

Remoción de paracetamol con carbón activado

Removal of paracetamol using activated carbon

Presentación: xx/10/2024

Andres Díaz Compañy

UTN-FRBB (SICAT), CIC Bs.As.

andresdc5@hotmail.com

Gabriel Roman

UTN-FRBB (SICAT), CONICET

gabrieleduardoroman332@gmail.com

Danila Ruiz

UNLP (CEDECOR)

ruiz@quimica.unlp.edu.ar

Sandra Simonetti

UTN-FRBB (SICAT), CONICET

ssimonetti@frbb.utn.edu.ar

Resumen

La presencia de residuos farmacéuticos en el medio acuático es un problema conocido en todo el mundo. El paracetamol se usa ampliamente como analgésico y antipirético. Su alto consumo implica un vertido continuo en ambientes acuosos a través de aguas residuales industriales y domésticas que requiere estrategias de mitigación y remediación. El objetivo del presente estudio es analizar la eliminación del paracetamol de soluciones acuosas mediante la técnica de adsorción. Para ello se utilizan dos adsorbentes comerciales con diferentes propiedades texturales: los carbonos activados CAT y CARBOPAL. Se llevan a cabo una serie de experimentos de adsorción por lotes a diferentes valores de pH (3.0, 7.0 y 10.5) y fuerza iónica (0.01, 0.5 y 1 M) para investigar los efectos en la eliminación del paracetamol de la solución acuosa. Además, se investiga el mecanismo de adsorción utilizando cálculos computacionales basados en la Teoría del Funcional de la Densidad. Los estudios muestran que las capacidades de adsorción de CAT y CARBOPAL son adecuadas para la remoción de paracetamol en agua.

Palabras clave: Adsorción, Paracetamol, Carbón activado, DFT.

Abstract

The presence of pharmaceutical residues in the aquatic environment is a known problem worldwide. Paracetamol is widely used as an analgesic and antipyretic. Its high consumption implies a continuous discharge into aqueous environments through industrial and domestic wastewaters that requires mitigation and remediation strategies. The aim of the present study is to analyze the removal of paracetamol from aqueous solutions by the adsorption technique. For this purpose, two commercial adsorbents with different textural properties are used: CAT and CARBOPAL activated carbons. A series of batch adsorption experiments are carried out at different pH values (3.0, 7.0 and 10.5) and ionic strength (0.01, 0.5 and 1 M) to investigate the effects on the removal of paracetamol from aqueous solution. In addition, the adsorption mechanism is investigated using computational calculations based on Density Functional Theory. Studies show that the adsorption capacities of CAT and CARBOPAL are suitable for the removal of paracetamol in water.

Keywords: Adsorption, Paracetamol, Activated carbon, DFT.

Introducción

En los últimos años, el desarrollo de métodos de análisis nuevos y más sensibles ha alertado sobre la presencia de residuos de medicamentos, productos farmacéuticos, veterinaria, cuidado personal, aditivos alimentarios, pesticidas y otros contaminantes en el agua. Estos contaminantes emergentes llegan al medio ambiente a través de aguas residuales domésticas e industriales, residuos de plantas de tratamiento, efluentes hospitalarios, etc. La eliminación de estos contaminantes se ha convertido en una de las mayores preocupaciones ambientales por el impacto que tienen en la salud humana y los efectos nocivos que generan en la naturaleza (Lapworth et. al., 2012). Los contaminantes emergentes generalmente no son biodegradables y, a menudo, no se eliminan mediante los tratamientos de aguas residuales convencionales basados en procesos biológicos, físicos y químicos. Cuando los procesos de depuración no logran eliminarlos, llegan a lagos, ríos y, en ocasiones, redes de agua potable. El paracetamol (N-(4-hidroxifenil) acetamida), también conocido como acetaminofén, es uno de los analgésicos y antipiréticos más utilizados en todo el mundo. Debido a su alta estabilidad, solubilidad e hidrofilia se ha detectado en aguas superficiales, aguas residuales y agua potable en todo el mundo (Birch et.al., 2015). Es por ello fundamental desarrollar procesos selectivos que sean efectivos cuando hay pequeñas cantidades de contaminante. La adsorción es una de las técnicas más eficientes, prometedoras y ampliamente utilizadas en los procesos de tratamiento de aguas residuales. Algunas de sus ventajas son el bajo costo, la simpleza en la operación e implementación, la aplicabilidad en concentraciones muy bajas, la posibilidad de regeneración y reutilización, y la posibilidad de utilizar materiales adsorbentes de diferentes orígenes. Se pueden cambiar varias condiciones como la fuerza iónica, el pH y la temperatura para que este proceso sea lo más eficiente posible (Saleh y Al-Absi, 2017; Tuzen et.al, 2018).

