
F400TMP-Ad10-3	2.49	182.16
F400TMP-Ad10-4	4.49	241.04
F400TMP-Ad10-5	15.09	288.24
F400TMP-Ad10-6	65.65	331.13
F400TMP-Ad10-7	111.73	340.07
F400TMP-Ad10-8	128.45	348.83
F400TMP-Ad10-9	190.44	358.99

**Tabla 6.16.** Datos experimentales del equilibrio de adsorción de TMP sobre el carbón F400. Condiciones de pH = 4, T = 25 °C y I = 0.5 N (HCl/NaOH).

<i>Experimento No.</i>	<i>Concentración de TMP en el Equilibrio (mg/L)</i>	<i>Masa de TMP Adsorbida (mg/g)</i>
F400TMP-Ad4-0.5N-1	1.33	140.59
F400TMP-Ad4-0.5N-2	7.33	183.53
F400TMP-Ad4-0.5N-3	37.95	210.04
F400TMP-Ad4-0.5N-4	57.39	244.17
F400TMP-Ad4-0.5N-5	122.06	252.31
F400TMP-Ad4-0.5N-6	175.91	253.32
F400TMP-Ad4-0.5N-7	220.01	265.18

**Tabla 6.17.** Datos experimentales del equilibrio de adsorción de TMP sobre el carbón F400. Condiciones de pH = 7, T = 25 °C y I = 0.5 N (HCl/NaOH).

<i>Experimento No.</i>	<i>Concentración de TMP en el Equilibrio (mg/L)</i>	<i>Masa de TMP Adsorbida (mg/g)</i>
F400TMP-Ad7-0.5N-1	0.34	132.77
F400TMP-Ad7-0.5N-2	0.39	173.52
F400TMP-Ad7-0.5N-3	5.62	225.28
F400TMP-Ad7-0.5N-4	25.62	262.88
F400TMP-Ad7-0.5N-5	66.84	317.07
F400TMP-Ad7-0.5N-6	90.09	323.41
F400TMP-Ad7-0.5N-7	125.93	324.16
F400TMP-Ad7-0.5N-8	170.49	385.91

**Tabla 6.18.** Datos experimentales del equilibrio de adsorción de TMP sobre el carbón F400. Condiciones de pH = 10, T = 25 °C y I = 0.5 N (HCl/NaOH).

<i>Experimento No.</i>	<i>Concentración de TMP en el Equilibrio (mg/L)</i>	<i>Masa de TMP Adsorbida (mg/g)</i>
F400TMP-Ad10-0.5N-1	0.86	145.34
F400TMP-Ad10-0.5N-2	1.27	192.37
F400TMP-Ad10-0.5N-3	3.60	236.00
F400TMP-Ad10-0.5N-4	24.57	275.29
F400TMP-Ad10-0.5N-5	59.13	341.30
F400TMP-Ad10-0.5N-6	91.31	336.79
F400TMP-Ad10-0.5N-7	128.16	345.59
F400TMP-Ad10-0.5N-8	197.77	330.20

**Tabla 6.19.** Datos experimentales del equilibrio de adsorción de TMP sobre el carbón F400. Condiciones de pH = 7, T = 15 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).

<i>Experimento No.</i>	<i>Concentración de TMP en el Equilibrio (mg/L)</i>	<i>Masa de TMP Adsorbida (mg/g)</i>
F400TMP-Ad7-T15-1	2.43	67.83
F400TMP-Ad7-T15-2	3.84	137.20
F400TMP-Ad7-T15-3	8.05	183.46
F400TMP-Ad7-T15-4	8.90	224.45
F400TMP-Ad7-T15-5	26.22	267.63
F400TMP-Ad7-T15-6	76.32	302.75
F400TMP-Ad7-T15-7	98.33	311.90
F400TMP-Ad7-T15-8	135.79	315.63
F400TMP-Ad7-T15-9	177.93	362.64

**Tabla 6.20.** Datos experimentales del equilibrio de adsorción de TMP sobre el carbón F400. Condiciones de pH = 7, T = 35 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).

<i>Experimento No.</i>	<i>Concentración de TMP en el Equilibrio (mg/L)</i>	<i>Masa de TMP Adsorbida (mg/g)</i>
F400TMP-Ad7-T35-1	0.28	138.94
F400TMP-Ad7-T35-2	1.55	190.21
F400TMP-Ad7-T35-3	4.68	233.35
F400TMP-Ad7-T35-4	25.28	267.49
F400TMP-Ad7-T35-5	78.66	300.67
F400TMP-Ad7-T35-6	128.76	327.20
F400TMP-Ad7-T35-7	178.40	361.15

**Tabla 6.21.** Datos experimentales del equilibrio de adsorción de AMP sobre el carbón F400n. Condiciones de pH = 5, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).

<i>Experimento No.</i>	<i>Concentración de AMP en el Equilibrio (mg/L)</i>	<i>Masa de AMP Adsorbida (mg/g)</i>
F400nAMP-Ad5-1	5.79	37.35
F400nAMP-Ad5-2	25.54	61.79
F400nAMP-Ad5-3	52.77	75.86
F400nAMP-Ad5-4	83.72	92.52
F400nAMP-Ad5-5	129.05	97.55
F400nAMP-Ad5-6	161.64	109.28
F400nAMP-Ad5-7	396.46	141.99
F400nAMP-Ad5-8	575.61	174.57
F400nAMP-Ad5-9	737.05	177.80

**Tabla 6.22.** Datos experimentales del equilibrio de adsorción de AMP sobre el carbón F400n. Condiciones de pH = 7, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).

<i>Experimento No.</i>	<i>Concentración de AMP en el Equilibrio (mg/L)</i>	<i>Masa de AMP Adsorbida (mg/g)</i>
F400nAMP-Ad7-1	6.65	36.06
F400nAMP-Ad7-2	25.74	52.85
F400nAMP-Ad7-3	64.63	92.28
F400nAMP-Ad7-4	138.18	122.08
F400nAMP-Ad7-5	315.81	220.33
F400nAMP-Ad7-6	467.59	271.82
F400nAMP-Ad7-7	611.88	288.39

**Tabla 6.23.** Datos experimentales del equilibrio de adsorción de AMP sobre el carbón F400n. Condiciones de pH = 9, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).

<i>Experimento No.</i>	<i>Concentración de AMP en el Equilibrio (mg/L)</i>	<i>Masa de AMP Adsorbida (mg/g)</i>
F400nAMP-Ad9-1	9.09	37.48
F400nAMP-Ad9-2	24.23	69.11
F400nAMP-Ad9-3	84.36	105.05
F400nAMP-Ad9-4	148.36	131.87
F400nAMP-Ad9-5	367.62	192.84
F400nAMP-Ad9-6	510.07	252.16
F400nAMP-Ad9-7	638.42	289.97

**Tabla 6.24.** Datos experimentales del equilibrio de adsorción de AMP sobre el carbón F400n. Condiciones de pH = 7, T = 15 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).

<i>Experimento No.</i>	<i>Concentración de AMP en el Equilibrio (mg/L)</i>	<i>Masa de AMP Adsorbida (mg/g)</i>
F400nAMP-Ad7-T15-1	8.62	34.08
F400nAMP-Ad7-T15-2	28.35	61.94
F400nAMP-Ad7-T15-3	97.65	86.68
F400nAMP-Ad7-T15-4	172.17	100.73
F400nAMP-Ad7-T15-5	437.66	119.21
F400nAMP-Ad7-T15-6	614.89	144.82
F400nAMP-Ad7-T15-7	774.59	167.98

**Tabla 6.25.** Datos experimentales del equilibrio de adsorción de AMP sobre el carbón F400n. Condiciones de pH = 7, T = 35 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).

<i>Experimento No.</i>	<i>Concentración de AMP en el Equilibrio (mg/L)</i>	<i>Masa de AMP Adsorbida (mg/g)</i>
F400nAMP-Ad7-T35-1	2.18	39.75
F400nAMP-Ad7-T35-2	20.09	69.44
F400nAMP-Ad7-T35-3	61.62	116.44
F400nAMP-Ad7-T35-4	136.28	128.48
F400nAMP-Ad7-T35-5	335.18	202.01
F400nAMP-Ad7-T35-6	462.66	266.51
F400nAMP-Ad7-T35-7	592.21	314.30

**Tabla 6.26.** Datos experimentales del equilibrio de adsorción de TMP sobre la FCA. Condiciones de pH = 4, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).

<i>Experimento No.</i>	<i>Concentración de TMP en el Equilibrio (mg/L)</i>	<i>Masa de TMP Adsorbida (mg/g)</i>
FCATMP-Ad4-1	1.29	52.01
FCATMP-Ad4-2	27.42	214.71
FCATMP-Ad4-3	64.58	282.48
FCATMP-Ad4-4	108.78	304.40
FCATMP-Ad4-5	182.80	278.96
FCATMP-Ad4-6	205.15	302.85
FCATMP-Ad4-7	229.99	331.42

**Tabla 6.27.** Datos experimentales del equilibrio de adsorción de TMP sobre la FCA. Condiciones de pH = 7, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).

<i>Experimento No.</i>	<i>Concentración de TMP en el Equilibrio (mg/L)</i>	<i>Masa de TMP Adsorbida (mg/g)</i>
FCATMP-Ad7-1	3.28	233.37
FCATMP-Ad7-2	6.65	346.04
FCATMP-Ad7-3	47.85	399.16
FCATMP-Ad7-4	96.46	482.09
FCATMP-Ad7-5	142.34	493.97
FCATMP-Ad7-6	185.98	540.95
FCATMP-Ad7-7	212.58	546.77

**Tabla 6.28.** Datos experimentales del equilibrio de adsorción de TMP sobre la FCA. Condiciones de pH = 10, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).

<i>Experimento No.</i>	<i>Concentración de TMP en el Equilibrio (mg/L)</i>	<i>Masa de TMP Adsorbida (mg/g)</i>
FCATMP-Ad10-1	4.08	240.40
FCATMP-Ad10-2	12.52	351.81
FCATMP-Ad10-3	39.96	422.92
FCATMP-Ad10-4	88.49	519.07
FCATMP-Ad10-5	143.95	512.46
FCATMP-Ad10-6	189.21	546.57
FCATMP-Ad10-7	224.69	487.41

**Tabla 6.29.** Datos experimentales del equilibrio de adsorción de TMP sobre la FCA. Condiciones de pH = 4, T = 25 °C y I = 0.5 N (HCl/NaOH).

<i>Experimento No.</i>	<i>Concentración de TMP en el Equilibrio (mg/L)</i>	<i>Masa de TMP Adsorbida (mg/g)</i>
FCATMP-Ad4-0.5N-1	7.18	227.75
FCATMP-Ad4-0.5N-2	39.95	302.92
FCATMP-Ad4-0.5N-3	100.01	314.27
FCATMP-Ad4-0.5N-4	166.68	317.76
FCATMP-Ad4-0.5N-5	201.55	302.40
FCATMP-Ad4-0.5N-6	232.32	308.95
FCATMP-Ad4-0.5N-7	251.30	294.73
FCATMP-Ad4-0.5N-8	257.96	311.45



**Tabla 6.30.** Datos experimentales del equilibrio de adsorción de TMP sobre la FCA. Condiciones de pH = 7, T = 25 °C y I = 0.5 N (HCl/NaOH).

<i>Experimento No.</i>	<i>Concentración de TMP en el Equilibrio (mg/L)</i>	<i>Masa de TMP Adsorbida (mg/g)</i>
FCATMP-Ad7-0.5N-1	3.63	248.49
FCATMP-Ad7-0.5N-2	6.68	364.54
FCATMP-Ad7-0.5N-3	37.00	438.92
FCATMP-Ad7-0.5N-4	84.27	547.99
FCATMP-Ad7-0.5N-5	142.88	520.18
FCATMP-Ad7-0.5N-6	222.31	548.65

**Tabla 6.31.** Datos experimentales del equilibrio de adsorción de TMP sobre la FCA. Condiciones de pH = 10, T = 25 °C y I = 0.5 N (HCl/NaOH).

<i>Experimento No.</i>	<i>Concentración de TMP en el Equilibrio (mg/L)</i>	<i>Masa de TMP Adsorbida (mg/g)</i>
FCATMP-Ad10-0.5N-1	2.37	239.12
FCATMP-Ad10-0.5N-2	5.36	346.63
FCATMP-Ad10-0.5N-3	23.34	438.95
FCATMP-Ad10-0.5N-4	97.04	491.36
FCATMP-Ad10-0.5N-5	130.62	528.27
FCATMP-Ad10-0.5N-6	181.40	560.43
FCATMP-Ad10-0.5N-7	217.84	508.98
FCATMP-Ad10-0.5N-8	235.04	511.42

**Tabla 6.32.** Datos experimentales del equilibrio de adsorción de TMP sobre la FCA. Condiciones de pH = 7, T = 15 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).

<i>Experimento No.</i>	<i>Concentración de TMP en el Equilibrio (mg/L)</i>	<i>Masa de TMP Adsorbida (mg/g)</i>
FCATMP-Ad7-T15-1	0.09	42.83
FCATMP-Ad7-T15-2	3.75	235.06
FCATMP-Ad7-T15-3	11.24	344.94
FCATMP-Ad7-T15-4	44.01	403.80
FCATMP-Ad7-T15-5	115.18	438.40
FCATMP-Ad7-T15-6	139.06	505.46
FCATMP-Ad7-T15-7	182.14	555.05
FCATMP-Ad7-T15-8	213.98	527.41

**Tabla 6.33.** Datos experimentales del equilibrio de adsorción de TMP sobre la FCA. Condiciones de pH = 7, T = 35 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).

<i>Experimento No.</i>	<i>Concentración de TMP en el Equilibrio (mg/L)</i>	<i>Masa de TMP Adsorbida (mg/g)</i>
FCATMP-Ad7-T35-1	1.26	42.58
FCATMP-Ad7-T35-2	1.55	237.78
FCATMP-Ad7-T35-3	7.49	349.47
FCATMP-Ad7-T35-4	29.97	426.28
FCATMP-Ad7-T35-5	83.34	513.36
FCATMP-Ad7-T35-6	127.83	548.17
FCATMP-Ad7-T35-7	184.48	537.15
FCATMP-Ad7-T35-8	209.77	552.18

**Tabla 6.34.** Datos experimentales del equilibrio de adsorción de AMP sobre la FCA. Condiciones de pH = 5, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).

<i>Experimento No.</i>	<i>Concentración de AMP en el Equilibrio (mg/L)</i>	<i>Masa de AMP Adsorbida (mg/g)</i>
FCAAMP-Ad5-1	3.32	41.50
FCAAMP-Ad5-2	4.78	78.52
FCAAMP-Ad5-3	5.86	114.22
FCAAMP-Ad5-4	8.19	150.09
FCAAMP-Ad5-5	8.97	190.76
FCAAMP-Ad5-6	16.36	225.72
FCAAMP-Ad5-7	114.87	368.05
FCAAMP-AD5-8	221.86	417.56
FCAAMP-AD5-9	410.39	450.29

**Tabla 6.35.** Datos experimentales del equilibrio de adsorción de AMP sobre la FCA. Condiciones de pH = 7, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).

<i>Experimento No.</i>	<i>Concentración de AMP en el Equilibrio (mg/L)</i>	<i>Masa de AMP Adsorbida (mg/g)</i>
FCAAMP-Ad7-1	7.62	37.80
FCAAMP-Ad7-2	10.59	72.44
FCAAMP-Ad7-3	22.81	141.97
FCAAMP-Ad7-4	33.75	215.80
FCAAMP-Ad7-5	179.01	319.14
FCAAMP-Ad7-6	329.42	372.68
FCAAMP-Ad7-7	457.94	401.00

**Tabla 6.36.** Datos experimentales del equilibrio de adsorción de AMP sobre la FCA. Condiciones de pH = 9, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).

<i>Experimento No.</i>	<i>Concentración de AMP en el Equilibrio (mg/L)</i>	<i>Masa de AMP Adsorbida (mg/g)</i>
FCAAMP-Ad9-1	9.68	35.91
FCAAMP-Ad9-2	17.20	67.71
FCAAMP-Ad9-3	44.44	123.00
FCAAMP-Ad9-4	98.23	162.71
FCAAMP-Ad9-5	226.05	301.10
FCAAMP-Ad9-6	400.45	325.76
FCAAMP-Ad9-7	512.87	396.94

**Tabla 6.37.** Datos experimentales del equilibrio de adsorción de AMP sobre la FCA. Condiciones de pH = 7, T = 15 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).

<i>Experimento No.</i>	<i>Concentración de AMP en el Equilibrio (mg/L)</i>	<i>Masa de AMP Adsorbida (mg/g)</i>
FCAAMP-Ad7-T15-1	1.93	40.11
FCAAMP-Ad7-T15-2	7.59	79.64
FCAAMP-Ad7-T15-3	32.96	137.59
FCAAMP-Ad7-T15-4	71.10	186.17
FCAAMP-Ad7-T15-5	147.95	350.98
FCAAMP-Ad7-T15-6	273.62	415.01
FCAAMP-Ad7-T15-7	376.93	473.29

**Tabla 6.38.** Datos experimentales del equilibrio de adsorción de AMP sobre la FCA. Condiciones de pH = 7, T = 35 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).

<i>Experimento No.</i>	<i>Concentración de AMP en el Equilibrio (mg/L)</i>	<i>Masa de AMP Adsorbida (mg/g)</i>
FCAAMP-Ad7-T35-1	2.29	40.43
FCAAMP-Ad7-T35-2	4.75	77.85
FCAAMP-Ad7-T35-3	14.66	150.75
FCAAMP-Ad7-T35-4	26.12	221.84
FCAAMP-Ad7-T35-5	77.00	408.83
FCAAMP-Ad7-T35-6	220.79	446.60
FCAAMP-Ad7-T35-7	388.75	496.17

**Tabla 6.39.** Datos experimentales del equilibrio de adsorción competitivo de AMP y Cd(II) sobre la FCA. Condiciones de pH = 5, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).

<i>Experimento No.</i>	<i>Concentración de AMP en el Equilibrio (mg/L)</i>	<i>Masa de AMP Adsorbida (mg/g)</i>	<i>Concentración de Cd(II) en el Equilibrio (mg/L)</i>	<i>Masa de Cd(II) Adsorbida (mg/g)</i>
FC-50Cd	-----	-----	46.97	7.45
FC-100Cd	-----	-----	87.17	13.23
FC-150Cd	-----	-----	128.31	14.49
FC-200Cd	-----	-----	175.39	12.56
FC-250Cd	-----	-----	204.10	17.82
FC-300-50	2.70	33.08	277.36	12.80
FC-300-100	8.96	66.31	277.04	14.85
FC-300-150	16.14	98.36	276.22	14.99
FC-300-200	22.06	131.89	250.30	34.91
FC-300-250	28.92	166.90	268.62	19.49
FC-300-300	36.60	207.18	266.65	23.11
FC-250-50	4.08	33.75	212.75	22.83
FC-250-100	8.53	68.71	207.02	27.02

Tabla 6.39. (Continuación)

<i>Experimento No.</i>	<i>Concentración de AMP en el Equilibrio (mg/L)</i>	<i>Masa de AMP Adsorbida (mg/g)</i>	<i>Concentración de Cd(II) en el Equilibrio (mg/L)</i>	<i>Masa de Cd(II) Adsorbida (mg/g)</i>
FC-250-150	12.78	104.67	203.34	29.77
FC-250-200	15.01	142.95	209.33	23.41
FC-250-250	20.97	176.84	210.05	21.43
FC-250-300	24.55	223.71	198.64	30.69
FC-200-50	3.49	32.54	182.57	11.13
FC-200-100	8.63	65.27	180.45	11.37
FC-200-150	15.45	99.11	179.27	11.50
FC-200-200	21.03	132.94	178.19	15.66
FC-200-250	29.43	166.62	174.09	16.93
FC-200-300	34.38	206.97	170.14	20.89
FC-150-50	4.21	32.90	157.87	10.98
FC-150-100	8.31	68.40	159.07	11.02
FC-150-150	13.36	104.89	152.68	17.56
FC-150-200	15.94	145.74	150.94	18.72
FC-150-250	19.42	179.33	147.50	21.07
FC-150-300	21.24	223.60	146.78	22.20
FC-100-50	0.62	34.45	92.23	9.65
FC-100-100	4.80	68.38	90.87	10.88
FC-100-150	9.55	101.63	88.45	14.16
FC-100-200	16.28	135.65	88.06	12.86
FC-100-250	19.62	172.77	84.63	16.58
FC-100-300	25.48	213.43	85.85	14.80
FC-50-50	0.00	35.46	43.15	8.87
FC-50-100	4.83	70.42	41.61	9.30

**Tabla 6.39.** (Continuación)

<i>Experimento No.</i>	<i>Concentración de AMP en el Equilibrio (mg/L)</i>	<i>Masa de AMP Adsorbida (mg/g)</i>	<i>Concentración de Cd(II) en el Equilibrio (mg/L)</i>	<i>Masa de Cd(II) Adsorbida (mg/g)</i>
FC-50-150	10.34	103.10	41.49	9.82
FC-50-200	15.38	138.22	40.38	11.41
FC-50-250	19.34	173.52	39.50	11.41
FC-50-300	21.80	221.05	36.19	13.84

----- No hay presencia de este componente en el experimento.

**Tabla 6.40.** Datos experimentales del equilibrio de adsorción competitivo de AMP y Cd(II) sobre el carbón F400n. Condiciones de pH = 5, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).

<i>Experimento No.</i>	<i>Concentración de AMP en el Equilibrio (mg/L)</i>	<i>Masa de AMP Adsorbida (mg/g)</i>	<i>Concentración de Cd(II) en el Equilibrio (mg/L)</i>	<i>Masa de Cd(II) Adsorbida (mg/g)</i>
F4-50Cd	-----	-----	52.46	3.16
F4-100Cd	-----	-----	97.74	4.71
F4-150Cd	-----	-----	142.99	3.02
F4-200Cd	-----	-----	171.92	15.58
F4-300Cd	-----	-----	258.98	10.64
F4-300-50	0.00	35.31	290.67	2.16
F4-300-100	10.06	65.42	293.64	1.49
F4-300-150	24.16	91.75	290.54	3.50
F4-300-200	50.57	109.87	290.62	2.86
F4-300-250	77.35	130.35	288.42	3.86
F4-300-300	117.46	144.06	286.92	7.00
F4-250-50	0.92	36.15	227.33	11.07
F4-250-100	11.76	65.99	228.65	9.66
F4-250-150	37.11	85.12	227.46	10.53
F4-250-200	66.58	103.47	214.89	19.27
F4-250-250	103.11	112.57	216.31	16.58

**Tabla 6.40.** (Continuación)

<i>Experimento No.</i>	<i>Concentración de AMP en el Equilibrio (mg/L)</i>	<i>Masa de AMP Adsorbida (mg/g)</i>	<i>Concentración de Cd(II) en el Equilibrio (mg/L)</i>	<i>Masa de Cd(II) Adsorbida (mg/g)</i>
FC-200-50	0.00	35.38	193.52	2.43
FC-200-100	6.72	66.65	192.37	1.92
FC-200-150	24.03	91.71	191.76	1.52
FC-200-200	48.39	110.17	189.81	6.31
FC-200-250	79.15	127.35	188.38	5.52
FC-200-300	116.32	141.43	189.16	5.63
FC-150-50	0.00	36.77	163.48	6.60
FC-150-100	13.38	64.50	160.78	9.69
FC-150-150	40.65	83.65	161.28	10.77
FC-150-200	70.68	101.10	161.98	9.75
FC-150-250	102.89	113.44	161.48	10.02
FC-100-250	111.70	108.39	99.51	0.24
FC-100-300	151.54	124.58	100.39	0.64
FC-50-50	2.96	34.37	46.99	0.18
FC-50-100	19.91	60.46	48.14	0.70
FC-50-150	41.48	82.05	48.19	0.93
FC-50-200	78.13	93.05	47.77	1.60
FC-50-250	107.67	110.66	47.94	1.24
FC-50-300	141.44	130.42	47.56	1.27

----- No hay presencia de este componente en el experimento.

### **6.6 Ajuste de los Datos Experimentales del Equilibrio de Adsorción**

Los datos experimentales del equilibrio de adsorción de AMP y TMP sobre los distintos adsorbentes, se ajustaron por los modelos de isothermas de Freundlich, Langmuir y Redlich-Peterson (Ecuaciones 2.15 - 2.17) descritos en la sección 2.8.2. Los parámetros de ajuste se calcularon por un método de mínimos cuadrados usando el software STATISTICA 10, el método de optimización fue Rosenbrock-quasiNewton y la función objetivo está representada por la ecuación (6.4).



$$\text{Función objetivo} = \sum_{i=1}^n (q_{\text{exp } i} - q_{\text{cal } i})^2 \quad (6.4)$$

Donde  $q_{\text{exp } i}$  es la masa adsorbida experimental del experimento “i”, mg/g;  $q_{\text{cal } i}$  es la masa adsorbida calculada del experimento “i”, mg/g.

En el caso de cada modelo, se estimó el porcentaje de desviación promedio con la ecuación (6.5):

$$\% \bar{D} = \left( \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left| \frac{q_{\text{exp } i} - q_{\text{cal } i}}{q_{\text{exp } i}} \right| \right) \times 100 \% \quad (6.5)$$

Los valores de los parámetros de ajuste de las isothermas de Freundlich, Langmuir y Redlich-Peterson para los distintos sistemas se enlistan enseguida en las Tablas 6.41 - 6.52.

**Tabla 6.41.** Constantes de las isothermas de Freundlich, Langmuir y Redlich-Peterson para la adsorción de AMP sobre el carbón F400 (A), ACF800B (B), ACF800C (C) y ACF800D (D). Condiciones de pH = 7, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).

	<i>Freundlich</i>			<i>Langmuir</i>			<i>Redlich-Peterson</i>			
	$k_f$ $((\text{mg}^{(1-1/n)}\text{L}^{(1/n)})/\text{g})$	$n$	$\% \bar{D}$	$q_m$ $(\text{mg}/\text{g})$	$K$ $(\text{L}/\text{mg})$	$\% \bar{D}$	$a$ $(\text{L}/\text{g})$	$b$ $(\text{L}^\beta/\text{mg}^\beta)$	$\beta$	$\% \bar{D}$
<b>A</b>	61.374	3.66	9	374.29	0.018	10	14.203	0.101	0.852	8
<b>B</b>	116.215	3.34	4	768.18	0.019	15	42.637	0.254	0.756	8
<b>C</b>	76.724	2.74	5	818.73	0.011	21	22.584	0.093	0.830	14
<b>D</b>	116.046	3.45	7	731.66	0.019	7	24.017	0.079	0.860	4

**Tabla 6.42.** Constantes de las isothermas de Freundlich, Langmuir y Redlich-Peterson para la adsorción de TMP sobre el carbón F400n (A), ACF800B (B), ACF800C (C) y ACF800D (D). Condiciones de pH = 7, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).

	<i>Freundlich</i>			<i>Langmuir</i>			<i>Redlich-Peterson</i>			
	$k_f$ $((\text{mg}^{(1-1/n)}\text{L}^{(1/n)})/\text{g})$	$n$	$\% \bar{D}$	$q_m$ $(\text{mg}/\text{g})$	$K$ $(\text{L}/\text{mg})$	$\% \bar{D}$	$a$ $(\text{L}/\text{g})$	$b$ $(\text{L}^\beta/\text{mg}^\beta)$	$\beta$	$\% \bar{D}$
<b>A</b>	24.298	2.34	14	265.89	0.023	9	8.88	0.099	0.800	6
<b>B</b>	277.920	4.44	12	867.32	0.147	6	165.26	0.268	0.931	7
<b>C</b>	223.041	4.60	10	690.04	0.171	4	118.14	0.171	1	4
<b>D</b>	263.931	4.69	9	758.12	0.262	7	313.74	0.620	0.917	4

**Tabla 6.43.** Constantes de las isothermas de Freundlich, Langmuir y Redlich-Peterson para la adsorción de TMP sobre el carbón F400 a diferentes pH. Condiciones de T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).

pH	Freundlich			Langmuir			Redlich-Peterson			
	$k_f$ ((mg <sup>(1-1/n)</sup> L <sup>(1/n)</sup> )/g)	n	%D	$q_m$ (mg/g)	K (L/mg)	%D	a (L/g)	b (L <sup>β</sup> /mg <sup>β</sup> )	β	%D
4	93.259	7.28	7	179.36	0.529	9	448.71	4.331	0.884	6
7	118.111	4.64	14	314.78	0.403	15	526.80	3.733	0.822	13
10	155.417	5.87	13	347.85	0.479	6	233.74	0.871	0.944	5

**Tabla 6.44.** Constantes de las isothermas de Freundlich, Langmuir y Redlich-Peterson para la adsorción de TMP sobre el carbón F400 a diferentes pH y fuerza iónica alta. Condiciones de T = 25 °C y I = 0.5 N (HCl/NaOH).

pH	Freundlich			Langmuir			Redlich-Peterson			
	$k_f$ ((mg <sup>(1-1/n)</sup> L <sup>(1/n)</sup> )/g)	n	%D	$q_m$ (mg/g)	K (L/mg)	%D	a (L/g)	b (L <sup>β</sup> /mg <sup>β</sup> )	β	%D
4	141.783	8.49	3	246.12	0.778	8	880.54	5.682	0.900	2
7	173.237	7.03	6	314.40	2.313	12	727.19	2.313	1.000	12
10	183.269	7.75	7	331.10	0.899	6	477.41	1.892	0.939	5

**Tabla 6.45.** Constantes de las isothermas de Freundlich, Langmuir y Redlich-Peterson para la adsorción de TMP sobre el carbón F400 a diferentes temperaturas. Condiciones de pH = 7 y I = 0.01 N (HCl/NaOH).

T (°C)	Freundlich			Langmuir			Redlich-Peterson			
	$k_f$ ((mg <sup>(1-1/n)</sup> L <sup>(1/n)</sup> )/g)	n	%D	$q_m$ (mg/g)	K (L/mg)	%D	a (L/g)	b (L <sup>β</sup> /mg <sup>β</sup> )	β	%D
15	108.162	4.30	17	341.45	0.155	9	57.843	0.193	0.973	9
35	176.932	7.64	4	308.67	1.496	14	416.53	1.369	0.999	14

**Tabla 6.46.** Constantes de las isothermas de Freundlich, Langmuir y Redlich-Peterson para la adsorción de AMP sobre el carbón F400n a diferentes pH. Condiciones de T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).

<i>pH</i>	<i>Freundlich</i>			<i>Langmuir</i>			<i>Redlich-Peterson</i>			
	$k_f$ ((mg <sup>(1-1/n)</sup> L <sup>(1/n)</sup> )/g)	<i>n</i>	% $\bar{D}$	$q_m$ (mg/g)	<i>K</i> (L/mg)	% $\bar{D}$	<i>a</i> (L/g)	<i>b</i> (L <sup>β</sup> /mg <sup>β</sup> )	$\beta$	% $\bar{D}$
<b>5</b>	20.867	3.06	2	187.06	0.012	20	150.18	6.749	0.684	3
<b>7</b>	10.044	1.89	8	414.79	0.004	19	20.77	1.746	0.494	8
<b>9</b>	11.938	2.05	6	365.42	0.004	22	182.84	15.165	0.514	7

**Tabla 6.47.** Constantes de las isothermas de Freundlich, Langmuir y Redlich-Peterson para la adsorción de AMP sobre el carbón F400n a diferentes temperaturas. Condiciones de pH = 7 y I = 0.01 N (HCl/NaOH).

<i>T</i> (°C)	<i>Freundlich</i>			<i>Langmuir</i>			<i>Redlich-Peterson</i>			
	$k_f$ ((mg <sup>(1-1/n)</sup> L <sup>(1/n)</sup> )/g)	<i>n</i>	% $\bar{D}$	$q_m$ (mg/g)	<i>K</i> (L/mg)	% $\bar{D}$	<i>a</i> (L/g)	<i>b</i> (L <sup>β</sup> /mg <sup>β</sup> )	$\beta$	% $\bar{D}$
<b>15</b>	19.848	3.20	7	157.23	0.015	17	272.26	13.511	0.690	7
<b>35</b>	14.742	2.12	15	393.62	0.005	30	309.51	20.825	0.531	15

**Tabla 6.48.** Constantes de las isothermas de Freundlich, Langmuir y Redlich-Peterson para la adsorción de TMP sobre la FCA a diferentes pH. Condiciones de T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).

<i>pH</i>	<i>Freundlich</i>			<i>Langmuir</i>			<i>Redlich-Peterson</i>			
	$k_f$ ((mg <sup>(1-1/n)</sup> L <sup>(1/n)</sup> )/g)	<i>n</i>	% $\bar{D}$	$q_m$ (mg/g)	<i>K</i> (L/mg)	% $\bar{D}$	<i>a</i> (L/g)	<i>b</i> (L <sup>β</sup> /mg <sup>β</sup> )	$\beta$	% $\bar{D}$
<b>4</b>	89.820	4.17	19	324.60	0.087	10	45.36	0.203	0.932	6
<b>7</b>	216.390	5.81	6	514.51	0.257	6	650.16	2.637	0.853	5
<b>10</b>	222.402	6.01	7	528.27	0.175	5	126.60	0.317	0.945	4

**Tabla 6.49.** Constantes de las isothermas de Freundlich, Langmuir y Redlich-Peterson para la adsorción de TMP sobre la FCA a diferentes pH y fuerza iónica alta. Condiciones de  $T = 25\text{ }^{\circ}\text{C}$  y  $I = 0.5\text{ N}$  (HCl/NaOH).

<i>pH</i>	<i>Freundlich</i>			<i>Langmuir</i>			<i>Redlich-Peterson</i>			
	$k_f$ $((\text{mg}^{(1-1/n)}\text{L}^{(1/n)})/\text{g})$	<i>n</i>	% $\bar{D}$	$q_m$ $(\text{mg/g})$	<i>K</i> $(\text{L/mg})$	% $\bar{D}$	<i>a</i> $(\text{L/g})$	<i>b</i> $(\text{L}^{\beta}/\text{mg}^{\beta})$	$\beta$	% $\bar{D}$
<b>4</b>	218.367	15.17	5	313.58	0.388	3	121.52	0.388	1.000	3
<b>7</b>	245.462	6.34	8	542.83	0.251	5	179.62	0.424	0.949	5
<b>10</b>	260.405	7.34	8	526.11	0.340	4	226.63	0.520	0.963	3

**Tabla 6.50.** Constantes de las isothermas de Freundlich, Langmuir y Redlich-Peterson para la adsorción de TMP sobre la FCA a diferentes temperaturas. Condiciones de  $\text{pH} = 7$  y  $I = 0.01\text{ N}$  (HCl/NaOH).

<i>T</i> $(^{\circ}\text{C})$	<i>Freundlich</i>			<i>Langmuir</i>			<i>Redlich-Peterson</i>			
	$k_f$ $((\text{mg}^{(1-1/n)}\text{L}^{(1/n)})/\text{g})$	<i>n</i>	% $\bar{D}$	$q_m$ $(\text{mg/g})$	<i>K</i> $(\text{L/mg})$	% $\bar{D}$	<i>a</i> $(\text{L/g})$	<i>b</i> $(\text{L}^{\beta}/\text{mg}^{\beta})$	$\beta$	% $\bar{D}$
<b>15</b>	173.377	4.65	23	512.83	0.191	17	593.39	2.622	0.839	5
<b>35</b>	182.849	4.58	9	545.542	0.232	9	162.36	0.401	0.939	7

**Tabla 6.51.** Constantes de las isothermas de Freundlich, Langmuir y Redlich-Peterson para la adsorción de AMP sobre la FCA a diferentes pH. Condiciones de  $T = 25\text{ }^{\circ}\text{C}$  y  $I = 0.01\text{ N}$  (HCl/NaOH).

<i>pH</i>	<i>Freundlich</i>			<i>Langmuir</i>			<i>Redlich-Peterson</i>			
	$k_f$ $((\text{mg}^{(1-1/n)}\text{L}^{(1/n)})/\text{g})$	<i>n</i>	% $\bar{D}$	$q_m$ $(\text{mg/g})$	<i>K</i> $(\text{L/mg})$	% $\bar{D}$	<i>a</i> $(\text{L/g})$	<i>b</i> $(\text{L}^{\beta}/\text{mg}^{\beta})$	$\beta$	% $\bar{D}$
<b>5</b>	76.499	3.25	42	451.15	0.058	19	28.80	0.082	0.956	21
<b>7</b>	42.683	2.67	32	425.30	0.023	15	102.9	2.058	0.652	31
<b>9</b>	17.463	2.00	14	491.77	0.006	14	5.92	0.090	0.695	8

**Tabla 6.52.** Constantes de las isotermas de Freundlich, Langmuir y Redlich-Peterson para la adsorción de AMP sobre la FCA a diferentes temperaturas. Condiciones de pH = 7 y I = 0.01 N (HCl/NaOH).

T (°C)	Freundlich			Langmuir			Redlich-Peterson			
	$k_f$ $((\text{mg}^{(1-1/n)}\text{L}^{(1/n)})/\text{g})$	n	% $\bar{D}$	$q_m$ (mg/g)	K (L/mg)	% $\bar{D}$	a (L/g)	b (L <sup><math>\beta</math></sup> /mg <sup><math>\beta</math></sup> )	$\beta$	% $\bar{D}$
15	27.290	2.06	8	629.93	0.008	24	652.90	23.548	0.517	8
35	68.717	2.90	33	535.65	0.030	8	19.59	0.054	0.935	6

### 6.7 Calor Isostérico de Adsorción

El calor de adsorción es comúnmente usado para medir la magnitud de la interacción entre el adsorbato y el adsorbente, y se puede determinar por medio de calorimetría o por medio de un análisis de los experimentos de adsorción a varias temperaturas (Builes et al., 2013). La ecuación (6.8) y su forma integrada entre dos puntos, representada por la ecuación (6.9), son las ecuaciones utilizadas para estimar el calor isostérico de adsorción.

$$\frac{(\Delta H_{\text{ads}})_q}{-RT^2} = \left( \frac{\partial \ln(C)}{\partial T} \right)_q \quad (6.6) \quad (\Delta H_{\text{ads}})_q = \frac{R \ln \left( \frac{C_2}{C_1} \right)}{\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1}} \quad (6.7)$$

Donde  $(\Delta H_{\text{ads}})_q$  es el calor isostérico de adsorción, J/mol; R es la constante de los gases ideales, (8.3144 J/(mol K));  $C_1$  es la concentración del adsorbato a la temperatura  $T_1$  a un cierto valor de q, mg/L;  $C_2$  es la concentración del adsorbato a la temperatura  $T_2$  al mismo valor de q, mg/L;  $T_1$  es la temperatura, K;  $T_2$  es la temperatura, K.

Ulteriormente, se ejemplifica el cálculo para el calor isostérico en la adsorción de los experimentos F400nAMP-Ad7-T15-5 y F400nAMP-Ad7-4, donde las concentraciones y temperaturas necesarias son  $C_1 = 437.66$  mg/L,  $C_2 = 138.18$  mg/L,  $T_1 = 288.15$  K,  $T_2 = 298.15$  K.

Al sustituir los valores de concentración y temperatura en la ecuación (6.9):

$$(\Delta H_{\text{ads}})_q = \frac{\left( 8.3144 \frac{\text{J}}{\text{mol K}} \right) \ln \left( \frac{138.18 \frac{\text{mg}}{\text{L}}}{437.66 \frac{\text{mg}}{\text{L}}} \right)}{\frac{1}{298.15 \text{ K}} - \frac{1}{288.15 \text{ K}}} = 82,353 \frac{\text{J}}{\text{mol}}$$

En la Tabla 6.53 se presentan todos los calores isostéricos de adsorción, determinados a partir de los efectos de la temperatura en los diferentes sistemas de adsorción estudiados en el presente trabajo.

**Tabla 6.53.** Datos experimentales de los calores isostéricos de los distintos sistemas estudiados.

<i>Sistema</i>	<i>Experimento No.</i>	<i>Temperatura</i> (°C)	<i>Concentración</i> (mg/L)	<i>(ΔH<sub>ads</sub>)<sub>q</sub></i> (kJ/mol)
AMP-F400n	F400nAMP-Ad7-T15-5	15	437.66	82.35
	F400nAMP-Ad7-4	25	138.18	
TMP-FCA	FCATMP-Ad7-6	25	185.98	28.64
	FCATMP-Ad7-T35-6	35	127.83	

### 6.8 Ajuste de los Datos Experimentales del Equilibrio de Adsorción Binaria

Los datos experimentales del equilibrio de adsorción binaria se interpretaron con los modelos de isothermas de adsorción multicomponente de Freundlich, Langmuir y Redlich-Peterson con y sin parámetros de interacción (Ecuaciones 2.18-2.25). Los parámetros de ajuste se calcularon por un método de mínimos cuadrados con el software Micromath Scientist y empleando el método de optimización de Levenberg-Maquardt y la función objetivo siguiente:

$$\text{Función objetivo} = \sum_{i=1}^2 \sum_{j=1}^n (q_{\text{exp } i,j} - q_{\text{cal } i,j})^2 \quad (6.8)$$

Donde  $q_{\text{exp } i,j}$  es la masa adsorbida del componente “i” correspondiente al dato experimental “j”, mmol/g;  $q_{\text{cal } i,j}$  es la masa adsorbida del componente “i” correspondiente al dato experimental “j” que se predice con el modelo de adsorción binaria, mmol/g.

El porcentaje de desviación promedio se evaluó para cada modelo de isoterma por medio de la ecuación siguiente:

$$\% \bar{D} = \left( \frac{1}{2n} \sum_{i=1}^{i=2} \sum_{j=1}^n \left| \frac{q_{\text{exp } i,j} - q_{\text{cal } i,j}}{q_{\text{exp } i,j}} \right| \right) \times 100 \% \quad (6.9)$$

Los datos experimentales de los sistemas de adsorción binarios de AMP y Cd(II) se encuentran en forma tabular en el Apéndice C. En la Tabla 6.54, se presentan los parámetros

de ajuste para el equilibrio de adsorción individual de AMP y Cd(II) sobre el carbón F400n y la FCA, utilizados también en el cálculo de los parámetros de las superficies de adsorción.

**Tabla 6.54.** Constantes de las isothermas de Freundlich, Langmuir y Redlich-Peterson para la adsorción de AMP y Cd(II) sobre el carbón F400n y la FCA. Condiciones de pH = 5, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).

