



UNIVERSIDAD DE CUENCA
Facultad de Ciencias Químicas
Carrera de Ingeniería Ambiental

Título del trabajo:

**“Evaluación de la remoción del ibuprofeno
mediante biosorción en tallos de rosas y
posos de café”**

Trabajo de titulación previo a la obtención del título de:
Ingeniero Ambiental

AUTORA:

Diana Gabriela Marín Pesántez
CI. 0105674998

TUTORA:

Ing. María Eulalia Vanegas Peña, PhD
CI. 0103168118

Cuenca, Diciembre del 2017



RESUMEN

En esta investigación se analiza la viabilidad de dos biosorbentes, tallos de rosas [TR] y posos de café, como biomásas para la remoción del ibuprofeno. El proceso discontinuo fue realizado a escala de laboratorio en tanque agitado, evaluando las diferentes variables que intervienen en el proceso tales como concentración del adsorbato y adsorbente, tiempo de contacto, pH y temperatura con el fin de analizar el fenómeno desde el punto de vista de equilibrio, cinético y termodinámico.

La caracterización química de la superficie, realizada mediante la determinación del punto de carga cero (PZC) y la titulación de Boehm, muestran que la superficie de los dos biosorbente es de carácter ácido. Por espectrofotometría FT-IR se analizó la variación entre los espectros antes y después de a biosorción tanto para posos de café como para TR, los cambios de las bandas alrededor de 3400 y entre 1600 y 1450 cm^{-1} se deberían a la interacción del ibuprofeno con las biomásas. Posterior a esto, se realizó una serie de experimentos en los cuales se optimizó cada parámetro, tales como pH de 2 a 10, cantidad de adsorbente de 1 a 15 g/L, tiempo de contacto de 3 a 1440min, concentración inicial del fármaco de 10 a 60 mg/L y temperatura de 30 a 50°C.

Se obtuvieron altos valores de remoción al trabajar con posos de café mientras que TR demostró un comportamiento menos favorable bajo los mismos parámetros, alcanzando una remoción de 60,42%, por lo que estas pruebas se mantuvieron hasta este paso, dado que el porcentaje de remoción no fue tan satisfactorio como el de posos de café. Es así que, los resultados de posos de café demostraron que el porcentaje máximo de adsorción fue de 94,74% al tratar el medicamento con posos de café a un pH=2, cantidad de biomasa de 12 g/L, tiempo de contacto de 60 min, concentración inicial de 10mg/L y temperatura de 30°C. Al realizar el estudio de adsorción de equilibrio se pudo observar que los datos se ajustan mejor a la isoterma de Langmuir mientras que al modelar los datos cinéticos los resultados siguen la pseudo cinética de segundo orden.

Palabras clave: adsorción, ibuprofeno, posos de café, tallos de rosas, porcentaje de remoción



ABSTRACT

In this investigation, the viability of two adsorbents, stems of roses [SR] and coffee grounds are analyzed, as biomasses for the removal of ibuprofen. The discontinuous process was carried out on a laboratory scale by a series of batch sorption experiments evaluating the different variables that influence the process such as adsorbate and adsorbent concentration, contact time, pH and temperature, in order to analyze the process from the point of view of equilibrium, kinetic and thermodynamic.

The chemical characterization of the surface, realized by the determination of the point zero charge (PZC) and the Boehm titration, show that the surface of the two adsorbents is acidic. By FT-IR spectrophotometry, the variation between the spectra before and after the biosorption was analyzed both for coffee grounds and for stems of roses, the changes of the bands around 3400 and, between 1600 and 1450 cm^{-1} , it would be due to the Interaction of ibuprofen with biomass. Subsequent to this, a series of experiments were performed in which each parameter was optimized, such as pH from 2 to 10, dose of adsorbent from 1 to 15 g/L, contact time from 3 to 1440 min, initial concentration of drug from 10 to 60mg/L and temperature from 30 to 50 ° C.

High removal values were obtained with coffee grounds while SR showed a less favorable behavior under the same parameters, it is possible to indicate that only a 60,42% removal was obtained, so that these tests were maintained until this step, since the percentage of removal was not as satisfactory as that of coffee grounds. Thus, the results showed that the maximum percentage of adsorption was 94,74% when treating the drug with coffee grounds at pH=2, dose of biomass of 12 g/L, contact time of 60 min, initial concentration of 10 mg/L and temperature of 30 °C. The equilibrium adsorption study showed that the data fit better to the Langmuir isotherm and when modeling the kinetic data the results follow the pseudo second-order kinetics.

Key words: adsorption, ibuprofen, coffee grounds, stems of roses, removal percentage.



Contenido

RESUMEN.....	2
CAPÍTULO 1	13
INTRODUCCIÓN.....	13
MARCO TEÓRICO.....	14
1.1 Contaminantes emergentes.....	14
1.1.1 Productos farmacéuticos.....	14
1.1.2 Ibuprofeno.....	14
1.2 Tecnologías para eliminar ibuprofeno de aguas contaminadas.....	16
1.3 Biosorción	16
1.3.1 Adsorbentes	18
1.3.2 Factores que influyen en la biosorción.....	19
1.3.3 Estudios de adsorción de ibuprofeno sobre diversos materiales.....	20
1.3.4 Estudio de equilibrio.....	20
1.3.5 Estudio cinético de adsorción	22
1.3.6 Estudio termodinámico	23
1.4 Técnicas de caracterización	24
1.4.1 Análisis infrarrojo	24
1.4.2 Espectrofotometría UV-VIS.....	24
1.5 OBJETIVOS	25
1.5.1 General.....	25
1.5.2 Específicos	25
1.6 HIPÓTESIS	25
CAPITULO 2	26
2 METODOLOGÍA.....	26
Materiales	26
Equipos	26
Reactivos	26
2.1 Obtención y acondicionamiento de las biomosas	26
2.1.1 Posos de café.....	26
2.1.2 Tallos de rosas.....	27
2.2 Caracterización de los biosorbentes	28
2.2.1 Caracterización física.....	28
2.2.2 Caracterización química	31
2.3 Preparación de soluciones de Ibuprofeno	33



2.4	Curva de calibración para UV-VIS.....	34
2.5	Efecto de los factores que influyen en la biosorción en agitado (Batch)	34
2.5.1	pH.....	34
2.5.2	Concentración de biomasa	34
2.5.3	Tiempo de contacto o agitación	35
2.5.4	Concentración inicial del medicamento.....	35
2.5.5	Temperatura.....	35
CAPITULO 3		36
3	RESULTADOS Y DISCUSIÓN.....	36
3.1	Caracterización de POSOS DE CAFÉ.....	36
3.1.1	Caracterización física.....	36
3.1.2	Caracterización química	36
3.2	Caracterización de TR y TRSC	39
3.2.1	Caracterización física.....	39
3.2.2	Caracterización química	39
3.3	Curva de calibración para UV-VIS.....	41
3.4	ESTUDIO DE LA CAPACIDAD DE ADSORCIÓN DE LOS POSOS DE CAFÉ COMO BIOADSORBENTE DE IBUPROFENO.....	42
3.4.1	EFEECTO DE pH.....	42
3.4.2	EFEECTO DE LA DOSIS DE BIOMASA.....	44
3.4.3	EFEECTO DE TIEMPO DE CONTACTO O AGITACIÓN	45
3.4.4	EFEECTO DE CONCENTRACIÓN INICIAL DE IBUPROFENO	47
3.4.5	EFEECTO DE LA TEMPERATURA.....	48
3.5	ESTUDIO DE LA CAPACIDAD DE ADSORCIÓN DE TR Y TRSC COMO BIOADSORBENTES DE IBUPROFENO.....	49
3.5.1	EFEECTO DE pH.....	50
3.5.2	EFEECTO DE LA DOSIS DEL ADSORBENTE	50
3.5.3	EFEECTO DE TIEMPO DE CONTACTO O AGITACIÓN	51
3.5.4	EFEECTO DE CONCENTRACIÓN INICIAL DE IBUPROFENO	52
3.6	ISOTERMA DE ADSORCIÓN EN EL EQUILIBRO.....	53
3.6.1	MODELO MATEMÁTICO DE LANGMUIR	53
3.6.2	MODELO MATEMÁTICO DE FREUNDLICH	55
3.7	ESTUDIO CINÉTICO DE REMOCIÓN DE IBUPROFENO CON POSOS DE CAFÉ 57	
3.7.1	LAGERGRÉN PSEUDO PRIMER ORDEN.....	57
3.7.2	PSEUDO SEGUNDO ORDEN	58



3.8 ESTUDIO TERMODINÁMICO.....	60
CAPITULO 4	61
4 CONCLUSIONES.....	61
4.1 RECOMENDACIONES.....	62
4.2 BIBLIOGRAFÍA.....	63
4.3 ANEXOS.....	68

Índice de tablas

Tabla 1. Concentración de ibuprofeno en puntos de medición.....	15
Tabla 2. Tecnologías para eliminar fármacos de fuentes hídricas.....	16
Tabla 3. Estudios de biosorción.....	17
Tabla 4. Estudios de biosorción con ibuprofeno.....	20
Tabla 5. Determinación de las características físicas de posos de café.....	36
Tabla 6. Datos para la determinación de pH en el PZC para posos de café.....	36
Tabla 7. Datos promedio para determinar grupos básicos y ácidos de posos de café.....	37
Tabla 8. Determinación de características físicas de TR y TRSC.....	39
Tabla 9. Datos para la determinación de pH en el PZC para TR y TRSC.....	39
Tabla 10. Datos promedio para determinar grupos básicos y ácidos de TR y TRSC.....	40
Tabla 11. Valores de absorbancia a una longitud de onda de 220nm y pH=2.....	41
Tabla 12. Resultados experimentales de variación de pH con posos de café.....	43
Tabla 13. Resultados experimentales de variación de dosis de biomasa con posos de café.....	44
Tabla 14. Resultados experimentales de variación de tiempo de contacto con posos de café.....	46
Tabla 15. Resultados experimentales de variación de concentración inicial de ibuprofeno con posos de café.....	47
Tabla 16. Resultados experimentales de variación de ibuprofeno con posos de café.....	48
Tabla 17. Prueba preliminar de TR y TRSC.....	49
Tabla 18. Resultados experimentales de variación de pH con TR.....	50
Tabla 19. Resultados experimentales de variación de biomasa con TR.....	51
Tabla 20. Resultados experimentales de tiempo de contacto en TR.....	52
Tabla 21. Resultados experimentales de concentración inicial de ibuprofeno en TR.....	52
Tabla 22. Valores experimentales a 30, 40 y 50°C.....	54
Tabla 23. Datos para ajustar al modelo de Langmuir.....	54
Tabla 24. Datos para ajustar al modelo matemático de Freundlich.....	56
Tabla 25. Datos para ajustar al modelo cinético pseudo primer orden.....	57
Tabla 26. Datos para ajustar al modelo cinético de pseudo segundo orden.....	59
Tabla 27. Parámetros termodinámicos.....	60
Tabla 28. Valores obtenidos para determinar grupos básicos de posos de café.....	68
Tabla 29. Valores obtenidos para determinar grupos ácidos de posos de café.....	69
Tabla 30. Valores obtenidos para determinar grupos básicos de TR.....	71
Tabla 31. Valores obtenidos para determinar grupos ácidos de TR.....	72
Tabla 32. Valores obtenidos para determinar grupos básicos de TRSC.....	74



Tabla 33. Valores obtenidos para determinar grupos ácidos de TRSC 75
 Tabla 34. Valores de absorbancia a una longitud de onda de 221nm y pH=4..... 77
 Tabla 35. Valores de absorbancia a una longitud de onda de 221nm y pH=6..... 77
 Tabla 36. Valores de absorbancia a una longitud de onda de 221nm y pH=10 78

Índice de figuras

Figura 1. Estructura química del ibuprofeno 15
 Figura 2. Acondicionamiento de posos de café..... 26
 Figura 3. Partes del tallo de rosa desde un corte transversal 27
 Figura 4. Acondicionamiento de tallos de rosa obtenidos de la floristería Bella Flower 27
 Figura 5. Determinación del contenido de humedad 29
 Figura 6. Determinación de densidad real con el método del picnómetro 29
 Figura 7. Determinación de la densidad aparente por el método de la probeta 30
 Figura 8. Determinación de pH en el punto de carga cero 31
 Figura 9. Determinación de los grupos ácidos y básicos por el método de titulación de Boehm 33
 Figura 10. Determinación del punto de carga cero de posos de café 36
 Figura 11. Obtención de volumen equivalente para grupos básicos y ácidos con posos de café..... 37
 Figura 12. Espectrofotometría de infrarrojo de poso de café antes y después de la biosorción 38
 Figura 13. Determinación del punto de carga cero de TR 39
 Figura 14. Obtención de volumen equivalente para grupos básicos y ácidos con TR y TRSC..... 40
 Figura 15. Espectrofotometría de infrarrojo de TR antes y después de la biosorción..... 41
 Figura 16. Curva de calibración de ibuprofeno a 220nm, pH=2 42
 Figura 17. Especiación del ibuprofeno..... 42
 Figura 18. Curva de efecto de pH en posos de café 43
 Figura 19. Efecto de pH en la biosorción de ibuprofeno 44
 Figura 20. Curva de efecto de la dosis de biomasa con posos de café 45
 Figura 21. Curva de efecto del tiempo de contacto con posos de café 46
 Figura 22. Curva de efecto de la concentración inicial de ibuprofeno con posos de café 47
 Figura 23. Curva de efecto de la temperatura con posos de café..... 49
 Figura 24. Curva de efecto de pH en TR..... 50
 Figura 25. Curva de efecto de la concentración de biomasa en TR 51
 Figura 26. Curva de efecto del tiempo de contacto en TR 52
 Figura 27. Curva de efecto de la concentración inicial de ibuprofeno en TR 53
 Figura 28. Isoterma de adsorción ajustada al modelo de Langmuir a 30, 40 y 50°C y R_L 55
 Figura 29. Isoterma de adsorción ajustada al modelo de Freundlich a 30, 40 y 50°C.. 56
 Figura 30. Pseudo primer orden lineal 58
 Figura 31. Ajuste al modelo cinético pseudo primer orden..... 58
 Figura 32. Pseudo segundo orden lineal 59
 Figura 33. Ajuste al modelo cinético de pseudo segundo orden 59
 Figura 34. Obtención de volumen equivalente para grupos básicos con posos de café 70



Figura 35. Obtención de volumen equivalente para grupos ácidos con posos de café 70
 Figura 36. Obtención de volumen equivalente para grupos básicos con TR 73
 Figura 37. Obtención de volumen equivalente para grupos ácidos con TR 73
 Figura 38. Obtención de volumen equivalente para grupos básicos con TRSC..... 76
 Figura 39. Obtención de volumen equivalente para grupos básicos con TRSC..... 76
 Figura 40. Curva de calibración de ibuprofeno a 221nm, pH=4 77
 Figura 41. Curva de calibración de ibuprofeno a 221nm, pH=6 77
 Figura 42. Curva de calibración de ibuprofeno a 221nm, pH=10 78

Índice de ecuaciones

Ecuación 1 18
 Ecuación 2..... 21
 Ecuación 3..... 21
 Ecuación 4..... 21
 Ecuación 5..... 21
 Ecuación 6..... 22
 Ecuación 7..... 22
 Ecuación 8..... 22
 Ecuación 9..... 22
 Ecuación 10..... 22
 Ecuación 11..... 23
 Ecuación 12..... 23
 Ecuación 13..... 23
 Ecuación 14..... 23
 Ecuación 15..... 23
 Ecuación 16..... 23
 Ecuación 17..... 28
 Ecuación 18..... 28
 Ecuación 19..... 29
 Ecuación 20..... 30
 Ecuación 21..... 30
 Ecuación 22..... 32
 Ecuación 23..... 32



Cláusula de licencia y autorización para publicación en el Repositorio Institucional

Diana Gabriela Marín Pesántez en calidad de autor/a y titular de los derechos morales y patrimoniales del trabajo de titulación "Evaluación de la remoción del ibuprofeno mediante biosorción en tallos de rosas y posos de café ", de conformidad con el Art. 114 del CÓDIGO ORGÁNICO DE LA ECONOMÍA SOCIAL DE LOS CONOCIMIENTOS, CREATIVIDAD E INNOVACIÓN reconozco a favor de la Universidad de Cuenca una licencia gratuita, intransferible y no exclusiva para el uso no comercial de la obra, con fines estrictamente académicos.

