



---

**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE SAN LUIS POTOSÍ**

**FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS**

**CENTRO DE INVESTIGACIÓN Y ESTUDIOS DE POSGRADO**

**INTERPRETACIÓN DE LA VELOCIDAD GLOBAL DE  
ADSORCIÓN PARA SISTEMAS BINARIOS EMPLEANDO  
MODELOS DIFUSIONALES**

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

PRESENTA:

**ULLOA ARRIETA MOISÉS ADOLFO**

DIRECTOR:

**DR. RAÚL OCAMPO PÉREZ**

CO-DIRECTOR:

**DR. FARID CORTÉS**

**SAN LUIS POTOSI, S.L.P. ENERO 2024**

---



El programa de Maestría en Ciencias en Ingeniería Química de la Universidad Autónoma de San Luis Potosí pertenece al Programa Nacional de Posgrados de Calidad (PNPC) del CONAHCyT, registro 000896, en el Nivel Consolidado. Número de CVU: 1182268. Número de Beca CONAHCyT: 812405.



INTERPRETACIÓN DE LA VELOCIDAD GLOBAL DE ADSORCIÓN PARA SISTEMAS BINARIOS EMPLEANDO MODELOS DIFUSIONALES © 2024 por Moisés Adolfo Ulloa Arrieta tiene licencia de [Atribución-No Comercial-SinDerivadas 4.0 Internacional](https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/)

Interpretación de la velocidad global de adsorción para sistemas binarios empleando modelos difusionales  
1 part - 0 words

24%

Moisés 16 ene 2024  
Adolfo 11:57:59  
Ulloa  
Arrieta





**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE SAN LUIS POTOSÍ**  
**FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS**  
**CENTRO DE INVESTIGACIÓN Y ESTUDIOS DE POSGRADO**



**INTERPRETACIÓN DE LA VELOCIDAD GLOBAL DE  
ADSORCIÓN PARA SISTEMAS BINARIOS EMPLEANDO  
MODELOS DIFUSIONALES**

**TESIS PARA OBTENER EL GRADO DE**

**MAESTRO EN CIENCIAS EN INGENIERÍA QUÍMICA**

**PRESENTA:**

**I. MAT. MOISÉS ADOLFO ULLOA ARRIETA**

**DIRECTOR:**

**DR. RAÚL OCAMPO PÉREZ**

**CO-DIRECTOR:**

**DR. FARID CORTÉS**

**SINODALES**

**Dra. Erika Padilla Ortega**  
Presidenta

\_\_\_\_\_  
Firma

**Dra. María Angélica Forgianny**  
Secretaria

\_\_\_\_\_  
Firma

**Dr. Raúl Ocampo Pérez**  
Vocal

\_\_\_\_\_  
Firma

**Comité Académico**  
**Posgrado en Ciencias en Ingeniería Química**  
**Facultad de Ciencias Químicas**  
**Universidad Autónoma de San Luis Potosí**  
**Presente.**

Por medio de la presente hacemos de su conocimiento que la tesis llevada a cabo por el alumno de Maestría en Ing. Moisés Adolfo Ulloa Arrieta, titulada:

**Interpretación de la velocidad global de adsorción para sistemas binarios empleando modelos difusionales.**

Ha sido concluida y aprobada por el comité tutorial para iniciar con los trámites correspondientes para su titulación, el cual tendrá lugar en la sala audiovisual el día 18 de enero del presente año a las 11:00 h.

ATENTAMENTE

COMITÉ TUTORIAL

Dr. Raúl Ocampo Pérez  
Director, FCQ/UASLP

\_\_\_\_\_  
Firma

Dr. Farid Cortés  
Co-director, Minas/UNAL

\_\_\_\_\_  
Firma

Dra. Erika Padilla Ortega  
Asesora, FCQ/UASLP

\_\_\_\_\_  
Firma

Dra. María Angélica Forgiorny  
Asesora, FCB/UdeMedellín

\_\_\_\_\_  
Firma

## **AGRADECIMIENTOS INSTITUCIONALES**

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE SAN LUIS POTOSÍ

(UASLP)

Facultad de Ciencias Químicas

Centro de Investigación y Estudios de Posgrado

CONSEJO NACIONAL DE HUMANIDADES, CIENCIAS Y TECNOLOGÍA

(CONAHCYT)

Beca No. 812405

## **AGRADECIMIENTOS TÉCNICOS**

Al Dr. Raúl Ocampo Pérez, por el espacio en el Laboratorio de Procesos Avanzados de Oxidación donde llevé a cabo la parte experimental de este proyecto y por suministrar los reactivos, materiales y equipos necesarios para la realización de las cinéticas de adsorción.

A la Dra. Angélica Forgianny, por permitirme hacer uso del equipo de infrarrojo para la caracterización del material en el Laboratorio de Diseño de Materiales del Grupo de Investigación MAT&MPAC de la Universidad de Medellín.

A la Dra. Erika Padilla, por su apoyo en las dudas respecto al equilibrio binario de adsorción, así como en el análisis de los modelos de isotermas multicomponente.

## **AGRADECIMIENTOS**

A mis padres, que siempre han sido un apoyo incondicional y nunca me han cortado las alas para perseguir cada uno de mis objetivos. A ellos por estar en cada paso que doy y por darme las fuerzas de seguir adelante, siendo el pilar de mi vida y los que me motivan a ser mejor. Sin su sacrificio y esfuerzo no podría estar aquí hoy. Gracias por demostrarme el amor que me tienen de todas las formas posibles. Mamá, este triunfo es especialmente para ti, porque a pesar de los momentos difíciles siempre me has apoyado y me has mostrado una sonrisa que me hace salir adelante.

A Miguel, por ser otro de los pilares en mi vida, por ser el mejor compañero en todo este proceso. Agradezco por estar a mi lado en todos los momentos de enfermedad, cansancio y por escucharme y aconsejarme. Gracias por siempre creer en mí.

A mi familia, por su apoyo y aporte de cada granito de arena que hizo esto posible.

Al Dr. Raúl Ocampo, por permitirme formar parte de su grupo de investigación y formarme con sus conocimientos y experiencia. Gracias por la paciencia y la confianza que depositó en mí para poder terminar este proyecto.

A mis compañeros Karina Mota, Juan Carlos Serna, Saúl Maruri y Saúl Osmar por su amistad y consejos otorgados, por apoyarme en la montura de los experimentos. Gracias por la paciencia, las risas y los momentos vividos.

A Valeria Alfaro y Juan Camilo Barreto, por abrirme las puertas y guiarme en los primeros pasos que di en México. Gracias por estar para mí y por todas las experiencias vividas. Hicieron de estos dos años una aventura maravillosa que atesoro mucho.

A Ashanti, Fide, Nancy, Marisol, Alfredo, Alejandro, Cesar, Uri y cada uno de los amigos que hice en este trayecto. Gracias por cada una de las aventuras, las risas y los momentos que llevo conmigo.

Al Grupo AOP's & CLAYS por su apoyo en el proceso y al Grupo de Investigación Materiales con Impacto (MAT&MPAC) por abrirme las puertas al mundo de la investigación.

Al comité tutorial por la elaboración de esta tesis.

## RESUMEN

En este trabajo se estudió la velocidad global de adsorción en sistemas individuales y binarios empleando como contaminantes modelo metronidazol (MNZ) y acetaminofén (ACT); y como adsorbente un carbón activado comercial (F400). Los datos experimentales se interpretaron de manera rigurosa mediante un modelo de difusión que toma en cuenta el transporte externo de masa, la difusión intraparticular y la adsorción sobre el sitio activo. Este modelo fue desarrollado tanto para sistemas individuales como para sistemas binarios. Adicionalmente, el material adsorbente fue caracterizado para conocer sus propiedades fisicoquímicas y relacionar su comportamiento en los resultados de adsorción. Los resultados del equilibrio de adsorción individual demostraron que la adsorción de MNZ y ACT se lleva a cabo mediante interacciones similares con valores máximos de capacidades de adsorción de 1.40 mmol/g y 1.38 mmol/g para el MNZ y el ACT, respectivamente. Se encontró que ambas moléculas se adsorben en monocapa, lo cual se confirmó con los resultados de la superficie ocupada por las moléculas después de la adsorción ( $\%S_{\text{MNZ}} = 79.45\%$  y  $\%S_{\text{ACT}} = 77.42$ ) y la naturaleza de las interacciones que gobiernan el proceso de adsorción del MNZ y ACT, las cuales fueron interacciones dispersivas y puentes de hidrógeno. El modelo de difusión general fue capaz de predecir correctamente las curvas de decaimiento de la concentración de ambas especies obteniéndose bajos porcentajes de desviación y ambos mecanismos de difusión fueron relevantes, pero la contribución de la difusión superficial fue ligeramente más alta para el caso del MNZ, mientras que para el ACT fue la difusión en el volumen del poro. El equilibrio binario reveló que el modelo de isoterma ILME fue el más preciso para describir la superficie de adsorción, mostrando un efecto antagónico en el cual el MNZ y el ACT compiten por los sitios activos en la superficie del adsorbente. Para finalizar, el modelo de difusión general empleado para describir la difusión individual pudo extenderse con éxito para interpretar sistemas binarios, demostrando un excelente ajuste a los datos experimentales con bajos porcentajes de desviación. Al igual que en los sistemas individuales, en el sistema binario ambos mecanismos de difusión fueron relevantes.

**Palabras clave: adsorción individual, adsorción multicomponente, metronidazol, acetaminofén, difusión intraparticular, carbón activado.**

## **ABSTRACT**

In this work, the overall adsorption rate was studied in single and binary systems using metronidazole (MNZ) and acetaminophen (ACT) as model contaminants and commercial activated carbon (F400) as adsorbent. The experimental data were rigorously interpreted using a diffusion model considering external mass transport, intraparticle diffusion, and adsorption on the active site. This model was evaluated for both single and binary systems. Additionally, the adsorbent material was characterized to understand its physicochemical properties and for relating its performance with the adsorption results. The results of the individual adsorption equilibrium showed that the adsorption of MNZ and ACT is carried out by similar interactions with maximum values of adsorption capacities of 1.40 mmol/g and 1.38 mmol/g for MNZ and ACT, respectively. Both molecules were found to be adsorbed in monolayer, which was confirmed by the results of the surface area occupied by the molecules after adsorption (%SMNZ = 79.45% and %SACT = 77.42) and the nature of the interactions governing the adsorption process of MNZ and ACT were dispersive interactions and hydrogen bonding. The general diffusion model was able to correctly predict the concentration decay curves of both species obtaining low percentage deviations and both diffusion mechanisms were relevant, but the contribution of surface diffusion was slightly higher for the case of MNZ, while for ACT it was the diffusion in the pore volume. The binary equilibrium revealed that the ILME isotherm model was the most accurate for describing the adsorption surface, showing an antagonistic effect in which MNZ and ACT compete for active sites on the adsorbent surface. To conclude, the general diffusion model used to describe individual diffusion could be successfully extended to interpret binary systems, demonstrating an excellent fit to the experimental data with low percentage deviations. As in the single systems, both diffusion mechanisms were relevant in the binary system.

**Keywords: individual adsorption, multicomponent adsorption, metronidazole, acetaminophen, intraparticle diffusion, activated carbon.**

# ÍNDICE GENERAL

RESUMEN .....	VIII
ABSTRACT.....	IX
ÍNDICE DE FIGURAS .....	XIII
ÍNDICE DE TABLAS.....	XIV
INTRODUCCIÓN .....	15
<b>1. ANTECEDENTES .....</b>	<b>18</b>
1.1. Contaminantes emergentes .....	18
1.2. Tipos de contaminantes emergentes .....	20
1.3. Fármacos como contaminantes en el agua.....	21
1.4. Antibióticos .....	22
1.4.1. Metronidazol.....	23
1.5. Analgésicos.....	25
1.5.1. Acetaminofén.....	26
1.6. Métodos de remediación.....	27
1.6.1. Adsorción .....	28
1.7. Materiales adsorbentes .....	28
1.7.1. Carbón activado .....	28
1.7.2. Propiedades de los carbones activados .....	30
1.7.2.1. Propiedades químicas superficiales .....	30
1.7.2.2. Propiedades texturales .....	31
1.8. Isotermas de adsorción .....	31
1.8.1. Modelos de isotermas monocomponente.....	32
1.8.2. Modelos de isotermas multicomponente .....	35
1.9. Velocidad de adsorción.....	38
1.9.1. Mecanismos de transferencia de masa.....	39
1.9.2. Modelo difusional .....	40
1.10. Antecedentes bibliográficos.....	42
<b>2. JUSTIFICACIÓN E HIPÓTESIS .....</b>	<b>44</b>
2.1. Justificación.....	44
2.2. Hipótesis.....	45

<b>3. OBJETIVOS .....</b>	<b>46</b>
3.1. Objetivo general.....	46
3.2. Objetivos particulares.....	46
<b>4. MATERIALES Y MÉTODOS .....</b>	<b>48</b>
4.1. Adsorbatos.....	48
4.1.1. Metronidazol.....	48
4.1.2. Acetaminofén.....	49
4.2. Carbón activado F400 .....	51
4.3. Identificación de interacciones adsorbato-adsorbente .....	53
4.4. Determinación de la concentración de acetaminofén y metronidazol en solución acuosa ...	53
4.5. Obtención de los datos experimentales de equilibrio y velocidad de adsorción mono- y multicomponente	54
4.6. Modelado del equilibrio de adsorción individual .....	57
4.7. Modelado del equilibrio de adsorción multicomponente.....	58
4.8. Modelado matemático de la velocidad de adsorción individual.....	59
<b>REFERENCIAS.....</b>	<b>64</b>

## Índice de figuras

<b>Figura 1.1.</b> Rutas esquemáticas de algunos contaminantes emergentes desde las fuentes hasta los receptores [17].....	20
<b>Figura 1.2.</b> Algunos tipos de contaminantes emergentes.....	21
<b>Figura 1.3.</b> Estructura química del metronidazol.....	24
<b>Figura 1.4.</b> Estructura química del acetaminofén.....	26
<b>Figura 1.5.</b> Esquema de la estructura porosa y grupos funcionales superficiales de un carbón activado. [45].....	29
<b>Figura 4.1.</b> Diagrama de especiación del metronidazol.....	49
<b>Figura 4.2.</b> Diagrama de especiación del acetaminofén.....	51
<b>Figura 4.3.</b> Diagrama del sistema experimental utilizado .....	56
<b>Figura 4.4.</b> Elemento intraparticular esférico diferencial seleccionado. ....	60