Sistema	Freundlich			Langmuir			Redlich-Peterson			
	$k_f$ ((mg <sup>(1-1/n)</sup> L <sup>(1/n)</sup> )/g)	n	% $\bar{D}$	$q_m$ (mg/g)	K (L/mg)	% $\bar{D}$	a (L/g)	b (L <sup><math>\beta</math></sup> /mg <sup><math>\beta</math></sup> )	$\beta$	% $\bar{D}$
<i>Cd(II)</i> <sup>a</sup>	0.1135	2.32	14	0.198	1.452	12	0.288	1.452	1.00	12
<i>AMP</i> <sup>a</sup>	1.3265	3.25	42	1.291	20.43	19	28.80	22.05	0.95	21
<i>Cd(II)</i> <sup>b</sup>	0.0546	1.19	45	0.385	0.170	45	0.094	0.723	0.33	45
<i>AMP</i> <sup>b</sup>	0.4046	3.06	2	0.535	4.077	20	150.1	369.5	0.68	3

<sup>a</sup> El adsorbente es FCA.

<sup>b</sup> El adsorbente es F400n.

### 6.9 Datos Experimentales de la Velocidad de Adsorción

Los datos experimentales de las curvas de decaimiento de la concentración se enlistan en el Apéndice D. En el estudio de la velocidad de adsorción se observó que la isoterma de adsorción dinámica es ligeramente diferente a la isoterma estática. En la Tabla 6.55 se incluyen los parámetros de las isothermas lineal o ley de Henry, Langmuir y Redlich-Peterson.

**Tabla 6.55.** Parámetros de las isothermas dinámicas de los sistemas con FCA y F400n.

Sistema	Henry		Langmuir			Redlich-Peterson			
	$k_H$ (L/g)	% $\bar{D}$	$q_m$ (mg/g)	K (L/mg)	% $\bar{D}$	a (L/g)	b (L <sup><math>\beta</math></sup> /mg <sup><math>\beta</math></sup> )	$\beta$	% $\bar{D}$
<i>AMP</i> <sup>a</sup>	6.35 (0-18)*	1	287.08	0.027	5.91	586.23	12.26	0.694	4.28
<i>TMP</i> <sup>a</sup>	147.25 (0-2)*	29	395.51	1.474	2.75	597.28	1.527	0.997	2.75
<i>AMP</i> <sup>b</sup>	1.77 (0-50)*	0	246.20	0.0091	5.41	19.660	1.115	0.575	4.3

<sup>a</sup> El adsorbente es FCA.

<sup>b</sup> El adsorbente es F400n.

\*Intervalo de validez de la isoterma de Henry.

## CAPÍTULO 7. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

### 7.1 Caracterización de Materiales

#### 7.1.1 Propiedades de Textura de los Adsorbentes

Las propiedades de textura de los adsorbentes tales como el área específica, diámetro de poro, y volumen de poro, se determinaron haciendo uso de los isothermas de adsorción-desorción de N<sub>2</sub>. El cálculo de las propiedades de textura se efectuó con el método BET, el modelo de Dubinin-Radushkevich, el modelo t-plot y regla de Gurvich. Las propiedades de textura de los adsorbentes se enlistan en la Tabla 7.1. El área específica de los adsorbentes decrece en el orden siguiente: ACF800C > ACF800B > ACF800D > FCA > F400 > F400n.

**Tabla 7.1.** Propiedades de textura de los materiales adsorbentes.

<i>Material</i> <i>Adsorbente</i>	$S_{BET}$ (m <sup>2</sup> /g)	$V_p^a$ (cm <sup>3</sup> /g)	$D_p^b$ (nm)	$S_{micDR}$ (m <sup>2</sup> /g)	$W_0$ (cm <sup>3</sup> /g)	$L_0$ (nm)	$S_{ext}$ (m <sup>2</sup> /g)	$\rho_p$ (g/cm <sup>3</sup> )	$\epsilon_p$
<b>F400</b>	939	0.54	2.29	739	0.36	0.99	157	1.036	0.554
<b>F400n</b>	762.5	0.37	1.97	682	0.31	0.91	85	1.291	0.486
<b>FCA</b>	1268	0.56	1.77	920	0.50	1.09	74	0.945	0.531
<b>ACF800B</b>	1956	0.92	1.88	1071	0.80	1.49	124	-----	-----
<b>ACF800C</b>	2169	1.04	1.92	1126	0.87	1.54	196	-----	-----
<b>ACF800D</b>	1583	0.69	1.75	944	0.66	1.40	117	-----	-----

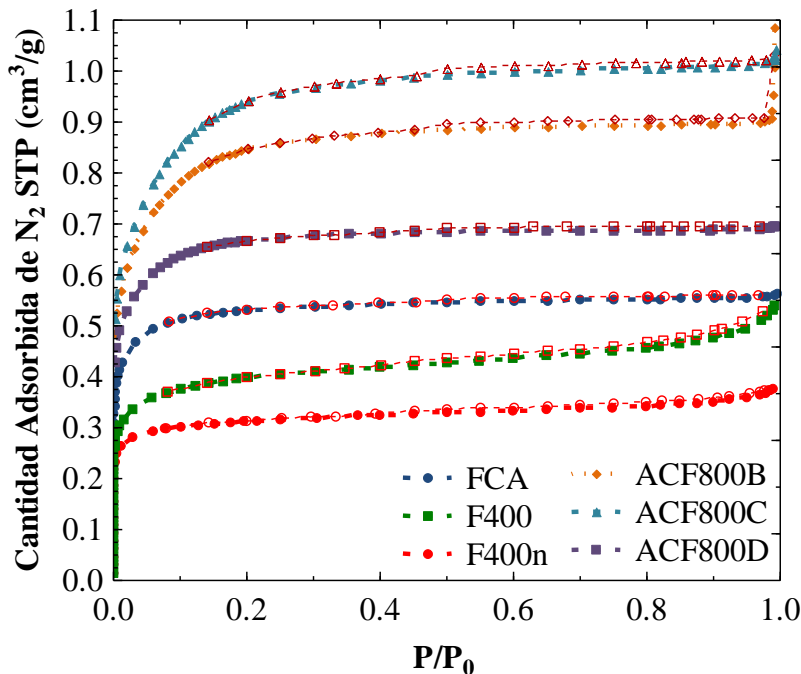
<sup>a</sup> Volumen total de los poros cuando P/P<sub>0</sub> = 0.98.

<sup>b</sup> Diámetro promedio de los poros determinado por la regla de Gurvich.

----- No se determinaron.

Las isothermas de fisisorción de N<sub>2</sub> de todos los carbones activados se muestran en la Figura 7.1 y la cantidad de N<sub>2</sub> adsorbido incrementa significativamente a presiones relativas bajas, lo cual revela que todos los materiales son microporosos. Además, las isothermas presentan ciclos de histéresis muy pequeños que no aportan información relevante; no obstante, el F400 tiene un ciclo de histéresis más marcado, lo que evidencia la presencia de mesoporos estrechos. De acuerdo con la IUPAC, las isothermas de los materiales son de tipo Ib, y para el caso del F400 con ciclo de histéresis H4 (Thommes et al., 2015).





**Figura 7.1.** Isotermas de adsorción-desorción de  $N_2$  de los materiales adsorbentes.

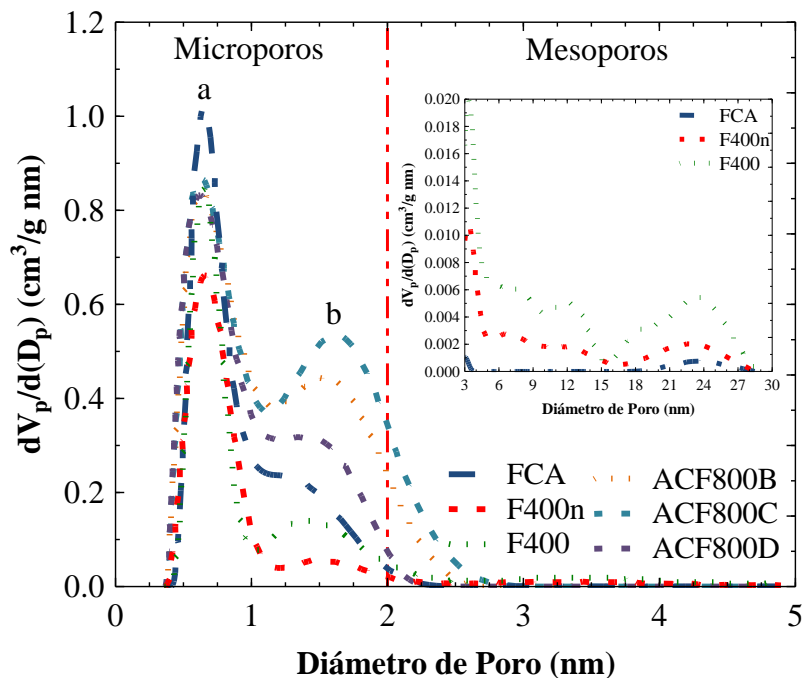
El área específica ( $S_{BET}$ ) y el área de los microporos ( $S_{micDR}$ ) de los materiales carbonosos contrastan entre los dos tipos de adsorbentes utilizados, puesto que las FCAs tienen mayores áreas que los CAs granulares. En promedio, las relaciones entre el área específica y el área de microporos de las FCAs y los CAs son 2/1 y 1/0.7, respectivamente. En el caso del área externa ( $S_{ext}$ ) no hay una relación obvia entre las FCAs y los CAs, ya que para el caso de F400 se tiene una mayor área externa que para FCA, ACF800D y ACD800B. No obstante, este resultado se explica observando que el ciclo de histéresis de la isoterma de adsorción-desorción de  $N_2$  de F400 es evidentemente más marcado, corroborando mayor mesoporosidad, y por consiguiente, una mayor área externa.

La anchura de los microporos ( $L_0$ ) de los materiales carbonosos son 1.54, 1.49, 1.40, 1.09, 0.99 y 0.91 nm para ACF800C, ACF800B, ACF800D, FCA, F400 y F400n, respectivamente. En virtud de que  $L_0$  es inferior a 2 nm corrobora que todos los CAs son mayoritariamente microporosos; sin embargo, se nota que las FCAs tienen microporos más anchos que los CAs granulares. La relación entre el volumen de los microporos ( $W_0$ ) de las FCAs y los CAs es de 2/1.

Las fibras de carbón activado ACF800B, ACF800C y ACF800D se reactivaron usando flujos de CO<sub>2</sub> a 800 °C y periodos de reactivación de 300, 450 y 150 min, respectivamente. Destaca la isoterma de adsorción-desorción de ACF800B que se muestra en Figura 7.1, ya que, a presiones relativas cercanas a la unidad, se observa un incremento repentino en la capacidad de adsorción, lo que se asocia a la condensación capilar cuando se saturan los poros.

El tiempo de activación fue de suma importancia en el desarrollo de las propiedades de textura de las fibras, ya que el área específica ( $S_{BET}$ ), el área externa ( $S_{ext}$ ), el área de los microporos ( $S_{micDR}$ ), el volumen de microporo ( $W_0$ ) y el resto de las propiedades de textura se incrementaron con el tiempo de activación. Las proporciones promedio con las que se incrementaron las propiedades de textura de las fibras modificadas con respecto a la FCA precursora son de 1.24, 1.47 y 1.67 veces para ACF800D, ACF800B y ACF800C respectivamente.

Las distribuciones del tamaño de poro de todos los adsorbentes se exhiben en la Figura 7.2, mientras que en la Figura 7.3 se graficó la fracción de volumen de poro acumulado contra diámetro de poro.



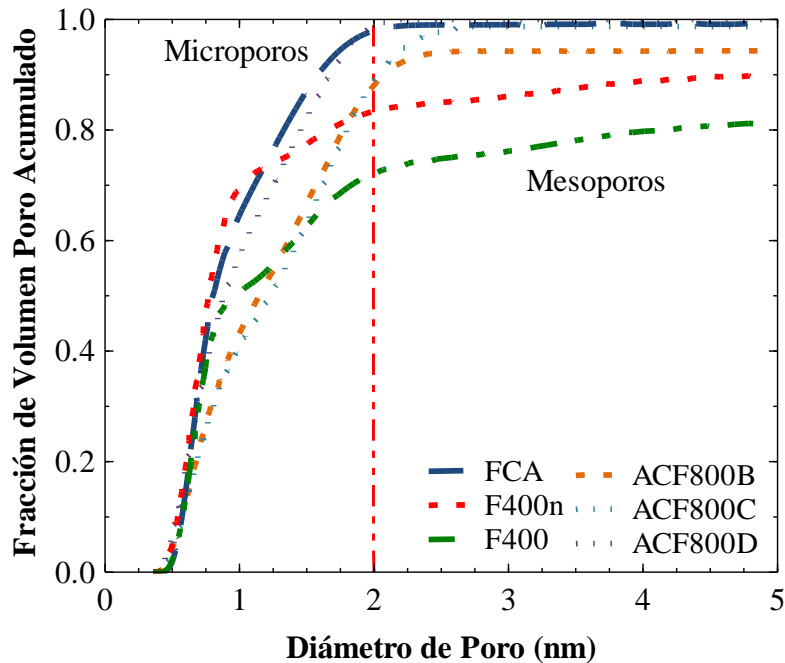
**Figura 7.2.** Distribución del volumen de los poros contra el diámetro de poro. Obtenidas por DFT.

Las distribuciones de tamaño de poro de todos los materiales adsorbentes (Figura 7.2) tienen un comportamiento bimodal, teniendo dos picos que predominan en la región microporosa. El primer pico que presentan todos los materiales (designado como “a”) tiene una estructura simétrica y estrecha, con un máximo a un diámetro de poro de 0.7 nm, lo que sugiere una alta presencia de microporos con diámetros muy cercanos al del máximo. Además, las alturas de los picos, que son proporcionales a la cantidad de los poros con ese diámetro, varían en el siguiente orden decreciente: FCA > ACF800C > F400  $\approx$  ACF800B  $\approx$  ACF800D > F400n. Los segundos picos (etiquetado como “b”) de los materiales, de manera general, son poco simétricos y anchos, pero con máximos bien definidos, lo que indica una gran cantidad de microporos con diámetros similares al de los máximos, pero a su vez, la anchura de los picos refleja una mayor distribución de poros con diámetros entre 1 y 2.5 nm.

La distribución de tamaño de poro de las fibras modificadas con respecto a la fibra sin modificar (FCA), arroja que la activación resultó beneficiosa para las fibras, al desarrollar microporos más anchos. Esto puede observarse en los picos “b” de la distribución de tamaño de poro de las fibras, donde al incrementar el tiempo de activación también se aumenta proporcionalmente la cantidad de microporos anchos y mesoporos estrechos.

En la Figura 7.3 se ilustra la fracción de volumen de poro acumulado contra el diámetro de poro y se corrobora que la mayor parte del volumen de los poros de todos los CAs es de microporos. Las fracciones de volumen de poro acumulado de la ACF800C, ACF800B, ACF800D, FCA, F400 y F400n son 0.90, 0.89, 0.99, 0.98, 0.84 y 0.72, respectivamente, para diámetros de poros menores de 2 nm. El F400 es el material con mayor volumen de poros en la región mesoporosa (0.28), lo cual corrobora que el lazo de histéresis más marcado en su isoterma de adsorción-desorción de N<sub>2</sub>, aunado a su elevada área externa, deriva de una mesoporosidad más desarrollada comparada con la de los otros materiales.

Las fracciones de volumen de poro acumulado de las FCAs modificadas, aunado al incremento de sus áreas específicas, de microporos y externas, revelan que el tiempo de activación propicio un ensanchamiento generalizado de los poros, así como la formación de nuevos poros; por lo tanto, al aumentar el tiempo de activación se formaron mesoporos. Por esta razón, la fracción de volumen de los microporos decreció conforme aumenta el tiempo de activación.



**Figura 7.3.** Fracción de volumen acumulado de los poros contra el diámetro de poro. Obtenidas por DFT.

### 7.1.2 Sitios Activos de los Adsorbentes

Las concentraciones de los sitios activos de los materiales adsorbentes se enlistan en la Tabla 7.2. Como se puede observar, las concentraciones de los sitios ácidos se encuentran en el intervalo de 0.046 a 0.321 meq/g, y decrecen de acuerdo a la siguiente secuencia: FCA > ACF800C > ACF800D > ACF800B > F400 > F400n.

**Tabla 7.2.** Concentraciones de los sitios activos de los materiales adsorbentes.

<i>Material</i> <i>Adsorbente</i>	<i>Sitios Ácidos (meq/g)</i>				<i>Sitios Básicos</i> <i>(meq/g)</i>
	<i>Totales</i>	<i>Carboxílicos</i>	<i>Fenólicos</i>	<i>Lactónicos</i>	
<i>F400</i>	0.053	0.000	0.02	0.033	0.268
<i>F400n</i>	0.046	0.012	0.024	0.01	0.325
<i>FCA</i>	0.321	0.094	0.173	0.054	0.200
<i>ACF800B</i>	0.074	-----	-----	-----	0.731
<i>ACF800C</i>	0.281	-----	-----	-----	0.715
<i>ACF800D</i>	0.114	-----	-----	-----	0.751

----- No se determinaron.

Las concentraciones de los sitios básicos de los carbones F400 y F400n son aproximadamente 5 a 7 veces mayores que las de los sitios ácidos, respectivamente. Este resultado revela que la naturaleza de la superficie de estos CAs es de carácter básica. La concentración de sitios ácidos de la FCA sin modificar es 1.6 veces mayor que la de sitios básicos, indicando que su superficie es de carácter ácido. Las concentraciones de los grupos ácidos en FCA decrecen en el orden siguiente: fenólicos > carboxílicos > lactónicos.

En contraste con la FCA, las fibras modificadas ACF800B, ACF800C y ACF800D tienen mayor concentración de sitios básicos y se redujo la concentración de sitios ácidos. La relación entre la concentración de los sitios básicos y la de los ácidos es de 9.8/1, 2.5/1 y 6.6/1, respectivamente. Como consecuencia de la activación, se generaron nuevos poros en las fibras modificadas y los anillos aromáticos de las láminas de grafeno contenían electrones  $\pi$ , que son considerados sitios básicos por su capacidad para capturar protones o iones hidronio. Adicionalmente, se pudieron formar sitios carbonilo, éter, quinona y pirona, que también pueden haber contribuido a la basicidad de las fibras modificadas; no obstante, aún no es posible cuantificar las concentraciones de cada tipo de sitio básico, y así, verificar cual se formó en mayor proporción. La mayor concentración de sitios básicos fue de la fibra ACF800D con una concentración de 0.751 meq/g y un tiempo de activación de 150 min. Para las fibras con tiempos de activación superiores la concentración de sitios básicos disminuyó levemente, hasta una concentración mínima de 0.715 meq/g, que corresponde a la fibra ACF800C con un tiempo de activación de 450 min.

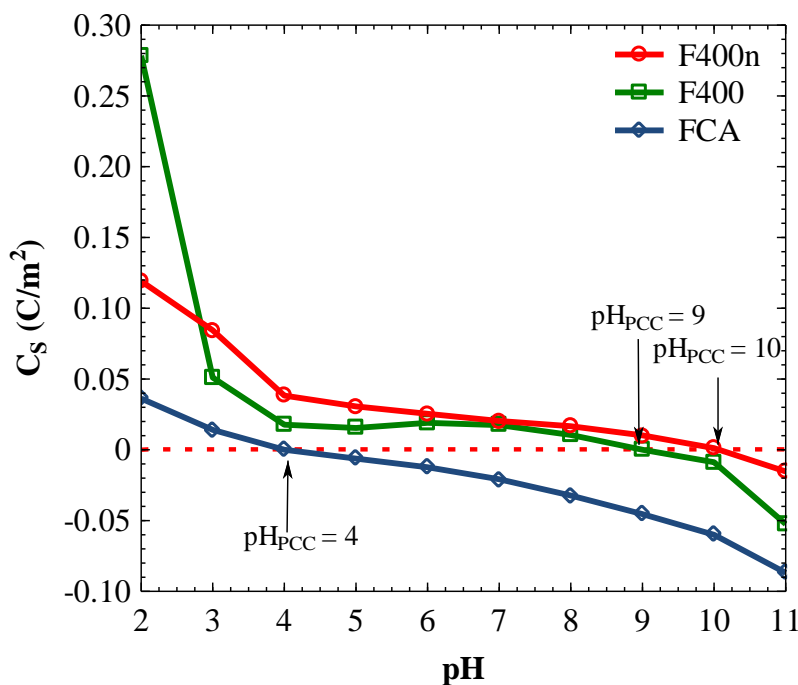
### ***7.1.3 Distribución de la Carga Superficial y Punto de Carga Cero de los Adsorbentes***

Todos los sólidos en sus superficies tienen grupos funcionales, cuyo objetivo es balancear las cargas superficiales del material y así tener una estructura sólida estable; sin embargo, al sumergir los sólidos en solución acuosa, los protones y los iones hidroxilo en solución propician que los grupos funcionales superficiales adquieran cargas como consecuencia de reacciones ácido-base.

Los carbones activados tienen carácter anfótero, debido a que poseen grupos ácidos y básicos en sus superficies. La distribución de la carga superficial de un CA con respecto al pH de la solución es una información muy importante para entender el mecanismo de adsorción. Además, el pH de la solución al cual la carga superficial es neutra o cero se le conoce como punto de carga cero ( $\text{pH}_{\text{PCC}}$ ).

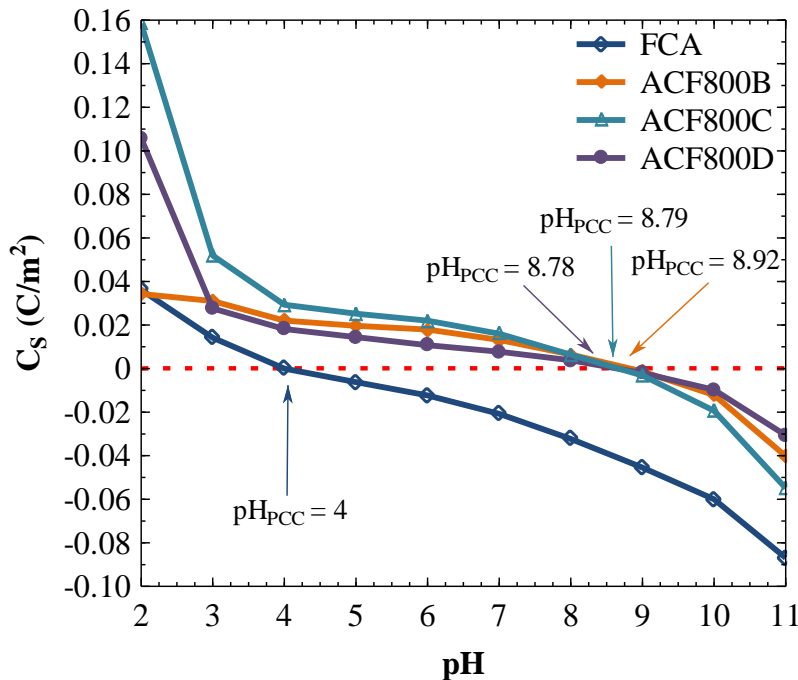
A pH superiores al  $pH_{PCC}$ , la carga superficial neta es negativa, esto revela que los sitios ácidos cedieron protones, o que se han generado cargas parciales negativas en grupos funcionales con elementos que tienen electrones libres. Por el contrario, a valores inferiores de pH al  $pH_{PCC}$ , la carga superficial neta es positiva, lo que indica que los grupos básicos han aceptado protones o iones hidronio de la solución.

El  $pH_{PCC}$  es de suma importancia para elucidar el mecanismo de adsorción y depende de las reacciones ácido-base de los grupos funcionales superficiales. En las Figuras 7.4 y Figura 7.5 se muestran las distribuciones de las cargas superficiales de todos los materiales adsorbentes. Los  $pH_{PCC}$  siguen la secuencia decreciente subsecuente: F400n > F400 > ACF800B > ACF800C > ACF800D > FCA.



**Figura 7.4.** Distribuciones de las cargas superficiales de F400n, F400 y FCA.

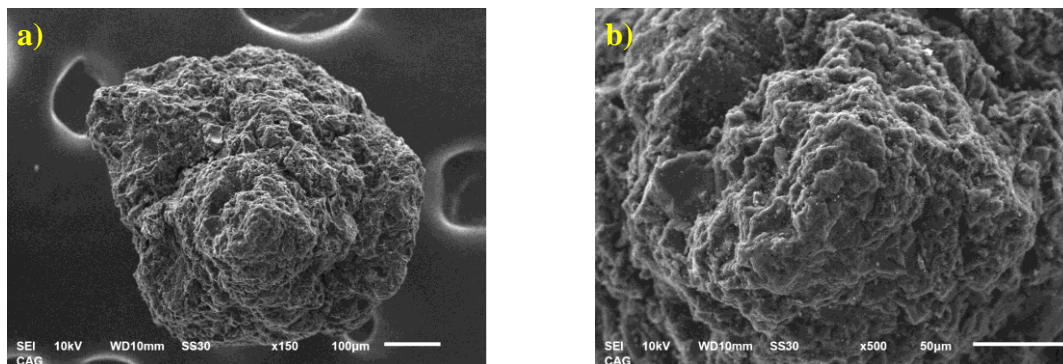
Los  $pH_{PCC}$  de F400 y F400n son 9 y 10 respectivamente, lo que significa que se trata de CAs con alto contenido de grupos básicos, corroborando los resultados de la sección anterior. El  $pH_{PCC}$  de la FCA es de 4, que contrasta con los  $pH_{PCC}$  de ACF800B, ACF800C y ACF800D que son de 8.92, 8.79 y 8.78, respectivamente. Corroborando el resultado planteado en la sección anterior de que en la activación con  $CO_2$  se formaron sitios básicos.



**Figura 7.5.** Distribuciones de las cargas superficiales de FCA, ACF800B, ACF800C y ACF800D.

#### 7.1.4. Morfología de los Materiales Adsorbentes

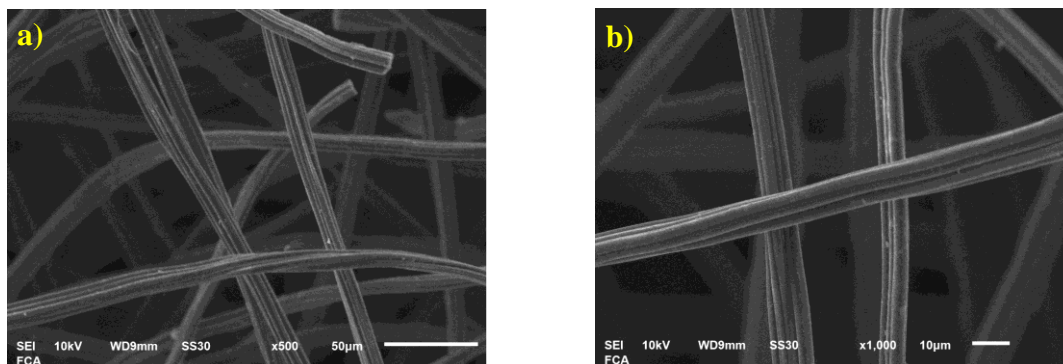
En las Figuras 7.6 y 7.7 se presentan fotomicrográficas de algunos de los CAs, tomadas a través de la técnica de microscopía electrónica de barrido (SEM), utilizando electrones secundarios. La morfología de F400n se ilustra en la Figura 7.6 y se nota que este CA está formado por pequeños gránulos de carbón que tienen forma muy irregular. La geometría de los gránulos se puede considerar como de esferas irregulares.



**Figura 7.6.** Fotomicrográficas del carbón activado granular (CAG) F400n a distintas magnificaciones. a) 150×, b) 500×.



La Figura 7.7 muestra que la FCA está conformada por delgados filamentos o fibrillas de carbono, que conservaron la forma del material precursor. También, se observa que la geometría de las fibras es cilíndrica con ralladuras laterales axiales.



**Figura 7.7.** Fotomicrografías de la FCA a distintas magnificaciones. a) 500×, b) 1000×.

### ***7.2 Equilibrio de Adsorción Individual de Ampicilina y Trimetoprima***

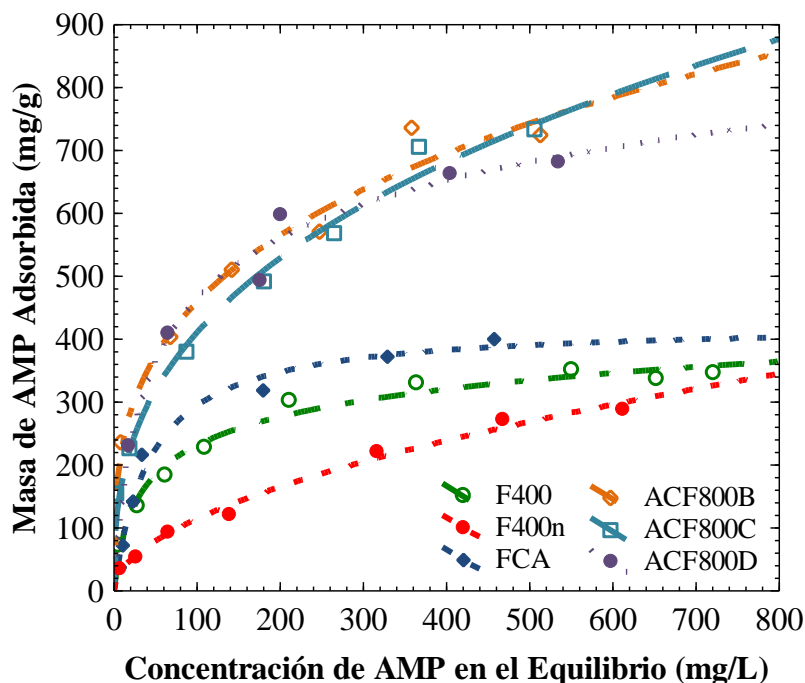
Los datos experimentales del equilibrio individual de adsorción de AMP y TMP sobre los distintos adsorbentes, se interpretaron con los modelos de equilibrio de Freundlich, Langmuir y Redlich-Peterson, y las constantes de las isothermas se determinaron a través de un método de mínimos cuadrados. En las Tablas de la sección 6.6 se enlistan todas las constantes de las isothermas de los modelos previamente mencionados. Los modelos de isoterma que interpretaron mejor los datos experimentales son los que presentaron menor porcentaje de desviación, %D. No obstante, es importante recalcar que, a pesar de que se logre un buen ajuste, no necesariamente significa que los mecanismos de adsorción están regidos por las suposiciones bajo las cuales se dedujo el modelo que mejor ajustó los datos experimentales.

El modelo de equilibrio de Redlich-Peterson presentó los menores porcentajes de desviación con respecto al modelo de Freundlich y Langmuir. Los modelos de Langmuir y de Redlich-Peterson ajustaron de mejor manera el equilibrio de los sistemas con TMP, debido a que la capacidad de adsorción se incrementó considerablemente a bajas concentraciones en el equilibrio; por otra parte, los modelos de Freundlich y Redlich-Peterson ajustaron mejor los datos de equilibrio de adsorción de AMP ya que la capacidad de adsorción incrementó gradualmente.



### 7.2.1 Comparación de las Capacidades de los Materiales F400, F400n, FCA y las Fibras de Carbón Modificadas para Adsorber Ampicilina y Trimetoprima

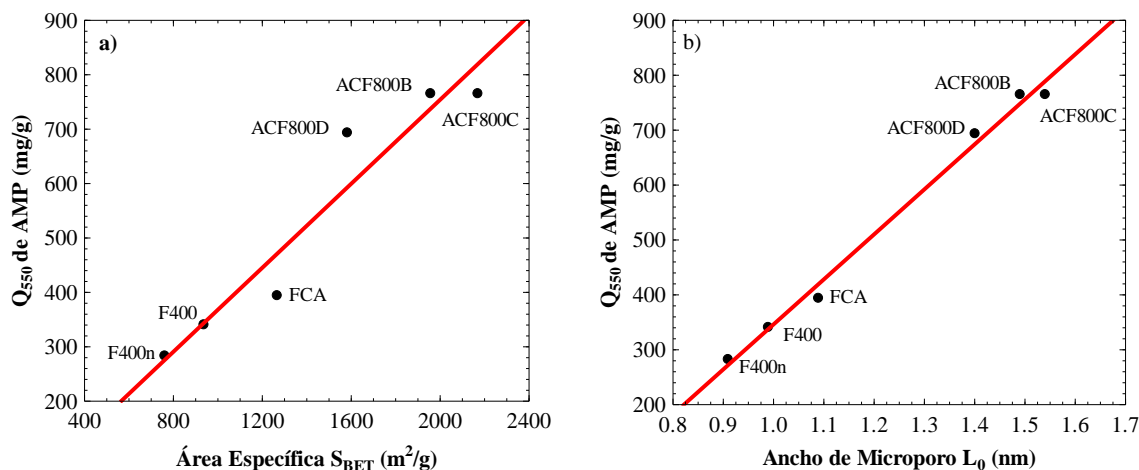
Con el objetivo de comparar las capacidades de adsorción de los distintos CAs utilizados en el presente trabajo, se realizaron experimentos de equilibrio de adsorción a  $T = 25\text{ }^{\circ}\text{C}$ ,  $\text{pH} = 7$  y  $I = 0.01\text{ N}$  (HCl/NaOH). Las isotermas de adsorción de AMP sobre los distintos CAs se exhiben en la Figura 7.8 y la capacidad de adsorción decrece en el orden siguiente:  $\text{ACF800C} \approx \text{ACF800B} > \text{ACF800D} > \text{FCA} > \text{F400} > \text{F400n}$ .



**Figura 7.8.** Isotermas de adsorción de la AMP sobre los materiales F400, F400n, FCA y las fibras modificadas a  $T = 25\text{ }^{\circ}\text{C}$ ,  $\text{pH} = 7$  y  $I = 0.01\text{ N}$  (HCl/NaOH).

A una concentración en el equilibrio de AMP de  $550\text{ mg/L}$ , la cantidad de AMP adsorbida sobre ACF800C, ACF800B, ACF800D, FCA, F400 y F400n es de 765, 764, 693, 393, 340 y 283 mg/g, respectivamente. Esta cantidad se denominará  $Q_{550}$ . Las diferencias entre las capacidades de adsorción se atribuyen a las propiedades de textura como el área específica ( $S_{\text{BET}}$ ), volumen de microporos ( $W_0$ ) y anchura de microporos ( $L_0$ ). El efecto del área específica y anchura de microporos en la capacidad de los CAs para adsorber AMP se ilustra en la Figura 7.9 a) y b). Se observa que  $Q_{550}$  aumenta linealmente con el área específica y la anchura de microporos. Es importante puntualizar que la adsorción de AMP sobre los

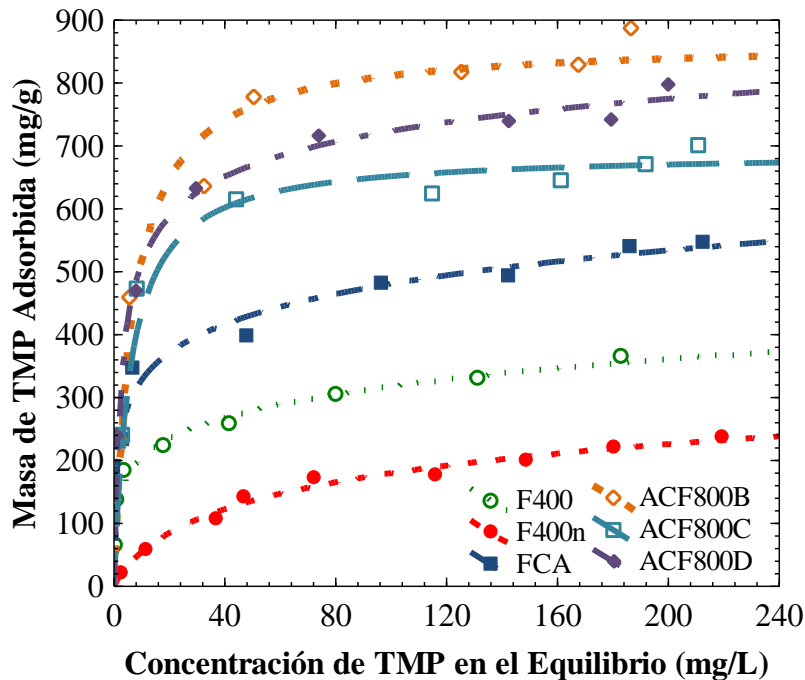
CAs ocurre por interacciones  $\pi$ - $\pi$  entre el anillo aromático de la AMP y los anillos aromáticos de las láminas de grafeno de los CAs.



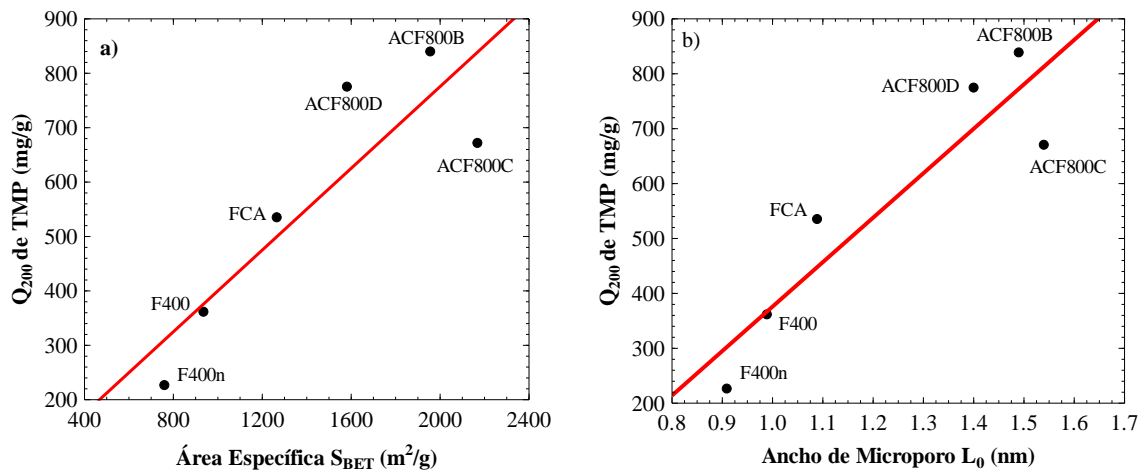
**Figura 7.9.** Efecto de las propiedades textura de los materiales adsorbentes en la capacidad de los CAs ( $Q_{550}$ ) para adsorber AMP. a)  $Q_{550}$  vs.  $S_{BET}$  y b)  $Q_{550}$  vs.  $L_0$ .

La capacidad de adsorción de los CAs aumenta con el área específica porque se incrementan las interacciones  $\pi$ - $\pi$ ; también, el ensanchamiento de los microporos, facilita el acceso de las moléculas de AMP a los mismos, reduciendo el impedimento estérico que pudiera existir.

Las isotermas de adsorción de TMP sobre los distintos CAs se graficaron en la Figura 7.10 y las capacidades de adsorción presentan el orden decreciente siguiente: ACF800B > ACF800D > ACF800C > FCA > F400 > F400n. A una concentración en el equilibrio de TMP de 200 mg/L, la cantidad adsorbida de TMP sobre ACF800B, ACF800D, ACF800C, FCA, F400 y F400n ( $Q_{200}$ ) es de 838, 775, 670, 534, 361 y 226 mg/g, respectivamente. Al igual que la AMP, las capacidades de adsorción de los CAs por la TMP dependen de las propiedades de textura como se ilustra en las Figuras 7.11 a) y b). En estas figuras se nota que  $Q_{200}$  crece prácticamente lineal conforme aumenta el área específica y el ancho de microporo. No obstante, la capacidad de ACF800C se desvía del comportamiento que exhiben los demás CAs, ya que presenta menor capacidad que la esperada (Ver Figura 7.11b). Esto se puede atribuir a un efecto adicional que pueda disminuir la capacidad de adsorción.



**Figura 7.10.** Isotermas de adsorción de TMP sobre los materiales F400, F400n, FCA y las fibras modificadas a  $T = 25\text{ }^{\circ}\text{C}$ ,  $\text{pH} = 7$  y  $I = 0.01\text{ N}$  (HCl/NaOH).

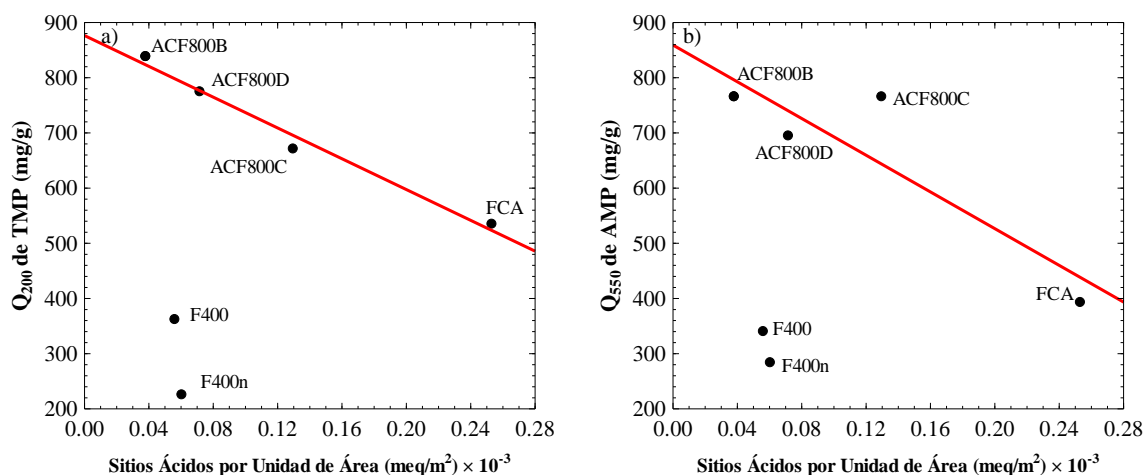


**Figura 7.11.** Efecto de las propiedades textura de los materiales adsorbentes en la capacidad de los CAs ( $Q_{200}$ ) para adsorber TMP. a)  $Q_{200}$  vs.  $S_{\text{BET}}$  y b)  $Q_{200}$  vs.  $L_0$ .

La concentración de los sitios ácidos de los CAs afecta la capacidad de adsorción, puesto que los sitios ácidos actúan como grupos desactivantes de las interacciones dispersivas  $\pi$ - $\pi$ , disminuyendo la capacidad de adsorción por este mecanismo. En las Figuras 7.12 a) y

b) se aprecia que la capacidad de la FCA y FCAs modificadas para adsorber AMP ( $Q_{550}$ ) y TMP ( $Q_{200}$ ) disminuye linealmente incrementando la concentración de sitios ácidos. Las capacidades de adsorción de F400n y F400 no siguen el mismo comportamiento que las de las FCAs. La tendencia lineal corrobora que la capacidad de adsorción de las FCAs depende del área específica y la concentración de los sitios ácidos.

Los resultados anteriores constatan que la TMP y AMP se adsorben principalmente por interacciones dispersivas  $\pi$ - $\pi$ . Carrales-Alvarado et al., (2014) encontraron resultados similares para la adsorción de metronidazol sobre materiales carbonosos.