Asimismo, autorizo a la Universidad de Cuenca para que realice la publicación de este trabajo de titulación en el repositorio institucional, de conformidad a lo dispuesto en el Art. 144 de la Ley Orgánica de Educación Superior.

Cuenca, 1 de diciembre de 2017

Diana Gabriela Marín Pesántez

C.I: 0105674998



Cláusula de Propiedad Intelectual

Diana Gabriela Marín Pesántez, autora del trabajo de titulación "Evaluación de la remoción del ibuprofeno mediante biosorción en tallos de rosas y posos de café", certifico que todas las ideas, opiniones y contenidos expuestos en la presente investigación son de exclusiva responsabilidad de su autor/a.

Cuenca, 1 de diciembre de 2017

Una firma manuscrita en tinta azul sobre una línea horizontal.

Diana Gabriela Marín Pesántez

C.I: 0105674998



DEDICATORIA

Este trabajo va dedicado en primera instancia a Dios, en el cual he encontrado la fortaleza para continuar mi camino de formación profesional.

A mi hijo, frijolito, quien ha sido mi inspiración para levantarme con fuerza y deseo de superación cada mañana, gracias por ser mi motor para impulsarme y querer llegar a hacer grandes cosas con el fin de poder darte siempre lo mejor.

A mi esposo quien ha estado a mi lado todo este tiempo colaborando en todo lo posible, siempre con sus palabras de motivación y esperanza incluso en las situaciones cuando el paisaje se tornaba gris.

A mis padres que siempre han sabido apoyarme y han estado pendiente de cada paso a lo largo de mi vida estudiantil, gracias también por sus consejos, confianza y los recursos que han invertido en mi formación.

Y en especial, a mi abuelito Arturo, que desde el cielo me cuida y me guía, aunque no estés físicamente sé que también estas celebrando este gran paso de mi vida.



AGRADECIMIENTOS

Mi profundo agradecimiento a Ing. María Eulalia Vanegas Peña, PhD, directora de tesis, por la oportunidad prestada al trabajar en su área de investigación, por brindarme sus conocimientos, tiempo y ayuda incondicional durante este proceso.

Ing. Mayra Vera, PhD, asesora de esta investigación, por estar pendiente de las pruebas y los resultados obtenidos en este trabajo.

Ing. Christian Cruzat, PhD, por brindarme sus conocimientos y experiencia a cerca de análisis instrumental, contribuyendo a culminar con éxito este estudio.

Blgo. Henrietta Hampel, PhD, por la gentileza con la prestación del equipo de espectrofotometría UV-VIS.

Ing. María Elena Cazar, PhD, por la ayuda prestada con la realización de los estudios de espectrometría FT-IR.

También expreso mi gratitud al equipo de trabajo del Centro de Estudios Ambientales de la Universidad de Cuenca, por compartirme todas sus experiencias para la ejecución los análisis de este proyecto.



CAPÍTULO 1

INTRODUCCIÓN

La liberación de diferentes productos químicos originados por industrias es motivo de preocupación científica desde hace varias décadas, debido a que los diversos tratamientos que se emplean en el manejo de aguas residuales son deficientes en la eliminación de nuevos contaminantes denominados emergentes, los cuales finalmente van a ser vertidos en los recursos hídricos, causando efectos ecotoxicológicos en las especies animales que ahí habitan.

Dentro de este grupo de contaminantes emergentes se encuentran los productos farmacéuticos, que han llegado al compartimento hídrico por efluentes de industrias, hospitales o excretadas por los seres humanos, tal es el caso del ibuprofeno el cual ha sido catalogado como el sexto fármaco más vendido en el mundo lo que favorece su permanencia constante en el medio ambiente. A esto se suma el problema de que el límite máximo admisible para la concentración de medicamentos en el medio ambiente sigue sin estar regulado, seguramente debido a la ausencia de conocimiento sobre la exposición a largo plazo a estos compuestos y sus metabolitos en el medio ambiente.

En este contexto, se han desarrollado tecnologías para la eliminación de productos farmacéuticos de aguas contaminadas: filtración de membrana (nanofiltración y ósmosis inversa), degradación por UV, ultrasonidos y electroquímica, entre otros, presentando dichos métodos una problemática ambiental, económica y social, por lo que se busca tecnologías alternativas que puedan enmendar dicha falencia que no requieren equipo de alto costo o recursos humanos altamente especializados, respetuosos con el medio ambiente y que aborden recursos locales.

La biosorción definida como el proceso de remoción de contaminantes de soluciones acuosas por medio del uso de biomasa, se ha presentado en los últimos años como un proceso innovador, económico, de bajo impacto ecológico y sobretodo capaz de retener contaminantes en baja concentración en el cual se manejan residuos de materiales naturales renovables, además que ofrece la ventaja de remover el contaminante sin producir sustancias potencialmente más peligrosas.

El poso de café es un residuo que se genera anualmente en grandes cantidades por lo que se transforma en una opción muy prometedora como biosorbente aportándole un valor añadido antes de su disposición final. Por otro lado, los cultivos de flores se presentan con una alta densidad especialmente en la serranía ecuatoriana, pero luego de usar su parte útil son destinados al compost o definidos como rechazo. Estos componentes están constituidos de un material celulósico y hemicelulósico que contienen grupos funcionales que posibilitan la adsorción de contaminantes, puesto que se conoce que los tallos de rosa son capaces de remover metales pesados como el cadmio con una capacidad de adsorción de 55,55mg/g y un porcentaje de remoción del 41 % y posos de café que se han estudiado bajo una modificación química con ácido cítrico para remover Pb (II) y Cu (II) en donde la capacidad de adsorción fue de 158,7mg/g.



MARCO TEÓRICO

1.1 Contaminantes emergentes

Los contaminantes emergentes son sustancias que no tienen una normativa que regularice su concentración y a pesar de encontrarse en el rango de ng/l o µg/l su control es muy difícil caracterizándose por ser los responsables de efectos tóxicos agudos y crónicos en organismos acuáticos, esto como consecuencia a que presentan afinidad y por ende una mayor acumulación en los tejidos animales, pudiendo ser metabolizados y transformados en sustancias tóxicas (Álvarez, 2014). Dentro de este grupo, se ha englobado a fármacos, plaguicidas, surfactantes, aditivos de gasolina, esteroides y otros que en su mayoría son bioacumulables (Cervantes, 2015).

1.1.1 Productos farmacéuticos

Estudios han detectado un incremento de la presencia de fármacos en el medio acuático, lo cual se torna preocupante por ser sustancias polares con alta solubilidad en el agua que provoca que las plantas de tratamiento convencionales no funcionen eficientemente en su remoción, siendo finalmente vertidos a las fuentes hídricas (Dalfior y col., 2013).

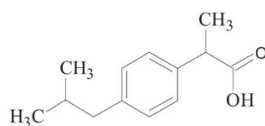
En general, los fármacos se han considerado como emergentes por su uso persistente, liberación constante y por manifestar efectos ecotoxicológicos. Dichos fármacos pueden ser excretados ya sea mediante la orina (55-80% de la cantidad ingerida) o las heces sin alteración alguna, en forma de conjugados glucurónidos o sulfatos y/o como un metabolito (Cortacans y col., 2006). Algunos estudios han considerado que en vista de la variedad de beneficios que presenta para la salud, su concentración en el medio se verá aumentada (Álvarez, 2014).

1.1.2 Ibuprofeno

Es un analgésico, antiinflamatorio no esteroideo utilizado en el tratamiento de migraña, dolor muscular, artritis y fiebre, cuya actividad farmacológica está basada en la inhibición de la síntesis periférica de prostaglandinas que están encargados del procedimiento inflamatorio (Sabri y col., 2012) y su estructura química se menciona en la Figura 1. La tasa de excreción de sus ingredientes activos sin metabolizar es del 10% al 15% (Revista Cubana de Farmacia, 2016), mientras que el 90% restante se elimina en forma de metabolitos glucurónidos (Agencia Española de Medicamentos y Productos Sanitarios, 2016) y además el cuerpo humano los degrada en metabolitos hidroxibuprofeno, carboxi-ibuprofeno y ácido carboxi-hidratrópico (Sabri y col., 2012).

El ibuprofeno al ser un fármaco ácido por tener su pKa en 4,9 (Lindqvist y col., 2005) no es fácilmente adsorbido por lodos en plantas de tratamiento de aguas residuales (PTAR) y permanecen en fase acuosa.

Figura 1. Estructura química del ibuprofeno



Fuente: Rayo y col., 2014

Las vías industriales se identifican como las principales rutas de contaminación de ibuprofeno en los ambientes acuáticos. La contaminación industrial se genera debido a la introducción de efluentes no tratados de las empresas farmacéuticas, mientras que la contaminación doméstica se debe al uso de ibuprofeno como una droga medicinal por seres humanos y animales. Por lo tanto, el fármaco y sus productos metabolizados ingresan en el recurso hídrico a través de plantas de tratamiento de aguas residuales. A veces, los metabolitos formados son más peligrosos que los compuestos orgánicos originales (Madhavan y col., 2010).

Aguirre (2013) ha fusionado resultados de la concentración de este contaminante en varios puntos de emisión en la ciudad de Cádiz, España, verificándose que los mayores valores se reportan de las Plantas de Tratamiento de Aguas Residuales (PTAR) en donde llegan descargas de todo tipo, como se puede identificar en la Tabla 1

Tabla 1. Concentración de ibuprofeno en puntos de medición

Fuente	Ibuprofeno ($\mu\text{g L}^{-1}$)
Lago	0,01
Río	0,05 / 2,3
Mar	0,01
Planta tratamiento de aguas negras	0,03 / 0,7 / 2,1 / 7,1 / 20
Planta de tratamiento de aguas residuales	0,5 / 0,8 / 1,0 / 1,3 / 2,6 / 3,0 / 6,3 / 10,1 / 24,6

Fuente: Aguirre y col., 2013

En cuanto a los efectos negativos que puede causar el ibuprofeno en fuentes de agua se reporta que a una concentración alta de 13,4 mg/L afecta la reproducción de la *Daphnia magna*, importante especie indicadora de efectos tóxicológicos en el agua (Behera y col., 2011) mientras que a concentraciones bajas tales como 250 ng/L produce el daño de la membrana de la glándula digestiva del mejillón *M. galloprovincialis* (Gonzalez y col., 2012). Además, causa la estimulación de la producción de ácido abscísico en la lenteja de agua *Lemna minor* (Sabri y col., 2012) lo que genera el cese de la división celular inhibiendo su crecimiento (Behera y col., 2011) y en el cangrejo *Carcinus maenas*, en presencia de ibuprofeno más otros contaminantes, altera la oxidación de las células y causa estrés oxidativo, generando daños en el ácido desoxirribonucleico (Aguirre y col., 2013).



1.2 Tecnologías para eliminar ibuprofeno de aguas contaminadas

Se han reportado trabajos de eliminación de ibuprofeno mediante diferentes técnicas las cuales se adjuntan en la Tabla 2, los inconvenientes de estos métodos se traducen en la generación de lodos tóxicos, la inversión económica, los recursos necesarios de operación de alta tecnología, los requisitos de personal calificado y la eliminación incompleta del contaminante especialmente cuando se trata de concentraciones muy bajas, estos factores los convierten en métodos infructuosos y actualmente no pueden considerarse opciones viables.

Tabla 2. Tecnologías para eliminar ibuprofeno de fuentes hídricas

Método	Porcentaje de remoción (%)	Referencia	Observaciones
Ozonización	80%	Nakada y col., 2007	Mayores costos de operación.
Degradación electroquímica	60-95%	Ciríaco y col., 2009	Alto costo de instalación, operación e insumos (electrodo diamante dopado con boro).
Fotocatálisis heterogénea	75%	Mendez y col., 2008	Generación de sustancias más tóxicas.
Sonólisis, fotocátalisis, sonofotocatálisis	23%, 61% y 85% respectivamente	Madhavan y col., 2010	Deficiencia en concentraciones bajas y formación de radicales libres oxidantes.

1.3 Biosorción

Es la transferencia de soluto de una solución gaseosa o líquida (adsorbato) a un sólido (biosorbente) por interacciones físicas con las partículas sólidas (microporos y/o sitios activos) o por interacciones químicas con los grupos funcionales (Dalfior, 2013), cuyo proceso termina al alcanzar el equilibrio entre el adsorbato de la solución y el adsorbato retenido en el biosorbente.

Las distintas informaciones bibliográficas acerca de estudios de adsorción indican que este proceso está constantemente siendo estudiado, es así que en la Tabla 3 se reportan estudios de varios tipos de contaminantes emergentes y metales pesados, a continuación se nombraran ciertos de ellos.



Tabla 3. Estudios de biosorción

Adsorbato	Adsorbente	q_{max} (mg/g)	Porcentaje de remoción (%)	Referencia
Diclofenaco sódico y nimesulida	Carbón activado	63,47 y 74,81		Saucier, 2015
Diclofenaco sódico	Bagazo de uva	76,98		Antunes, 2012
Paracetamol	Mesocarpo de coco	38,218		Dalfior, 2013
Verde de malaquita	Nanopartículas de óxido de zinc	322,58		Ghaedi, 2014
Colorante catiónico rojo básico 46	Cascarilla de arroz		93	Amaringo, 2013
Herbicidas como el ácido 2,4-diclorofenoxiacético (2,4-D)	Carbono activado de cáscara de coco	368,0		Njoku, 2015
Hierro	Hueso de aceituna	1,82		Alami, 2010

Los mecanismos de la sorción se engloban dentro de un campo donde se puede hablar de adsorción, absorción y cambio iónico. La adsorción se da cuando se extrae materia de una fase y se la retiene sobre la superficie de otra, llamándose la sustancia concentrada adsorbato y la otra adsorbente. Mientras que, la absorción se da cuando las moléculas de una fase interpenetran uniformemente en los de otra fase conformando una solución en esta segunda. El intercambio iónico implica un intercambio de una sustancia o ion por otra sobre la superficie del sólido.

Existen dos tipos de adsorción según la naturaleza de interacción entre el adsorbato y adsorbente:

- Fisisorción: Es la adsorción que se da por la presencia de las fuerzas de Van der Waals, que conlleva interacciones electroestáticas donde la molécula adsorbida tiene libre movimiento sobre la superficie del sólido adsorbente, no está unido a un sitio específico y que no pueden ser ni enlaces covalentes ni enlaces puramente iónicos (Delgadillo, 2011).
- Quimisorción: Es el proceso que se da cuando la especie adsorbida sufre una modificación como consecuencia de las interacciones químicas con el adsorbente, el mecanismo queda restringido a una monocapa con necesidad de energía de activación mayor que en la fisisorción, siendo esta energía necesaria para las transformaciones químicas de la especie adsorbida, se forman enlaces fuertes en los centros activos del adsorbente porque el contaminante se ubica sobre sitios de carga opuesta sobre la superficie del adsorbente (Delgadillo, 2011).

El proceso de biosorción funciona eficientemente a bajas concentraciones de adsorbato, son flexibles en cuanto a condiciones de experimentación de caudal y concentración, se puede regenerar el adsorbente y recuperar sustancias retenidas. Además, presenta un bajo costo al emplear desechos como adsorbentes.



La capacidad de adsorción puede expresarse mediante la Ecuación 1, donde, q_e es la cantidad de adsorbente adsorbido por unidad de masa de biosorbente (mg/g); C_o y C_e son la concentración inicial y en el equilibrio del adsorbato (mg/L), respectivamente; V es el volumen de disolución (L) y m , la masa de biosorbente (g).

Ecuación 1

$$q_e = \frac{(C_o - C_e)V}{m}$$

Además, es de vital importancia las propiedades del bioadsorbente tales como: tamaño, porosidad, naturaleza química, solubilidad y grupos funcionales, así como, las condiciones del medio tales como pH y temperatura (Álvarez, 2014).

1.3.1 Adsorbentes

Los materiales naturales ya aprovechados o desechados pueden ser usados como adsorbente ya sea en su forma original o luego de alguna modificación química. Estos se los puede clasificar de dos formas:

1. Por su naturaleza:
 - Orgánico
 - Inorgánico

2. Por su disponibilidad:
 - Natural: Es el que existe en la naturaleza y se utiliza como tal o con un tratamiento menor tales como madera, zeolita, arcilla, turba, carbón, lignito, etc.
 - Industrial / Agrícola / Residuos o subproductos domésticos tales como escorias, lodos, ceniza, bagazo, fango rojo, carbones activados.
 - Productos sintetizados: alginato, soja desaceitada, sulfuro de hierro sintético, alúmina activada impregnada de alumbre, cemento de sorel, alunita calcinada (Vinueza y col., 2013).

