



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE SAN LUIS POTOSÍ



FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS

Posgrado en Ciencias en Ingeniería Química

**Adsorción de Compuestos Farmacéuticos sobre Carbón
Activado y Xerogeles de Carbono**

Tesis que para obtener el grado de:
Maestría en Ciencias en Ingeniería Química

Presenta:

Ruperto García Jitzell Lupita

Director de Tesis: **Dr. Roberto Leyva Ramos**

Codirector de Tesis: **Dra. Damarys Haidee Carrales Alvarado**



UASLP-Sistema de Bibliotecas
Repositorio Institucional Tesis Digitales Restricciones de Uso
DERECHOS RESERVADOS
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en este Trabajo Terminal está protegido por la Ley Federal de Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos.

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde se obtuvo, mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto o con fines de lucro, reproducción, edición o modificación será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.



Adsorción de Compuestos Farmacéuticos sobre Carbón Activado y Xerogeles de Carbono ©
2024 by Ruperto Garcia Jitzell Lupita is licensed under [Creative Commons Attribution-NonCommercial-NoDerivatives 4.0 International](https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/)

Este proyecto se realizó en *Laboratorio de Ingeniería Química Ambiental* adscrito a la *Universidad Autónoma de San Luis Potosí*, en el periodo comprendido *entre agosto de 2022 a julio de 2024*, bajo la dirección del *Dr. Roberto Leyva Ramos* y la *Dra. Damarys Haidee Carrales Alvarado* y fue apoyado por el *Consejo Nacional de Humanidades, Ciencias y Tecnologías* obteniendo recursos para la realización del trabajo.

El programa de Maestría en Ciencias en Ingeniería Química de la Universidad Autónoma de San Luis Potosí pertenece al Sistema Nacional de Posgrados de Calidad (SNP) del CONAHCYT, registro 000896. Número de la beca otorgada por CONAHCYT: 829721, Número de CVU: 1139530

Los datos del trabajo titulado *Adsorción de Compuestos Farmacéuticos sobre Carbón Activado y Xerogeles de Carbono* se encuentran bajo el resguardo de la *Facultad de Ciencias Químicas* y pertenecen a la Universidad Autónoma de San Luis Potosí.



Solicitud de Registro de Tesis Maestría

San Luis Potosí SLP a noviembre/24/2022

Comité Académico

En atención a: Coordinador/a del Posgrado

Por este conducto solicito a Usted se lleve a cabo el registro de tema de tesis de Maestría, el cual quedó definido de la siguiente manera:

Adsorción de Compuestos Farmacéuticos sobre Carbón Activado y Xerogeles de Carbono que desarrollará el/la estudiante: *Ruperto García Jitzell Lupita* bajo la dirección y/o Co-dirección de *Dr. Roberto Leyva Ramos* y la *Dra. Damarys Haidee Carrales Alvarado*.

Asimismo, le comunico que el proyecto en el cual trabajará el alumno involucrará el manejo de animales de experimentación, estudios con seres humanos o muestras derivadas de los mismos, el manejo y/o generación de organismos genéticamente modificados y requiere de aval de Comité de Ética e investigación de la FCQ.

(Complete la opción que aplique en su caso):

() Sí debido a que: _____

() No

(X) No Aplica

Sin otro particular, quedo de Usted.

A T E N T A M E N T E

Jitzell Lupita Ruperto García

Dr. Roberto Leyva Ramos

Dra. Damarys Haidee Carrales Alvarado



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE SAN LUIS POTOSÍ



FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS

Posgrado en Ciencias en Ingeniería Química

**Adsorción de Compuestos Farmacéuticos sobre Carbón
Activado y Xerogeles de Carbono**

Tesis que para obtener el grado de:
Maestría en Ciencias en Ingeniería Química

Presenta:
Ruperto García Jitzell Lupita

SINODALES:

Presidente: Dra. Esmeralda Mendoza Mendoza _____

Secretario: Dr. Roberto Leyva Ramos _____

Vocal: Dra. Damarys Haidee Carrales Alvarado _____

Vocal: Dra. Brenda Azharel Jiménez López _____

SAN LUIS POTOSÍ, S. L. P.

AGOSTO, 2024

INTEGRANTES DEL COMITÉ TUTORIAL ACADÉMICO

Dr. Roberto Leyva Ramos: Director de tesis. Adscrito al Posgrado en Ciencias en Ingeniería Química de la Universidad Autónoma de San Luis Potosí, San Luis Potosí, S.L.P.

Dra. Damarys Haidee Carrales Alvarado: Codirectora de tesis. Adscrito al Posgrado en Ciencias en Ingeniería Química de la Universidad Autónoma de San Luis Potosí, San Luis Potosí, S.L.P.

Dra. Esmeralda Mendoza Mendoza: Tutor de tesis. Adscrito al Posgrado en Ciencias en Ingeniería Química de la Universidad Autónoma de San Luis Potosí, San Luis Potosí, S.L.P.

Dra. Brenda Azharel Jiménez López: Tutor de tesis. Adscrito al Posgrado en Ciencias en Ingeniería Química de la Universidad Autónoma de San Luis Potosí, San Luis Potosí, S.L.P.



Carta Cesión de Derechos

San Luis Potosí SLP a julio/18 /2024

En la ciudad de San Luis Potosí el día 18 del mes de julio del año 2024. El que suscribe *Jitzell Lupita Ruperto García*, alumna del Programa de Posgrado en Ciencias en Ingeniería Química adscrito a la Universidad Autónoma de San Luis Potosí manifiesta que es autora intelectual del presente trabajo terminal, realizado bajo la dirección de: Dr. Roberto Leyva Ramos y la Dra. Damarys Haidee Carrales Alvarado y cede los derechos del trabajo titulado *Adsorción de Compuestos Farmacéuticos sobre Carbón Activado y Xerogeles de Carbono* a la **Universidad Autónoma de San Luis Potosí**, para su difusión con fines académicos y de investigación.

Los usuarios de la información no deben reproducir de forma total o parcial texto, gráficas, imágenes o cualquier contenido del trabajo si el permiso expreso del o los autores. Éste, puede ser obtenido directamente con el autor o autores escribiendo a la siguiente dirección jitzellupita@hotmail.com. Si el permiso se otorga, el usuario deberá dar el agradecimiento correspondiente y citar la fuente del mismo.

Jitzell Lupita Ruperto García



DEDICATORIA

*A Dios, por permitirme continuar con este
proceso cada día y darme la fuerza y
entendimiento para sacar adelante cada
obstáculo.*

*A mi madre, Reyna por ser esa parte
fundamental de mi día a día. Que sin sus
consejos, amor y apoyo no habría logrado
cumplir esta meta.*

*A mi novio, Juan Camilo, por estar
presente en cada momento, por su amor,
apoyo y paciencia.*



AGRADECIMIENTOS

Quiero agradecer primeramente a Dios por permitirme cumplir una meta más en mi vida.

Muy especialmente a mi asesor de tesis, el Dr. Roberto Leyva Ramos, por brindarme la oportunidad de ser parte de su grupo de investigación. Gracias por toda su enseñanza y motivación que me permitieron culminar este trabajo.

A la Dra. Damarys Haidee Carrales Alvarado por su codirección en el desarrollo de este proyecto, por su paciencia, apoyo constante y disponibilidad. Muchas gracias por brindarme siempre su apoyo y conocimientos.

A los miembros de mi comité tutorial, Dra. Esmeralda y Dra. Brenda, por todas las recomendaciones y consejos que me brindaron a lo largo de la maestría.

A Ana Luisa, que realizó su servicio social conmigo, muchas gracias por tu dedicación y esfuerzo.

A las maestras Alejandra, Betty, Thalia, Laurita y Korina. Gracias por todos los momentos agradables.

A mis compañeros de maestría Mariana, Brenda, Victor y Antonio. Por hacer mis días más amenos en clases.

A mis compañeros de laboratorio, Diana, Brenda A., Brenda V., Uziel, Génesis, Carolina y Alberto, muchas gracias por todos los momentos divertidos en el laboratorio.

Finalmente, quiero agradecer a toda mi familia que estuvo conmigo durante esta etapa. A mi mamá por todo su amor y consejos, que me han permitido forjarme como persona, te amo.

Gracias a mi novio, por siempre creer en mi y motivarme para seguir adelante, te amo.



Agradecimientos por apoyo técnico:

A la Dra. Damarys Haidee Carrales Alvarado por su gran apoyo en la revisión de esta tesis y en el uso de los diferentes equipos del laboratorio.

Al Dr. Antonio Aragón Piña por la realización de los análisis de microscopía electrónica de barrido.

A la I.A. Thalia Stephanie Cadena González, Q.F.B. Beatriz Nieto Ahumada y B.Q. Alejandra Morales López por su apoyo en la realización experimental de esta tesis.

A la Q. Laura Hernández de la Rosa y Q. Korina Loredo Martínez por su disposición y apoyo en los análisis experimentales de esta tesis.

A la Dra. Diana Elizabeth Villela Martínez y la Dra. Génesis Derith Valdéz García por la asesoría en los equipos de análisis del laboratorio.



Agradecimiento a las instituciones:

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

Consejo Nacional de Humanidades Ciencias y Tecnologías (CONAHCYT)
No. CVU: 1139530

Instituto de Metalurgia Universidad Autónoma de San Luis Potosí



RESUMEN

En este trabajo, se evaluó la adsorción de Paracetamol (PCT) y Clorfenamina (CNA) en solución acuosa utilizando carbones activados comerciales denominados Gama B (GB) y Megapol M (MM), además de microesferas de xerogel de carbón (XC) y xerogel de carbón activado (XCA) preparadas mediante polimerización en emulsión inversa. Con el fin de aumentar la capacidad de adsorción y la porosidad de XC, se realizó una activación con CO₂ obteniendo xerogel de carbón activado (XCA). Los resultados del equilibrio de adsorción PCT indicaron que las máximas capacidades de adsorción de GB, MM, XC y XCA fueron de 226, 195, 225 y 232 mg/g a pH=7 y T = 25 °C, respectivamente. En el caso del CNA, la máxima capacidad de adsorción de XC y XCA fue de 218 y 140 mg/g a pH = 11 y T = 25 °C, respectivamente. Los materiales carbonosos se caracterizaron por medio de las técnicas de fisiorción de N₂, microscopía electrónica de barrido, análisis termogravimétrico, punto de carga cero y cuantificación de sitios activos. Los efectos de pH, temperatura, fuerza iónica y las propiedades fisicoquímicas y de textura de los materiales adsorbentes, demostraron que las capacidades de adsorción obtenidas se atribuyen principalmente a la química superficial de los materiales y la carga neutra que poseen las moléculas PCT y CNA, así como el mecanismo el cual se encuentra influenciado principalmente por interacciones dispersivas π - π y π -catión.

Palabras clave: Adsorción, Carbón Activado, Paracetamol, Clorfenamina, Xerogel de Carbón.



ABSTRACT

In this work, the adsorption of Paracetamol (PCT) and Chlorphenamine (CNA) in an aqueous solution was evaluated using commercial activated carbons designated as Gama B (GB) and Megapol M (MM), also using microspheres of carbon xerogel (XC) and activated carbon xerogel (XCA). To increase the adsorption capacity and porosity of XC, activation with CO₂ was carried out to obtain and activated carbon xerogel (XCA) prepared by inverse emulsion polymerization. The PCT adsorption equilibrium results indicated that the maximum adsorption capacities of GB, MM, XC, and XCA were 226, 195, 225, and 232 mg/g at pH=7 and T = 25 °C, respectively. In the case of CNA, the maximum adsorption capacity of XC and XCA was 218 and 140 mg/g at pH = 11 and T = 25 °C, respectively. The carbonaceous materials were characterized by N₂ physisorption techniques, scanning electron microscopy, thermogravimetric analysis, point of zero charge and quantification of active sites. The effects of pH, temperature, ionic strength and the characterization of the adsorbent materials demonstrated that the adsorption capacities can be attributed to the surface chemistry of the materials and the neutral charges of the PCT and CNA molecules, as well as the mechanism which is mainly influenced by dispersive π - π and π -cation interactions.

Keywords: Adsorption, Activated Carbon, Chlorphenamine, Carbon Xerogel, Paracetamol.