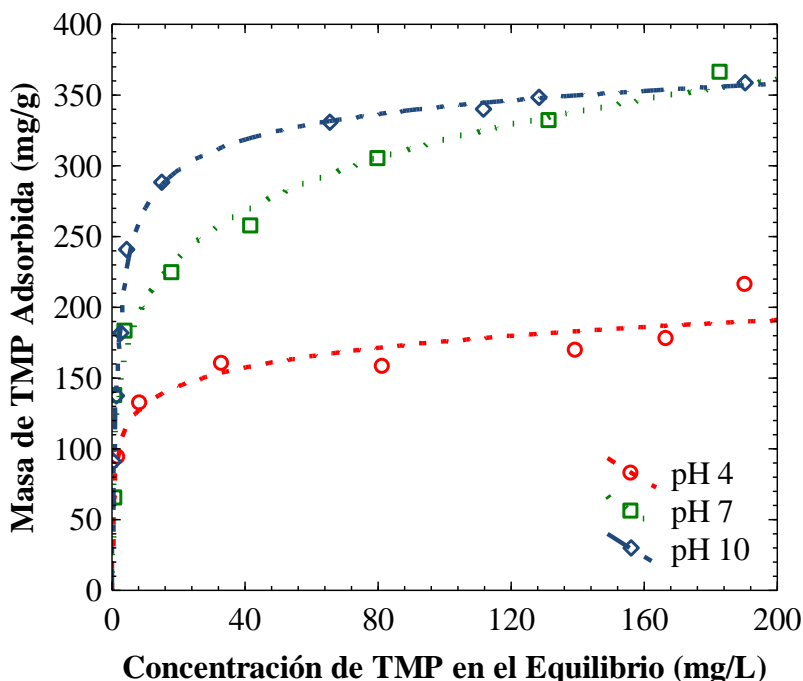
**Figura 7.12.** Efecto de la acidez de CAs. a)  $Q_{200}$  de TMP vs. concentración de sitios ácidos por unidad de área, b)  $Q_{550}$  de AMP vs. concentración de sitios ácidos por unidad de área.

### 7.2.2 Adsorción Individual de Trimetoprima Sobre el Carbón F400

El efecto del pH en la capacidad de F400 por TMP se grafica en la Figura 7.13, y se nota que la capacidad de adsorción aumenta considerablemente incrementando el pH de 4 a 10. A una concentración de TMP en el equilibrio mayor a 80 mg/L, la capacidad aumenta levemente incrementando el pH de 7 a 10. A una concentración en el equilibrio de 100 mg/L, las capacidades de adsorción ( $Q_{100}$ ) son de 176, 318 y 342 mg/g a pH de 4, 7 y 10, respectivamente; es decir que, la capacidad a pH de 4 es casi dos veces menor que la capacidad a pH de 10.

El efecto del pH sobre la capacidad de adsorción se explica basándose en la distribución de carga superficial de F400 y el diagrama de especiación de la TMP. La TMP se encuentra únicamente como especies positivas a pH inferiores a 7.1 y el  $pH_{PCC}$  de F400 es de 9, resultando en la presencia de repulsión electrostática a pH inferiores a 7.1. A pH

mayores de 7.1, la TMP adquiere carga neutra y no ocurre repulsión electrostática. El incremento de la capacidad a pH de 10 se puede atribuir a interacciones hidrofóbicas entre el agua y la TMP que favorecen la acumulación de TMP sobre el F400.

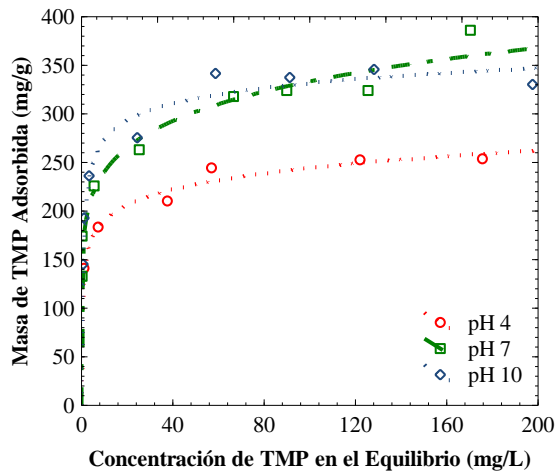


**Figura 7.13.** Efecto del pH sobre la capacidad de F400 para adsorber TMP a  $T = 25\text{ }^{\circ}\text{C}$  y  $I = 0.01\text{ N}$  (HCl/NaOH).

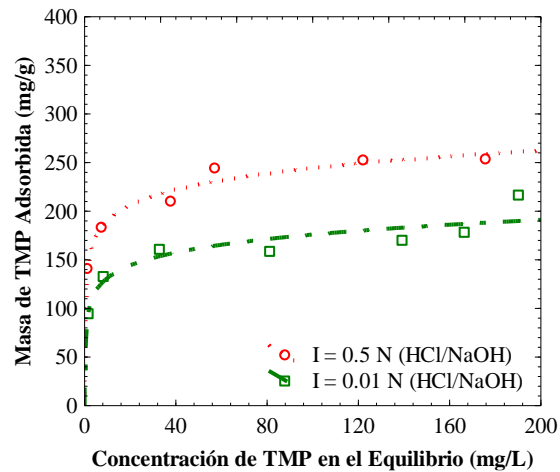
El efecto de las interacciones electrostáticas se analizó aumentando la fuerza iónica  $I$  de  $0.01\text{ N}$  a  $0.5\text{ N}$  (HCl/NaOH), y los resultados se presentan en la Figura 7.14. En esta figura se puede observar claramente que la fuerza iónica no afecta la capacidad de adsorción a pH de 7 y 10, confirmando que las interacciones electrostáticas no son importantes en este intervalo de pH. En la Figura 7.15 se muestra el efecto de la fuerza iónica en la capacidad de adsorción de F400 a  $\text{pH} = 4$ , y se nota claramente que la capacidad de adsorción aumento incrementando la fuerza iónica. Por ejemplo, a una concentración en el equilibrio de  $100\text{ mg/L}$ , la cantidad de TMP adsorbida ( $Q_{100}$ ) es de  $176$  y  $244\text{ mg/g}$  a  $I$  de  $0.01\text{ N}$  y  $0.5\text{ N}$ , respectivamente. Este aumento se debe a un efecto de apantallamiento como consecuencia de que los iones  $\text{Cl}^-$  que se adsorben en la superficie positiva de F400, balancean su carga negativa y disminuyen las repulsiones electrostáticas.

El efecto de la temperatura se analizó determinando las isotermas de adsorción a  $15$ ,  $25$  y  $35\text{ }^{\circ}\text{C}$  y este efecto se muestra en la Figura 7.16. Los resultados revelan que la capacidad

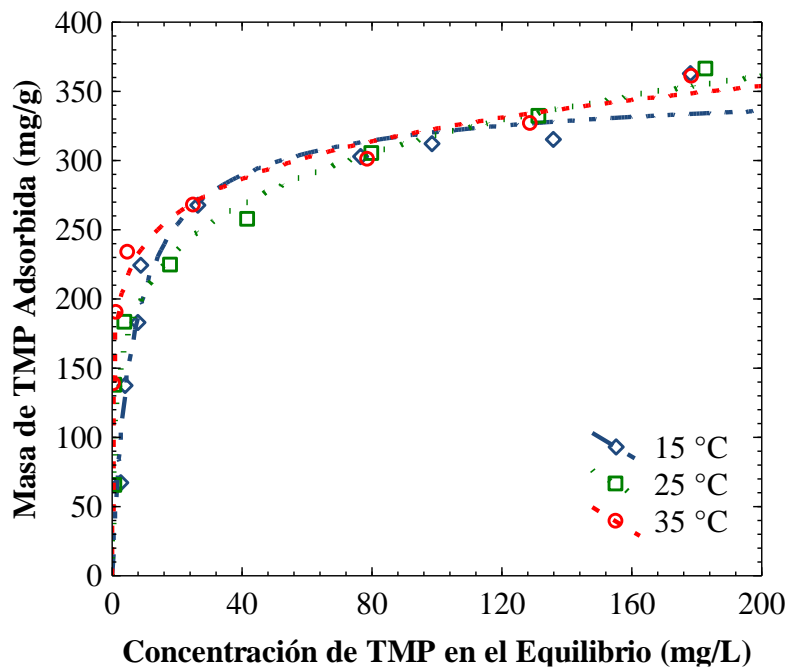
de adsorción permanece prácticamente constante variando la temperatura en el intervalo de 15 - 35 °C. Esto significa que la capacidad de adsorción no es función de la temperatura. Además, el nulo efecto de la temperatura en la capacidad permite asumir que las interacciones adsorbato-adsorbente, son predominantemente interacciones físicas y no químicas.



**Figura 7.14.** Efecto del pH sobre la capacidad de F400 para adsorber TMP a  $I = 0.5 \text{ N (HCl/NaOH)}$  y  $T = 25 \text{ °C}$ .



**Figura 7.15.** Efecto de la fuerza iónica sobre la capacidad de F400 para adsorber TMP a  $\text{pH} = 4$  y  $T = 25 \text{ °C}$ .

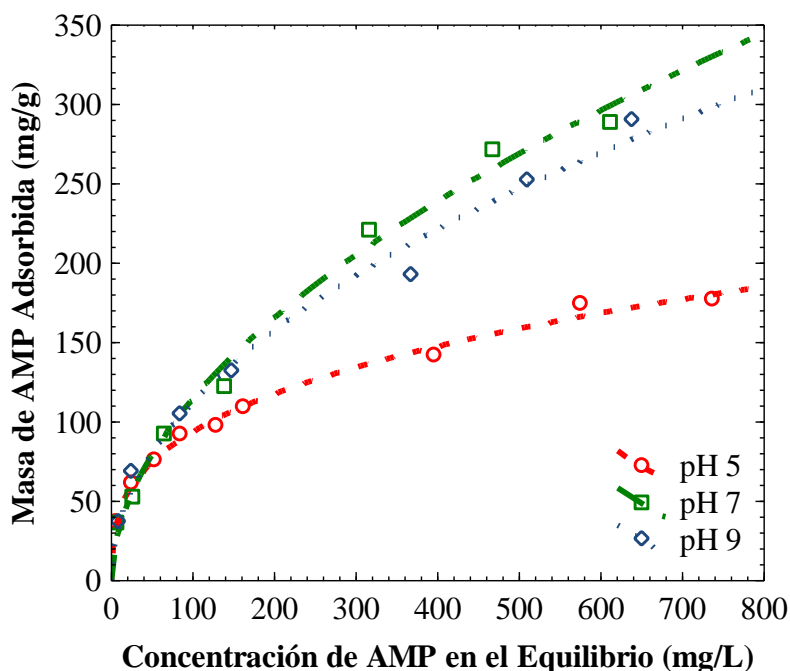


**Figura 7.16.** Efecto de la temperatura sobre la capacidad de F400 para adsorber TMP a  $\text{pH} = 7$  y  $I = 0.01 \text{ N (HCl/NaOH)}$ .

### 7.2.3 Adsorción Individual de Ampicilina Sobre el Carbón F400n

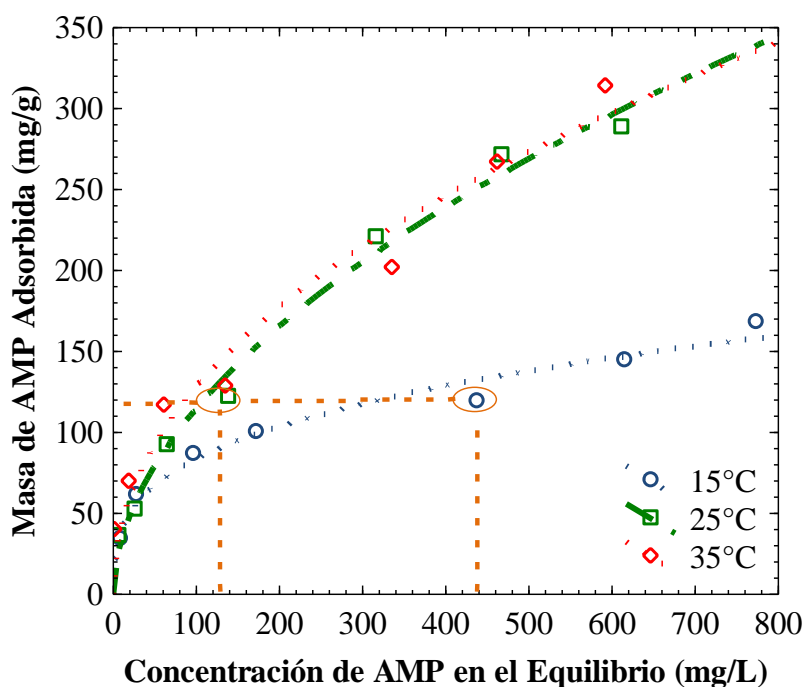
Como se muestra en la Figura 7.17, el pH influye en la capacidad de adsorción de F400n por AMP. A una concentración de AMP en el equilibrio de 550 mg/L, las capacidades de adsorción ( $Q_{550}$ ) son de 163, 283 y 258 para el pH de 5, 7 y 9, respectivamente. La capacidad de adsorción aumenta incrementando el pH de 5 a 7, y luego, disminuye levemente al elevar el pH de 7 a 9.

La tendencia de la capacidad de adsorción en función del pH pareciera ser anómalo; no obstante, se puede explicar usando el diagrama de especiación de TMP y la carga superficial del F400n. El  $pH_{PCC}$  de F400n es de 10, evidenciando que la superficie de F400n está cargada positivamente en el intervalo de pH de este estudio. Además, la AMP se encuentra en forma zwitteriónica a pH 5, aniónica a pH 9 y una contribución igual de ambas especies a pH 7.14. A pH 5 la especie zwitteriónica de la AMP propicia repulsión electrostática con la superficie de F400n. La repulsión desaparece parcialmente a pH de 7 y se transforma en atracción electrostática a pH de 9. La tendencia apunta a que la capacidad de adsorción aumentará proporcionalmente con el pH. Sin embargo, a pH 9 hay una ligera disminución de la capacidad de adsorción respecto pH 7, esto estriba en que la carga superficial positiva disminuye de 0.020 a 0.010 C/m<sup>2</sup> de pH 7 a 9, respectivamente.



**Figura 7.17.** Efecto del pH sobre la capacidad de F400n para adsorber AMP a  $T = 25\text{ }^{\circ}\text{C}$  y  $I = 0.01\text{ N}$  (HCl/NaOH).

El efecto de la temperatura sobre el sistema F400n-AMP se exhibe en la Figura 7.18 y se nota que la capacidad aumenta incrementando la temperatura de 15 a 25 °C, revelando que la adsorción es endotérmica. Mientras que la capacidad permanece esencialmente constante al aumentar la temperatura de 25 a 35 °C. Con el fin de obtener una mayor información se calculó el calor isostérico de adsorción ( $(\Delta H_{ads})_q$ ) entre dos puntos de las isotermas de adsorción de AMP sobre el carbón F400n a 15 y 25 °C, dando como resultado un calor isostérico de 82,353.01 J/mol. Un calor isostérico superior a 40,000 J/mol se relaciona directamente a adsorción química. Los resultados anteriores constatan que la adsorción de AMP es dominada por una combinación de interacciones  $\pi$ - $\pi$ , electrostáticas y químicas (quimisorción).

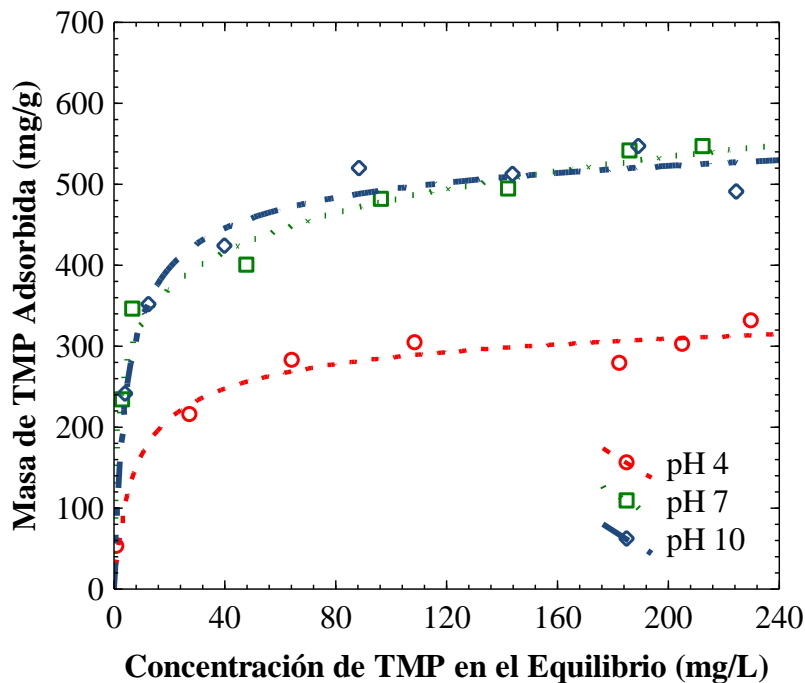


**Figura 7.18.** Efecto de la temperatura sobre la capacidad de F400n para adsorber AMP a  $\text{pH} = 7$  y  $I = 0.01 \text{ N}$  (HCl/NaOH).



#### 7.2.4 Adsorción Individual de Trimetoprima sobre la FCA

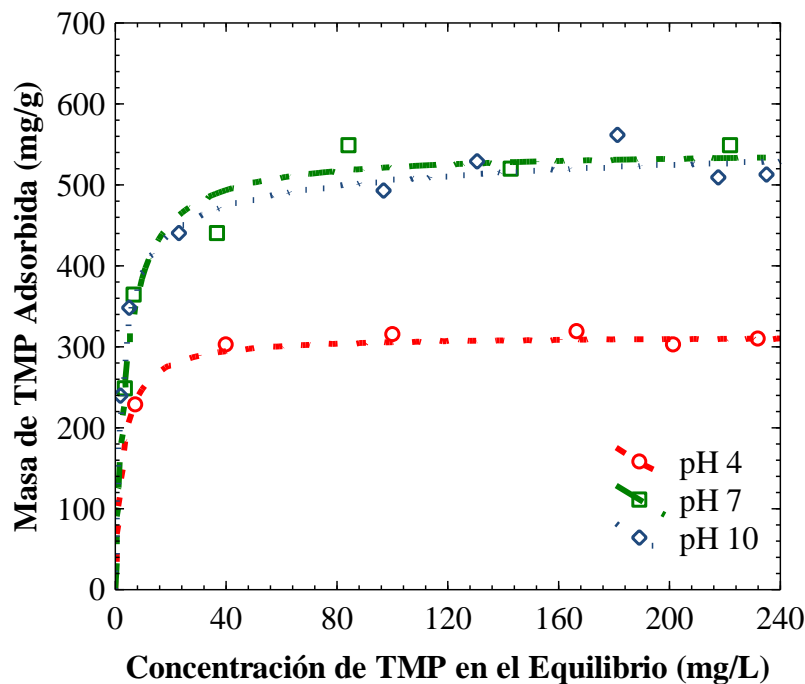
El pH juega un rol importante en la capacidad de FCA para adsorber TMP, como se muestra la Figura 7.19. Es evidente que la capacidad de adsorción se incrementa y permanece constante cuando el pH aumenta de 4 a 7 y de 7 a 10, respectivamente. A una concentración en el equilibrio de 200 mg/L, las capacidades de adsorción ( $Q_{200}$ ) son de 309, 534 y 522 mg/g para los pH de 4, 7 y 10, respectivamente. En otras palabras, la capacidad de adsorción a pH de 4 aumentó 1.72 y 1.69 veces a pH de 7 y 10, respectivamente. Este comportamiento se puede explicar con la distribución de carga superficial y la especiación de la TMP. La FCA tiene un  $pH_{PCC}$  de 4 y por esta razón, la superficie de FCA está cargada negativamente a pH mayores del  $pH_{PCC}$ . Por otra parte, la TMP tiene especies positivas a pH inferiores de 7.1, lo que resulta en un sistema poco interactivo a pH 4 y en atracción electrostática a pH superiores a 4, pero inferiores a 7.1. A pH mayores a 7.1 la TMP adquiere carga neutra y no hay atracción electrostática, pero sí interacciones hidrofóbicas. A un pH de 10, solamente existe la especie neutra de la TMP. A pesar de ello, se tiene casi la misma capacidad de adsorción que a pH 7, indicando que la contribución de la especie catiónica de la TMP es nula o equiparable a la de la especie neutra.



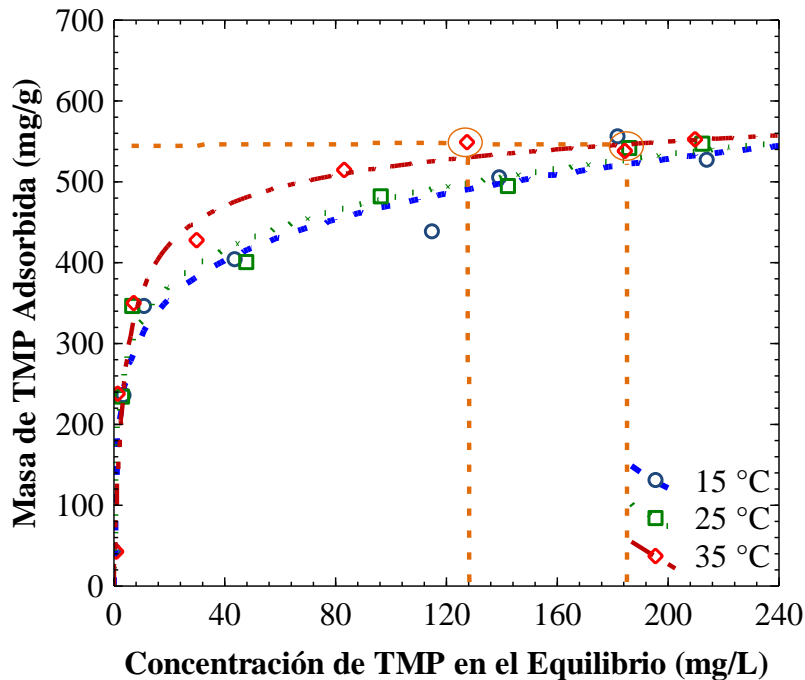
**Figura 7.19.** Efecto del pH sobre la capacidad de FCA para adsorber TMP a  $T = 25\text{ }^{\circ}\text{C}$  y  $I = 0.01\text{ N}$  (HCl/NaOH).

El efecto de las interacciones electrostáticas se estudió aumentando la fuerza iónica  $I$  de 0.01 N a 0.5 N, los resultados se exhiben en la Figura 7.20. Esta figura demuestra que la fuerza iónica no afecta significativamente a las capacidades de adsorción a ningún pH. A un pH de 4 y una concentración en el equilibrio de 200 mg/L, se tiene una capacidad de adsorción ( $Q_{200}$ ) de 309 mg/g tanto a fuerza iónica de 0.01 N como de 0.5 N. Este resultado corrobora que las interacciones electrostáticas no afectan y que la adsorción ocurre principalmente por interacciones  $\pi$ - $\pi$ .

Se analizó la influencia de la temperatura sobre la capacidad de adsorción en el sistema TMP-FCA y los resultados se presentan en la Figura 7.21. Se encontró que la tendencia de los isotermas de adsorción a 25 y 35 °C indica que la adsorción es endotérmica. Con el objetivo de conocer qué tipo de interacciones dominan el proceso, se calculó el calor isostérico de adsorción de 28,643 J/mol, indicativo de que las interacciones predominantes son de carácter físico (interacciones electrostáticas, hidrofóbicas y  $\pi$ - $\pi$ ) y no de carácter químico.



**Figura 7.20.** Efecto del pH sobre la capacidad de FCA para adsorber TMP a  $T = 25\text{ }^{\circ}\text{C}$ ,  $I = 0.5\text{ N}$  (HCl/NaOH).



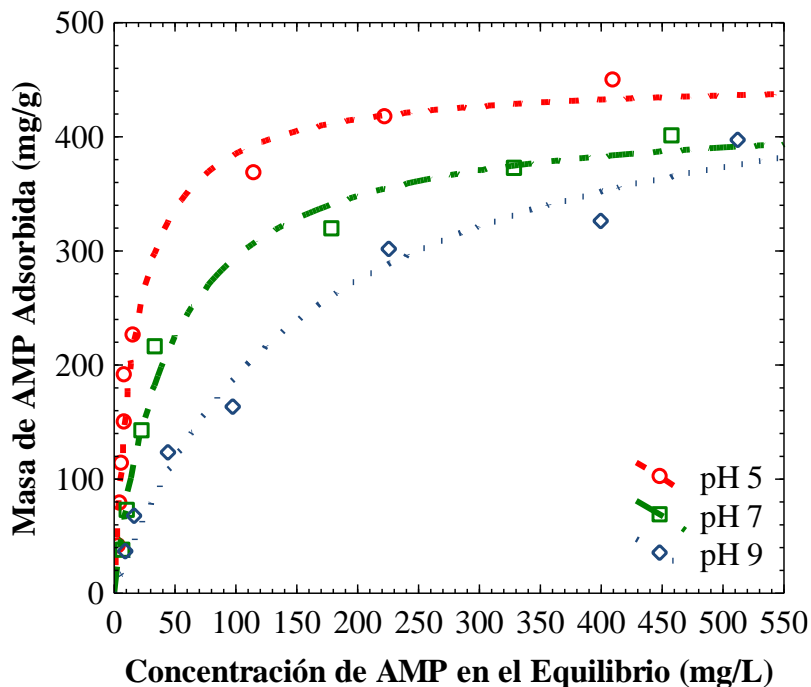
**Figura 7.21.** Efecto de la temperatura sobre la capacidad de FCA para adsorber TMP a  $\text{pH} = 7$  y  $I = 0.01 \text{ N}$  (HCl/NaOH).

### 7.2.5 Adsorción Individual de Ampicilina sobre la FCA

La capacidad de adsorción de FCA por AMP se incrementa considerablemente disminuyendo el pH de 9 a 5, como se observa en la Figura 7.22. A una concentración en el equilibrio de 400 mg/L, las capacidades de adsorción ( $Q_{400}$ ) son 432, 382 y 349 mg/g a los pH de 5, 7 y 9, respectivamente. Es decir que la capacidad de adsorción a pH 5 disminuyó 11 % y 19 % incrementando el pH a 7 y a 9, respectivamente.

El comportamiento de la capacidad de adsorción en función del pH tiene su explicación en la especiación de la molécula de AMP y la carga superficial de FCA. La FCA tiene un  $\text{pH}_{\text{PCC}}$  de 4; por tanto, la superficie de la misma adquiere una carga negativa en todo el intervalo de pH estudiado. Además, la AMP está en forma zwitteriónica a pH de 5, aniónica a pH de 9 y en pH de 7.14 están presentes ambas especies. A pH de 5 la especie zwitteriónica de la AMP propicia atracción electrostática con la superficie de FCA. La atracción electrostática se reduce incrementando el pH y aparece la especie aniónica de la AMP, tornándose en repulsión electrostática a pH superiores a 7.14. El comportamiento antes descrito es únicamente aplicable para concentraciones en el equilibrio inferiores 400 mg/L,

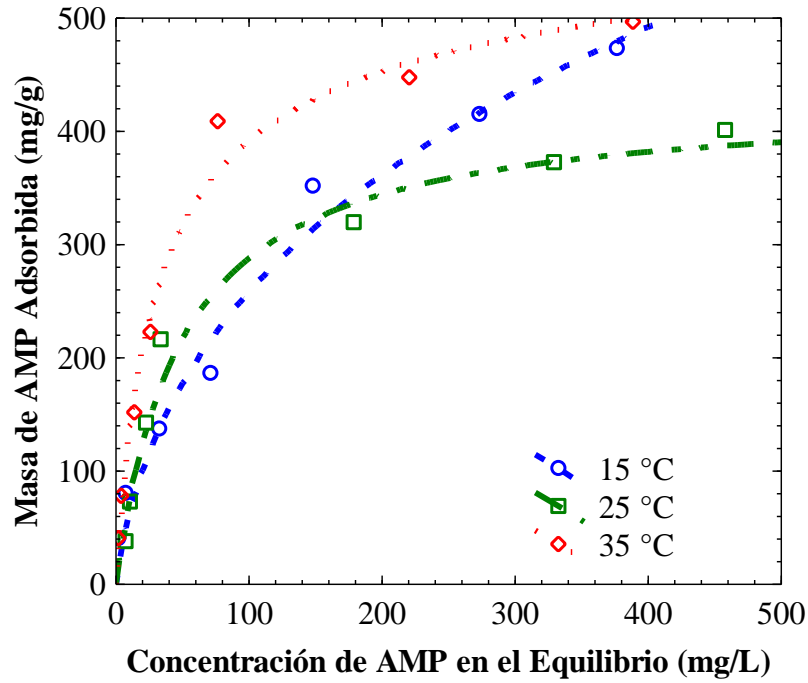
ya que, a concentraciones en el equilibrio superiores, la capacidad de adsorción parece tender a un mismo valor independientemente del pH.



**Figura 7.22.** Efecto del pH sobre la capacidad de FCA para adsorber AMP a  $T = 25\text{ }^{\circ}\text{C}$  y  $I = 0.01\text{ N}$  (HCl/NaOH).

La capacidad de adsorción de FCA por AMP no tiene una tendencia aparente con respecto a la temperatura en el intervalo de 15 a 35  $^{\circ}\text{C}$ , como se muestra en la Figura 7.23. El efecto de la temperatura es anómalo puesto que las isotermas de adsorción a diferentes temperaturas tienen cruces entre sí, lo que no permite clasificar al sistema como endotérmico, exotérmico o no interactivo. Además, es difícil de explicar esta clase de comportamientos con contundencia.

Los resultados anteriores, permiten elucidar que la adsorción de AMP sobre FCA es controlada por interacciones físicas (interacciones dispersivas  $\pi$ - $\pi$ , e interacciones electrostáticas) y químicas. Sin embargo, no queda claro que tipo de adsorción química es la que está ocurriendo.



**Figura 7.23.** Efecto de la temperatura sobre la capacidad de FCA para adsorber AMP a  $\text{pH} = 7$  y  $I = 0.01 \text{ N}$  (HCl/NaOH).

### 7.3 Mecanismos de Adsorción

En la sección 7.1 se reportan las propiedades fisicoquímicas y de textura de los adsorbentes; mientras que, en la sección 7.2 se analizaron los efectos de los parámetros de operación (pH, temperatura y fuerza iónica) sobre el equilibrio de adsorción. A continuación, se presentan los mecanismos respectivos para cada sistema, derivados a partir de las secciones antes mencionadas. Cabe mencionar que todos los sistemas incluyen dentro de su mecanismo, la contribución de interacciones  $\pi$ - $\pi$ , al tener tanto los CAs como los adsorbatos, anillos aromáticos.

La adsorción de TMP sobre el carbón F400, tiene una alta dependencia del pH como consecuencia de la especiación de la TMP y la carga superficial de F400. Se presentan interacciones electrostáticas repulsivas a pH inferiores a 7.1, e interacciones hidrofóbicas a pH superiores al mismo. Si hay presencia de iones en solución, las interacciones electrostáticas repulsivas merman su fuerza, incrementando ligeramente la capacidad de adsorción a pH inferiores a 7.1. Además, la temperatura no tiene un efecto representativo.

Para el sistema de adsorción AMP-F400n, la capacidad de adsorción tiene fuertes disminuciones a temperaturas inferiores a 25 °C. Esto es debido a reacciones de quimisorción que se ven desfavorecidas a temperaturas inferiores. En lo que respecta al pH, existen interacciones electrostáticas repulsivas a pH inferiores a 7.14 e interacciones electrostáticas atractivas a pH superiores.

El sistema de adsorción TMP-FCA tiene ligeros incrementos en la capacidad de adsorción a temperaturas superiores a 25 °C. Por otra parte, a pH inferiores a 7.1 pero superiores a 3.2, hay una combinación de interacciones electrostáticas atractivas e hidrofóbicas, que son influenciadas nula o compensatoriamente entre sí, por el aumento de la fuerza iónica. El aumento de la fuerza iónica mejora la afinidad adsorbato-adsorbente en concentraciones en el equilibrio inferiores a 15 mg/L.

La adsorción de AMP sobre FCA presenta interacciones electrostáticas atractivas a pH superiores a 4. Además, por medio del efecto de la temperatura, se corroboró que el proceso tiene una contribución por parte de reacciones de quimisorción; no obstante, no queda claro que tipo de reacciones de quimisorción están ocurriendo.

La presencia de los fármacos adsorbidos se corroboró al realizar fisisorciones de N<sub>2</sub> a los adsorbentes saturados. Las isothermas de adsorción-desorción de N<sub>2</sub> resultantes se

grafican en la Figura 7.24 y las distribuciones de tamaño de poro en la Figura 7.25. El cálculo de las propiedades de textura de los adsorbentes saturados se efectuó con el método BET, el modelo de Dubinin-Radushkevich y el modelo t-plot. Sin embargo, únicamente se determinaron el área específica, área de microporos y área externa, puesto que el resto de las propiedades de textura carecerían de significado físico. Las propiedades de textura de los adsorbentes saturados se encuentran en la Tabla 7.3.

**Tabla 7.3.** Propiedades de textura de los adsorbentes después del proceso de adsorción.

<i>Material Adsorbente</i>	$S_{BET} (m^2/g)$	$S_{micDR} (m^2/g)$	$S_{ext} (m^2/g)$
<i>F400-TMP</i>	116	37	31.8
<i>F400n-AMP</i>	283	209.6	53.3
<i>FCA-TMP</i>	112	51	14.8
<i>FCA-AMP</i>	0.7	-----	-----

----- No se determinaron.

Las isothermas de adsorción-desorción de  $N_2$  de los CAs en su estado inicial se clasificaron como isothermas tipo Ib, y para el F400n con lazo de histéresis H4.

Después de la adsorción de los respectivos fármacos, la isoterma de adsorción-desorción de FCA saturada con TMP disminuyó su tamaño respecto a la isoterma del material sin saturar. Además, se mantiene su clasificación como isoterma Ib. Por otra parte, la isoterma de adsorción-desorción de  $N_2$  de F400 saturado con TMP si cambió su forma y pasó a ser una isoterma tipo II con un lazo de histéresis tipo H3. Además, la TMP ocupó 90 % del área específica, 94 % del área de microporos y 80 % del área externa para ambos casos.

Para el sistema AMP-FCA la isoterma de adsorción-desorción de  $N_2$  pasó a ser tipo III con un lazo de histéresis tipo H3, característicos de materiales macroporosos. La AMP ocupó el 100 % del área disponible.

La isoterma de adsorción-desorción de  $N_2$  del carbón F400n saturado con AMP no cambió su clasificación respecto al material sin saturar. La AMP saturó el 63 % del área específica.

La distribución de tamaño de poros de los adsorbente saturados (Figura 7.25), da como resultado que los poros que no lograron saturarse en su totalidad son los microporos

anchos y mesoporos estrechos. Por esta misma razón, el carbón F400n saturado con AMP tiene un área de 209.6 m<sup>2</sup>/g sin saturar.

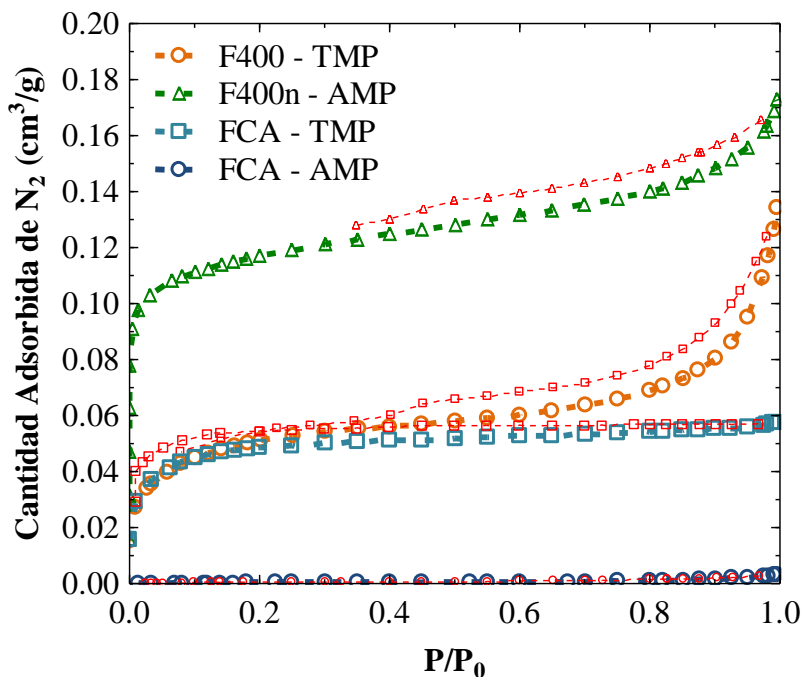


Figura 7.24. Isothermas de adsorción-desorción de N<sub>2</sub> de los CAs saturados.

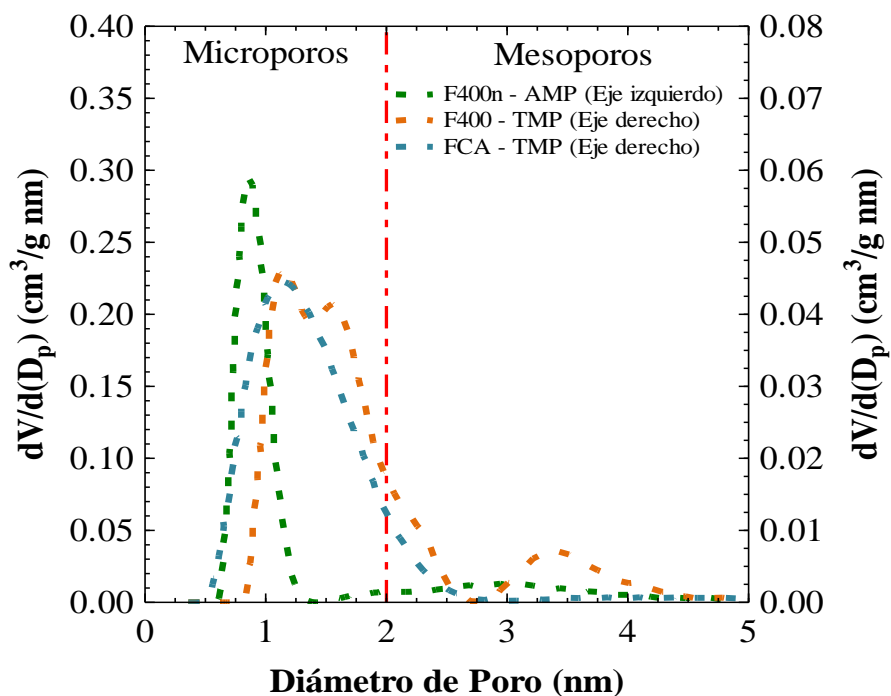
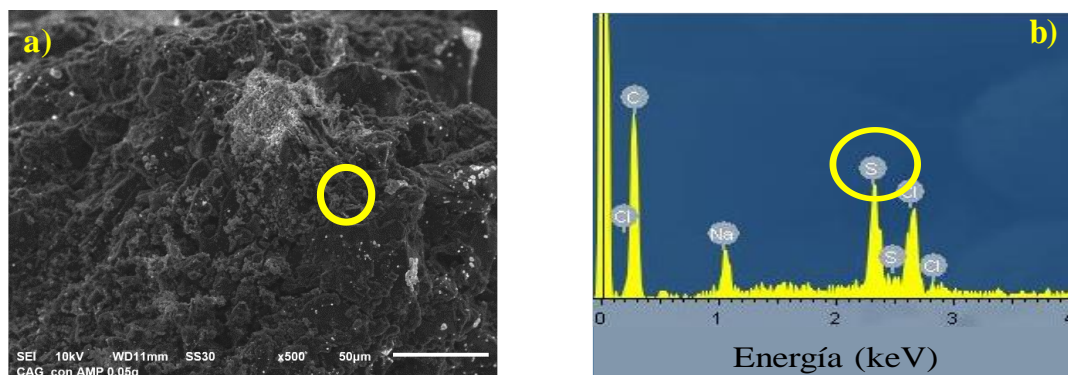


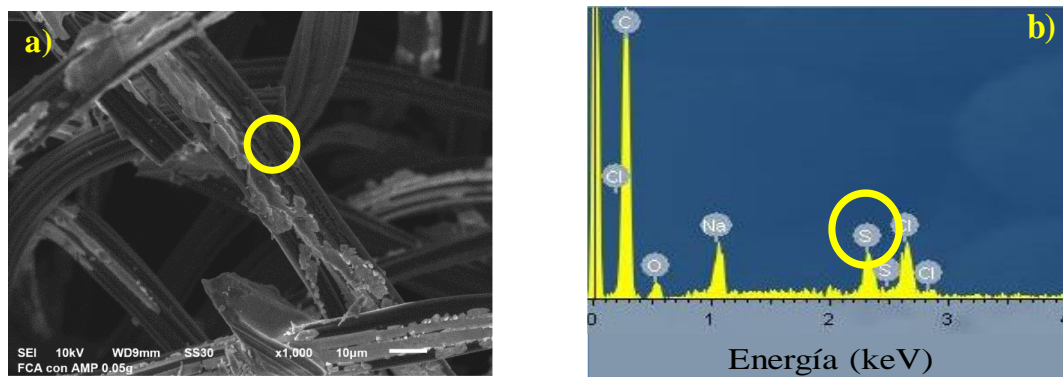
Figura 7.25. Distribución de tamaño de poro de los CAs saturados. Obtenidos por DFT.



Específicamente para los sistemas de AMP con el carbón F400n y FCA, se hicieron análisis elementales con el fármaco cargado. Mediante la técnica de microscopía electrónica de barrido (SEM) como se ilustra en las Figuras 7.26 y 7.27, se logró la detección de los átomos de Azufre de la molécula de AMP. Esto permitió constatar que la AMP se encontraba también adsorbida en la superficie del adsorbente.



**Figura 7.26.** Análisis elemental del carbón F400n después de adsorber AMP. a) Punto de análisis, b) Elementos en la superficie del carbón F400n.



**Figura 7.27.** Análisis elemental de la FCA después de adsorber AMP. a) Punto de análisis, b) Elementos en la superficie de la FCA.

### 7.4 Equilibrio de Adsorción Binario

Los experimentos de adsorción binario de AMP y Cd(II) se realizaron a pH = 5, T = 25 °C y una fuerza iónica I de 0.01 N (HCl/NaOH). A este pH, el Cd(II) se encuentra como catión ( $\text{Cd}^{2+}$ ). La interpretación de los datos experimentales del equilibrio de adsorción multicomponente de AMP y Cd(II) sobre el carbón F400n y la FCA se efectuó usando los modelos de equilibrio multicomponente de Freundlich, Langmuir y Redlich-Peterson. Se consideró que el modelo que mejor ajustó los datos experimentales es aquel que presentó el menor porcentaje de desviación y cuyos parámetros de ajuste tienen significado físico. La Tabla 7.4 muestra los parámetros de los modelos de isothermas de adsorción binaria, y en las Figuras 7.28 y 7.29 se comparan las masas adsorbidas de AMP y Cd(II) experimentales y predichas por los modelos de adsorción binaria.