1.3.1.1 Posos de café y tallos de rosas en el Ecuador

La situación geográfica del Ecuador nos beneficia a poseer las condiciones necesarias e ideales para tener una producción de excelencia.

Los cultivos de café se dan a lo largo y ancho del país, exactamente en 21 provincias llegando incluso a producirse en las Islas Galápagos, convirtiéndose en uno de los pocos países en el mundo que exportan café en todas sus variedades: arábigo lavado, arábigo natural y robusta, esta producción ayuda al Ecuador en el ámbito económico por la generación de divisas e ingresos que su exportación implica reportándose un valor de 6.468 toneladas en el año 2015. La densidad promedio de plantas de café arábigo es de 3.419 plantas por hectárea, mientras que el rendimiento promedio de café para el año 2016 fue de 0,48 toneladas por hectárea (Ministerio de Agricultura, Ganadería, Acuicultura y Pesca, 2016), estimándose una producción total de 42.000 kg en el 2015.



El poso de café es el café agotado producto de la extracción, que consiste en el café tostado y molido que ya se les fue extraído sus compuestos solubles en agua, este desecho se lo destina un 27% a la generación de energía a partir de su incineración, 60% a los rellenos sanitarios y usadas en menor medida como fertilizantes orgánicos y enmienda de suelos. Se reporta que por cada 1.000 g de cereza de café se generan 104 g de poso de café, lo que representa el 10% de la producción (Calle y col., 2017).

En cuanto a las rosas son las que mayor peso en exportaciones poseen es así que en el año 2012 se exportó 572 millones de dólares lo que representa el 74,7% de la exportación total de flores en el país. La situación geográfica del país permite contar con micro climas y una luminosidad que proporciona características únicas a las flores como son: tallos gruesos, largos y totalmente verticales, botones grandes y colores sumamente vivos.

En el año 2016 en el Ecuador, del total de las flores producidas a nivel nacional, de un aproximado de 4.200 hectáreas, el 74% corresponde a rosas, es decir, 3.100 hectáreas (Ministerio de Comercio exterior, 2016)

Las rosas al ser empleadas en los adornos florales, se producen un desecho del 50% del total del tallo, las que finalmente son desechadas y destinadas a los rellenos sanitarios o a la fabricación de compost, es por ello que resulta interesante evaluar el uso de posos de café y tallos de rosas como biosorbente en el proceso de remoción de ibuprofeno.

1.3.2 Factores que influyen en la biosorción

Como cualquier proceso, la biosorción se ve afectada por una serie de parámetros que pueden favorecer o afectar:

Los factores internos incluyen la composición físico-química del adsorbente y del adsorbato, el cual determina el mecanismo de la adsorción.

Los diferentes biosorbentes presentan características químicas con una variedad de grupos funcionales que contribuyen al proceso de remoción, tales como hidroxilo, carbonilo, carboxilo, sulfhidrilo, tioéter, sulfonato, amina, amida, imidazol, fosfonato, fosfodieser. Los sitios activos se caracterizan por ser disponibles, afines con el contaminante y deben estar presentes en una cantidad considerable. La fuerza de enlace es importante para la unión covalente con un sitio incluso si el mismo ya está ocupado (Bustamante, 2011).

Los factores externos incluyen el sistema de contacto: continuo o discontinuo, tiempo de contacto, velocidad de agitación, temperatura del medio, pH.

El pH es el parámetro más importante y determinante para la biosorción debido a que afecta a la química de la solución y la actividad de los grupos funcionales de la biomasa, el aumento en la dosificación del adsorbente provoca un incremento en la eficacia de remoción, ya que se ofrece más poros y más superficie activa de contacto, en varios estudios se ha demostrado que una baja concentración inicial del contaminante aumenta el porcentaje de remoción, mientras que bajas temperaturas facilitan la remoción.



1.3.3 Estudios de adsorción de ibuprofeno sobre diversos materiales

En la Tabla 4 se describen varios estudios investigativos de biosorción que se han realizado con el ibuprofeno, empleando como materiales biosorbentes de característica inorgánica desde esferas huecas de sílice hasta carbones activados.

Tabla 4. Estudios de biosorción con ibuprofeno

Material	Concentración inicial (mg/L)	q_{max} (mg/g)	Porcentaje de remoción (%)	pH	Referencia
Esferas huecas de sílice mesoporosa		969			Zhu y col., 2007
	60	138,9	99,5	2	Mestre y col., 2009
	20	57,1	95,3	2-4	Mestre y col., 2007
Carbón activado	50	16,94		2	Dubey y col., 2010
	100	10,74		3	Essandoh y col., 2015
	20		99	2	Mondal y col., 2016
Agregados de arcilla expandida Nanocompuestos de carbono-hierro	1		93		Dordio y col., 2009
	80		65	2,5	Singh y col., 2012

Como se manifiesta en estos estudios las concentraciones empleadas fueron desde 100 a 1 mg/L trabajando a un pH ácido, los mejores valores de biosorción fueron de hasta el 99% de remoción.

1.3.4 Estudio de equilibrio

El estudio de equilibrio se efectúa mediante el análisis de las isotermas de adsorción a una temperatura constante, para obtener los valores se grafica la cantidad adsorbida de contaminante por unidad de masa de la biomasa frente la concentración de equilibrio. Predicen la capacidad de un adsorbente para remover un contaminante presente en aguas.

Existen dos modelos matemáticos para ajustar los datos: Langmuir y Freundlich

- **Modelo matemático de Langmuir**

Es usado para procesos de adsorción de un soluto desde una fase líquida por una fase sólida. Supone una atracción y posteriormente unión entre el contaminante y la superficie adsorbente, suponiendo que la adsorción tiene lugar en centros activos de la superficie del adsorbente y luego de eso no ocurre adsorción en ese mismo punto, la adsorción de soluto por el adsorbente se origina a partir de una monocapa superficial sin interacciones entre moléculas adsorbidas, la energía de adsorción es constante y uniforme, la afinidad de cada lugar de interacción por las moléculas de soluto es la misma y las moléculas de soluto adsorbidas están localizadas y por lo tanto no se



mueven sobre la superficie (Vinueza y col., 2013). La Ecuación 2 describe el modelo matemático de Langmuir.

Ecuación 2

$$q_{eq} = \frac{K_L q_{max} C_{eq}}{1 + K_L C_{eq}}$$

La ecuación linealizada se presenta en la Ecuación 3

Ecuación 3

$$\frac{1}{q_{eq}} = \frac{1}{q_{max}} + \left(\frac{1}{K_L * q_{max}} * \frac{1}{C_{eq}} \right)$$

Donde q_e son los mg del contaminante acumulado por g de biomasa (mg/g), C_{eq} son los mg del contaminante residual en la solución (mg/L), q_{max} y K_L son las constantes de la ecuación de Langmuir. Representan la máxima capacidad de adsorción para una monocapa completa en mg/g y la afinidad entre el adsorbente y el adsorbato en L/mg.

El factor de separación R_L que se indica en la Ecuación 4 es un factor adimensional y permite comprobar la isoterma de adsorción.

Ecuación 4

$$R_L = \frac{1}{1 + K_L C_0}$$

Donde C_0 es la concentración inicial de ibuprofeno (mg/L).

El valor de R_L indica que la naturaleza de la isoterma es irreversible ($R_L = 0$), favorable ($0 < R_L < 1$) o desfavorable ($R_L = 1$) (Mondal y col., 2016)

- **Modelo matemático de Freundlich**

El modelo de Freundlich procede de la relación entre el soluto adsorbido y la concentración de equilibrio, apartando la presencia de otros iones de disolución o variaciones de pH, supone que la superficie no es monocapa, que es heterogénea y que los puntos activos tienen distintas afinidades, primero se ocupan los de mayor afinidad y después se ocupa el resto, existiendo posibles interacciones laterales entre las moléculas sorbidas (Dordio y col, 2009; Alami y col., 2010)

La ecuación de Freundlich se expresa en la Ecuación 5

Ecuación 5

$$q_{eq} = K_F C_{eq}^{1/n_F}$$

Donde K_F se representa en L/mg y está relacionado con la afinidad y n_F es un parámetro de la ecuación congruente con la intensidad de la adsorción.

Linealizando, se tiene la Ecuación 6.



Ecuación 6

$$\log q_{eq} = \frac{1}{n_F} \log C_{eq} + \text{Log} K_F$$

Al graficar se obtiene K_F y n_F

1.3.5 Estudio cinético de adsorción

El estudio cinético permite determinar la velocidad de adsorción del adsorbato por el adsorbente, es decir, conocer el comportamiento de la adsorción en función de tiempo. Existen varios modelos que describen el proceso:

- **Lagergren pseudo primer orden**

Este modelo está basado en la adsorción física del adsorbato sobre el adsorbente (Delgadillo, 2011) y se expresa en la Ecuación 7:

Ecuación 7

$$\frac{dq_e}{dt} = K_1(q_e - q_t)$$

Donde q_e es la capacidad de adsorción en el equilibrio en mg/g, q_t es la capacidad de adsorción en un tiempo (mg/g) y K_1 es la constante de velocidad de la ecuación, expresada en min^{-1}

De la integración de esta ecuación en los límites $t=0, q_t=0$ y $t=t, q_t=q_t$ se tiene la Ecuación 8:

Ecuación 8

$$q_t = q_e(1 - e^{-tK_1})$$

Que al linealizar se tiene la Ecuación 9

Ecuación 9

$$\log(q_e - q_t) = \log q_e - t \frac{K_1}{2.303}$$

- **Pseudo segundo orden**

Este modelo se usa para ajustar la quimisorción del adsorbato sobre la superficie de materiales adsorbentes microporosos y mesoporosos en fase líquida (Delgadillo, 2011) y viene dado por la Ecuación 10:

Ecuación 10

$$\frac{dq_t}{dt} = K_2(q_e - q_t)^2$$



Donde q_t es la concentración del soluto fijada por adsorción en la superficie del adsorbente mg/g en un tiempo t (min), q_e es la concentración del soluto fijada por adsorción en el equilibrio mg/g y K_2 es la constante cinética de la ecuación de pseudo segundo orden en g/mg.min

De la integración de esta ecuación en los límites $t=0, q_t=0$ y $t=t, q_t=q_t$ se tiene la Ecuación 11:

Ecuación 11

$$q_t = \frac{t}{\frac{1}{K_2 q_e^2} + \frac{t}{q_e}}$$

Donde $K_2 q_e^2$ es la velocidad de adsorción inicial expresada en mg/g y representada por h .

El modelo de pseudo-segundo orden es más adecuado para la descripción del comportamiento cinético de adsorción en el cual la adsorción química es la que controla su velocidad.

Al linealizar se tiene la Ecuación 12

Ecuación 12

$$\frac{t}{q_t} = \frac{1}{h} + \frac{1}{q_e} * t$$

1.3.6 Estudio termodinámico

Los valores obtenidos del estudio cinético y de equilibrio permiten determinar los parámetros termodinámicos. Los parámetros termodinámicos como cambio de energía libre de Gibbs (ΔG°), cambio de entalpía (ΔH°) y cambio de entropía (ΔS°) son utilizados para comprender el comportamiento termodinámico del proceso de adsorción y se calculan usando las ecuaciones 13-15.

Ecuación 13

$$\Delta G^\circ = -RT \ln K_c$$

Ecuación 14

$$K_c = \frac{C_a}{C_e}$$

Ecuación 15

$$\Delta G^\circ = \Delta H^\circ - T \Delta S^\circ$$

La relación entre la constante de equilibrio y la temperatura está dada por la ecuación de Van't Hoff representada en la Ecuación 16.

Ecuación 16

$$\ln K_c = \frac{-(\Delta H^\circ)}{RT} + \frac{\Delta S^\circ}{R}$$



Donde K_C es la constante de equilibrio, C_a es la cantidad de ibuprofeno adsorbido en equilibrio (mg/L), C_e es la concentración de ibuprofeno que permanece en la solución en equilibrio (mg/L), T es la temperatura de la solución (K) y R es la constante de gases.

La entalpía isostérica ΔH° y entropía ΔS° de adsorción también se calcula a partir de la pendiente y de la intersección de la gráfica de $\ln(K_C)$ frente a $1/T$, respectivamente.

1.4 Técnicas de caracterización

1.4.1 Análisis infrarrojo

La espectroscopia de transmisión de infrarrojo con transformada de Fourier (FTIR) se emplea en la caracterización de diversos compuestos para identificar los grupos funcionales presentes en las muestras. El principio básico detrás de la espectrometría molecular es que las moléculas absorben energía de la luz en longitudes de ondas específicas, conocidas como sus frecuencias de resonancia (vibración). Esta técnica es sensible a la estructura ya que reflejan las vibraciones características de los grupos de átomos por lo que se emplean para identificar especialmente los grupos orgánicos. La zona geográfica, el periodo estival, la especie, la textura, la madurez son factores que influyen en el contenido de grupos funcionales del bioadsorbente (Pinzón y col., 2008).

Un espectrómetro infrarrojo funciona con una pequeña muestra que es colocada en una celda infrarroja, donde es sometida a una fuente de luz infrarroja, la cual hace un barrido a través de las diversas longitudes de onda.

La variación en las bandas de absorción de los espectros FTIR correspondientes al material adsorbente antes y después del contacto con la especie adsorbida, revela los grupos funcionales que intervienen en el proceso de adsorción (Pinzón y col., 2008).

1.4.2 Espectrofotometría UV-VIS

La espectrometría ultravioleta-visible o espectrofotometría UV-Vis involucra la espectroscopia de fotones en la región de radiación ultravioleta-visible. Utiliza la luz en los rangos visible y adyacentes como el ultravioleta (UV) cercano y el infrarrojo (IR) cercano. En esta región del espectro electromagnético, las moléculas se someten a transiciones electrónicas entre los orbitales atómicos y/o moleculares de la sustancia.

Cuando la radiación incide sobre un cuerpo, se pueden dar dos acontecimientos; ciertos átomos llamados cromóforos absorben radiación y se ven representados por los máximos valores de absorción ó en las moléculas existen también átomos o grupos de átomos que no absorben radiación, se denominan como grupos auxocromos.

La ley de Lambert-Beer establece que la absorbancia de una solución es directamente proporcional a la concentración de la solución. Por tanto, la espectrometría UV/VIS puede emplearse para obtener la concentración de una muestra (Mora y col., 2006).



1.5 OBJETIVOS

1.5.1 General

Evaluar el proceso biosorción de IBUPROFENO en posos de café y tallos de rosas en tanque agitado mediante el análisis a escala de laboratorio de aguas a concentraciones previamente determinadas.

1.5.2 Específicos

- Acondicionar y caracterizar los biosorbentes mediante un análisis físico y químico.
- Analizar y optimizar el proceso de biosorción frente a los diferentes parámetros involucrados: pH, cantidad de biomasa, tiempo de contacto, concentraciones iniciales del medicamento y otros a escala de laboratorio.
- Obtener la modelación matemática para el estudio cinético, de equilibrio y termodinámico.

1.6 HIPÓTESIS

La remoción de ibuprofeno es posible por el método de biosorción utilizando como biomasa tallos de rosas y posos de café en tanque agitado.

CAPITULO 2

2 METODOLOGÍA

Materiales

Para el presente estudio se empleó los siguientes materiales: crisoles, matraces, espátula, picnómetro, embudo, papel filtro, pipetas, balones de aforo, vasos de precipitación y probeta.

Equipos

En cuanto a equipos se utilizó una balanza analítica marca Sartorius modelo ENTRIS2241-1S, desecador, pHmetro HANNA instruments modelo HI2221, Agitador Thermo Scientific modelo MaxQ4000, estufa Quincy Lab Inc modelo 20AF Lab Oven, plato agitador Corning modelo PC-620D, equipo de reflujo, espectrofotómetro Thermo Scientific Genesys 10S UV-VIS y espectrofotómetro FT-IR Thermo Scientific modelo Nicolet is5.

Reactivos

Los reactivos que se emplearon son biosorbentes (tallos de rosas y posos de café), ibuprofeno puro de Sigma Aldrich, agua destilada, solución de HCl y NaOH 0,1N, metanol de grado analítico 99,9% .