## Índice de tablas

<b>Tabla 4.1.</b> Propiedades fisicoquímicas del metronidazol [68].....	48
<b>Tabla 4.2.</b> Propiedades fisicoquímicas del acetaminofén [65]. .....	50
<b>Tabla 4.3.</b> Propiedades texturales y fisicoquímicas del F400 [70]. .....	52
<b>Tabla 4.4.</b> Matriz de experimentos multicomponente.....	57

## INTRODUCCIÓN

El agua es un recurso esencial para la vida en el planeta y vital para el desarrollo de la humanidad, siendo esta indispensable para el correcto desarrollo de los ecosistemas y los seres vivos, además posibilita el progreso económico y social de las naciones [1-3]. Entre los diversos contaminantes descargados en aguas residuales, destacan los contaminantes emergentes, que han encendido las alarmas en la comunidad científica, dado que éstos compuestos químicos son utilizados en productos de uso común como artículos de cuidado personal, pesticidas, hormonas y fármacos, entre otros. Es especialmente preocupante que las plantas convencionales para el tratamiento de aguas residuales no están diseñadas para eliminar este tipo de contaminantes. Por esto, los contaminantes emergentes terminan en los cuerpos de agua, ocasionando problemas al medio ambiente [1]. Los productos farmacéuticos, son de especial preocupación debido a que se han venido introduciendo y acumulando continuamente al medio ambiente, convirtiéndose en un problema para los ecosistemas y la salud de los seres humanos en general [2]. Dentro de los fármacos más usados encontramos los antibióticos y analgésicos, ya que estos encuentran aplicación directa o indirecta en medicina humana y veterinaria, ganadería, acuicultura, entre otros. Los antibióticos una vez ingresan al medio ambiente representan una amenaza para la salud humana y los ecosistemas naturales, debido a que los microorganismos como las bacterias después de una exposición prolongada pueden generar genes de resistencia [3]. Este fenómeno de diseminación de bacterias resistentes a los antibióticos, conocido como resistencia microbiana, compromete la capacidad de tratar infecciones comunes, ya que se vuelven intratables con los fármacos disponibles actualmente. Por otro lado, los analgésicos también representan una problemática emergente por su alta movilidad, persistencia y su aguda

resistencia a la degradación, convirtiéndose en un desafío a la hora de tratarlos una vez llegan a los cuerpos de agua [4]. Por tanto, la liberación de antibióticos y analgésicos a cuerpos de agua superficiales y subterráneos es un asunto ambiental y de salud pública que requiere urgentes medidas de mitigación.

Ante la necesidad de eliminar contaminantes emergentes del agua, se han propuesto diversas tecnologías, entre las que destacan: la filtración por membranas, catálisis electroquímica, coagulación, biodegradación, fotocátalisis y adsorción [5]. De todas estas una de las opciones más prometedoras es la adsorción, esto por ser una tecnología eficiente, de fácil operación, bajo costo y que no produce grandes cantidades de subproductos dañinos para el ambiente [6]. Diferentes materiales adsorbentes se han investigado para el tratamiento de aguas residuales, tales como los geles de sílice, las arcillas, óxidos de grafenos, nanotubos y carbones activados comerciales [11-14]. Gracias a sus buenas propiedades fisicoquímicas (alta área específica, textura porosa, química superficial, etc.) y versatilidad, los carbones activados han sido utilizados ampliamente en la adsorción de contaminantes emergentes. Además, estudios previos han demostrado su eficacia a la hora de remover fármacos de soluciones acuosas [7].

Los estudios experimentales estáticos por lotes son un punto de partida indispensable antes de llevar a cabo un escalamiento del laboratorio a la industria de un proceso de adsorción, este tipo de estudios permite determinar la máxima capacidad de adsorción del adsorbente en el equilibrio termodinámico y la velocidad de adsorción, dando paso así, hacia a la experimentación de adsorción en continuo en columnas, que es un proceso más cercano a lo que se realiza a nivel industrial [8]. La adsorción en columna o lecho empacado se da en tres etapas esenciales: (1) equilibrio de adsorción; (2) tasa o velocidad de adsorción en lotes y (3) adsorción

en régimen dinámico [9]. La adsorción es un fenómeno que está gobernado por la transferencia de masa, de ahí que sea importante dilucidar si existen procesos difusionales y de ser así estudiar los parámetros para tener una información más precisa sobre los fenómenos que allí ocurren [10]. Hoy en día existen diferentes modelos para estudiar la velocidad de adsorción, donde cada uno de ellos toma en cuenta ciertas consideraciones en el transporte de masa. Aun así, estos modelos coinciden en que para la interpretación de la velocidad de adsorción se debe partir de un balance de masa, por lo cual en el desarrollo de estos se resuelven entonces ecuaciones de transferencia de masa. Estas ecuaciones toman en cuenta tanto el equilibrio como la tasa de adsorción, siendo uno dependiente del otro. Es decir, que es necesario contar con los parámetros de equilibrio. Dentro de dichos modelos destacan los modelos difusionales y en este trabajo se optó por el modelo de difusión general.

A pesar de que se ha estudiado ampliamente el equilibrio y la velocidad global de adsorción en sistemas monocomponentes, los estudios binarios son escasos. Además, estos trabajos no han considerado los modelos difusionales para la interpretación de estas velocidades globales de adsorción. Dichos estudios como se mencionó anteriormente son esenciales y necesarios para escalar la adsorción multicomponente en sistemas dinámicos y su aplicación a nivel industrial.

Por tanto, en este proyecto se propone utilizar un carbón activado grado comercial (F400) para la remediación de dos contaminantes emergentes altamente presentes en aguas residuales: un antibiótico de amplio espectro (Metronidazol) y un analgésico ampliamente utilizado (Acetaminofén), evaluando su comportamiento en sistemas mono- y multicomponente, que es lo que más semejante a condiciones reales. Además, se implementará

un modelo matemático predictivo para describir las velocidades de adsorción de cada compuesto sobre el adsorbente en sistemas multicomponente. Los resultados de este trabajo de investigación aportarán información valiosa sobre la efectividad de utilizar el modelo de difusión general para interpretar la velocidad global de adsorción y la determinación de los parámetros de transferencia de masa.

## **1. ANTECEDENTES**

### **1.1. Contaminantes emergentes**

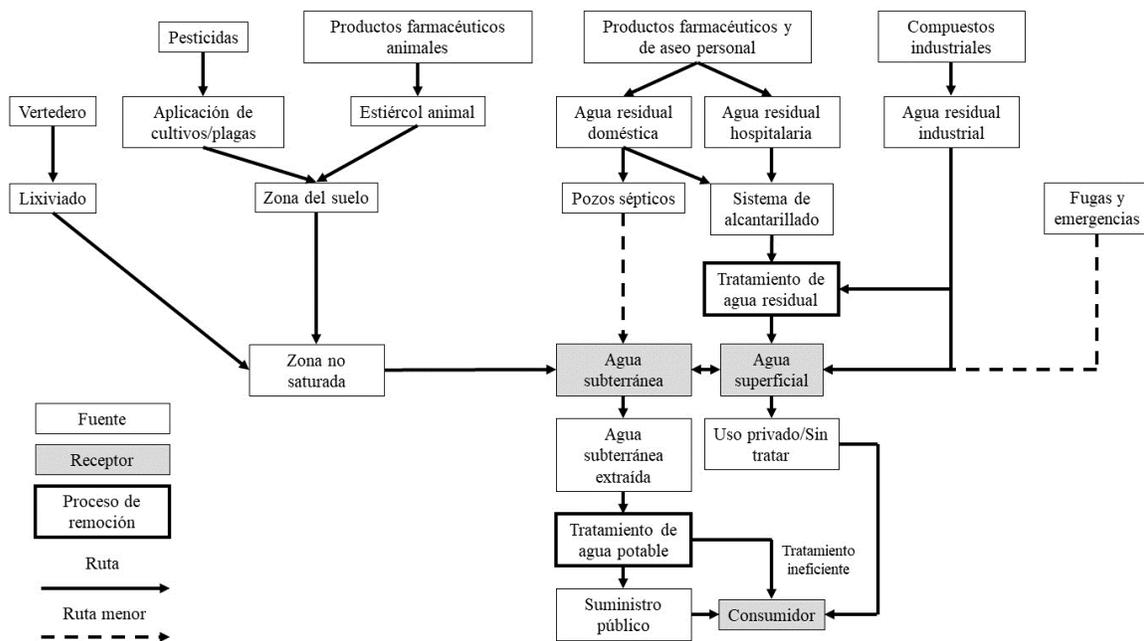
Debido a la masiva descarga de diferentes compuestos químicos tanto al suelo como al agua, se empezó la discusión sobre cuál era el impacto de dichos compuestos al medio ambiente y como afectaban a la salud humana. Esta discusión se originó porque incluso en concentraciones muy bajas, dichos compuestos pueden influir significativamente en la contaminación, sobre todo porque algunos al ser de origen antropogénico han llamado la atención sobre su impacto a largo plazo [11]. A estos nuevos compuestos de diferente naturaleza química y origen se les conoce como contaminantes emergentes [12].

De acuerdo con la UNESCO, los contaminantes emergentes son aquellas sustancias o compuestos químicos sintéticos o naturales, o cualquier microorganismo que no tenga una regulación claramente establecida, estos compuestos se encuentran comúnmente en el ambiente y son potencialmente nocivos para la salud del ser humano, cuyo destino, comportamiento y efectos (eco)toxicológicos no se comprenden correctamente [18-19]. Esta es una preocupación latente, ya que, debido a las propiedades de los contaminantes emergentes, como su polaridad, hace que sean fáciles de disolver en agua y de esta forma pueden transportarse entre diferentes

ambientes. Por otro lado, al poder acumularse en los organismos son fáciles de entrar en las cadenas alimenticias y su baja biodegradación los hace propensos a ser sustancias recalcitrantes a la eliminación [15].

En ciertos casos, la liberación de estos contaminantes al medio ambiente probablemente se ha venido presentando desde hace varios años, pero no es hasta en las últimas décadas que gracias a los nuevos métodos de detección se ha reconocido su impacto [16].

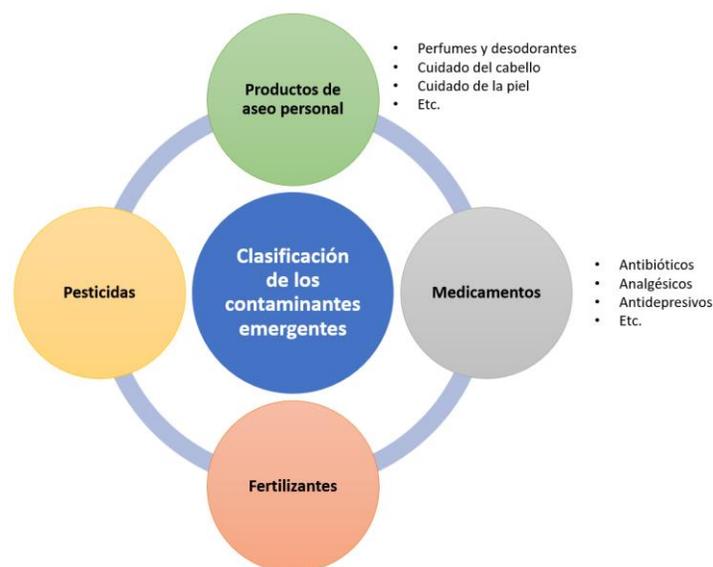
En la Figura 1.1 se observan algunas rutas que siguen los contaminantes emergentes desde su fuente hasta su destino final previamente reportados por Gavrilesco y cols. [17]. Como se puede apreciar, un inefectivo tratamiento de las aguas contaminadas con dichas sustancias puede ocasionar que estas sustancias lleguen al ser humano a través del consumo de aguas contaminadas, generando serios problemas de salud pública. La exposición prolongada a dichos contaminantes emergentes, incluso en pequeñas dosis, se ha asociado con el desarrollo de cáncer, malformaciones congénitas, disrupción endocrina y aceleración de la resistencia microbiana, entre otros efectos adversos documentados [7].



**Figura 1.1.** Rutas esquemáticas de algunos contaminantes emergentes desde las fuentes hasta los receptores [17].

## 1.2. Tipos de contaminantes emergentes

Dentro de lo que se constituyen como contaminantes emergentes se pueden encontrar una gran variedad de compuestos como los pesticidas, productos farmacéuticos y de cuidado personal (PPCP), compuestos químicos disruptores endocrinos (EDC), subproductos de desinfección (DBP), genes resistentes a los antibióticos (ARG), bacterias resistentes a los antibióticos (ARB), entre otros [18]. En la Figura 1.2 se muestran algunos tipos de contaminantes emergentes que se encuentran hoy en día en circulación: como los productos de aseo personal que incluyen perfumes, productos para cuidados del cabello, entre otros; además de medicamentos ampliamente utilizados como antibióticos y analgésicos.



**Figura 1.2.** Algunos tipos de contaminantes emergentes.

Dentro de estos tipos de contaminantes emergentes destacan los productos farmacéuticos, los cuales han tenido un amplio uso en la medicina humana y veterinaria, conllevando a una descarga continua en las aguas residuales (la mayoría se excreta sin metabolizar) y son transportados hasta los medios acuáticos donde afectan los suministros de agua y los ecosistemas [19].

### **1.3. Fármacos como contaminantes en el agua**

Debido a la innovación y el desarrollo del sector farmacéutico, se han generado grandes beneficios en el bienestar y salud de las personas, prolongando así su esperanza de vida. Desde ese momento han surgido una gran variedad de fármacos asequibles para la población del mundo, siendo seguros y eficaces para combatir enfermedades [20].

Los compuestos farmacéuticos son aquellas sustancias que utiliza un ser humano para el cuidado de su salud personal o también son aquellos compuestos utilizados en el sector

agroindustrial para el tratamiento de enfermedades y el crecimiento en los animales [21]. La concentración de estos compuestos en los medios acuosos ha venido en aumento de manera gradual, ya sea por el crecimiento de la población o porque cada día estos fármacos se consumen con una mayor frecuencia [22].