**Tabla 7.4.** Parámetros para la adsorción competitiva de AMP y Cd(II) sobre el carbón F400n y la FCA.

Modelo	Parámetros Totales	Parámetros de Interacción	FCA-AMP-Cd(II)		F400n-AMP-Cd(II)	
			Valores de los Parámetros de Interacción	% $\bar{D}$	Valores de los Parámetros de Interacción	% $\bar{D}$
NMLM	4	0	-----	29.1	-----	116
MLM $\eta_i$	6	2	$\eta_{\text{AMP}} = 0.915$	29.3	$\eta_{\text{AMP}} = 0.604$	51.5
			$\eta_{\text{Cd}} = 1.265$		$\eta_{\text{Cd}} = 5.541$	
			$q_{\text{max}} = 1.216$		$q_{\text{max}} = 0.414$	
MLE	3	0	$K_{\text{eAMP}} = 13.23$	33.2	$K_{\text{eAMP}} = 13.91$	50.2
			$K_{\text{eCd}} = 0.1380$		$K_{\text{eCd}} = 0.0319$	
			$a_{\text{AMP-AMP}} = 1$		$a_{\text{AMP-AMP}} = 1$	
SRS	8	4	$a_{\text{AMP-Cd}} = 0.0165$	25.8	$a_{\text{AMP-Cd}} = 0$	43.5
			$a_{\text{Cd-Cd}} = 1$		$a_{\text{Cd-Cd}} = 1$	
			$a_{\text{Cd-AMP}} = 0$		$a_{\text{Cd-AMP}} = 2100950$	
			$x_{\text{AMP}} = 1.622$		$x_{\text{AMP}} = 0.0384$	
FME	10	6	$y_{\text{AMP}} = 0.0016$	24.2	$y_{\text{AMP}} = 0$	46.1
			$z_{\text{AMP}} = 0.781$		$z_{\text{AMP}} = 1$	
			$x_{\text{Cd}} = 1.033$		$x_{\text{Cd}} = 0.872$	
			$y_{\text{Cd}} = 0.582$		$y_{\text{Cd}} = 9.259$	
			$z_{\text{Cd}} = 6.522$		$z_{\text{Cd}} = 0.057$	
NMRPM	6	0	-----	29.1	-----	63.1
MRPM $\eta_i$	8	2	$\eta_{\text{AMP}} = 0.900$	29.8	$\eta_{\text{AMP}} = 0.599$	54.7
			$\eta_{\text{Cd}} = 1.168$		$\eta_{\text{Cd}} = 4.948$	

-----No hay parámetros de ajuste para el modelo.

En el sistema F400n-AMP-Cd(II), los resultados del ajuste muestran de manera generalizada porcentajes de desviación superiores al 40 %. Esto revela que los datos experimentales para la adsorción binaria de AMP-Cd(II) no se interpretan con ninguno de los modelos de isothermas de adsorción binaria. Además, los valores de los parámetros de interacción son extremadamente grandes y/o pequeños, y carecen de significado físico.

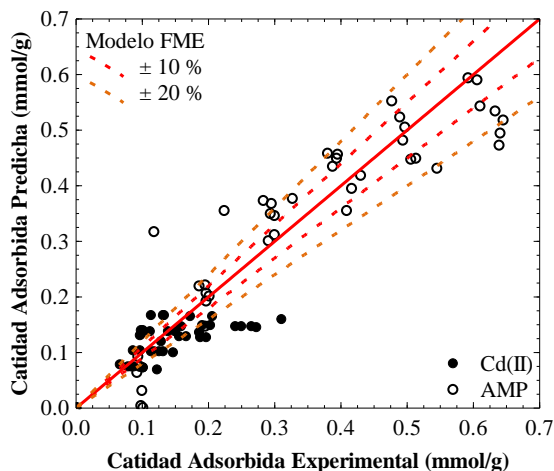
Los porcentajes de desviación para el sistema FCA-AMP-Cd(II) variaron entre 24 y 33 %, lo que indica un ajuste satisfactorio por parte de todos los modelos de adsorción binaria. Los modelos NMLM,  $MLM\eta_i$  y MLE tienen porcentajes de desviación de 29.1, 29.3 y 33.2 %, respectivamente. Los modelos NMLM y MLE ajustaron bien los datos experimentales, pero no cuentan con parámetros de interacción que proporcionen información sobre las interacciones de los adsorbatos. Por esta razón, no se consideraron apropiados.

El modelo  $MLM\eta_i$  tiene dos parámetros de interacción que muestran la magnitud de interacciones de AMP sobre la adsorción de Cd(II) y viceversa. El factor de interacción  $\eta_{AMP}$  tiene un valor de 0.9151, y el factor  $\eta_{Cd}$  un valor 1.2654, demostrando que la interacción del Cd(II) es más importante que la de AMP.

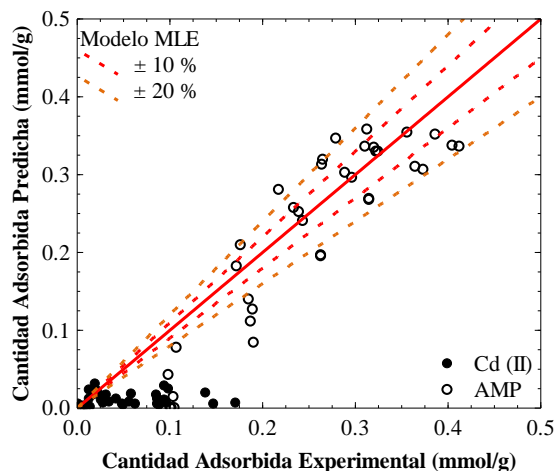
Los ajustes de los modelos de equilibrio multicomponente NMRPM y  $MRPM\eta_i$  derivados de la isoterma de Redlich-Peterson, presentan porcentajes de desviación de 29.1 y 29.8 %. La interpretación por los modelos NMRPM y  $MRPM\eta_i$  es análoga a de los modelos NMLM y  $MLM\eta_i$ , respectivamente.

Los modelos SRS y FME que derivan del modelo de equilibrio de Freundlich, tienen los menores porcentajes de desviación con 25.8 y 24.2 %, respectivamente. El modelo de SRS tiene cuatro parámetros de interacción, dos de los cuales tienen un valor de 1 ( $a_{Cd-Cd}$  y  $a_{AMP-AMP}$ ) y representan la competencia entre moléculas de una misma especie por los sitios activos. Por otra parte, los dos parámetros restantes representan la competencia de una especie “i” en la adsorción de una especie “j”. El parámetro de interacción  $a_{AMP-Cd}$  tiene un valor de 0.0165 y el parámetro  $a_{Cd-AMP}$  tiene un valor de 0. Un valor de 0 en este último parámetro, indica que la AMP no afecta al equilibrio del Cd(II). No obstante, el valor del parámetro  $a_{AMP-Cd}$  que es muy grande en comparación con el parámetro  $a_{Cd-AMP}$ , indica antagonismo por parte del Cd(II) hacia la capacidad de adsorción de la AMP.

El modelo FME tiene el menor porcentaje de desviación de todos los modelos, pero es el que tiene el mayor número de parámetros tanto individuales como de interacción.



**Figura 7.28.** Comparación entre la  $q_{cal}$  y  $q_{exp}$  para modelo FME para el sistema FCA-AMP-Cd(II).



**Figura 7.29.** Comparación entre la  $q_{cal}$  y  $q_{exp}$  para el modelo MLE para el sistema F400n-AMP-Cd(II).

#### 7.4.1 Superficie de Adsorción de Ampicilina y Cadmio (II) sobre la FCA

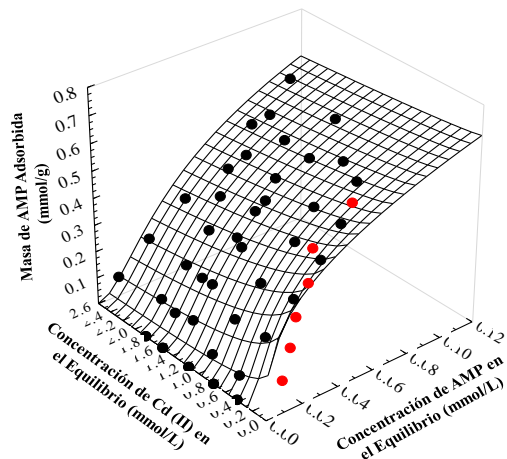
Los datos experimentales del equilibrio de adsorción binario de AMP y Cd(II) sobre FCA, se graficaron en forma tridimensional en las Figuras 7.30 y 7.32. Las superficies de adsorción se calcularon con los modelos de adsorción binaria.

En la Figura 7.30 se presentan los datos experimentales de la masa adsorbida de AMP sobre FCA contra las concentraciones en equilibrio de AMP y Cd(II). La superficie de adsorción se evaluó con el modelo de FME. Se observa que la máxima capacidad de adsorción ocurre cuando solo se encuentra AMP. Por otra parte, al incrementarse la concentración de Cd(II), hay una disminución de la capacidad de adsorción de la AMP.

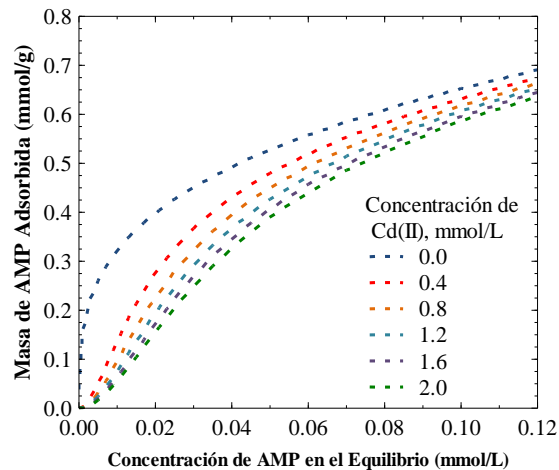
En la Figura 7.31 se grafica la masa de AMP adsorbida variando la concentración de AMP y a diferentes isoconcentraciones de Cd(II). A una concentración en el equilibrio de AMP de 0.02 mmol/L, y aumentando la concentración en el equilibrio de Cd(II) de 0.4 hasta 2 mmol/L, en incrementos de 0.4 mmol/L, la capacidad de adsorción de AMP es 0.27, 0.22, 0.19, 0.17 y 0.15 mmol/g, respectivamente. Confirmando la afinidad del Cd(II) hacia la FCA y un efecto antagónico del Cd(II) hacia la adsorción de AMP.

Es importante resaltar, que estudios realizados por Valdez-García (2019), encontraron que la adsorción de Cd(II) sobre la FCA, es consecuencia de procesos de quimisorción del Cd(II) en sitios ácidos y por interacciones  $\pi$ -catión. De igual manera, la capacidad de

adsorción de AMP puede ocurrir en sitios ácidos, por lo que no es raro que exista antagonismo por parte del Cd(II).

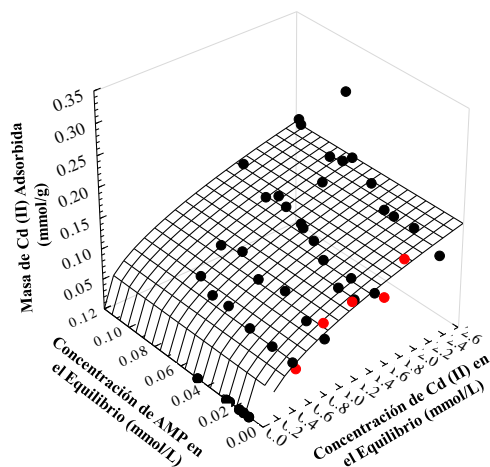


**Figura 7.30.** Superficie de adsorción de  $q_{AMP}$  sobre la FCA a concentraciones de AMP y Cd(II) a pH = 5, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).

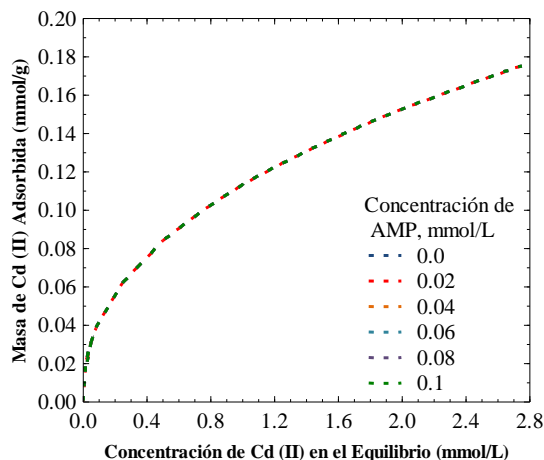


**Figura 7.31.** Masa de AMP adsorbida sobre la FCA a diferentes isoconcentraciones de Cd(II) a pH = 5, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).

En la Figura 7.32 se pueden apreciar los datos experimentales de la masa de Cd(II) adsorbido sobre la FCA a diferentes concentraciones de AMP y Cd(II). La superficie de adsorción se representa por el modelo FME. Esta superficie revela que independientemente de la concentración de AMP en solución, la capacidad de adsorción de Cd(II) permanece invariante. Este resultado se puede corroborar también con ayuda de la Figura 7.33, en la cual se observa que la cantidad de Cd(II) adsorbido permanece constante variando las isoconcentraciones de AMP.



**Figura 7.32.** Superficie de adsorción de  $q_{Cd}$  sobre la FCA a concentraciones de AMP y Cd(II) a pH = 5, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).



**Figura 7.33.** Masa de Cd(II) adsorbido sobre la FCA a diferentes isoconcentraciones de AMP a pH = 5, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).

#### 7.4.2 Superficie de Adsorción de Ampicilina y Cadmio (II) Sobre el Carbón F400n

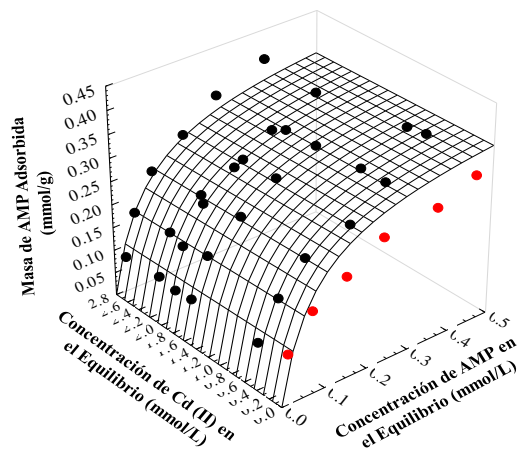
Los datos experimentales del equilibrio de adsorción binaria de AMP y Cd(II) sobre F400n, se graficaron en forma tridimensional en las Figuras 7.34 y 7.36. Las superficies de adsorción se evaluaron con el modelo MLE.

En las Figuras 7.34 y 7.35, se puede apreciar que la capacidad de adsorción de F400n por AMP no varía aumentando la concentración de Cd(II), indicando que la adsorción de Cd(II) no es interactiva. Además, la capacidad de F400n para adsorber Cd(II) es mucho menor que para AMP, como se observa en las Figuras 7.34 y 7.36, y por eso, no afecta la presencia de Cd(II).

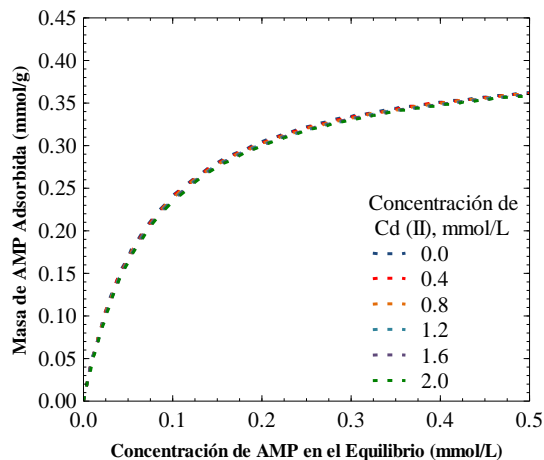
Las bajas capacidades de F400n para adsorber Cd(II) en los experimentos de adsorción individual y binaria, se atribuye a la poca disponibilidad de sitios ácidos para la adsorción. Por lo tanto, la adsorción de AMP sobre F400n no depende de la concentración del Cd(II) y la adsorción binaria de AMP y Cd(II) es no interactiva con respecto al Cd(II).

La capacidad de F400n para adsorber Cd(II) en presencia de AMP se ilustra en la Figura 7.36 y se nota que la presencia de AMP afecta levemente la masa de Cd(II) adsorbido. En la Figura 7.37 se muestra que la masa de Cd(II) adsorbido decrece aumentando la

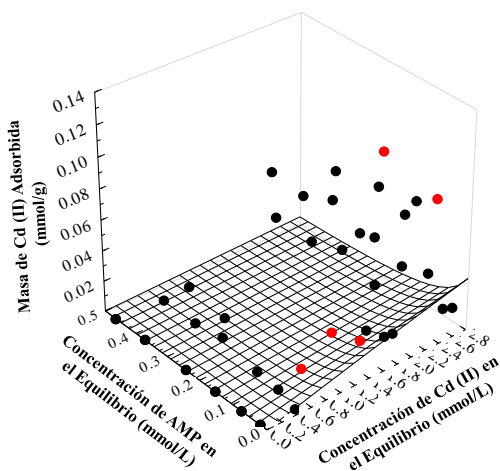
concentración de AMP. Esto significa que la presencia de AMP exhibe un efecto antagónico contra la adsorción de Cd(II).



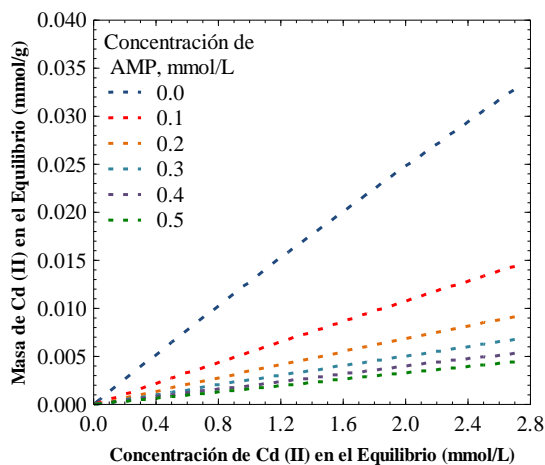
**Figura 7.34.** Superficie de adsorción de  $q_{AMP}$  sobre F400n a concentraciones de AMP y Cd(II) sobre el carbón F400n a pH = 5, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).



**Figura 7.35.** Masa de AMP adsorbida en F400n a diferentes isoconcentraciones de Cd(II) a pH = 5, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).



**Figura 7.36.** Superficie de adsorción de  $q_{Cd}$  sobre F400n a concentraciones de AMP y Cd(II) a pH = 5, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).



**Figura 7.37.** Masa de Cd(II) adsorbido sobre F400n a diferentes isoconcentraciones de AMP a pH = 5, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).



### ***7.5 Velocidad de Adsorción de Ampicilina y Trimetoprima Sobre los Carbones F400, F400n y la FCA***

Las curvas experimentales de decaimiento de la concentración de AMP y TMP sobre la FCA muestran que el equilibrio de adsorción se alcanza entre 30 y 80 minutos, respectivamente. Por otro lado, el equilibrio de AMP sobre el carbón F400n se logra a 3500 minutos. La diferencia entre los tiempos de equilibrio de la FCA y el carbón F400n estriba en que el F400n es un carbón granular con tamaño de partícula de 0.22 mm, mientras que la FCA está formada por filamentos de diámetro de 0.01 mm. Esto implica que el camino de difusión en el F400n sea 22 veces más grande, propiciando que el transporte intraparticular sea mucho más lento en los carbones granulares.

Las variables de operación en las cinéticas de adsorción fueron la concentración inicial del fármaco, masa del adsorbente, volumen de la solución y velocidad de agitación o flujo volumétrico, según el caso.

Los parámetros de transporte de masa y las condiciones de operación se designaron de la forma siguiente. El transporte externo optimizado se denominó  $(k_L)_p$ , cm/s; la difusividad en el volumen del poro optimizada como  $(D_{ep})_p$ ,  $\text{cm}^2/\text{s}$ ; el flujo volumétrico como  $Q$ ,  $\text{cm}^3/\text{s}$ ; la concentración inicial y en el equilibrio de las cinéticas como  $C_{A0}$  y  $C_{Ae}$ , respectivamente, mg/L; la capacidad de adsorción en el equilibrio como  $q_e$ , mg/g; y la tortuosidad asumiendo que no hay restricción como  $\tau_s$ .

En el Apéndice D, se encuentran las tablas de los datos experimentales de las curvas de decaimiento de la concentración de todos los sistemas. Las tablas incluyen el nombre del experimento, la absorbancia o área de pico, factores de dilución, concentraciones en función del tiempo, tiempo, así como la curva de calibración utilizada para cuantificar cada experimento. Las condiciones experimentales, las propiedades de transporte optimizadas y los porcentajes de desviación se encuentran especificadas para cada sistema de adsorción en las Tablas 7.5, 7.6 y 7.8.

#### ***7.5.1 Cálculo de los Parámetros de Transferencia de Masa***

Debido a que los parámetros de transporte de masa, al igual que las propiedades fisicoquímicas tanto del adsorbente como del adsorbato, tienden a variar en función de la temperatura y el pH, es importante controlar estas variables. Por ello, todos los experimentos de decaimiento de la concentración se llevaron a cabo a una temperatura de 25 °C y pH = 7.



Los modelos difusionales (Ecuaciones 2.51 - 2.88) se resolvieron numéricamente usando un software para resolver ecuaciones diferenciales por elemento finito y los parámetros de transporte de masa se calcularon por el método de mínimos cuadrados de la ecuación (7.1).

Los ajustes se fundamentaron en análisis de sensibilidad de los parámetros de transporte de masa ( $N_{sh}$ ,  $\chi_1$  y  $\chi_2$ ). Cuyo objetivo fue determinar el mecanismo de transporte dominante, ya fuese, transporte externo, difusión superficial, difusividad en el volumen del poro o una combinación de los tres mecanismos anteriores. Una vez determinado el/los mecanismos dominantes, se simplificó el modelo general y se procedió a realizar los ajustes con la misma simplificación a todas las curvas de decaimiento del mismo sistema. El criterio utilizado para determinar el error entre los valores predichos y experimentales por el modelo es el porcentaje de desviación promedio, que se presenta en la ecuación (7.2).

$$\text{Función Objetivo} = \sum_{\theta=1}^{\theta=n} (\phi_{Aexp,\theta} - \phi_{Acal,\theta})^2 \quad (7.1)$$

$$\% \bar{D} = \left( \frac{1}{n} \sum_{\theta=1}^{\theta=n} \left| \frac{\phi_{Aexp,\theta} - \phi_{Acal,\theta}}{\phi_{Aexp,\theta}} \right| \right) \times 100 \% \quad (7.2)$$

Donde  $\phi_{Aexp,\theta}$  es el valor experimental de la concentración adimensional en el tiempo adimensional  $\theta$ ;  $\phi_{Acal,\theta}$  es el valor predicho de la concentración adimensional en el tiempo adimensional  $\theta$ .

El coeficiente de difusividad molecular tanto de la AMP como de la TMP, se estimaron mediante la correlación para soluciones diluidas de Wilke-Chang, representada por la ecuación (7.3):

$$D_{AB} = \frac{7.4 \times 10^{-8} (\phi M_B)^{\frac{1}{2}} T}{\eta_B V_A^{0.6}} \quad (7.3)$$

Donde  $D_{AB}$  es la difusividad molecular del componente A en el solvente B,  $\text{cm}^2/\text{s}$ ;  $M_B$  es el peso molecular del solvente,  $\text{g/mol}$ ; T es la temperatura,  $\text{K}$ ;  $\eta_B$  es la viscosidad del solvente,  $\text{cp}$ ;  $V_A$  es el volumen molar del compuesto orgánico en su punto normal de ebullición estimado por la correlación de Le Bas,  $\text{cm}^3/\text{mol}$ ;  $\phi$  es el parámetro adimensional de disociación del solvente, cuyo valor es 2.26 para el agua. Los valores de las difusividades moleculares a  $25^\circ\text{C}$  de AMP y TMP son  $4.377 \times 10^{-6}$  y  $4.718 \times 10^{-6} \text{ cm}^2/\text{s}$  respectivamente.

Los coeficientes de transporte externo de masa ( $k_L$ ) se estimaron por el método propuesto por Furusawa y Smith (1973). El método de Furusawa y Smith se fundamenta en que, a tiempos próximos a cero ( $t \rightarrow 0$ ), el transporte global de masa es predominantemente controlado por el transporte externo de masa ( $C_A \rightarrow C_{A0}$ ,  $C_{Ar} \rightarrow 0$ ), por lo que el coeficiente  $k_L$  puede evaluarse por la siguiente ecuación:

$$\left[ \frac{d \left( \frac{C_A}{C_{A0}} \right)}{dt} \right]_{t=0} = \left( \frac{d\phi_A}{dt} \right)_{t=0} = \frac{-mSk_L}{V} \quad (7.4)$$

Los valores de  $k_L$  se obtuvieron utilizando los primeros 4 o 5 puntos de cada experimento de decaimiento de la concentración, independientemente del material adsorbente utilizado. No obstante, los primeros 5 puntos para los experimentos con FCA corresponden al intervalo de tiempo de 0 - 7 minutos; mientras que, para los experimentos con el carbón F400n corresponden al intervalo de tiempo de 0 - 120 minutos.

Las áreas externas por unidad de masa ( $S$ ) de los materiales adsorbentes se calcularon considerando que la geometría de la FCA y el carbón F400n, consistían en cilindros y esferas, respectivamente. Las expresiones correspondientes para cada geometría son las siguientes:

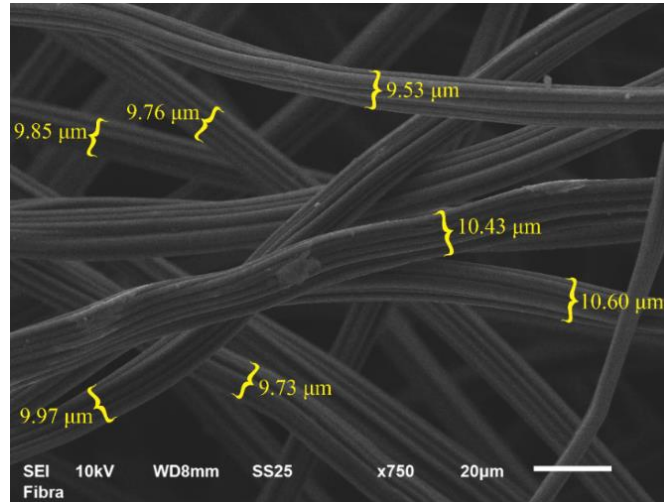
$$\text{Geometría Cilíndrica} \quad S = \frac{S_{extc}}{\rho_p v_c} = \frac{\pi d_f L}{\frac{d_f^2}{4} \pi L \rho_p} = \frac{4}{d_f \rho_p} \quad (7.5)$$

$$\text{Geometría Esférica} \quad S = \frac{S_{exte}}{\rho_p v_e} = \frac{4\pi R_e^2}{\frac{4}{3} \pi R_e^3 \rho_p} = \frac{3}{R_e \rho_p} \quad (7.6)$$

Donde  $S_{extc}$  es el área externa de una fibra de carbón activado,  $\text{cm}^2$ ;  $v_c$  es el volumen de una fibra de carbón activado,  $\text{cm}^3$ ;  $d_f$  es el diámetro de la fibrilla,  $\text{cm}$ ;  $L$  es la longitud de una fibra de carbón activado,  $\text{cm}$ ;  $S_{exte}$  es el área externa de una partícula de carbón activado,  $\text{cm}^2$ ;  $v_e$  es el volumen de una partícula de carbón activado,  $\text{cm}^3$ ;  $R_e$  es el radio de una partícula de carbón activado,  $\text{cm}$ .

Las densidades de partícula ( $\rho_p$ ) se calcularon a partir de los resultados de picnometría de Helio. El diámetro promedio de la FCA,  $d_f$ , se determinó midiendo los diámetros de varias fibras en la fotomicrografía que se muestra en la Figura 7.38, y el diámetro promedio aritmético fue de aproximadamente 0.001  $\text{cm}$ .

Por otro lado, el  $R_e$  se estimó utilizando el promedio de apertura de las mallas entre las que se tamizó el carbón, en este caso se utilizaron las mallas 30 y 50, y  $R_e$  es de 0.0221 cm. El área externa por unidad de área de la FCA es de 4228.9 cm<sup>2</sup>/g, y para el carbón F400n es de 105.1 cm<sup>2</sup>/g.



**Figura 7.38.** Fotomicrografía de la fibra de carbón activado (FCA) utilizada en la determinación del diámetro de la fibrilla ( $d_f$ ). Magnificación de 750×.

La tortuosidad de un material se define como el cociente entre la distancia recorrida por una molécula desde la entrada a lo más profundo dentro del poro, y la distancia lineal desde la entrada a lo más profundo del poro. Debido a su propia definición, la tortuosidad llega a carecer de significado físico si adquiere valores muy grandes o inferiores a 1. Además, se trata de una propiedad intrínseca de cada material, y se debe determinar experimentalmente. La tortuosidad permite corregir la difusividad efectiva ( $D_{ep}$ ) usando la ecuación (7.7) o la ecuación propuesta por Satterfield et al., (1973).

$$D_{ep} = \frac{D_{AB}\epsilon_p}{\tau} \quad (7.7)$$

$$D_{ep} = \frac{D_{AB}\epsilon_p K_p K_r}{\tau} \quad (7.8)$$

Donde  $\tau$  es la tortuosidad;  $K_p$  es el parámetro de restricción por exclusión;  $K_r$  es el parámetro de restricción por fricción.

Leyva-Ramos y Geankoplis (1994) obtuvieron un valor de tortuosidad de 3.5 para carbones activados granulares. Otro valor de 6.4 fue reportado por Leyva-Ramos et al.,

(2005) para la adsorción de Cadmio(II) y Zinc (II) sobre un carbón activado granular. Esto indica que la tortuosidad de los carbones activados granulares suelen oscilar en el intervalo de 3.5 - 6.4. Por otro lado, Ocampo-Pérez (2011) encontró un valor de tortuosidad de 2.4 para la adsorción de pentaclorofenol y azul de metileno sobre fibras de carbón activado. Por lo tanto, las tortuosidades de las fibras de carbón activado pueden ser ligeramente menores que las de los carbones activados granulares.

La utilidad de los parámetros de restricción surge cuando las tortuosidades calculadas, son grandes en comparación con el intervalo normal reportado para los materiales adsorbentes utilizados, lo que sugiere que en el sistema hay restricción. Los parámetros de restricción  $K_p$  y  $K_r$  que modifican a la expresión más sencilla para la difusividad efectiva, intentan describir la dificultad que tienen las moléculas para ingresar ( $K_p$ ) (Dechadilok y Deen, 2006) y difundirse dentro de los poros ( $K_r$ ). Los parámetros  $K_p$  y  $K_r$ , consideran que los poros son cilíndricos o tipo rendija y la molécula tiene forma esférica con un diámetro inferior al diámetro de los poros (Dechadilok y Deen, 2006).

Diversas ecuaciones se han propuesto para estimar  $K_p$  y  $K_r$ . La ecuación más sencilla para estimar  $K_p$  y  $K_r$ , pero también con el intervalo de validez más pequeño ( $\lambda < 0.4$ ), es la de Renkin, (1956). Las ecuaciones para cada factor de restricción en una geometría de poro cilíndrica son las siguientes:

$$K_p = (1 - \lambda)^2 \quad (7.9)$$

$$K_r = (1 - 2.104\lambda + 2.09\lambda^3 - 0.95\lambda^5) \quad (7.10)$$

$$\lambda = \frac{D_m}{D_p} \quad (7.11)$$

Donde  $\lambda$  es el cociente entre el diámetro de la molécula y el diámetro promedio de los poros;  $D_m$  es el diámetro de la molécula, nm.

Dechadilok y Deen (2006) correlacionaron los resultados de diversos autores para aproximar el producto de  $K_p$  y  $K_r$  en una geometría de poro cilíndrica y en un intervalo de aplicación de ( $\lambda < 0.95$ ). La correlación es la siguiente:

$$K_p K_r = 1 + \frac{9}{8}\lambda \ln(\lambda) - 1.56034\lambda + 0.528155\lambda^2 + 1.91521\lambda^3 - 2.81903\lambda^4 + 0.270788\lambda^5 + 1.10155\lambda^6 - 0.435933\lambda^7 \quad (7.12)$$

Bungay y Brenner (1973) obtuvieron la ecuación siguiente para estimar  $K_r$  para valores de  $\lambda < 1$  en una geometría de poro cilíndrica:

$$K_t = \frac{9\pi^2\sqrt{2}}{4(1-\lambda)^{\frac{5}{2}}} \left[ 1 + \sum_{n=1}^2 a_n(1-\lambda)^n \right] + \sum_{n=0}^4 (a_{n+3})\lambda^n \quad (7.13)$$

$$K_r = \frac{6\pi}{K_t}$$

Donde;  $a_1 = -73/60$ ,  $a_2 = 77293/50400$ ,  $a_3 = -22.5083$ ,  $a_4 = -5.6117$ ,  $a_5 = -0.3363$ ,  $a_6 = -1.216$  y  $a_7 = 1.647$ .

El parámetro  $\lambda$  se estimó utilizando el diámetro promedio de los poros ( $D_p$ ) y la dimensión más pequeña de las moléculas de AMP y TMP, que son 0.509 y 0.704 nm (Ver Tabla 2.1 y 2.4), respectivamente.

### 7.5.2 Velocidad de Adsorción en el Sistema AMP-FCA

Los ajustes a las curvas de decaimiento de la concentración de AMP durante la adsorción sobre la FCA, se realizaron con el modelo de transporte externo de masa (MTEM, que asume que la difusión es muy rápida dentro de los poros, es decir que  $D_{es \rightarrow \infty}$  y  $D_{ep \rightarrow \infty}$ ). Se utilizó como modelo de equilibrio la isoterma de Redlich-Peterson, y a su vez, se asumió que la geometría de las fibras es de tipo cilíndrica. La isoterma de adsorción de Redlich-Peterson utilizada para modelar el equilibrio de adsorción dinámico, tiene un porcentaje de desviación promedio del 4.28 %. Las curvas de decaimiento se ajustaron satisfactoriamente con el modelo del transporte de masa hasta llegar al equilibrio.

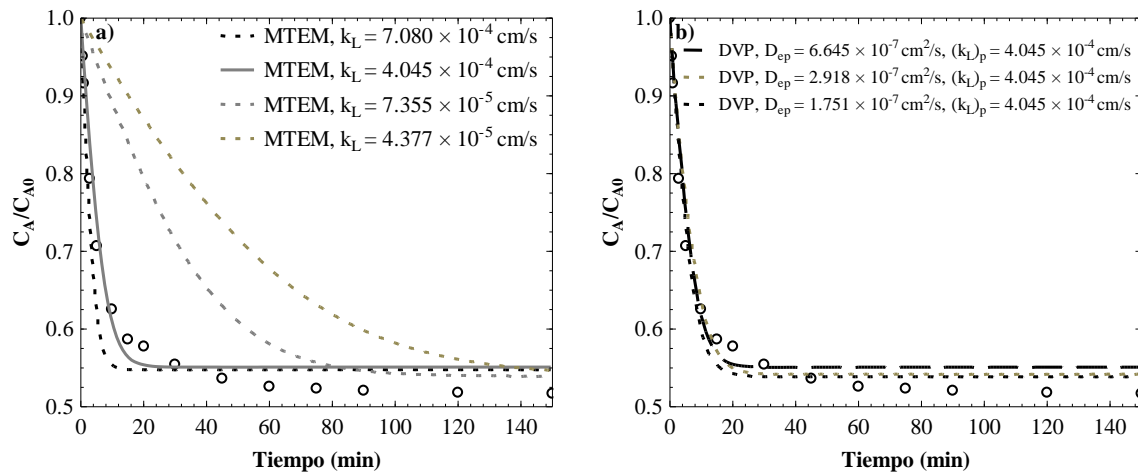
**Tabla 7.5.** Condiciones experimentales y parámetros optimizados, de las curvas de decaimiento de la concentración del sistema AMP-FCA.

Experimento No.	Q (cm <sup>3</sup> /s)	V <sub>0</sub> (mL)	m (g)	C <sub>A0</sub> (mg/L)	C <sub>Ae</sub> (mg/g)	q <sub>e</sub> (mg/g)	(k <sub>L</sub> ) <sub>p</sub> × 10 <sup>4</sup> (cm/s)	% $\bar{D}$
C1-FCAAMP	0.666	400	0.2513	92.88	18.61	118.21	3.745	7
C2-FCAAMP	0.666	400	0.2507	195.38	87.05	172.84	3.745	11
C3-FCAAMP	0.666	400	0.2497	306.11	158.22	236.91	4.045	3
C4-FCAAMP	0.666	400	0.2504	420.91	258.37	259.66	3.444	3
C5-FCAAMP	0.666	500	0.2495	312.13	195.81	233.12	1.941	4
C6-FCAAMP	0.666	300	0.2507	305.47	122.41	219.06	4.346	6
C7-FCAAMP	1	400	0.2512	306.25	158.61	235.09	5.098	4
C8-FCAAMP	2	400	0.2501	309.98	158.28	242.64	8.705	5
C9-FCAAMP	0.666	400	0.1509	302.05	213.11	235.75	4.745	3
C10-FCAAMP	0.666	400	0.0518	303.23	268.13	271.05	3.594	1

Primeramente, se evaluó con el modelo MTEM el efecto del coeficiente de transporte externo de masa ( $k_L$ ) sobre las curvas de decaimiento de la concentración. Se encontró que todas las curvas de decaimiento son significativamente dependientes del transporte externo, esto se puede observar en la Figura 7.39 a) para el experimento C3-FCAAMP. Donde, el valor de  $k_L$  se varió en un intervalo entre  $4.377 \times 10^{-5}$  cm/s y  $7.080 \times 10^{-4}$  cm/s, encontrándose que el coeficiente  $k_L$  óptimo para este experimento es de  $4.045 \times 10^{-4}$  cm/s. Además, de que el  $k_L$  tiene un impacto importante en las caídas de concentración.

La influencia del transporte intraparticular se evaluó utilizando el modelo DVP, un valor óptimo del coeficiente  $k_L$  de  $4.045 \times 10^{-4}$  cm/s y otorgando valores a la difusividad

efectiva ( $D_{ep}$ ) de  $6.5$  ( $6.645 \times 10^{-7} \text{ cm}^2/\text{s}$ ),  $15$  ( $2.918 \times 10^{-7} \text{ cm}^2/\text{s}$ ) y  $25$  ( $1.751 \times 10^{-7} \text{ cm}^2/\text{s}$ ) veces menores a la difusividad molecular de la AMP. En la Figura 7.39 b) se puede apreciar que variando la difusividad efectiva no se afecta las predicciones del modelo DVP, indicando que la difusión intraparticular no afecta la velocidad global de adsorción. Lo anterior corrobora que las moléculas de AMP se difunden muy rápido dentro de los poros, volviendo al modelo MTEM el más apropiado para describir la velocidad de adsorción.

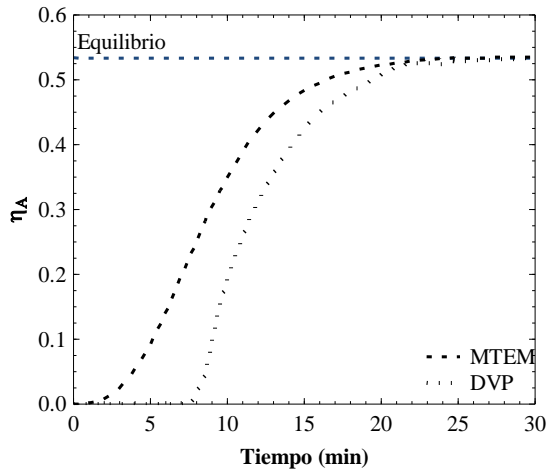


**Figura 7.39.** Comparación de las predicciones de los modelos de MTEM a) y de DVP b) para el experimento C3-FCAAMP. Las estimaciones con el modelo DVP se hicieron con el valor óptimo de  $k_L$ .

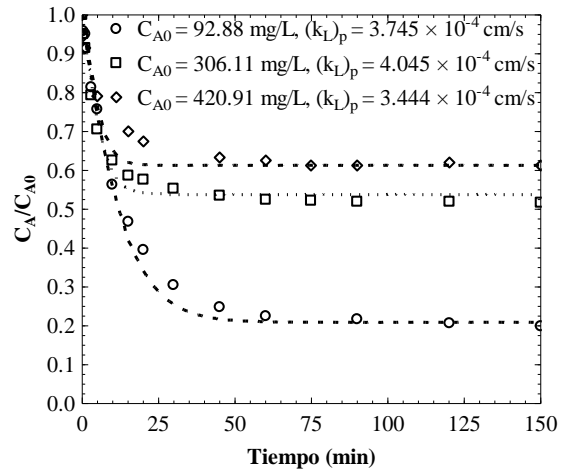
Adicionalmente, la Figura 7.40 muestra la concentración adimensional intraparticular ( $\eta_A$ ) en el centro de la partícula ( $\xi = 0$ ) y en función del tiempo, evaluadas con los modelos MTEM y DVP, como referencia, se graficó la concentración adimensional en el equilibrio. En esta figura, la curva del modelo DVP presenta un retraso con respecto a la curva del modelo MTEM, que se debe a que la difusión intraparticular es más lenta que el transporte externo de masa.

Se estudiaron los efectos de distintas variables de operación sobre la velocidad de adsorción tales como la concentración inicial ( $C_{A0}$ ), volumen de solución ( $V_0$ ), masa del adsorbente ( $m$ ) y gasto volumétrico de la solución fluyendo en el lecho empacado ( $Q$ ).

El efecto de la concentración inicial se exhibe en la Figura 7.41, el coeficiente de transporte externo de masa fluctúa entre  $3.444 \times 10^{-4}$  y  $4.045 \times 10^{-4} \text{ cm/s}$ , que es un intervalo relativamente pequeño. Esto demuestra que  $k_L$  no es función de la concentración inicial.



**Figura 7.40.** Efecto de la difusividad efectiva sobre la concentración adimensional, en el centro de la FCA ( $\xi = 0$ ) para el experimento C3-FCAAMP.