**ÍNDICE**

CAPÍTULO 1. INTRODUCCIÓN	1
CAPÍTULO 2. ANTECEDENTES	3
2.1. Contaminación del Agua	3
2.2. Contaminantes Emergentes	3
2.2.1. Compuestos Farmacéuticos	4
2.2.2. Contaminación del Agua por Paracetamol y Clorfenamina	5
2.2.3. Paracetamol	6
2.2.4. Efectos Toxicológicos del Paracetamol	7
2.2.5. Paracetamol en Solución Acuosa	7
2.2.6. Clorfenamina	8
2.2.7. Efectos Toxicológicos de la Clorfenamina	9
2.2.8. Clorfenamina en Solución Acuosa	9
2.3. Métodos de Eliminación de Compuestos Orgánicos	10
2.3.1. Adsorción	11
2.3.2. Factores que afectan en el proceso de adsorción de compuesto orgánicos	12
2.4. Materiales Adsorbentes	13
2.4.1. Materiales de Carbono	14
2.4.2. Carbón Activado	15
2.4.3. Tipos de Activación	16
2.4.4. Xerogeles de Carbón	18
2.5. Isotermas de Adsorción	20
2.5.1. Langmuir	20
2.5.2. Freundlich	21
2.5.3. Radke–Prausnitz	21



CAPÍTULO 3. JUSTIFICACIÓN, HIPÓTESIS Y OBJETIVOS	22
3.1. Justificación	22
3.2. Hipótesis	22
3.3. Objetivos	23
CAPÍTULO 4. MATERIAL	24
4.1. Materiales Adsorbentes	24
4.1.1. Carbón Activado Comercial Gama B	24
4.1.2. Carbón Activado Megapol M	24
4.1.3. Xerogeles de Carbón	24
4.2. Reactivos y Sustancias	25
4.3. Compuestos Farmacéuticos	26
4.4. Soluciones Patrón	26
4.4.1. Solución Buffer	26
4.5. Instrumentos y Equipos Analíticos	27
4.6. Adsorbedor Experimental de Lote	28
CAPITULO 5. MÉTODOS	29
5.1. Materiales Adsorbentes	29
5.1.1. Síntesis de Xerogel Orgánico	29
5.2. Caracterización de Materiales Carbonosos	30
5.2.1. Propiedades de Textura mediante Fisisorción de Nitrógeno a 77 K	30
5.2.2. Clasificación del Tamaño de Poros	31
5.2.3. Modelos para Interpreta las Isotermas de Adsorción-Desorción de Nitrógeno	31



5.3. Cuantificación de Sitios Activos	34
5.4. Distribución de la Carga Superficial y Punto de Carga Cero	35
5.5. Microscopía Electrónica de Barrido	36
5.6. Métodos de Cuantificación de los Compuestos Farmacéuticos	37
5.6.1. Cuantificación de Paracetamol	37
5.6.2. Cuantificación de Clorfenamina	37
5.7. Métodos para la Obtención de Datos Experimentales del Equilibrio de Adsorción	38
5.7.1. Equilibrio Individual de Adsorción	38
CAPÍTULO 6. DATOS EXPERIMENTALES Y CÁLCULOS	39
6.1. Propiedades de Textura	39
6.2. Cuantificación de Sitios Activos	43
6.3. Distribución de la Carga Superficial y Punto de Carga Cero	46
6.4. Cálculo de las Concentraciones de Paracetamol y Clorfenamina	48
6.5. Cálculo de la Masa Adsorbida de Paracetamol y Clorfenamina	48
CAPÍTULO 7. RESULTADOS Y DISCUSIÓN.	67
7.1. Caracterización de los Materiales Adsorbentes	67
7.1.1. Propiedades de Textura	67
7.1.2. Análisis Termogravimétrico	70
7.1.3. Cuantificación de Sitios Activos	73
7.1.4. Punto de Carga Cero y Distribución de la Carga Superficial	75
7.1.5. Morfología y Estructura de los Materiales Adsorbentes	76
7.2. Equilibrio de Adsorción Individual de Paracetamol y Clorfenamina	79



7.2.1. Adsorción Individual de Paracetamol sobre los Carbones Activados GB y MM	79
7.2.2. Adsorción Individual de Paracetamol sobre los Xerogeles XC y XCA	83
7.2.3. Adsorción Individual de Clorfenamina sobre los Xerogeles XC y XCA	86
7.3. Mecanismo de Adsorción	88
7.4. Comparación de las Capacidades de Adsorción	89
CAPÍTULO 8. CONCLUSIONES	92
REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS	29
APÉNDICE A	103
APÉNDICE B.	139



ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 2.1. Presencia de compuestos farmacéuticos en cuerpos de agua alrededor del mundo.	2
Tabla 2.2. Concentraciones de PCT y CNA en cuerpos de agua de varios países.	6
Tabla 2.3. Propiedades fisicoquímicas del Paracetamol.	7
Tabla 2.4. Propiedades fisicoquímicas de la Clorfenamina.	9
Tabla 2.5. Comparación de las capacidades de diferentes materiales para adsorber PCT y CNA.	14
Tabla 4.1. Especificaciones de los carbones activos en estudio reportadas por Carbotecnia.	24
Tabla 4.2. Reactivos y sustancias utilizadas.	25
Tabla 4.3. Condiciones de la preparación de soluciones utilizadas.	26
Tabla 4.4. Equipos e instrumentos utilizados.	27
Tabla 5.1. Soluciones utilizadas para la determinación de los sitios activos.	34
Tabla 6.1. Cálculos de la distribución de tamaño de los poros y volumen total acumulado correspondiente al material GB.	42
Tabla 6.2. Datos experimentales de la cuantificación de sitios básicos totales en XC.	43
Tabla 6.3. Datos experimentales para la cuantificación de sitios activos de los diferentes materiales.	45
Tabla 6.4. Datos experimentales de la carga superficial de los carbones activados GB y MM.	47
Tabla 6.5. Datos experimentales de la carga superficial de los carbones activados XC y XCA.	47
Tabla 6.6. Datos experimentales del equilibrio de adsorción de PCT sobre Gama B en solución acuosa a pH = 3, I = 0.01 N (HCl/NaOH) y T = 25 °C.	48
Tabla 6.7. Datos experimentales del equilibrio de adsorción de PCT sobre Gama B en solución acuosa a pH = 7, I = 0.01 N (HCl/NaOH) y T = 25 °C.	49
Tabla 6.8. Datos experimentales del equilibrio de adsorción de PCT sobre Gama B en solución acuosa a pH = 11, I = 0.01 N (HCl/NaOH) y T = 25 °C.	49
Tabla 6.9. Datos experimentales del equilibrio de adsorción de PCT sobre Gama B en solución acuosa a pH = 7, I = 0.05 N (HCl/NaOH) y T = 25 °C.	50
Tabla 6.10. Datos experimentales del equilibrio de adsorción de PCT sobre Gama B en solución acuosa a pH = 7, I = 0.1 N (HCl/NaOH) y T = 25 °C.	50
Tabla 6.11. Datos experimentales del equilibrio de adsorción de PCT sobre Gama B en solución acuosa a pH = 7, I = 0.01 N (HCl/NaOH) y T = 15 °C.	51



Tabla 6.12. Datos experimentales del equilibrio de adsorción de PCT sobre Gama B en solución acuosa a pH = 7, I = 0.01 N (HCl/NaOH) y T = 35 °C.	51
Tabla 6.13. Datos experimentales del equilibrio de adsorción de PCT sobre Megapol M en solución acuosa a pH = 5, I = 0.01 N (HCl/NaOH) y T = 25 °C.	52
Tabla 6.14. Datos experimentales del equilibrio de adsorción de PCT sobre Megapol M en solución acuosa a pH = 7, I = 0.01 N (HCl/NaOH) y T = 25 °C.	52
Tabla 6.15. Datos experimentales del equilibrio de adsorción de PCT sobre Megapol M en solución acuosa a pH = 11, I = 0.01 N (HCl/NaOH) y T = 25 °C.	53
Tabla 6.16. Datos experimentales del equilibrio de adsorción de PCT sobre Megapol M en solución acuosa a pH = 7, I = 0.05 N (HCl/NaOH) y T = 25 °C.	53
Tabla 6.17. Datos experimentales del equilibrio de adsorción de PCT sobre Megapol M en solución acuosa a pH = 7, I = 0.1 N (HCl/NaOH) y T = 25 °C.	54
Tabla 6.18. Datos experimentales del equilibrio de adsorción de PCT sobre Megapol M en solución acuosa a pH = 7, I = 0.01 N (HCl/NaOH) y T = 15 °C.	54
Tabla 6.19. Datos experimentales del equilibrio de adsorción de PCT sobre Megapol M en solución acuosa a pH = 7, I = 0.01 N (HCl/NaOH) y T = 35 °C.	55
Tabla 6.20. Datos experimentales del equilibrio de adsorción de PCT sobre Xerogel de Carbón en solución acuosa a pH = 3, I = 0.01 N (HCl/NaOH) y T = 25 °C.	55
Tabla 6.21. Datos experimentales del equilibrio de adsorción de PCT sobre Xerogel de Carbón en solución acuosa a pH = 7, I = 0.01 N (HCl/NaOH) y T = 25 °C.	56
Tabla 6.22. Datos experimentales del equilibrio de adsorción de PCT sobre Xerogel de Carbón en solución acuosa a pH = 11, I = 0.01 N (HCl/NaOH) y T = 25 °C.	56
Tabla 6.23. Datos experimentales del equilibrio de adsorción de PCT sobre Xerogel de Carbón en solución acuosa a pH = 7, I = 0.05 N (HCl/NaOH) y T = 25 °C.	57
Tabla 6.24. Datos experimentales del equilibrio de adsorción de PCT sobre Xerogel de Carbón en solución acuosa a pH = 7, I = 0.1 N (HCl/NaOH) y T = 25 °C.	57
Tabla 6.25. Datos experimentales del equilibrio de adsorción de PCT sobre Xerogel de Carbón en solución acuosa a pH = 7, I = 0.01 N (HCl/NaOH) y T = 15 °C.	58
Tabla 6.26. Datos experimentales del equilibrio de adsorción de PCT sobre Xerogel de Carbón en solución acuosa a pH = 7, I = 0.01 N (HCl/NaOH) y T = 35 °C.	58
Tabla 6.27. Datos experimentales del equilibrio de adsorción de PCT sobre Xerogel de Carbón Activado en solución acuosa a pH = 3, I = 0.01 N (HCl/NaOH) y T = 25 °C.	59



Tabla 6.28. Datos experimentales del equilibrio de adsorción de PCT sobre Xerogel de Carbón Activado en solución acuosa a pH = 7, I = 0.01 N (HCl/NaOH) y T = 25 °C.	59
Tabla 6.29. Datos experimentales del equilibrio de adsorción de PCT sobre Xerogel de Carbón Activado en solución acuosa a pH = 11, I = 0.01 N (HCl/NaOH) y T = 25 °C.	60
Tabla 6.30. Datos experimentales del equilibrio de adsorción de PCT sobre Xerogel de Carbón Activado en solución acuosa a pH = 7, I = 0.05 N (HCl/NaOH) y T = 25 °C.	60
Tabla 6.31. Datos experimentales del equilibrio de adsorción de PCT sobre Xerogel de Carbón Activado en solución acuosa a pH = 7, I = 0.1 N (HCl/NaOH) y T = 25 °C.	61
Tabla 6.32. Datos experimentales del equilibrio de adsorción de PCT sobre Xerogel de Carbón Activado en solución acuosa a pH = 7, I = 0.01 N (HCl/NaOH) y T = 15 °C.	61
Tabla 6.33. Datos experimentales del equilibrio de adsorción de PCT sobre Xerogel de Carbón Activado en solución acuosa a pH = 7, I = 0.01 N (HCl/NaOH) y T = 35 °C.	62
Tabla 6.34. Datos experimentales del equilibrio de adsorción de CNA sobre Xerogel de Carbón en solución acuosa a pH = 3, I = 0.01 N (HCl/NaOH) y T = 25 °C.	62
Tabla 6.35. Datos experimentales del equilibrio de adsorción de CNA sobre Xerogel de Carbón en solución acuosa a pH = 7, I = 0.01 N (HCl/NaOH) y T = 25 °C.	63
Tabla 6.36. Datos experimentales del equilibrio de adsorción de CNA sobre Xerogel de Carbón en solución acuosa a pH = 11, I = 0.01 N (HCl/NaOH) y T = 25 °C.	63
Tabla 6.37. Datos experimentales del equilibrio de adsorción de CNA sobre Xerogel de Carbón en solución acuosa a pH = 11, I = 0.01 N (HCl/NaOH) y T = 15 °C.	64
Tabla 6.38. Datos experimentales del equilibrio de adsorción de CNA sobre Xerogel de Carbón en solución acuosa a pH = 11, I = 0.01 N (HCl/NaOH) y T = 35 °C.	64
Tabla 6.39. Datos experimentales del equilibrio de adsorción de CNA sobre Xerogel de Carbón Activado en solución acuosa a pH = 3, I = 0.01 N (HCl/NaOH) y T = 25 °C.	65
Tabla 6.40. Datos experimentales del equilibrio de adsorción de CNA sobre Xerogel de Carbón Activado en solución acuosa a pH = 7, I = 0.01 N (HCl/NaOH) y T = 25 °C.	65
Tabla 6.41. Datos experimentales del equilibrio de adsorción de CNA sobre Xerogel de Carbón Activado en solución acuosa a pH = 11, I = 0.01 N (HCl/NaOH) y T = 25 °C.	66
Tabla 7.1. Propiedades de Textura de los materiales adsorbentes.	67
Tabla 7.2. Sitios activos de los materiales adsorbentes.	74





ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 2.1. Diagrama de especiación del Paracetamol en solución acuosa a $T = 25\text{ }^{\circ}\text{C}$ y $C_T = 1000\text{ mg/L}$.	8
Figura 2.2. Diagrama de especiación de la Clorfenamina en solución acuosa a $C_T = 1000\text{ mg/L}$ y $T = 25^{\circ}\text{C}$.	10
Figura 2.3. Representación de la estructura porosa de los carbones activados.	16
Figura 2.4. Ionización de los grupos funcionales presentes en la superficie del carbón activado en función del pH del medio a) ácido, b) neutro y c) básico.	17
Figura 4.1. Esquema de un adsorbedor de lote.	28
Figura 5.1. Representación gráfica de la síntesis de los Xerogeles.	30
Figura 6.1. Isoterma de adsorción-desorción de N_2 a 77 K del carbón activado GB.	39
Figura 6.2. Curvas potenciométricas de referencia del material GB.	46
Figura 7.1. Isoterma de adsorción-desorción de N_2 sobre GB y MM a 77 K .	68
Figura 7.2. Isoterma de adsorción-desorción de N_2 sobre XC y XCA a 77 K .	68
Figura 7.3. Distribución de tamaño de poro de a) GB, b) MM, c) XC y d) XCA obtenidas por el método BJH.	69
Figura 7.4. Distribución del volumen acumulado de los poros contra el diámetro de poro por DFT de a) GB y MM y b) XC y XCA.	70
Figura 7.5. Curvas TGA de a) GB, b) PCT y c) GB/PCT.	72
Figura 7.6. Curvas TGA y DTG de a) XC, b) XC/PCT.	73
Figura 7.7. Estructura química del xerogel orgánico.	75
Figura 7.8. Distribución de las cargas superficiales de los materiales adsorbentes a) GB y MM y b) XC y XCA.	76
Figura 7.9. Fotomicrografías del carbón activado granular GB a diferente magnificación.	77
Figura 7.10. Fotomicrografías del carbón activado MM en polvo a diferente magnificación.	77
Figura 7.11. Fotomicrografías del XC a magnificación de a) $\times 500$ y b) $\times 2000$.	78
Figura 7.12. Fotomicrografías del XCA a una magnitud de a) $\times 300$ y b) $\times 750$.	79
Figura 7.13. Efecto de pH de la solución en la capacidad de a) GB y b) MM para adsorber PCT a $I = 0.01\text{ N}$ y $T = 25\text{ }^{\circ}\text{C}$. Las líneas representan la isoterma de Radke-Prausnitz.	80
Figura 7.14. Efecto de fuerza iónica de la solución en la capacidad de a) GB y b) MM para adsorber PCT a $\text{pH} = 7$ y $T = 25\text{ }^{\circ}\text{C}$. Las líneas representan el modelo de la isoterma Radke-Prausnitz.	81