Con el pasar de los años, se ha descubierto la presencia de compuestos farmacéuticos tanto en aguas residuales como en aguas naturales, no solo en su forma primaria u original, sino también en forma de metabolitos derivados de las excreciones del ser humano [23]. Incluso, se ha reportado que después de ingresar a plantas de tratamientos de aguas residuales convencionales, éstos pueden ser transformados en compuestos químicos más tóxicos que los originales [7]. Dentro de los grupos de fármacos que se ha encontrado cantidades significativas en cuerpos de agua, se tienen dos que son usados ampliamente por el ser humano para el tratamiento o prevención de enfermedades: antibióticos y analgésicos.

#### **1.4. Antibióticos**

Se le conoce como antibióticos a aquellas sustancias o fármacos que atacan o impiden el crecimiento de microorganismos, tales como bacterias, hongos y virus. En la actualidad existen más de 250 antibióticos registrados tanto para el tratamiento de seres humanos como de animales y su producción se remonta a la década de 1930, desde entonces ha venido aumentando su uso [24].

El descubrimiento del primer antibiótico data del año 1893 por el microbiólogo italiano Bartolomeo Gosio, en donde inhibía el crecimiento de *Bacillus anthracis* utilizando el ácido micofenólico que obtuvo aislando el *P. glaucum*. A partir de entonces se siguieron desarrollando

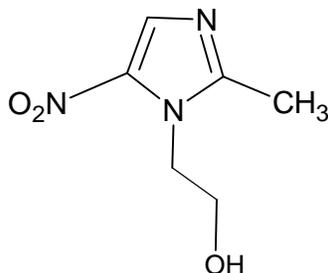
nuevos compuestos y no fue hasta el año 1928 donde se marcó un hito en este campo cuando, el bacteriólogo escocés Alexander Fleming, descubrió por accidente que el hongo *Penicillium notatum* impedía el desarrollo de las colonias de *Staphylococcus aureus* y, en el año 1929 se creó el primer antibiótico verdadero al poder aislar la molécula activa y a la que llamó “penicilina” [25].

Existe una preocupación alrededor de la propagación de los antibióticos a través de las aguas residuales, puesto que estos antibióticos pueden provocar un intercambio genético irreversible promoviendo así resistencia de los patógenos a estos compuestos [20]. Se le llama resistencia a los antibióticos a la capacidad que tienen las bacterias para resistir y evadir la acción del medicamento antimicrobiano que en el pasado sí surtía efecto para su tratamiento [21]. De acuerdo con la Organización Panamericana de la Salud (OPS) alrededor de 700.000 personas mueren al año en el mundo debido a infecciones relacionadas a bacterias resistentes a los antimicrobianos y que para el año 2050 podrían generar pérdidas económicas por más de 100 billones de dólares [26].

#### **1.4.1. Metronidazol**

El metronidazol es un nitroimidazol introducido al mercado en el año 1959 para el tratamiento de infecciones producidas debido a *Trichomonas vaginalis* [27]. Actualmente se usa en el área de la medicina para tratar padecimientos como la tricomoniasis, la amebiasis, las lesiones inflamatorias de la rosácea y las infecciones bacterianas, así como para prevenir las infecciones posoperatorias [28]. El metronidazol pertenece a una clase de medicamentos llamados antimicrobianos. Su mecanismo de acción consiste en parar el crecimiento de la

bacteria [29]. El metronidazol es un miembro de la clase de imidazoles sustituidos en C-1, -2 y -5 con grupos 2-hidroxietilo, nitro y metilo respectivamente [30].



**Figura 1.3.** Estructura química del metronidazol.

La principal vía de expulsión del metronidazol es por las vías renales. La tasa de metabolización del metronidazol es de aproximadamente de entre 60 a 80%, es decir que este fármaco se excreta sin metabolizar entre un 20% por la orina y un 6 a 15% por las heces fecales. [27]. Debido a que el metronidazol fue uno de los antibióticos más usado para el tratamiento de infecciones causadas por bacterias y parásitos, existe una problemática alrededor de la afectación que pueda causar en la biodiversidad y la salud de las personas por su continua descarga al ambiente, puesto que este es un compuesto no biodegradable y que es soluble en agua, promoviendo la bioacumulación en los sistemas acuáticos y su posterior transporte hacia los seres humanos [31].

La resistencia de este antibiótico es causada por la alteración de las enzimas implicadas en la activación intracelular del fármaco, estas enzimas son necesarias para la producción de metabolitos activos. En ciertas ocasiones se ha observado que la resistencia puede ser transferida de un microorganismo a otro [27]. Por otro lado, como efectos adversos que pueden presentarse ante una sobredosis de metronidazol se tienen: neuropatía periférica, toxicidad del sistema

nervioso central, convulsiones, orina oscura, sabor metálico en la boca, náuseas, malestar epigástrico y vértigo, además a la neutropenia [28].

### **1.5. Analgésicos**

Los analgésicos son aquellas sustancias que son capaces de eliminar o minimizar el dolor [32]. La palabra analgesia viene del latín *analgēsia* que nace a su vez del griego *ἀναλγησία* y significa “sin dolor” [33].

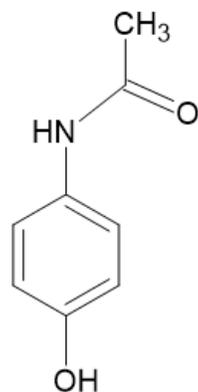
Dentro de los analgésicos se encuentran aquellos que son opiáceos y opioides, los cuales son un grupo de medicamentos que se usan principalmente para el tratamiento de dolores fuertes y de gran persistencia, tales como los dolores postoperatorios y oncológicos. Los opiáceos son aquellos de origen natural como la morfina y los opioides son de origen sintético como el fentanilo, estos últimos actúan sobre los receptores del sistema nervioso, imitando el poder analgésico de los opiáceos endógenos [32].

Por otro lado, se tienen los analgésicos periféricos o no opioides, los cuales se conforman una familia fármacos heterogénea que usualmente poseen además de un mecanismo analgésico, también actúan como antipiréticos y antiinflamatorios (aunque en menor grado). Estos medicamentos son usados para el tratamiento del dolor de intensidad leve o moderado y, además, como su acción es periférica no afectan la conciencia y no producen dependencia. Entre los analgésicos periféricos encontramos los para-aminofenoles, tales como el paracetamol, el cual posee propiedades analgésicas y antipiréticas, pero no es usado tanto como antiinflamatorio debido a su baja efectividad. El paracetamol o acetaminofén es ampliamente utilizado porque no es agresivo con la mucosa gástrica [32].

### 1.5.1. Acetaminofén

El acetaminofén o paracetamol es utilizado como un analgésico doméstico común, ya que se tolera bien y tiene una incidencia baja en efectos secundarios [34], [35]. Es un analgésico y antipirético con propiedades similares al ácido acetilsalicílico, pero con un efecto antiinflamatorio bajo [35]. Este medicamento fue aprobado por la Administración de Alimentos y Medicamentos de los Estados Unidos (FDA, por sus siglas en inglés) en el año 1951 y desde entonces es comercializado en diferentes presentaciones [36].

El paracetamol pertenece a la familia de los fenoles, siendo este el 4-aminofenol en el que uno de los hidrógenos que está unido al grupo amino ha sido sustituido por un grupo acetilo [36]. En la Figura 1.4 se observa la estructura química del acetaminofén.



**Figura 1.4.** Estructura química del acetaminofén.

El mecanismo de acción del acetaminofén consiste en la inhibición de la ciclooxigenasa y la biosíntesis de prostaglandinas [36], [37]. Su efecto antipirético está relacionado con su acción sobre el centro termorregulador del hipotálamo, induciendo una vasodilatación periférica y dando lugar a un incremento del flujo sanguíneo en la piel, aumentando la sudoración y la pérdida de calor [37]. El acetaminofén se absorbe de manera rápida en el cuerpo, donde la

concentración máxima se alcanza entre 30 y 120 min, pero de la dosis administrada solo un 90% es metabolizada por el hígado en glucurónicos, sulfatos, cisteínas y la eliminación del restante sin metabolizar se da mayormente por vías renales [38].

Existe una problemática alrededor de la disposición de este fármaco en el medio ambiente, debido a que, en la centralización de las aguas residuales hospitalarias y domésticas, este puede terminar en los cuerpos acuáticos. Es bien sabido que este fármaco se considera tóxico para la fauna acuática y en cantidades excesivas puede causar trastornos de la salud en el ser humano, ya que un uso repetido y excesivo a largo plazo genera insuficiencia hepática aguda, además de otras enfermedades. Por otro lado, al ser un compuesto bioacumulativo, puede ingresar a la cadena alimenticia causando estrés oxidativo, trastornos reproductivos, acompañado de alta mortalidad en las especies acuáticas [39].

## **1.6. Métodos de remediación**

Hoy en día no están bien definidas las concentraciones máximas de productos farmacéuticos en el entorno, en otras palabras, al no tener una regulación legal acerca de las concentraciones permitidas en la descarga de estos contaminantes al medio ambiente no se puede determinar correctamente su impacto tanto en la biodiversidad y la salud humana [40]. Es por ello por lo que cada día se están investigando nuevos y mejores métodos de remediación que permitan minimizar la concentración de los compuestos en las descargas de aguas residuales a los cuerpos acuáticos. La remoción de compuestos farmacéuticos del agua enlista sistemas convencionales (cloruro, dióxido de cloruro, plantas de tratamiento de aguas residuales), procesos de avanzados de oxidación (ozono, radiación ultravioleta, radiación gama y radiación

de electrones) y procesos de adsorción [41]. Entre éstos la adsorción ha encontrado amplia aplicación en sistemas reales debido a su efectividad y fácil adaptabilidad a los sistemas existentes.

### **1.6.1. Adsorción**

De acuerdo con la Unión Internacional de Química Pura y Aplicada (IUPAC por sus siglas en inglés), la adsorción está definida como el aumento en la concentración de una sustancia en la interfaz de una fase líquida o gaseosa debido a la operación de fuerzas superficiales [42]. En otras palabras, la adsorción es la acumulación de un adsorbato en la superficie de un adsorbente en una fase líquida o gaseosa con la finalidad de remover dicho adsorbato, purificando la solución.

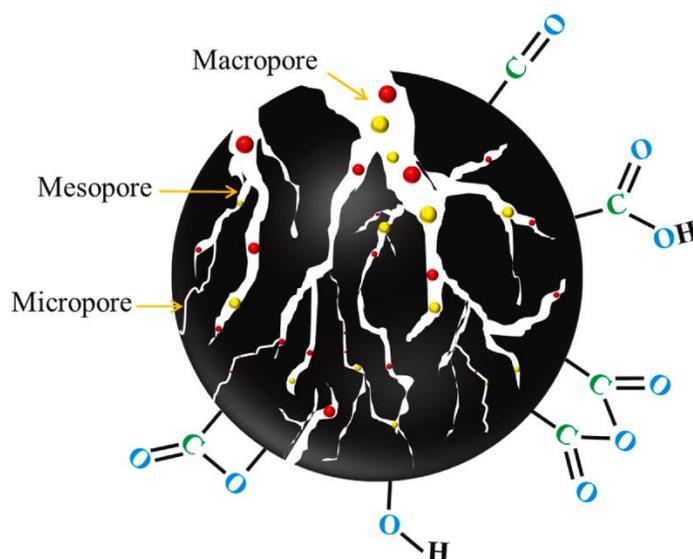
La adsorción es un mecanismo de transferencia de fase que es vital para llevar a cabo diferentes procesos debido a su bajo costo, flexibilidad, cinética rápida y alta efectividad. El fenómeno de la adsorción existe tanto en sistemas naturales y biológicos como en químicos, debido a esto, en la actualidad la adsorción es una operación unitaria imprescindible en procesos industriales de separación, purificación, catálisis y manejo de la contaminación en plantas de tratamiento de aguas residuales [42], [43].

## **1.7. Materiales adsorbentes**

### **1.7.1. Carbón activado**

Los carbones activados son estructuras con una alta porosidad y superficie específica, dichas estructuras son obtenidas de sustancias orgánicas ricas en carbono [44][45]. Los carbones

activados tienen una alta superficie específica que va desde los 500 hasta los 3000 m<sup>2</sup>/g, mientras que los volúmenes de poro pueden alcanzar valores de entre 0.7 y 1.8 cm<sup>3</sup>/g [45][46]. Además de esto, los carbones activados poseen una gran variedad de distribución de tamaños de poro, con un buen desarrollo de microporos, mesoporos y macroporos, acompañado de diferentes grupos funcionales en la superficie de este [45][47]. En la Figura 1.5 se puede observar un esquema de la estructura porosa de un carbón activado, junto con los diferentes grupos funcionales que se pueden encontrar en su superficie.



**Figura 1.5.** Esquema de la estructura porosa y grupos funcionales superficiales de un carbón activado. [45]

Los carbones activados son materiales sólidos se pueden preparar en varias presentaciones, tales como: polvos, gránulos, pellets, fibras, telas, entre otros. Dependiendo de las modificaciones y las propiedades que este material presente puede ser aplicado en numerosas áreas, ya sea en fase líquida o gaseosa, para el tratamiento de aguas, almacenamiento de energía,

industria petroquímica, recuperación de solventes, soporte para catalizadores e industria farmacéutica [45][47].

## **1.7.2. Propiedades de los carbones activados**

### **1.7.2.1. Propiedades químicas superficiales**

Los carbones activados están constituidos por microcristalitos que consisten en anillos hexagonales fusionados de átomos de carbono. Esta estructura es muy similar a la estructura del grafito. La superficie del carbón activado usualmente está constituida por grupos funcionales oxigenados o complejos de oxígeno. Estos complejos de oxígeno surgen tanto de las materias primas o precursores usados como del proceso de quimisorción de oxígeno durante la activación del carbón [46].

Principalmente se encuentran cuatro grupos funcionales oxigenados característicos, que son carboxílicos fuertes, carboxílicos débiles, fenoles y carbonilos, dichos grupos son considerados ácidos. Otro tipo de grupos que se pueden encontrar son los éteres que son de carácter básico. Entre más alta sea la temperatura de activación es posible tener una superficie más básica. Durante el proceso de activación es recomendable usar atmósferas reactantes, ya que si el tratamiento térmico de los carbones se da en una atmósfera inerte puede eliminar los grupos oxigenados de la superficie del material [46].