El objetivo de este trabajo es determinar experimentalmente la influencia de la fuerza iónica, el pH, y la composición química de la superficie del adsorbente en la adsorción de paracetamol a partir de una solución acuosa utilizando dos tipos de carbón activado con diferentes propiedades fisicoquímicas. Además, estudiamos mediante cálculos DFT, las interacciones que ejerce el tipo estructural aromático en el proceso de adsorción, mediante el análisis de propiedades electrónicas como la densidad de estados y la densidad de carga.

Metodología experimental y computacional

El paracetamol fue suministrado por Sigma-Aldrich con un grado analítico de pureza superior al 99%.

Se utilizaron los carbonos activados Hydrogen Sulfide CAT-Ox 4 mm pellet Activated Carbon (UMI 2000) y CARBOPAL MB 4S (Donau), en lo sucesivo denominados CAT y CARBOPAL, respectivamente. Los parámetros de la estructura de la superficie se calcularon a partir de las isotermas de adsorción/desorción de N₂ a -195.8 °C, realizadas en un equipo volumétrico automatizado (ASAP 2020 de Micromeritics). Los grupos básicos se cuantificaron mediante titulación de Boehm, mientras que el pH de la carga de punto cero (pHpzc) se determinó mediante titulación de masa (Delgado et.al., 2019). Se investigó el efecto del pH de la solución sobre la adsorción de paracetamol regulando el pH a 3.0, 7.0 y 10.5 mediante la adición de soluciones de HCl 0.1 M o NaOH 0.1 M (antes de la adición del adsorbente). Las concentraciones iniciales y de equilibrio se determinaron en un espectrofotómetro UV-Vis de doble haz (Shimadzu UV-1203) a 245 nm, donde el paracetamol tiene un máximo de adsorción. La curva de calibración se ajustó mediante un análisis de regresión lineal. Cada experimento se realizó por triplicado y los resultados se promediaron para reducir los errores experimentales o algún error aleatorio.

Las isotermas de adsorción describen cómo los adsorbatos interactúan con los adsorbentes y, por lo tanto, son fundamentales para optimizar el uso de los adsorbentes. Por tanto, la correlación de los datos de equilibrio mediante ecuaciones teóricas o empíricas es esencial para el diseño práctico y el funcionamiento de los sistemas de adsorción. Para establecer las correlaciones más apropiadas para los datos de equilibrio experimental, se probaron los dos modelos isotérmicos más comunes, Langmuir y Freundlich (Kumar y Arab, 2016; Zhou, 2020). Se adoptaron el modelo de pseudo primer orden, el modelo de pseudo-segundo orden y el modelo Elovich para interpretar el mecanismo cinético de adsorción (Somsesta et.al., Chen et.al., 2020).

Se realizó un estudio computacional para obtener mayor información sobre el proceso de adsorción, utilizando el software Gaussian 09 para realizar los cálculos teóricos. Las optimizaciones de la geometría se realizaron utilizando el método DFT con el conjunto funcional B3LYP y base 6-311G (d, p) (Frisch et.al., 2010). Se

calcularon las cargas electrónicas de la molécula de paracetamol antes y después de adsorberla en el material carbonoso.