Figura 7.15. Efecto de temperatura de la solución de PCT en la capacidad de adsorción de a) GB y b) MM a $\text{pH} = 7$ y $I = 0.01 \text{ N}$. Las líneas representan el modelo de la isoterma Radke-Prausnitz.	83
Figura 7.16. Efecto de pH de la solución en la capacidad de a) XC y b) XCA para adsorber PCT a $T = 25 \text{ }^\circ\text{C}$ y $I = 0.01 \text{ N}$. Las líneas representan el modelo de la isoterma Radke-Prausnitz.	85
Figura 7.17. Efecto de temperatura en la capacidad de a) XC y b) XCA para adsorber PCT a $\text{pH} = 7$ y $I = 0.01 \text{ N}$. Las líneas representan el modelo de la isoterma Radke-Prausnitz.	86
Figura 7.18. Efecto de fuerza iónica de la solución en la capacidad de a) XC y b) XCA para adsorber PCT a $\text{pH} = 7$ y $T = 25 \text{ }^\circ\text{C}$. Las líneas representan el modelo de la isoterma Radke-Prausnitz.	87
Figura 7.19. Efecto del pH de la solución en la capacidad de a) XC y b) XCA para adsorber CNA a $T = 25 \text{ }^\circ\text{C}$ y $I = 0.01 \text{ N}$. Las líneas representan el modelo de la isoterma Radke-Prausnitz.	88
Figura 7.20. Efecto de temperatura en la capacidad XC para adsorber CNA a $\text{pH} = 7$ y $I = 0.01 \text{ N}$. Las líneas representan el modelo de la isoterma Radke-Prausnitz.	88
Figura 7.21. Comparación de las capacidades de adsorción de GB, MM, XC y XCA para adsorber PCT a $T=25 \text{ }^\circ\text{C}$.	90
Figura 7.22. Comparación de las capacidades de adsorción de XC y XCA para adsorber CNA a $T=25 \text{ }^\circ\text{C}$.	91
Figura 7.23. Comparación de las capacidades de adsorción de GB, MM, XC y XCA para adsorber PCT y CNA. Las líneas representan el modelo de la isoterma de Radke-Prausnitz.	91



CAPÍTULO 1. INTRODUCCIÓN

El agua es un recurso de vital importancia para todos los seres vivos y cubre aproximadamente el 71 % de la superficie de la Tierra. La mayor parte se encuentra en los océanos y solo un bajo porcentaje está en lagos, ríos, glaciares y en el subsuelo como agua subterránea. Además, le agua tiene una función importante en la naturaleza, ya que participa en el ciclo del agua, lo que incluye procesos como la evaporación, condensación, precipitación e infiltración.

En cuanto a los seres humanos, el agua es indispensable para distintas actividades, como la agricultura, la ganadería, la industria, la higiene personal y, por supuesto, en mantener hidratado nuestro cuerpo. Por lo tanto, el acceso a agua limpia y segura es fundamental para la salud y bienestar de los seres vivos y el medio ambiente. Sin embargo, actualmente la mayor parte de los cuerpos de agua del planeta se encuentran contaminados, debido a las actividades humanas como las industrias químicas, farmacéuticas, energéticas, entre muchas otras. A diferencia de la contaminación natural, estos descargan o desechan contaminantes tóxicos en los distintos cuerpos de agua.

Los contaminantes emergentes (CEs) han sido detectados recientemente como compuestos orgánicos en el medio ambiente y pueden representar riesgos al ecosistema y a la salud humana. Estos compuestos desafortunadamente no son monitoreados en el agua o los alimentos, por lo que causan mayor preocupación. La presencia de los CEs puede persistir en el medio ambiente durante largos periodos de tiempo, lo que conlleva a su acumulación en los tejidos y la alteración de procesos biológicos. Entre estos CEs se encuentran los productos farmacéuticos, ya que estos se convierten en contaminantes al momento en que se liberan al medio ambiente. Estos productos farmacéuticos ingresan a los cuerpos de agua, como ríos y lagos, y posteriormente se han detectado en agua potable y en ecosistemas acuáticos.

Algunos de estos compuestos farmacéuticos contaminantes son los antibióticos, tales como la tetraciclina, doxiciclina y trimetoprima, los analgésicos y antiinflamatorios como el ibuprofeno, paracetamol, clorfenamina y diclofenaco, y hormonas como los anticonceptivos y medicamentos psicoactivos. Dos fármacos frecuentemente utilizados por la sociedad son el paracetamol (PCT) y la clorfenamina (CNA). Estos son empleados para el tratamiento de





dolores o afecciones musculares, inflamaciones y resfriados. Ambos analgésicos han sido detectados en diferentes cuerpos de agua, incluyendo el agua potable alrededor del mundo. Adicionalmente, las plantas de tratamiento de agua no cuentan con las tecnologías adecuadas para la eliminación de contaminantes farmacéuticos. Por esta razón, se han investigado diferentes métodos de tratamientos terciarios para eliminar estos compuestos persistentes en el agua. Entre estos métodos destacan los procesos avanzados de oxidación, cloración y adsorción.

La adsorción es un método eficiente para eliminar contaminantes del agua aún en bajas concentraciones. Actualmente, se han desarrollado distintos materiales adsorbentes sintéticos, como el hidróxido doble laminar (HDL), carbones activados, xerogeles de carbón, resinas poliméricas y algunos de origen natural como las arcillas y las zeolitas. Estos adsorbentes se caracterizan por poseer altas capacidades de adsorción y por ser relativamente económicos, adicionalmente en algunos casos se pueden regenerar y reutilizar.

En este proyecto de investigación se plantea la eliminación de compuestos farmacéuticos en soluciones acuosas mediante el proceso de adsorción. Los adsorbentes utilizados son carbones activados comerciales denominados Gama B (GB) y Megapol M (MM), y Xerogel de Carbón (XC) y Xerogel de Carbón Activado (XCA). Los materiales carbonosos se han utilizado en la adsorción de compuestos orgánicos ya que presentan alta capacidad de adsorción debido a que se favorecen las interacciones dispersivas π - π entre los anillos aromáticos del grafeno carbón y del compuesto orgánico.

El objetivo principal de este proyecto es caracterizar los cuatro materiales adsorbentes para determinar sus propiedades de textura y fisicoquímicas. Además, se evaluará el equilibrio de adsorción de PCT sobre GB, MM, XC y XCA, y CNA sobre XC y XCA, además se analizará el efecto de las propiedades de los adsorbentes y de las condiciones de la solución tales como pH, temperatura y fuerza iónica sobre la capacidad de adsorción. También, se estudiará el efecto de la activación en la capacidad de adsorción del XCA.





CAPÍTULO 2. ANTECEDENTES

2.1. Contaminación del Agua

El agua es una sustancia líquida e incolora que existe en la naturaleza cubriendo hasta un 71 % de la superficie de la Tierra. Esta sustancia líquida, es un recurso indispensable en la vida cotidiana de todo ser vivo, debido a que es indispensable en casi todos los procesos que se llevan a cabo. Sin embargo, este vital líquido se ha estado contaminado con diferentes especies presentes en las aguas municipales y residuales de la industria alimentaria, textil, farmacéutica y metalúrgica. La presencia de los contaminantes ha disminuido la calidad del agua para consumo de los seres vivos, y se estima que alrededor del 90 % del agua de diferentes ciudades se encuentra contaminada. Además, se ha considerado que el 70 % es proveniente de aguas residuales de los hogares y el 30 % proviene de la industria (Geissen et al., 2015). De acuerdo con la literatura, el agua es contaminada por diferentes tipos de contaminantes, algunos de ellos de origen natural y otros de origen antropogénico (Hoang et al., 2022).

La contaminación natural se debe a las erupciones volcánicas, incendios, tormentas de arena y descomposición de materia orgánica, entre otros. En cambio, la contaminación de origen antropogénico es ocasionada por las actividades del ser humano. Estos contaminantes han alarmado a la sociedad debido a la calidad del agua que tienen los cuerpos de agua, las enfermedades que se pueden provocar y la poca disponibilidad de agua limpia en el mundo (Aránguez et al., 1999). Actualmente, existen contaminantes que no se encuentran regulados por ninguna norma, estos son los contaminantes emergentes, debido a que se considera que no tienen impacto significativo en el ambiente. Por esta razón, se desconocen los efectos de los contaminantes emergentes en el medio ambiente y en la salud humana (Taheran et al., 2018).

2.2. Contaminantes Emergentes

Los contaminantes emergentes (CE) son utilizados cotidianamente en la preparación productos de uso personal, pesticidas, fármacos y surfactantes (Wilkinson et al., 2017). Recientemente, estos compuestos de diferente origen y naturaleza química han sido detectados en los medios acuáticos, incrementando el riesgo de causar impacto ecológico, como también efectos nocivos a la salud humana (Kyzas et al., 2015). No obstante, la concentración de estos





compuestos se considera muy baja y por esa razón no son considerados peligrosos (Poynton y Robinson, 2018). Los CE se dividen en tres categorías (Gogoi et al., 2018):

1. Productos farmacéuticos
2. Productos de cuidado personal
3. Productos como insecticidas, pesticidas y fertilizantes

Actualmente, no hay ninguna ley que regule los límites máximos permisibles de los CE en aguas residuales y potable alrededor del mundo. En cambio, en países como Estados Unidos y Suiza se han realizado listas de vigilancia para algunos fármacos, tales como diclofenaco, sulfametoxazol, ibuprofeno, paracetamol y productos de cuidado personal, para reducir y controlar su consumo (Gogoi et al., 2018). Desafortunadamente, no existen datos sobre la presencia, concentración y ecotoxicidad de estos contaminantes, y por esta razón, es difícil estimar sus efectos en la salud humana (Barceló, 2003). En la Tabla 2.1 se enlistan la presencia algunos compuestos farmacéuticos presentes en cuerpos de agua alrededor del mundo.

Tabla 2.1. Presencia de compuestos farmacéuticos en cuerpos de agua alrededor del mundo.

Lugar	Contaminante	Cuerpo de agua	Concentración ($\mu\text{g/L}$)	Referencia
Pensilvania	Trimetoprima	Planta de tratamiento de agua	9.8	(Kibuye et al., 2019)
Ghana	Tetraciclina	Agua superficial	0.03	(Azanu et al., 2018)
México	Ampicilina	Planta de tratamiento de agua	17.1	(Zacarías et al., 2017)
España	Diclofenaco	Aguas residuales hospitalarias	0.05-13.7	(Cruz-Morató et al., 2014)
USA	Sulfametoxazol	Agua subterránea	0.17	(Fram et al., 2011)
Corea del Sur	Ibuprofeno	Agua superficial	0.0014	(Kim et al., 2009)
	Carbamazepina		0.60	

2.2.1. Compuestos Farmacéuticos

Los productos farmacéuticos son estructuras complejas que generarán subproductos propios de su metabolismo, los cuales, bajo las condiciones del ecosistema en el que se





encuentren, pueden ser bioacumulables e incluso mucho más tóxicos que el compuesto original (Jiménez-Cartagena, 2011). Los fármacos pueden degradarse por microorganismos como bacterias y hongos, propiciando la formación de metabolitos que algunas veces pueden ser más tóxicos que el fármaco original (Santos et al., 2010; Gröning et al., 2007).

Actualmente la presencia de fármacos en el agua se debe a la gran producción de la industria farmacéutica, y el elevado consumo que existe en la sociedad, ocasionando contaminación de las aguas residuales de los hospitales y los hogares. Sin embargo, en años recientes se ha comprobado que la contaminación química ha estado aumentando y se han detectado estos contaminantes en fuentes de agua superficiales, provocando problemas en las funciones sexuales de los peces, afectando su reproducción y la cadena alimenticia. Adicionalmente, no se sabe con certeza las afecciones que puedan causar, y estos efectos podrían no solo estar limitados a los peces, sino a toda la humanidad (ONU, 2018).

En 2017, la UNESCO realizó una investigación sobre 118 compuestos farmacéuticos en los sistemas de tratamiento de agua en la región del mar Báltico y encontró que tan solo nueve de estos productos farmacéuticos fueron eliminados al 95 % y del resto solo se eliminó la mitad. Uno de esos compuestos estudiados es el PCT (ONU, 2018).

2.2.2. Contaminación del Agua por Paracetamol y Clorfenamina

En 1977 se detectó el primer compuesto farmacéutico se detectó en cuerpos de agua; sin embargo, no fue hasta finales del año 1990 que adquirió un particular interés en la comunidad científica. En el caso de la clorfenamina (CNA) y el paracetamol (PCT) fueron detectados principalmente en agua superficial, agua subterránea y agua potable. Por ejemplo, el PCT se ha detectado en 100 % de las aguas residuales de hospitales, en países de Asia, Europa y América, y las concentraciones varían desde 50 y 400 $\mu\text{g/L}$ (Hoang et al., 2022). En la Tabla 2.2 se presentan las concentraciones de PCT y CNA en cuerpos de agua en distintos lugares del mundo.

Tabla 2.2. Concentraciones de PCT y CNA en cuerpos de agua de varios países.