2.1 Obtención y acondicionamiento de las biomasas

2.1.1 Posos de café

Los posos de café se obtuvieron de la cafetería El Nogal ubicado en la Av. Loja, los cuales corresponden a una mezcla de cafés de distintas casas comerciales. En la Figura 2 se presenta la preparación y acondicionamiento que consistió en someter a varios ciclos de lavado con agua destilada hasta obtener una solución incolora (Figura 2.1), se secó en una estufa a 60°C durante 24 horas (Figura 2.2) y se colocó en un desecador hasta su enfriamiento (Figura 2.3). Posteriormente, se tamizó la muestra hasta obtener la granulometría de 0.0165 plg (Figura 2.4) y se guardó en una funda hermética (Bustamante, 2011).

Figura 2. Acondicionamiento de posos de café



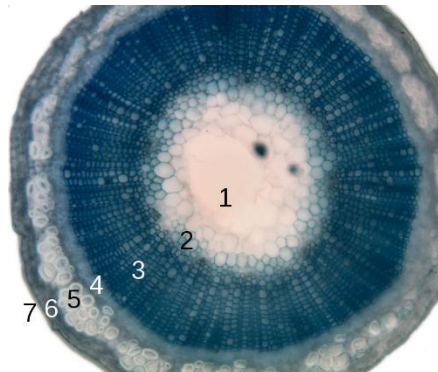


2.1.2 Tallos de rosas

1. Floristería Bella Flower

Los tallos de rosas fueron recolectados en la Av. Gonzales Suárez y Guapondélig. Para su preparación se extrajo la parte llamada epidermis y corteza del tallo de rosa como se puede observar en la Figura 3, posterior a esto se realizó varios lavados con agua destilada (Figura 4.2), se secó en una estufa por 24h y a 60°C de temperatura (Figura 4.3), luego se trituro en un molino manual (Figura 4.4) y se emplearon los tamices U.S.A. Standard Test Sieve para obtener la granulometría deseada que en este caso fue de menor a 0,0165 plg (Figura 4.5). Finalmente, se guardó en una funda hermética.

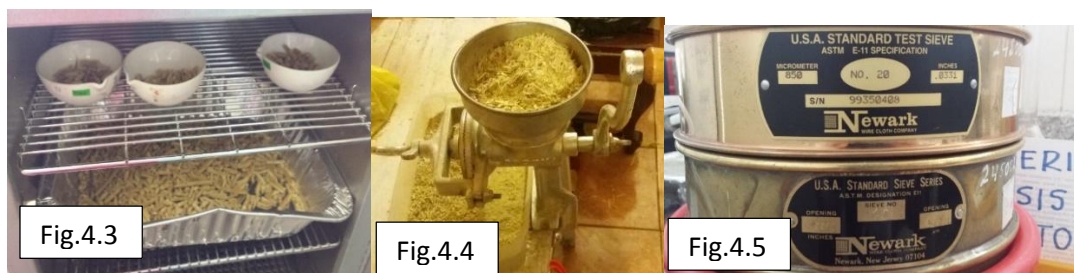
Figura 3. Partes del tallo de rosa desde un corte transversal



Corte transversal de un tallo en el que se observa la estructura primaria. 1- médula 2- protoxilema 3-xilema primario 4-floema primario 5-fibras de esclerénquima 6-corteza 7- epidermis

Figura 4. Acondicionamiento de tallos de rosa obtenidos de la floristería Bella Flower





2. Arreglos florales de la Iglesia de San Blas

Se recolectaron los tallos de rosas de los arreglos florales que eran catalogados como desechos luego de su vida útil en la Iglesia de San Blas ubicado en las calles Simón Bolívar y Manuel Vega. De esta fuente se obtuvieron residuos de distintas especies de rosas.

Para su acondicionamiento se lavó y raspó la parte externa verde del tallo, se secó en una estufa por 24h a 60°C, se siguió con el triturado en un molino manual y se tamizó para obtener la granulometría deseada que en este caso fue menor a 0,0165 plg. Finalmente, se guardó en una funda hermética.

A los tallos de rosas obtenidos de la floristería se los identificará con las siglas TRSC mientras que a los tallos de rosa de la Iglesia de San Blas como TR

2.2 Caracterización de los biosorbentes

2.2.1 Caracterización física

2.2.1.1 Contenido de Humedad

Método de secado

Para la determinación del contenido de humedad se colocó aproximadamente 75 g de muestra húmeda en un crisol (Figura 5.1), las muestras fueron llevadas a la estufa por un periodo de 24 horas a 60°C (Figura 5.2), una vez cumplido este tiempo se enfrió en el desecador por 10 minutos y se pesó las muestras secas. El proceso fue realizado por un tiempo hasta cuando la diferencia entre dos pesadas consecutivas no difiera en más del 0,05 g. El resultado se obtuvo al aplicar la Ecuación 17 para contenido de humedad en un sólido expresado en base húmeda (Tinoco y col., 2010)

Ecuación 17
$$\%hum = \frac{PMH - PMS}{PMH} * 100$$

Ecuación 18 PESO PERDIDO = CONTENIDO DE AGUA = PMH – PMS

Donde PMH significa el peso de la muestra húmeda (g) y PMS es el peso de la muestra seca (g)

Figura 5. Determinación del contenido de humedad



2.2.1.2 Densidad real

Método del picnómetro

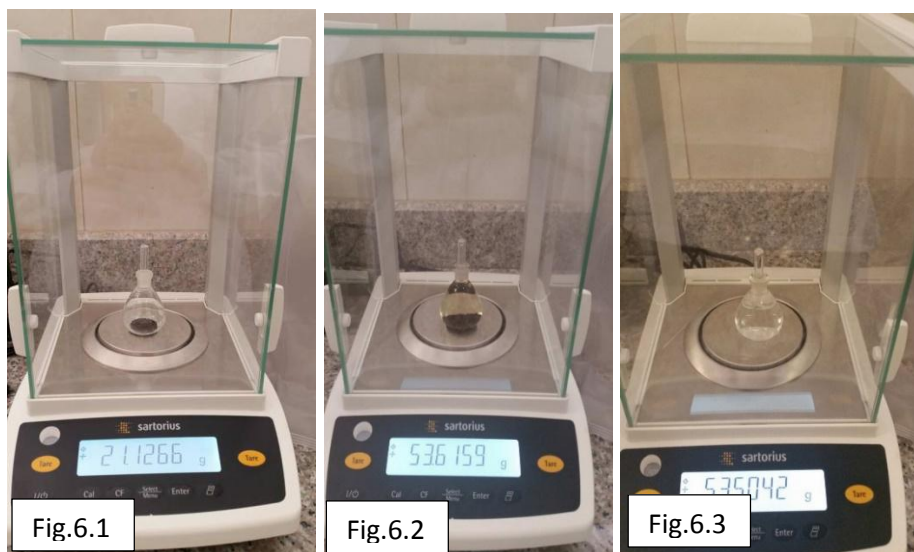
Para aplicar este método se pesó el picnómetro vacío, se colocó la cantidad de 1 a 5 g de muestra y se volvió a pesar (Figura 6.1), luego con cautela el picnómetro fue llenado hasta el enrase con agua destilada o con cualquier líquido en el que la muestra sea inmisible y se volvió a registrar su peso (Figura 6.2). Finalmente, se pesó el picnómetro únicamente con el líquido (Figura 6.3) y se aplicó la Ecuación 19 (Centro Documentación De Estudios y Oposiciones [CEDE], 2011).

Ecuación 19

$$\delta = \frac{m \cdot \delta_L}{m + (P+L) - (P+m+L)}$$

Donde m es la masa del biosorbente (g); P+L es el peso del picnómetro más el líquido (g); P+m+L representa el peso del picnómetro más la masa del biosorbente más el líquido (g) y δ_L es la densidad del líquido de inmersión (g/mL)

Figura 6. Determinación de densidad real con el método del picnómetro



2.2.1.3 Densidad aparente

Método de la probeta

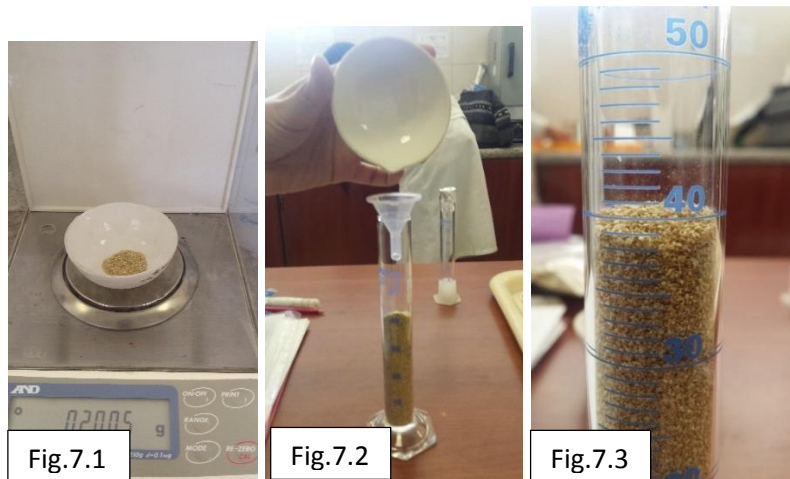
Con el fin de determinar la densidad aparente con el método de la probeta se colocó una cantidad de biomasa determinada en un crisol y se pesó con ayuda de la balanza analítica (Figura 7.1), luego se colocó la muestra en una probeta (Figura 7.2) y se golpeó la misma en su base rítmicamente para eliminar el aire. Finalizamos con la medición del volumen en mL ocupado por la biomasa en la probeta (Figura 7.3). Aplicar la Ecuación 20 (Atarés, 2009).

Ecuación 20

$$\delta = \frac{m}{v}$$

Donde m representa la masa del biosorbente y v es el volumen ocupado por el biosorbente en la probeta.

Figura 7. Determinación de la densidad aparente por el método de la probeta



2.2.1.4 Porosidad

Esta característica es importante porque el tamaño de los poros determina el paso del adsorbato con o sin dificultad hacia la superficie interna del adsorbente. El volumen ocupando los espacios vacíos o volumen poroso por unidad de volumen total o porosidad se determina con los datos de densidad real y densidad aparente expresada en porcentaje con la siguiente Ecuación 21 (Rodríguez, 2010).

Ecuación 21

$$\varepsilon = \frac{\delta_{real} - \delta_{aparente}}{\delta_{real}} * 100$$

2.2.2 Caracterización química

2.2.2.1 Determinación de pH en el Punto de Carga Cero

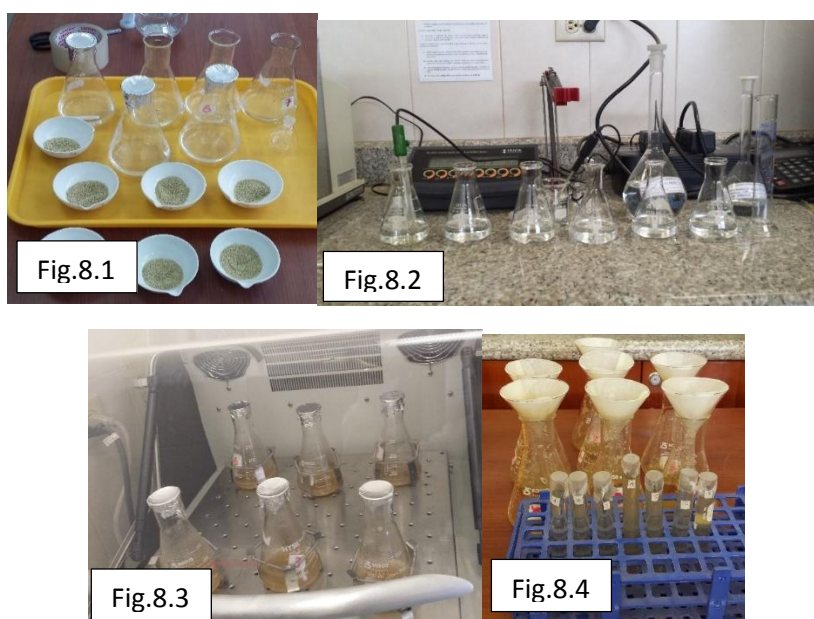
El punto de carga cero (PZC) es el valor del pH en el cual el número de sitios negativos y positivos es equivalente, es decir, la carga externa e interna total de las partículas sobre la superficie de la biomasa adsorbente es nula (Franks y col., 2003).

El PZC nos indica la distribución de cargas global sobre la superficie del biosorbente y consecuentemente la capacidad para retener contaminantes iónicos, estableciendo el rango más óptimo de pH para alcanzar una adsorción eficiente de cualquier contaminante de naturaleza aniónica o catiónica en solución (Amaringo, 2013).

Los resultados obtenidos de la intersección de la curva del $pH_i = pH_f$ y de la curva de pH_i vs pH_f es el PZC, y detalla que la superficie total del biosorbente estará cargado negativamente cuando el pH del medio sea superior al pH_{PZC} y cargado de manera positiva cuando el pH del medio sea inferior al valor pH_{PZC} (Alami, 2010). Esto es, la remoción de sustancias de naturaleza catiónica será favorecida a un pH menor al pH_{PZC} y los contaminantes aniónicos serán retenidos a pH superiores al pH_{PZC} (Amaringo, 2013).

En primera instancia se colocó 50 mL de agua destilada en cada uno de los erlenmeyers para consecuentemente ajustar el pH con ayuda de las soluciones de Na(OH) Y HCl 0,1N a los valores de 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9 y 10 (Figura 8.1) , luego se añadió 0,5g de biosorbente y se agitó las muestras en el equipo por un periodo de 24 h y 150 rpm, manteniendo una temperatura de 25°C. (Figura 8.3). Transcurrido el tiempo, se filtraron las muestras (Figura 8.4) y se midió el pH. Para obtener el pH en el PZC, se graficaron los valores de pH inicial frente a pH final y se trazó una diagonal o una curva donde pH inicial sea igual a pH final. El punto de carga cero se determinó en el punto donde intersecaron estas dos (Amaringo, 1998).

Figura 8. Determinación de pH en el punto de carga cero





2.2.2.2 Determinación de sitios ácidos y básicos

Para determinar la cantidad de sitios ácidos y básicos del material adsorbente se siguió el método de Boehm, mediante titulaciones ácido-base basado en la neutralización. El hidróxido de Sodio (NaOH) es la base más fuerte generalmente usada, y neutraliza todos los ácidos (incluyendo fenoles, grupos lactónicos y ácidos carboxílicos) mientras que HCl neutraliza elementos de carácter básico asociado a grupos tipo cromeno, pirona y quinona, junto con los electrones π de los planos basales, por lo tanto, tendrán un número de moles que incluye todos estos (Goertzen y col., 2010).

Método de titulación de Boehm

Para el proceso, se colocó en 3 erlenmeyer 50 mL de solución Na(OH) 0,1N y en otros 3 soluciones de HCl 0,1N, después se agregó 1 g de biosorbente a cada muestra (Figura 9.1) y se agitaron las muestras por 24 h, a 150 rpm y a temperatura de 25°C.

Luego de ese tiempo, se filtraron las muestras (Figura 9.2) y se tomó 10 mL de solución para ser tituladas con el agente titulante y se anotó el pH con cada volumen de titulación (Figura 9.3). Se realizó este proceso hasta que la muestra estabilizó su pH.

Con el fin de obtener los resultados se grafica volumen de agente titulante (mL) vs pH y se obtuvo el primer volumen equivalente, luego se obtuvo la derivada de pH dividido para la derivada de volumen de agente titulante y se graficó frente al volumen de agente titulante. Al obtener esta grafica se visualizó un pico que corroboró con el valor obtenido de volumen equivalente en la primera gráfica. Finalmente, se aplicó la Ecuación 22 y Ecuación 23 para sitios básicos y ácidos respectivamente.

Ecuación 22

$$\text{moles de grupos básicos} = \frac{V_a(C_a) - V_{eqNaOH}(C_{NaOH}) \frac{V_a}{V_{alicuota,a}}}{m}$$

Donde moles de grupos básicos es la cantidad de moles de los grupos funcionales básicos en la superficie del biosorbente que reaccionó con el ácido durante la mezcla, (C_a) es la concentración del ácido que va a reaccionar con el biosorbente en la mezcla, V_a es el volumen del ácido que va a reaccionar con el biosorbente en la mezcla, $V_{alicuota,a}$ es el volumen de la alícuota tomada de la reacción de V_a con el biosorbente, (C_{NaOH}) es la concentración de la base (agente titulante) adicionado a la alícuota tomada de la muestra original y $V_{eq NaOH}$ es el volumen de la base (agente titulante) en el que ocurre el punto de equivalencia, en la gráfica es el volumen correspondiente a pH 7.