Desarrollo

El carbón activado tiene una química superficial variada que, además de sus propiedades ácido-base, puede generar cargas superficiales positivas o negativas dependiendo del pH de la solución. La influencia combinada de todos los grupos funcionales determina pH_{pzc}, en el que la carga superficial neta sobre el carbono es neutra. Se sabe que la carga neta en la superficie del carbono es positiva a un pH de la solución menor que el correspondiente al pH_{pzc} debido a la protonación de grupos básicos, y es negativa a un pH de la solución superior a pH_{pzc} debido a la desprotonación de los grupos funcionales. Por lo tanto, es muy importante conocer la carga superficial del material en medio acuoso.

La Tabla 1 resume los valores relevantes relacionados con las propiedades químicas de textura y superficie de los adsorbentes utilizados.

	CAT	CARBOPAL		CAT	CARBOPAL
BET Área Superficial ($\text{m}^2 \text{ g}^{-1}$)	983	1588	Diámetro de poro medio (nm)	2.23	3.89
Superficie de microporos ($\text{m}^2 \text{ g}^{-1}$)	579	198	Grupos carboxílicos (mmol g^{-1})	2.72	1.31
Volumen de poro total (mL g^{-1})	0.66	1.25	Grupos fenólicos (mmol g^{-1})	7.78	7.92
Volumen de microporos (mL g^{-1})	0.25	0.04	Grupos básicos (mmol g^{-1})	2.44	7.83
Volumen de mesoporo (mL g^{-1})	0.41	1.21	pH _{pzc}	7.46	4.76

Tabla 1: Propiedades fisicoquímicas relevantes de CAT y CARBOPAL.

El bajo valor de pH_{pzc} observado para CARBOPAL podría atribuirse a un aumento en la cantidad de oxígeno en la superficie debido a la presencia de grupos ácidos y, según la valoración de Boehm, la mayoría de estos grupos ácidos son fenólicos. Además, CARBOPAL tiene el mayor número de grupos básicos. A través de la titulación, también se determinó que CAT tiene un mayor número de grupos carboxílicos.

La caracterización morfológica de los carbonos comerciales se ha examinado mediante microscopio electrónico de barrido (SEM). En la Fig. 1 se muestran las imágenes SEM correspondientes a los materiales carbonosos CAT y CARBOPAL. Comparando ambas microfotografías de CAT (izquierda) y ambas de CARBOPAL (derecha), se observa que las estructuras no son uniformes ni ordenadas.

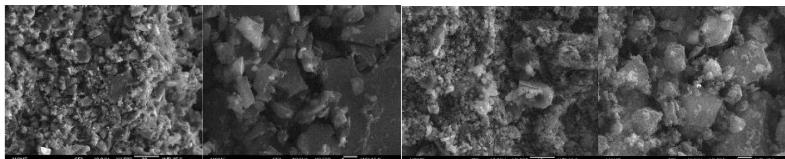


Figura 1: Microfotografías SEM CAT (izquierda) y CARBOPAL (derecha).

El proceso de adsorción está influenciado por interacciones electrostáticas entre adsorbente y adsorbato. Por tanto, las modificaciones del pH pueden generar cambios en la estructura del adsorbato y en las propiedades fisicoquímicas del adsorbente.