Lugar	Contaminante	Cuerpo de agua	Concentración ($\mu\text{g/L}$)	Referencia
-------	--------------	----------------	--------------------------------------	------------





USA			0.12	Westerhoff et al., 2005
España		Agua potable	0.26	Boleda et al., 2011
Canadá	PCT		0.30	Kleywegt et al., 2011
México		Aguas superficiales y residuales	0.38	Castro-Pastrana et al., 2021
Escocia		Agua de mar	0.4-1.4	McKenzie et al., 2020
Omán	CNA	Agua residual hospitalaria	0.29	Ali et al., 2019

2.2.3. Paracetamol

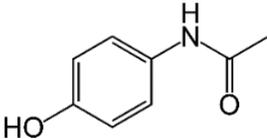
El PCT es también conocido como acetaminofén (ACT), fue utilizado por primera vez en USA en 1955 y en 1956 en UK. Es un medicamento con propiedades analgésicas y antipiréticas utilizado principalmente en infantes y adultos para tratar dolores leves, como dolor de cabeza, procedimientos quirúrgicos menores y fiebre causada por el resfriado común o gripa, y se consume en diferentes presentaciones como pastillas, jarabe, inyectable y supositorios rectales. Después de su administración parte de este fármaco no es metabolizado por el cuerpo, y es eliminado de nuestro sistema por la orina. En México, como en la mayor parte del mundo, es un medicamento de venta libre, lo que ha provocado un aumento en su consumo en los últimos años. Las propiedades fisicoquímicas y la estructura del PCT se muestran en la Tabla 2.3.

Tabla 2.3. Propiedades fisicoquímicas del Paracetamol.

<i>Compuesto</i>	<i>Estructura química</i>	<i>Fórmula molecular</i>	<i>Peso molecular</i>	<i>Ka^a</i>
------------------	---------------------------	--------------------------	-----------------------	-----------------------





<i>Paracetamol</i>		$C_8H_9NO_2$	151.16 g/mol	9.38
--------------------	---	--------------	--------------	------

^a Constante de disociación

Además, el consumo excesivo de este compuesto puede causar tanto problemas psicológicos como problemas en el hígado.

2.2.4. Efectos Toxicológicos del Paracetamol

Está documentado que el paracetamol con dosis controladas rara vez tiene efectos adversos; sin embargo, algunas personas podrían presentar reacciones alérgicas o comezón en el cuerpo. En cambio, el uso prolongado de este analgésico llega a provocar hepatotoxicidad y también dañar algunos órganos, tales como los riñones, el corazón y el sistema nervioso central generando insuficiencia renal hepática fulminante y, en el peor de los casos, podría causar la muerte (Igwegbe et al., 2021). En casos de sobredosis, las personas con mayor riesgo de envenenamiento son personas adultas mayores, niños pequeños, y personas alcohólicas con problemas en el hígado, y con desnutrición. Generalmente, los síntomas se presentan durante las 24 horas, provocando náuseas, vomito y dolor abdominal. Siendo el PCT uno de los compuestos farmacéuticos comúnmente responsable de reportes de sobredosis en los centros de toxicología (Iwuozor, 2019).

2.2.5. Paracetamol en Solución Acuosa

La solubilidad del PCT en solución acuosa es de 12.780 mg/L a 20 °C, y, por ende, es muy probable que esté presente en los cuerpos de agua. Además, el PCT posee distintos grupos funcionales que le permiten aceptar o donar protones, y la molécula puede estar cargada de distinta manera dependiendo del pH de la solución. El PCT posee dos especies, una aniónica (PCT^-) y otra neutra (PCT^0). La especie neutra se encuentra a $pH < 7$, mientras que la especie aniónica a $pH > 8$. En la Figura 2.1 se ilustra el diagrama de especiación calculado a partir de la reacción de disociación que se presenta a continuación:



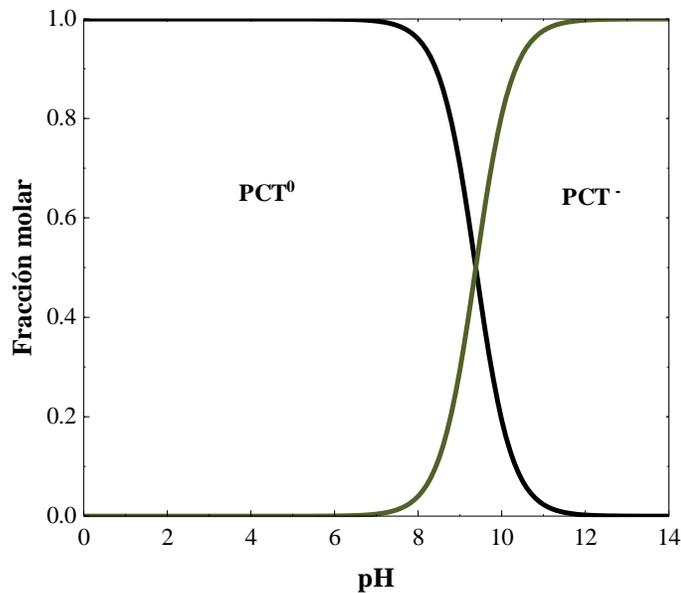


Figura 2.1. Diagrama de especiación del PCT en solución acuosa a $T = 25 \text{ }^\circ\text{C}$ y $C_T = 1000 \text{ mg/L}$.

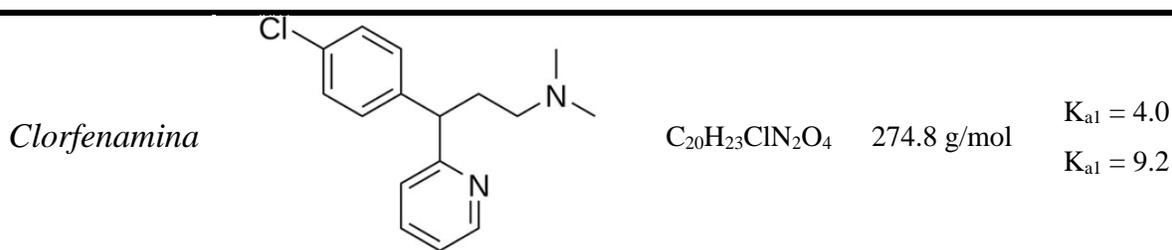
2.2.6. Clorfenamina

La clorfenamina (CNA) es un antihistamínico utilizado para tratar reacciones alérgicas, resfriado común, enrojecimiento, picazón y lagrimeo de ojos, estornudos, irritación de la nariz o garganta, secreción nasal e inclusive la tos. Este fármaco no acelera la recuperación, sino que ayuda bloqueando la acción de la histamina, una sustancia del cuerpo que produce las alergias. Sin embargo, su consumo ha estado aumentando durante los últimos años, debido a la sobrepoblación y que es un medicamento de venta libre. Las propiedades fisicoquímicas de la CNA se muestran en la Tabla 2.4.

Tabla 2.4. Propiedades fisicoquímicas de la Clorfenamina.

<i>Compuesto</i>	<i>Estructura química</i>	<i>Fórmula molecular</i>	<i>Peso molecular</i>	<i>Ka</i>
------------------	---------------------------	--------------------------	-----------------------	-----------





^a Constante de disociación

2.2.7. Efectos Toxicológicos de la Clorfenamina

Como se comentó anteriormente, la clorfenamina (CNA) es especialmente utilizada para tratar reacciones alérgicas y síntomas del resfriado común; sin embargo, se han reportado algunos efectos adversos en las personas. Si se está consumiendo este antihistamínico, no se recomienda realizar tareas que demanden demasiada atención o que se requiera estar alerta, tales como la conducción de un vehículo. Esto se debe a que sus efectos secundarios más comunes son la fatiga, somnolencia, vértigo, dolor de cabeza, nerviosismo, náuseas, vómito, estreñimiento, diarreas, y sequedad en boca, dependiendo de la persona los efectos podrían presentarse con mayor o menor intensidad. Además, se ha reportado que la CNA puede provocar convulsiones, especialmente en pacientes epilépticos de edad preescolar y no se recomienda su uso en ellos.

2.2.8. Clorfenamina en Solución Acuosa

La solubilidad de la CNA es de 5.5 g/L. El diagrama de especiación se ilustra en la Figura 2.2 y se puede observar que cuenta con tres especies en solución acuosa. La especie catiónica CNA^{+2} predomina a $pH < 4$, la especie catiónica CNA^{+} es preponderante a pH entre 5 y 8, y la especie neutra, CNA^0 se encuentra en un $pH > 9$ (Lv et al., 2014).



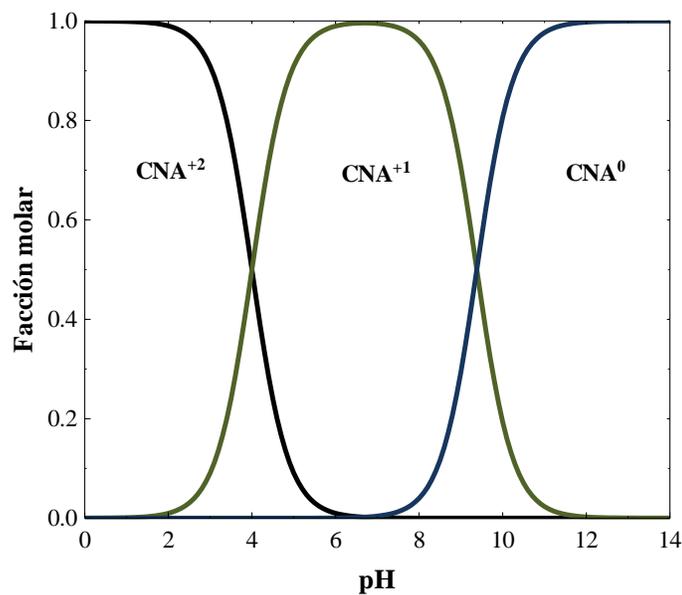


Figura 2.2. Diagrama de especiación de la Clorfenamina en solución acuosa a $C_T = 1000$ mg/L y $T = 25^\circ\text{C}$.

2.3. Métodos de Eliminación de Compuestos Orgánicos

Los procesos para eliminar estos compuestos en soluciones acuosas deben ser capaces de mineralizar los contaminantes o transformarlos en materiales inocuos al hombre y a la naturaleza a un bajo costo. Con el uso de nuevas tecnologías y sistemas de tratamiento, algunas industrias han dejado de realizar algunas actividades como el almacenamiento de desechos y el confinamiento, ya que no son recomendables desde el punto de vista de la salud humana y el medio ambiente.

Existen diferentes métodos utilizados para eliminar compuestos orgánicos en efluentes acuosos, algunos de estos son los procesos avanzados de oxidación, fotodegradación con luz UV, separación con membranas y adsorción, entre otros. Los métodos de tratamiento conllevan diferentes características que permiten identificar qué tipo de tratamiento se necesita para la eliminación eficiente de compuestos orgánicos en efluentes acuosos.

Los procesos avanzados de oxidación (PAO) son métodos de degradación química que mineralizan compuestos orgánicos de alto peso molecular en componentes de bajo peso molecular como el dióxido de carbono, agua o bien compuestos inorgánicos no dañinos. Además, estos procesos eliminan contaminantes orgánicos convirtiéndolos en productos menos





perjudiciales para la salud humana y el medio ambiente acuático. Los PAO se clasifican en diferentes tipos como son los procesos oxidativos (O_2/H_2O_2 y O_3/UV), Fenton, proceso foto-Fenton y foto-Fenton mejorado y fotooxidación (Quiroga et al., 2015). La fotodegradación con luz UV es una técnica reciente de investigación en la cual la radiación emitida por la luz UV tiene propiedades que favorecen la eliminación de contaminantes en el tratamiento de aguas residuales.

La separación con membranas se puede realizar mediante ósmosis inversa y electrodiálisis. La ósmosis inversa se utiliza en la eliminación de sales del agua, contaminantes orgánicos, colorantes, pesticidas y microorganismos. Debido a esto, el agua purificada obtenida carece de minerales y la membrana puede obstruirse después de un cierto tiempo de operación.

Estos procesos avanzados se han investigado para degradar diferentes tipos de compuestos orgánicos, tales como los fármacos PCT y CNA. Napoleño et al., (2018) estudiaron la degradación de paracetamol, diclofenaco, clorfenamina y aspirina mediante procesos avanzados de oxidación con el fin de eliminar estos compuestos orgánicos que persisten en plantas de tratamiento de aguas residuales, obteniendo un porcentaje de remoción entre 90 y 100 %. Sin embargo, Bermeo y Bermeo (2020) confirmaron que la degradación del PCT, CNA y otros compuestos orgánicos generan subproductos como benzoquinona, formaldehído y acetaldehído.

En este contexto, se ha optado por evaluar una técnica amigable con el medio ambiente como lo es la adsorción, debido a que actualmente es una de las alternativas más prometedoras para sustituir técnicas convencionales utilizadas para la remoción de compuestos orgánicos. Este proceso cuenta con diferentes ventajas, tales como fácil operación, bajos costos de operación y simplicidad de diseñar. Además, existe la posibilidad de regenerar y reutilizar del material adsorbente (Bermeo y Beermeo, 2020).

2.3.1. Adsorción

La adsorción se puede definir como un fenómeno superficial, que involucra la acumulación o concentración de sustancias en una superficie o interfase en fase líquida o gas. El compuesto que se adsorbe se le llama adsorbato y la fase donde ocurre la adsorción se le conoce como adsorbente (Cooney, 1999). La adsorción se puede clasificar en física y química,





dependiendo de qué tipo de interacción ocurre entre la molécula del adsorbato y la superficie del adsorbente (Rathi & Kumar, 2021):

- Física o también llamada fisisorción. El adsorbato se acumula en la superficie del adsorbente, ocasionado por fuerzas débiles como interacciones electrostáticas y fuerzas de Van der Waals. Dicha adsorción sucede en multicapa y es un proceso exotérmico y reversible.
- Química o también conocida como quimisorción. En este caso, la interacción entre el adsorbato y la superficie del adsorbente se debe enlaces químicos. La adsorción química es un proceso más lento a comparación de la adsorción física y se forma una monocapa en la superficie del adsorbente.