Como es bien sabido, los grupos funcionales de la superficie del carbón activado juegan un papel fundamental en los procesos de adsorción. Tomando como ejemplo el grupo carbonilo, los compuestos aromáticos se pueden adsorber en los oxígenos del carbonilo a través de un mecanismo de complejación, ya que el oxígeno del carbonilo actúa como un donante de

electrones mientras que el adsorbato actúa como un receptor de esos electrones. Otro mecanismo son los puentes de hidrógeno que se pueden establecer entre un átomo de hidrógeno que está unido a un átomo altamente electronegativo y otro. El átomo de hidrógeno tiene una carga parcial positiva, por lo que atrae a la densidad electrónica de un átomo cercano.

### **1.7.2.2. Propiedades texturales**

Una de las propiedades más llamativas de los carbones activados es su elevada área específica, la cual puede ser fácilmente superior a los 500 m<sup>2</sup>/g. Estudios han mostrado que carbonizados obtenidos por pirólisis a temperaturas por encima de 400 °C permiten alcanzar una alta área específica y un gran volumen de poro. Lograr estas áreas específicas altas, implica que se deban abrir los poros que estaban inicialmente restringidos y la creación de nuevos poros [44].

Hablando de la porosidad, la distribución y tamaño de microporos, mesoporos y macroporos influyen en las capacidades de adsorción y propiedades del carbón activado. Por ejemplo, pequeños tamaños de poro no atrapan moléculas grandes de adsorbato y tamaños muy grande de poro no son capaces de retener moléculas pequeñas de adsorbato [44]. Dependiendo del proceso que se lleve a cabo se obtendrán diferentes combinaciones de tamaño de poro. Estudios anteriores han mostrado que usar ZnCl<sub>2</sub> como agente activante ayuda a la formación de microporos esencialmente [46].

## **1.8. Isotermas de adsorción**

La isoterma de adsorción es una representación numérica y matemática que relaciona la cantidad de adsorbato que se adsorbe sobre un adsorbente a una concentración de equilibrio

dada cuando se tiene una temperatura constante [43]. Generalmente, las isothermas de adsorción se establecen cuando se produce el contacto entre el adsorbato y el adsorbente durante un tiempo suficiente, en el que la concentración de la interfase debe estar en equilibrio dinámico con la concentración de adsorbato existente en la solución [48].

Una comprensión e interpretación adecuadas de las isothermas de adsorción es fundamental para el entendimiento de los mecanismos de adsorción y el diseño eficaz del sistema de adsorción. Además, la condición donde se alcanza el equilibrio de adsorción es una de las informaciones más importantes que se debe tener de los procesos de adsorción. Los datos experimentales del equilibrio de adsorción se pueden modelar por las isothermas e investigar información del proceso de adsorción, como los mecanismos de adsorción, la capacidad máxima de adsorción, así como las propiedades del adsorbente, dando una idea del área superficial, energía de adsorción, entre otras [49]. La mayoría de los modelos se basan en algunos supuestos.

### **1.8.1. Modelos de isothermas monocomponente**

- *Modelo de Langmuir*

El modelo de isoterma de adsorción de Langmuir se desarrolló inicialmente para la descripción de la adsorción de un gas en un adsorbato en fase sólida por Irving Langmuir en 1916 [50]. Esta isoterma ha sido ampliamente estudiada y asume que la adsorción ocurre en una superficie adsorbente homogénea [43]. La isoterma de Langmuir explica la cobertura de la superficie al equilibrar las velocidades relativas de adsorción y desorción (equilibrio dinámico) [48].

Esta isoterma plantea ciertos supuestos, los cuales son: (1) la adsorción se da en monocapa; (2) la distribución de los sitios de adsorción es homogénea a lo largo de la superficie del adsorbente; (3) la energía de adsorción es constante; y (4) la interacción entre las moléculas de adsorbato es insignificante [49].

El modelo de isoterma de Langmuir está dado por:

$$q_e = \frac{q_{\text{máx}} K_L C_e}{1 + K_L C_e} \quad (1.1)$$

- ***Modelo de Freundlich***

El modelo de isoterma de adsorción de Freundlich se usa para representar una adsorción no lineal con dos parámetros y fue propuesto por Herbert Freundlich en el año 1906 [49][51]. Este modelo de isoterma interpreta la adsorción como un fenómeno que ocurre sobre superficies heterogéneas a través de un mecanismo de adsorción multicapa [43]. En este modelo se plantea que el calor de adsorción y los sitios activos no necesitan estar distribuidos uniformemente sobre la superficie del adsorbente, dando lugar a una superficie heterogénea [48].

La expresión del modelo de isoterma de Freundlich expone unos supuestos: (1) la adsorción se da en multicapa; (2) la superficie es heterogénea, tanto en la distribución de los sitios de adsorción como en las energías de dichos sitios activos; (3) los sitios de unión más fuertes serán ocupados primero y luego se provocará una disminución exponencial en la energía de adsorción al irse completando el proceso de adsorción.

El modelo de isoterma de Freundlich está dado por:

$$q_e = K_F C_e^{1/n} \quad (1.2)$$

- **Modelo de Prausnitz-Radke**

Este modelo de isoterma de tres parámetros fue propuesto por primera vez en el año 1972 por los investigadores Clayton J. Radke y John M. Prausnitz [52], en donde investigaron el proceso de adsorción de ciertos compuestos orgánicos en solución acuosa como la acetona, propionitrilo, p-clorofenol, 2-propanol y p-cresol, utilizando carbón activado [53].

Este modelo propone una reducción a una isoterma lineal a bajas concentraciones de adsorbato, mientras que a concentraciones más altas se convierte en un modelo de isoterma de Freundlich [43]. Este modelo permite el estudio de los procesos de adsorción en amplios rangos de concentración y carga de adsorbato, dando así a correlaciones útiles para la predicción de los equilibrios de adsorción [42].

El modelo de isoterma de Prausnitz-Radke está dado por:

$$q_e = \frac{aC_e}{1+bC_e^\beta} \quad (2.3)$$

En relación a los parámetros de los modelos de isoterma tenemos que  $K_L$  (L/mg) es la relación entre la velocidad de adsorción y la velocidad de desorción,  $q_{máx}$  (mg/g) es la capacidad máxima de adsorción;  $K_F$  (L/mg) y  $n$  son constantes que integran todos los factores que afectan la capacidad de adsorción y la intensidad de adsorción, respectivamente; y  $a$  (L/g),  $b$  ( $L^\beta/mg^\beta$ ) y

$\beta$  son los parámetros de la isoterma de Prausnitz-Radke, mientras que  $C_e$  (mg/L) es la concentración del soluto en el equilibrio.

El estudio del equilibrio de adsorción de moléculas orgánicas, específicamente de fármacos, ha sido investigado ampliamente por diversos autores en la literatura. Un ejemplo de lo anterior es el trabajo de Carrales-Alvarado y cols., los cuales estudiaron la adsorción de MNZ sobre un carbón activado comercial (F400). Ellos llevaron a cabo experimentos de equilibrio de adsorción a diferentes condiciones de pH y temperatura, encontrando una capacidad máxima de adsorción de 248.6 mg/g a  $\text{pH} = 7$  y  $T = 25$  °C, hallando que la combinación de un área superficial grande y un bajo contenido de grupos carboxílicos son preferibles para la eliminación de MNZ de una solución acuosa y el proceso a  $\text{pH} < 4$  era desfavorable [54]. Por otro lado, Thanh Nguyen y cols. estudiaron la adsorción de ACT sobre un carbón activado comercial de origen local, donde en el equilibrio de adsorción encontraron que a condiciones de  $\text{pH} = 7$  y  $T = 25$  °C era posible alcanzar capacidades de adsorción máximas de alrededor de 221 mg/g, encontrando interacciones del tipo  $n-\pi$ ,  $\pi-\pi$  e interacciones débiles como puentes de hidrógeno (pero no tan significativas) que favorecieron el proceso de adsorción, además una conclusión importante es que la adsorción de ACT no dependía tanto del pH [55].

### 1.8.2. Modelos de isotermas multicomponente

- *Modelo de isoterma de Langmuir Multicomponente Modificado con un factor de interacción  $\eta_i$  (ILMM)*

Este modelo de isoterma es una modificación del modelo de isoterma de Langmuir original, puesto que dicho modelo no es capaz de describir con sus constantes las interacciones presentes en una adsorción multicomponente, de ahí que sea necesario utilizar un factor de interacción  $\eta_i$ . El factor de interacción  $\eta_i$  considera los efectos competitivos que puedan darse en el sistema y está asociado a la afinidad del soluto  $i$  por el adsorbente, por lo que entre mayor sea el valor de  $\eta_i$  menor será la afinidad por el material adsorbente del soluto  $i$  en el sistema multicomponente [56].

La ILMM está dada por:

$$q_{e,i} = \frac{q_{máx,i} K_i (C_{e,i}/\eta_i)}{1 + \sum_{j=1}^N K_j (C_{e,j}/\eta_j)} \quad (1.4)$$

Donde  $q_{máx,i}$  y  $K_{i,j}$  se derivan de los correspondientes ajustes de la isoterma individual de Langmuir.  $\eta_i$  puede estimarse de los datos de adsorción multicomponente y dependerá de las concentraciones de las especies en la solución [57].

- ***Modelo de isoterma de Langmuir Multicomponente Extendido (ILME)***

Este modelo de isoterma también es una modificación del modelo de isoterma de Langmuir individual. En este fue propuesto por Yang y cols. en el año 1987 [58] y supone que los sitios de adsorción superficiales son uniformes, por lo que hay una competencia de los adsorbatos por los mismos sitios superficiales [57].

La ILME está dada por:

$$q_{e,i} = \frac{q_{\text{máx}} K_{E,i} C_{e,i}}{1 + \sum_{j=1}^N K_{E,j} C_{e,j}} \quad (1.5)$$

Donde  $q_{\text{máx}}$  es la capacidad máxima de adsorción de las  $N$  especies en el sistema,  $K_{E,i}$  y  $K_{E,j}$  son parámetros de la isoterma de Langmuir Multicomponente Extendido asociados a la afinidad de la especie  $i$  y  $j$  por el adsorbente. Todos los parámetros son obtenidos del ajuste de la adsorción competitiva en el sistema multicomponente.

- ***Modelo de isoterma de Redlich-Peterson Multicomponente Modificado con un factor de interacción  $\eta_i$  (IRPMM)***

Al igual que en los casos anteriores, este modelo es una extensión del modelo de isoterma de Redlich-Peterson individual, en donde se utiliza un factor de interacción  $\eta_i$  asociado a las características de las especies en el sistema multicomponente [59].

La IRPMM está dada por:

$$q_{e,i} = \frac{a_i (C_{e,i}/\eta_i)}{1 + \sum_{j=1}^N b_j (C_{e,j}/\eta_j)^{\beta_j}} \quad (1.6)$$

Donde  $a_i$ ,  $b_j$  y  $\beta_j$  son los parámetros de la isoterma individual de Redlich-Peterson.  $\eta_i$  puede estimarse de los datos de adsorción multicomponente.

Al igual que el equilibrio individual, estudiar el equilibrio multicomponente es de vital importancia en esta área de investigación porque permite entender el proceso de adsorción de

una manera más acercada a lo que sucede en un proceso de tratamiento de agua residual real, en donde se tiene una matriz de varios contaminantes. Diversos autores han investigado la adsorción multicomponente de varias combinaciones de contaminantes, tal como Carrales-Alvarado y cols. que estudió el equilibrio de adsorción binario de la mezcla dimetridazol (DTZ) y metronidazol (MNZ) sobre diferentes materiales carbonosos, entre ellos un carbón activado comercial (F400). Ellos encontraron que a condiciones de  $\text{pH} = 7$  y  $T = 25\text{ }^\circ\text{C}$  se alcanzaban capacidades de adsorción máximas de  $248\text{ mg/g}$  y  $270\text{ mg/g}$  para el MNZ y DTZ, respectivamente. Como conclusión del equilibrio binario dedujeron que las capacidades de adsorción de ambos contaminantes disminuyeron cuando ambos nitroimidazoles estaban presentes en solución, ya que ambos nitroimidazoles (MNZ y DTZ) compitieron por los mismos sitios de adsorción del material, mostrando una mayor afinidad del DTZ que del MNZ por la superficie del carbón (determinando así que la adsorción era antagónica y no cooperativa) y que el proceso de adsorción se veía favorecido mayormente interacciones dispersivas del tipo  $\pi$ - $\pi$  [60].

### **1.9. Velocidad de adsorción**

Usualmente, el equilibrio de adsorción no se alcanza de una forma inmediata, sobre todo cuando se tienen adsorbentes porosos y este es un proceso regido por la transferencia de masa del seno de la solución a los sitios de adsorción del material adsorbente, que a su vez está limitada por la resistencia a la transferencia de masa (dichas resistencias son las que determinan el tiempo para alcanzar el equilibrio de adsorción). El avance en el proceso de adsorción es conocido como cinética de adsorción. La velocidad de adsorción a menudo está limitada por procesos difusionales y por la transferencia de masa del seno de la solución a la superficie

externa y de la difusión de la superficie externa al interior de la partícula del material adsorbente [61].

De ahí, que evaluar los mecanismos que limitan la velocidad global de adsorción y los parámetros de transferencia de masa sea tan importante, debido a que dichos parámetros cinéticos junto con los parámetros de equilibrio sean datos de acceso esenciales para determinar los tiempos de contacto necesarios para diseñar de adsorbedores de lecho fijo y la dinámica del proceso [61].

### **1.9.1. Mecanismos de transferencia de masa**

La cinética de adsorción puede darse en cuatro pasos significativos [61]:

- I) Transporte convectivo del adsorbato desde el seno de la solución hacia la capa límite hidrodinámica que se encuentra alrededor de la partícula del adsorbente.
- II) Transporte del adsorbato de la capa límite a la superficie externa de la partícula de adsorbente (difusión externa).
- III) Transporte del adsorbato al interior de la partícula (difusión intraparticular) por difusión en el líquido de los poros (difusión en el volumen de poro) y/o por difusión a lo largo de la superficie interna (difusión superficial).
- IV) Adsorción de las moléculas del soluto en los sitios de adsorción finales presentes en la superficie de los poros.