La fuerza iónica es un factor importante en el estudio del equilibrio de la fase acuosa. Se obtuvieron isotermas con tres concentraciones diferentes de solución de NaCl: 0.01, 0.50 y 1.00 M. La Fig. 2 muestra las isotermas de adsorción de paracetamol obtenidas en CAT y CARBOPAL a diferentes fuerzas iónicas (IS). El efecto de la modificación de la fuerza iónica es significativo. Cuanto mayor sea la fuerza iónica, mayor será la cantidad de paracetamol adsorbido. Cuando se usa CAT como adsorbente, la adsorción de paracetamol disminuye de 550 mg g⁻¹ a 390 mg g⁻¹ (30%) con una disminución en la fuerza iónica de 1.00 a 0.50 M. Cuando la fuerza iónica disminuye a 0.01 M, la adsorción disminuye a 290 mg/g (casi la mitad con respecto a la obtenida para la solución 1.00 M). Cuando se utiliza CARBOPAL como adsorbente, la variación en la capacidad de adsorción al modificar la fuerza iónica no es tan notable; cambia de 445 mg g⁻¹ a 415 mg g⁻¹ (disminución del 7%) a medida que la fuerza iónica disminuye de 1.00 a 0.50 M; y se reduce a 320 mg g⁻¹ para una fuerza iónica de 0.01 M (disminución del 28%). El



aumento de la adsorción de paracetamol en estos adsorbentes carbonosos con el aumento de la fuerza iónica podría deberse a la disminución de la solubilidad del fármaco en la solución salina, comúnmente denominado efecto salino (Arafat et.al. 1999). Los iones Na^+ y Cl^- de la disociación de NaCl en agua son fuertemente solvatados por moléculas de agua, formando grandes esferas de hidratación. Estas moléculas de agua tendrán una movilidad restringida y serán menos capaces de interactuar con las moléculas de paracetamol. Por lo tanto, la solubilidad del paracetamol en la solución disminuye y se favorece su difusión hacia la superficie del adsorbente.

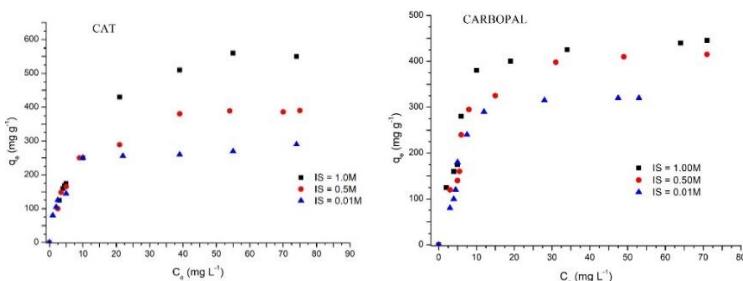


Figura 2: Isotermas de adsorción de paracetamol en CAT y CARBOPAL a fuerzas iónicas 1.0, 0.5 y 0.01 M.

Al comparar las dos superficies de carbono analizadas, se obtuvo una mayor capacidad de adsorción para CAT, que tiene menor SBET que CARBOPAL (Tabla 1). Esta diferencia en la eficiencia del adsorbente se atribuye al hecho de que CAT tiene un mayor número de microporos. En este carbono V_{micro} representa el 38% del volumen total, mientras que en CARBOPAL V_{micro} representa sólo el 3.2%. La estructura de los poros puede afectar significativamente la cinética de adsorción. Los tipos principales de interacciones entre el paracetamol y la superficie del carbón activado son: la formación de enlaces hidrógeno, la interacción de dispersión π - π y la formación del complejo donador-aceptor de electrones. La interacción π - π se fortalece cuando la adsorción tiene lugar en microporos más pequeños. Por el contrario, se postula que la formación del complejo donante-aceptor se produce en microporos y mesoporos más amplios (Lorenc-Grabowska, 2016). Por tanto, la distribución del tamaño de los poros es un factor determinante en la capacidad de adsorción de los carbonos analizados, más que la superficie específica.

A pH = 3 el paracetamol está en su forma neutra y ambos carbonos están cargados positivamente, pero el número de grupos básicos que pueden protonarse a este valor de pH es mucho mayor en CARBOPAL (Tabla 1). Esta mayor carga positiva también podría afectar el proceso de adsorción, considerando que los sitios activos del carbono disminuyen debido a la protonación de grupos básicos (pironas, cromenos, capas de grafeno, que actúan como bases de Lewis y forman complejos donante-aceptor de electrones con moléculas de H_2O o grupos amino).