2.3.2. Factores que afectan en el proceso de adsorción de compuesto orgánicos

Algunos de los factores que afectan al proceso de adsorción son los siguientes (Leyva-Ramos, 2010):

- Propiedades de textura del adsorbente: Se conocen como propiedades de textura a las características de la estructura porosa del material adsorbente. Es importante que los adsorbentes sólidos posean una elevada área específica, debido a que la adsorción es un fenómeno que depende del área específica del adsorbente.
- Carga superficial del adsorbente: La carga superficial se genera al contactar el material adsorbente con una solución acuosa. Debido a esto, se genera una interacción entre los iones de la solución y los grupos funcionales del material adsorbente.
- Sitios activos de los adsorbentes y pH de la solución: Dependiendo del pH de la solución, los grupos funcionales de la superficie del adsorbente pueden ceder protones (sitios ácidos) o bien pueden aceptar protones (sitios básicos).
- Temperatura: La temperatura puede afectar el equilibrio de adsorción de las tres formas siguientes: 1) la capacidad de adsorción se favorece disminuyendo la temperatura, 2) la capacidad de adsorción se incrementa aumentando la temperatura y 3) la capacidad de adsorción no depende de la temperatura.





2.4. Materiales Adsorbentes

Existe una gran diversidad de materiales adsorbentes, tanto de origen natural como sintéticos. Los principales adsorbentes son carbón activado, arcillas, zeolitas, alúmina activada, y resinas poliméricas, y entre los novedosos adsorbentes destacan los xerogeles, aerogeles e hidróxido doble laminar, también, conocido como HDL. En la Tabla 2.5 se presentan las capacidades máximas de diferentes materiales adsorbentes para adsorber PCT y CNA.

Tabla 2.5. Comparación de las capacidades de diferentes materiales para adsorber PCT y CNA.

Material Adsorbente	Adsorbato	Condiciones	q_{\max} (mg/g)	Referencia
Gel de sílice		pH = 3, T = 25 °C	95	Spaltro et al., 2021
CA de cáscara de coco	PCT	pH = 9, T = 25 °C	38	Yanyan et al., 2018
CA de cáscara de anacardo		pH = 5, T = 25 °C	146	Geczo et al., 2020
CA de palma datilera		pH = 7, T = 25 °C	13	Ali et al., 2019
CA Oxidado de semilla de mango kernel	CNA	pH = 7, T = 25 °C	18	Iloh, 2023

Se considera que estos materiales adsorbentes deben poseer ciertas características para ser un material óptimo, estas características son:

- **Bajo costo y alta disponibilidad.** El material debe ser económicamente accesible y disponible para su uso a gran escala para ser utilizado en tratamientos a nivel industrial.





- **Selectividad.** Los adsorbentes deben ser selectivos o afines por el contaminante para poder eliminarlo de los cuerpos de agua.
- **Regeneración del material adsorbente.** El adsorbente debe ser regenerable, para que sea pueda reutilizar.
- **Alta capacidad de adsorción.** El adsorbente debe tener alta capacidad de adsorción por el contaminante; de lo contrario, se necesitaría mayor masa para lograr una eficiente

De acuerdo con la literatura, se han evaluado diferentes tipos de materiales adsorbentes para remover compuestos farmacéuticos del agua (Tabla 2.5) en su mayoría carbones activados, debido a las propiedades físicas y químicas que posee el CA (Carbón Activado) y que favorecen su capacidad para adsorber. En algunos trabajos se han reportado el uso de CA a base de cáscara de coco (Yanyan et al., 2018) y CA de cáscara de anacardo (Geczo et al., 2020) para adsorber PCT y se obtuvieron capacidades de adsorción entre 38 y 146 mg/g, respectivamente. En el caso de CNA, se han utilizado CA de diferentes orígenes; sin embargo, las capacidades de adsorción ya que menores de 18 mg/g. Debido a que el uso del carbón activado también podría generar un problema al medio ambiente actualmente se están desarrollando materiales con capacidades de adsorción mayores, que se adapten a las necesidades y que se puedan obtener de la forma deseada para diferentes aplicaciones.

2.4.1. Materiales de Carbono

Los adsorbentes de carbono se caracterizan por ser materiales con una amplia variedad de propiedades que los hace insustituibles en ciertos campos de aplicación diferentes. Desde hace algunos años, los materiales carbonosos han jugado un papel muy importante en el desarrollo industrial y tecnológico. Algunas de sus aplicaciones más importantes son como fuente de energía, por ser un componente principal de combustibles fósiles, y también, como material adsorbente (carbón activado), comúnmente utilizado en sistemas de purificación de líquidos (agua) y gases.

La industria de los materiales carbonosos presenta un gran interés en investigación, debido a que es un elemento abundante en el planeta. Así mismo, por la gran aplicación que tienen estos materiales, se optó por el estudio y diseño de nuevos métodos de síntesis, y, por





ende, el desarrollo de nuevas estructuras carbonosas, como son: las fibras de carbón activado, xerogeles de carbón y carbones activados granulares, entre otros.

Estos materiales normalmente se preparan a partir de un material orgánico por carbonización en las fases sólida, líquida y gaseosa. Los mecanismos involucrados son significativamente diferentes. Una carbonización en fase sólida siempre procede dentro de la fase en estado sólido con todos los cambios estructurales que implican la eliminación y reemplazo de átomos dentro de una red sólida que permanece esencialmente rígida durante todo el proceso. Las carbonizaciones en fase líquida son muy diferentes. Los sólidos que emergen de un líquido carbonizante (alquitrán de hulla y yacimientos de petróleo) están extremadamente bien organizados y constituyen los carbones grafitables (también llamados carbones anisotrópicos).

2.4.2. Carbón Activado

La producción de carbón activado (CA) se estima en alrededor de 100,000 toneladas anuales (Samsuri et al., 2014). Los precursores para la producción de CA son la madera, antracita, carbón bituminoso, lignito, cáscara de coco y nuez. Así mismo, un carbón activado se puede producir a partir de residuos agrícolas, como cáscara de arroz, bagazo, semillas de frutas (cereza y uvas), cáscaras (nuez, almendra y pistacho), huesos e incluso granos de café (Klasson et al., 2013). La preparación de los CAs consta de dos etapas fundamentales, la carbonización y activación.

La carbonización del material consiste en pirolizar el material crudo a temperaturas entre 700 y 900 °C con el objetivo de evaporar y eliminar hidrocarburos en la ausencia de oxígeno. Sin embargo, el material resultante tiene baja porosidad, es por ello que se lleva a cabo la activación del material carbonizado (Byamba-Ochir et al., 2016). La activación, se realiza en una atmósfera de gases oxidantes como dióxido de carbono y nitrógeno a temperaturas entre 800 y 1100 °C. Después de la activación, se obtiene el material activado con la formación de poros que pueden variar en macroporos, mesoporos y microporos dependiendo del precursor y las condiciones de preparación (ver Figura 2.3) (Yayha et al., 2015).



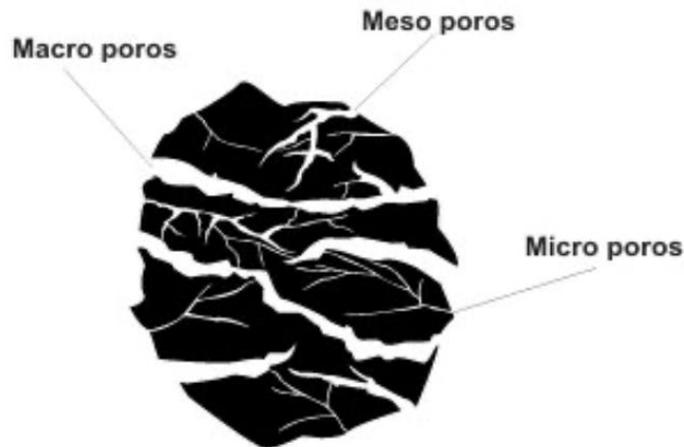


Figura 2.3. Representación esquemática de la estructura porosa de los CAs.

Una propiedad importante de los CAs es su carácter anfótero que solamente se presenta cuando se encuentra en solución. Los grupos funcionales que el CA posee en la superficie tienen la capacidad de aceptar y donar protones dependiendo del pH de la solución posibilitando que el CA se comporte como ácido o base. Tal proceso depende de la constante de ionización (pK_a) de cada grupo funcional en la superficie. Los grupos ácidos tienen sus constantes de disociación ácida en intervalos de pH de 3-6 (carboxílicos), 7-9 (lactónicos) y 8-11 (fenólicos). En la Figura 2.4 se ilustran los grupos funcionales del CA (Carrales-Alvarado, 2014).

2.4.3. Tipos de Activación

El proceso de activación de los CAs favorece la formación de los poros. Estos procesos se dividen en dos categorías, la activación química y la activación física. Sin embargo, en ambos casos ocurren reacciones químicas, pero se denomina activación física cuando se utilizan gases como agentes activantes, mientras que en la activación química se utilizan reactivos químicos en solución acuosa.



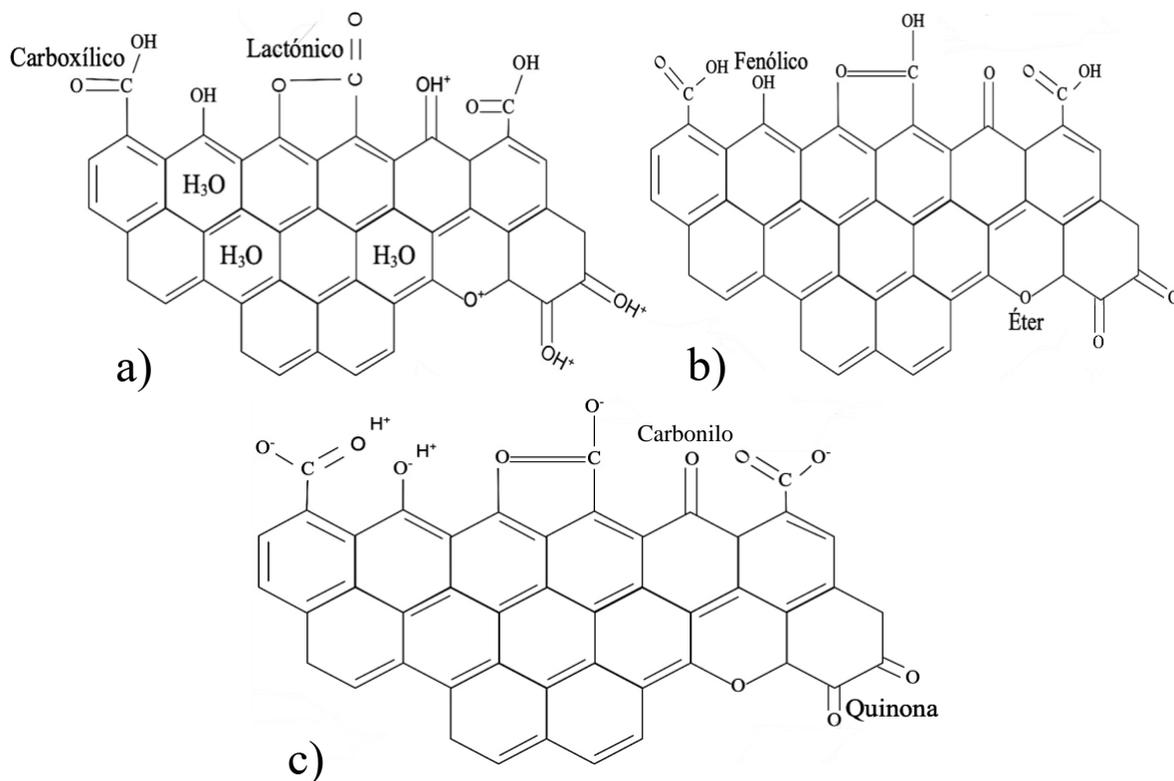


Figura 2.4. Ionización de los grupos funcionales presentes en la superficie del carbón activado en función del pH del medio a) ácido, b) neutro y c) básico.

En cuanto a la activación física, se utilizan gases como vapor de agua y CO_2 . Alguna de las ventajas que tiene este tipo de activación es que es un proceso relativamente amigable con el medio ambiente, debido a que no se producen residuos sólidos. En cambio, el utilizar temperaturas elevadas (mayores a $500\text{ }^\circ\text{C}$) y extensos tiempos de activación, los rendimientos son menores en comparación con la activación química, debido a que el gas con el que se realiza la activación se encuentra en contacto con la superficie porosa y el exterior de las partículas del material. Esto ocasiona que disminuya la porosidad o una nula formación de poros y ensanchamiento, ya que las reacciones que se llevan a cabo pueden producir pérdida de material o en el peor de los casos colapsar la estructura superficial del material (Rodríguez-Reinoso & Molina-Sabio, 1992).

En cambio, la activación química es un proceso donde diferentes agentes activantes como KOH , NaOH , H_3PO_4 , ZnCl y $\text{C}_6\text{H}_8\text{O}_7$ destacan por ser muy eficaces. Este proceso consiste en realizar una impregnación o un mezclado con el material y el precursor químico.





Adicionalmente, este tipo de activaciones presentan elevados rendimientos, ya que, al haber contacto estrecho entre las partículas el rendimiento se encuentra levemente relacionado al tiempo de activación y más con las condiciones como la temperatura de activación (una menor temperatura mejora el rendimiento, pero no significa que se obtenga mayor porosidad) (Zhang et al., 2015). Además, debido a que se añaden cantidades fijas de precursores activantes, una vez que la reacción alcance el equilibrio, no se desarrollara más porosidad en el material.

2.4.4. Xerogeles de Carbón

Los xerogeles de carbón (XC) son materiales poliméricos que provienen de un proceso de síntesis, el cual permite diseñar sus propiedades acordes a la aplicación, mediante el control de sus condiciones experimentales. Estos materiales carbonosos sintéticos se producen por la reacción de policondensación entre un benceno hidroxilado (resorcinol y fenol) y un aldehído (furfural y formaldehído) en un disolvente (metanol, agua y acetona) (Arenillas et al., 2019).