### 1.9.2. Modelo difusional

Este modelo se obtiene a partir del balance de materia para una partícula esférica, por lo que los supuestos que se toman en cuenta son los siguientes:

- La temperatura es constante
- La solución está completamente homogénea, es decir, perfectamente mezclada
- La transferencia de masa dentro de la partícula del adsorbente es debido a la difusión intraparticular, la cual ocurre por difusión en el volumen de poro (difusión tipo Fick) y por difusión superficial
- La adsorción en los sitios activos es más rápida que la difusión intraparticular (instantánea)
- El adsorbente es isotrópico

El modelo de difusión general (PVSDM) es el siguiente [62]:

$$V \frac{dC_A}{dt} = -mSk_L (C_A - C_{Ar}|_{r=R_p}) \quad (1.7)$$

$$t=0, C_A = C_{A0} \quad (1.8)$$

$$\varepsilon_p \frac{\partial C_{Ar}}{\partial t} + \rho_p \frac{\partial q}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r^2 \left( D_{ep} \frac{\partial C_{Ar}}{\partial r} + D_s \rho_p \frac{\partial q}{\partial r} \right) \right] \quad (1.9)$$

$$C_{Ar} = 0, t=0, 0 \leq r \leq R_p \quad (1.10)$$

$$\left. \frac{\partial C_{Ar}}{\partial r} \right|_{r=0} = 0 \quad (1.11)$$

$$D_{ep} \left. \frac{\partial C_{Ar}}{\partial r} \right|_{r=R_p} + D_s \rho \frac{\partial q}{\partial r} = k_L (C_A - C_{Ar}|_{r=R_p}) \quad (1.12)$$

Donde:

V = Volumen de la solución

t = Tiempo

m = Masa del adsorbente

S = Área externa del adsorbente por unidad de masa

$k_L$  = Coeficiente de transferencia de masa externa

$C_A$  = Concentración del adsorbato en la solución

$C_{Ar}$  = Concentración del adsorbato dentro de la partícula del adsorbente

$R_p$  = Radio de la partícula de adsorbente

$\epsilon_p$  = Fracción hueca

$\rho_p$  = Densidad de la partícula de adsorbente

q = Masa del adsorbato por unidad de masa de adsorbente

r = Distancia radial

$D_{ep}$  = Coeficiente de difusión efectivo

$D_s$  = Coeficiente de difusión superficial

Como se mencionó anteriormente, entender los pasos limitantes y la velocidad global en el proceso de adsorción es de suma importancia si se desea escalarlo a nivel industrial, es por

ello que entender el modelo de difusión general y los fenómenos que este considera es indispensable en el estudio de cinéticas de adsorción. Ocampo-Pérez y cols. han demostrado que los modelos difusionales fueron muy acertados para describir la velocidad de adsorción de compuestos orgánicos en sólidos porosos y esto estaba relacionado a que la difusión intraparticular era la etapa que gobernaba el proceso de adsorción [63]. Otro ejemplo de ello es el trabajo de Flores-Cano y cols. quienes investigaron la adsorción de MNZ sobre carbonizados hechos a partir de residuos de café, hallando  $q_{\text{máx}} = 152 \text{ mg/g}$  a  $T = 25 \text{ °C}$  y  $\text{pH} = 7$ , además predijeron las curvas de decaimiento de la concentración con el modelo PVSDM, donde reveló que la difusión superficial contribuyó con más del 90 % de la difusión intraparticular total, es decir, la difusión superficial fue el mecanismo que controló la difusión intraparticular [64]. En otro trabajo de Ocampo-Pérez y cols. estudiaron la velocidad de adsorción global de ACT sobre pellets de carbón, encontrando que los modelos matemáticos basados en la difusión del volumen de los poros o la difusión superficial eran capaces de predecir las curvas de disminución de la concentración y que en este caso la molécula de ACT se difundía tanto por difusión de volumen de poro como por difusión superficial [65].

### **1.10. Antecedentes bibliográficos**

Ahora bien, se ha hablado sobre la aplicación de modelos difusionales para el estudio de la velocidad de adsorción en sistemas donde se tiene una molécula o contaminante modelo, pero poco se ha propuesto sobre la aplicación de dichos modelos para estudiar sistemas binarios. Un ejemplo de ello es el trabajo de Franco y cols del año 2022 [66] en donde estudiaron la aplicación del modelo de difusión general para la adsorción de colorantes en sistemas individual y binario utilizando azul de metileno y cristal violeta. En este trabajo se aplicó el método de líneas para

resolver el sistema de ecuaciones, el cual transforma ecuaciones diferenciales parciales en ecuaciones diferenciales ordinarias. Ellos mostraron que la diferencia entre el modelo aplicado al sistema individual y el binario radicaba en la forma en la que se incorporaba el equilibrio, ya que en lugar de aplicar ecuaciones de isothermas de adsorción monocomponente, optaron por utilizar la ecuación para equilibrios binarios. Franco y cols. encontraron que su extensión de modelo a pesar de tener un valor de  $R^2 \geq 0.8735$  era capaz de describir los datos experimentales de las curvas de decaimiento de la concentración, pero no tomaron en cuenta otros factores como la influencia de la cantidad de masa adsorbida de una especie en otra.

## 2. JUSTIFICACIÓN E HIPÓTESIS

### 2.1. Justificación

La presencia de fármacos en aguas residuales representa un grave problema ambiental emergente. Entre ellos, antibióticos como el metronidazol y analgésicos ampliamente utilizados como el paracetamol o acetaminofén se han detectado en concentraciones del orden de decenas a miles de ng/L en el efluente de plantas de tratamiento e incluso en cuerpos de agua superficial. Estos niveles, aunque aparentemente bajos, pueden causar efectos tóxicos tanto en organismos acuáticos como en humanos. En el año 2020 estudios reportaron la presencia de metronidazol en efluentes de plantas de tratamiento de aguas residuales en concentraciones cercanas a los 24500 ng/L [67]. Por otro lado, se han detectado concentraciones entre 0.4-71 ng/L de paracetamol en ríos de España y Francia, mientras que en varios países asiáticos estudios han demostrado que esta concentración sube hasta los 33 ng/L [34]. Estas concentraciones pueden aumentar en los efluentes de las industrias farmacéuticas y hospitalarios [39].

Ante esta problemática, el uso de carbones activados para la adsorción de estos contaminantes representa una tecnología prometedora para la remediación de dichos contaminantes en aguas residuales, dada su efectividad, bajo costo y disponibilidad comercial a gran escala. A pesar de que se ha estudiado ampliamente el equilibrio y la velocidad global de adsorción en sistemas monocomponentes, los estudios binarios son escasos, siendo éstos últimos los que se asemejan a las condiciones reales, donde usualmente coexisten mezclas de varios compuestos. Además, estos trabajos no han considerado los modelos difusionales para la interpretación de estas velocidades globales de adsorción, información esencial para el escalado

de la adsorción multicomponente en sistemas dinámicos y su aplicación a nivel industrial. Aquellos trabajos que han realizado aproximaciones a modelos difusionales aplicados a mezclas multicomponente no han detallado apropiadamente el desarrollo de este, lo cual da lugar a algunas imprecisiones.

La realización de este trabajo presenta un avance significativo en el estudio de los fenómenos de adsorción multicomponente, permitiendo así acercar más la brecha entre las simulaciones de procesos y su comportamiento en un entorno real, ya que esta extensión de modelo logra apoyar la obtención de predicciones más detalladas del comportamiento de una mezcla de contaminantes en un proceso de adsorción en escenarios más prácticos. Además, la implementación del modelo permite dilucidar parámetros claves y necesarios en el escalamiento al régimen dinámico de matrices más complejas de compuestos en sistemas acuosos, tales como una planta de tratamiento real.

## **2.2. Hipótesis**

Extendiendo las ecuaciones del modelo de difusión general y resolviendo estas de forma simultánea, permitirá la predicción de las curvas de decaimiento de concentración de las dos especies y la interpretación de la velocidad global de adsorción para el sistema multicomponente metronidazol-acetaminofén.

### **3. OBJETIVOS**

#### **3.1. Objetivo general**

Interpretar la velocidad de global de adsorción para el sistema binario metronidazol-acetaminofén aplicando un modelo de difusión general que permita evaluar la importancia de las diferentes resistencias a la transferencia de masa sobre la velocidad global de adsorción de ambos fármacos.

#### **3.2. Objetivos particulares**

Caracterizar las interacciones adsorbato-adsorbente a través de técnicas espectroscópicas.

Determinar los parámetros de equilibrio individual a través de las isothermas de adsorción monocomponente de los compuestos metronidazol y acetaminofén.

Estudiar el ajuste de la superficie de adsorción multicomponente del sistema metronidazol-acetaminofén con los modelos matemáticos.

Obtener las curvas de decaimiento de concentración monocomponente y multicomponente de los compuestos metronidazol y acetaminofén.

Interpretar las curvas de decaimiento de concentración monocomponente con el modelo de difusión general.

Aplicar el modelo matemático difusional general para dilucidar las velocidades de adsorción multicomponente metronidazol-acetaminofén.

Estimar la resistencia a la transferencia de masa que gobierna la difusión global de adsorción de ambos fármacos.

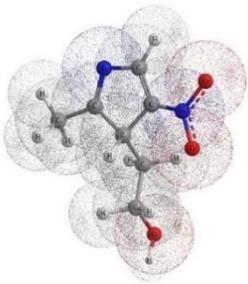
## 4. MATERIALES Y MÉTODOS

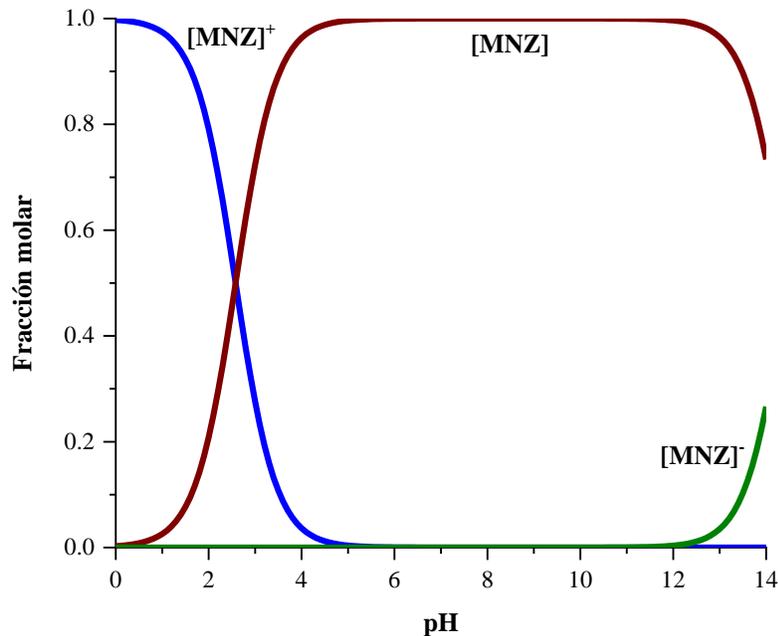
### 4.1. Adsorbatos

#### 4.1.1. Metronidazol

El metronidazol (MNZ) o 2-methyl-5-nitroimidazol-1-etanol fue suministrado por Sigma-Aldrich con una pureza del 100%. Las propiedades fisicoquímicas del metronidazol se enlistan en la Tabla 4.1. A partir de los valores de  $pK_a$  reportados se construyó el diagrama de especiación reportado en la Figura 4.1. Aquí se observa que a  $pH \leq 2.58$  predomina la especie negativa de la molécula de MNZ, a  $2.58 \leq pH \leq 14.44$  predomina la especie neutra y a  $pH \geq 14.44$  encontramos mayormente la especie positiva de esta. Por lo tanto, a  $pH = 7$  tendremos al MNZ en estado neutro en un 100%.

**Tabla 4.1.** Propiedades fisicoquímicas del metronidazol [68].

Estructura	
Fórmula molecular	$C_6H_9N_3O_3$
Peso molecular	171.15
$pK_a$	2.58, 14.44
Tamaño molecular (nm)	$x = 0.969$ $y = 0.736$ $z = 0.454$

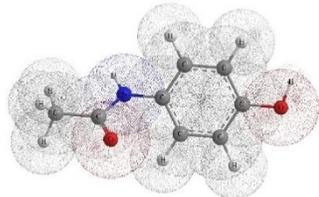


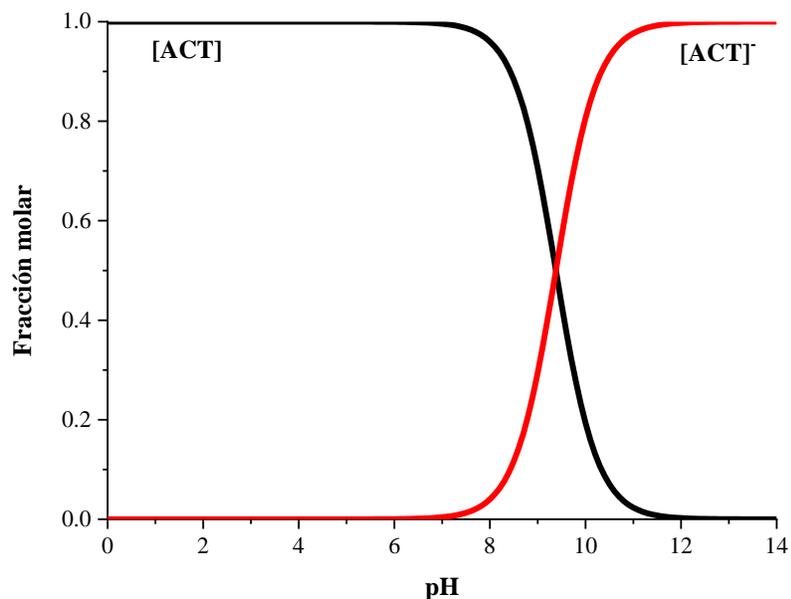
**Figura 4.1.** Diagrama de especiación del metronidazol.

#### 4.1.2. Acetaminofén

El acetaminofén (ACT) o 4-aminofenol fue suministrado por Sigma-Aldrich con una pureza  $\geq 99\%$ . Las propiedades fisicoquímicas del acetaminofén se enlistan en la Tabla 4.2. A partir de los valores de  $pK_a$  reportados se construyó el diagrama de especiación mostrado en la Figura 4.2. Aquí se observa que a  $pH \leq 9.38$  se va a tener casi en un 100% la especie neutra de la molécula de ACT, mientras que a  $pH \geq 9.38$  empieza a aparecer la especie negativa de la misma. Por lo tanto, a  $pH = 7$  tendremos al ACT en estado neutro en un 100%.