Es bien sabido que el pH afecta el estado de ionización de un electrolito débil (este es el caso del paracetamol, con $\text{pK}_a \sim 9$) y las cargas que pueden aparecer en la superficie del adsorbente. Las Fig. 3 muestra las isoterms de adsorción de paracetamol a diferentes valores de pH usando 167 mg L^{-1} de adsorbente y una concentración farmacéutica inicial que oscila entre 25 y 150 mg L^{-1} . En estos experimentos, la temperatura se mantuvo a 25°C y la fuerza iónica se mantuvo constante agregando una solución de NaCl 1 M.

Los carbones activados tienen grupos superficiales que pueden protonarse o desprotonarse a diferentes valores de pH. Los sitios de superficie asociados con grupos funcionales representan una pequeña proporción de la superficie total. Sin embargo, pequeñas variaciones en la naturaleza química del adsorbente pueden producir cambios importantes en su capacidad de adsorción. A pH < pH_{PZC} , la superficie del carbono se carga positivamente favoreciendo la adsorción de especies aniónicas (Lazo-Cannata et.al., 2011). Por otro lado, la adsorción de especies catiónicas se verá favorecida a pH > pH_{PZC} , cuando el carbono está cargado negativamente.

Los electrolitos débiles, como el paracetamol, pueden existir tanto en forma ionizada como no ionizada, según el pH de la solución. Teniendo en cuenta que el pK_a del paracetamol es de 9.3, se deduce que tanto a pH = 3 como a pH = 7 el fármaco estará presente principalmente en su forma no ionizada, mientras que a pH = 11 la forma desprotonada es la predominante. La interacción entre cada especie y la superficie adsorbente puede favorecer o desfavorecer el proceso de adsorción dependiendo de la magnitud de las fuerzas de atracción o repulsión (Alade et.al., 2019).

En el caso de CARBOPAL ($\text{pH}_{\text{PZC}}=4.76$), a pH = 3.0, su superficie está, en promedio, cargada positivamente. En estas condiciones, el paracetamol estará en su forma neutra (no disociado) y la adsorción se llevaría a cabo

principalmente por interacciones π - π , entre los electrones π del anillo aromático de las moléculas de paracetamol y los electrones π de la capa de grafeno. Además, pueden tener lugar enlaces puente hidrógeno.

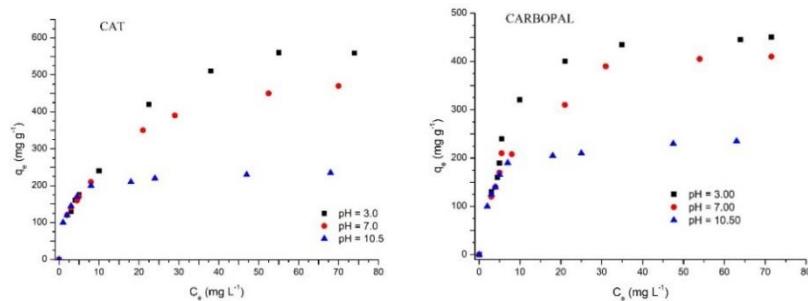


Figura 3: Isotermas de adsorción de paracetamol en CAT y CARBOPAL a pH 3.0, 7.0 y 10.5.

A pH=7.0, la superficie de CARBOPAL está cargada negativamente y el paracetamol no se disocia principalmente, por lo que nuevamente las interacciones dominantes no serían electrostáticas sino más bien las de dispersión π - π entre los anillos aromáticos. A pH=10.5, la superficie de CARBOPAL está cargada negativamente y el paracetamol se encuentra principalmente en su forma ionizada (desprotonada), por lo que las interacciones electrostáticas adsorbato-adsorbente serán repulsivas y la capacidad de adsorción del paracetamol por la superficie de carbono disminuye.