**Figura 7.41.** Curvas de decaimiento de la concentración de AMP sobre la FCA a diferentes concentraciones iniciales (C1-FCAAMP ( $\circ$ ), C3-FCAAMP ( $\square$ ), C4-FCAAMP ( $\diamond$ )).

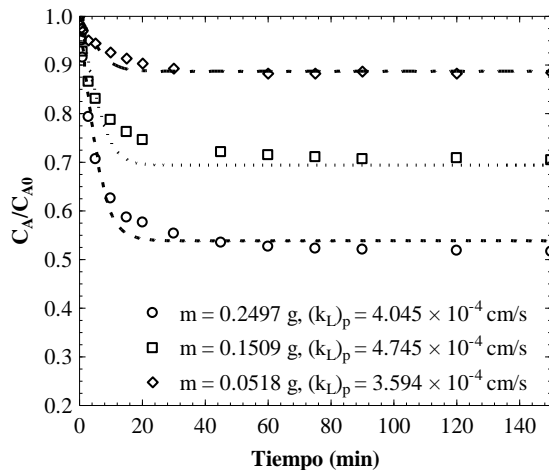
El efecto de la masa del adsorbente y volumen inicial de la solución se ilustra en las Figuras 7.42 y 7.43, respectivamente. Los resultados evidencian que el coeficiente de transporte externo de masa no cambió variando la masa del adsorbente. El coeficiente  $k_L$  esencialmente no se afectó reduciendo el volumen de solución de 400 a 300 mL. Sin embargo, el valor de  $k_L$  descendió de  $4.045 \times 10^{-4}$  a  $1.941 \times 10^{-4}$  cm/s, incrementando el volumen de la solución de 400 a 500 mL. El primer resultado era de esperarse, pero el último no se pudo explicar.

Una variable que engloba tanto a la concentración inicial, volumen de solución y masa del adsorbente es la capacidad de adsorción en el equilibrio ( $q_e$ ). Esta variable oscila en un rango de 118.21 a 271.05 mg/g y no hay una afectación significativa del  $k_L$ . Por lo tanto, los parámetros que engloba  $q_e$  analizados tanto individualmente como en conjunto no afectan al  $k_L$ .

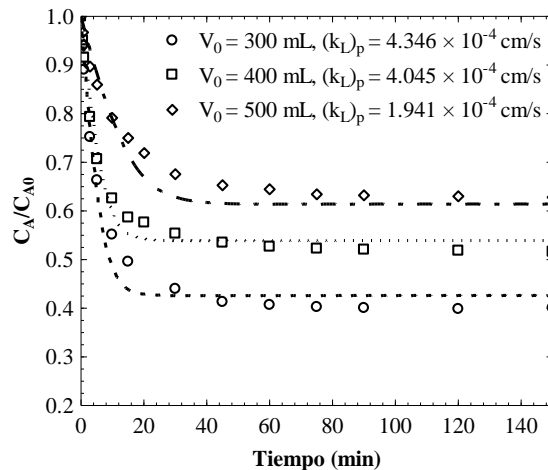
El coeficiente de transporte externo de masa depende del flujo volumétrico y aumenta incrementando el gasto volumétrico. El efecto del flujo volumétrico sobre la velocidad global de adsorción se ilustra en la Figura 7.44 y, es claro que, incrementando el flujo volumétrico,



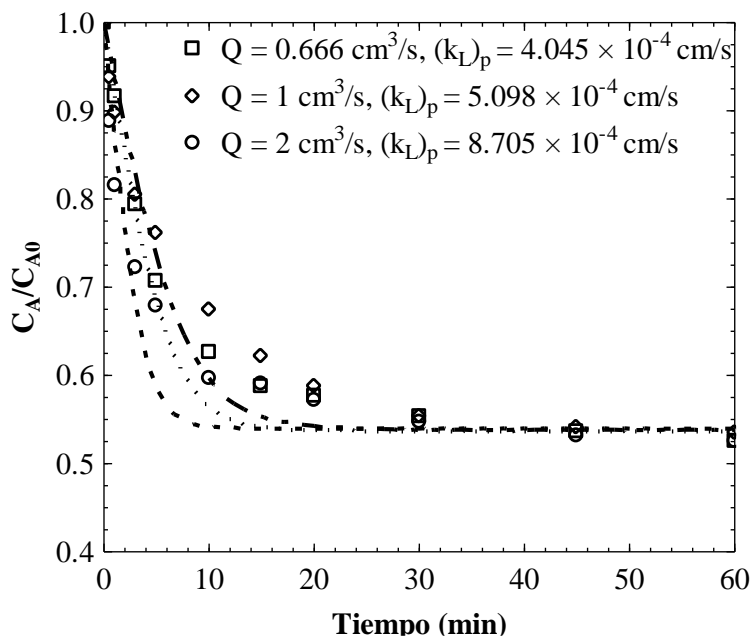
las caídas de concentración son más pronunciadas. No obstante, después del minuto 5 los datos experimentales tienden a desviarse ligeramente.



**Figura 7.42.** Curvas de decaimiento de la concentración de AMP sobre la FCA a diferentes masas de adsorbente (C3-FCAAMP (○), C9-FCAAMP (□) y C10-FCAAMP (◇)).



**Figura 7.43.** Curvas de decaimiento de la concentración de AMP sobre la FCA a diferentes volúmenes iniciales de solución (C3-FCAAMP (□), C5-FCAAMP (◇) y C6-FCAAMP (○)).



**Figura 7.44.** Curvas de decaimiento de la concentración de AMP durante la adsorción sobre la FCA a diferentes flujos volumétricos (C3-FCAAMP (□), C7-FCAAMP (◇) y C8-FCAAMP (○)).

### 7.5.3 Velocidad de Adsorción en el Sistema TMP-FCA

Los datos experimentales de las curvas de decaimiento de la concentración de TMP durante la adsorción sobre la FCA, se realizaron con el modelo de difusión en el volumen del poro (DVP, que asume que la difusividad superficial es despreciable, es decir  $D_{es \rightarrow 0}$ ), asumiendo que la geometría de las fibras es cilíndrica y utilizando la isoterma de Langmuir. La isoterma de adsorción de Langmuir tiene un porcentaje de desviación promedio del 2.75 %; por consiguiente, las curvas de decaimiento predichas con el modelo DVP alcanzaron el equilibrio muy cercano al equilibrio experimental.

**Tabla 7.6.** Condiciones experimentales y parámetros de las curvas de decaimiento de la concentración del sistema TMP-FCA.

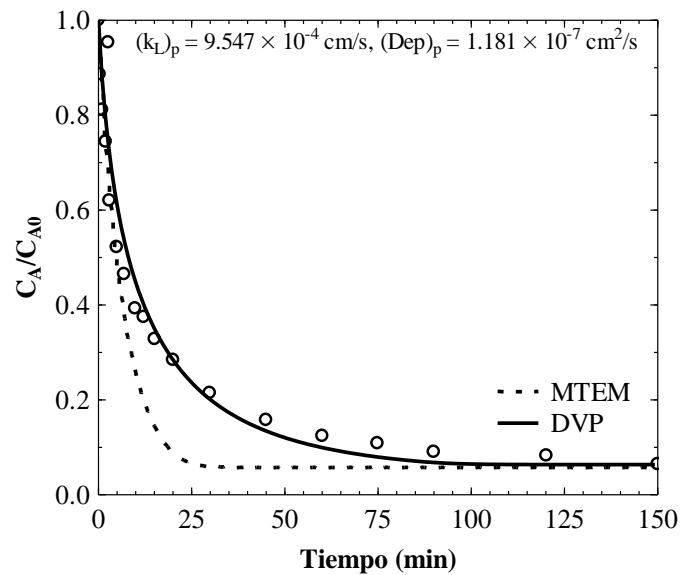
Experimento No.	Q (cm <sup>3</sup> /s)	V <sub>0</sub> (mL)	m (g)	C <sub>A0</sub> (mg/L)	C <sub>Ae</sub> (mg/g)	q <sub>e</sub> (mg/g)	τ <sub>s</sub>	(k <sub>L</sub> ) <sub>p</sub> × 10 <sup>4</sup> (cm/s)	(D <sub>ep</sub> ) <sub>p</sub> × 10 <sup>7</sup> (cm <sup>2</sup> /s)	% $\bar{D}$
C1-FCATMP	0.666	400	0.2508	141.98	0.82	225.13	8.64	4.199	2.901	52*
C2-FCATMP	0.666	400	0.2493	186.88	2.27	296.21	10.39	3.227	2.415	5
C3-FCATMP	0.666	400	0.2508	241.31	11.34	366.78	11.09	4.361	2.261	12*
C4-FCATMP	0.666	400	0.2496	290.89	36.26	408.01	48.51	5.005	0.517	16
C5-FCATMP	0.666	600	0.2505	235.87	76.20	382.43	39.14	5.496	0.640	6
C6-FCATMP	1	400	0.2507	248.57	10.43	379.96	20.85	7.440	1.203	38*
C7-FCATMP	2	400	0.2509	242.22	13.61	364.47	21.24	9.547	1.181	17*
C8-FCATMP	0.666	400	0.1496	231.79	87.09	386.88	48.51	3.227	0.517	6
C9-FCATMP	0.666	400	0.0492	229.52	181.89	387.21	48.51	2.593	0.517	2

\*El error es consecuencia de valores de  $\phi_A$  muy pequeños en la zona del equilibrio.

Primeramente, se evaluó el ajuste de los datos con el modelo MTEM. No obstante, como se exhibe en la Figura 7.45 para el experimento C7-FCATMP, es evidente que este modelo alcanza muy rápidamente el equilibrio y se desvía considerablemente de los datos experimentales a partir de  $t = 5$  min. En contraparte, el modelo DVP interpreta bien los datos experimentales, puesto que considera la resistencia interna del adsorbente.

Se calcularon con los modelos MTEM y DVP para el experimento C7-FCATMP los perfiles de concentración adimensional en función del tiempo para el centro de las fibras ( $\xi = 0$ ) y la superficie externa de las mismas ( $\xi = 1$ ), exhibiéndose en la Figura 7.46. En el centro de las fibras se observa un contraste entre las curvas de concentración adimensional de los modelos de MTEM y DVP, ambas tienen el mismo comportamiento, pero hay un desfase entre ambas curvas, que es propiciado por la difusividad efectiva, y corrige la

desviación en el modelo MTEM. En la Figura 7.47, se presentan los perfiles de concentración adimensional dentro de la partícula a diferentes tiempos calculados con el modelo DVP. A tiempos cortos, los perfiles de concentración cerca de la frontera ( $\xi = 1$ ) se incrementan rápidamente como consecuencia del transporte externo y la lenta difusión intraparticular a lo largo del poro ( $D_{ep}$ ). Estos comportamientos, dejan claro qué tanto el transporte externo como intraparticular dominan a la cinética de adsorción. Por consiguiente, el modelo DVP el más apropiado para modelar la velocidad de adsorción.

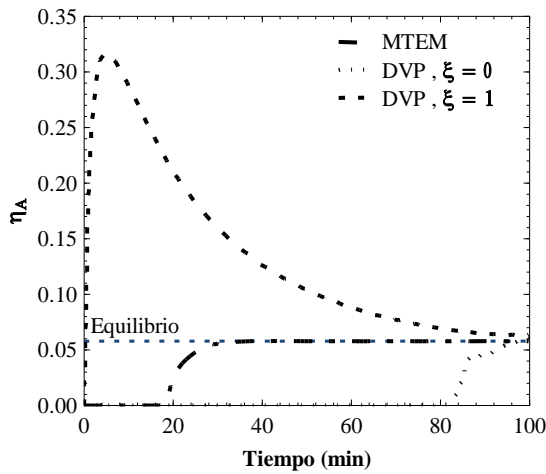


**Figura 7.45.** Comparación entre los modelos de difusión en el volumen del poro (DVP) y de transporte externo (MTEM). Experimento C7-FCATMP (○).

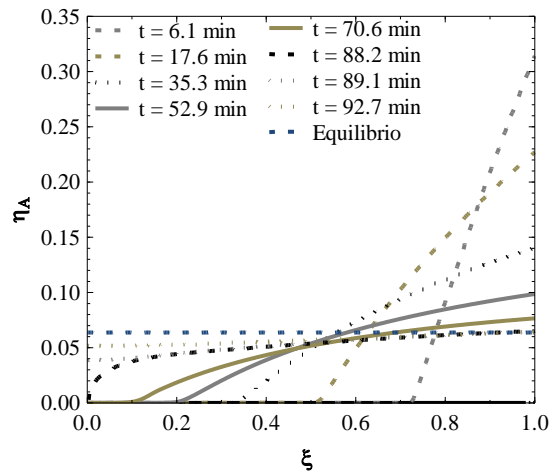
Los parámetros analizados sobre la velocidad de adsorción son la concentración inicial ( $C_{A0}$ ), volumen de solución ( $V_0$ ), masa del adsorbente ( $m$ ) y flujo volumétrico dentro del lecho empacado ( $Q$ ).

Los efectos de la concentración inicial y masa del adsorbente se presentan en las Figuras 7.48 y 7.49. Ambos efectos y el de volumen de solución, tienen resultados consistentes, que indican que la difusividad efectiva ( $(D_{ep})_p$ ) disminuye proporcionalmente con respecto a la masa adsorbida de TMP. Por otra parte, el coeficiente de transporte externo de masa oscila entre valores de  $4.199 \times 10^{-4}$  y  $5.496 \times 10^{-4} \text{ cm/s}$  en los efectos de concentración inicial y volumen de solución, por lo que no se tiene una fuerte dependencia de estos parámetros hacia el  $k_L$ . Al variar la masa se presenta una reducción proporcional del coeficiente de transporte externo. No obstante, si se analiza únicamente este efecto y en

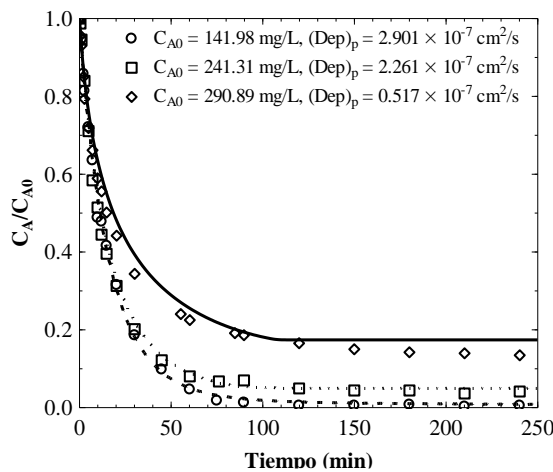
términos del número de Sherwood ( $N_{Sh}$ ), la variación es menor al 10 %, por ende, la masa no lo afecta representativamente.



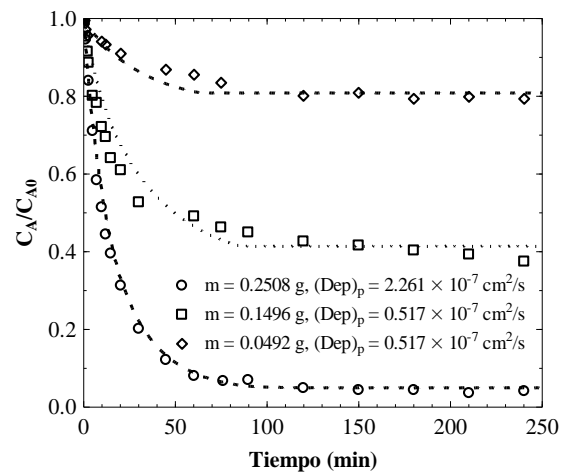
**Figura 7.46.** Efecto de la difusividad efectiva sobre la concentración adimensional, en la frontera ( $\xi = 1$ ) y en el centro de la FCA ( $\xi = 0$ ) para el experimento C7-FCATMP.



**Figura 7.47.** Perfiles intraparticulares de concentración adimensional de TMP, en el modelo de difusión en el volumen del poro para el experimento C7-FCATMP.



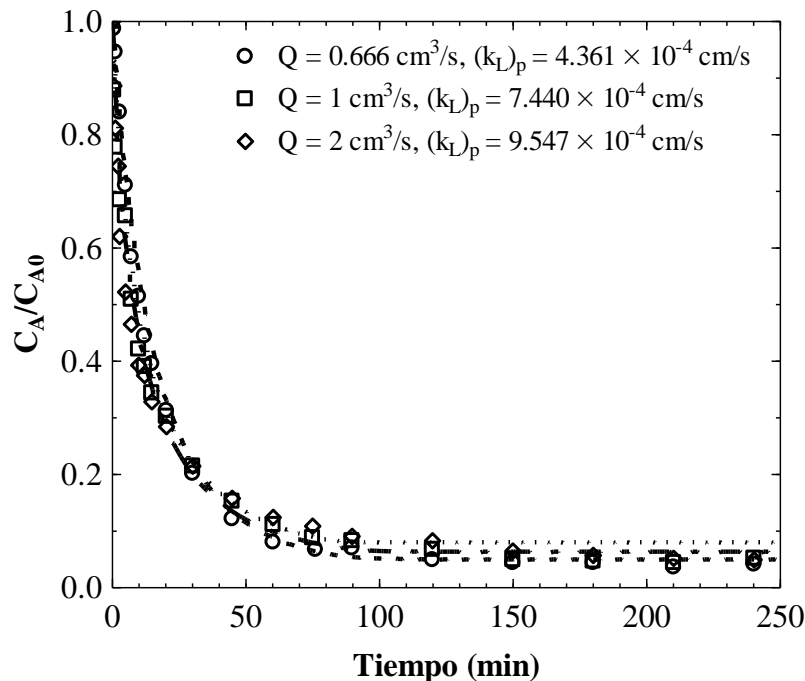
**Figura 7.48.** Curvas de decaimiento de la concentración de TMP sobre la FCA a diferentes concentraciones iniciales (C1-FCATMP ( $\circ$ ), C3-FCATMP ( $\square$ ) y C4-FCATMP ( $\diamond$ )).



**Figura 7.49.** Curvas de decaimiento de la concentración de TMP sobre la FCA a diferentes masas de adsorbente (C3-FCATMP ( $\circ$ ), C8-FCATMP ( $\square$ ) y C9-FCATMP ( $\diamond$ )).

La capacidad de adsorción en el equilibrio oscila entre 225.13 a 408.01 mg/g para los efectos de la masa, concentración inicial y volumen de solución. El valor promedio de  $k_L$  para estos efectos es de  $4.015 \times 10^{-4}$  cm/s. y únicamente tiene una desviación promedio de 23 % respecto a los  $k_L$  experimentales. Por este motivo se afirma que el coeficiente de transporte externo no es dependiente de estos parámetros ni de la capacidad de adsorción.

El efecto del flujo volumétrico sobre el sistema TMP-FCA que se exhibe en la Figura 7.50, y se nota que tiene un impacto directo en los primeros tiempos de las cinéticas de adsorción. Los resultados revelan que al incrementarse el flujo volumétrico también lo hace proporcionalmente el coeficiente de transporte externo de masa ( $k_L$ ), en una relación promedio de 1.48 veces por cada mililitro por segundo que se incrementa el gasto volumétrico (Q).



**Figura 7.50.** Curvas de decaimiento de la concentración de TMP sobre la FCA a diferentes flujos volumétricos (C3-FCATMP (○), C6-FCATMP (□), C7-FCATMP (◇)).

Los valores experimentales de tortuosidad sin restricción “ $\tau_s$ ” variaron en un intervalo de 8.64 y 48.51, cifras muy superiores a lo reportado en la literatura para las fibras de carbón activado. Esto solo puede ser indicativo de la presencia de restricción por exclusión ( $K_p$ ) y

fricción ( $K_r$ ). Los parámetros de restricción estimados para este sistema se muestran en la Tabla 7.7.

Los parámetros de restricción seleccionados para corregir la tortuosidad son los de la ecuación de Bungay y Brenner, el parámetro “ $\lambda$ ” tiene de un valor de 0.3974 para el sistema TMP-FCA. La tortuosidad promedio corregida tomando en cuenta la restricción, es de 2.91. La difusividad efectiva promedio ( $(Dep)_{prom}$ ) calculada a partir de esta tortuosidad para el sistema de adsorción TMP-FCA es  $8.785 \times 10^{-8} \text{ cm}^2/\text{s}$ .

**Tabla 7.7.** Parámetros de restricción para el sistema TMP-FCA.

Ecuación	$K_p K_r$
Renkin	0.1037
Dechadilok y Deen	0.1070
Bungay y Brenner	0.1022

#### 7.5.4 Parámetros de Transporte de Masa para los Sistemas AMP-FCA y TMP-FCA

El equilibrio de adsorción de los sistemas AMP-FCA y TMP-FCA, se modelaron con las isothermas de Redlich-Peterson y Langmuir, respectivamente. Esto puede haberse hecho con otro tipo de modelo de equilibrio, pero si se utiliza otro modelo que presente un mayor porcentaje de desviación, los modelos de transferencia de masa no logran aproximar satisfactoriamente el equilibrio para algunas cinéticas en concreto.

A continuación, se tienen las ecuaciones para estimar la concentración en el equilibrio para las isothermas de Henry y Langmuir, en base a los parámetros de operación  $V_0$ ,  $C_{A0}$  y  $m$ . Estas expresiones se obtienen al igualar el balance masa del soluto con la isoterma de adsorción y posteriormente resolver para la concentración en el equilibrio.

*Isoterma de Henry*

$$C_{Ae} = \frac{\left(\frac{V_0}{m}\right) C_{A0}}{k_{He} - \left(\frac{V_0}{m}\right)} \quad (7.14)$$

*Isoterma de Langmuir*

$$C_{Ae} = \frac{\left[ q_m K + \left(\frac{V_0}{m}\right) - \left(\frac{V_0}{m}\right) K C_{A0} \right] + \sqrt{\left[ \left(\frac{V_0}{m}\right) K C_{A0} - q_m K - \left(\frac{V_0}{m}\right) \right]^2 - 4 \left(\frac{V_0}{m}\right)^2 K C_{A0}}}{2 \left(\frac{V_0}{m}\right) K} \quad (7.15)$$

El transporte convectivo de masa en el sistema, es descrito por el coeficiente de transporte externo ( $k_L$ ). Si se maneja este coeficiente en términos del número de Sherwood

( $N_{Sh}$ ), este último puede correlacionarse en términos de otros dos números adimensionales, que son el número de Reynolds ( $N_{Re}$ ) y el número de Schmidt ( $N_{Sc}$ ). El número de Reynolds relaciona las fuerzas de inercia con las fuerzas viscosas, mientras el número de Schmidt relaciona las fuerzas viscosas con el transporte difusivo. Se ha encontrado que estos dos números son función del número de Sherwood, y debido a eso, se han planteado correlaciones entre estos tres números para generalizar el comportamiento de los sistemas en base a sus propiedades y parámetros de operación.

$$N_{Sc} = \frac{10000\mu}{\rho D_{AB}} \quad (7.16)$$

$$N_{Re} = \frac{\rho \left(\frac{Q}{A}\right) D_{eq}}{10000\mu(1 - \varepsilon)} \quad (7.17)$$

$$D_{eq} = \frac{6v_e}{S_{extc}} = \frac{6 \frac{d_f^2}{4} \pi L}{\pi d_f L} = \frac{6d_f}{4} \quad (7.18)$$

Donde  $N_{Sc}$  es el número de Schmidt, 1;  $\mu$  es la viscosidad de la solución, Kg/(m s);  $\rho$  es la densidad de la solución, Kg/m<sup>3</sup>; A es el área transversal de la columna empacada, cm<sup>2</sup>;  $D_{eq}$  es el diámetro equivalente o diámetro de Suater, cm;  $\varepsilon$  es la fracción hueca de la columna empacada, 1.

La viscosidad ( $\mu$ ) y densidad ( $\rho$ ) utilizadas en la determinación de los números adimensionales fueron del agua pura, debido a que las concentraciones utilizadas en los experimentos no fueron lo suficientemente grandes como para afectarlas. Asimismo, la difusividad molecular ( $D_{AB}$ ) utilizada fue la de Wilke-Chang para especies diluidas. El diámetro equivalente estimado para las fibras fue de 0.0015 cm. La fracción hueca de la columna ( $\varepsilon$ ) fue considerada como 0, ya que las fibras se encontraban firmemente compactadas dentro del lecho. La correlación encontrada para el número de Sherwood tiene un porcentaje de desviación del 8% respecto a la información experimental. Además, se recomienda su uso para  $N_{Sc} < 2041$  y  $0.11 < N_{Re}$ .

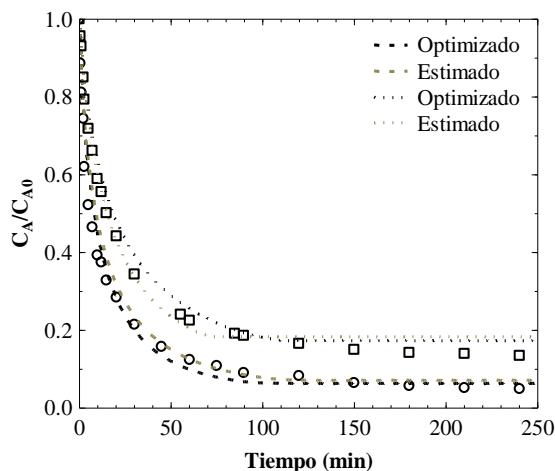
$$N_{Sh} = 0.5115 N_{Re}^{0.6497} N_{Sc}^{0.0676} \quad (7.19)$$

Se realizaron las estimaciones de las curvas de decaimiento de la concentración para los sistemas de adsorción de AMP y TMP sobre la FCA, haciendo uso de la correlación para

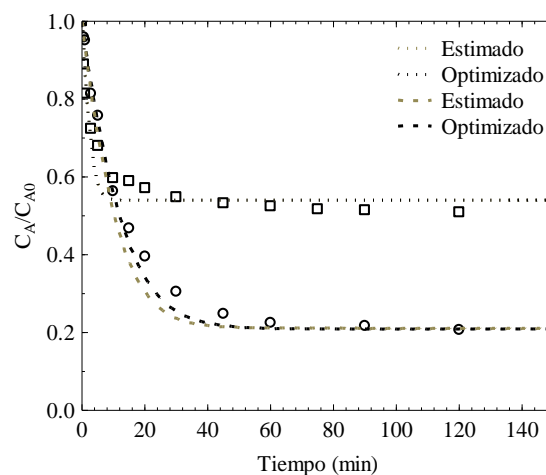
el número de Sherwood encontrada con ambos sistemas, y la difusividad efectiva promedio para el caso de la TMP.

En las Figuras 7.51 y 7.52 se muestran algunas curvas de decaimiento de la concentración optimizadas y predichas a partir de los parámetros de transporte de masa. Cabe mencionar, que las estimaciones se hicieron para experimentos con diferente capacidad de adsorción y flujo volumétrico, con el objetivo de demostrar la funcionalidad de los parámetros. Las curvas estimadas con el modelo MTEM para el sistema AMP-FCA y los experimentos C1-FCAAMP y C8-FCAAMP, muestran porcentajes de desviación del 8 y 5 %; mientras que, las curvas optimizadas tienen porcentajes del 7 y 5 %, respectivamente. Por otra parte, las curvas estimadas con el modelo DVP para el sistema TMP-FCA y los experimentos C7-FCATMP y C8-FCATMP, arrojan porcentajes de desviación del 18 y 19 %, respectivamente, que son muy similares a los de las curvas optimizadas.

Como resultado, se encontró que tanto los parámetros de transporte ( $N_{Sh}$  y  $(D_{ep})_{prom}$ ) encontrados, así como también los modelos propuestos para cada sistema de adsorción, logran predecir satisfactoriamente la información experimental.



**Figura 7.51.** Curvas de decaimiento de la concentración estimadas con la  $(D_{ep})_{prom}$  y la correlación encontrada para  $N_{Sh}$ . Experimentos C7-FCATMP (○) y C8-FCATMP (□).



**Figura 7.52.** Curvas de decaimiento de la concentración estimadas con la correlación encontrada para  $N_{Sh}$ . Experimentos C1-FCAAMP (○) y C8-FCAAMP (□).



### 7.5.5 Velocidad de Adsorción en el Sistema AMP-F400n

La interpretación de los datos cinéticos de adsorción de AMP sobre el carbón F400n, se efectuó con el modelo de difusión en el volumen del poro (DVP, que asume que la difusividad superficial es despreciable, es decir  $D_{es \rightarrow 0}$ ), Se asumió que la geometría de las partículas de carbón es esférica. Además, se utilizó la isoterma de Langmuir.

**Tabla 7.8.** Condiciones experimentales y parámetros de las curvas de decaimiento de la concentración del sistema AMP-F400n.

Experimento No.	Rpm	$V_0$ (mL)	$m$ (g)	$C_{A0}$ (mg/L)	$C_{Ae}$ (mg/g)	$q_e$ (mg/g)	$\tau_s$	$(k_L)_p \times 10^4$ (cm/s)	$(D_{ep})_p \times 10^7$ (cm <sup>2</sup> /s)	% $\bar{D}$
C1-F400nAMP	100	1000	0.5009	94.50	50.05	88.74	1.90	4.831	11.184	3
C2-F400nAMP	100	1000	0.502	199.60	133.43	131.81	6.52	3.791	3.269	2
C3-F400nAMP	100	1000	0.5015	386.87	294.84	183.51	4.96	3.631	4.295	1
C4-F400nAMP	100	1000	0.7506	202.81	110.45	123.05	5.74	4.191	3.708	3
C5-F400nAMP	100	1000	1.0011	211.22	103.08	108.98	5.32	3.631	4.002	2

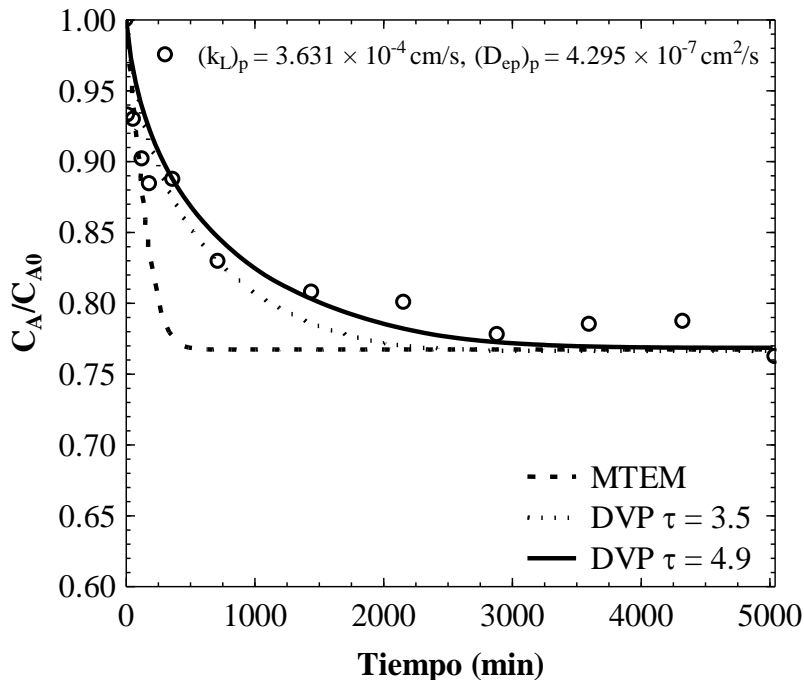
Inicialmente, se examinó el ajuste de los datos experimentales por el modelo MTEM para el experimento C3F400n-AMP. Resultando en un ajuste pobre de los datos experimentales, que se adjudica a que el transporte intraparticular domina la velocidad de adsorción. Por este motivo, se procedió a utilizar el modelo DVP, obteniéndose un ajuste satisfactorio. En la Figura 7.53 se aprecia una comparación entre los modelos de MTEM, DVP optimizado y DVP ajustado con la tortuosidad teórica de 3.5, recomendada para carbones activados granulares para el experimento C3F400n-AMP.

En las Figuras 7.54 y 7.55, se aprecian los perfiles intraparticulares de concentración adimensional en función del tiempo, y el efecto de la difusividad efectiva en el centro del carbón activado ( $\xi = 0$ ), respectivamente. La difusividad efectiva propicia un retardo en la llegada de las moléculas de AMP al centro del carbón que el modelo MTEM no puede aproximar. Por lo anterior, se corrobora que el modelo DVP es el más adecuado para describir la velocidad de adsorción en este sistema.

La difusividad efectiva ( $(D_{ep})_p$ ) estimada a partir de la tortuosidad teórica de 3.5, es de  $6.086 \times 10^{-7}$  cm<sup>2</sup>/s, y realiza una corrección satisfactoria a la predicción del modelo DVP con un porcentaje de desviación de 2.5 %. A pesar de ello, es claro que se subestima

ligeramente a la difusividad efectiva optimizada, cuyo valor es de  $4.295 \times 10^{-7} \text{ cm}^2/\text{s}$  y realiza la corrección con menor porcentaje de desviación.

Los parámetros analizados sobre la velocidad de adsorción, son la concentración inicial ( $C_{A0}$ ) y la masa del adsorbente ( $m$ ).

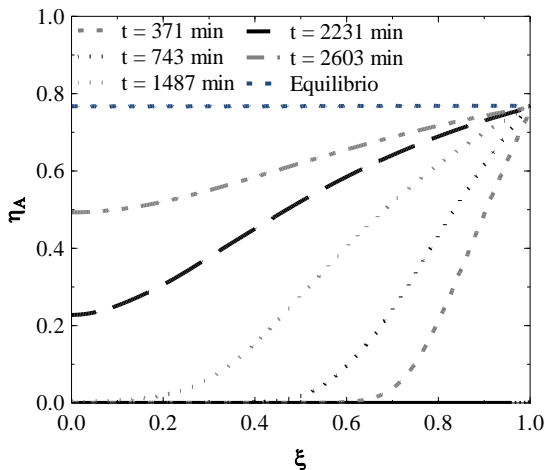


**Figura 7.53.** Comparación entre los modelos de difusión en el volumen del poro (DVP) y el de transporte externo (MTEM) para el experimento C3-F400nAMP (o).

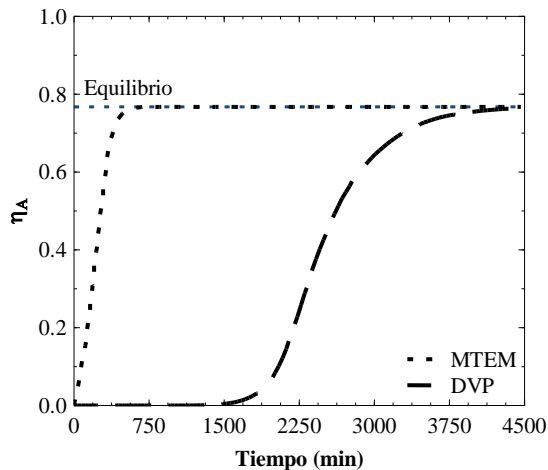
El efecto de la masa deja ver una disminución proporcional de la difusividad efectiva  $(D_{ep})_p$  conforme aumenta la capacidad de adsorción en el equilibrio ( $q_e$ ). En el efecto de la concentración que se muestra en la Figura 7.56, hay un valor máximo de difusividad efectiva de  $11.184 \times 10^{-7} \text{ cm}^2/\text{s}$  para una capacidad de adsorción en el equilibrio de 88.74 mg/g, desde ese punto, conforme aumenta la capacidad de adsorción en el equilibrio, la difusividad efectiva en el resto de los experimentos disminuye hasta valores muy similares a los presentes en el efecto de la masa. A partir de una capacidad de adsorción en el equilibrio de 108.98 mg/g y hasta una capacidad de adsorción de 183.51 mg/g, la difusividad efectiva permanece prácticamente constante, con un valor promedio de  $3.818 \times 10^{-7} \text{ cm}^2/\text{s}$ .

El valor de tortuosidad promedio, tomando en cuenta todas las difusividades efectivas es de 4.88. Esta tortuosidad está en el intervalo normal reportado para un carbón activado

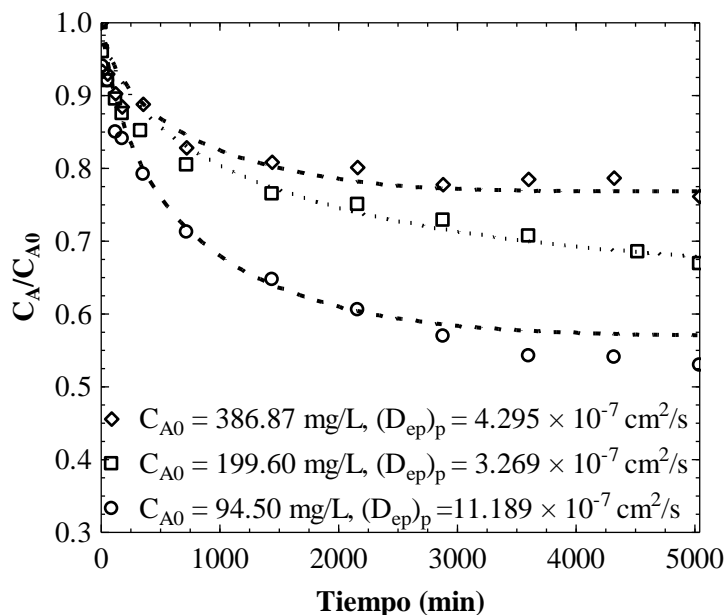
granular. Encima de ello, al tener un valor de tortuosidad considerado normal, apunta a que no hay restricción por exclusión ( $K_p$ ) o fricción ( $K_r$ ).



**Figura 7.54.** Perfiles intraparticulares de concentración adimaneccional de AMP, en el modelo de difusión en el volumen del poro en el experimento C3-F400nAMP.



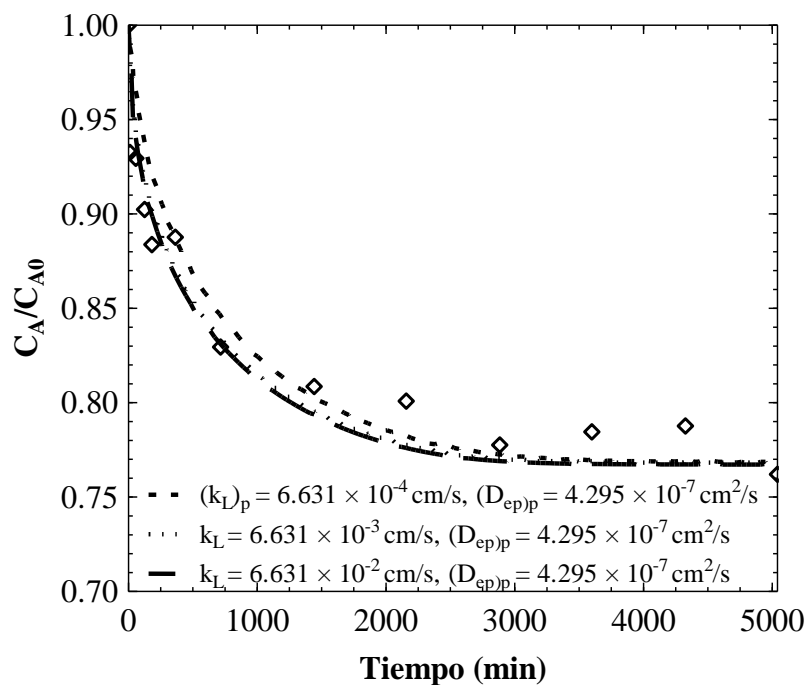
**Figura 7.55.** Efecto de la difusividad efectiva sobre la concentración adimensional, en el centro del carbón F400n ( $\xi = 0$ ) para el experimento C3-F400nAMP.



**Figura 7.56.** Curvas de decaimiento de la concentración de AMP durante la adsorción sobre el carbón F400n a diferentes concentraciones iniciales (C1-F400nAMP ( $\circ$ ), C2-F400nAMP ( $\square$ ) y C3-F400nAMP ( $\diamond$ )).

A pesar de que no se realizaron experimentos para verificar el efecto del transporte externo de masa ( $k_L$ ), se realizó un análisis de sensibilidad para verificar la importancia de este parámetro sobre el modelo DVP, este se grafica en la Figura 7.57. Llegándose a la conclusión de que, aun incrementándose el valor de  $k_L$  en cien veces, no hay una variación significativa sobre las curvas de decaimiento de la concentración. Lo que a su vez reafirma que el mecanismo de transporte dominante es el intraparticular.

La difusividad efectiva promedio ( $(D_{ep})_{prom}$ ) para el sistema de adsorción AMP-F400n es de  $4.359 \times 10^{-7} \text{ cm}^2/\text{s}$ , que tiene un porcentaje de desviación promedio del 24% respecto a todas las difusividades efectivas optimizadas para cada experimento.



**Figura 7.57.** Efecto del coeficiente de transporte externo de masa sobre el experimento C3-F400nAMP ( $\diamond$ ).

## ***CAPÍTULO 8. CONCLUSIONES***

Los materiales adsorbentes utilizados poseen propiedades de textura muy específicas de materiales microporosos. Las fotomicrografías permitieron ver que las FCAs están conformadas por pequeñas fibrillas de carbón con geometría cilíndrica; mientras que, los carbones activados granulares F400 y F400n están conformados por diminutas estructuras esféricas irregulares.

La reactivación de la FCA dio como resultado a las fibras denominadas como ACF800D, ACF800B y ACF800C. En promedio, la reactivación propicio incrementos de 1.24, 1.47 y 1.67 veces en las propiedades de textura con respecto al tiempo de activación; no obstante, se tuvo una pérdida en la acidez del material sin una tendencia aparente. Aun cuando, hubo pérdida aleatoria de acidez, los  $pH_{PCC}$  de las fibras modificadas son básicos y se localizan muy próximos entre sí.

Los datos experimentales del equilibrio de adsorción se ajustaron a las isothermas de Freundlich, Langmuir y Redlich-Peterson, siendo las isothermas de Langmuir y Redlich-Peterson los que mejor ajustaron el equilibrio de la TMP, en tanto que el equilibrio de la AMP se ajustó mejor por los modelos de Freundlich y Redlich-Peterson.

La capacidad de adsorción de los adsorbentes por AMP y TMP aumentó linealmente con las propiedades de textura. Además, para la TMP se encontró que la acidez de los adsorbentes merma la capacidad de adsorción de los mismos. Esto debido a la desactivación de las interacciones dispersivas  $\pi$ - $\pi$ .

La capacidad de adsorción de la AMP y TMP sobre los adsorbentes F400, F400n y FCA tiene una fuerte dependencia con el pH. Esto deriva del comportamiento de los grupos funcionales en las superficies de los adsorbentes y las cargas que adquieren los adsorbatos por reacciones ácido-base. Para la TMP se presentan interacciones hidrofóbicas una vez que la molécula adquiere carga neutra, además, al aumentar la fuerza iónica los iones en solución aumentan la hidrofobicidad. Adicionalmente, cuando la TMP tiene cargas positivas, presentaron interacciones electrostáticas repulsivas con el carbón F400 y atractivas con la FCA. Para la AMP se tiene una combinación de interacciones electrostáticas atractivas y repulsivas tanto para el carbón F400n y la FCA.

