

SIMULACIÓN DE CURVAS DE RUPTURA PARA LA ADSORCIÓN DE PARACETAMOL A PARTIR DE DATOS OBTENIDOS EN ESTUDIO TERMODINÁMICO Y CINÉTICO

*F.J. García-Mateos, R. Ruiz-Rosas, M.D. Marqués, L. Cotoruelo,
J. Rodríguez-Mirasol, T. Cordero*

*Departamento de Ingeniería Química. Facultad de Ciencias.
Universidad de Málaga. Campus de Teatinos s/n, 29071 Málaga*

garciamateos@uma.es

Palabras clave: Adsorción, paracetamol, simulación, curvas de ruptura.

1. Introducción

Los productos farmacéuticos considerados, en algunos casos, como contaminantes emergentes, poseen, en general, una alta estabilidad química y térmica y además son biológicamente activos. Algunos de ellos han sido detectados en aguas superficiales en niveles cercanos a los 100 µg/L. El uso generalizado de estos productos hace prever que su presencia se incremente en las corrientes de entrada de las estaciones depuradoras de aguas residuales. La adsorción de estos compuestos sobre carbón activo ofrece una alternativa para su eliminación.

En este trabajo se presentan los resultados de un estudio de adsorción de paracetamol (producto farmacéutico de mayor concentración en aguas superficiales) en columna de carbón activo de origen lignocelulósico. Los parámetros característicos de adsorción, obtenidos de experimentos realizados en tanque de mezcla discontinuo, han sido utilizados para modelar el proceso de adsorción en columna, comparándose las curvas de ruptura simuladas con las obtenidas experimentalmente.

2. Experimental

El carbón activo ha sido preparado por activación química de hueso de aceituna con ácido fosfórico, con una relación de impregnación 3:1 (ácido fosfórico/hueso de aceituna). La etapa de activación se ha llevado a cabo en atmósfera inerte a 500°C durante 2 horas. Posteriormente el carbón activo se sometió a un tratamiento térmico a 900°C en atmósfera inerte.

La adsorción de paracetamol se ha realizado a temperaturas comprendidas entre 15 y 35°C en tanque agitado (estudio termodinámico y cinético) y en columna (estudio de las curvas de ruptura). Los experimentos en tanque agitado se llevaron a cabo poniendo en contacto 10 mg (b.s.) de carbón activo con 100 mL de disolución de paracetamol a distintas concentraciones, usando una única concentración de 7 ppm para el estudio cinético. Los experimentos en columna se realizaron variando la concentración de entrada (3-7 ppm), caudal de entrada (4-8 mL/min) y masa de carbón activo (170-230 mg) para estudiar el efecto que éstos producen sobre la adsorción de paracetamol sobre la columna de carbón activado. En todos los casos se usó un diámetro medio de partícula de 0,185 mm.

Tabla 1. Parámetros obtenidos del estudio termodinámico.

| Temperatura (°C) | q_L (mg/g) | K (L/mg) | r^2 | ΔG (kJ/mol) | ΔS (J/mol·K) | ΔH (kJ/mol) |
|------------------|--------------|----------|-------|---------------------|----------------------|---------------------|
| 15 | 108.3 | 1.33 | 0.978 | -29.2 | | |
| 25 | 98.4 | 1.13 | 0.982 | -29.9 | 41.8 | -17.3 |
| 35 | 92.8 | 0.83 | 0.984 | -30.1 | | |

3. Resultados y discusión

La Tabla 1 muestra los resultados obtenidos tras realizar el estudio termodinámico. Los datos experimentales se explican mediante la isoterma de adsorción propuesta por Langmuir. Los valores negativos de ΔG indican la facilidad y la espontaneidad del proceso de adsorción y el valor negativo de la entalpía indica que la naturaleza del proceso de adsorción es exotérmica.

La Figura 1. presenta los valores del coeficiente de difusión en función del grado de recubrimiento a diferentes temperaturas, obtenidos a partir del estudio cinético, donde se observa que al aumentar la temperatura aumenta el valor de dichos coeficientes, debido a una mayor movilidad de las moléculas del contaminante. El comportamiento de la columna fue simulado resolviendo simultáneamente el balance para el lecho y para la partícula, considerando las resistencias a la transferencia de materia en la película líquida (K_m) y a través de la partícula (D_s), y suponiendo que la adsorción del paracetamol se produce siguiendo el modelo de Langmuir. Los parámetros de la isoterma de adsorción, así como los valores de difusividad en la partícula fueron obtenidos del estudio realizado en tanque agitado (Tabla 1 y Fig 1). La Figura 2. muestra las curvas de ruptura obtenidas al variar la temperatura, la concordancia entre las simulaciones y las curvas experimentales parece indicar que es posible predecir el comportamiento dinámico en columna a partir de la experimentación en tanque agitado en discontinuo.

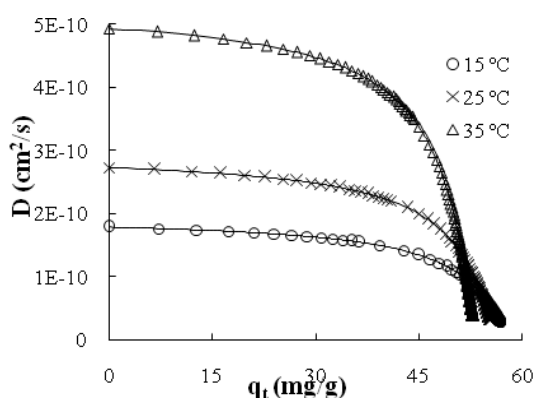


Fig. 1. Variación del coeficiente de difusión con respecto al grado de recubrimiento a diferentes temperaturas.

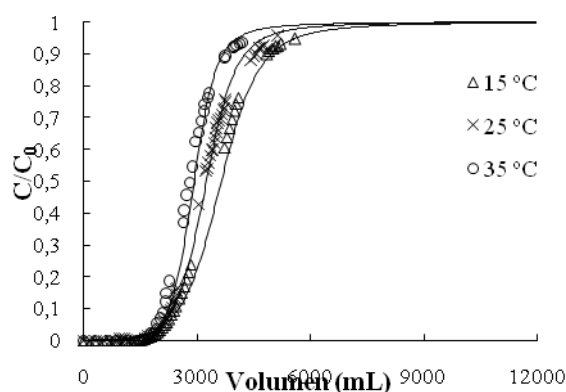


Fig. 2. Comparación curvas de ruptura experimentales-simuladas a diferentes temperaturas.

Agradecimientos

Proyectos MEC (CTQ2009-14262 y CTQ2012-36408), Junta de Andalucía (P09-FQMF-5156 y P10FQM-6768) y Andalucía Tech.