Los XC poseen una serie de propiedades que los hacen materiales con alto valor agregado. Entre ellas sobresale que son materiales muy puros, cuyas propiedades texturales y químicas se pueden diseñar a la medida de cada aplicación, mediante el control de distintos parámetros de síntesis, y controlar la forma deseada (películas, esferas, polvo, cilindros, discos, monolitos) (Rasinees-Calonge, 2015). Además, presentan alta porosidad, área específica y volumen de poros, estructura porosa controlada con una estrecha distribución de tamaño de poro, baja resistividad y alta conductividad eléctrica. Dichas propiedades térmicas y mecánicas. Dichas propiedades hacen que los XC sean materiales prometedores para distintas aplicaciones potenciales, entre las que se encuentran electrodos para condensadores de doble capa, materiales adsorbentes para la separación de gases y remoción de contaminantes del agua, soporte de catalizadores y para almacenamiento de hidrógeno (Arenillas et al., 2019).

Los XC se obtienen por pirólisis o carbonización de xerogeles orgánicos, preparados por el proceso de síntesis sol-gel. Los xerogeles orgánicos convencionales fueron sintetizados por primera vez por Pekala a partir de resorcinol y formaldehído en condiciones alcalinas tratándose de compuestos que se obtienen a partir de las reacciones de polimerización entre bencenos hidroxilados y aldehídos (Pekala, 1989).





En términos generales, el proceso es el siguiente. Los monómeros de partida inician la reacción de polimerización formando una suspensión de partículas sólidas coloidales (sol), también conocidas como clusters, que tienden a crecer e interconectarse obteniendo una red tridimensional que crece de tamaño hasta formar el gel. Al eliminarse el disolvente por medio de un proceso de secado, el resultado es un polímero orgánico sólido, denominado xerogel orgánico (XO). Después de un tratamiento térmico, donde se pierden la mayor parte de los heteroátomos y la composición química del material es principalmente en carbono, se obtiene el xerogel de carbón (XC). Por último, el XC se activa para aumentar el área y la cantidad de poros, y se obtiene el xerogel de carbón activado (XCA).

Por lo tanto, los XC son materiales ampliamente utilizados, destacándose principalmente su uso como adsorbente para la eliminación de contaminantes orgánicos e inorgánicos en el agua. La adsorción de contaminantes orgánicos se lleva a cabo mayormente en XC, debido a que la estructura carbonosa favorece las interacciones dispersivas π - π entre los anillos aromáticos del compuesto orgánico y los grafenos de la estructura del XC (Moral-Rodríguez et al., 2020). Recientemente, se han reportado en la literatura diferentes estudios de investigación de adsorción de compuestos farmacéuticos utilizando XC. Álvarez et al. (2015) sintetizaron XC a partir del método de policondensación de resorcinol y formaldehído con metanol como solvente, y los aplicaron para adsorber diclofenaco en solución acuosa y se alcanzó una capacidad máxima de adsorción de 78 mg/g. Segovia-Sandoval et al. (2019) adsorbieron metronidazol en solución acuosa utilizando como adsorbente XC con óxido de grafeno (GO). La síntesis de este material se realizó a partir del método de sol-gel, a través de la policondensación de resorcinol y formaldehído utilizando una solución acuosa de GO como solvente, y realizando la carbonización a una temperatura de 900 °C en una atmósfera de N₂ por 4 horas. La capacidad del material fue de 200 mg/g a pH de 8. Cabe destacar que, las condiciones en las que se lleve a cabo la síntesis juegan un papel fundamental en las capacidades de adsorción; por ejemplo, al momento de carbonizar los xerogeles, el tiempo de carbonización y la temperatura delimitan la concentración de sitios ácidos de la estructura química del material.

Como se mencionó anteriormente, los XC se han utilizado en la adsorción de diferentes compuestos orgánicos. Sin embargo, existen muy pocos estudios sobre la adsorción de PCT y CNA sobre estos materiales, además de las condiciones de síntesis en la morfología de los





xerogeles orgánicos. En un trabajo previo por Carrales-Alvarado et al. (2023) se sintetizaron microesferas de xerogel orgánico utilizando polimerización sol-gel por emulsión inversa de resorcinol y formaldehído para adsorber diclofenaco. Por esta razón, que en este proyecto se optó por utilizar el método de síntesis por emulsión inversa para analizar a mayor detalle el mecanismo de adsorción de estos materiales y el efecto morfológico que podría causar el utilizar microesferas de XC para la adsorción de fármacos.

2.5. Isotermas de Adsorción

La isoterma de adsorción es la relación matemática entre la masa del soluto adsorbido por masa del adsorbente y la concentración del soluto en la solución cuando se alcanza el equilibrio a una temperatura constante. Los modelos más utilizados y reportados en la literatura para sistemas líquido-sólido son las isotermas de Langmuir, Freundlich y Radke-Prausnitz, las cuales se describen a continuación.

2.5.1. Langmuir

Este modelo se desarrolló teóricamente con base en las siguientes suposiciones:

- i) La adsorción ocurre solamente en sitios específicos sobre la superficie del adsorbente.
- ii) En cada sitio del material solamente se adsorbe una molécula del adsorbato.
- iii) El calor de adsorción de los sitios activos no varía.

Se representa matemáticamente como:

$$q = \frac{q_m KC}{1+KC} \quad (2.2)$$

Donde:

- C = Concentración de soluto en el equilibrio (mg/L)
K = Constante de la isoterma de Langmuir relacionada al calor de adsorción (L/mg)
q = Masa de soluto adsorbida por masa del adsorbente (mg/g)
q_m = Máxima cantidad de masa de soluto adsorbido sobre el adsorbente (mg/g)





2.5.2. Freundlich

El modelo de Freundlich se desarrolló empíricamente y se ha comprobado que puede se aplicar en adsorbentes con superficies energéticamente heterogéneas. Este modelo se representa matemáticamente de la siguiente manera:

$$q = kC^{1/n} \quad (2.3)$$

Donde:

- k = Constante de la isoterma de Freundlich relacionada a la capacidad de adsorción (L/mg)
- n = Intensidad de la adsorción

2.5.3. Radke–Prausnitz

La isoterma de adsorción de Radke-Prausnitz fue propuesta para describir isotermas de adsorción de diferentes compuestos orgánicos en solución acuosa; sin embargo, no tiene ningún fundamento teórico. Además, esta isoterma es una combinación entre las isotermas de Lineal, Langmuir y Freundlich. Este modelo se representa como:

$$q = \frac{aC}{1+bC^\beta} \quad (2.4)$$

Donde:

- a = Constante de la isoterma de Radke-Prausnitz
- b = Constante de la isoterma de Radke-Prausnitz
- β = Constante de la isoterma de Radke-Prausnitz





CAPÍTULO 3. JUSTIFICACIÓN, HIPÓTESIS Y OBJETIVOS

3.1. Justificación

Los contaminantes emergentes son sustancias químicas provenientes de diversas fuentes, como productos farmacéuticos, productos de cuidado personal, químicos industriales y pesticidas, entre otros. Estos contaminantes se encuentran presentes en el medio ambiente, pero que no han sido regulados, ni se han estudiado los efectos tóxicos en la salud humana y el medio ambiente. Es decir, la presencia de estos contaminantes emergentes en el medio ambiente es un serio problema en constante evolución que requiere de acciones adecuadas para minimizar los efectos que pueden causar a la salud humana y al medio ambiente en un futuro inminente.

Los fármacos, en especial los analgésicos, son considerados contaminantes emergentes altamente persistentes en el agua, afectando la salud humana, el desarrollo y equilibrio hormonal de animales acuáticos como los pescados, y también, alteran la composición de las comunidades acuáticas.

En varios estudios se ha demostrado que los compuestos farmacéuticos como el PCT y CNA pueden aumentar el riesgo de enfermedades crónicas que pueden ocasionar implicaciones para la salud humana y el desarrollo animal.

Actualmente, se han analizado diferentes alternativas para efectuar un óptimo tratamiento de agua con motivo de eliminar eficientemente los contaminantes farmacéuticos del agua. Esto debido a que las plantas de tratamiento de agua no cuentan actualmente con procesos eficientes para eliminar los compuestos farmacéuticos. Por lo anterior, se plantea utilizar el proceso de adsorción como método de eliminación de analgésicos comunes como el Paracetamol y la Clorfenamina, utilizando materiales carbonosos como, carbones activados y xerogeles de carbón.

3.2. Hipótesis

Analizando el proceso de adsorción sobre materiales carbonosos como método de eliminación de PCT y CNA en solución acuosa, y encontrando las condiciones específicas de pH, temperatura y fuerza iónica, se permitirá saber si estos compuestos contaminantes





presentes en el agua se pueden llegar a eliminarse eficientemente, mediante el uso de materiales novedosos de carbón.

3.3. Objetivos

Objetivo general

Estudiar el equilibrio de adsorción de compuestos farmacéuticos como el PCT y CNA sobre cuatro materiales carbonosos con distintas propiedades fisicoquímicas y analizar su efecto en la capacidad de adsorción.

Objetivos específicos

- ⇒ Determinar las propiedades de textura, carga superficial, punto de carga cero y concentración de sitios activos de los cuatro materiales carbonosos.
- ⇒ Evaluar el equilibrio de adsorción de PCT sobre dos carbones activados comerciales (GB y MM) y los xerogeles de carbón XC y activado XCA.
- ⇒ Evaluar el equilibrio de adsorción de CNA sobre los xerogeles XC y XCA en solución acuosa.
- ⇒ Evaluar el efecto de la modificación de XC sobre la capacidad para adsorber de PCT y CNA en solución acuosa.
- ⇒ Investigar el efecto de pH, temperatura y fuerza iónica sobre las capacidades de los cuatro materiales para adsorber PCT y CNA.
- ⇒ Elucidar los mecanismos de adsorción de PCT y CNA sobre los distintos materiales adsorbentes.





CAPÍTULO 4. MATERIAL

4.1. Materiales Adsorbentes

En este trabajo se utilizaron dos carbones activados comerciales y xerogeles de carbón como materiales adsorbentes, los cuales se describen a continuación.

4.1.1. Carbón Activado Comercial Gama B

Carbón Activado Comercial Gama B (GB) es un carbón activado (CA) comercial proporcionado por la empresa Carbotecnia (ver Tabla 4.1). El CA GB es fabricado a partir de un mineral bituminoso seleccionado con la finalidad de obtener un CA con una amplia gama de poros, debido a que esto favorece la adsorción de diversos contaminantes orgánicos que causan olor y color. Estos contaminantes orgánicos se caracterizan por ser persistentes en el agua y bioacumulables en los tejidos grasos de los organismos vivos afectando la cadena alimenticia.

4.1.2. Carbón Activado Megapol M

El CA Megapol (MM) es fabricado por la empresa Carbotecnia (Ver Tabla 4.1). Este CA es de origen vegetal fabricado a partir de madera y es activado químicamente. Se caracteriza por ser muy efectivo en la adsorción de compuestos orgánicos con altos pesos moleculares tales como los colorantes.

Tabla 4.1. Especificaciones de los carbones activos en estudio reportadas por Carbotecnia.

<i>Material</i>	<i>Granulometría</i>	<i>pH</i>	<i>Contenido de cenizas</i>	<i>Área específica</i>
GB	Malla 40 US Std*	7.0 – 9.0	14 %, max	900 m ² /g
MM	Malla 325 US Std*	2.8 – 5.5	8 %, max	—

*United States Standard

4.1.3. Xerogeles de Carbón

Este material se sintetizó en el Laboratorio de Ingeniería Ambiental, Centro de Investigación y Estudios de Posgrado, Universidad Autónoma de San Luis Potosí. La síntesis





se efectuó en tres etapas: (i) reacción sol-gel, (ii) el secado convencional del gel y (iii) la carbonización del xerogel orgánico para obtener xerogel de Carbón (XC). Además, el XC se activó en atmosfera de CO₂ obteniendo un xerogel de carbón activado (XCA). En la Sección 5.1.1 se describe detalladamente la metodología empleada para sintetizar XC y XCA.

4.2. Reactivos y Sustancias

En la Tabla 4.2 se enlistan los reactivos utilizados para la preparación de las soluciones necesarias en el desarrollo experimental de este proyecto.

Tabla 4.2. Reactivos y sustancias utilizadas.

<i>Sustancia</i>	<i>Especificaciones</i>	<i>Marca</i>
Sal Maleato de Clorfenamina	CAS: 113-92-8 99 % pureza	Sigma-Aldrich
Paracetamol (Acetaminofén)	CAS: 103-90-2 99 % pureza	Sigma-Aldrich
Ácido Clorhídrico HCl	CAS: 7647-01-0 38 % pureza	CTR Scientific
Hidróxido de Sodio NaOH	CAS: 1310-73-2 98.7 % pureza	MACRON Fine Chemicals
Cloruro de Sodio NaCl	CAS: 7647-14-5 99 % pureza	Golden Bell
Resorcinol C ₆ H ₆ O ₂	CAS: 108-43-3 99 % pureza	Sigma-Aldrich
Formaldehido CH ₂ O	CAS: 50-00-0 37.2 % pureza	Fermont
Carbonato de Calcio CaCO ₃	Cat. 1725	Monterrey Reactivo Analítico
Heptano RA C ₇ H ₁₆	CAS: 142-82-5 99% pureza	CTR Scientific
Span 80 C ₆₄ H ₁₂₄ O ₂₆	CAS:1338-3-8 60% pureza	Sigma-Aldrich
Acetona RA (CH ₃) ₂ CO	CAS: 67-64-1 99.6% pureza	CTR Scientific





4.3. Compuestos Farmacéuticos

En este proyecto se utilizaron dos compuestos farmacéuticos: Paracetamol (PCT) y Clorfenamina (CNA). Ambos de la marca Sigma-Aldrich con pureza de $\geq 99\%$ para fines de investigación en laboratorio (R&D).

4.4. Soluciones Patrón

Las soluciones patrón fueron preparadas en matraces volumétricos, los cuales se aforaron con agua desionizada o solución buffer, dependiendo del estudio a realizar. Las soluciones se enlistan en la Tabla 4.3.