**Tabla 4.2.** Propiedades fisicoquímicas del acetaminofén [65].

Estructura	
Fórmula molecular	$C_8H_9NO_2$
Peso molecular	151.16
pK <sub>a</sub>	9.38
Tamaño molecular (nm)	x = 1.070 y = 0.658 z = 0.376



**Figura 4.2.** Diagrama de especiación del acetaminofén.

#### 4.2. Carbón activado F400

El carbón activado FILTRASORB 400 (F400) es un carbón activado de grado comercial elaborado por Calgon Carbon Corporation que puede usarse en una variedad de aplicaciones en medios acuosos, incluyendo la remoción de compuestos orgánicos disueltos en el agua. Este carbón activado de tipo granular está hecho a base de carbón bituminoso y es producido a través de un proceso conocido como reaglomeración para obtener así un producto granular duradero y de alta actividad [69]. El F400 fue triturado y tamizado a un tamaño de partícula de 0.223 mm correspondiente al pasante malla 50 y retenida malla 100. Después de tamizarlo fue lavado con agua desionizada y secado por 24 h a 110 °C. Las propiedades texturales y fisicoquímicas fueron reportadas por Serna-Carrizales y cols. y son mostradas en la Tabla 4.3.

El área específica  $S_{BET}$  reportada fue de  $756 \text{ m}^2/\text{g}$ , con un volumen de microporos de  $0.317 \text{ cm}^3/\text{g}$  correspondiente al 88% del total de volumen de poros que fue de  $0.36 \text{ cm}^3/\text{g}$ , mientras que la anchura promedio de microporos fue de  $1.27 \text{ nm}$ . Con respecto a las propiedades fisicoquímicas encontró que tiene una mayor cantidad de sitios básicos ( $0.436 \text{ m}_{eq}/\text{mol}$ ) que de sitios ácidos ( $0.089 \text{ m}_{eq}/\text{mol}$ ) y un  $\text{pH}_{PZC} = 9.43$ . Este valor de  $\text{pH}_{PZC}$  nos muestra densidad de carga superficial del F400 estará equilibrada a un  $\text{pH} = 9.43$ , será mayormente positiva a un  $\text{pH} < 9.43$  y negativa a un  $\text{pH} > 9.43$ .

**Tabla 4.3.** Propiedades texturales y fisicoquímicas del F400 [70].

Propiedades texturales				Propiedades fisicoquímicas		
$S_{BET}$ ( $\text{m}^2/\text{g}$ )	$W_0$ ( $\text{cm}^3/\text{g}$ )	$L_0$ ( $\text{nm}$ )	$V_{0.95}$ ( $\text{cm}^3/\text{g}$ )	Sitios ácidos totales ( $\text{m}_{eq}/\text{g}$ )	Sitios básicos totales ( $\text{m}_{eq}/\text{g}$ )	$\text{pH}_{PZC}$
756	0.317	1.27	0.36	0.089	0.486	9.43

$S_{BET}$  = área específica,  $W_0$  = volumen de microporos,  $L_0$  = anchura promedio de microporos,  $V_{0.95}$  = volumen total de poros a un valor de  $P/P_0$  de 0.95.

### **4.3. Identificación de interacciones adsorbato-adsorbente**

Se realizaron análisis de infrarrojo antes y después de la adsorción con el fin de identificar los grupos funcionales de la superficie del material y de esta manera dilucidar los posibles sitios activos para la adsorción de los compuestos. Para esta caracterización se empleó espectroscopia infrarroja con transformada de Fourier y reflectancia total atenuada (FTIR-ATR, por sus siglas en inglés), utilizando un equipo Spectrum Two (PerkinElmer, Waltham, Massachusetts, USA) a temperatura ambiente en el rango de 4000 a 450  $\text{cm}^{-1}$ .

### **4.4. Determinación de la concentración de acetaminofén y metronidazol en solución acuosa**

La concentración de acetaminofén y metronidazol en solución acuosa se determinó por medio de espectroscopia ultravioleta-visible (UV-vis), empleando un equipo marca Shimadzu modelo UV-1900 a una longitud de onda de 320 nm y 243 nm para el MNZ y el ACT, respectivamente. La curva de calibración se obtuvo a partir de soluciones patrón de MNZ y ACT en un rango de 3 a 20 mg/L, finalmente se aplicó la ley de Beer-Lambert para relacionar la absorbancia con la concentración.

Para la determinación de la concentración de las especies en la solución multicomponente se realizó por medio de espectroscopia ultravioleta-visible (UV-vis), pero esta vez obteniendo los espectros completos en un rango de longitudes de onda de 190-450 nm y leyendo las absorbancias a las longitudes de onda de 320 nm y 243 nm para el MNZ y el ACT, respectivamente. Las curvas de calibración se obtuvieron a partir de soluciones patrones de MNZ y ACT preparando soluciones combinadas en un rango de 3 a 25 mg/L, finalmente se

aplicó una modificación la ley de Beer-Lambert previamente utilizada por Pauletto y cols. [71] para relacionar la absorbancia con la concentración mostrada en las siguientes ecuaciones:

$$C_{ACT} = \frac{K_{C2}A_1 - K_{C1}A_2}{K_{M1}K_{C2} - K_{M2}K_{C1}} \quad (4.1)$$

$$C_{MNZ} = \frac{K_{M1}A_2 - K_{M2}A_1}{K_{M1}K_{C2} - K_{M2}K_{C1}} \quad (4.2)$$

Donde:

$C_{ACT}$  = Concentración del ACT en la solución, mg/L

$C_{MNZ}$  = Concentración del MNZ en la solución, mg/L

$A_1$  = Absorbancia a una longitud de onda de 243 nm

$A_2$  = Absorbancia a una longitud de onda de 320 nm

$K_{C1}$ ,  $K_{C2}$ ,  $K_{M1}$ ,  $K_{M2}$  = Promedio de las absorptividades, L/mg

#### **4.5. Obtención de los datos experimentales de equilibrio y velocidad de adsorción mono- y multicomponente**

Los datos experimentales de velocidad de adsorción fueron obtenidos en un esquema parecido al mostrado en la Figura 4.3. El sistema constó de un reactor de vidrio en donde se depositó el material adsorbente y la solución preparada, un motor de velocidad variable, un potenciómetro, un recirculador de agua y un baño termostático. Para obtener los datos, una masa de 0.5 g fue pesada y depositada en el reactor de vidrio, dentro del cual se encontraba una propela

propulsada por el motor a una velocidad constante de 200 rpm, luego se le agregó un volumen de 0.5 L de la solución del contaminante modelo preparada con una solución controladora de pH (pH = 7). Al momento que se vació por completo la solución se encendió el cronometro para iniciar la cinética de adsorción. El pH de la solución se mantuvo constante todo el proceso agregando gotas de soluciones valoradas de 0.01 y 0.1 N de NaOH y HCl en la medida que era necesario. Se tomaron alícuotas de 1 mL para monitorear la concentración en el tiempo hasta que alcanzase el equilibrio. El rango de concentraciones para los experimentos monocomponente utilizado fue de 200 mg/L a 1000 mg/L para el MNZ y de 200 mg/L a 700 mg/L para el ACT.

La cantidad adsorbida del contaminante modelo en función del tiempo se calculó mediante la siguiente ecuación:

$$q_t = \frac{(C_{A0} - C_{At})V}{m} \quad (4.3)$$

Donde:

$q_t$  = Capacidad de adsorción en el tiempo t, mg/g

$C_{A0}$  = Concentración inicial del soluto en la solución, mg/L

$C_{At}$  = Concentración del soluto en la solución a tiempo t, mg/L

$V$  = Volumen de la solución, L

$m$  = masa del adsorbente, g

Además, para cada experimento se calcularon los datos de equilibrio de adsorción tomando como referencia el ultimo valor de la concentración obtenido en el tiempo para cada

cinética de adsorción. La capacidad de adsorción en el equilibrio se calculó con la siguiente ecuación:

$$q_t = \frac{(C_{A0} - C_{Ae})V}{m} \quad (4.4)$$

Donde:

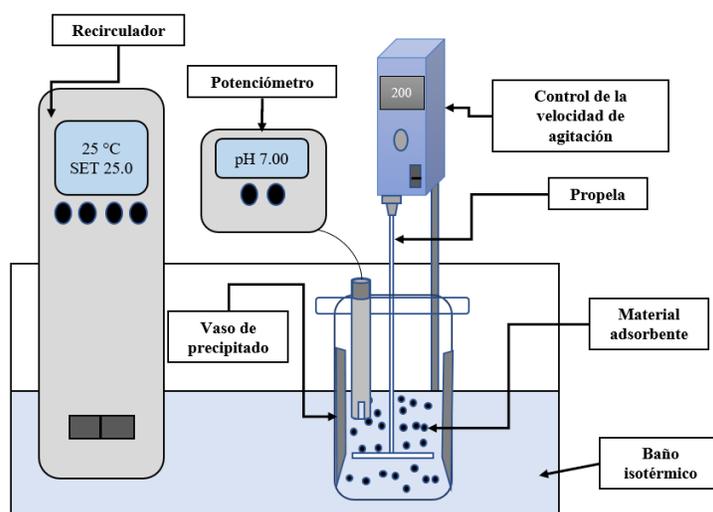
$q_e$  = Capacidad de adsorción en el equilibrio, mg/g

$C_{A0}$  = Concentración inicial del soluto en la solución, mg/L

$C_{Ae}$  = Concentración en el equilibrio del soluto en la solución, mg/L

$V$  = Volumen de la solución, L

$m$  = masa del adsorbente, g



**Figura 4.3.** Diagrama del sistema experimental utilizado

Para la obtención de los datos experimentales de velocidad y equilibrio de adsorción multicomponente se construyó una matriz de experimentos de 5×5, es decir, 5 combinaciones de concentraciones de MNZ y ACT. Para este caso, las concentraciones se trabajaron equimolar, así se puede comparar mejor los resultados. A cada una de las combinaciones de las concentraciones se le asignó un número del 11 al 35. La matriz de experimentos se muestra en la Tabla 4.4

**Tabla 4.4.** Matriz de experimentos multicomponente.

Matriz 5x5		ACT (mmol/L)				
		1.17	1.75	2.34	2.92	4.09
MNZ (mmol/L)	1.17	11	12	13	14	15
	1.75	16	17	18	19	20
	2.34	21	22	23	24	25
	2.92	26	27	28	29	30
	4.09	31	32	33	34	35

#### 4.6. Modelado del equilibrio de adsorción individual

Los datos de equilibrio de adsorción individual obtenidos se interpretaron con los modelos de isoterma de adsorción de Langmuir (Ecuación 1.1), Freundlich (Ecuación 1.2) y Prausnitz-Radke (Ecuación 1.3).

Los parámetros de ajuste de cada modelo de isoterma se obtuvieron empleando el software STATISTICA mediante un ajuste no lineal. Como función objetivo para la optimización se utilizó una función de mínimos cuadrados de las capacidades de adsorción

expresada en la Ecuación 1.5, utilizando el método de optimización de Rosenbrock y Cuasi-Newton. Para identificar cual isoterma de adsorción representó mejor los datos experimentales se hallaron los porcentajes de desviación utilizando la Ecuación 1.6.

$$F.O. = \sum (q_{\text{exp}} - q_{\text{adj}})^2 \quad (5.5)$$

$$\%D = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left| \frac{q_{\text{exp}} - q_{\text{adj}}}{q_{\text{exp}}} \right| \times 100\% \quad (5.6)$$

Donde:

$q_{\text{exp}}$  = Capacidad de adsorción experimental, mmol/g

$q_{\text{adj}}$  = Capacidad de adsorción ajustada, mmol/g

$N$  = Número de datos experimentales

#### 4.7. Modelado del equilibrio de adsorción multicomponente

Los datos de equilibrio de adsorción binarios obtenidos se interpretaron con los modelos de isoterma de adsorción de Langmuir Multicomponente Modificado con un factor de interacción  $\eta_i$  (Ecuación 1.4), Langmuir Multicomponente Extendido (Ecuación 1.5) y Redlich-Peterson Multicomponente Modificado con un factor de interacción  $\eta_i$  (Ecuación 1.6).

Los parámetros de ajuste de cada modelo de isoterma se obtuvieron empleando el software *Micromath Scientist*, por medio del método de optimización Levenberg-Marquardt, que minimiza la función de mínimos cuadrados expresada en la Ecuación 4.7. Para identificar

cual isoterma de adsorción representó mejor los datos experimentales se hallaron los porcentajes de desviación utilizando la Ecuación 4.8.

$$F.O.= \sum_{i=1}^2 \sum_{j=1}^N (q_{i,j \text{ exp}} - q_{i,j \text{ adj}})^2 \quad (4.7)$$

$$\%D = \left( \frac{1}{2} \sum_{i=1}^2 \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \left| \frac{q_{i,j \text{ exp}} - q_{i,j \text{ adj}}}{q_{i,j \text{ exp}}} \right| \right) \times 100\% \quad (4.8)$$

Donde:

$q_{i,j \text{ exp}}$  = Cantidad del componente  $i$  adsorbido correspondiente al dato  $j$  experimental, mmol/g

$q_{i,j \text{ adj}}$  = Cantidad del componente  $i$  correspondiente al dato  $j$  ajustado, mmol/g

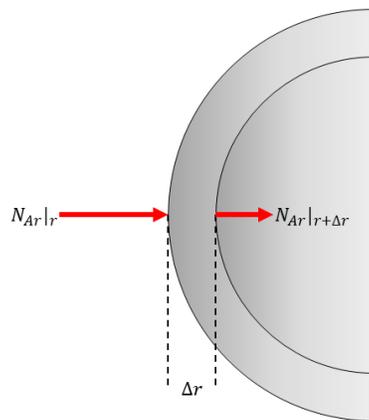
$N$  = Número de datos experimentales

#### 4.8. Modelado matemático de la velocidad de adsorción individual

Como se explicó brevemente en secciones anteriores, el modelo que se utilizó para interpretar los datos de cinética de adsorción fue el modelo difusional general. Este modelo explica el transporte de masa del soluto desde el seno de la solución hasta los sitios activos de adsorción en los poros y para llevar a cabo esto debe vencer una serie de resistencias.