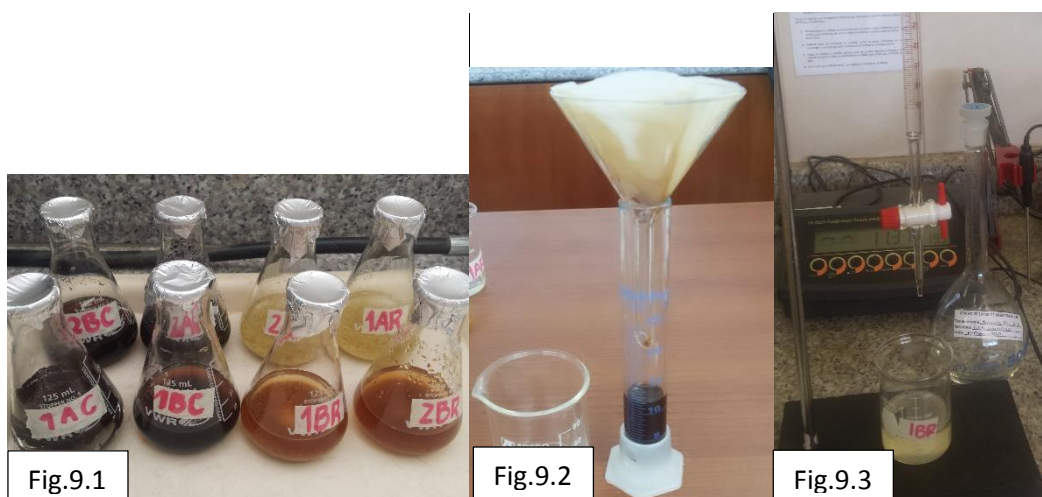
Ecuación 23

$$\text{moles de grupos ácidos} = \frac{V_b(C_b) - V_{eqHCl}(C_{HCl}) \frac{V_b}{V_{alicuota,b}}}{m}$$

Donde moles de grupos ácidos es la cantidad de moles de los grupos funcionales ácidos en la superficie del biosorbente que reaccionó con la base durante la mezcla, (C_b) es la

concentración de la base que va a reaccionar con el biosorbente en la mezcla, V_b es el volumen de la base que va a reaccionar con el biosorbente en la mezcla, $V_{\text{alícuota},b}$ es el volumen de la alícuota tomada de la reacción de V_b con el biosorbente, (C_{HCl}) es la concentración del ácido (agente titulante) adicionado a la alícuota tomada de la muestra original y $V_{\text{eq HCl}}$ es el volumen del ácido (agente titulante) en el que ocurre el punto de equivalencia, en la gráfica es el volumen correspondiente a pH 7.

Figura 9. Determinación de los grupos ácidos y básicos por el método de titulación de Boehm



2.2.2.3 Identificación de grupos funcionales

Se identifican mediante este método de espectroscopia de infrarrojo (FT-IR) los grupos funcionales y activos presentes en la superficie del biosorbente, lo que permite conocer su estructura química.

Este análisis se realizó antes y después del proceso de biosorción con el fin de establecer la relación de los grupos activos identificados y la retención de los contaminantes presentes en una solución acuosa, es decir que la variación en la bandas de adsorción permitió determinar los grupos funcionales que intervienen en el proceso de adsorción (Pinzón y col., 2008).

La determinación de grupos funcionales presentes en los biosorbentes, se realizó mediante el equipo espectrofotómetro infrarrojo, donde se obtuvieron los espectros utilizando un accesorio de reflectancia total atenuada ATR, con un cristal de ZnSe y 16 barridos en el rango de longitud de onda de 4000 a 600 cm^{-1}

2.3 Preparación de soluciones de Ibuprofeno

En este estudio investigativo se empleó Ibuprofeno puro con el fin de evitar comprimidos farmacéuticos que contienen excipientes que podrían interferir en el análisis espectroscópico. Para la preparación de las soluciones seriadas se empleó un blanco de metanol/agua (5:95) con el fin de solubilizar el fármaco, esta solución también sirvió como blanco para la medición de las distintas pruebas en el equipo de UV-VIS.



Se preparó una solución inicial de 100 mg/L para ejecutar las pruebas de calibración en el espectrofotómetro UV-VIS y una solución inicial de 60 mg/L para los estudios de adsorción, a partir de las cuales se realizaron soluciones seriadas por dilución de 40, 20, 10, 5, 1, 0,5 y 0,25 mg/L.

2.4 Curva de calibración para UV-VIS

Previo a las pruebas para el estudio de biosorción de Ibuprofeno determinar la curva de calibración a emplearse en el equipo de UV-VIS para ello se necesita preparar las soluciones descritas en el paso anterior. Con el fin de obtener el rango de linealidad de Lambert-Beer de absorbancia versus concentración de ibuprofeno, se deben leer soluciones patrón de 0,5 mg/L, 1 mg/L, 5 mg/L, 10 mg/L, 20 mg/L, 40 mg/L, 60 mg/L, 80 mg/L y 100 mg/L.

Para determinar la longitud de onda de trabajo se hizo un barrido de absorbancia en función de la longitud de onda con dos soluciones de alta y baja concentración, en este caso 10mg/L y 60mg/L. Luego de obtener la longitud de onda, se procedió a realizar la curva de calibración (Matkovic y col., 2004).

2.5 Efecto de los factores que influyen en la biosorción en agitado (Batch)

En este proceso diferentes muestras serán analizadas considerando el tiempo de agitación, lo cual simula las etapas de mezcla y floculación rápida en una planta de tratamiento de agua (Dalfior, 2013).

Este procedimiento consistió en realizar una experimentación en matraces con diferentes concentraciones en presencia de ciertas cantidades de biosorbente, a diferentes valores de pH. Las muestras combinadas fueron sometidas a una agitación en la cual se experimentaron distintos tiempos. En éste, se pudo obtener mediante la agitación un mayor contacto entre las partículas del adsorbato con el adsorbente, lo que facilita la biosorción. Las muestras fueron analizadas por duplicado y el resultado promedio fue usado en este estudio.

2.5.1 pH

Con el objeto de analizar el pH óptimo para el proceso de adsorción de Ibuprofeno, se empleó 4 soluciones de 60 mg/L reguladas a diferentes pH: 2, 4, 6 y 10 mediante un ajuste con soluciones de HCl o NaOH 1N, se combinó con una biomasa de 6 g/L por cada erlenmeyer y se colocó en el equipo agitador a 150 rpm por un lapso de 1 h a una temperatura de 30°C (Dalfior, 2013).

2.5.2 Concentración de biomasa

Para determinar la cantidad de bioadsorbente adecuado, se analizó diferentes pesos: 1g/L, 3g/L, 6g/L, 9g/L, 12 g/L y 15g/L, con una solución de 60mg/L al pH óptimo obtenido en la prueba anterior, se colocó en el agitador a 150 rpm por un lapso de 1h a una temperatura de 30°C (Dalfior, 2013).



2.5.3 Tiempo de contacto o agitación

Con el efecto de establecer el tiempo de contacto, se tomó los valores óptimos de pH y cantidad de biomasa en g/L obtenidos en las pruebas anteriores, se colocó una solución de 60mg/L en el erlenmeyer y se procedió a agitar las muestras por diferentes tiempos manteniendo constante la temperatura de 30°C y las revoluciones. Los tiempos adecuados fueron 3, 6, 10, 20, 40, 60, 180, 1200 y 1440 minutos (Dalfior, 2013). Estas pruebas además fueron de utilidad para obtener el estudio cinético. Estos datos fueron llevados a los modelos matemáticos de pseudo primer orden y pseudo segundo orden.

2.5.4 Concentración inicial del medicamento

Para la optimización de la concentración inicial se evaluaron diferentes soluciones 10 mg/L, 20 mg/L, 30 mg/L, 40 mg/L, 50 mg/L y 60 mg/L y 80 mg/L, combinadas con pH, biomasa y tiempo de agitación más adecuadas. Sometido a agitación a 30°C y 150 rpm. Esta prueba ayuda para construir los datos de la isoterma de adsorción (Dalfior, 2013).

2.5.5 Temperatura

Para el estudio termodinámico se necesitan soluciones a diferente concentración de ibuprofeno 10 mg/L, 20 mg/L, 30 mg/L, 40 mg/L, 50 mg/L y 60 mg/L, combinadas con las condiciones óptimas obtenidas. Las temperaturas a evaluarse son: 30°C (mismos datos del proceso anterior), 40°C y 50°C. Estos datos deben ser llevados a los modelos matemáticos de Langmuir y Freundlich.



CAPITULO 3

3 RESULTADOS Y DISCUSIÓN

3.1 Caracterización de POSOS DE CAFÉ

3.1.1 Caracterización física

En la Tabla 5 se indican los valores obtenidos de un promedio de tres réplicas para posos de café donde se puede apreciar el alto contenido de humedad que alcanza el 76,97%, la densidad real de 1,29mg/L, la densidad aparente de 0,46g/mL, que concuerda con el valor de 0,4 g/mL reportado por Buenaventura y col. (2002) y con una porosidad estimada de 0,64.

Tabla 5. Determinación de las características físicas de posos de café

Característica	Valor
Contenido de humedad	76,97 %
Densidad real	1,29 g/mL
Densidad aparente	0,46 g/mL
Porosidad	0,64

3.1.2 Caracterización química

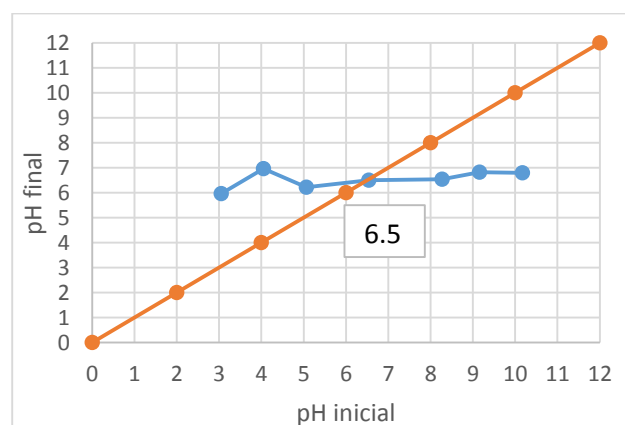
3.1.2.1 Determinación de pH en el punto de carga cero

En la Tabla 6 se muestran los valores de pH obtenidos durante la experimentación.

Tabla 6. Datos para la determinación de pH en el PZC para posos de café

pH INICIAL	pH FINAL
3,05	5,97
4,05	6,97
5,06	6,22
6,54	6,51
8,27	6,54
9,16	6,82
10,17	6,8

Figura 10. Determinación del punto de carga cero de posos de café



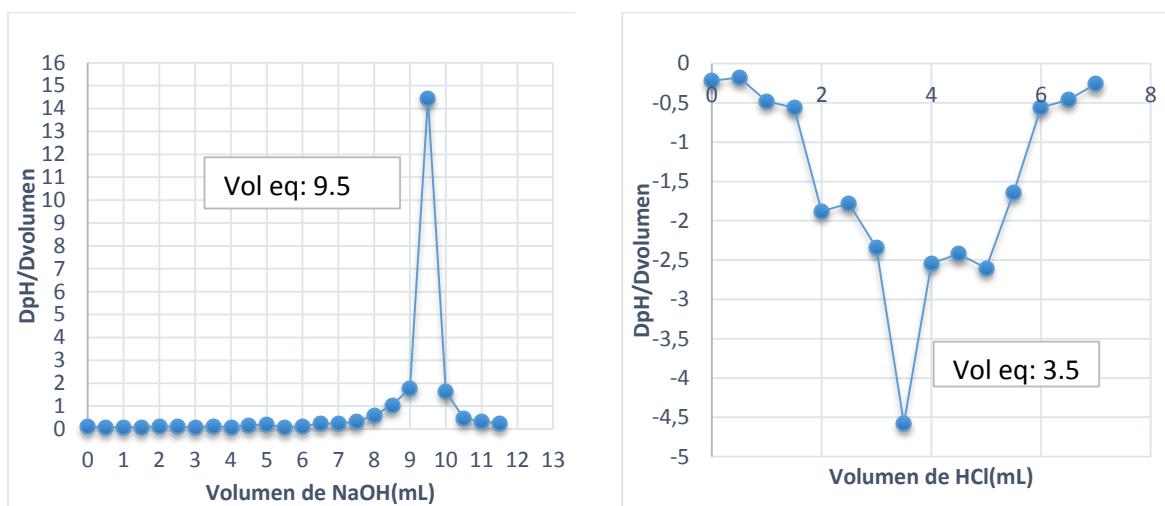
Como se puede notar en la Figura 10, el valor que se obtuvo fue de un pH igual a 6,5, lo que demuestra que la superficie de los posos de café tiene un carácter ácido.



3.1.2.1 Determinación de grupos ácidos y básicos

Para la determinación de grupos ácidos y básicos se siguió el método de Boehm, en el Anexo A se ponen de manifiesto los resultados experimentales, así como los cálculos realizados para la obtención de la deriva de pH y derivada del volumen, datos que nos sirven para trazar la gráfica y obtener el volumen equivalente.

Figura 11. Obtención de volumen equivalente para grupos básicos y ácidos con posos de café



Como se demuestra en la Figura 11, con la derivada del pH con respecto a la del volumen vs volumen se ha podido establecer el valor para el volumen equivalente. A partir de esto, se aplican la Ecuación 22 y Ecuación 23 para determinar los moles de grupos básicos y ácidos.

Tabla 7. Datos promedio para determinar grupos básicos y ácidos de posos de café.

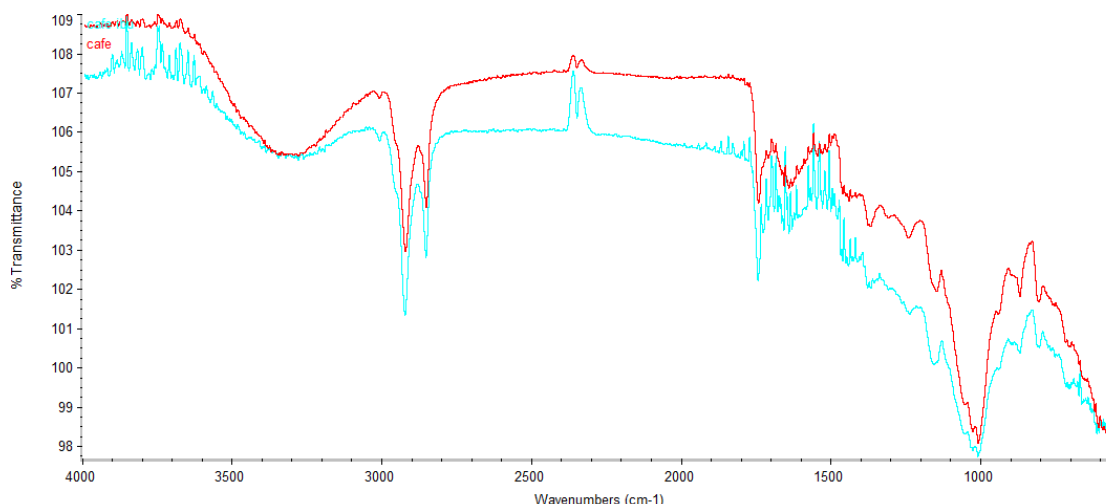
Va(mL)	Ca (N)	VeqNaOH (mL)	C (NaOH) (N)	Valicuota,a (mL)	m (g)	Moles básicos (mequiv-g/g)
50	0,1	9,5	0,1	10	1	0,25
Vb (mL)	Cb (N)	VeqHCl (mL)	C (HCl) (N)	Valicuota,b (mL)	m (g)	Moles ácidos (mequiv-g/g)
50	0,1	3,5	0,1	10	1,0001	3,25

Los resultados de la Tabla 7 indican que la superficie del biosorbente está conformada por un 7,14% de grupos básicos y un 92,86% de grupos ácidos, estos valores son respaldados por la prueba del punto de carga cero que reportó un valor de 6,5, demostrando de esta forma que la superficie de los posos de café es de carácter ácida.

3.1.2.2 Identificación de grupos funcionales

La Figura 12, representa el espectro IR de poso de café antes de la biosorción en color rojo y después de ser empleado en la biosorción en color celeste.