4.4.1. Solución Buffer

Esta solución se preparó utilizando cierta masa de NaOH y determinado volumen de HCl (las cantidades añadidas de NaOH y HCl dependen del volumen requerido y la fuerza iónica). Estos reactivos se agregaron a un determinado volumen de agua desionizada y se mantuvo en agitación magnética hasta que la solución es homogénea. Por último, el pH de la solución se ajustó al valor deseado.

Tabla 4.3. Condiciones de la preparación de soluciones utilizadas.

<i>Solución</i>	<i>Masa o volumen de reactivo</i>	<i>Volumen de la solución</i>
Clorfenamina 1000 mg/L	1.4224 g de clorfenamina	1000 mL
Paracetamol 1000 mg/L	0.5 g de Paracetamol	500 mL
Solución buffer HCl/NaOH 0.01 N	1.6 g de NaOH ± 3.22 mL de HCl	4000 mL
Solución buffer HCl/NaOH 0.05 N	8 g de NaOH ± 16.15 mL de HCl	4000 mL
Solución buffer HCl/NaOH 0.1 N	16 g de NaOH ± 32.2 mL de HCl	4000 mL





4.5. Instrumentos y Equipos Analíticos

Los equipos analíticos e instrumentos utilizados en la experimentación y caracterización de los adsorbentes se especifican en la Tabla 4.4.

Tabla 4.4. Equipos e instrumentos utilizados.

<i>Equipo</i>	<i>Marca</i>	<i>Modelo</i>	<i>Aplicación</i>
Balanza analítica	Mettler	AE200	Medición de reactivos
Potenciómetro	Thermo	Orion 420A+	Medición de pH
Sonicador	BRASON	2510	Preparación de soluciones patrón
Estufa	LUZEREN	PCD-E3000	Secado de muestras por convección
Placa de agitación y calentamiento	Thermolyne	Cimarec 2	Agitación y calentamiento de soluciones
Agitador orbital	Yellow Line	OS 2 basic	Agitación de los adsorbentes de lote
Centrífuga	Centurion Scientific	K3 series	Separación de las partículas de la solución
Espectrofotómetro UV-Vis	Shimadzu	UV-1800	Determinación de las concentraciones de Clorfenamina y Paracetamol
Fisisorción de Nitrógeno	Micrometrics	ASAP 2020	Propiedades de textura del material adsorbente
Microscopio Electrónico de Barrido	JEOL	JSM-6610LV	Morfología del material adsorbente
Analizador Termogravimétrico	Perkin Elmer	Pyris Diamond TGA/DTA	Identificación de la estabilidad térmica del material





4.6. Adsorbedor Experimental de Lote

Los datos experimentales del equilibrio de adsorción de CNA y PCT se obtuvieron en un adsorbedor experimental de lote, el cual se ilustra en la Figura 4.1. El adsorbedor experimental de lote consiste en un tubo tipo Falcon de 50 mL, donde se contacta una determinada masa del material adsorbente con un volumen de solución del contaminante (fármaco) a una concentración y pH iniciales conocidos. En los adsorbedores se efectúan varios experimentos a distintas concentraciones, y los adsorbedores se colocan en una gradilla, la cual se sumerge en un baño de temperatura constante con el fin de controlar la temperatura de la solución. El baño de temperatura consta de un contenedor de acrílico con un recirculador de agua, que mantiene la temperatura constante en el baño. Cabe aclarar que diariamente los adsorbedores de lote se agitaron y se ajustó el pH de la solución. Una vez alcanzado el equilibrio, se cuantificó la concentración final del CNA o PCT por espectrofotometría UV-Vis.

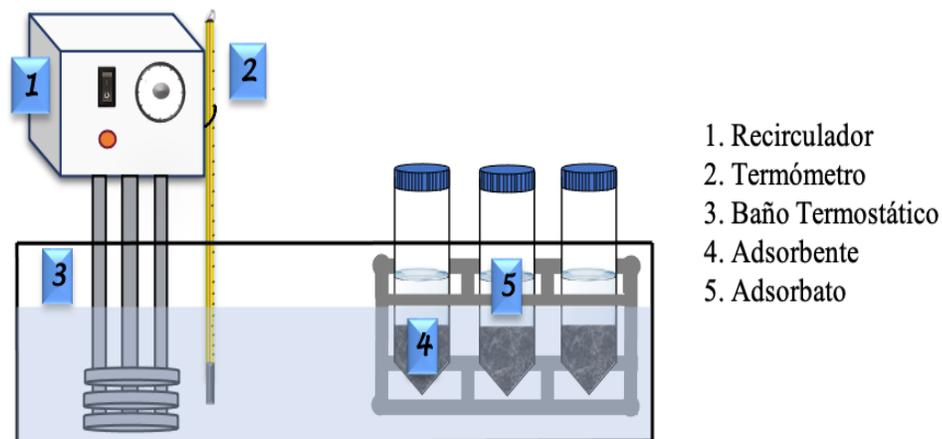


Figura 4.1. Esquema de un adsorbedor de lote.





REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Ali, S. N., El-Shafey, E., Al-Busafi, S., & Al-Lawati, H. A. (2019). Adsorption of chlorpheniramine and ibuprofen on surface functionalized activated carbons from deionized water and spiked hospital wastewater. *Journal of Environmental Chemical Engineering*, 7(1), 102860. <https://doi.org/10.1016/j.jece.2018.102860>
- Alonso, J. M. Q., Quero-Pastor, M. J., & Merino, A. A. (2015). Tratamientos avanzados para la eliminación de fármacos en aguas superficiales. *Revista de Salud Ambiental*, 15, 18-21. <https://ojs.diffundit.com/index.php/rasa/article/view/733>
- Álvarez, S., Ribeiro, R., Gomes, H., Sotelo, J., & García, J. (2015). *Eliminación de contaminantes emergentes mediante adsorción empleando xerogel de carbón*. META2014-XI Reunión de la Mesa Española de Tratamiento de Aguas, Alicante, España. <http://hdl.handle.net/10198/11388>
- Amaringo-Villa, F. A. (2013). Determinación del punto de carga cero y punto isoeléctrico de dos residuos agrícolas y su aplicación en la remoción de colorantes. *Revista de Investigación Agraria y Ambiental*, 4(2), 27. <https://doi.org/10.22490/21456453.982>
- Aránguez, E., Ordóñez, J. M., Serrano, J., Aragonés, N., Fernández-Patier, R., Gandarillas, A., & Galán, I. (1999). Contaminantes atmosféricos y su vigilancia. *Revista Española de Salud Pública*, 73(2), 123-132. https://scielo.isciii.es/pdf/resp/v73n2/contam_atmos.pdf
- Arenillas, A., Menéndez, J. A., Reichenauer, G., Celzard, A., Fierro, V., Maldonado Hodar, F. J., & Job, N. (2019). Organic and carbon gels. From Laboratory synthesis to applications. *Springer Nature Switzerland*. <https://doi.org/10.1007/978-3-030-13897-4>
- Azanu, D., Styrishave, B., Darko, G., Weisser, J. J., & Abaidoo, R. C. (2018). Occurrence and risk assessment of antibiotics in water and lettuce in Ghana. *Science of the Total Environment*, 622-623, 293-305. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2017.11.287>
- Barceló, D. (2003). Emerging pollutants in water analysis. *Trends in Analytical Chemistry*, 22(10), xiv-xvi. [https://doi.org/10.1016/s0165-9936\(03\)01106-3](https://doi.org/10.1016/s0165-9936(03)01106-3)
- Barranco, L. M. D., Orrego, M. J. F., & Hincapie, J. J. F. (2018). Preparación y caracterización de carbones activados a partir de un carbón mineral de la cuenca del Cesar (Colombia). *Revista Politécnica*, 14(26), 75-88. <https://doi.org/10.33571/rpolitec.v14n26a7>





- Barrett, E. P., Joyner, L. G., & Halenda, P. P. (1951). The determination of pore volume and area distributions in porous substances. I. Computations from nitrogen isotherms. *Journal of the American Chemical Society*, 73(1), 373-380. <https://doi.org/10.1021/ja01145a126>
- Bermeo, J & Bermeo, V. (2020). Determinación de la relación entre 4-aminofenol del acetam inofeno jarabe y las condiciones de almacenamiento en farmacias del cantón naranjito. [Tesis de licenciatura inédita], Universidad de Guayaquil.
- Boehm, H. (1994). Some aspects of the surface chemistry of carbon blacks and other carbons. *Carbon*, 32(5), 759-769. [https://doi.org/10.1016/0008-6223\(94\)90031-0](https://doi.org/10.1016/0008-6223(94)90031-0)
- Boleda, M. R., Galceran, M. T., & Ventura, F. (2011). Behavior of pharmaceuticals and drugs of abuse in a drinking water treatment plant (DWTP) using combined conventional and ultrafiltration and reverse osmosis (UF/RO) treatments. *Environmental Pollution*, 159(6), 1584-1591. <https://doi.org/10.1016/j.envpol.2011.02.051>
- Brunauer, S., Emmett, P. H., & Teller, E. (1938). Adsorption of gases in multimolecular layers. *Journal of the American Chemical Society*, 60(2), 309-319. <https://doi.org/10.1021/ja01269a023>
- Byamba-Ochir, N., Shim, W. G., Balathanigaimani, & Moon, H. (2016). Highly porous activated carbons prepared from carbon rich Mongolian anthracite by direct NaOH activation. *Applied Surface Science*, 379, 331-337. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2016.04.082>
- Canal-Rodríguez, M., Arenillas, A., Menéndez, J., Beneroso, D., & Rey-Raap, N. (2018). Carbon xerogels graphitized by microwave heating as anode materials in lithium-ion batteries. *Carbon*, 137, 384-394. <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2018.05.045>
- Carrales-Alvarado, D. H., Leyva-Ramos, R., Bailón-García, E., Carrasco-Marín, F., & Villela-Martinez, D. E. (2022). Synthesis, characterization, and application of pristine and clay-templated carbon xerogel microspheres for removing diclofenac and heavy metals from water solution. *Environmental Science and Pollution Research International*, 30(12), 34684-34697. <https://doi.org/10.1007/s11356-022-24615-z>
- Carrales-Alvarado, D. H., Ocampo-Pérez, R., Leyva-Ramos, R., & 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. <https://doi.org/10.1016/j.jcis.2014.08.023>
- Carrales-Alvarado, D. H. (2014). Equilibrio y cinética de adsorción de nitromidazoles en solución acuosa sobre materiales carbonosos. [Tesis de maestría inedita], Universidad Autónoma de San Luis Potosí.
- Castro-Pastrana, L. I., Cerro-López, M., Toledo-Wall, M., Gómez-Oliván, L. M., & Saldívar-Santiago, M. (2021). Análisis de fármacos en aguas residuales de tres hospitales de la ciudad de Puebla, México. *Ingeniería del Agua*, 25(1), 59. <https://doi.org/10.4995/ia.2021.13660>.
- Cooney, D. O. (1999). *Adsorption Design for Wastewater Treatment*. CRC Press LLC.
- Cruz-Morató, C., Lucas, D., Llorca, M., Rodríguez-Mozaz, S., Gorga, M., Petrovic, M., Barceló, D., Vicent, T., Sarrà, M., & Marco-Urrea, E. (2014). Hospital wastewater treatment by fungal bioreactor: Removal efficiency for pharmaceuticals and endocrine disruptor compounds. *Science of the Total Environment*, 493, 365-376. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2014.05.117>
- De Oliveira, G., Feitosa, A., Loureiro, K., Fernandes, A., Souto, E., & Severino, P. (2016). Compatibility study of paracetamol, chlorpheniramine maleate and phenylephrine hydrochloride in physical mixtures. *Saudi Pharmaceutical Journal*, 25(1), 99-103. <https://doi.org/10.1016/j.jsps.2016.05.001>
- Fram, M. S., & Belitz, K. (2011). Occurrence and concentrations of pharmaceutical compounds in groundwater used for public drinking-water supply in California. *Science of the Total Environment*, 409(18), 3409-3417. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2011.05.053>
- Geczo, A., Giannakoudakis, D. A., Triantafyllidis, K., Elshaer, M. R., Rodríguez-Aguado, E., & Bashkova, S. (2020). Mechanistic insights into acetaminophen removal on cashew nut shell biomass-derived activated carbons. *Environmental Science and Pollution Research International*, 28(42), 58969-58982. <https://doi.org/10.1007/s11356-019-07562-0>
- Geissen, V., Mol, H., Klumpp, E., Umlauf, G., Nadal, M., Van Der Ploeg, M., Van de Zee, S. E., & Ritsema, C. J. (2015). Emerging pollutants in the environment: A challenge for





- water resource management. *International Soil and Water Conservation Research*, 3(1), 57-65. <https://doi.org/10.1016/j.iswcr.2015.03.002>
- Gogoi, A., Mazumder, P., Tyagi, V. K., Chaminda, G. T., An, A. K., & Kumar, M. (2018). Occurrence and fate of emerging contaminants in water environment: A review. *Groundwater for Sustainable Development*, 6, 169-180. <https://doi.org/10.1016/j.gsd.2017.12.009>
- Gröning, J., Held, C., Garten, C., Claußnitzer, U., Kaschabek, S. R., & Schlömann, M. (2007). Transformation of diclofenac by the indigenous microflora of river sediments and identification of a major intermediate. *Chemosphere*, 69(4), 509-516. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2007.03.037>
- Gurvitsch, L. G. (1915). Physico-chemical attractive force. *Journal of Physical Chemistry Society of Russia*, 47, 805–827.
- Hoang, H. N., Hanh, D. T., Ha, L. S., Duong, N. T., & Ha, T. T. (2022). Current situation and health risk assessment of acetaminophen and chlorpheniramine maleate in urban house dust from Hanoi, Vietnam. *Vietnam Journal of Chemistry*, 60(1), 116-122. <https://doi.org/10.1002/vjch.202100098>
- Igwegbe, C. A., Aniagor, C. O., Oba, S. N., Yap, P., Iwuchukwu, F. U., Liu, T., De Souza, E. C., & Ighalo, J. O. (2021). Environmental protection by the adsorptive elimination of acetaminophen from water: A comprehensive review. *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*, 104, 117-135. <https://doi.org/10.1016/j.jiec.2021.08.015>
- Iloh, E.O. (2023). Effect of pH on chlorpheniramine adsorption using OAC, HAC and BAC of mango kernel seed, avocado pear seed and velvet tamarind shell. *IAA Journal of Applied Sciences* 9(1): 66-73. ISSN: 2636-7246. <https://www.iaajournals.org/wp-content/uploads/2023/03/IAA-JAS-9166-73-2023.-Effect-of-pH-on-Chlorpheniramine-adsorption-using-OAC-HAC-and-BAC-of-Mango-kernel-seed-Avocado-pear-seed-and-Velvet-tamarind-shell.pdf>
- Iwuozor, K. (2019). A review on the properties and uses of paracetamol. *International Journal of Pharmacy and Chemistry*, 5(3), 31. <https://doi.org/10.11648/j.ijpc.20190503.12>