El modelo de difusión general (PVSDM, por sus siglas en inglés) es obtenido a partir del balance de masa diferencial en una partícula esférica, en donde el flujo de masa es únicamente en dirección radial. Un esquema del elemento diferencial utilizado se muestra en la Figura 4.4. Durante el proceso de adsorción, el soluto migra desde el seno de la solución a la capa límite

externa, subsecuentemente migra de dicha capa a la superficie externa de la partícula y de allí a los poros del material (en donde se toma en cuenta la difusión intraparticular, a cuál abarca difusión superficial y difusión en el volumen del poro) hasta finalmente llegar a los sitios activos de adsorción. De esta forma, las curvas de decaimiento de la concentración de MNZ y ACT sobre F400 fueron interpretadas con el modelo de difusión general que ha sido estudiado ampliamente para este tipo de sistemas.



**Figura 4.4.** Elemento intraparticular esférico diferencial seleccionado.

Se parte de la premisa que no hay reacción, generación o consumo del soluto y que existe acumulación en el volumen de los poros y en la superficie, dando como resultado la siguiente ecuación:

$$4\pi r^2 \Delta r \varepsilon_p \frac{\partial C_{Ar}}{\partial t} + 4\pi r^2 \Delta r \rho_p \frac{\partial q}{\partial t} = 4\pi r^2 \Delta r N_{Ar}|_r - 4\pi r^2 \Delta r N_{Ar}|_{r+\Delta r} \quad (4.9)$$

Dividiendo toda la ecuación entre  $4\pi \Delta r$  y tomando el límite cuando  $\Delta r \rightarrow 0$  obtenemos:

$$\varepsilon_p \frac{\partial C_{Ar}}{\partial t} + \rho_p \frac{\partial q}{\partial t} = -\frac{1}{r^2} \frac{\partial (r^2 N_{Ar})}{\partial r} \quad (4.10)$$

Donde:

t = Tiempo

$C_{Ar}$  = Concentración del adsorbato dentro de la partícula del adsorbente

$\epsilon_p$  = Fracción hueca

$\rho_p$  = Densidad de la partícula de adsorbente

q = Masa del adsorbato por unidad de masa de adsorbente

r = Distancia radial

$N_{Ar}$  = Flúx másico radial

Ahora bien, como se consideran dos tipos de transporte intraparticular (difusión en el volumen de poro y difusión superficial), el flujo de masa total puede ser expresado de la siguiente forma:

$$N_{Ar} = -D_{ep} \frac{\partial C_{Ar}}{\partial r} - D_s \rho_p \frac{\partial q}{\partial r} \quad (4.11)$$

Donde:

$D_{ep}$  = Coeficiente de difusión efectivo

$D_s$  = Coeficiente de difusión superficial

Dicha ecuación es reemplazada en el balance total, obteniendo:

$$\epsilon_p \frac{\partial C_{Ar}}{\partial t} + \rho_p \frac{\partial q}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r^2 \left( D_{ep} \frac{\partial C_{Ar}}{\partial r} + D_s \rho_p \frac{\partial q}{\partial r} \right) \right] \quad (4.12)$$

En este sistema es necesario establecer dos condiciones de frontera y una condición inicial. La condición inicial está expresada como:

$$C_{Ar} = 0, \quad t = 0, \quad 0 \leq r \leq R_p \quad (4.13)$$

Esta condición establece que para el tiempo cero no hay presencia de soluto adsorbido sobre el adsorbente, para toda longitud de trabajo.

**Condición de frontera N° 1:**

$$\left. \frac{\partial C_{Ar}}{\partial r} \right|_{r=0} = 0 \quad (4.14)$$

Esta condición de frontera está asociada a la simetría de la partícula, ya que se toma como referencia el centro de la partícula y en el cual no hay intercambio de masa.

**Condición de frontera N° 2:**

$$D_{ep} \left. \frac{\partial C_{Ar}}{\partial r} \right|_{r=R_p} + D_s \rho \left. \frac{\partial q}{\partial r} \right|_{r=R_p} = k_L (C_A - C_{Ar}|_{r=R_p}) \quad (4.15)$$

Esta condición de frontera establece la continuidad de los fluxes en la superficie externa de la partícula, es decir, donde sucede el acoplamiento.

El balance total está acoplado al balance de masa del soluto para la fase líquida, el cual considera que la variación de la concentración se debe al transporte externo de masa y que debido a una agitación apropiada se desprecian los balances espaciales de concentración. Este paso es necesario para relacionar la concentración del soluto en la solución y la concentración del soluto en el adsorbente, dando como resultado la siguiente ecuación:

$$V \frac{dC_A}{dt} = -mS k_L (C_A - C_{Ar}|_{r=R_p}) \quad (4.16)$$

$$t=0, C_A = C_{A0} \quad (4.17)$$

Donde:

$k_L$  = Coeficiente de transferencia de masa externa

$C_A$  = Concentración del adsorbato en la solución

$C_{Ar}$  = Concentración del adsorbato dentro de la partícula del adsorbente

$R_p$  = Radio de la partícula de adsorbente

$m$  = Masa del adsorbente

$S$  = Área externa del adsorbente por unidad de masa

Como se considera que la adsorción sobre los sitios activos se da de manera instantánea, es posible suponer un equilibrio entre la concentración del soluto en los poros y la cantidad adsorbida sobre la superficie de estos. Este equilibrio se puede representar con una relación matemática entre  $C_{Ar}$  y  $q$ , conocida como isoterma de adsorción:

$$q=f(C_{Ar}) \tag{4.18}$$

La isoterma de adsorción que se incluya en el modelado difusional será aquella que represente mejor los datos de equilibrio de adsorción experimentales.

## REFERENCIAS

- [1] U. Ortiz-Ramos, R. Leyva-Ramos, E. Mendoza-Mendoza, y A. Aragón-Piña, “Removal of tetracycline from aqueous solutions by adsorption on raw Ca-bentonite. Effect of operating conditions and adsorption mechanism”, *Chemical Engineering Journal*, vol. 432, p. 134428, mar. 2022, doi: 10.1016/J.CEJ.2021.134428.
- [2] J. Rivera-Utrilla, M. Sánchez-Polo, M. Á. Ferro-García, G. Prados-Joya, y R. Ocampo-Pérez, “Pharmaceuticals as emerging contaminants and their removal from water. A review”, *Chemosphere*, vol. 93, núm. 7, pp. 1268–1287, oct. 2013, doi: 10.1016/J.CHEMOSPHERE.2013.07.059.
- [3] Y. Li, H. Shang, Y. Cao, C. Yang, Y. Feng, y Y. Yu, “Quantification of adsorption mechanisms distribution of sulfamethoxazole onto biochar by competition relationship in a wide pH range”, *J Environ Chem Eng*, vol. 10, núm. 6, p. 108755, dic. 2022, doi: 10.1016/J.JECE.2022.108755.
- [4] E. C. Silva, V. R. Soares, y A. R. Fajardo, “Removal of pharmaceuticals from aqueous medium by alginate/polypyrrole/ZnFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> beads via magnetic field enhanced adsorption”, *Chemosphere*, vol. 316, p. 137734, mar. 2023, doi: 10.1016/J.CHEMOSPHERE.2022.137734.
- [5] Y. Sun, J. Bian, y Q. Zhu, “Sulfamethoxazole removal of adsorption by carbon – Doped boron nitride in water”, *J Mol Liq*, vol. 349, p. 118216, mar. 2022, doi: 10.1016/J.MOLLIQ.2021.118216.

- [6] P. Sarker *et al.*, “Evaluation of the adsorption of sulfamethoxazole (SMX) within aqueous influents onto customized ordered mesoporous carbon (OMC) adsorbents: Performance and elucidation of key adsorption mechanisms”, *Chemical Engineering Journal*, vol. 454, p. 140082, feb. 2023, doi: 10.1016/J.CEJ.2022.140082.
- [7] A. Aguilar-Aguilar, L. D. de León-Martínez, A. Forgiionny, N. Y. Acelas Soto, S. R. Mendoza, y A. I. Zárate-Guzmán, “A systematic review on the current situation of emerging pollutants in Mexico: A perspective on policies, regulation, detection, and elimination in water and wastewater”, *Science of The Total Environment*, vol. 905, p. 167426, dic. 2023, doi: 10.1016/J.SCITOTENV.2023.167426.
- [8] S. Singh, V. C. Srivastava, y I. D. Mall, “Fixed-bed study for adsorptive removal of furfural by activated carbon”, *Colloids Surf A Physicochem Eng Asp*, vol. 332, núm. 1, pp. 50–56, ene. 2009, doi: 10.1016/J.COLSURFA.2008.08.025.
- [9] V. Díaz-Blancas, C. G. Aguilar-Madera, J. V. Flores-Cano, R. Leyva-Ramos, E. Padilla-Ortega, y R. Ocampo-Pérez, “Evaluation of mass transfer mechanisms involved during the adsorption of metronidazole on granular activated carbon in fixed bed column”, *Journal of Water Process Engineering*, vol. 36, p. 101303, ago. 2020, doi: 10.1016/J.JWPE.2020.101303.
- [10] D. S. P. Franco, J. L. S. Fagundes, J. Georgin, N. P. G. Salau, y G. L. Dotto, “A mass transfer study considering intraparticle diffusion and axial dispersion for fixed-bed adsorption of crystal violet on pecan pericarp (*Carya illinoensis*)”, *Chemical Engineering Journal*, vol. 397, p. 125423, oct. 2020, doi: 10.1016/J.CEJ.2020.125423.

- [11] S. Ahmadi, A. Rezae, S. Ghosh, A. Malloum, y A. Banach, “A review on bioelectrochemical systems for emerging pollutants remediation: A computational approaches”, *J Environ Chem Eng*, vol. 11, núm. 3, p. 110021, jun. 2023, doi: 10.1016/J.JECE.2023.110021.
- [12] Á. Martínez-Orgániz, P. M. Crespo-Barrera, J. E. Becerril-Bravo, y A. E. Navarro-Frómeta, “Pollutants of emerging concern in tourist beaches of Guerrero, Mexico: A first approach to sources”, *Mar Pollut Bull*, vol. 192, p. 114989, jul. 2023, doi: 10.1016/J.MARPOLBUL.2023.114989.
- [13] “Emerging Pollutants in Water and Wastewater”. Consultado: el 18 de noviembre de 2022. [En línea]. Disponible en: <https://en.unesco.org/emergingpollutantsinwaterandwastewater>
- [14] “Emerging substances | NORMAN”. Consultado: el 18 de noviembre de 2022. [En línea]. Disponible en: <https://www.norman-network.net/?q=node/19>
- [15] S. Ahmadi, A. Rezae, S. Ghosh, A. Malloum, y A. Banach, “A review on bioelectrochemical systems for emerging pollutants remediation: A computational approaches”, *J Environ Chem Eng*, vol. 11, núm. 3, p. 110021, jun. 2023, doi: 10.1016/J.JECE.2023.110021.
- [16] V. Geissen *et al.*, “Emerging pollutants in the environment: A challenge for water resource management”, *International Soil and Water Conservation Research*, vol. 3, núm. 1, pp. 57–65, mar. 2015, doi: 10.1016/J.ISWCR.2015.03.002.

- [17] M. Gavrilescu, K. Demnerová, J. Aamand, S. Agathos, y F. Fava, “Emerging pollutants in the environment: present and future challenges in biomonitoring, ecological risks and bioremediation”, *N Biotechnol*, vol. 32, núm. 1, pp. 147–156, ene. 2015, doi: 10.1016/J.NBT.2014.01.001.
- [18] R. Kumar Mishra, S. Samyukthalakshmi Mentha, Y. Misra, y N. Dwivedi, “Emerging pollutants of severe environmental concern in water and wastewater: A comprehensive review on current developments and future research”, *Water-Energy Nexus*, ago. 2023, doi: 10.1016/J.WEN.2023.08.002.
- [19] C. Peña-Guzmán *et al.*, “Emerging pollutants in the urban water cycle in Latin America: A review of the current literature”, *J Environ Manage*, vol. 237, pp. 408–423, may 2019, doi: 10.1016/J.JENVMAN.2019.02.100.
- [20] R. B. González-González, E. A. Flores-Contreras, R. Parra-Saldívar, y H. M. N. Iqbal, “Bio-removal of emerging pollutants by advanced bioremediation techniques”, *Environ Res*, vol. 214, p. 113936, nov. 2022, doi: 10.1016/J.ENVRES.2022.113936.
- [21] N. Ranjan, P. K. Singh, y N. S. Maurya, “Pharmaceuticals in water as emerging pollutants for river health: A critical review under Indian conditions”, *Ecotoxicol Environ Saf*, vol. 247, p. 114220, dic. 2022, doi: 10.1016/J.ECOENV.2022.114220.
- [22] N. Taoufik, W. Boumya, F. Z. Janani, A. Elhalil, F. Z. Mahjoubi, y N. Barka, “Removal of emerging pharmaceutical pollutants: A systematic mapping study review”, *J Environ Chem Eng*, vol. 8, núm. 5, p. 104251, oct. 2020, doi: 10.1016/J.JECE.2020.104251.