Figura 12. Espectrofotometría de infrarrojo de poso de café antes y después de la biosorción



En el espectro de los posos de café se puede identificar en el rango de longitud de onda alrededor de 3400cm^{-1} algunos modos vibracionales atribuibles al grupo hidroxilo (-OH) relacionados posiblemente a la celulosa, hemicelulosa y lignina (Benitez y col., 2014). Este pico se debe normalmente a variaciones por extensión de los grupos -OH y -NH, los -OH tienden a aparecer en números de ondas más altos, siendo a menudo más ancha que la banda de -NH. El enlace de hidrogeno amplía los picos y los desplaza hacia número de ondas más bajos. Por lo tanto, la forma ancha de gran intensidad entre 3500 a 3100 cm^{-1} es típica y corresponde al enlace -OH con posible traslapo del grupo -NH (Vera y col., 2016).

Entre 2900 y 2800 cm^{-1} se encuentra la presencia de grupos metil y metileno atribuibles al estiramiento simétrico y asimétrico de los enlaces C-H de cadenas alifáticas. Estos picos han sido identificados en café tostado y atribuidos a la cafeína, pero dado que los posos de café empleados han sido extraídos la cafeína, estos picos pueden corresponder a los lípidos presentes en grandes cantidades en el café (Pujol y col., 2013).

Los picos alrededor de 1800 y 1700 cm^{-1} corresponden al estiramiento del grupo carbonilo C=O lo que manifiesta la vibración del grupo carboxilo que puede ser atribuido a la pectina, hemicelulosa y lignina (Benitez y col., 2014).

Después de la adsorción de Ibuprofeno en este biosorbente, hay un cambio en las bandas de absorción asociadas con algunos grupos funcionales, el primero de ellos es el cambio en la forma en el rango de 3900 a 3100 cm^{-1} debido al estiramiento de -OH que indican la presencia de los grupos alcohol libres de ibuprofeno a causa de la adsorción de este medicamento sobre la superficie del poso de café como lo indican Mondal y col., (2016) en su estudio. Además la gran diferencia entre los espectros en la región entre 1600 y 1450 cm^{-1} se puede atribuir a los anillos aromáticos del ibuprofeno y la presencia de un nuevo pico en el espectro del café después de la remoción a 1700



cm⁻¹, podría ser asociado a la interacción a través de puentes de hidrógeno con el C=O que existiría entre el ibuprofeno y la biomasa.

3.2 Caracterización de TR y TRSC

3.2.1 Caracterización física

En la Tabla 8 se indica el valor obtenido para el contenido de humedad de TR que resultó de 65,23 %, densidad real de 1,33 g/mL, densidad aparente de 0,19 g/mL y porosidad de 0,85. Estos resultados han sido validados con el estudio reportado por Velandia y col. (2016) en el cual se obtuvo 65,23 %, 1,3 g/mL y 0,19 g/mL respectivamente. Mientras que para TRSC se obtuvo un valor de contenido de humedad de 52,17 % y densidad aparente de 0,12 g/mL.

Tabla 8. Determinación de características físicas de TR y TRSC

Característica	Valor TR	Valor TRSC
Contenido de humedad	65,23 %	52,17 %
Densidad real	1,33 g/mL	
Densidad aparente	0,19 g/mL	0,12 g/mL
Porosidad	0,85	

3.2.2 Caracterización química

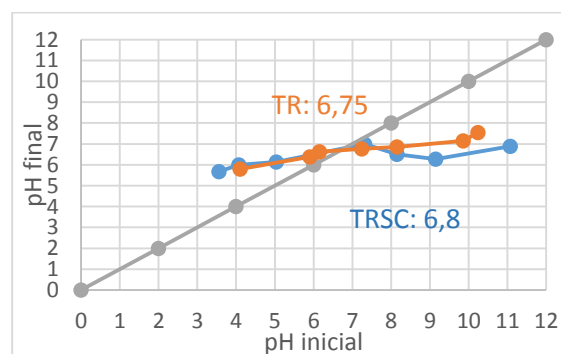
3.2.2.1 Determinación de pH en el punto de carga cero

El valor del punto de carga cero para TR resultó de 6,75 y para TRSC de 6,8 como se puede visualizar en la Figura 13 cuyos datos se presentan en la Tabla 9, a este valor de pH la cantidad de grupos ácidos es equivalente a la de básicos, manifestándose en este punto un levemente carácter ácido de la biomasa.

Tabla 9. Datos para la determinación de pH en el PZC para TR y TRSC

pH inicial TR	pH final TR	pH inicial TRSC	pH final TRSC
4,1	5,8	3,56	5,68
5,9	6,38	4,07	6
6,15	6,63	5,04	6,14
7,24	6,77	7,32	7
8,15	6,85	8,15	6,51
9,86	7,14	9,15	6,27
10,24	7,54	11,07	6,89

Figura 13. Determinación del punto de carga cero de TR

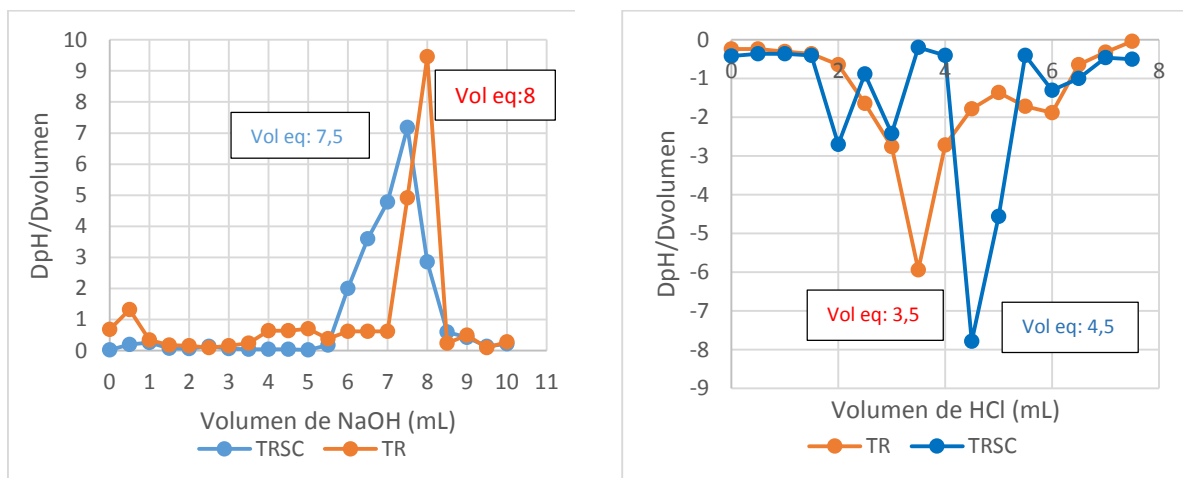


3.2.2.2 Determinación de grupos ácidos y básicos

Para la determinación de grupos ácidos y básicos se siguió el método de Boehm, los resultados se muestran en el Anexo B.



Figura 14. Obtención de volumen equivalente para grupos básicos y ácidos con TR y TRSC



En la Figura 14 se puede visualizar que se ha aplicado los valores obtenidos de la DpH con respecto a Dvolumen vs volumen para poder determinar el volumen equivalente mediante la gráfica. A continuación se calcularon los moles de grupos básicos y ácidos a través del uso de la Ecuación 22 y Ecuación 23.

Tabla 10. Datos promedio para determinar grupos básicos y ácidos de TR y TRSC

	Va (mL)	Ca (N)	VeqNaOH (mL)	C (NaOH) (N)	Valicuota,a (mL)	m (g)	Moles básicos (mequiv-g/g)
TR	50	0,1	7,5	0,1	10	1,0002	1,24
TRSC	50	0,1	8	0,1	10	1,0008	0,99

	Vb (mL)	Cb (N)	VeqHCl (mL)	C (HCl) (N)	Valicuota,b (mL)	m (g)	Moles ácidos (mequiv-g/g)
TR	50	0,1	3,5	0,1	10	1	3,25
TRSC	50	0,1	4,5	0,1	10	1,0003	2,74

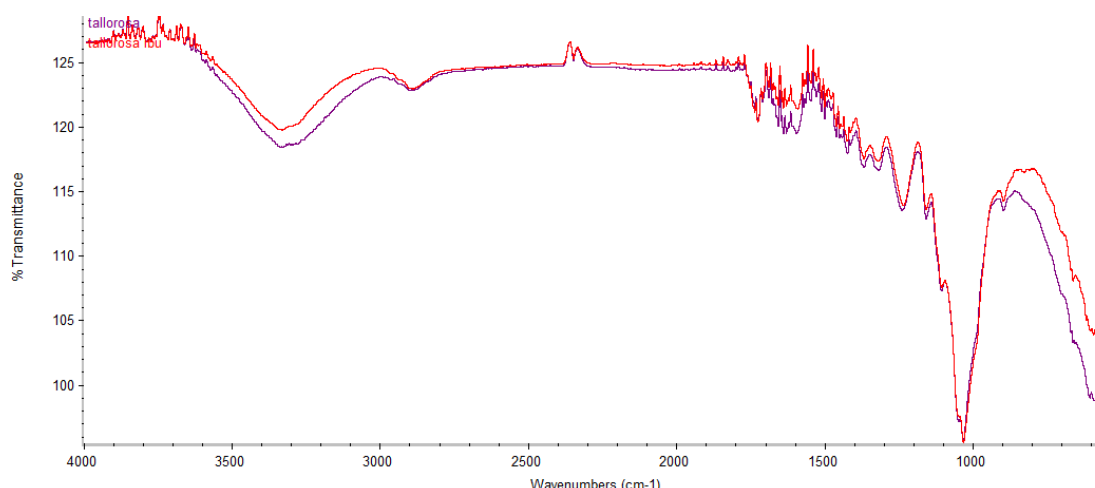
Mediante los cálculos de la Tabla 10 es posible establecer que el biosorbente TR posee un porcentaje del 27,77% de grupos básicos y un 72,23% de grupos ácidos, al igual que TRSC que presentó 26,66% de básicos y 73,34% de grupos ácidos lo que nos permite validar el resultado obtenido en la prueba del punto de carga cero, determinándose que la superficie de TR y TRSC es de carácter ácido.

3.2.2.3 Identificación de grupos funcionales

Como se puede visualizar en la Figura 15, se presenta el espectro de tallos de rosa antes y después del proceso de adsorción de ibuprofeno, TR en estado natural está en color morado y TR luego de la biosorción está en color rojo.



Figura 15. Espectrofotometría de infrarrojo de TR antes y después de la biosorción



Se puede apreciar en el espectro de FTIR del tallo de rosa que después de la adsorción hay una menor modificación del espectro con respecto al original por la baja remoción de ibuprofeno que presentó los TR. Sin embargo, se puede evidenciar un comportamiento similar al de los posos de café, debido a la absorción en la zona alrededor de 3400, y entre los 1600 y 1450 cm^{-1} que son las mismas interacciones mencionadas anteriormente.

3.3 Curva de calibración para UV-VIS

Se prepararon las soluciones de ibuprofeno de 100, 80, 60, 40, 20, 10, 5, 1, 0,5 y 0,25 mg/L. Con las muestras de 10 y 60 mg/L se realizó un barrido con el fin de determinar el valor de la longitud de onda, poniendo a discusión se determinó una longitud de 220 nm por presentar un pico con mayor absorbancia, lo que a su vez es similar al estudio reportado por Tauguinas (2001).

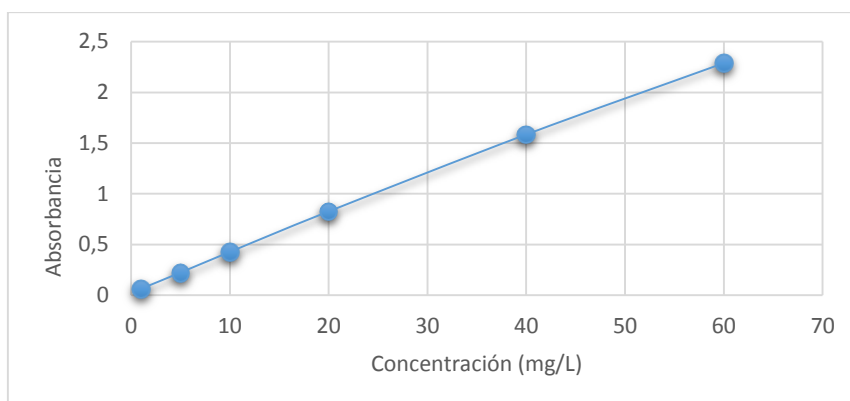
Posterior a esto, las soluciones fueron leídas a dicha longitud de onda, los resultados indicaron que el rango de linealidad de Lambert-Beer se encuentra con un $R=1,00E^{00}$, para ello fueron eliminados los valores de 0,25, 0,5, 80 y 100 mg/L por no cumplir con la linealidad.

La curva de concentración frente absorbancia reportó los siguientes valores de la Tabla 11:

Tabla 11. Valores de absorbancia a una longitud de onda de 220nm y pH=2

Concentración (mg/L)	Regulación de pH para la curva	Absorbancia
60	2,94	2,289
40	2,81	1,585
20	2,72	0,826
10	2,26	0,427
5	2,06	0,223
1	2,58	0,063

Figura 16. Curva de calibración de ibuprofeno a 220nm, pH=2



A partir de los valores obtenidos en la Tabla 11, se obtiene la curva de calibración de ibuprofeno a un pH=2, cumpliendo la linealidad de Lambert-Beer y consiguiendo los siguientes valores:

Pendiente=0,0378

Desviación estándar= $2,50 \times 10^{-2}$

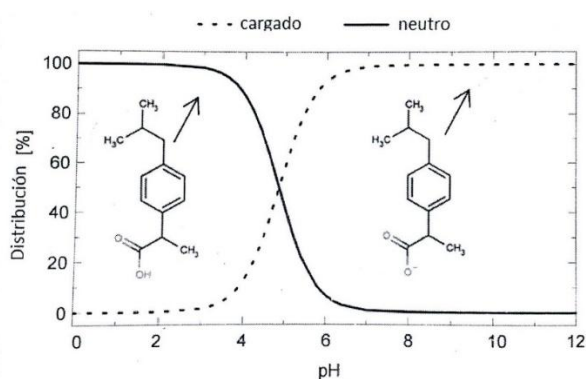
Cabe resaltar que esta curva fue realizada con soluciones reguladas a pH de 2, para los demás valores de pH (4, 6 y 10) se procedió de igual manera, es decir en primer lugar se realizó un barrido mediante el cual se determinó la mejor longitud de onda y a partir de ello, se construyó la curva de calibración, la misma que ha sido validada y los resultados se muestran en el Anexo D.

3.4 ESTUDIO DE LA CAPACIDAD DE ADSORCIÓN DE LOS POSOS DE CAFÉ COMO BIOADSORBENTE DE IBUPROFENO

3.4.1 EFECTO DE pH

El valor el pH es un factor importante no solamente porque modifica la carga superficial de acuerdo al PZC sino también afecta a la especiación del ibuprofeno de acuerdo con la Figura 17, que indica que a medida que aumenta el pH va bajando la cantidad de la molécula en estado neutro y va aumentando en estado cargado.

Figura 17. Especiación del ibuprofeno



Fuente: Singh y col. (2016)



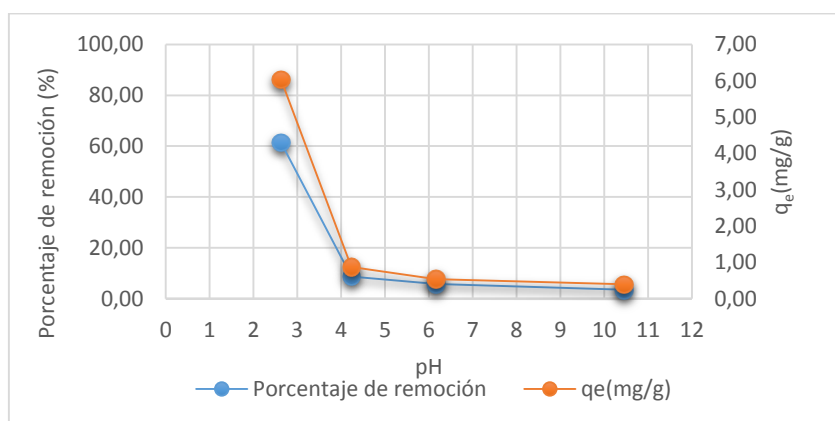
Para la optimización del pH se realizaron una serie de ensayos a una concentración inicial de ibuprofeno de 60mg/L, dosis de biomasa de 6g/L, tiempo 1h y variación de pH de 2 a 10. Los resultados se indican en la Tabla 12.