Los experimentos de equilibrio de adsorción a distintas temperaturas develaron que los sistemas de adsorción con TMP son dominados por interacciones físicas. Por otra parte,

los sistemas de adsorción con AMP están sujetos ante todo por una combinación de interacciones físicas y químicas.

Los estudios de equilibrio de adsorción competitiva de AMP y Cd(II) sobre el carbón F400n y la FCA, revelaron un comportamiento antagónico del Cd(II) hacia la AMP en el caso de la FCA y un comportamiento poco interactivo en el caso del carbón F400n. La capacidad de adsorción de AMP sobre la FCA se ve disminuida en presencia del Cd(II) por la competencia de sitios activos, empero la capacidad de adsorción de Cd(II) permanece inamovible. En la adsorción de AMP y Cd(II) sobre el carbón F400n hay un ligero efecto antagónico de la AMP hacia el Cd(II); adicionalmente, la AMP mantiene constante su capacidad de adsorción.

Los tiempos necesarios para llegar al equilibrio de adsorción de AMP y TMP sobre la FCA son de 30 y 80 minutos respectivamente. El equilibrio de AMP sobre el carbón F400n es alcanzado a los 3500 minutos. La velocidad de adsorción del sistema AMP-FCA es controlado únicamente por el transporte externo de masa y en el sistema TMP-FCA es controlado por el transporte intraparticular en el volumen del poro (DVP). Para la adsorción de AMP sobre el carbón F400n, el mecanismo controlante de la velocidad de adsorción es la difusividad intraparticular en el volumen del poro (DVP). Las tortuosidades encontradas para la FCA y el carbón F400n son 2.91 y 4.77, respectivamente. Coincidiendo con lo reportado en la literatura.

**REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS**

- Abdehagh, N., Tezel, F. H., y Thibault, J. (2016). Multicomponent adsorption modeling: Isotherms for ABE model solutions using activated carbon F-400. *Adsorption*, 22(3), 357–370.
- Alekseev, V. G., y Demskaya, L. V. (2007). Ag(I) complexes with the ampicillin, amoxicillin, and cephalixin anions. *Russian Journal of Coordination Chemistry*, 33(3), 203–207.
- Alekseev, V. G., Larin, S. V., Shigina, O. Y., y Shcherbakova, E. E. (2006a). Interaction of ampicillin with zinc and cadmium ions in aqueous solutions. *Russian Journal of General Chemistry*, 76(2), 317–320.
- Alekseev, V. G., Shcherbakova, E. E., Yakubovich, Y. Y., Vorob'ev, N. V., Larin, S. V., y Shigina, O. Y. (2006b). Interaction of ampicillin with Mn(II), Co(II), and Ni(II) ions. *Russian Journal of General Chemistry*, 76(2), 321–324.
- Andreozzi, R. (1999). Advanced oxidation processes (AOP) for water purification and recovery. *Catalysis Today*, 53(1), 51–59.
- Anggraini, M., Kurniawan, A., Ong, L. K., Martin, M. A., Liu, J.-C., Soetaredjo, F. E., Indraswati, N., y Ismadji, S. (2014). Antibiotic detoxification from synthetic and real effluents using a novel MTAB surfactant-montmorillonite (organoclay) sorbent. *RSC Advances*, 4(31), 16298–16311.
- Arnot, J. A., y Gobas, F. A. (2006). A review of bioconcentration factor (BCF) and bioaccumulation factor (BAF) assessments for organic chemicals in aquatic organisms. *Environmental Reviews*, 14(4), 257–297.
- Ayawei, N., Ebelegi, A. N., y Wankasi, D. (2017). Modelling and interpretation of adsorption isotherms. *Journal of Chemistry*, 2017, 1–11.
- Azanu, D., Styriahave, B., Darko, G., Weisser, J. J., y Abaidoo, R. C. (2018). Occurrence and risk assessment of antibiotics in water and lettuce in Ghana. *The Science of the Total Environment*, 622–623, 293–305.
- Babic, B., Milonjic, S., Polovina, M., y Kaludierović, B. (1999). Point zero charge and intrinsic equilibrium constants of activated carbon cloth. *Carbon*, 37, 477–481.

- Babić, S., Horvat, A. J. M., Mutavdžić Pavlović, D., y Kaštelan-Macan, M. (2007). Determination of pKa values of active pharmaceutical ingredients. *TrAC Trends in Analytical Chemistry*, 26(11), 1043–1061.
- Balarak, D., Mostafapour, F., Azarpira, H., y Joghataei, A. (2017). Langmuir, Freundlich, Temkin and Dubinin–Radushkevich isotherms studies of equilibrium sorption of ampicilin unto montmorillonite nanoparticles. *Journal of Pharmaceutical Research International*, 20(2), 1–9.
- Bania, K., Guha, A., Bhattacharyya, P., y Sinha, S. (2013). Effect of substituent and solvent on cation- $\pi$  interactions in benzene and borazine: A computational study. *Dalton transactions*, 43(3), 1769–1784.
- Bedient, P. B., Rifai, H. S., y Newell, C. J. (1999). *Ground Water Contamination: Transport and Remediation*. New Jersey: Prentice Hall PTR.
- Bekçi Molu, Z., y Yurdakoc, K. (2010). Preparation and characterization of aluminum pillared K10 and KSF for adsorption of trimethoprim. *Microporous and Mesoporous Materials*, 127(1-2), 50–60.
- Benarde, M. A., Snow, W. B., Olivieri, V. P., y Davidson, B. (1967). Kinetics and mechanism of bacterial disinfection by chlorine dioxide. *Applied Microbiology*, 15(2), 257–265.
- Bergh, J. J., Breytenbach, J. C., y Wessels, P. L. (1989). Degradation of trimethoprim. *Journal of Pharmaceutical Sciences*, 78(4), 348–350.
- Blaney, L. (2014). Ozone Treatment of Antibiotics in Water. *Water Reclamation and Sustainability* (pp. 265–316).
- Brogden, R. N., Carmine, A. A., Heel, R. C., Speight, T. M., y Avery, G. S. (1982). Trimethoprim: A review of its antibacterial activity, pharmacokinetics and therapeutic use in urinary tract infections. *Drugs*, 23(6), 405–430.
- Builes, S., Sandler, S. I., y Xiong, R. (2013). Isothermic heats of gas and liquid adsorption. *Langmuir*, 29(33), 10416–10422.
- Bungay, P. M., y Brenner, H. (1973). The motion of a closely-fitting sphere in a fluid-filled tube. *International Journal of Multiphase Flow*, 1(1), 25–56.
- Carrales-Alvarado, D. H. (2014). *Equilibrio y cinética de adsorción de nitromidazoles en solución acuosa sobre materiales carbonosos*. (Tesis inédita de maestría). Universidad Autónoma de San Luis Potosí.



- Carrales-Alvarado, D. H., Ocampo-Pérez, R., Leyva-Ramos, R., y Rivera-Utrilla, J. (2014). Removal of the antibiotic metronidazole by adsorption on various carbon materials from aqueous phase. *Journal of Colloid and Interface Science*, 436, 276–285.
- Chitongo, R., Opeolu, B. O., y Olatunji, O. S. (2019). Abatement of amoxicillin, ampicillin, and chloramphenicol from aqueous solutions using activated carbon prepared from grape slurry. *CLEAN – Soil, Air, Water*, 47(2), 1800077.
- Clifford, Dennis., Subramonian, Suresh., y Sorg, T. J. (1986). Water treatment processes. III. Removing dissolved inorganic contaminants from water. *Environmental Science & Technology*, 20(11), 1072–1080.
- Daughton C G, y Ternes T A. (1999). Pharmaceuticals and personal care products in the environment: Agents of subtle change? *Environmental Health Perspectives*, 107(suppl 6), 907–938.
- de Barros, A. L. C., Schmidt, F. F., de Aquino, S. F., y Afonso, R. J. de C. F. (2018). Determination of nine pharmaceutical active compounds in surface waters from Paraopeba River Basin in Brazil by LTPE-HPLC-ESI-MS/MS. *Environmental Science and Pollution Research International*, 25(20), 19962–19974.
- Dechadilok, P., y Deen, W. M. (2006). Hindrance factors for diffusion and convection in pores. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 45(21), 6953–6959.
- Díaz-Flores, P. E. (2006). *Equilibrio y cinética de adsorción de compuestos tóxicos en solución acuosa sobre materiales novedosos*. (Tesis inédita de doctorado). Universidad Autónoma de San Luis Potosí.
- Dodd, M. C., y Huang, C.-H. (2007). Aqueous chlorination of the antibacterial agent trimethoprim: Reaction kinetics and pathways. *Water Research*, 41(3), 647–655.
- Domínguez, J., González, T., Palo, P., y Cuerda-Correa, E. M. (2011). Removal of common pharmaceuticals present in surface waters by amberlite xad-7 acrylic-ester-resin: Influence of pH and presence of other drugs. *Desalination*, 269(1–3), 231–238.
- Eggen, T., y Vogelsang, C. (2015). Occurrence and Fate of Pharmaceuticals and Personal Care Products in Wastewater. En E. Y. Zeng (Ed.), *Comprehensive Analytical Chemistry* (Vol. 67, pp. 245–294).

- Eliopoulos, G. M., y Huovinen, P. (2001). Resistance to trimethoprim-sulfamethoxazole. *Clinical Infectious Diseases*, 32(11), 1608–1614.
- Fekadu, S., Alemayehu, E., Dewil, R., y Van der Bruggen, B. (2019). Pharmaceuticals in freshwater aquatic environments: A comparison of the African and European challenge. *The Science of the Total Environment*, 654, 324–337.
- Fernandes, R., Amador, P., y Prudêncio, C. (2013).  $\beta$ -Lactams: chemical structure, mode of action and mechanisms of resistance. *Reviews in Medical Microbiology*, 24(1), 7–17.
- Foo, K. Y., y Hameed, B. (2010). Insights into Modeling of Adsorption Isotherm Systems. *Chemical Engineering Journal*, 156(1), 2–10.
- Furusawa, T., y Smith, J. M. (1973). Fluid-particle and intraparticle mass transport rates in slurries. *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals*, 12(2), 197–203.
- Girish, C. R. (2017). Various isotherm models for multicomponent adsorption: A review. *International Journal of Civil Engineering and Technology*, 8(10), 80–86.
- Huovinen, P., Sundstrom, L., Swedberg, G., y Skold, O. (1995). Trimethoprim and sulfonamide resistance. *Antimicrobial Agents and Chemotherapy*, 39(2), 279–289.
- Caviedes Rubio, D.I., Delgado, D., y Olaya Amaya, A. (2017). Normatividad ambiental dirigida a regular la presencia de los productos farmacéuticos residuales en ambientes acuáticos. *Revista Jurídica Piélagus*, 16(1), 121–130.
- Kibuye, F. A., Gall, H. E., Elkin, K. R., Ayers, B., Veith, T. L., Miller, M., Jacob, S., Hayden, K. R., Watson, J. E., y Elliott, H. A. (2019). Fate of pharmaceuticals in a spray-irrigation system: From wastewater to groundwater. *The Science of the Total Environment*, 654, 197–208.
- Kimosop, S., Getenga, Z., Orata, F., Okello, V., y K. Cheruiyot, J. (2016). Residue levels and discharge loads of antibiotics in wastewater treatment plants (WWTPs), hospital lagoons, and rivers within Lake Victoria Basin, Kenya. *Environmental Monitoring and Assessment*, 188(9), 532.
- Kolar, B., Arnus, L., Jeretin, B., Gutmaher, A., Drobne, D., y Durjava, M. K. (2014). The toxic effect of oxytetracycline and trimethoprim in the aquatic environment. *Chemosphere*, 115, 75–80.
- Kulkarni, P., Olson, N. D., Raspanti, G. A., Goldstein, R. E. R., Gibbs, S. G., Sapkota, A., y Sapkota, A. R. (2017). Antibiotic concentrations decrease during wastewater

- treatment but persist at low levels in reclaimed water. *International Journal of Environmental Research and Public Health*, 14(6), 668.
- Kurt, A., Mert, B. K., Özengin, N., y Yonar, Ö. S. and T. (2017). Treatment of Antibiotics in Wastewater Using Advanced Oxidation Processes (AOPs). En Farooq, R. (Ed), *Physico-Chemical Wastewater Treatment and Resource Recovery* (pp. 175–211).
- Lapshin, S. V., y Alekseev, V. G. (2009). Copper(II) complexation with ampicillin, amoxicillin, and cephalexin. *Russian Journal of Inorganic Chemistry*, 54(7), 1066–1069.
- Lawal, I. A., y Moodley, B. (2017). Sorption mechanism of pharmaceuticals from aqueous medium on ionic liquid modified biomass. *Journal of Chemical Technology & Biotechnology*, 92(4), 808–818.
- Leyva-Ramos, R. (2017). Importancia y aplicaciones de la adsorción en fase líquida: sólidos porosos, preparación, caracterización y aplicaciones. *Ediciones Universidad de los Andes*, Bogotá, Colombia.
- Leyva-Ramos, R. (2010). Fundamentos de adsorción en sistemas líquido-sólido. IBEROARSEN, *Tecnologías económicas para el abatimiento de arsénico en aguas* (pp.43-50), CYTED, Argentina.
- Leyva-Ramos, R., y Geankoplis, C. J. (1985). Model simulation and analysis of surface diffusion of liquids in porous solids. *Chemical Engineering Science*, 40(5), 799–807.
- Leyva-Ramos, R., y Geankoplis, C. J. (1994). Diffusion in liquid-filled pores of activated carbon. I. Pore volume diffusion. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, 72(2), 262–271.
- Leyva-Ramos, R., Rangel-Mendez, J. R., Bernal-Jacome, L. A., y Mendoza, M. B. (2005). Intraparticle diffusion of cadmium and zinc ions during adsorption from aqueous solution on activated carbon. *Journal of Chemical Technology & Biotechnology*, 80(8), 924–933.
- Li, J., H.L. Ng, D., Song, P., Kong, C., Song, Y., y Yang, P. (2015). Preparation and characterization of high-surface-area activated carbon fibers from silkworm cocoon waste for congo red adsorption. *Biomass and Bioenergy*, 75, 189–200.

- Lin, A. Y.-C., Yu, T.-H., y Lateef, S. K. (2009). Removal of pharmaceuticals in secondary wastewater treatment processes in Taiwan. *Journal of Hazardous Materials*, 167(1–3), 1163–1169.
- Lippens, B. C., y de Boer, J. H. (1965). Studies on pore systems in catalysts: V. The t method. *Journal of Catalysis*, 4(3), 319–323.
- Liu, F., Ying, G.-G., Tao, R., Zhao, J.-L., Yang, J.-F., y Zhao, L.-F. (2009). Effects of six selected antibiotics on plant growth and soil microbial and enzymatic activities. *Environmental Pollution*, 157(5), 1636–1642.
- Liu, H., Zhang, J., Bao, N., Cheng, C., Ren, L., y Zhang, C. (2012). Textural properties and surface chemistry of lotus stalk-derived activated carbons prepared using different phosphorus oxyacids: Adsorption of trimethoprim. *Journal of Hazardous Materials*, 235–236, 367–375.
- Lowell, S., Shields, J., Thomas, M., y Thommes, M. (2004). *Characterization of Porous Solids and Powders: Surface Area, Pore Size and Density*. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht.
- Luo, X., Zheng, Z., Greaves, J., Cooper, W. J., y Song, W. (2012). Trimethoprim: Kinetic and mechanistic considerations in photochemical environmental fate and AOP treatment. *Water Research*, 46(4), 1327–1336.
- Matsuo, H., Sakamoto, H., Arizono, K., y Shinohara, R. (2011). Behavior of pharmaceuticals in waste water treatment plant in Japan. *Bulletin of Environmental Contamination and Toxicology*, 87(1), 31–35.
- Moral-Rodríguez, A. I. (2014). *Remoción de compuestos farmacéuticos del agua por medio de adsorción sobre carbón activado granular*. (Tesis inédita de maestría). Universidad Autónoma de San Luis Potosí.
- Moral-Rodríguez, A. I. (2019). *Síntesis y modificación de materiales carbonosos para eliminar compuestos farmacéuticos del agua*. (Tesis inédita de doctorado). Universidad Autónoma de San Luis Potosí.
- Nielsen, L., y Badosz, T. (2016). Analysis of the Competitive Adsorption of Pharmaceuticals on Waste Derived Materials. *Chemical Engineering Journal*, 287, 139–147.

- Ocampo-Pérez, R. (2011). *Modelado de las cinéticas de adsorción y aplicación de procesos de oxidación avanzada para la eliminación de contaminantes orgánicos en solución acuosa*. (Tesis inédita de doctorado). Universidad Autónoma de San Luis Potosí.
- Prabhasankar, V. P., Joshua, D. I., Balakrishna, K., Siddiqui, I. F., Taniyasu, S., Yamashita, N., Kannan, K., Akiba, M., Praveenkumarreddy, Y., y Guruge, K. S. (2016). Removal rates of antibiotics in four sewage treatment plants in South India. *Environmental Science and Pollution Research International*, 23(9), 8679–8685.
- Prahas, D., Liu, J. C., Ismadji, S., y Wang, M.-J. (2012). Adsorption of tetramethylammonium hydroxide on activated carbon. *Journal of Environmental Engineering*, 138(3), 232–238.
- Radovic, L., Moreno-Castilla, C., y Rivera-Utrilla, J. (2000). Carbon materials as adsorbents in aqueous solutions. *Chemistry and Physics of Carbon*, 27, 227–405.
- Raynor, B. D. (1997). Penicillin and ampicillin. *Primary Care Update for OB/GYNs*, 4(4), 147–152.
- Renkin, E. M. (1956). Filtration, diffusion, and molecular sieving through porous cellulose membranes. *Journal of General Physiology*, 39(5), 820–820.
- Rodríguez-Reinoso, F. Marsh H., y Heintz E.A. (1997). *Introduction to Carbon Technologies*. Alicante: Publicaciones de la Universidad de Alicante.
- Satterfield, C. N., Colton, C. K., y Pitcher, W. H. (1973). Restricted diffusion in liquids within fine pores. *AIChE Journal*, 19(3), 628–635.
- Serna-Galvis, E. A., Botero-Coy, A. M., Martínez-Pachón, D., Moncayo-Lasso, A., Ibáñez, M., Hernández, F., y Torres-Palma, R. A. (2019). Degradation of seventeen contaminants of emerging concern in municipal wastewater effluents by sonochemical advanced oxidation processes. *Water Research*, 154, 349–360.
- Simate, G. S., y Ndlovu, S. (2014). Acid mine drainage: Challenges and opportunities. *Journal of Environmental Chemical Engineering*, 2(3), 1785–1803.
- Stoeckli, F., y Ballerini, L. (1991). Evolution of microporosity during activation of carbon. *Fuel*, 70(4), 557–559.
- Stumm, W., y Morgan, J. J. (1996). *Aquatic chemistry: chemical equilibria and rates in natural waters*. New York: Wiley.

- Tella, A., y Obaleye, J. (2010). Metal-chelator therapy: Stability constants of transition metal complexes of pyrimidine and sulphonamide drugs. *Int. J. Chem. Sci.*, 8(3), 1675–1683.
- Tella, A., y Obaleye, J. (2011). Synthesis and biological studies of Co(II) and Cd(II) 5-(3,4,5-trimethoxybenzyl) pyrimidine-2,4-diamine (Trimethoprim) complexes. *International Journal of Biological and Chemical Sciences*, 4(6).
- Thommes, M., Kaneko, K., Neimark, A. V., Olivier, J. P., Rodriguez-Reinoso, F., Rouquerol, J., y Sing, K. S. W. (2015). Physisorption of gases, with special reference to the evaluation of surface area and pore size distribution (IUPAC Technical Report). *Pure and Applied Chemistry*, 87(9–10), 1051–1069.
- Valdez-García, G. D. (2019). *Equilibrio y cinética de adsorción de cadmio (II) y plomo (II) en solución acuosa sobre novedosos materiales de carbono*. (Tesis inédita de maestría). Universidad Autónoma de San Luis Potosí.
- Young, S., Balluz, L., y Malilay, J. (2004). Natural and technologic hazardous material releases during and after natural disasters: A review. *Science of the Total Environment*, 322(1–3), 3–20.
- Zacarías, V. H. R., Machuca, M. A. V., Soto, J. L. M., Equihua, J. L. P., Cardona, A. A. V., Calvillo, M. D. L., y González, J. V. (2017). Hidroquímica y contaminantes emergentes en aguas residuales urbano industriales de Morelia, Michoacán, México. *Revista Internacional de Contaminación Ambiental*, 33(2), 221–235.

*NOMENCLATURA*

%D	Porcentaje de desviación, %.
% $\bar{D}$	Porcentaje de desviación promedio, %.
Abs	Absorbancia, uA.
$A_p$	Área proyectada de la molécula del $N_2$ , $nm^2/molécula$ .
$A_r$	Área de pico, uA.
a	Constante de la isoterma de adsorción de Redlich-Peterson, L/g
$a_{ij}$	Constante de competitividad del modelo SRS.
b	Constante de la isoterma de adsorción de Redlich-Peterson, $L^\beta/mg^\beta$ .
$C_A$	Concentración del soluto en solución acuosa, mg/L.
$C_{A0}$	Concentración inicial del soluto en solución acuosa, mg/L.
$C_{Ae}$	Concentración en el equilibrio de las cinéticas de adsorción, mg/L.
$C_{AMP}$	Concentración de AMP, mg/L.
$C_{Ar}$	Concentración del soluto dentro de los poros de la partícula a una distancia r, mg/L.
$C_{Ar} _{r=R}$	Concentración del soluto en la superficie externa de la partícula, mg/L.
$C_f$	Concentración final del soluto en el equilibrio de adsorción, mg/L.
$C_{ft}$	Concentración final de la solución neutralizante, eq/L.
$C_{in}$	Concentración inicial de la solución neutralizante, eq/L.
$C_N$	Concentración de la solución neutralizante, mol/L.
$C_S$	Carga superficial, $C/m^2$ .
$C_{Sact}$	Concentración de los sitios activos, (meq)/g.
$C_T$	Concentración de la solución titulante, eq/L
$C_{TMP}$	Concentración de TMP, mg/L.
$C_0$	Concentración inicial del soluto, mg/L.
$C_1$	Concentración del adsorbato a la temperatura $T_1$ a un cierto valor de q, mg/L.
$C_2$	Concentración del adsorbato a la temperatura $T_2$ al mismo valor de q, mg/L.
C	Concentración del soluto en el equilibrio, mg/L.
$D_{AB}$	Difusividad molecular del componente A en el solvente B, $cm^2/s$ .

$D_{ep}$	Coeficiente de difusión efectivo, $\text{cm}^2/\text{s}$ .
$(D_{ep})_p$	Coeficiente de difusión efectivo optimizado, $\text{cm}^2/\text{s}$ .
$D_{es}$	Coeficiente de difusión superficial, $\text{cm}^2/\text{s}$ .
$d_f$	Diámetro de la fibrilla, $\text{cm}$ .
$D_p$	Diámetro promedio de poros, $\text{nm}$ .
$E_0$	Energía de adsorción, $\text{kJ/mol}$ .
$F_d$	Factor de dilución.
$F$	Constante de Faraday, $\text{C/mol}$ .
$K_{e,i}$	Constante de la isoterma de adsorción de Langmuir multicomponente, $\text{L/mmol}$ .
$k_f$	Constante de la isoterma de adsorción de Freundlich, $\text{mg}^{1-1/n} \text{L}^{1/n}/\text{g}$ .
$k_H$	Constante de la isoterma de adsorción de Henry, $\text{L/g}$ .
$k_L$	Coeficiente de transporte externo de masa, $\text{cm/s}$ .
$(k_L)_p$	Coeficiente de transporte externo de masa optimizado, $\text{cm/s}$ .
$K_p$	Parámetro de restricción por exclusión.
$K_r$	Parámetro de restricción por fricción.
$K$	Constante de equilibrio de la isoterma de adsorción de Langmuir, $\text{L/mg}$ .
$L_0$	Anchura de microporos, $\text{nm}$ .
$M_B$	Peso molecular del solvente, $\text{g/mol}$ .
$m$	masa del adsorbente, $\text{g}$ .
$N_A$	Número de Avogadro, $\text{moléculas/mol}$ .
$N_{Sh}$	Número de Sherwood.
$N_{Sc}$	Numero de Schmidt.
$N_{Re}$	Número de Reynolds.
$n$	Intensidad de adsorción.
$P_0$	Presión de vapor del $\text{N}_2$ a $77\text{K}$ y $1\text{atm}$ , $\text{atm}$ .
$P$	Presión de $\text{N}_2$ en el equilibrio, $\text{atm}$ .
$q_e$	Masa de soluto adsorbida en el equilibrio cinético, $\text{mg/g}$ .
$q_{H^+}$	Concentración de protones adsorbidos a un cierto $\text{pH}$ , $\text{mol/g}$ .
$q_{\max}$	Constante del modelo LME relacionada con la capacidad máxima de adsorción, $\text{mmol/g}$ .



$q_m$	Constante de la isoterma de adsorción de Langmuir que indica la máxima capacidad de adsorción del adsorbente, mg/g.
$q_0$	Masa del soluto adsorbida a la concentración inicial, mg/g.
$Q$	Flujo volumétrico como, $\text{cm}^3/\text{s}$ .
$q$	Masa de soluto adsorbido en el equilibrio, mg/g.
$R_e$	Radio de una partícula de carbón activado, cm.
Rpm	Revoluciones por minuto.
$R$	Radio total de la partícula, cm.
$r$	Distancia radial, cm.
$S_{\text{BET}}$	Área BET, $\text{m}^2/\text{g}$ .
$S_{\text{ext}}$	Área externa, $\text{m}^2/\text{g}$ .
$S_{\text{micDR}}$	Área de los microporos DR, $\text{m}^2/\text{g}$ .
$S$	Área externa por unidad de masa del adsorbente, $\text{cm}^2/\text{g}$ .
TOC	Concentración de carbono orgánico total, mg/L TOC.
$t$	Tiempo.
$V_A$	Volumen de la solución valorada de HCl/NaOH necesario para alcanzar el equilibrio en la curva potenciométrica del material, mL.
$V_{\text{ads}}$	Volumen de $\text{N}_2$ gas adsorbido cuando $P/P_0 = 0.98$ , $\text{cm}^3/\text{g}$ .
$V_B$	Volumen de la solución valorada de HCl/NaOH necesario para alcanzar el equilibrio en la curva de referencia, mL.
$V_{\text{in}}$	Volumen inicial de la solución neutralizante, L.
$V_m$	Volumen de $\text{N}_2$ adsorbido que forma una monocapa, $\text{cm}^3/\text{g}$ .
$V_{\text{N}_2}$	Volumen de $\text{N}_2$ gas adsorbido a una determinada presión de equilibrio, $\text{cm}^3/\text{g}$ .
$V_p$	Volumen promedio de poros, $\text{cm}^3/\text{g}$ .
$V_0$	Volumen inicial de solución, L.
$W_0$	Volumen total de los microporos, $\text{cm}^3/\text{g}$ .
$W$	Volumen de $\text{N}_2$ líquido adsorbido a una determinada presión de equilibrio, $\text{cm}^3/\text{g}$ .
$x_i$	Constante de competitividad del modelo FME.
$y_i$	Constante de competitividad del modelo FME, $(\text{mmol/L})^{x_i-z_i}$ .
$z_i$	Constante de competitividad del modelo FME.

## Letras griegas

$\alpha$	Parámetro adimensional de los modelos de transferencia de masa.
$\beta$	Constante de la isoterma de adsorción de Redlich-Peterson.
$\gamma_L$	Parámetro adimensional de la isoterma de adsorción de Langmuir.
$\gamma_p$	Parámetro adimensional de la isoterma de adsorción de Redlich-Peterson.
$(\Delta H_{ads})_q$	Calor isostérico de adsorción a una $q$ determinada, J/mol.
$\epsilon_p$	Fracción hueca de las partículas.
$\eta_A$	Concentración adimensional dentro de los poros de la partícula.
$\eta_B$	Viscosidad del solvente, cp.
$\eta_i$	Parámetro de interacción de los modelos MLM $\eta_i$ y MRPM $\eta_i$ .
$\theta$	Tiempo adimensional.
$\lambda$	Cociente entre el diámetro de la molécula y el diámetro promedio de los poros.
$\xi$	Radio de la partícula adimensional.
$\rho_p$	Densidad de las partículas del adsorbente, g/cm <sup>3</sup> .
$\rho_s$	Densidad del sólido, cm <sup>3</sup> /g.
$\tau$	Tortuosidad.
$\phi_A$	Concentración adimensional en el seno de la solución.
$\phi$	Parámetro adimensional de disociación del solvente.
$\chi_1$	Difusividad efectiva adimensional.
$\chi_2$	Difusividad superficial adimensional.
$\psi$	Parámetro adimensional de los modelos de transferencia de masa.
$\omega$	Parámetro adimensional de los modelos de transferencia de masa.



*APÉNDICE A*  
*CURVAS DE CALIBRACIÓN PARA LA CUANTIFICACIÓN DE AMPICILINA,*  
*TRIMETOPRIMA Y CADMIO (II)*



**Tabla A.1.** C1AM. AMP a T = 25 °C, pH = 5 y I = 0.01 N (NaOH/HCl).

<i>Concentración</i> (mg/L)	<i>Área de</i> <i>Pico (uA)</i>	<i>Concentración</i> <i>Calculada (mg/L)</i>	<b>%D</b>	<b>%D̄</b>
4	179504.4	1.84	54.1	11.2
6	257121.3	4.98	17.0	
10	397260.4	10.66	6.6	
25	805122.8	27.18	8.7	
100	2582197.3	99.18	0.8	
150	3903505.7	152.71	1.8	
200	5052206.2	199.25	0.4	
300	7518862.3	299.19	0.3	

$$C_{AMP} = 4.05151 \times 10^{-5} Ar - 5.4364$$

**Tabla A.2.** C2AM. AMP a T = 25 °C, pH = 7 y I = 0.01 N (NaOH/HCl).

<i>Concentración</i> (mg/L)	<i>Área de</i> <i>Pico (uA)</i>	<i>Concentración</i> <i>Calculada (mg/L)</i>	<b>%D</b>	<b>%D̄</b>
4	176870.5	0.38	90.5	18.8
6	258124.6	3.73	37.8	
10	412111.5	10.09	0.9	
25	884891.6	29.61	18.4	
100	2590447.6	100.02	0.0	
150	3861815.7	152.51	1.7	
200	5040718.4	201.18	0.6	
300	7373307.3	297.48	0.8	

$$C_{AMP} = 4.1284 \times 10^{-5} Ar - 6.9237$$

**Tabla A.3.** C3AM. AMP a T = 25 °C, pH = 9 y I = 0.01 N (NaOH/HCl).

<i>Concentración</i> (mg/L)	<i>Área de</i> <i>Pico (uA)</i>	<i>Concentración</i> <i>Calculada (mg/L)</i>	<i>%D</i>	<i>%D̄</i>
3	143052.4	0.97	67.5	
7	317154.4	8.26	18.0	
10	438347.9	13.33	33.3	
20	502617.1	16.01	19.9	
100	2503622.1	99.71	0.3	17.7
150	3786485.7	153.37	2.2	
200	4897172.8	199.83	0.1	
300	7256452.6	298.51	0.5	

$$C_{AMP} = 4.1828 \times 10^{-5} A_r - 5.0093$$

**Tabla A.4.** C4AM. AMP a T = 25 °C, pH = 5 y I = 0.01 N (NaOH/HCl).

<i>Concentración</i> (mg/L)	<i>TOC (ppm)</i>	<i>Concentración</i> <i>Calculada (mg/L)</i>	<i>%D</i>	<i>%D̄</i>
1	2.105	1.07	6.9	
3	3.101	3.00	0.1	
7	5.261	7.18	2.5	
10	7.519	11.54	15.4	
15	10.01	16.36	9.1	
25	14.22	24.51	2.0	3.8
50	26.72	48.70	2.6	
100	52.22	98.04	2.0	
150	78.46	148.81	0.8	
200	105.4	200.94	0.5	
250	131.2	250.86	0.3	

$$C_{AMP} = 1.9349 TOC - 3.0040$$

**Tabla A.5.** C5AM. AMP a T = 25 °C, pH = 5 y I = 0.01 N (NaOH/HCl).

<i>Concentración (mg/L)</i>	<i>TOC (ppm)</i>	<i>Concentración Calculada (mg/L)</i>	<i>%D</i>	<i>%D̄</i>
50	26.7	46.44	7.1	
100	52.2	97.95	2.0	
150	78.5	150.96	0.6	3.0
200	105.4	205.39	2.7	
250	131.2	257.51	3.0	
350	172.9	341.75	2.4	

$$C_{AMP} = 2.0202TOC - 7.5414$$

**Tabla A.6.** C1TM. TMP a T = 25 °C, pH = 7 y I = 0.01 N (NaOH/HCl).

<i>Concentración (mg/L)</i>	<i>Absorbancia (uA)</i>	<i>Concentración Calculada (mg/L)</i>	<i>%D</i>	<i>%D̄</i>
0.45	0.009	0.41	9.3	
1.5	0.032	1.45	3.2	
3	0.068	3.08	2.8	2.4
7.5	0.17	7.71	2.8	
15	0.33	14.97	0.2	
30	0.657	29.80	0.7	
45	0.99	44.91	0.2	
60	1.326	60.15	0.2	

$$C_{TMP} = 45.3594Abs$$

**Tabla A.7.** C2TM. TMP a T = 25 °C, pH = 7 y I = 0.01 N (NaOH/HCl).

<i>Concentración</i> (mg/L)	<i>Absorbancia</i> ( $\mu$ A)	<i>Concentración</i> <i>Calculada</i> (mg/L)	<b>%D</b>	<b>% <math>\bar{D}</math></b>
0.45	0.01	0.47	3.9	1.6
1.5	0.031	1.45	3.3	
3	0.064	2.99	0.2	
7.5	0.157	7.34	2.1	
15	0.313	14.64	2.4	
30	0.64	29.93	0.2	
45	0.958	44.81	0.4	
60	1.289	60.29	0.5	

$$C_{\text{TMP}} = 46.7697\text{Abs}$$

**Tabla A.8.** C3TM. TMP a T = 25 °C, pH = 4 y I = 0.01 N (NaOH/HCl).

<i>Concentración</i> (mg/L)	<i>Absorbancia</i> ( $\mu$ A)	<i>Concentración</i> <i>Calculada</i> (mg/L)	<b>%D</b>	<b>% <math>\bar{D}</math></b>
0.45	0.008	0.40	11.7	10.8
1.5	0.036	1.79	19.2	
3	0.067	3.33	10.9	
7.5	0.19	9.44	25.8	
15	0.334	16.59	10.6	
30	0.631	31.34	4.5	
45	0.914	45.40	0.9	
60	1.171	58.17	3.1	

$$C_{\text{TMP}} = 49.6731\text{Abs}$$

**Tabla A.9.** C4TM. TMP a T = 25 °C, pH = 7 y I = 0.01 N (NaOH/HCl).

<i>Concentración</i> (mg/L)	<i>Absorbancia</i> ( $\mu$ A)	<i>Concentración</i> <i>Calculada</i> (mg/L)	<b>%D</b>	<b>% <math>\bar{D}</math></b>
0.45	0.008	0.37	16.8	
1.5	0.029	1.36	9.5	
3	0.06	2.81	6.4	
7.5	0.151	7.07	5.7	5.6
15	0.305	14.28	4.8	
30	0.635	29.73	0.9	
45	0.96	44.95	0.1	
60	1.29	60.40	0.7	

$$C_{\text{TMP}} = 46.8229\text{Abs}$$

**Tabla A.10.** C5TM. TMP a T = 25 °C, pH = 10 y I = 0.01 N (NaOH/HCl)

<i>Concentración</i> (mg/L)	<i>Absorbancia</i> ( $\mu$ A)	<i>Concentración</i> <i>Calculada</i> (mg/L)	<b>%D</b>	<b>% <math>\bar{D}</math></b>
0.45	0.012	0.49	8.7	
1.5	0.039	1.59	6.0	
3	0.078	3.18	6.0	
7.5	0.191	7.79	3.9	3.4
15	0.372	15.17	1.1	
30	0.741	30.22	0.7	
45	1.104	45.02	0.0	
60	1.466	59.78	0.4	

$$C_{\text{TMP}} = 40.7790\text{Abs}$$



**Tabla A.11.** C6TM. TMP a T = 25 °C, pH = 4 y I = 0.5 N (NaOH/HCl).

<i>Concentración</i> (mg/L)	<i>Absorbancia</i> ( $\mu$ A)	<i>Concentración</i> <i>Calculada</i> (mg/L)	<b>%D</b>	<b>% <math>\bar{D}</math></b>
0.45	0.007	0.36	20.2	
1.5	0.029	1.49	0.8	
3	0.061	3.13	4.3	
7.5	0.152	7.80	3.9	3.8
15	0.291	14.92	0.5	
30	0.587	30.10	0.3	
45	0.874	44.82	0.4	
60	1.171	60.05	0.1	

$$C_{\text{TMP}} = 51.2848\text{Abs}$$

**Tabla A.12.** C7TM. TMP a T = 25 °C, pH = 7 y I = 0.5 N (NaOH/HCl).

<i>Concentración</i> (mg/L)	<i>Absorbancia</i> ( $\mu$ A)	<i>Concentración</i> <i>Calculada</i> (mg/L)	<b>%D</b>	<b>% <math>\bar{D}</math></b>
0.45	0.008	0.39	13.9	
1.5	0.019	0.92	38.7	
3	0.05	2.42	19.3	
7.5	0.152	7.36	1.8	9.6
15	0.305	14.77	1.5	
30	0.624	30.22	0.7	
45	0.926	44.85	0.3	
60	1.241	60.11	0.2	

$$C_{\text{TMP}} = 48.4334\text{Abs}$$

**Tabla A.13.** C8TM. TMP a T = 25 °C, pH = 10 y I = 0.5 N (NaOH/HCl).

<i>Concentración (mg/L)</i>	<i>Absorbancia (uA)</i>	<i>Concentración Calculada (mg/L)</i>	<i>%D</i>	<i>% D̄</i>
0.45	0.011	0.45	0.1	2.4
1.5	0.036	1.47	1.7	
3	0.078	3.19	6.5	
7.5	0.201	8.23	9.7	
15	0.365	14.95	0.4	
30	0.736	30.14	0.5	
45	1.098	44.96	0.1	
60	1.462	59.86	0.2	

$$C_{\text{TMP}} = 40.9470\text{Abs}$$

**Tabla A.14.** C1Cd. Cd(II) a T = 25 °C, pH = 5 y I = 0.5 N (NaOH/HCl).

<i>Concentración (mg/L)</i>	<i>Absorbancia (uA)</i>	<i>Concentración Calculada (mg/L)</i>	<i>%D</i>	<i>% D̄</i>
0	-0.0001	-0.28	----	3
20	0.0084	20.01	0.1	
50	0.0222	53.5	7.0	
100	0.0392	94.88	5.1	
200	0.0772	188.55	5.7	
275	0.113	276.84	0.7	
350	0.1469	359.51	2.7	
450	0.1895	460.72	2.4	
550	0.2296	551.52	0.3	
620	0.2559	608.1	1.9	

$$C_{\text{Cd}} = \frac{\text{Abs}}{0.00072\text{Abs}^2 - 0.00018\text{Abs} + 0.00042}$$

**Tabla A.15.** C2Cd. Cd(II) a T = 25 °C, pH = 5 y I = 0.5 N (NaOH/HCl).

<i>Concentración (mg/L)</i>	<i>Absorbancia (uA)</i>	<i>Concentración Calculada (mg/L)</i>	<i>%D</i>	<i>% <math>\bar{D}</math></i>
0	-0.0004	-0.40	-----	
20	0.0175	19.70	1.5	
50	0.0458	52.13	4.3	
100	0.0883	101.90	1.9	
200	0.1653	195.22	2.4	1.8
350	0.284	344.42	1.6	
450	0.3718	456.76	1.5	
550	0.4467	552.37	0.4	
620	0.498	616.98	0.5	

$$C_{Cd} = \frac{Abs}{0.00032Abs^2 - 0.00033Abs + 0.00089}$$

**Tabla A.16.** C3Cd. Cd(II) a T = 25 °C, pH = 5 y I = 0.5 N (NaOH/HCl).

<i>Concentración (mg/L)</i>	<i>Absorbancia (uA)</i>	<i>Concentración Calculada (mg/L)</i>	<i>%D</i>	<i>% <math>\bar{D}</math></i>
0	-0.0002	-0.28	-----	
5	0.0043	5.19	3.8	
20	0.0152	18.64	6.8	
50	0.0404	50.66	1.3	
100	0.0762	98.53	1.5	
200	0.1435	194.00	3.0	2.7
350	0.251	352.56	0.7	
450	0.3324	466.36	3.6	
550	0.406	556.33	1.2	
620	0.4513	603.49	2.7	

$$C_{Cd} = \frac{Abs}{0.00142Abs^2 - 0.00082Abs + 0.00083}$$

**Tabla A.17.** C4Cd. Cd(II) a T = 25 °C, pH = 5 y I = 0.5 N (NaOH/HCl).

<i>Concentración</i> (mg/L)	<i>Absorbancia</i> ( $\mu$ A)	<i>Concentración</i> <i>Calculada</i> (mg/L)	<b>%D</b>	<b>% <math>\bar{D}</math></b>
0	-0.0007	-0.79	-----	
50	0.0411	50.66	1.3	
100	0.0796	99.93	0.1	0.5
200	0.154	198.87	0.6	
275	0.2094	274.51	0.2	
350	0.2651	350.48	0.1	

$$C_{Cd} = \frac{Abs}{0.00065Abs^2 - 0.00045Abs + 0.00083}$$

**Tabla A.18.** C5Cd. Cd(II) a T = 25 °C, pH = 5 y I = 0.5 N (NaOH/HCl).

<i>Concentración</i> (mg/L)	<i>Absorbancia</i> ( $\mu$ A)	<i>Concentración</i> <i>Calculada</i> (mg/L)	<b>%D</b>	<b>% <math>\bar{D}</math></b>
0	-0.0002	-0.26	-----	
20	0.0175	20.51	2.6	
50	0.0458	54.29	8.6	
100	0.0883	106.11	6.1	
200	0.1653	203.29	1.6	4.4
350	0.284	358.67	2.5	
450	0.3718	475.55	5.7	
550	0.4467	575.21	4.6	
620	0.498	642.50	3.6	
50	0.0441	52.22	4.4	

$$C_{Cd} = \frac{Abs}{0.00032Abs^2 - 0.00033Abs + 0.00086}$$

**Tabla A.19.** C6Cd. Cd(II) a T = 25 °C, pH = 5 y I = 0.5 N (NaOH/HCl).

<i>Concentración (mg/L)</i>	<i>Absorbancia (uA)</i>	<i>Concentración Calculada (mg/L)</i>	<i>%D</i>	<i>% D̄</i>
0	0.0006	0.74	----	
5	0.0043	5.38	7.6	
20	0.0152	19.34	3.3	
50	0.0404	52.56	5.1	
100	0.0762	102.22	2.2	
200	0.1435	201.26	0.6	4.1
350	0.251	365.77	4.5	
450	0.3324	483.82	7.5	
550	0.406	577.17	4.9	
620	0.4513	626.09	1.0	
5	0.0041	5.20	4.0	

$$C_{Cd} = \frac{Abs}{0.00142Abs^2 - 0.00082Abs + 0.000801}$$

**Tabla A.20.** C7Cd. Cd(II) a T = 25 °C, pH = 5 y I = 0.5 N (NaOH/HCl).

<i>Concentración (mg/L)</i>	<i>Absorbancia (uA)</i>	<i>Concentración Calculada (mg/L)</i>	<i>%D</i>	<i>% D̄</i>
0	-0.0006	-0.90	----	
20	0.0136	18.62	6.9	
50	0.0424	55.21	10.4	
100	0.0857	105.30	5.3	5.8
200	0.1657	193.08	3.5	
350	0.2776	332.55	5.0	
450	0.3548	466.10	3.6	

$$C_{Cd} = \frac{Abs}{-0.00399Abs^2 + 0.00156Abs + 0.00071}$$

**Tabla A.21.** C8Cd. Cd(II) a T = 25 °C, pH = 5 y I = 0.5 N (NaOH/HCl).

<i>Concentración (mg/L)</i>	<i>Absorbancia (<math>\mu</math>A)</i>	<i>Concentración Calculada (mg/L)</i>	<b>%D</b>	<b>% <math>\bar{D}</math></b>
0	-0.0006	-1.03	----	
20	0.0108	19.83	0.9	
50	0.0286	52.78	5.6	
100	0.052	96.95	3.1	2.3
350	0.1777	342.45	2.2	
450	0.2383	460.38	2.3	
550	0.2886	555.04	0.9	
620	0.3201	611.87	1.3	

$$C_{Cd} = \frac{Abs}{0.00062Abs^2 - 0.00028Abs + 0.00055}$$



***APÉNDICE B***

***DATOS EXPERIMENTALES DEL EQUILIBRIO DE ADSORCIÓN INDIVIDUAL DE  
TRIMETOPRIMA Y AMPICILINA SOBRE EL CARBÓN F400, F400n, LA FCA Y  
LAS FIBRAS DE CARBÓN MODIFICADAS***



**Tabla B.1.** Datos experimentales de la adsorción de AMP sobre el carbón F400. Condiciones de pH = 7, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).