En el caso de CAT ($pH_{PZC}=7.46$), a pH = 3.0 está cargado positivamente y el paracetamol está en su forma neutra, por lo que las interacciones dominantes serán el apilamiento π - π entre los anillos aromáticos del carbono y del paracetamol, y enlaces hidrógeno. A pH =7.0, el carbono será casi neutro, como el paracetamol, por lo que las interacciones dominantes no serán electrostáticas. Sin embargo, a pH=10.5, tanto la superficie del carbono como el paracetamol están cargados negativamente, por lo que las interacciones electrostáticas serán repulsivas, lo que dará como resultado una menor capacidad de adsorción a este valor de pH.

Como se discutió anteriormente, a pH=3.0, CAT tiene una mayor capacidad de adsorción, esto podría explicarse considerando que CARBOPAL tiene un mayor número de grupos básicos, los cuales al protonarse, inhiben la adsorción de paracetamol en estos sitios. Comparando q_{max} a pH=3.0, CAT adsorbe un 10% más que CARBOPAL. A pH=7.0, CARBOPAL presenta la menor capacidad de adsorción de paracetamol lo que puede explicarse por la carga negativa que presenta su superficie, mientras que el adsorbente CAT a este valor de pH es prácticamente neutro ($pH_{PZC} = 7.46$). La diferencia en q_{max} a este pH es casi del 9%. A pH=10.5, tanto ambos carbonos como el paracetamol están cargados negativamente, por lo que las interacciones serán repulsivas. La adsorción se producirá en menor grado que a otros pH y debido a interacciones no electrostáticas.

Las isotermas de adsorción a pH=3.0 y fuerza iónica 1.0 M en los dos adsorbentes se ajustaron a los modelos de Freundlich y Langmuir. Los parámetros característicos se determinan a partir de la forma lineal respectiva y se muestran en la Tabla 2.

Absorbente	Freundlich	Langmuir
CAT	$K_F \text{ (mg g}^{-1}\text{)} = 81.01$ $n = 2.06$ $R^2 = 0.968$	$q_m \text{ (mg g}^{-1}\text{)} = 666.67$ $K_L = 0.075$ $R^2 = 0.992$
CARBOPAL	$K_F \text{ (mg g}^{-1}\text{)} = 166.66$ $n = 2.82$ $R^2 = 0.788$	$q_m \text{ (mg g}^{-1}\text{)} = 460.83$ $K_L = 0.027$ $R^2 = 0.989$

Tabla 2: Resultados de la aplicación de las ecuaciones de Freundlich y Langmuir a las isotermas de adsorción.

En todos los casos, el coeficiente de correlación R^2 muestra que el modelo de Langmuir es el que mejor se ajusta a los datos experimentales. Además, los valores teóricos de q_m derivados del modelo de Langmuir son más consistentes con la cantidad de adsorción experimental, lo que indica además la validez del modelo de Langmuir para describir la adsorción del paracetamol. El hecho de que la isoterma de Langmuir se ajuste muy bien a los datos experimentales sugiere la cobertura monocapa de paracetamol sobre las partículas adsorbentes.

La evolución de la concentración de paracetamol en función del tiempo se muestra en la Fig. 4. En los tres materiales estudiados, la adsorción es rápida durante los primeros 200 min y luego disminuye gradualmente, alcanzando el equilibrio en aproximadamente 800 min.

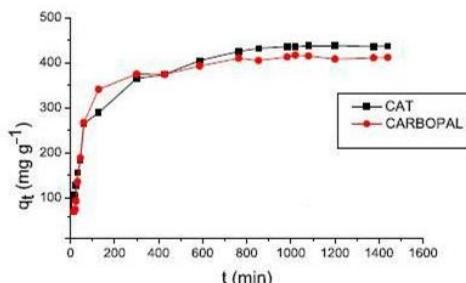


Figura 4: Perfiles cinéticos de adsorción del paracetamol.

Los parámetros obtenidos para los tres modelos cinéticos pueden observarse en la Tabla 3.