Tabla 12. Resultados experimentales de variación de pH con posos de café

pH inicial	pH final	Porcentaje de remoción (%)	q _e (mg/g)
2,63	3,74	61,46	6,04
4,23	6,28	8,70	0,88
6,16	6,38	5,80	0,54
10,45	6,85	3,58	0,39

Resultados de remoción con concentración inicial de 60mg/L, cantidad de biomasa de 6g/L, pH de 2 a 10, 30°C y 1 hora de agitación a 150rpm.

Figura 18. Curva de efecto de pH en posos de café

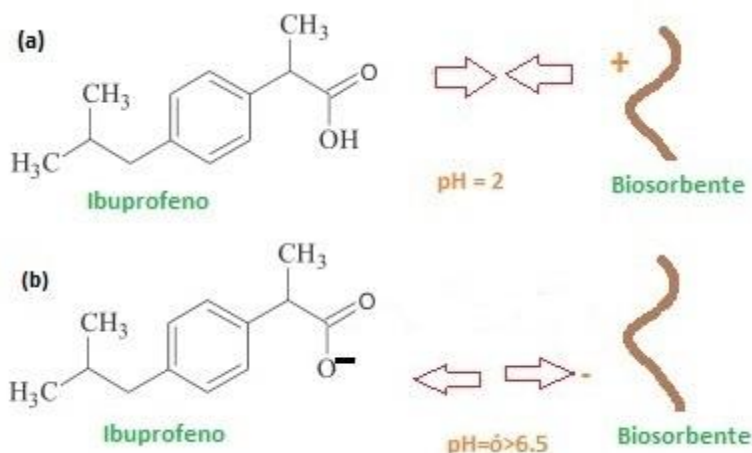


Los resultados indican que se alcanzó una remoción máxima de 61,46% a un pH de 2, similar resultado se obtuvo al analizar q_e, reportándose la mejor capacidad de adsorción de 6,04 mg/g. Además se observa que al aumentar el valor del pH existe una disminución de la adsorción. El mecanismo con el que interviene el pH puede interpretarse por la influencia de dos factores, siendo estos, el pH_{PZC} que es la carga de la superficie del adsorbente y el pKa del medicamento. Cuando se trabaja con un pH del medio por debajo del punto de carga cero la superficie del adsorbente estará cargado positivamente mientras que al estar el pH del medio por encima de este valor, la superficie será negativa. La constante de disociación del ibuprofeno es de 4,91 según Lindqvist y col. (2005), lo que indica que a valores por encima de este el ibuprofeno estará en su estado iónico específicamente aniónica, y al contrario a valores por debajo de este el ibuprofeno estará en su forma molecular neutra que podría llegar a representar más del 99% en moles.

Por tanto, la adsorción se produjo a pH menor a pKa y menor al punto de carga cero, es decir, el ibuprofeno en estado molecular neutro y el adsorbente cargado positivamente lo que incrementa la adsorción drásticamente, posiblemente las cargas positivas promueven la adsorción de la molécula de ibuprofeno neutro como se esquematiza en la Figura 19.a (Mondal y col., 2016), a través de puentes de hidrogeno y otras interacciones. A pH 4 o mayores la superficie del adsorbente fue menos positiva puesto que se iban cargando de manera negativa y baja la especie predominante neutra del ibuprofeno por lo tanto se establecieron repulsiones electrostáticas dándose menor adsorción, esto justifica también que a valores de pH básicos (Figura 19.b) el ibuprofeno

se encuentre desprotonado definiéndose una interacción menor con la superficie de los posos de café (Mestre y col., 2007), prevaleciendo ,las repulsiones electrostáticas.

Figura 19. Efecto de pH en la biosorción de ibuprofeno



Es importante mencionar el cambio de pH que se manifiesta antes y después de la agitación, pudiendo deberse este acontecimiento a la intervención de los grupos funcionales del adsorbente una vez que se encuentra en contacto con la solución ajustando el pH ya sea de manera ácida o básica.

Similares resultados se obtuvieron en el estudio reportado por Mondal y col (2016) en el que se removió el 98,37% trabajando con *Parthenium hysterophorus* modificados químicamente que presentaron un valor de pH en el punto de carga cero de 7,4. Además Mestre y col. (2007) ha experimentado con carbones activados lográndose una remoción de ibuprofeno de más del 90%, en la que se determinó un valor de pH_{PZC} de 7,5, trabajando en ambos estudios con $\text{pH}=2$

3.4.2 EFECTO DE LA DOSIS DE BIOMASA

Para analizar el efecto de la dosis de posos de café sobre la adsorción de ibuprofeno se trabajó experimentalmente con pH igual a 2, concentración de ibuprofeno de 60 mg/L, tiempo de 1 h, 30 °C, bajo 150 rpm y variación de la dosis de biomasa de 1 g/L a 15 g/L. Los resultados se muestran en la Tabla 13.

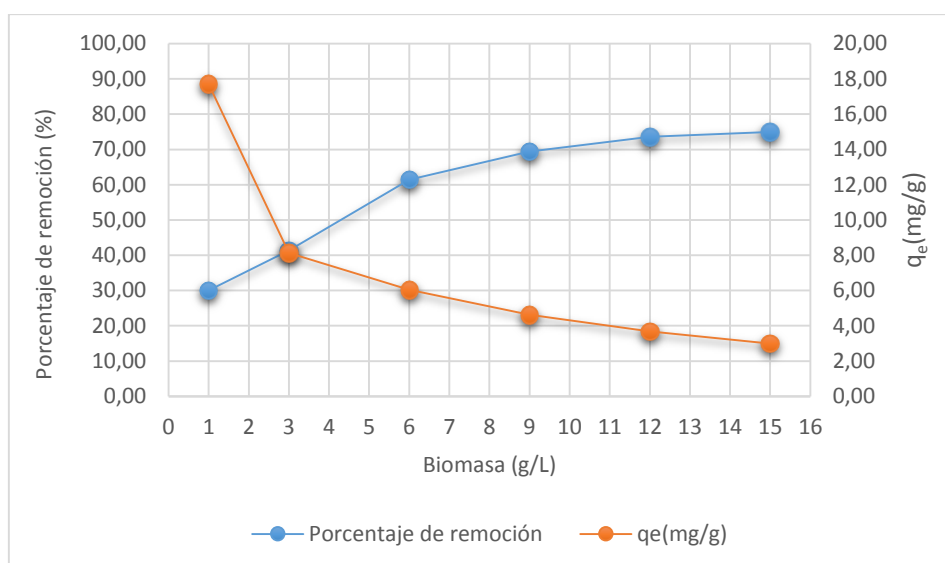
Tabla 13. Resultados experimentales de variación de dosis de biomasa con posos de café

Biomasa (g/L)	Porcentaje de remoción (%)	q_e (mg/g)
1	30,04	17,71
3	41,37	8,13
6	61,46	6,04
9	69,43	4,63
12	73,61	3,68
15	74,93	3,00

Resultados de remoción con pH igual a 2, concentración inicial de 60mg/L, dosis de biomasa de 1 a 15g/L, 30°C y 1 hora de agitación a 150rpm.



Figura 20. Curva de efecto de la dosis de biomasa con posos de café



Como se puede visualizar en la Figura 20, el porcentaje de remoción va aumentando conforme aumenta la cantidad de biomasa hasta llegar a un punto en el que tiende a estabilizarse, debido a que al aumentar la biomasa incrementa la cantidad de sitios activos adsorbentes. Además, estudios reportados indican que al seguir aumentando la dosis de adsorbente puede disminuir la remoción de ibuprofeno porque se produce la superposición o agregación de los sitios de adsorción de adsorbente lo que conduce a una disminución en la superficie total del adsorbente (Ghaedi y col., 2014; Mondal y col., 2016;) razón por la cual el experimento se suspendió en este punto ya que se consiguió la estabilización.

Por otro lado, a medida que se incrementó la concentración de adsorbente, la capacidad de biosorción disminuyó debido a que aumenta la cantidad de biomasa empleado para tratar a un mismo volumen de muestra, por lo tanto, los sitios de biosorción permanecieron insaturados durante el proceso de biosorción y la agregación de partículas, como resultado de una alta masa adsorbente (Yargıç y col., 2015).

Se obtuvo una remoción de 73,61% al trabajar con 12g/L y 74,93% con 15g/L, por lo que al analizar en relación al aprovechamiento de la cantidad de desechos se ha elegido como la mejor opción 12g/L puesto que trabajar con 15g/L implicaría 3g/L adicionales para remover solo 1% más.

3.4.3 EFECTO DE TIEMPO DE CONTACTO O AGITACIÓN

En la Tabla 14 se muestra el tiempo de contacto que se estudió con los parámetros óptimos de pH y dosis de biomasa, concentración inicial de 60 mg/L, a 150 rpm, 30°C y con un tiempo de contacto que varió entre 3 y 1440 min.

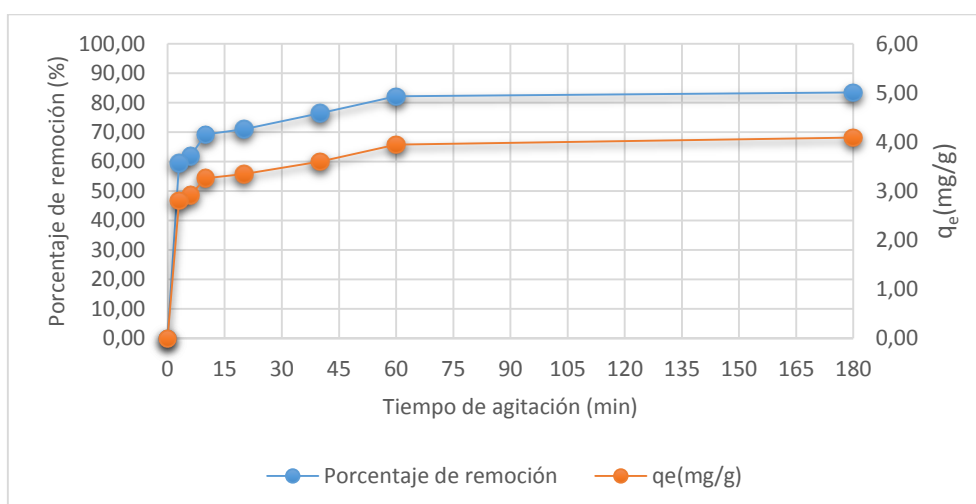


Tabla 14. Resultados experimentales de variación de tiempo de contacto con posos de café

Tiempo de agitación (min)	Porcentaje de remoción (%)	q_e (mg/g)
1440	86,87	4,09
1200	85,84	4,04
180	83,47	4,09
60	82,10	3,95
40	76,42	3,60
20	70,95	3,34
10	69,25	3,26
6	61,87	2,91
3	59,54	2,80

Resultados de remoción con pH igual a 2, dosis de biomasa de 12g/L, concentración inicial de 60mg/L, tiempo de contacto de 3 a 1440min, 30°C y 150rpm.

Figura 21. Curva de efecto del tiempo de contacto con posos de café



La concentración inicial se comporta como una fuerza impulsora importante para prevalecer sobre toda la resistencia de la transferencia de masa de todas las moléculas de ibuprofeno entre las fases acuosas y sólidas (Mondal y col.,2016). La explicación de esta condición de remoción se debe al hecho de que al iniciar la agitación, los sitios activos sobre la superficie del adsorbente estaban vacíos para la unión con moléculas del adsorbato, luego, todos los sitios libre fueron llenados por lo que se alcanzó un punto de equilibrio, posteriormente los sitios activos vacantes se redujeron y por ende la remoción también disminuye. Es así, que se observa que existe una remoción que supera el 50% durante los primeros 3 minutos de agitación, a los 60 minutos se alcanza el punto de inflexión con una adsorción de ibuprofeno de 82,10%, a partir de este punto la velocidad de adsorción cambia ligeramente siendo constante debido a la disminución en la velocidad de difusión (Ghaedi y col., 2014). Por lo que se considera 60 min el valor óptimo con un porcentaje de remoción 82,10% y capacidad adsortiva de 3,95mg/g. Como indica la Figura 21, es notorio que a las 24 h (1440min) se logra una remoción del



86,87% situación que al analizar en relación a consumo de energía eléctrica no resulta ventajoso puesto que solo se aumenta un 4% en relación a 60min, usándose por un periodo de 23 horas más.

Situación similar se presentó en el estudio de Ghaedi (2014) en el que se removió colorante verde malaquita con nanopartícula de óxido de zinc cargado sobre carbón activado, se detectó la remoción de más del 50% en los primeros 2 min y posteriormente se llegó a la estabilización a los 15min de la adsorción. Así también en el trabajo de Mondal y col. (2016) se realizó el procedimiento y los resultados determinaron el mismo comportamiento en la curva detectándose un tiempo óptimo más largo de 120min para la remoción de ibuprofeno.

3.4.4 EFECTO DE CONCENTRACIÓN INICIAL DE IBUPROFENO

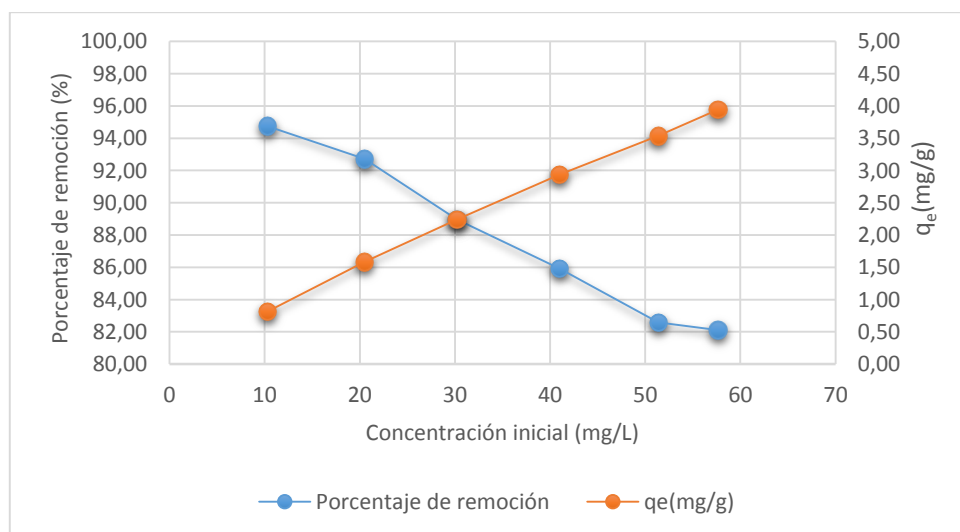
Se tomaron los valores de los factores ya optimizados, pH igual a 2, biomasa 12g/L, tiempo de 1h y se variaron las concentraciones de las soluciones de 10 a 60 mg/L. Los resultados se muestran en la Tabla 15

Tabla 15. Resultados experimentales de variación de concentración inicial de ibuprofeno con posos de café

Concentración inicial (mg/L)	Porcentaje de remoción (%)	q _e (mg/g)
60	82,10	1,84
50	82,59	3,95
40	85,92	3,54
30	88,95	2,94
20	92,72	2,24
10	94,74	1,58

Resultados de remoción con pH igual a 2, dosis de biomasa de 12g/L, tiempo de 1h, concentración inicial de 10 a 60mg/L, 30°C y 150rpm.

Figura 22. Curva de efecto de la concentración inicial de ibuprofeno con posos de café





Es notable que el porcentaje de adsorción disminuye con el aumento de la carga de medicamento, pues a una concentración de 10mg/L la adsorción es de 94,74% y al estar el ibuprofeno a 60mg/L se remueve el 82,10%, probablemente esto es debido al número fijo de sitios de adsorción ya que la masa se mantiene constante en este ensayo (Dalfior, 2013). Este resultado es favorable para la aplicación del método en campo ya que aquí se manifiestan concentraciones de medicamento en $\mu\text{g/L}$ esperando una alta remoción.

Esta tendencia también sucedió en el estudio de Dordio y col. (2009) en el que se removió ibuprofeno con agregados de arcilla expandida, alcanzándose un remoción entre 92,5% y 30% a una concentración inicial de 1mg/L y 50mg/L, respectivamente, similar efecto se obtuvo en el trabajo de Mondal y col. (2016) a concentraciones parecidas a las de este estudio.