<i>Experimento No.</i>	<i>m (g)</i>	<i>V<sub>0</sub> (mL)</i>	<i>Tiempo (Días)</i>	<i>Ar (uA)</i>	<i>Fd</i>	<i>Concentración de AMP (mg/L)</i>	<i>Curva de Calibración</i>
F400AMP-Ad7-1	0.0254	20	0	2484051.4	1	95.63	C2AM
			10	280654.9	1	4.66	
F400AMP-Ad7-2	0.0246	20	0	4888860.5	1	194.91	
			10	839481.8	1	27.73	
F400AMP-Ad7-3	0.0248	20	0	7191435.2	1	289.97	
			10	1677153.6	1	62.32	
F400AMP-Ad7-4	0.0249	20	0	2077995.6	5	394.33	
			10	2806374.7	1	108.94	
F400AMP-Ad7-5	0.0252	20	0	3037900.3	5	592.47	
			10	2726789.5	2	211.30	
F400AMP-Ad7-6	0.025	20	0	2046604.2	10	775.69	
			10	4569205.8	2	363.43	
F400AMP-Ad7-7	0.0248	20	0	2557292.7	10	986.53	
			10	2833733.4	5	550.33	
F400AMP-Ad7-8	0.0254	30	0	4716522.8	5	938.98	
			10	1748688.7	10	652.70	
F400AMP-Ad7-9	0.0252	40	0	4716522.8	5	938.98	
			10	1914584.8	10	721.19	

**Tabla B.2.** Datos experimentales de la adsorción de AMP sobre la ACF800B. Condiciones de pH = 7, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).

<i>Experimento No.</i>	<i>m (g)</i>	<i>V<sub>0</sub> (mL)</i>	<i>Tiempo (Días)</i>	<i>Ar (uA)</i>	<i>Fd</i>	<i>Concentración de AMP (mg/L)</i>	<i>Curva de Calibración</i>
ACF800BAMP-Ad7-1	0.0248	20	0	3804281.2	2	300.27	C2AM
			10	401789.8	1	9.66	
ACF800BAMP-Ad7-2	0.0249	20	0	2928809.3	5	569.95	
			10	990535	2	67.94	
ACF800BAMP-Ad7-3	0.0254	20	0	3993298.22	5	789.69	
			10	1884071.9	2	141.72	
ACF800BAMP-Ad7-4	0.0251	20	0	2500794.9	10	963.20	
			10	1371339.2	5	248.46	
ACF800BAMP-Ad7-5	0.0247	30	0	2500794.9	10	963.20	
			10	1035039.3	10	358.07	
ACF800BAMP-Ad7-6	0.0249	40	0	2500794.9	10	963.20	
			10	1411218	10	513.38	



**Tabla B.3.** Datos experimentales de la adsorción de AMP sobre la ACF800C. Condiciones de pH = 7, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).

<i>Experimento No.</i>	<i>m (g)</i>	<i>V<sub>0</sub> (mL)</i>	<i>Tiempo (Días)</i>	<i>Ar (uA)</i>	<i>Fd</i>	<i>Concentración de AMP (mg/L)</i>	<i>Curva de Calibración</i>
ACF800CAMP-Ad7-1	0.0251	20	0	4967196.3	1	198.14	C2AM
			10	265393.8	1	4.03	
ACF800CAMP-Ad7-2	0.0249	20	0	3804281.2	2	300.27	
			10	638319.2	1	19.43	
ACF800CAMP-Ad7-3	0.0255	20	0	2928809.3	5	569.95	
			10	1224603.9	2	87.27	
ACF800CAMP-Ad7-4	0.0248	20	0	3993298.2	5	789.69	
			10	2354349.8	2	180.55	
ACF800CAMP-Ad7-5	0.0246	20	0	2500794.9	10	963.20	
			10	1452850	5	265.28	
ACF800CAMP-Ad7-6	0.0254	30	0	2500794.9	10	963.20	
			10	1055977.8	10	366.72	
ACF800CAMP-Ad7-7	0.0249	40	0	2500794.9	10	963.20	
			10	1395158.2	10	506.75	

**Tabla B.4.** Datos experimentales de la adsorción de AMP sobre la ACF800D. Condiciones de pH = 7, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).

<i>Experimento No.</i>	<i>m (g)</i>	<i>V<sub>0</sub> (mL)</i>	<i>Tiempo (Días)</i>	<i>Ar (uA)</i>	<i>Fd</i>	<i>Concentración de AMP (mg/L)</i>	<i>Curva de Calibración</i>
ACF800DAMP-Ad7-1	0.0246	20	0	3804281.2	2	300.27	C2AM
			10	584876.1	1	17.22	
ACF800DAMP-Ad7-2	0.0247	20	0	2928809.3	5	569.95	
			10	946698.3	2	64.32	
ACF800DAMP-Ad7-3	0.0249	20	0	3993298.2	5	789.69	
			10	2291457.8	2	175.36	
ACF800DAMP-Ad7-4	0.0255	20	0	2500794.9	10	963.20	
			10	1138936.4	5	200.48	
ACF800DAMP-Ad7-5	0.0253	30	0	2500794.9	10	963.20	
			10	1147469.3	10	404.49	
ACF800DAMP-Ad7-6	0.0251	40	0	2500794.9	10	963.20	
			10	1463331.4	10	534.89	

**Tabla B.5.** Datos experimentales de la adsorción de TMP sobre el carbón F400n. Condiciones de pH = 7, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).

<i>Experimento No.</i>	<i>m (g)</i>	<i>V<sub>0</sub> (mL)</i>	<i>Tiempo (Días)</i>	<i>Abs (uA)</i>	<i>Fd</i>	<i>Concentración de TMP (mg/L)</i>	<i>Curva de Calibración</i>
F400nTMP-Ad7-1	0.0245	20	0	0.625	1	29.23	C2TM
			10	0.057	1	2.67	
F400nTMP-Ad7-2	0.0251	20	0	0.184	10	86.06	
			10	0.251	1	11.74	
F400nTMP-Ad7-3	0.0248	20	0	0.364	10	170.24	
			10	0.794	1	37.14	
F400nTMP-Ad7-4	0.025	20	0	0.481	10	224.96	
			10	1.009	1	47.19	
F400nTMP-Ad7-5	0.0254	20	0	0.625	10	292.31	
			10	0.155	10	72.49	
F400nTMP-Ad7-6	0.0248	25	0	0.625	10	292.31	
			10	0.248	10	115.99	
F400nTMP-Ad7-7	0.0251	35	0	0.625	10	292.31	
			10	0.318	10	148.73	
F400nTMP-Ad7-8	0.0253	50	0	0.625	10	292.31	
			10	0.386	10	180.53	
F400nTMP-Ad7-9	0.0246	80	0	0.625	10	292.31	
			10	0.469	10	219.35	

**Tabla B.6.** Datos experimentales de la adsorción de TMP sobre la ACF800B. Condiciones de pH = 7, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).

<i>Experimento No.</i>	<i>m (g)</i>	<i>V<sub>0</sub> (mL)</i>	<i>Tiempo (Días)</i>	<i>Abs (uA)</i>	<i>Fd</i>	<i>Concentración de TMP (mg/L)</i>	<i>Curva de Calibración</i>
ACF800BTMP-Ad7-1	0.0255	20	0	0.636	10	297.46	C2TM
			10	0.060	1	2.81	
ACF800BTMP-Ad7-2	0.0255	40	0	0.636	10	297.46	
			10	0.126	1	5.87	
ACF800BTMP-Ad7-3	0.025	60	0	0.636	10	297.46	
			10	0.702	1	32.83	
ACF800BTMP-Ad7-4	0.0254	80	0	0.636	10	297.46	
			10	0.108	10	50.51	
ACF800BTMP-Ad7-5	0.0253	120	0	0.636	10	297.46	
			10	0.268	10	125.34	
ACF800BTMP-Ad7-6	0.025	160	0	0.636	10	297.46	
			10	0.359	10	167.90	
ACF800BTMP-Ad7-7	0.025	200	0	0.636	10	297.46	
			10	0.399	10	186.61	

**Tabla B.7.** Datos experimentales de la adsorción de TMP sobre la ACF800C. Condiciones de pH = 7, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).

<i>Experimento No.</i>	<i>m (g)</i>	<i>V<sub>0</sub> (mL)</i>	<i>Tiempo (Días)</i>	<i>Abs (uA)</i>	<i>Fd</i>	<i>Concentración de TMP (mg/L)</i>	<i>Curva de Calibración</i>
ACF800CTMP-Ad7-1	0.0245	20	0	0.636	10	297.46	C2TM
			10	0.064	1	2.99	
ACF800CTMP-Ad7-2	0.0245	40	0	0.636	10	297.46	
			10	0.180	1	8.42	
ACF800CTMP-Ad7-3	0.0247	60	0	0.636	10	297.46	
			10	0.949	1	44.38	
ACF800CTMP-Ad7-4	0.0255	80	0	0.672	10	314.10	
			10	0.246	10	115.05	
ACF800CTMP-Ad7-5	0.0253	120	0	0.636	10	297.46	
			10	0.345	10	161.36	
ACF800CTMP-Ad7-6	0.0251	160	0	0.636	10	297.46	
			10	0.411	10	192.22	
ACF800CTMP-Ad7-7	0.0247	200	0	0.636	10	297.46	
			10	0.451	10	210.93	

**Tabla B.8.** Datos experimentales de la adsorción de TMP sobre la ACF800D. Condiciones de pH = 7, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).

<i>Experimento No.</i>	<i>m (g)</i>	<i>V<sub>0</sub> (mL)</i>	<i>Tiempo (Días)</i>	<i>Ads (uA)</i>	<i>Fd</i>	<i>Concentración de TMP (mg/L)</i>	<i>Curva de Calibración</i>
ACF800DTMP-Ad7-1	0.0248	20	0	0.636	10	297.46	C2TM
			10	0.025	1	1.17	
ACF800DTMP-Ad7-2	0.0246	40	0	0.636	10	297.46	
			10	0.174	1	8.14	
ACF800DTMP-Ad7-3	0.0254	60	0	0.636	10	297.46	
			10	0.629	1	29.42	
ACF800DTMP-Ad7-4	0.025	80	0	0.636	10	297.46	
			10	0.158	10	73.90	
ACF800DTMP-Ad7-5	0.0251	120	0	0.636	10	297.46	
			10	0.305	10	142.65	
ACF800DTMP-Ad7-6	0.0254	160	0	0.636	10	297.46	
			10	0.384	10	179.60	
ACF800DTMP-Ad7-7	0.0245	200	0	0.636	10	297.46	
			10	0.427	10	199.71	

**Tabla B.9.** Datos experimentales de la adsorción de TMP sobre el carbón F400. Condiciones de pH = 4, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).

<i>Experimento No.</i>	<i>m (g)</i>	<i>V<sub>0</sub> (mL)</i>	<i>Tiempo (Días)</i>	<i>Abs (uA)</i>	<i>Fd</i>	<i>Concentración de TMP (mg/L)</i>	<i>Curva de Calibración</i>
F400TMP-Ad4-1	0.0247	20	0	0.474	5	117.73	C3TM
			10	0.033	1	1.64	
F400TMP-Ad4-2	0.0248	20	0	0.695	5	172.61	
			10	0.170	1	8.44	
F400TMP-Ad4-3	0.025	20	0	0.941	5	233.71	
			10	0.663	1	32.93	
F400TMP-Ad4-4	0.0249	20	0	1.123	5	278.91	
			10	0.328	5	81.46	
F400TMP-Ad4-5	0.0246	30	0	1.123	5	278.91	
			10	0.281	10	139.58	
F400TMP-Ad4-6	0.0253	40	0	1.123	5	278.91	
			10	0.335	10	166.41	
F400TMP-Ad4-7	0.0252	50	0	0.602	10	299.03	
			10	0.383	10	190.25	

**Tabla B.10.** Datos experimentales de la adsorción de TMP sobre el carbón F400. Condiciones de pH = 7, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).

<i>Experimento No.</i>	<i>m (g)</i>	<i>V<sub>0</sub> (mL)</i>	<i>Tiempo (Días)</i>	<i>Ads (uA)</i>	<i>Fd</i>	<i>Concentración de TMP (mg/L)</i>	<i>Curva de Calibración</i>
F400TMP-Ad7-1	0.0251	20	0	0.177	10	82.88	C4TM.
			10	0.017	1	0.80	
F400TMP-Ad7-2	0.0249	20	0	0.368	10	172.31	
			10	0.019	1	0.89	
F400TMP-Ad7-3	0.0248	20	0	0.494	10	231.31	
			10	0.083	1	3.89	
F400TMP-Ad7-4	0.0249	20	0	0.635	10	297.33	
			10	0.383	1	17.93	
F400TMP-Ad7-5	0.0248	25	0	0.635	10	297.33	
			10	0.089	10	41.67	
F400TMP-Ad7-6	0.0249	35	0	0.635	10	297.33	
			10	0.171	10	80.07	
F400TMP-Ad7-7	0.025	50	0	0.635	10	297.33	
			10	0.281	10	131.57	
F400TMP-Ad7-8	0.025	80	0	0.635	10	297.33	
			10	0.391	10	183.08	

**Tabla B.11.** Datos experimentales de la adsorción de TMP sobre el carbón F400. Condiciones de pH = 10, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).

<i>Experimento No.</i>	<i>m (g)</i>	<i>V<sub>0</sub> (mL)</i>	<i>Tiempo (Días)</i>	<i>Abs (uA)</i>	<i>Fd</i>	<i>Concentración de TMP (mg/L)</i>	<i>Curva de Calibración</i>
F400TMP-Ad10-1	0.0249	20	0	0.553	5	112.75	C5TM
			10	0.011	1	0.45	
F400TMP-Ad10-2	0.0248	20	0	0.842	5	171.68	
			10	0.036	1	1.47	
F400TMP-Ad10-3	0.0248	20	0	1.12	5	228.36	
			10	0.061	1	2.49	
F400TMP-Ad10-4	0.0247	20	0	0.741	10	302.17	
			10	0.011	10	4.49	
F400TMP-Ad10-5	0.0249	25	0	0.741	10	302.17	
			10	0.037	10	15.09	
F400TMP-Ad10-6	0.025	35	0	0.741	10	302.17	
			10	0.161	10	65.65	
F400TMP-Ad10-7	0.0252	45	0	0.741	10	302.17	
			10	0.274	10	111.73	
F400TMP-Ad10-8	0.0249	50	0	0.741	10	302.17	
			10	0.315	10	128.45	
F400TMP-Ad10-9	0.0249	80	0	0.741	10	302.17	
			10	0.467	10	190.44	

**Tabla B.12.** Datos experimentales de la adsorción de TMP sobre el carbón F400. Condiciones de pH = 4, T = 25 °C y I = 0.5 N (HCl/NaOH).

<i>Experimento No.</i>	<i>m (g)</i>	<i>V<sub>0</sub> (mL)</i>	<i>Tiempo (Días)</i>	<i>Abs (uA)</i>	<i>Fd</i>	<i>Concentración de TMP (mg/L)</i>	<i>Curva de Calibración</i>
F400TMP-Ad4-0.5N-1	0.0252	20	0	0.348	10	178.47	C6TM
			10	0.026	1	1.33	
F400TMP-Ad4-0.5N-2	0.0253	20	0	0.467	10	239.50	
			10	0.143	1	7.33	
F400TMP-Ad4-0.5N-3	0.0251	20	0	0.588	10	301.56	
			10	0.740	1	37.95	
F400TMP-Ad4-0.5N-4	0.025	25	0	0.588	10	301.56	
			10	1.119	1	57.39	
F400TMP-Ad4-0.5N-5	0.0249	35	0	0.588	10	301.56	
			10	0.238	10	122.06	
F400TMP-Ad4-0.5N-6	0.0248	50	0	0.588	10	301.56	
			10	0.343	10	175.91	
F400TMP-Ad4-0.5N-7	0.0246	80	0	0.588	10	301.56	
			10	0.429	10	220.01	

**Tabla B.13.** Datos experimentales de la adsorción de TMP sobre el carbón F400. Condiciones de pH = 7, T = 25 °C y I = 0.5 N (HCl/NaOH).

<i>Experimento No.</i>	<i>m (g)</i>	<i>V<sub>0</sub> (mL)</i>	<i>Tiempo (Días)</i>	<i>Abs (uA)</i>	<i>Fd</i>	<i>Concentración de TMP (mg/L)</i>	<i>Curva de Calibración</i>
F400TMP-Ad7-0.5N-1	0.0249	20	0	0.342	10	165.64	C7TM
			10	0.007	1	0.34	
F400TMP-Ad7-0.5N-2	0.0253	20	0	0.454	10	219.89	
			10	0.008	1	0.39	
F400TMP-Ad7-0.5N-3	0.0253	20	0	0.6	10	290.60	
			10	0.116	1	5.62	
F400TMP-Ad7-0.5N-4	0.0252	25	0	0.6	10	290.60	
			10	0.529	1	25.62	
F400TMP-Ad7-0.5N-5	0.0247	35	0	0.6	10	290.60	
			10	0.138	10	66.84	
F400TMP-Ad7-0.5N-6	0.0248	40	0	0.6	10	290.60	
			10	0.186	10	90.09	
F400TMP-Ad7-0.5N-7	0.0254	50	0	0.6	10	290.60	
			10	0.260	10	125.93	
F400TMP-Ad7-0.5N-8	0.0249	80	0	0.6	10	290.60	
			10	0.352	10	170.49	

**Tabla B.14.** Datos experimentales de la adsorción de TMP sobre el carbón F400. Condiciones de pH = 10, T = 25 °C y I = 0.5 N (HCl/NaOH).

<i>Experimento No.</i>	<i>m (g)</i>	<i>V<sub>0</sub> (mL)</i>	<i>Tiempo (Días)</i>	<i>Abs (uA)</i>	<i>Fd</i>	<i>Concentración de TMP (mg/L)</i>	<i>Curva de Calibración</i>
F400TMP-Ad10-0.5N-1	0.0249	20	0	0.444	10	181.80	C8TM
			10	0.021	1	0.86	
F400TMP-Ad10-0.5N-2	0.0249	20	0	0.588	10	240.77	
			10	0.031	1	1.27	
F400TMP-Ad10-0.5N-3	0.0252	20	0	0.735	10	300.96	
			10	0.088	1	3.60	
F400TMP-Ad10-0.5N-4	0.0251	25	0	0.735	10	300.96	
			10	0.600	1	24.57	
F400TMP-Ad10-0.5N-5	0.0248	35	0	0.735	10	300.96	
			10	1.444	1	59.13	
F400TMP-Ad10-0.5N-6	0.0249	40	0	0.735	10	300.96	
			10	0.223	10	91.31	
F400TMP-Ad10-0.5N-7	0.025	50	0	0.735	10	300.96	
			10	0.313	10	128.16	
F400TMP-Ad10-0.5N-8	0.025	80	0	0.735	10	300.96	
			10	0.483	10	197.77	

**Tabla B.15.** Datos experimentales de la adsorción de TMP sobre el carbón F400. Condiciones de pH = 7, T = 15 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).

<i>Experimento No.</i>	<i>m (g)</i>	<i>V<sub>0</sub> (mL)</i>	<i>Tiempo (Días)</i>	<i>Abs (uA)</i>	<i>Fd</i>	<i>Concentración de TMP (mg/L)</i>	<i>Curva de Calibración</i>
F400TMP-Ad7-T15-1	0.0251	20	0	0.187	10	87.56	C4TM
			10	0.052	1	2.43	
F400TMP-Ad7-T15-2	0.0249	20	0	0.373	10	174.65	
			10	0.082	1	3.84	
F400TMP-Ad7-T15-3	0.0249	20	0	0.505	10	236.46	
			10	0.172	1	8.05	
F400TMP-Ad7-T15-4	0.0252	20	0	0.623	10	291.71	
			10	0.019	10	8.90	
F400TMP-Ad7-T15-5	0.0248	25	0	0.623	10	291.71	
			10	0.560	1	26.22	
F400TMP-Ad7-T15-6	0.0249	35	0	0.623	10	291.71	
			10	0.163	10	76.32	
F400TMP-Ad7-T15-7	0.0248	40	0	0.623	10	291.71	
			10	0.210	10	98.33	
F400TMP-Ad7-T15-8	0.0247	50	0	0.623	10	291.71	
			10	0.290	10	135.79	
F400TMP-Ad7-T15-9	0.0251	80	0	0.623	10	291.71	
			10	0.380	10	177.93	

**Tabla B.16.** Datos experimentales de la adsorción de TMP sobre el carbón F400. Condiciones de pH = 7, T = 35 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).

<i>Experimento No.</i>	<i>m (g)</i>	<i>V<sub>0</sub> (mL)</i>	<i>Tiempo (Días)</i>	<i>Abs (uA)</i>	<i>Fd</i>	<i>Concentración de TMP (mg/L)</i>	<i>Curva de Calibración</i>
F400TMP-Ad7-T35-1	0.0251	20	0	0.373	10	174.65	C4TM
			10	0.006	1	0.28	
F400TMP-Ad7-T35-2	0.0247	20	0	0.505	10	236.46	
			10	0.033	1	1.55	
F400TMP-Ad7-T35-3	0.0246	20	0	0.623	10	291.71	
			10	0.100	1	4.68	
F400TMP-Ad7-T35-4	0.0249	25	0	0.623	10	291.71	
			10	0.540	1	25.28	
F400TMP-Ad7-T35-5	0.0248	35	0	0.623	10	291.71	
			10	0.168	10	78.66	
F400TMP-Ad7-T35-6	0.0249	50	0	0.623	10	291.71	
			10	0.275	10	128.76	
F400TMP-Ad7-T35-7	0.0251	80	0	0.623	10	291.71	
			10	0.381	10	178.40	

**Tabla B.17.** Datos experimentales de la adsorción de AMP sobre el carbón F400n. Condiciones de pH = 5, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).

<i>Experimento No.</i>	<i>m (g)</i>	<i>V<sub>0</sub> (mL)</i>	<i>Tiempo (Días)</i>	<i>Ar (uA)</i>	<i>Fd</i>	<i>Concentración de AMP (mg/L)</i>	<i>Curva de Calibración</i>
F400nAMP-Ad5-1	0.0254	20	0	1447742.2	1	53.22	C1AM
			10	277075.8	1	5.79	
F400nAMP-Ad5-2	0.0249	20	0	2663281.6	1	102.47	
			10	764492.8	1	25.54	
F400nAMP-Ad5-3	0.051	40	0	3823978.6	1	149.49	
			10	1436770.1	1	25.54	
F400nAMP-Ad5-4	0.0255	20	0	5112064.3	1	201.68	
			10	2200593.8	1	83.72	
F400nAMP-Ad5-5	0.0501	40	0	6335091.0	1	251.23	
			10	3319337.1	1	129.05	
F400nAMP-Ad5-6	0.025	20	0	3814754.1	2	298.24	
			10	4123750.8	1	161.64	
F400nAMP-Ad5-7	0.0254	20	0	2981467.4	5	576.79	
			10	5026952.1	2	396.46	
F400nAMP-Ad5-8	0.0248	20	0	4044256.4	5	792.08	
			10	2975656.9	5	575.61	
F400nAMP-Ad5-9	0.0249	20	0	2499746.4	10	958.41	
			10	1953390.2	10	737.05	

**Tabla B.18.** Datos experimentales de la adsorción de AMP sobre el carbón F400n. Condiciones de pH = 7, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).

<i>Experimento No.</i>	<i>m (g)</i>	<i>V<sub>0</sub> (mL)</i>	<i>Tiempo (Días)</i>	<i>Ar (uA)</i>	<i>Fd</i>	<i>Concentración de AMP (mg/L)</i>	<i>Curva de Calibración</i>
F400nAMP-Ad7-1	0.0245	20	0	1398925.7	1	50.83	C2AM
			10	328885.5	1	6.65	
F400nAMP-Ad7-2	0.0251	20	0	2397849.2	1	92.07	
			10	791243.7	1	25.74	
F400nAMP-Ad7-3	0.0248	20	0	4504958.0	1	179.06	
			10	1733221.4	1	64.63	
F400nAMP-Ad7-4	0.025	20	0	3689368.8	2	290.78	
			10	3514695.1	1	138.18	
F400nAMP-Ad7-5	0.0254	20	0	3053179.3	5	595.63	
			10	3992496.3	2	315.81	
F400nAMP-Ad7-6	0.0248	20	0	4065763.3	5	804.65	
			10	2432899.2	5	467.59	
F400nAMP-Ad7-7	0.0251	20	0	2526488.0	10	973.81	
			10	1649804.2	10	611.88	



**Tabla B.19.** Datos experimentales de la adsorción de AMP sobre el carbón F400n. Condiciones de pH = 9, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).

<i>Experimento No.</i>	<i>m (g)</i>	<i>V<sub>0</sub> (mL)</i>	<i>Tiempo (Días)</i>	<i>Ar (uA)</i>	<i>Fd</i>	<i>Concentración de AMP (mg/L)</i>	<i>Curva de Calibración</i>
F400nAMP-Ad9-1	0.0253	20	0	1470527.9	1	56.50	C3AM
			10	337083.4	1	9.09	
F400nAMP-Ad9-2	0.0246	20	0	2731259.7	1	109.23	
			10	699120.8	1	24.23	
F400nAMP-Ad9-3	0.0249	20	0	5263202.1	1	215.14	
			10	2136560.2	1	84.36	
F400nAMP-Ad9-4	0.0255	20	0	3903035.9	2	316.49	
			10	3666558.6	1	148.36	
F400nAMP-Ad9-5	0.0255	20	0	3053179.3	5	613.50	
			10	4514219.5	2	367.62	
F400nAMP-Ad9-6	0.025	20	0	4065763.3	5	825.27	
			10	2558625.3	5	510.07	
F400nAMP-Ad9-7	0.0254	20	0	2526488	10	1006.69	
			10	1646066.4	10	638.42	

**Tabla B.20.** Datos experimentales de la adsorción de AMP sobre el carbón F400n. Condiciones de pH = 7, T = 15 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).

<i>Experimento No.</i>	<i>m (g)</i>	<i>V<sub>0</sub> (mL)</i>	<i>Tiempo (Días)</i>	<i>Ar (uA)</i>	<i>Fd</i>	<i>Concentración de AMP (mg/L)</i>	<i>Curva de Calibración</i>
F400nAMP-Ad7-T15-1	0.0255	20	0	1428993.1	1	52.07	C2AM
			10	376564.1	1	8.62	
F400nAMP-Ad7-T15-2	0.0248	20	0	2714823.2	1	105.16	
			10	854365.8	1	28.35	
F400nAMP-Ad7-T15-3	0.0246	20	0	5115288.5	1	204.26	
			10	2532903.5	1	97.65	
F400nAMP-Ad7-T15-4	0.0254	20	0	3802180.3	2	300.09	
			10	4337925.6	1	172.17	
F400nAMP-Ad7-T15-5	0.025	20	0	3009822.7	5	586.68	
			10	5468267.7	2	437.66	
F400nAMP-Ad7-T15-6	0.0248	20	0	4016448	5	794.47	
			10	3146499.2	5	614.89	
F400nAMP-Ad7-T15-7	0.0245	20	0	2542381.5	10	980.37	
			10	2043939.7	10	774.59	

**Tabla B.21.** Datos experimentales de la adsorción de AMP sobre el carbón F400n. Condiciones de pH = 7, T = 35 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).

<i>Experimento No.</i>	<i>m (g)</i>	<i>V<sub>0</sub> (mL)</i>	<i>Tiempo (Días)</i>	<i>Ar (uA)</i>	<i>Fd</i>	<i>Concentración de AMP (mg/L)</i>	<i>Curva de Calibración</i>
F400nAMP-Ad7-T35-1	0.0251	20	0	1428993.1	1	52.07	C2AM
			10	220556.6	1	2.18	
F400nAMP-Ad7-T35-2	0.0245	20	0	2714823.2	1	105.16	
			10	654362.9	1	20.09	
F400nAMP-Ad7-T35-3	0.0245	20	0	5115288.5	1	204.26	
			10	1660325.2	1	61.62	
F400nAMP-Ad7-T35-4	0.0255	20	0	3802180.3	2	300.09	
			10	3468807.6	1	136.28	
F400nAMP-Ad7-T35-5	0.249	20	0	3009822.7	5	586.68	
			10	4227100.9	2	335.18	
F400nAMP-Ad7-T35-6	0.0249	20	0	4016448	5	794.47	
			10	2409049.7	5	462.66	
F400nAMP-Ad7-T35-7	0.0247	20	0	2542381.5	10	980.37	
			10	1602164.2	10	592.21	

**Tabla B.22.** Datos experimentales de la adsorción de TMP sobre la FCA. Condiciones de pH = 4, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).

<i>Experimento No.</i>	<i>m (g)</i>	<i>V<sub>0</sub> (mL)</i>	<i>Tiempo (Días)</i>	<i>Abs (uA)</i>	<i>Fd</i>	<i>Concentración de TMP (mg/L)</i>	<i>Curva de Calibración</i>
FCATMP-Ad4-1	0.0251	20	0	0.134	10	66.56	C3TM
			10	0.026	1	1.29	
FCATMP-Ad4-2	0.0253	20	0	0.602	10	299.03	
			10	0.552	1	27.42	
FCATMP-Ad4-3	0.0249	30	0	0.602	10	299.03	
			10	0.130	10	64.58	
FCATMP-Ad4-4	0.025	40	0	0.602	10	299.03	
			10	0.219	10	108.78	
FCATMP-Ad4-5	0.025	60	0	0.602	10	299.03	
			10	0.368	10	182.80	
FCATMP-Ad4-6	0.0248	80	0	0.602	10	299.03	
			10	0.413	10	205.15	
FCATMP-Ad4-7	0.025	120	0	0.602	10	299.03	
			10	0.463	10	229.99	

**Tabla B.23.** Datos experimentales de la adsorción de TMP sobre la FCA. Condiciones de pH = 7, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).

<i>Experimento No.</i>	<i>m (g)</i>	<i>V<sub>0</sub> (mL)</i>	<i>Tiempo (Días)</i>	<i>Abs (uA)</i>	<i>Fd</i>	<i>Concentración de TMP (mg/L)</i>	<i>Curva de Calibración</i>
FCATMP-Ad7-1	0.0252	20	0	0.635	10	297.33	C4TM
			10	0.070	1	3.28	
FCATMP-Ad7-2	0.0252	30	0	0.635	10	297.33	
			10	0.142	1	6.65	
FCATMP-Ad7-3	0.025	40	0	0.635	10	297.33	
			10	1.022	1	47.85	
FCATMP-Ad7-4	0.025	60	0	0.635	10	297.33	
			10	0.206	10	96.46	
FCATMP-Ad7-5	0.0251	80	0	0.635	10	297.33	
			10	0.304	10	142.34	
FCATMP-Ad7-6	0.0247	120	0	0.635	10	297.33	
			10	0.397	10	185.98	
FCATMP-Ad7-7	0.0248	160	0	0.635	10	297.33	
			10	0.454	10	212.58	

**Tabla B.24.** Datos experimentales de la adsorción de TMP sobre la FCA. Condiciones de pH = 10, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).

<i>Experimento No.</i>	<i>m (g)</i>	<i>V<sub>0</sub> (mL)</i>	<i>Tiempo (Días)</i>	<i>Abs (uA)</i>	<i>Fd</i>	<i>Concentración de TMP (mg/L)</i>	<i>Curva de Calibración</i>
FCATMP-Ad10-1	0.0248	20	0	0.741	10	302.17	C5TM
			10	0.100	1	4.08	
FCATMP-Ad10-2	0.0247	30	0	0.741	10	302.17	
			10	0.307	1	12.52	
FCATMP-Ad10-3	0.0248	40	0	0.741	10	302.17	
			10	0.098	10	39.96	
FCATMP-Ad10-4	0.0247	60	0	0.741	10	302.17	
			10	0.217	10	88.49	
FCATMP-Ad10-5	0.0247	80	0	0.741	10	302.17	
			10	0.353	10	143.95	
FCATMP-Ad10-6	0.0248	120	0	0.741	10	302.17	
			10	0.464	10	189.21	
FCATMP-Ad10-7	0.0253	160	0	0.740	10	301.76	
			10	0.551	10	224.69	

**Tabla B.25.** Datos experimentales de la adsorción de TMP sobre la FCA. Condiciones de pH = 4, T = 25 °C y I = 0.5 N (HCl/NaOH).

<i>Experimento No.</i>	<i>m (g)</i>	<i>V<sub>0</sub> (mL)</i>	<i>Tiempo (Días)</i>	<i>Abs (uA)</i>	<i>Fd</i>	<i>Concentración de TMP (mg/L)</i>	<i>Curva de Calibración</i>
FCATMP-Ad4-0.5N-1	0.0254	20	0	0.578	10	296.43	C6TM
			10	0.140	1	7.18	
FCATMP-Ad4-0.5N-2	0.0254	30	0	0.578	10	296.43	
			10	0.779	1	39.95	
FCATMP-Ad4-0.5N-3	0.025	40	0	0.578	10	296.43	
			10	0.195	10	100.01	
FCATMP-Ad4-0.5N-4	0.0245	60	0	0.578	10	296.43	
			10	0.325	10	166.68	
FCATMP-Ad4-0.5N-5	0.0251	80	0	0.578	10	296.43	
			10	0.393	10	201.55	
FCATMP-Ad4-0.5N-6	0.0249	120	0	0.578	10	296.43	
			10	0.453	10	232.32	
FCATMP-Ad4-0.5N-7	0.0245	160	0	0.578	10	296.43	
			10	0.490	10	251.30	
FCATMP-Ad4-0.5N-8	0.0247	200	0	0.578	10	296.43	
			10	0.503	10	257.96	

**Tabla B.26.** Datos experimentales de la adsorción de TMP sobre la FCA. Condiciones de pH = 7, T = 25 °C y I = 0.5 N (HCl/NaOH).

<i>Experimento No.</i>	<i>m (g)</i>	<i>V<sub>0</sub> (mL)</i>	<i>Tiempo (Días)</i>	<i>Abs (uA)</i>	<i>Fd</i>	<i>Concentración de TMP (mg/L)</i>	<i>Curva de Calibración</i>
FCATMP-Ad7-0.5N-1	0.0245	20	0	0.636	10	308.04	C7TM
			10	0.075	1	3.63	
FCATMP-Ad7-0.5N-2	0.0248	30	0	0.636	10	308.04	
			10	0.138	1	6.68	
FCATMP-Ad7-0.5N-3	0.0247	40	0	0.636	10	308.04	
			10	0.764	1	37.00	
FCATMP-Ad7-0.5N-4	0.0245	60	0	0.636	10	308.04	
			10	0.174	10	84.27	
FCATMP-Ad7-0.5N-5	0.0254	80	0	0.636	10	308.04	
			10	0.295	10	142.88	
FCATMP-Ad7-0.5N-6	0.025	160	0	0.636	10	308.04	
			10	0.459	10	222.31	

**Tabla B.27.** Datos experimentales de la adsorción de TMP sobre la FCA. Condiciones de pH = 10, T = 25 °C y I = 0.5 N (HCl/NaOH).

<i>Experimento No.</i>	<i>m (g)</i>	<i>V<sub>0</sub> (mL)</i>	<i>Tiempo (Días)</i>	<i>Abs (uA)</i>	<i>Fd</i>	<i>Concentración de TMP (mg/L)</i>	<i>Curva de Calibración</i>
FCATMP-Ad10-0.5N-1	0.0247	20	0	0.727	10	297.69	C8TM
			10	0.058	1	2.37	
FCATMP-Ad10-0.5N-2	0.0253	30	0	0.727	10	297.69	
			10	0.131	1	5.36	
FCATMP-Ad10-0.5N-3	0.025	40	0	0.727	10	297.69	
			10	0.057	10	23.34	
FCATMP-Ad10-0.5N-4	0.0245	60	0	0.727	10	297.69	
			10	0.237	10	97.04	
FCATMP-Ad10-0.5N-5	0.0253	80	0	0.727	10	297.69	
			10	0.319	10	130.62	
FCATMP-Ad10-0.5N-6	0.0249	120	0	0.727	10	297.69	
			10	0.443	10	181.40	
FCATMP-Ad10-0.5N-7	0.0251	160	0	0.727	10	297.69	
			10	0.532	10	217.84	
FCATMP-Ad10-0.5N-8	0.0245	200	0	0.727	10	297.69	
			10	0.574	10	235.04	

**Tabla B.28.** Datos experimentales de la adsorción de TMP sobre la FCA. Condiciones de pH = 7, T = 15 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).

<i>Experimento No.</i>	<i>m (g)</i>	<i>V<sub>0</sub> (mL)</i>	<i>Tiempo (Días)</i>	<i>Abs (uA)</i>	<i>Fd</i>	<i>Concentración de TMP (mg/L)</i>	<i>Curva de Calibración</i>
FCATMP-Ad7-T15-1	0.0251	20	0	0.115	10	53.85	C4TM
			10	0.002	1	0.09	
FCATMP-Ad7-T15-2	0.0249	20	0	0.633	10	296.39	
			10	0.080	1	3.75	
FCATMP-Ad7-T15-3	0.0248	30	0	0.633	10	296.39	
			10	0.024	10	11.24	
FCATMP-Ad7-T15-4	0.025	40	0	0.633	10	296.39	
			10	0.094	10	44.01	
FCATMP-Ad7-T15-5	0.0248	60	0	0.633	10	296.39	
			10	0.246	10	115.18	
FCATMP-Ad7-T15-6	0.0249	80	0	0.633	10	296.39	
			10	0.297	10	139.06	
FCATMP-Ad7-T15-7	0.0247	120	0	0.633	10	296.39	
			10	0.389	10	182.14	
FCATMP-Ad7-T15-8	0.025	160	0	0.633	10	296.39	
			10	0.457	10	213.98	

**Tabla B.29.** Datos experimentales de la adsorción de TMP sobre la FCA. Condiciones de pH = 10, T = 35 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).

<i>Experimento No.</i>	<i>m (g)</i>	<i>V<sub>0</sub> (mL)</i>	<i>Tiempo (Días)</i>	<i>Abs (uA)</i>	<i>Fd</i>	<i>Concentración de TMP (mg/L)</i>	<i>Curva de Calibración</i>
FCATMP-Ad7-T35-1	0.0247	20	0	0.115	10	53.85	C4TM
			10	0.027	1	1.26	
FCATMP-Ad7-T35-2	0.0248	20	0	0.633	10	296.39	
			10	0.033	1	1.55	
FCATMP-Ad7-T35-3	0.0248	30	0	0.633	10	296.39	
			10	0.016	10	7.49	
FCATMP-Ad7-T35-4	0.025	40	0	0.633	10	296.39	
			10	0.064	10	29.97	
FCATMP-Ad7-T35-5	0.0249	60	0	0.633	10	296.39	
			10	0.178	10	83.34	
FCATMP-Ad7-T35-6	0.0246	80	0	0.633	10	296.39	
			10	0.273	10	127.83	
FCATMP-Ad7-T35-7	0.025	120	0	0.633	10	296.39	
			10	0.394	10	184.48	
FCATMP-Ad7-T35-8	0.0251	16'	0	0.633	10	296.39	
			10	0.448	10	209.77	

**Tabla B.30.** Datos experimentales de la adsorción de AMP sobre la FCA. Condiciones de pH = 5, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).