- Jiménez C. C. (2011). Contaminantes orgánicos emergentes en el ambiente: productos farmacéuticos. *Revista Lasallista de Investigación*, 8(2), 143-153. <http://www.scielo.org.co/pdf/rlsi/v8n2/v8n2a16.pdf>
- Kayiwa, R., Olupot, P. W., & Lubwama, M. (2020) *Production and potential of activated carbon from Cassava peels for remediation of Active pharmaceutical ingredients from wastewater: A Review. Journal of Materials Science Research and Reviews*, 2 (4). pp. 587-610.
- Khan, A., Wang, J., Li, J., Wang, X., Chen, Z., Alsaedi, A., Hayat, T., Chen, Y., & Wang, X. (2017). The role of graphene oxide and graphene oxide-based nanomaterials in the removal of pharmaceuticals from aqueous media: a review. *Environmental Science and Pollution Research International*, 24(9), 7938-7958. <https://doi.org/10.1007/s11356-017-8388-8>
- Kibuye, F. A., Gall, H. E., Elkin, K. R., Ayers, B., Veith, T. L., Miller, M., Jacob, S., Hayden, K. R., Watson, J. E., & 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. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2018.10.442>
- Kim, J., Jang, H., Kim, J., Ishibashi, H., Hirano, M., Nasu, K., Ichikawa, N., Takao, Y., Shinohara, R., & Arizono, K. (2009). Occurrence of pharmaceutical and personal care products (PPCPs) in surface water from Mankyung River, South Korea. *Journal of Health Science*, 55(2), 249-258. <https://doi.org/10.1248/jhs.55.249>
- Klasson, K. T., Ledbetter, C. A., Uchimiya, M., & Lima, I.M. (2013). Activated biochar removes 100 % dibromochloropropane from field well water. *Environmental Chemistry Letters*, 11(3), 271-275. <https://doi.org/10.1007/s10311-012-0398-7>
- Kleywegt, S., Pileggi, V., Yang, P., Hao, C., Zhao, X., Rocks, C., Thach, S., Cheung, P., & Whitehead, B. (2011). Pharmaceuticals, hormones and bisphenol A in untreated source and finished drinking water in Ontario, Canada — Occurrence and treatment efficiency. *Science of the Total Environment*, 409(8), 1481-1488. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2011.01.010>





- Kyzas, G. Z., Fu, J., Lazaridis, N. K., Bikiaris, D. N., & Matis, K. A. (2015b). New approaches on the removal of pharmaceuticals from wastewaters with adsorbent materials. *Journal of Molecular Liquids*, 209, 87-93. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2015.05.025>
- Leyva-Ramos, R. (2007). Importancia y Aplicaciones de la adsorción en fase líquida. En *sólidos porosos: preparación, caracterización y aplicaciones* (pp. 164-211). Universidad de los Andes. https://www.researchgate.net/publication/320407302_Importancia_y_Aplicaciones_de_la_Adsorcion_en_Fase_Liquida
- Leyva-Ramos, R. (2010). Fundamentos de adsorción en sistemas líquido-sólido. En *IBEROARSEN, Tecnologías económicas para el abatimiento de arsénico en aguas* (pp. 43-50). CYTED.
- Lippens, B., & De Boer, J. H. (1965). Studies on pore systems in catalysts V. The t method. *Journal of Catalysis*, 4(3), 319-323. [https://doi.org/10.1016/0021-9517\(65\)90307-6](https://doi.org/10.1016/0021-9517(65)90307-6)
- Lowell, S., Shields, J. E., Thomas, M. A., & Thommes, M. (2004). Characterization of porous solids and powders: surface area, pore size and density. En *particle technology series*. <https://doi.org/10.1007/978-1-4020-2303-3>
- Lv, G., Wu, L., Li, Z., Liao, L., & Liu, M. (2014). Binding sites of chlorpheniramine on 1:1 layered kaolinite from aqueous solution. *Journal of Colloid and Interface Science*, 424, 16-21. <https://doi.org/10.1016/j.jcis.2014.03.010>
- McKenzie, K., Moffat, C. F., & Petrie, B. (2020). Multi-residue enantioselective determination of emerging drug contaminants in seawater by solid phase extraction and liquid chromatography-tandem mass spectrometry. *Analytical Methods, The Royal Society of Chemistry*, 12(22), 2881-2892. <https://doi.org/10.1039/d0ay00801j>
- Moral-Rodriguez, A. I., Leyva-Ramos, R., Carrasco-Marín, F., Bautista-Toledo, & M. I., Pérez-Cadenas, A. F. (2020). Adsorption of diclofenac from Aqueous solution onto carbon xerogels: Effect of synthesis conditions and presence of bacteria. *Water, Air and Soil Pollution*, 231(1). <https://doi.org/10.1007/s11270-019-4385-5>
- Napoleao, D., Zaidan, L. M. C., Díaz, J. M. R., Da Rocha Santana, R., Da Silva de Mendonça Montenegro, M. B., Da Nova Araújo, A., Benachour, M., & Da Silva, V. L. (2018). *Use of the photo-Fenton process to discover the degradation of drugs present in water from*





- the wastewater treatment plants of the pharmaceutical industry.* Dialnet. <https://dialnet.unirioja.es/servlet/articulo?codigo=6563383>
- Organización de las Naciones Unidas. (2018). *Agua medicada: El consumo moderno de fármacos se convierte en un desafío ambiental.* Organización de las naciones unidas (ONU). <https://www.unep.org/es/noticias-y-reportajes/reportajes/agua-medicada-el-consumo-moderno-de-farmacos-se-convierte-en-un>
- Páez, C. A., Contreras, M. S., Léonard, A., Blacher, S., Olivera-Fuentes, C. G., Pirard, J., & Job, N. (2012). Effect of CO₂ activation of carbon xerogels on the adsorption of methylene blue. *Adsorption*, 18(3-4), 199-211. <https://doi.org/10.1007/s10450-012-9394-2>
- Patel, H., Weldekidan, H., Mohanty, A., & Misra, M. (2023). Effect of physicochemical activation on CO₂ adsorption of activated porous carbon derived from pine sawdust. *Carbon Capture Science & Technology*, 8, 100128. <https://doi.org/10.1016/j.ccst.2023.100128>
- Pekala, R. W. (1989). Organic aerogels from the polycondensation of resorcinol with formaldehyde. *Journal of Materials Science*, 24(9), 3221-3227. <https://doi.org/10.1007/bf01139044>
- Poynton, H. C., & Robinson, W. E. (2018). Contaminants of emerging concern, with an emphasis on nanomaterials and pharmaceuticals. *Elsevier eBooks* (pp.291-315). <https://doi.org/10.1016/b978-0-12-809270-5.00012-1>
- Rathi, B. S., Kumar, P. S. (2021). Application of adsorption process for effective removal of emerging contaminants from water and wastewater. *Environmental Pollution*, 280, 116995. <https://doi.org/10.1016/j.envpol.2021.116995>
- Rodríguez-Reinoso, F., Molina-Sabio, M. (1992). Activated carbons from lignocellulosic materials by chemical and/or physical activation: an overview. *Carbon*, 30(7), 1111-1118. [https://doi.org/10.1016/0008-6223\(92\)90143-k](https://doi.org/10.1016/0008-6223(92)90143-k)
- Quiroga, J. M., Quero-Pastor, M. J., & Merino, A. A. (2015). *Tratamientos avanzados para la eliminación de fármacos en aguas superficiales.* <https://ojs.diffundit.com/index.php/rsa/article/view/733>
- Samsuri, A. W., Sadegh-Zadeh, F., & Seh-Bardan, B. J. (2013). Characterization of biochars produced from oil palm and rice husks and their adsorption capacities for heavy metals.





- International Journal of Environmental Science and Technology*, 11(4), 967-976.
<https://doi.org/10.1007/s13762-013-0291-3>
- Santos, L. H., Araújo, A., Fachini, A., Pena, A., Delerue-Matos, C., & Montenegro, M. (2010). Ecotoxicological aspects related to the presence of pharmaceuticals in the aquatic environment. *Journal of Hazardous Materials*, 175(1-3), 45-95.
<https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2009.10.100>
- Segovia-Sandoval, S. J., Pastrana-Martínez, L. M., Ocampo-Pérez, R., Morales-Torres, S., Berber-Mendoza, M. S., & Carrasco-Marín, F. (2020). Synthesis and characterization of carbon xerogel/graphene hybrids as adsorbents for metronidazole pharmaceutical removal: Effect of operating parameters. *Separation and Purification Technology*, 237, 116341. <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2019.116341>
- Schönherr, J., Buchheim, J. R., Scholz, P., & Adelhelm, P. (2018). Boehm Titration Revisited (Part I): Practical aspects for achieving a high precision in quantifying oxygen-containing surface groups on carbon materials. *Journal of Carbon Research*, 4(2), 21. <https://doi.org/10.3390/c4020021>
- Shilapuram, V., Ozalp, N., Oschatz, M., Borchardt, L., Kaskel, S., & Lachance, R. (2013). Thermogravimetric analysis of activated carbons, ordered mesoporous carbide-derived carbons, and their deactivation kinetics of catalytic methane decomposition. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 53(5), 1741-1753.
<https://doi.org/10.1021/ie402195q>
- Spaltro, A., Pila, M. N., Colasurdo, D. D., Grau, E. N., Román, G., Simonetti, S., & Ruiz, D. L. (2021). Removal of paracetamol from aqueous solution by activated carbon and silica. Experimental and computational study. *Journal of Contaminant Hydrology*, 236, 103739. <https://doi.org/10.1016/j.jconhyd.2020.103739>
- Stoeckli, F., & Ballerini, L. (1991). Evolution of microporosity during activation of carbon. *Institute of Chemistry and Chemical Technology*, 70(4), 557-559.
[https://doi.org/10.1016/0016-2361\(91\)90036-a](https://doi.org/10.1016/0016-2361(91)90036-a)
- Taheran, M., Naghdi, M., Brar, S. K., Verma, M., & Surampalli, R. (2018). Emerging contaminants: Here today, there tomorrow! *Environmental Nanotechnology, Monitoring & Management*, 10, 122-126. <https://doi.org/10.1016/j.enmm.2018.05.010>





- Thommes, M., Kaneko, K., Neimark, A. V., Olivier, J. P., Rodriguez-Reinoso, F., Rouquerol, J., & Sing, K. S. (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. <https://doi.org/10.1515/pac-2014-1117>
- Wang, S., Xu, Y., Yan, M., Zhang, L., & Liu, Z. (2018). The effect of surfactants on carbon xerogel structure and CO₂ capture. *Journal of Non-crystalline Solids*, 499, 101-106. <https://doi.org/10.1016/j.jnoncrysol.2018.07.023>
- Westerhoff, P., Yoon, Y., Snyder, S., & Wert, E. (2005). Fate of endocrine-disruptor, pharmaceutical, and personal care product chemicals during simulated drinking water treatment processes. *Environmental Science & Technology*, 39(17), 6649-6663. <https://doi.org/10.1021/es0484799>
- Wilkinson, J., Hooda, P. S., Barker, J., Barton, S., & Swinden, J. (2017). Occurrence, fate and transformation of emerging contaminants in water: An overarching review of the field. *Environmental Pollution*, 231, 954-970. <https://doi.org/10.1016/j.envpol.2017.08.032>
- Yahya, M. A., Al-Qodah, Z., & Ngah, C. Z. (2015). Agricultural bio-waste materials as potential sustainable precursors used for activated carbon production: A review. *Renewable & Sustainable Energy Reviews*, 46, 218-235. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2015.02.051>
- Yanyan, L., Kurniawan, T. A., Zhu, M., Ouyang, T., Avtar, R., Othman, M. H. D., Mohammad, B. T., & Albadarin, A. B. (2018). Removal of acetaminophen from synthetic wastewater in a fixed-bed column adsorption using low-cost coconut shell waste pretreated with NaOH, HNO₃, ozone, and/or chitosan. *Journal of Environmental Management*, 226, 365-376. <https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2018.08.032>
- Zacarías, V .H. R., Machuca, M. A. V., Soto, J. L. M., Equihua, J. L. P., Cardona, A. A. V., Calvillo, M. D. L., & 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. <https://doi.org/10.20937/rica.2017.33.02.04>
- Zhang, X., Li, W., & Lu, A. (2015). Designed porous carbon materials for efficient CO₂ adsorption and separation. *New Carbon Materials*, 30(6), 481-501. [https://doi.org/10.1016/s1872-5805\(15\)60203-](https://doi.org/10.1016/s1872-5805(15)60203-)





RESUMEN DEL REPORTE DE SIMILITUD

**ADSORCIÓN DE COMPUESTOS
FARMACÉUTICOS SOBRE CARBÓN
ACTIVADO Y XEROGELAS DE CARBONO**

INFORME DE ORIGINALIDAD

28 %

ÍNDICE DE SIMILITUD