Modelo	CAT	CARBOPAL
pseudo-primer orden	$k_1 = 0.0041 \text{ min}^{-1}$ $q_e = 300 \text{ mg/g}^{-1}$ $R^2 = 0.947$	$k_1 = 0.0034 \text{ min}^{-1}$ $q_e = 230 \text{ mg/g}^{-1}$ $R^2 = 0.839$
pseudo-segundo orden	$k_2 = 3.8 \cdot 10^{-5} \text{ min}^{-1}$ $q_e = 455 \text{ mg/g}^{-1}$ $R^2 = 0.999$	$k_2 = 3.7 \cdot 10^{-5} \text{ min}^{-1}$ $q_e = 435 \text{ mg/g}^{-1}$ $R^2 = 0.999$
Elovich	$\alpha = 24.5 \text{ mg/g}^{-1}$ $\beta = 0.013 \text{ g}^{-1}$ $R^2 = 0.974$	$\alpha = 18.6 \text{ mg/g}^{-1}$ $\beta = 0.013 \text{ g}^{-1}$ $R^2 = 0.943$

Tabla 3: Parámetros del modelo cinético para la adsorción de paracetamol en CARBOPAL y CAT.

Para los modelos cinéticos de pseudo-primer orden y Elovich, los datos experimentales se desvían de la linealidad, por lo tanto, estos modelos son inaplicables a los sistemas estudiados. Por el contrario, el coeficiente de correlación y el valor q_e que se determinaron a partir del modelo de pseudo-segundo orden concuerdan bien con los datos experimentales. Esto indicaría que el paso limitante en el proceso de adsorción sería la transferencia de la masa desde la solución a la superficie del adsorbente.

La adsorción de compuestos farmacéuticos de fases acuosas se debe principalmente a interacciones entre los grupos funcionales en la estructura del fármaco y los grupos en la superficie del adsorbente sólido. Por otro lado, el efecto del pH sobre las interacciones adsorbato-adsorbente y la distribución de carga en estos grupos tienen efectos significativos sobre la capacidad de adsorción. Por lo tanto, el conocimiento adicional sobre las distribuciones de carga puede ser útil para explicar cómo interactúa la molécula con la superficie adsorbente. Se calcula entonces, la distribución de carga del paracetamol comparando su estructura electrónica antes y después de la adsorción.

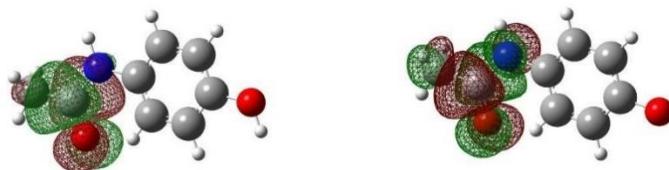


Figura 5: Orbitales frontera de las especies neutra (izquierda) y desprotonada (derecha), de molécula de paracetamol.

Los cambios observados son de pequeña magnitud y esto concuerda con un proceso de adsorción física. Se producen cambios notables en los átomos de los grupos NH, -C=O y C-OH de la molécula de paracetamol. La formación de un complejo donante-aceptor de electrones es posible entre grupos con pares de electrones libres, como los anillos de carbono en el carbón activado y los átomos electronegativos (nitrógeno y oxígeno) en la molécula de paracetamol. A pH bajo y neutro, la molécula de paracetamol existe como especie neutra. La