<i>Experimento No.</i>	<i>m (g)</i>	<i>V<sub>0</sub> (mL)</i>	<i>Tiempo (Días)</i>	<i>Ar (uA)</i>	<i>Fd</i>	<i>Concentración de AMP (mg/L)</i>	<i>Curva de Calibración</i>
FCAAMP-Ad5-1	0.0251	20	0	1501468.8	1	55.40	C1AM
			10	216073.2	1	3.32	
FCAAMP-Ad5-2	0.0245	20	0	2626412.1	1	100.97	
			10	252268.9	1	4.78	
FCAAMP-Ad5-3	0.0503	40	0	3823978.6	1	149.49	
			10	278886.3	1	5.86	
FCAAMP-Ad5-4	0.025	20	0	4967196.3	1	195.81	
			10	336405.7	1	8.19	
FCAAMP-Ad5-5	0.0508	40	0	6335091	1	251.23	
			10	355503.4	1	8.97	
FCAAMP-Ad5-6	0.0249	20	0	3804281.2	2	297.39	
			10	538030.6	1	16.36	
FCAAMP-Ad5-7	0.0256	20	0	3026806.6	5	585.97	
			10	1551751.0	2	114.87	
FCAAMP-Ad5-8	0.0256	20	0	2001003.6	10	756.34	
			10	2872213.5	2	114.87	
FCAAMP-Ad5-9	0.0249	20	0	2530837.2	10	971.01	
			10	2160068.1	5	410.39	

**Tabla B.31.** Datos experimentales de la adsorción de AMP sobre la FCA. Condiciones de pH = 7, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).

<i>Experimento No.</i>	<i>m (g)</i>	<i>V<sub>0</sub> (mL)</i>	<i>Tiempo (Días)</i>	<i>Ar (uA)</i>	<i>Fd</i>	<i>Concentración de AMP (mg/L)</i>	<i>Curva de Calibración</i>
FCAAMP-Ad7-1	0.0251	20	0	1501468.8	1	55.06	C2AM
			10	352324.0	1	7.62	
FCAAMP-Ad7-2	0.0251	20	0	2626412.1	1	101.51	
			10	424285.8	1	10.59	
FCAAMP-Ad7-3	0.0247	20	0	4967196.3	1	198.14	
			10	720334.1	1	22.81	
FCAAMP-Ad7-4	0.0247	20	0	3804281.2	2	300.27	
			10	985205.7	1	33.75	
FCAAMP-Ad7-5	0.0245	20	0	2928809.3	5	569.95	
			10	2335660.4	2	179.01	
FCAAMP-Ad7-6	0.0247	20	0	3993298.2	5	789.69	
			10	1763579.7	5	329.42	
FCAAMP-Ad7-7	0.0252	20	0	2500794.9	10	963.20	
			10	2386178.4	5	457.94	

**Tabla B.32.** Datos experimentales de la adsorción de AMP sobre la FCA. Condiciones de pH = 9, T = 25 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).

<i>Experimento No.</i>	<i>m (g)</i>	<i>V<sub>0</sub> (mL)</i>	<i>Tiempo (Días)</i>	<i>Ar (uA)</i>	<i>Fd</i>	<i>Concentración de AMP (mg/L)</i>	<i>Curva de Calibración</i>
FCAAMP-Ad9-1	0.0253	20	0	1437413.9	1	55.11	C3AM
			10	351285.2	1	9.68	
FCAAMP-Ad9-2	0.0249	20	0	2546377.5	1	101.50	
			10	531017.7	1	17.20	
FCAAMP-Ad9-3	0.0256	20	0	4946164.6	1	201.88	
			10	1182182.0	1	44.44	
FCAAMP-Ad9-4	0.0251	20	0	7350140.1	1	302.43	
			10	2468114.0	1	98.23	
FCAAMP-Ad9-5	0.0255	20	0	3036221.2	5	609.95	
			10	2821840.0	2	226.05	
FCAAMP-Ad9-6	0.0244	20	0	4888515.3	2	797.87	
			10	2034502.9	5	400.45	
FCAAMP-Ad9-7	0.0253	20	0	2546377.5	10	1015.01	
			10	1345906.0	10	512.87	

**Tabla B.33.** Datos experimentales de la adsorción de AMP sobre la FCA. Condiciones de pH = 7, T = 15 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).

<i>Experimento No.</i>	<i>m (g)</i>	<i>V<sub>0</sub> (mL)</i>	<i>Tiempo (Días)</i>	<i>Ar (uA)</i>	<i>Fd</i>	<i>Concentración de AMP (mg/L)</i>	<i>Curva de Calibración</i>
FCAAMP-Ad7-T15-1	0.025	20	0	1428993.1	1	52.07	C2AM
			10	214525.3	1	1.93	
FCAAMP-Ad7-T15-2	0.0245	20	0	2714823.2	1	105.16	
			10	351615.3	1	7.59	
FCAAMP-Ad7-T15-3	0.0249	20	0	5115288.5	1	204.26	
			10	965956.8	1	32.96	
FCAAMP-Ad7-T15-4	0.0246	20	0	3802180.34	2	300.09	
			10	1889957.9	1	71.10	
FCAAMP-Ad7-T15-5	0.025	20	0	3009822.7	5	586.68	
			10	1959531.6	2	147.95	
FCAAMP-Ad7-T15-6	0.0251	20	0	4016448	5	794.47	
			10	1493262.1	5	273.62	
FCAAMP-Ad7-T15-1	0.0255	20	0	2542381.5	10	980.37	
			10	1080705.8	10	376.93	

**Tabla B.34.** Datos experimentales de la adsorción de AMP sobre la FCA. Condiciones de pH = 7, T = 35 °C y I = 0.01 N (HCl/NaOH).

<i>Experimento No.</i>	<i>m (g)</i>	<i>V<sub>0</sub> (mL)</i>	<i>Tiempo (Días)</i>	<i>Ar (uA)</i>	<i>Fd</i>	<i>Concentración de AMP (mg/L)</i>	<i>Curva de Calibración</i>
FCAAMP-Ad7-T35-1	0.0248	20	0	1437413.9	1	52.42	C2AM
			10	223101.7	1	2.29	
FCAAMP-Ad7-T35-2	0.0247	20	0	2611624.4	1	100.90	
			10	282701.8	1	4.75	
FCAAMP-Ad7-T35-3	0.0245	20	0	4995695	1	199.32	
			10	522688.5	1	14.66	
FCAAMP-Ad7-T35-4	0.0247	20	0	3802241	2	300.10	
			10	800477.8	1	26.12	
FCAAMP-Ad7-T35-5	0.0252	20	0	3036221.2	5	592.13	
			10	1100231.5	2	77.00	
FCAAMP-Ad7-T35-6	0.0254	20	0	3985005.2	5	787.98	
			10	1237308.6	5	220.79	
FCAAMP-Ad7-T35-7	0.025	20	0	2611624.4	10	1008.96	
			10	2050989.3	5	388.75	





*APÉNDICE C*

*DATOS EXPERIMENTALES DEL EQUILIBRIO MULTICOMPONENTE DE  
AMPICILINA Y CADMIO (II) SOBRE LA FCA Y EL CARBÓN F400n*



**Tabla C.1.** Datos experimentales para la adsorción de AMP y Cd(II) sobre la FCA. Condiciones de pH = 5, T = 25 °C y I = 0.01N (HCl/NaOH). El volumen de las soluciones fue de 40 mL para una masa de 0.05 g y de 20 mL para una masa de 0.025 g.

<i>Experimento No.</i>	<i>m (g)</i>	<i>Tiempo (Días)</i>	<i>Abs (uA)</i>	<i>Concentración de Cd(II) (mg/L)</i>	<i>C.C</i>	<i>TOC (mg/L)</i>	<i>Concentración de AMP (mg/L)</i>	<i>C.C</i>
FC-50Cd	0.0254	0	0.0434	56.43	C7Cd	----	----	----
		10	0.0357	46.97	C7Cd	----	----	----
FC-100Cd	0.0247	0	0.0841	103.51	C7Cd	----	----	----
		10	0.0696	87.17	C7Cd	----	----	----
FC-150Cd	0.0255	0	0.1235	146.79	C7Cd	----	----	----
		10	0.1065	128.31	C7Cd	----	----	----
FC-200Cd	0.0255	0	0.1642	191.4	C7Cd	----	----	----
		10	0.1497	175.39	C7Cd	----	----	----
FC-250Cd	0.0249	0	0.195	226.28	C7Cd	----	----	----
		10	0.1756	204.1	C7Cd	----	----	----
FC-300-50	0.05	0	0.2231	293.36	C4Cd	24.32	44.05	C4AM
		10	0.2311	277.36	C2Cd	2.947	2.70	C4AM
FC-300-100	0.0497	0	0.2247	295.49	C4Cd	48.76	91.34	C4AM
		10	0.2309	277.04	C2Cd	6.181	8.96	C4AM
FC-300-150	0.0499	0	0.2243	294.92	C4Cd	73.31	138.85	C4AM
		10	0.2302	276.22	C2Cd	9.894	16.14	C4AM
FC-300-200	0.0503	0	0.2237	294.20	C4Cd	98.67	187.91	C4AM
		10	0.2090	250.3	C2Cd	12.956	22.06	C4AM
FC-300-250	0.0505	0	0.2230	293.22	C4Cd	125.4	239.64	C4AM
		10	0.2242	268.62	C2Cd	16.5	28.92	C4AM
FC-300-300	0.0501	0	0.2248	295.60	C4Cd	150.3	296.09	C5AM
		10	0.2226	266.65	C2Cd	20.47	36.60	C4AM
FC-250-50	0.0498	0	0.1756	241.17	C3Cd	25.38	46.10	C4AM
		10	0.1118	212.75	C8Cd	3.663	4.08	C4AM
FC-250-100	0.0499	0	0.1753	240.73	C3Cd	50.26	94.25	C4AM
		10	0.1089	207.02	C8Cd	5.96	8.53	C4AM
FC-250-150	0.0502	0	0.1753	240.70	C3Cd	76.05	144.15	C4AM
		10	0.1070	203.34	C8Cd	8.158	12.78	C4AM

**Tabla C.1.** (Continuación)

<i>Experimento No.</i>	<i>m (g)</i>	<i>Tiempo (Días)</i>	<i>Abs (uA)</i>	<i>Concentración de Cd(II) (mg/L)</i>	<i>C.C</i>	<i>TOC (mg/L)</i>	<i>Concentración de AMP (mg/L)</i>	<i>C.C</i>
FC-250-200	0.0504	0	0.1740	238.83	C3Cd	102.4	195.13	C4AM
		10	0.1101	209.33	C8Cd	9.31	15.01	C4AM
FC-250-250	0.0506	0	0.1729	237.16	C3Cd	128	244.67	C4AM
		10	0.1105	210.05	C8Cd	12.39	20.97	C4AM
FC-250-300	0.0496	0	0.1729	236.69	C3Cd	153.2	301.95	C5AM
		10	0.1046	198.64	C8Cd	14.24	24.55	C4AM
FC-200-50	0.0503	0	0.1523	196.57	C4Cd	24.5	44.40	C4AM
		10	0.1550	182.57	C2Cd	3.354	3.49	C4AM
FC-200-100	0.0505	0	0.1510	194.80	C4Cd	48.6	91.03	C4AM
		10	0.1533	180.45	C2Cd	6.014	8.63	C4AM
FC-200-150	0.0501	0	0.1502	193.67	C4Cd	73.69	139.58	C4AM
		10	0.1523	179.27	C2Cd	9.536	15.45	C4AM
FC-200-200	0.05	0	0.1532	197.76	C4Cd	98.3	187.20	C4AM
		10	0.1515	178.19	C2Cd	12.42	21.03	C4AM
FC-200-250	0.05	0	0.1513	195.25	C4Cd	124.4	237.70	C4AM
		10	0.1481	174.09	C2Cd	16.76	29.43	C4AM
FC-200-300	0.0498	0	0.1520	196.15	C4Cd	148.3	292.05	C5AM
		10	0.1449	170.14	C2Cd	19.32	34.38	C4AM
FC-150-50	0.0502	0	0.1281	171.65	C3Cd	25.07	45.50	C4AM
		10	0.0837	157.87	C8Cd	3.729	4.21	C4AM
FC-150-100	0.0504	0	0.1290	172.96	C3Cd	50.39	94.50	C4AM
		10	0.0843	159.07	C8Cd	5.849	8.31	C4AM
FC-150-150	0.0502	0	0.1302	174.72	C3Cd	76.49	145.00	C4AM
		10	0.0810	152.68	C8Cd	8.458	13.36	C4AM
FC-150-200	0.0495	0	0.1298	174.1	C3Cd	103	196.29	C4AM
		10	0.0801	150.94	C8Cd	9.789	15.94	C4AM
FC-150-250	0.0505	0	0.1298	174.1	C3Cd	128.6	245.83	C4AM
		10	0.0783	147.5	C8Cd	11.59	19.42	C4AM
FC-150-300	0.05	0	0.1301	174.53	C3Cd	152.6	300.74	C5AM
		10	0.0780	146.78	C8Cd	12.53	21.24	C4AM

**Tabla C.1.** (Continuación)

<i>Experimento No.</i>	<i>m (g)</i>	<i>Tiempo (Días)</i>	<i>Abs (uA)</i>	<i>Concentración de Cd(II) (mg/L)</i>	<i>C.C</i>	<i>TOC (mg/L)</i>	<i>Concentración de AMP (mg/L)</i>	<i>C.C</i>
FC-100-50	0.0496	0	0.0430	104.20	C1Cd	23.95	43.34	C4AM
		10	0.0716	92.23	C3Cd	1.872	0.62	C4AM
FC-100-100	0.0499	0	0.0431	104.44	C1Cd	48.12	90.10	C4AM
		10	0.0706	90.87	C3Cd	4.033	4.80	C4AM
FC-100-150	0.0506	0	0.0439	106.36	C1Cd	72.93	138.11	C4AM
		10	0.0688	88.45	C3Cd	6.487	9.55	C4AM
FC-100-200	0.0502	0	0.0430	104.20	C1Cd	97.95	186.52	C4AM
		10	0.0686	88.06	C3Cd	9.964	16.28	C4AM
FC-100-250	0.05	0	0.0435	105.36	C1Cd	123.3	235.57	C4AM
		10	0.0660	84.63	C3Cd	11.69	19.62	C4AM
FC-100-300	0.0503	0	0.0431	104.46	C1Cd	149.2	293.87	C5AM
		10	0.0669	85.85	C3Cd	14.72	25.48	C4AM
FC-50-50	0.0497	0	0.0225	54.17	C1Cd	24.32	44.05	C4AM
		10	0.0346	43.15	C3Cd	1.529	0	C4AM
FC-50-100	0.0497	0	0.0221	53.16	C1Cd	49.27	92.33	C4AM
		10	0.0334	41.61	C3Cd	4.049	4.83	C4AM
FC-50-150	0.0501	0	0.0223	53.79	C1Cd	73.63	139.46	C4AM
		10	0.0333	41.49	C3Cd	6.894	10.34	C4AM
FC-50-200	0.0496	0	0.0227	54.53	C1Cd	98.08	186.77	C4AM
		10	0.0324	40.38	C3Cd	9.503	15.38	C4AM
FC-50-250	0.05	0	0.0223	53.70	C1Cd	123.2	235.38	C4AM
		10	0.0317	39.50	C3Cd	11.55	19.34	C4AM
FC-50-300	0.05	0	0.0222	53.49	C1Cd	151.3	298.11	C5AM
		10	0.0291	36.19	C3Cd	12.82	21.80	C4AM

----- No hay presencia de este componente en el experimento.

**Tabla C.2.** Datos experimentales para la adsorción de AMP y Cd(II) sobre el carbón F400n. Condiciones de pH = 5, T = 25 °C y I = 0.01N (HCl/NaOH). El volumen de las soluciones fue de 40 mL para una masa de 0.05 g y de 20 mL para una masa de 0.025 g.

<i>Experimento No.</i>	<i>m (g)</i>	<i>Tiempo (Días)</i>	<i>Abs (uA)</i>	<i>Concentración de Cd(II) (mg/L)</i>	<i>C.C</i>	<i>TOC (mg/L)</i>	<i>Concentración de AMP (mg/L)</i>	<i>C.C</i>
F4-50Cd	0.0251	0	0.0434	56.43	C7Cd	----	----	----
		10	0.0402	52.46	C7Cd	----	----	----
F4-100Cd	0.0254	0	0.0841	103.51	C7Cd	----	----	----
		10	0.0790	97.74	C7Cd	----	----	----
F4-150Cd	0.0502	0	0.1235	146.79	C7Cd	----	----	----
		10	0.1200	142.99	C7Cd	----	----	----
F4-200Cd	0.05	0	0.1642	191.4	C7Cd	----	----	----
		10	0.1465	171.92	C7Cd	----	----	----
F4-300Cd	0.0508	0	0.2332	272.49	C7Cd	----	----	----
		10	0.2224	258.98	C7Cd	----	----	----
F4-300-50	0.0499	0	0.2231	293.36	C4Cd	24.32	44.05	C4AM
		10	0.2417	290.67	C2Cd	1.44	0	C4AM
F4-300-100	0.0497	0	0.2247	295.49	C4Cd	48.76	91.34	C4AM
		10	0.2440	293.64	C2Cd	6.75	10.06	C4AM
F4-300-150	0.05	0	0.2243	294.92	C4Cd	73.31	138.85	C4AM
		10	0.2416	290.54	C2Cd	14.04	24.16	C4AM
F4-300-200	0.05	0	0.2237	294.20	C4Cd	98.67	187.91	C4AM
		10	0.2416	290.62	C2Cd	27.69	50.57	C4AM
F4-300-250	0.0498	0	0.2230	293.22	C4Cd	125.4	239.64	C4AM
		10	0.2399	288.42	C2Cd	41.53	77.35	C4AM
F4-300-300	0.0496	0	0.2248	295.60	C4Cd	150.3	296.09	C5AM
		10	0.2387	286.92	C2Cd	62.26	117.46	C4AM
F4-250-50	0.05	0	0.1756	241.17	C3Cd	25.38	46.10	C4AM
		10	0.1193	227.33	C8Cd	2.029	0.92	C4AM
F4-250-100	0.05	0	0.1753	240.73	C3Cd	50.26	94.25	C4AM
		10	0.1199	228.65	C8Cd	7.629	11.76	C4AM
F4-250-150	0.0503	0	0.1753	240.70	C3Cd	76.05	144.15	C4AM
		10	0.1193	227.46	C8Cd	20.73	37.11	C4AM

**Tabla C.2.** (Continuación)

<i>Experimento No.</i>	<i>m (g)</i>	<i>Tiempo (Días)</i>	<i>Abs (uA)</i>	<i>Concentración de Cd(II) (mg/L)</i>	<i>C.C</i>	<i>TOC (mg/L)</i>	<i>Concentración de AMP (mg/L)</i>	<i>C.C</i>
F4-250-200	0.0497	0	0.1740	238.83	C3Cd	102.4	195.13	C4AM
		10	0.1129	214.89	C8Cd	35.96	66.58	C4AM
F4-250-250	0.0503	0	0.1729	237.16	C3Cd	128	244.67	C4AM
		10	0.1137	216.31	C8Cd	54.84	103.11	C4AM
F4-200-50	0.0502	0	0.1523	196.57	C4Cd	24.5	44.40	C4AM
		10	0.1639	193.52	C2Cd	1.4	0	C4AM
F4-200-100	0.0506	0	0.1510	194.80	C4Cd	48.6	91.03	C4AM
		10	0.1630	192.37	C2Cd	5.023	6.72	C4AM
F4-200-150	0.0504	0	0.1502	193.67	C4Cd	73.69	139.58	C4AM
		10	0.1625	191.76	C2Cd	13.97	24.03	C4AM
F4-200-200	0.0504	0	0.1532	197.76	C4Cd	98.3	187.20	C4AM
		10	0.1609	189.81	C2Cd	26.56	48.39	C4AM
F4-200-250	0.0498	0	0.1513	195.25	C4Cd	124.4	237.70	C4AM
		10	0.1598	188.38	C2Cd	42.46	79.15	C4AM
F4-200-300	0.0497	0	0.1520	196.15	C4Cd	148.3	292.05	C5AM
		10	0.1604	189.16	C2Cd	61.67	116.32	C4AM
F4-150-50	0.0495	0	0.1281	171.65	C3Cd	25.07	45.50	C4AM
		10	0.0866	163.48	C8Cd	1.016	0	C4AM
F4-150-100	0.0503	0	0.1290	172.96	C3Cd	50.39	94.50	C4AM
		10	0.0851	160.78	C8Cd	8.469	13.38	C4AM
F4-150-150	0.0499	0	0.1302	174.72	C3Cd	76.49	145.00	C4AM
		10	0.0855	161.28	C8Cd	22.56	40.65	C4AM
F4-150-200	0.0497	0	0.1298	174.1	C3Cd	103	196.29	C4AM
		10	0.0858	161.98	C8Cd	38.08	70.68	C4AM
F4-150-250	0.0504	0	0.1298	174.1	C3Cd	128.6	245.83	C4AM
		10	0.0856	161.48	C8Cd	54.73	102.89	C4AM
F4-100-250	0.05	0	0.0832	99.81	C5Cd	129.3	247.18	C4AM
		10	0.0743	99.51	C6Cd	59.28	111.70	C4AM
F4-100-300	0.0505	0	0.0843	101.20	C5Cd	156.6	308.82	C5AM
		10	0.0750	100.39	C6Cd	79.87	151.54	C4AM

**Tabla C.2.** (Continuación)

<i>Experimento No.</i>	<i>m (g)</i>	<i>Tiempo (Días)</i>	<i>Abs (uA)</i>	<i>Concentración de Cd(II) (mg/L)</i>	<i>C.C</i>	<i>TOC (mg/L)</i>	<i>Concentración de AMP (mg/L)</i>	<i>C.C</i>
F4-50-50	0.0501	0	0.0415	47.22	C2Cd	25.33	46.01	C4AM
		10	0.0376	46.99	C3Cd	3.08	2.96	C4AM
F4-50-100	0.05	0	0.0431	49.02	C2Cd	50.9	95.48	C4AM
		10	0.0384	48.14	C3Cd	11.84	19.91	C4AM
F4-50-150	0.0504	0	0.0434	49.36	C2Cd	76.42	144.86	C4AM
		10	0.0385	48.19	C3Cd	22.99	41.48	C4AM
F4-50-200	0.0503	0	0.0438	49.78	C2Cd	102.4	195.13	C4AM
		10	0.0382	47.77	C3Cd	41.93	78.13	C4AM
F4-50-250	0.0498	0	0.0435	49.49	C2Cd	128.4	245.44	C4AM
		10	0.0383	47.94	C3Cd	57.2	107.67	C4AM
F4-50-300	0.0496	0	0.0432	49.14	C2Cd	153.8	303.16	C5AM
		10	0.0367	47.56	C6Cd	74.65	141.44	C4AM

----- No hay presencia de este componente en el experimento.



*APÉNDICE D*  
*DATOS EXPERIMENTALES DE LAS CINÉTICAS DE ADSORCIÓN DE AMPICILINA*  
*Y TRIMETOPRIMA*





**Tabla D.1.** Datos experimentales para la curva de decaimiento de la concentración C1-FCAAMP.

<i>Tiempo (min)</i>	<i>Ar (uA)</i>	<i>Fd</i>	<i>Concentración de AMP (mg/L)</i>	<i>Curva de Calibración</i>
0	2417420.9	1	92.88	C2AM
0.5	2326687.6	1	89.13	
1	2306769.3	1	88.31	
3	1997545.1	1	75.54	
5	1871058	1	70.32	
10	1437417.9	1	52.42	
15	1223100.3	1	43.57	
20	1060578.8	1	36.86	
30	856757.7	1	28.45	
45	727751.3	1	23.12	
60	676860.3	1	21.02	
90	659384.3	1	20.30	
120	633378.1	1	19.22	
150	618507.3	1	18.61	

**Tabla D.2.** Datos experimentales para la curva de decaimiento de la concentración C2-FCAAMP.

<i>Tiempo (min)</i>	<i>Ar (uA)</i>	<i>Fd</i>	<i>Concentración de AMP (mg/L)</i>	<i>Curva de Calibración</i>
0	4900154	1	195.38	C2AM
1	4418076.1	1	175.47	
5	3481602.4	1	136.81	
10	2970193.7	1	115.70	
15	2815164.3	1	109.30	
30	2498867.4	1	96.24	
45	2492649.2	1	95.98	
60	2424024.5	1	93.15	
75	2349984.4	1	90.09	
90	2358098.5	1	90.43	
120	2270846.5	1	86.83	
150	2276185	1	87.05	

**Tabla D.3.** Datos experimentales para la curva de decaimiento de la concentración C3-FCAAMP.

<i>Tiempo (min)</i>	<i>Ar (uA)</i>	<i>Fd</i>	<i>Concentración de AMP (mg/L)</i>	<i>Curva de Calibración</i>
0	3874980.9	2	306.11	C2AM
0.5	7219301.1	1	291.12	
1	6961305.8	1	280.47	
3	6054116.7	1	243.02	
5	5407901.5	1	216.34	
10	4808863.2	1	191.61	
15	4522915.2	1	179.80	
20	4448771	1	176.74	
30	4275841.9	1	169.60	
45	4143320.1	1	164.13	
60	4068318.6	1	161.03	
75	4049931.9	1	160.28	
90	4026541.4	1	159.31	
120	4012258.8	1	158.72	
150	4000056.8	1	158.22	

**Tabla D.4.** Datos experimentales para la curva de decaimiento de la concentración C4-FCAAMP.

<i>Tiempo (min)</i>	<i>Ar (uA)</i>	<i>Fd</i>	<i>Concentración de AMP (mg/L)</i>	<i>Curva de Calibración</i>
0	5265428.6	2	420.91	C2AM
0.5	4992699.3	2	398.39	
1	4833421.6	2	385.24	
5	4195177.5	2	332.54	
15	3739824.4	2	294.95	
20	3604395.6	2	283.76	
45	3400074.3	2	266.89	
60	3351317.3	2	262.87	
75	3289898.2	2	257.80	
90	3291492.2	2	257.93	
120	3335009.4	2	261.52	
150	3296819.9	2	258.37	

**Tabla D.5.** Datos experimentales para la curva de decaimiento de la concentración C5-FCAAMP.

<i>Tiempo (min)</i>	<i>Ar (uA)</i>	<i>Fd</i>	<i>Concentración de AMP (mg/L)</i>	<i>Curva de Calibración</i>
0	3947973.4	2	312.13	
0.5	7484632.6	1	302.08	
1	7292134.1	1	294.13	
3	6954084.9	1	280.17	
5	6660598.8	1	268.06	
10	6148773.9	1	246.93	
15	5835954.7	1	234.01	
20	5600414.9	1	224.29	C2AM
30	5271169.4	1	210.69	
45	5101390.6	1	203.68	
60	5046355.4	1	201.41	
75	4967763.7	1	198.17	
90	4942684.7	1	197.13	
120	4929449.8	1	196.59	
150	4910571.7	1	195.81	

**Tabla D.6.** Datos experimentales para la curva de decaimiento de la concentración C6-FCAAMP.

<i>Tiempo (min)</i>	<i>Ar (uA)</i>	<i>Fd</i>	<i>Concentración de AMP (mg/L)</i>	<i>Curva de Calibración</i>
0	3867283.7	2	305.47	
0.5	7119479.9	1	287.00	
1	6761557.3	1	272.22	
3	5740147.2	1	230.06	
5	5076458.7	1	202.66	
10	4256619	1	168.81	
15	3843376.3	1	151.75	
30	3427240.8	1	134.57	C2AM
45	3225616.4	1	126.24	
60	3175453.9	1	124.17	
75	3149929.6	1	123.12	
90	3139208.6	1	122.68	
120	3111911	1	121.55	
150	3132704.8	1	122.41	

**Tabla D.7.** Datos experimentales para la curva de decaimiento de la concentración C7-FCAAMP.

<i>Tiempo (min)</i>	<i>Ar (uA)</i>	<i>Fd</i>	<i>Concentración de AMP (mg/L)</i>	<i>Curva de Calibración</i>
0	3876758.5	2	306.25	
0.5	7122653.5	1	287.13	
1	6833238.1	1	275.18	
3	6143759	1	246.72	
5	5820595.1	1	233.38	
10	5177140.5	1	206.81	
15	4782762.5	1	190.53	
20	4531803.1	1	180.17	C2AM
30	4275775	1	169.60	
45	4186864.9	1	165.93	
60	4140345.8	1	164.01	
75	4086107.3	1	161.77	
90	4059976.3	1	160.69	
120	4011367.9	1	158.68	
150	4009661.4	1	158.61	

**Tabla D.8.** Datos experimentales para la curva de decaimiento de la concentración C8-FCAAMP.

<i>Tiempo (min)</i>	<i>Ar (uA)</i>	<i>Fd</i>	<i>Concentración de AMP (mg/L)</i>	<i>Curva de Calibración</i>
0	3921958.5	2	309.98	
0.5	6843210.2	1	275.59	
1	6289694.4	1	252.74	
3	5599168.1	1	224.24	
5	5266465.2	1	210.50	
10	4651946.2	1	185.13	
15	4599746.7	1	182.97	
20	4466777.6	1	177.48	C2AM
30	4276061.9	1	169.61	
45	4163120.7	1	164.95	
60	4110754.5	1	162.79	
75	4050085.6	1	160.28	
90	4038031.9	1	159.78	
120	3989765.5	1	157.79	
150	4001493.6	1	158.28	

**Tabla D.9.** Datos experimentales para la curva de decaimiento de la concentración C9-FCAAMP.

<i>Tiempo (min)</i>	<i>Ar (uA)</i>	<i>Fd</i>	<i>Concentración de AMP (mg/L)</i>	<i>Curva de Calibración</i>
0	3825850.9	2	302.05	
0.5	7160334.6	1	288.69	
1	6963118.7	1	280.55	
3	6504505.1	1	261.61	
5	6240348.5	1	250.71	
10	5925132.2	1	237.69	
15	5751834.5	1	230.54	
20	5632357	1	225.61	C2AM
45	5443592.2	1	217.81	
60	5395152.9	1	215.81	
75	5373048.8	1	214.90	
90	5339105.2	1	213.50	
120	5354211.6	1	214.12	
150	5329798	1	213.11	

**Tabla D.10.** Datos experimentales para la curva de decaimiento de la concentración C10-FCAAMP.

<i>Tiempo (min)</i>	<i>Ar (uA)</i>	<i>Fd</i>	<i>Concentración de AMP (mg/L)</i>	<i>Curva de Calibración</i>
0	3840159	2	303.23	
0.5	7332757.6	1	295.81	
1	7280615.1	1	293.65	
3	7150230.4	1	288.27	
5	7109509.2	1	286.59	
10	6964498.7	1	280.60	
15	6883079.7	1	277.24	
20	6805742.5	1	274.05	C2AM
30	6728421	1	270.86	
60	6654278.7	1	267.79	
75	6653967.2	1	267.78	
90	6679660.8	1	268.84	
120	6654206.5	1	267.79	
150	6662383.6	1	268.13	

**Tabla D.11.** Datos experimentales para la curva de decaimiento de la concentración C1-FCATMP.

<i>Tiempo (min)</i>	<i>Abs (uA)</i>	<i>Fd</i>	<i>Concentración de TMP (mg/L)</i>	<i>Curva de Calibración</i>
0	0.313	10	141.98	
0.5	0.312	10	141.52	
1	0.296	10	134.26	
2	0.269	10	122.02	
3	0.255	10	115.67	
5	0.226	10	102.51	
7	0.199	10	90.27	
10	0.153	10	69.40	
12	0.15	10	68.04	
15	0.13	10	58.97	
20	0.099	10	44.91	
30	0.058	10	26.31	C1TM
45	0.061	5	13.83	
60	0.029	5	6.58	
75	0.012	5	2.72	
90	0.008	5	1.81	
120	0.005	4	0.91	
150	0.005	4	0.91	
180	0.008	3	1.09	
210	0.004	3	0.54	
240	0.007	3	0.95	
270	0.006	3	0.82	

**Tabla D.12.** Datos experimentales para la curva de decaimiento de la concentración C2-FCATMP.

<i>Tiempo (min)</i>	<i>Abs (uA)</i>	<i>Fd</i>	<i>Concentración de TMP (mg/L)</i>	<i>Curva de Calibración</i>
0	0.412	10	186.88	
0.5	0.411	10	186.43	
1	0.395	10	179.17	
2	0.373	10	169.19	
3	0.351	10	159.21	
5	0.31	10	140.61	
7	0.275	10	124.74	
10	0.245	10	111.13	
12	0.222	10	100.70	
15	0.196	10	88.90	
20	0.165	10	74.84	
30	0.111	10	50.35	C1TM
45	0.129	5	29.26	
60	0.081	5	18.37	
75	0.044	5	9.98	
90	0.037	5	8.39	
120	0.022	5	4.99	
150	0.017	5	3.86	
180	0.013	5	2.95	
210	0.015	5	3.40	
240	0.011	5	2.49	
270	0.01	5	2.27	

**Tabla D.13.** Datos experimentales para la curva de decaimiento de la concentración C3-FCATMP.

<i>Tiempo (min)</i>	<i>Abs (uA)</i>	<i>Fd</i>	<i>Concentración de TMP (mg/L)</i>	<i>Curva de Calibración</i>
0	0.532	10	241.31	
0.5	0.526	10	238.59	
1	0.503	10	228.16	
3	0.447	10	202.76	
5	0.378	10	171.46	
7	0.311	10	141.07	
10	0.274	10	124.28	
12	0.237	10	107.50	
15	0.21	10	95.25	
20	0.167	10	75.75	
30	0.107	10	48.53	C1TM
45	0.065	10	29.48	
60	0.043	10	19.50	
76	0.036	10	16.33	
90	0.037	10	16.78	
120	0.026	10	11.79	
150	0.024	10	10.89	
180	0.024	10	10.89	
210	0.02	10	9.07	
240	0.022	10	9.98	
270	0.025	10	11.34	



**Tabla D.14.** Datos experimentales para la curva de decaimiento de la concentración C4-FCATMP.

<i>Tiempo (min)</i>	<i>Abs (uA)</i>	<i>Fd</i>	<i>Concentración de TMP (mg/L)</i>	<i>Curva de Calibración</i>
0	0.583	11	290.89	
0.5	0.557	11	277.92	
1	0.597	10	270.80	
2	0.546	10	247.66	
3	0.509	10	230.88	
5	0.461	10	209.11	
7	0.424	10	192.32	
10	0.378	10	171.46	
12	0.356	10	161.48	
15	0.322	10	146.06	
20	0.283	10	128.37	
30	0.22	10	99.79	C1TM
55	0.154	10	69.85	
60	0.144	10	65.32	
85	0.123	10	55.79	
90	0.12	10	54.43	
120	0.107	10	48.53	
150	0.096	10	43.55	
180	0.091	10	41.28	
210	0.09	10	40.82	
240	0.087	10	39.46	
270	0.083	10	37.65	
300	0.08	10	36.29	

**Tabla D.15.** Datos experimentales para la curva de decaimiento de la concentración C5-FCATMP.

<i>Tiempo (min)</i>	<i>Abs (uA)</i>	<i>Fd</i>	<i>Concentración de TMP (mg/L)</i>	<i>Curva de Calibración</i>
0	0.52	10	235.87	
0.5	0.518	10	234.96	
1	0.497	10	225.44	
2	0.451	10	204.57	
3	0.44	10	199.58	
5	0.391	10	177.36	
7	0.355	10	161.03	
10	0.329	10	149.23	
12	0.318	10	144.24	
15	0.305	10	138.35	
20	0.281	10	127.46	
30	0.255	10	115.67	C1TM
45	0.228	10	103.42	
60	0.222	10	100.70	
75	0.202	10	91.63	
90	0.202	10	91.63	
120	0.188	10	85.28	
150	0.177	10	80.29	
180	0.174	10	78.93	
210	0.17	10	77.11	
240	0.171	10	77.56	
270	0.168	10	76.20	



**Tabla D.16.** Datos experimentales para la curva de decaimiento de la concentración C6-FCATMP.

<i>Tiempo (min)</i>	<i>Abs (uA)</i>	<i>Fd</i>	<i>Concentración de TMP (mg/L)</i>	<i>Curva de Calibración</i>
0	0.548	10	248.57	
0.5	0.482	10	218.63	
1	0.427	10	193.68	
3	0.375	10	170.10	
5	0.36	10	163.29	
7	0.279	10	126.55	
10	0.231	10	104.78	
12	0.214	10	97.07	
15	0.189	10	85.73	
20	0.166	10	75.30	
30	0.118	10	53.52	C1TM
45	0.083	10	37.65	
60	0.061	10	27.67	
75	0.048	10	21.77	
90	0.09	5	20.41	
120	0.073	5	16.56	
150	0.055	5	12.47	
180	0.05	5	11.34	
210	0.049	5	11.11	
240	0.056	5	12.70	
270	0.046	5	10.43	



**Tabla D.17.** Datos experimentales para la curva de decaimiento de la concentración C7-FCATMP.

<i>Tiempo (min)</i>	<i>Abs (uA)</i>	<i>Fd</i>	<i>Concentración de TMP (mg/L)</i>	<i>Curva de Calibración</i>
0	0.534	10	242.22	
0.5	0.474	10	215.00	
1	0.434	10	196.86	
2	0.362	11	180.62	
3	0.331	10	150.14	
5	0.279	10	126.55	
7	0.249	10	112.95	
10	0.21	10	95.25	
12	0.2	10	90.72	
15	0.175	10	79.38	
20	0.152	10	68.95	
30	0.115	10	52.16	C1TM
45	0.084	10	38.10	
60	0.067	10	30.39	
75	0.058	10	26.31	
90	0.049	10	22.23	
120	0.044	10	19.96	
150	0.035	10	15.88	
180	0.031	10	14.06	
210	0.028	10	12.70	
240	0.027	10	12.25	
270	0.03	10	13.61	

**Tabla D.18.** Datos experimentales para la curva de decaimiento de la concentración C8-FCATMP.

<i>Tiempo (min)</i>	<i>Abs (uA)</i>	<i>Fd</i>	<i>Concentración de TMP (mg/L)</i>	<i>Curva de Calibración</i>
0	0.511	10	231.79	
0.5	0.508	10	230.43	
1	0.488	10	221.35	
2	0.468	10	212.28	
3	0.453	10	205.48	
5	0.41	10	185.97	
7	0.4	10	181.44	
10	0.368	10	166.92	
12	0.355	10	161.03	
15	0.328	10	148.78	
20	0.312	10	141.52	CITM
30	0.27	10	122.47	
60	0.251	10	113.85	
75	0.237	10	107.50	
90	0.23	10	104.33	
120	0.218	10	98.88	
150	0.213	10	96.62	
180	0.206	10	93.44	
210	0.201	10	91.17	
240	0.192	10	87.09	
270	0.192	10	87.09	



**Tabla D.19.** Datos experimentales para la curva de decaimiento de la concentración C9-FCATMP.

<i>Tiempo (min)</i>	<i>Abs (uA)</i>	<i>Fd</i>	<i>Concentración de TMP (mg/L)</i>	<i>Curva de Calibración</i>
0	0.506	10	229.52	C1TM
0.5	0.503	10	228.16	
1	0.492	10	223.17	
2	0.484	10	219.54	
10	0.476	10	215.91	
12	0.472	10	214.10	
20	0.461	10	209.11	
45	0.439	10	199.13	
60	0.433	10	196.41	
75	0.423	10	191.87	
120	0.406	10	184.16	
150	0.409	10	185.52	
180	0.402	10	182.35	
210	0.404	10	183.25	
240	0.401	10	181.89	
270	0.401	10	181.89	



**Tabla D.20.** Datos experimentales para la curva de decaimiento de la concentración C1-F400nAMP.

<i>Tiempo (min)</i>	<i>Ar (uA)</i>	<i>Fd</i>	<i>Concentración de AMP (mg/L)</i>	<i>Curva de Calibración</i>
0	2456621.6	1	94.50	
10	2322320.7	1	88.95	
60	2274902.1	1	86.99	
120	2115035.9	1	80.39	
180	2091269.7	1	79.41	
360	1982028.8	1	74.90	
720	1800009.2	1	67.39	C2AM
1440	1648806.1	1	61.15	
2160	1552996.7	1	57.19	
2880	1471376.5	1	53.82	
3600	1410215.9	1	51.30	
4320	1403601.6	1	51.02	
5040	1379936.8	1	50.05	

**Tabla D.21.** Datos experimentales para la curva de decaimiento de la concentración C2-F400nAMP.

<i>Tiempo (min)</i>	<i>Ar (uA)</i>	<i>Fd</i>	<i>Concentración de AMP (mg/L)</i>	<i>Curva de Calibración</i>
0	2456621.6	1	199.60	
10	2322320.7	1	191.63	
60	2274902.1	1	183.67	
120	2115035.9	1	178.78	
180	2091269.7	1	174.62	
330	1982028.8	1	169.87	
720	1800009.2	1	160.74	C2AM
1440	1648806.1	1	152.86	
2160	1552996.7	1	149.70	
2880	1471376.5	1	145.65	
3600	1410215.9	1	141.26	
4520	1403601.6	1	136.88	
5040	1379936.8	1	133.43	

**Tabla D.22.** Datos experimentales para la curva de decaimiento de la concentración C3-F400nAMP.

<i>Tiempo (min)</i>	<i>Ar (uA)</i>	<i>Fd</i>	<i>Concentración de AMP (mg/L)</i>	<i>Curva de Calibración</i>
0	4853149	2	386.87	
10	4538836.9	2	360.92	
60	4522254.8	2	359.55	
120	4395836.6	2	349.11	
180	4309951.8	2	342.02	
360	4328314.2	2	343.54	
720	4053075.8	2	320.81	C2AM
1440	3955378	2	312.74	
2160	3920737.9	2	309.88	
2880	3810766.9	2	300.80	
3600	3844290.6	2	303.57	
4320	3857617.3	2	304.67	
5040	3738570.8	2	294.84	

**Tabla D.23.** Datos experimentales para la curva de decaimiento de la concentración C4-F400nAMP.

<i>Tiempo (min)</i>	<i>Ar (uA)</i>	<i>Fd</i>	<i>Concentración de AMP (mg/L)</i>	<i>Curva de Calibración</i>
0	5080300.6	1	202.81	
10	4502104.6	1	178.94	
60	4520806	1	179.72	
120	4278485.4	1	169.71	
180	3953571.2	1	156.30	
360	3755445.5	1	148.12	
1440	3758353.9	1	148.24	C2AM
2160	3353704.1	1	131.53	
2880	3121631.9	1	121.95	
3600	3038282.7	1	118.51	
4320	2975704	1	115.93	
5040	2935047.4	1	114.25	
5820	2843103.3	1	110.45	



**Tabla D.24.** Datos experimentales para la curva de decaimiento de la concentración C5-F400nAMP.

<i>Tiempo (min)</i>	<i>Ar (uA)</i>	<i>Fd</i>	<i>Concentración de AMP (mg/L)</i>	<i>Curva de Calibración</i>
0	5284021.6	1	211.22	
10	4971948.5	1	198.34	
60	4553364.6	1	181.06	
120	4245186.9	1	168.34	
180	4240828.7	1	168.16	
360	3896130	1	153.93	
720	3627828.7	1	142.85	C2AM
1440	3136673.1	1	122.57	
2160	2925471.8	1	113.85	
2880	2790006	1	108.26	
3600	2699975.8	1	104.54	
4320	2809217.5	1	109.05	
5040	2664470	1	103.08	