- [23] L. Sellaoui *et al.*, “Adsorption of pharmaceutical pollutants on activated carbon: Physicochemical assessment of the adsorption mechanism via advanced modelling”, *J Mol Liq*, vol. 389, p. 122929, nov. 2023, doi: 10.1016/J.MOLLIQ.2023.122929.
- [24] D. T. Bankole, A. P. Oluyori, y A. A. Inyinbor, “The removal of pharmaceutical pollutants from aqueous solution by Agro-waste”, *Arabian Journal of Chemistry*, vol. 16, núm. 5, p. 104699, may 2023, doi: 10.1016/J.ARABJC.2023.104699.
- [25] T. M. Uddin *et al.*, “Antibiotic resistance in microbes: History, mechanisms, therapeutic strategies and future prospects”, *J Infect Public Health*, vol. 14, núm. 12, pp. 1750–1766, dic. 2021, doi: 10.1016/J.JIPH.2021.10.020.
- [26] “La resistencia antimicrobiana pone en riesgo la salud mundial - OPS/OMS | Organización Panamericana de la Salud”. Consultado: el 3 de septiembre de 2023. [En línea]. Disponible en: <https://www.paho.org/es/noticias/3-3-2021-resistencia-antimicrobiana-pone-riesgo-salud-mundial>
- [27] D. Vicente y E. Pérez-Trallero, “Tetraciclinas, sulfamidas y metronidazol”, *Enferm Infecc Microbiol Clin*, vol. 28, núm. 2, pp. 122–130, feb. 2010, doi: 10.1016/J.EIMC.2009.10.002.
- [28] “Metronidazole: Uses, Interactions, Mechanism of Action | DrugBank Online”. Consultado: el 18 de noviembre de 2022. [En línea]. Disponible en: <https://go.drugbank.com/drugs/DB00916>
- [29] “Metronidazol: MedlinePlus medicinas”. Consultado: el 18 de noviembre de 2022. [En línea]. Disponible en: <https://medlineplus.gov/spanish/druginfo/meds/a689011-es.html>

- [30] “Metronidazole | C<sub>6</sub>H<sub>9</sub>N<sub>3</sub>O<sub>3</sub> - PubChem”. Consultado: el 18 de noviembre de 2022. [En línea]. Disponible en: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/4173>
- [31] N. Aarab, A. Hsini, A. Essekre, M. Laabd, R. Lakhmiri, y A. Albourine, “Removal of an emerging pharmaceutical pollutant (metronidazole) using PPY-PANi copolymer: Kinetics, equilibrium and DFT identification of adsorption mechanism”, *Groundw Sustain Dev*, vol. 11, p. 100416, oct. 2020, doi: 10.1016/J.GSD.2020.100416.
- [32] M.-J. Divins, “Analgésicos”, *Farmacia Profesional*, vol. 29, núm. 6, pp. 17–21, nov. 2015, Consultado: el 4 de septiembre de 2023. [En línea]. Disponible en: <https://www.elsevier.es/es-revista-farmacia-profesional-3-articulo-analgésicos-X0213932415442083>
- [33] F. Cortés Gabaudan, “Diccionario médico-biológico, histórico y etimológico”, *Universidad de Salamanca*, 2004, Consultado: el 18 de septiembre de 2023. [En línea]. Disponible en: <https://dicciomed.usal.es/palabra/analgesia>
- [34] D. Angelis y L. Chalak, “Acetaminophen and the developing brain: A critical review of the evidence”, *Early Hum Dev*, vol. 159, p. 105411, ago. 2021, doi: 10.1016/J.EARLHUMDEV.2021.105411.
- [35] R. Hilal-Dandan y L. L. Brunton, “Farmacoterapia de la inflamación, fiebre, dolor y gota”, en *Goodman & Gilman. Manual de farmacología y terapéutica*, vol. 2e, New York, NY: McGraw-Hill Education, 2015. [En línea]. Disponible en: [accessmedicina.mhmedical.com/content.aspx?aid=1119647200](https://accessmedicina.mhmedical.com/content.aspx?aid=1119647200)

- [36] “Acetaminophen | C<sub>8</sub>H<sub>9</sub>NO<sub>2</sub> | CID 1983 - PubChem”. Consultado: el 19 de septiembre de 2023. [En línea]. Disponible en: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/Acetaminophen>
- [37] R. R. Carranza, “Acetaminofeno: Analgésicos”, en *Vademécum Académico de Medicamentos*, New York, NY: McGraw-Hill Education, 2015. [En línea]. Disponible en: [accessmedicina.mhmedical.com/content.aspx?aid=1113051372](https://accessmedicina.mhmedical.com/content.aspx?aid=1113051372)
- [38] F. F. S. Daly, J. S. Fountain, L. Murray, A. Graudins, y N. A. Buckley, “Guidelines for the management of paracetamol poisoning in Australia and New Zealand — explanation and elaboration”, *Medical Journal of Australia*, vol. 188, núm. 5, pp. 296–302, mar. 2008, doi: 10.5694/J.1326-5377.2008.TB01625.X).
- [39] S. Mokhtaryan *et al.*, “New activated carbon derived from Gundelia tournefortii seeds for effective removal of acetaminophen from aqueous solutions: Adsorption performance”, *Arabian Journal of Chemistry*, vol. 16, núm. 11, p. 105253, nov. 2023, doi: 10.1016/J.ARABJC.2023.105253.
- [40] J. Rivera-Utrilla, M. Sánchez-Polo, M. Á. Ferro-García, G. Prados-Joya, y R. Ocampo-Pérez, “Pharmaceuticals as emerging contaminants and their removal from water. A review”, *Chemosphere*, vol. 93, núm. 7, pp. 1268–1287, oct. 2013, doi: 10.1016/J.CHEMOSPHERE.2013.07.059.
- [41] J. V. Flores-Cano, M. Sánchez-Polo, J. Messoud, I. Velo-Gala, R. Ocampo-Pérez, y J. Rivera-Utrilla, “Overall adsorption rate of metronidazole, dimetridazole and diatrizoate

- on activated carbons prepared from coffee residues and almond shells”, *J Environ Manage*, vol. 169, pp. 116–125, mar. 2016, doi: 10.1016/J.JENVMAN.2015.12.001.
- [42] Q. Hu, R. Lan, L. He, H. Liu, y X. Pei, “A critical review of adsorption isotherm models for aqueous contaminants: Curve characteristics, site energy distribution and common controversies”, *J Environ Manage*, vol. 329, p. 117104, mar. 2023, doi: 10.1016/J.JENVMAN.2022.117104.
- [43] G. K. Rajahmundry, C. Garlapati, P. S. Kumar, R. S. Alwi, y D. V. N. Vo, “Statistical analysis of adsorption isotherm models and its appropriate selection”, *Chemosphere*, vol. 276, p. 130176, 2021, doi: 10.1016/j.chemosphere.2021.130176.
- [44] J. F. Kwiatkowski, *Activated Carbon: Classifications, Properties and Applications*, vol. 59. NOVA, 2012.
- [45] M. Sultana, M. H. Rownok, M. Sabrin, M. H. Rahaman, y S. M. N. Alam, “A review on experimental chemically modified activated carbon to enhance dye and heavy metals adsorption”, *Clean Eng Technol*, vol. 6, p. 100382, feb. 2022, doi: 10.1016/j.clet.2021.100382.
- [46] C. Ferhan y A. Ozgur, *Activated Carbon for Water and Wastewater Treatment*, núm. July. 2011.
- [47] M.-M. Titirici, *Sustainable Carbon Materials from Hydrothermal Processes*. Wiley, 2013. doi: 10.1002/9781118622179.

- [48] M. A. Al-Ghouti y D. A. Da'ana, "Guidelines for the use and interpretation of adsorption isotherm models: A review", *J Hazard Mater*, vol. 393, núm. November 2019, p. 122383, 2020, doi: 10.1016/j.jhazmat.2020.122383.
- [49] J. Wang y X. Guo, "Adsorption isotherm models: Classification, physical meaning, application and solving method", *Chemosphere*, vol. 258, 2020, doi: 10.1016/j.chemosphere.2020.127279.
- [50] M. A. Al-Ghouti y D. A. Da'ana, "Guidelines for the use and interpretation of adsorption isotherm models: A review", *J Hazard Mater*, vol. 393, núm. November 2019, p. 122383, 2020, doi: 10.1016/j.jhazmat.2020.122383.
- [51] J. Wang y X. Guo, "Adsorption isotherm models: Classification, physical meaning, application and solving method", *Chemosphere*, vol. 258, 2020, doi: 10.1016/j.chemosphere.2020.127279.
- [52] C. J. Radke, J. M. Prausnitz, y C. J. Radke, "Adsorption of Organic Solutes from Dilute Aqueous Solution on Activated Carbon", *Industrial and Engineering Chemistry Fundamentals*, vol. 11, núm. 4, pp. 445–451, nov. 1972, doi: 10.1021/I160044A003/ASSET/I160044A003.FP.PNG\_V03.
- [53] H. N. Tran, J. C. Bollinger, E. C. Lima, y R. S. Juang, "How to avoid mistakes in treating adsorption isotherm data (liquid and solid phases): Some comments about correctly using Radke-Prausnitz nonlinear model and Langmuir equilibrium constant", *J Environ Manage*, vol. 325, p. 116475, ene. 2023, doi: 10.1016/J.JENVMAN.2022.116475.

- [54] D. H. Carrales-Alvarado, R. Ocampo-Pérez, R. Leyva-Ramos, y J. Rivera-Utrilla, “Removal of the antibiotic metronidazole by adsorption on various carbon materials from aqueous phase”, *J Colloid Interface Sci*, vol. 436, pp. 276–285, dic. 2014, doi: 10.1016/J.JCIS.2014.08.023.
- [55] D. T. Nguyen *et al.*, “Adsorption process and mechanism of acetaminophen onto commercial activated carbon”, *J Environ Chem Eng*, vol. 8, núm. 6, p. 104408, dic. 2020, doi: 10.1016/J.JECE.2020.104408.
- [56] J. I. Martínez-Costa, R. Leyva-Ramos, E. Padilla-Ortega, A. Aragón-Piña, y D. H. Carrales-Alvarado, “Antagonistic, synergistic and non-interactive competitive sorption of sulfamethoxazole-trimethoprim and sulfamethoxazole-cadmium (ii) on a hybrid clay nanosorbent”, *Science of The Total Environment*, vol. 640–641, pp. 1241–1250, nov. 2018, doi: 10.1016/J.SCITOTENV.2018.05.399.
- [57] V. C. Srivastava, I. D. Mall, y I. M. Mishra, “Equilibrium modelling of single and binary adsorption of cadmium and nickel onto bagasse fly ash”, *Chemical Engineering Journal*, vol. 117, núm. 1, pp. 79–91, mar. 2006, doi: 10.1016/J.CEJ.2005.11.021.
- [58] R. T. Yang, *Gas Separation by Adsorption Processes*. Butterworth, Boston., 1987.
- [59] V. C. Srivastava, I. D. Mall, y I. M. Mishra, “Modelling Individual and Competitive Adsorption of Cadmium(II) and Zinc(II) Metal Ions from Aqueous Solution onto Bagasse Fly Ash”, *Sep Sci Technol*, vol. 41, núm. 12, pp. 2685–2710, sep. 2006, doi: 10.1080/01496390600725687.

- [60] D. H. Carrales-Alvarado, R. Leyva-Ramos, J. I. Martínez-Costa, y R. Ocampo-Pérez, “Competitive Adsorption of Dimetridazole and Metronidazole Antibiotics on Carbon Materials from Aqueous Solution”, *Water Air Soil Pollut*, vol. 229, núm. 4, pp. 1–15, abr. 2018, doi: 10.1007/S11270-018-3730-4/FIGURES/8.
- [61] Worch y Eckhard, *Adsorption Technology in Water Treatment: Fundamentals, Processes, and Modeling*. Berlin, Alemania: De Gruyter, 2012.
- [62] R. Leyva-Ramos y C. J. Geankoplis, “Model simulation and analysis of surface diffusion of liquids in porous solids”, *Chem Eng Sci*, vol. 40, núm. 5, pp. 799–807, ene. 1985, doi: 10.1016/0009-2509(85)85032-6.
- [63] R. Ocampo-Perez, R. Leyva-Ramos, P. Alonso-Davila, J. Rivera-Utrilla, y M. Sanchez-Polo, “Modeling adsorption rate of pyridine onto granular activated carbon”, *Chemical Engineering Journal*, vol. 165, núm. 1, pp. 133–141, nov. 2010, doi: 10.1016/J.CEJ.2010.09.002.
- [64] J. V. Flores-Cano, M. Sánchez-Polo, J. Messoud, I. Velo-Gala, R. Ocampo-Pérez, y J. Rivera-Utrilla, “Overall adsorption rate of metronidazole, dimetridazole and diatrizoate on activated carbons prepared from coffee residues and almond shells”, *J Environ Manage*, vol. 169, pp. 116–125, mar. 2016, doi: 10.1016/J.JENVMAN.2015.12.001.
- [65] R. Ocampo-Perez, C. G. Aguilar-Madera, y V. Díaz-Blancas, “3D modeling of overall adsorption rate of acetaminophen on activated carbon pellets”, *Chemical Engineering Journal*, vol. 321, pp. 510–520, ago. 2017, doi: 10.1016/J.CEJ.2017.03.137.

- [66] D. S. P. Franco *et al.*, “Pore volume and surface diffusion model (PVSDM) applied for single and binary dye adsorption systems”, *Chemical Engineering Research and Design*, vol. 182, pp. 645–658, jun. 2022, doi: 10.1016/J.CHERD.2022.04.037.
- [67] V. Díaz-Blancas, C. G. Aguilar-Madera, J. V. Flores-Cano, R. Leyva-Ramos, E. Padilla-Ortega, y R. Ocampo-Pérez, “Evaluation of mass transfer mechanisms involved during the adsorption of metronidazole on granular activated carbon in fixed bed column”, *Journal of Water Process Engineering*, vol. 36, p. 101303, ago. 2020, doi: 10.1016/J.JWPE.2020.101303.
- [68] J. C. Serna-Carrizales *et al.*, “Optimization of Binary Adsorption of Metronidazole and Sulfamethoxazole in Aqueous Solution Supported with DFT Calculations”, *Processes*, vol. 11, núm. 4, abr. 2023, doi: 10.3390/pr11041009.
- [69] “FILTRASORB | Calgon Carbon Corporation”. Consultado: el 18 de noviembre de 2022. [En línea]. Disponible en: <https://www.calgoncarbon.com/products/filtrisorb/>
- [70] J. C. Serna-Carrizales, V. H. Collins-Martínez, E. Flórez, C. F. A. Gomez-Duran, G. Palestino, y R. Ocampo-Pérez, “Adsorption of sulfamethoxazole, sulfadiazine and sulfametazine in single and ternary systems on activated carbon. Experimental and DFT computations”, *J Mol Liq*, vol. 324, p. 114740, feb. 2021, doi: 10.1016/J.MOLLIQ.2020.114740.
- [71] P. S. Pauletto, S. F. Lütke, G. L. Dotto, y N. P. G. Salau, “Exploring the simultaneous mass transport of nimesulide and paracetamol adsorption on activated carbon: A PVSDM

approach”, *Sep Purif Technol*, vol. 329, p. 125148, ene. 2024, doi:  
10.1016/J.SEPPUR.2023.125148.