molécula neutra presenta baja densidad electrónica y se puede atribuir principalmente al grupo carbonilo (ver Fig. 5 (izquierda)). A valores de pH superiores a 10, predomina la forma aniónica del paracetamol. Las regiones con alta densidad electrónica se encuentran en el grupo carbonilo y, además, en los grupos amina y metilo (ver Fig. 5 (derecha)). La interacción de especies ionizadas y no ionizadas con la superficie sólida puede favorecer o desfavorecer el proceso de adsorción cuando prevalecen fuerzas de atracción o repulsión, respectivamente, es decir, la disminución/aumento de la capacidad de adsorción puede estar relacionada con el mismo/diferente signo de la carga de las especies que interactúan. Cuando la adsorción ocurre a pH bajo/neutro, el adsorbente cargado positivo/neutro atrae las cargas electrónicas más altas de la molécula de paracetamol neutra ubicada en los grupos NH, -C=O y C-OH. Las cargas de paracetamol pueden ser atraídas débilmente por los anillos de carbono (carbono activado) a través de la adsorción física. Por otro lado, la energía de adsorción calculada para el paracetamol en el carbón activado es de -2.12 eV, lo que confirma la naturaleza física de la interacción molécula-superficie.

Conclusiones

Los estudios de adsorción sobre los dos materiales carbonosos, CAT y CARBOPAL, muestran que sus capacidades de adsorción son adecuadas para la remoción de paracetamol presente en el agua, y se selecciona el pH=3 como óptimo para su adsorción. Por otro lado, valores altos de fuerza iónica favorecen la adsorción. Así, a 25 °C, pH=3, IS=1 M, 167 mg L⁻¹ de adsorbente y concentraciones de paracetamol entre 25 y 150 mg L⁻¹, la capacidad máxima de adsorción es de 560 mg g⁻¹ para CAT y 450 mg g⁻¹ para CARBOPAL. El uso de modelos cinéticos muestra que la adsorción de paracetamol sigue una cinética de adsorción de pseudo-segundo orden, mientras que el modelo de Langmuir es apropiado para describir la isoterma de adsorción. Los cálculos DFT mostraron una buena correlación con los resultados experimentales, corroborando el tipo de interacción entre el paracetamol y la superficie, proporcionando detalles atomísticos a través del modelado molecular.

Agradecimientos

Nuestro trabajo fue financiado por UTN, UNLP, CONICET y CIC BsAs. A. Diaz Compañy es miembro de CIC BsAs. G. Roman es becario de CONICET. S. Simonetti y D. Ruiz son miembros de CONICET.

Referencias

- Alade I.O., Abd Rahman M.A., Saleh T.A. (2019). Nano Struct. Nano Objects 17, 103.
- Arafat H. A., Franz M., Pinto N. G. (1999). Langmuir 15, 5997.
- Birch G.F., Drage D.S., Thompson K., Eaglesham G., Mueller J.F., Mar. (2015). Pollut. Bull. 97, 56.
- Chen S., Qin C., Wang T., Chen F., Li X., Hou H., Zhou M. (2019). J. Mol. Liq. 285, 62.
- Delgado N., Capparelli A., Navarro A., Marino D. (2019). J. Environ. Manag. 236, 301.
- Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B., Scuseria G.E., Robb M.A. Cheeseman J.R., Scalmani G., Barone V., Mennucci B., Petersson G.A., et al. (2010). Gaussian 09, Revision C.01; Gaussian, Inc.: Wallingford, CT, USA.
- Kumar S.V., Arab. (2016). J. Chem. 12, 316.
- Lapworth D. J., Baran N., Stuart M. E., Ward R. S. (2012). Environ. Pollut. 163, 287.
- Lazo-Cannata J. C., Nieto-Márquez A., Jacoby A., Paredes-Doig A. L., Romero A., Sun-Kou M. R., Valverde J. L. (2011). Sep. Purif. Technol. 80, 217.
- Lorenz-Grabowska E. (2016). Adsorption 22, 599.
- Saleh T.A., Al-Absi A.A. (2017). J. Mol. Liq. 248, 577.
- Somsesta N., Sricharoenchaikul V., Aht-Ong D. (2020). Mater. Chem. Phys. J. 240, 122221.
- Tuzen M., Sari A., SalehT.A. (2018). J. Environ. Manag. 206, 170.
- Zhou Y., Luan L., Tang B., Niu Y., Qu R., Liu Y., Xu, W. (2020). J. Chem. Eng. 398, 125651.