Como se observa en la gráfica anterior la capacidad de adsorción del adsorbente aumenta con el incremento de la concentración inicial de Ibuprofeno. El gradiente de concentración de biosorción fue la fuerza motriz para superar las resistencias de transferencia de masa entre el adsorbente y el medio de adsorción, lo que llevó a aumentar la capacidad de biosorción como lo indica Yargıç (2015). La capacidad máxima de adsorción de ibuprofeno fue de 3,95 mg/g usando 12 g/L de dosis de sorbente a 60 mg/L de concentración.

3.4.5 EFECTO DE LA TEMPERATURA

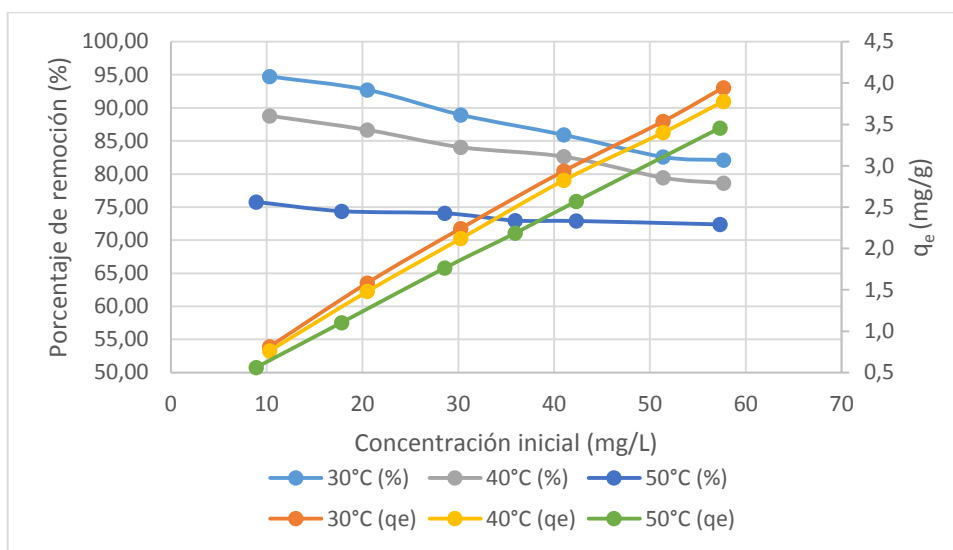
Para este análisis se realizaron tres pruebas con los parámetros anteriores optimizados, se emplearon concentraciones de ibuprofeno de 10 a 60 mg/L y temperatura de 30, 40 y 50 °C

Tabla 16. Resultados experimentales de variación de ibuprofeno con posos de café

Concentración inicial (mg/L)	30°C		40°C		50°C	
	Porcentaje de remoción (%)	q_e (mg/g)	Porcentaje de remoción (%)	q_e (mg/g)	Porcentaje de remoción (%)	q_e (mg/g)
10	94,74	0,8124	88,81	0,7615	75,79	0,5615
20	92,72	1,5840	86,66	1,4805	74,39	1,1035
30	88,95	2,2423	84,06	2,119	74,07	1,7640
40	85,92	2,9355	82,63	2,8231	72,97	2,1848
50	82,59	3,5354	79,44	3,4008	72,91	2,5700
60	82,10	3,945	78,62	3,7775	72,39	3,4558



Figura 23. Curva de efecto de la temperatura con posos de café



Como se puede observar en la Figura 23 , el valor de la capacidad de adsorción del adsorbente q_e disminuye conforme aumenta la temperatura, además el incremento en la temperatura provoca una disminución en el porcentaje de remoción de medicamento. La máxima adsorción se presenta en los 30°C. Similar resultado se obtuvo en el estudio de Mondal y col. (2006) y afirma que en el proceso de adsorción, intervienen fuerzas de Van der Waals y de enlaces de hidrógeno que son débiles, esto conjugado con un aumento de la temperatura da lugar a una descomposición de las fuerzas de adsorción provocando una disminución en la remoción del medicamento.

3.5 ESTUDIO DE LA CAPACIDAD DE ADSORCIÓN DE TR Y TRSC COMO BIOADSORBENTES DE IBUPROFENO

En el estudio de la capacidad de adsorción de analizaron los dos biosorbentes de TR y TRSC para lo cual se realizaron estudios preliminares a partir de los cuales se eligió a uno de ellos para seguir con el siguiente paso de la biosorción.

Para este procedimiento como prueba preliminar, se preparó una solución de 60mg/L, combinado con una biomasa de 3g/L y al pH de la solución de ibuprofeno, esto se colocó en un erlenmeyer hasta 100 mL. En el agitador permaneció por el lapso de 1 hora, a 25°C y 150rpm.

Tabla 17. Prueba preliminar de TR y TRSC

pH inicial	pH final	Porcentaje de remoción de TR (%)	Porcentaje de remoción de TRSC (%)
4,78	5,56	2,39	2,56
4,71	5,5	1,81	1,15

El resultado de la Tabla 17 demuestra que en promedio se removi6 2,10% de ibuprofeno con TR y 1,85% con TRSC. Se procedió a tomar TR para los futuros ensayos



experimentales, descartando la biomasa de TRSC, en razón de la inexistencia de diferencia en los resultados de los porcentajes de remoción.

3.5.1 EFECTO DE pH

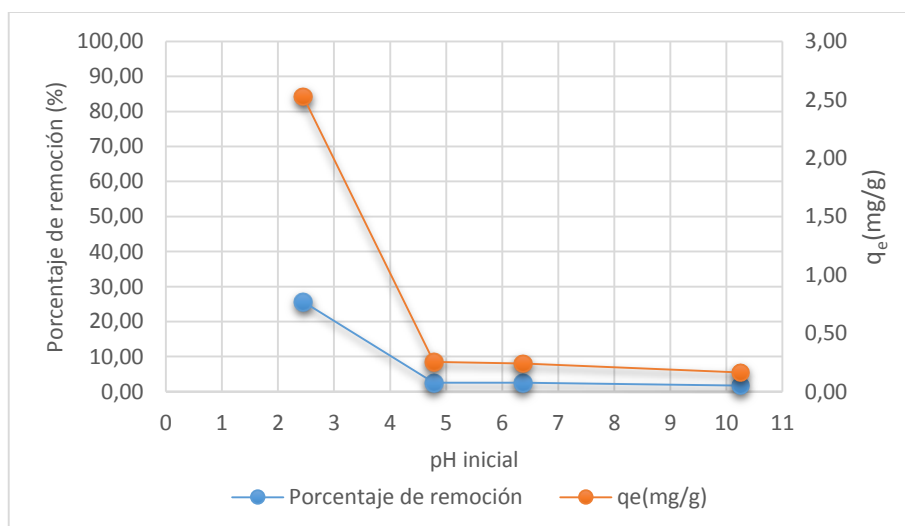
Para las pruebas del efecto de pH, se tomó una concentración inicial de ibuprofeno de 60mg/L, una biomasa de 6g/L, tiempo de 1h, agitación de 150rpm, temperatura de 30°C y se varió el pH desde 2 a 10.

Tabla 18. Resultados experimentales de variación de pH con TR

pH inicial	pH final	Porcentaje de remoción (%)	q _e (mg/g)
2,45	2,87	25,64	2,53
4,78	5,56	2,56	0,26
6,37	6,6	2,52	0,24
10,25	7,25	1,69	0,16

Resultados de remoción con concentración inicial de 60mg/L, cantidad de biomasa de 6g/L, pH de 2 a 10, 30°C y 1 hora de agitación a 150rpm.

Figura 24. Curva de efecto de pH en TR



Se puede observar en la Figura 24 que el mejor resultado es a pH igual a 2, el cual es un valor por debajo del punto de carga cero, por lo tanto la superficie del biosorbente estará cargado positivamente y el ibuprofeno con un pKa de 4,9, estará presente en su estado molecular neutro. Similar resultado se obtuvo con los posos de café.

3.5.2 EFECTO DE LA DOSIS DEL ADSORBENTE

En la Tabla 19 se pueden observar el porcentaje de remoción de ibuprofeno producto de la variación de la cantidad de biomasa suministrada.

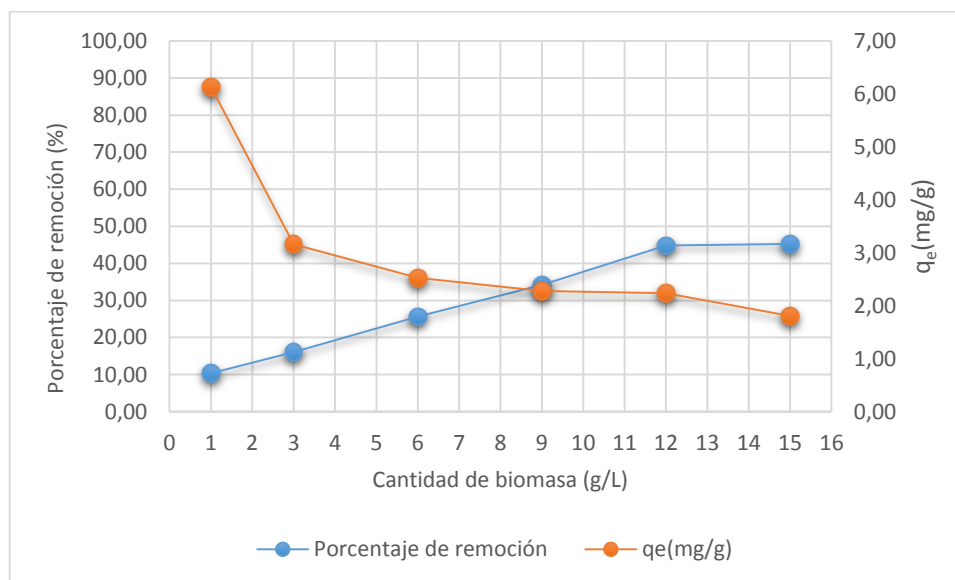


Tabla 19. Resultados experimentales de variación de biomasa con TR

Biomasa (g/L)	Porcentaje de remoción (%)	q_e (mg/g)
1	10,36	6,13
3	16,04	3,16
6	25,64	2,53
9	34,20	2,28
12	44,79	2,24
15	45,22	1,81

Resultados de remoción con concentración inicial de 60mg/L, pH igual a 2, concentración de biomasa de 1 a 15g/L, 30°C y 1 hora de agitación a 150rpm.

Figura 25. Curva de efecto de la concentración de biomasa en TR



Como se puede observar en la Figura 25, la relación entre biomasa y remoción es aparentemente lineal, al aumentar la dosis de biosorbente, incrementa también el área superficial absorbible y por tanto los sitios de adsorción más activos, el porcentaje de remoción es mayor conforme aumenta la cantidad de biomasa hasta que llega a una estabilización en 12g/L pues a partir de este punto la remoción permanece constante, razón por la cual se eligió esta concentración para los futuros estudios con una remoción de 44,79%. Al contrario, el valor de q_e aumenta al disminuir la cantidad de biomasa, ya que al aumentar la dosis del biosorbente para tratar el mismo volumen de efluente probablemente existen más sitios activos disponibles que permanecen insaturados.

3.5.3 EFECTO DE TIEMPO DE CONTACTO O AGITACIÓN

La condición experimental para la prueba de contacto fue concentración inicial de 60 mg/L, pH igual a 2, dosis de biomasa de 12g/L mientras que el tiempo de contacto se estudió entre los valores de 10 a 1440 min.

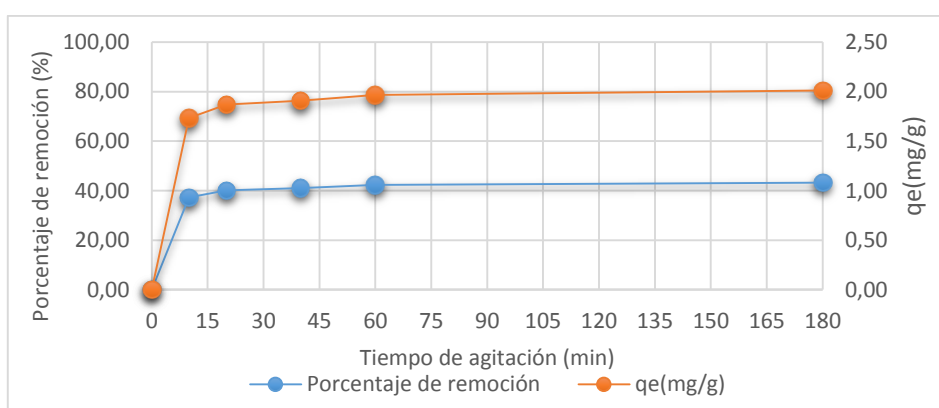


Tabla 20. Resultados experimentales de tiempo de contacto en TR

Tiempo de agitación (min)	Porcentaje de remoción (%)	q _e (mg/g)
1440	44,29	2,06
180	43,20	2,01
60	42,25	1,97
40	40,98	1,91
20	40,17	1,87
10	37,25	1,73

Resultados de remoción con concentración inicial de 60mg/L, pH igual a 2, cantidad de biomasa de 12g/L, variación de tiempo de 10 a 1440min, a 30°C y 150rpm.

Figura 26. Curva de efecto del tiempo de contacto en TR



Los resultados señalan que el mejor porcentaje de remoción se considera a los 60 min con 42,25% y q_e de 1,97mg/g puesto que a partir de esto la curva empieza a mantenerse estable. A pesar que se observa un 2% adicional en la remoción a los 1440min en relación con 60min, este aumento se considera despreciable por la inversión de energía que se necesitaría.

3.5.4 EFECTO DE CONCENTRACIÓN INICIAL DE IBUPROFENO

Para el análisis de la concentración inicial se lo realizó a pH igual a 2, cantidad de biomasa de 12g/L, tiempo de 1 hora y con variación de la concentración inicial de 10 a 60mg/L

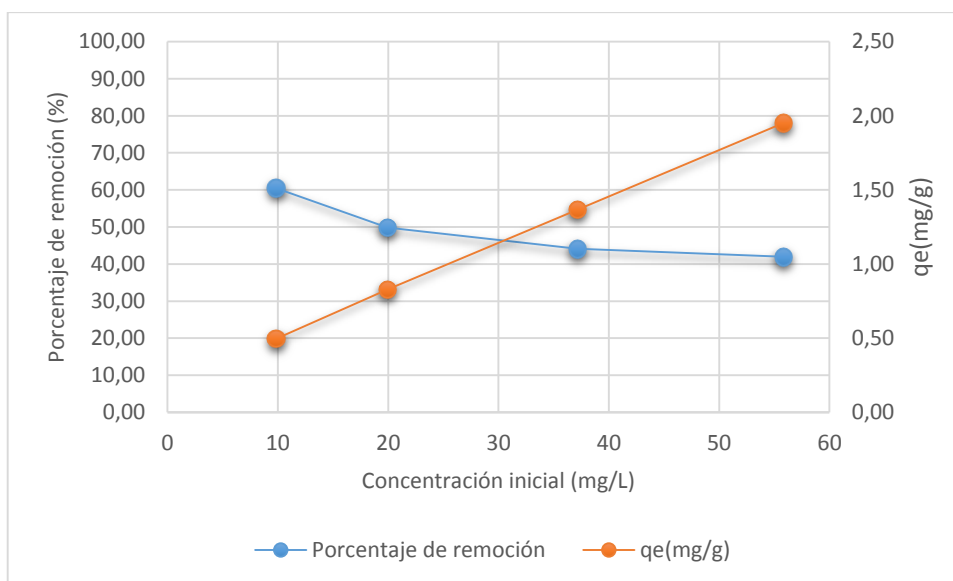
Tabla 21. Resultados experimentales de concentración inicial de ibuprofeno en TR

Concentración inicial (mg/L)	Porcentaje de remoción (%)	q _e (mg/g)
60	41,94	1,95
40	44,14	1,37
20	49,84	0,83
10	60,42	0,50

Resultados de remoción con pH igual a 2, cantidad de biomasa de 12g/L, tiempo de 1 hora, a 30°C, 150rpm y con variación de la concentración inicial de 10 a 60mg/L



Figura 27. Curva de efecto de la concentración inicial de ibuprofeno en TR



Según la Figura 27 es notable que el porcentaje de eliminación disminuye con el aumento de la carga, es decir, se tiene un mayor porcentaje de absorción para concentraciones iniciales más bajas. Por otra parte, una tendencia contraria se presenta en la capacidad de adsorción, debido a que al incrementar la concentración de la solución aumenta el valor de q_e . Similar hecho sucedió en el estudio de Dordio y col. (2009). El mayor porcentaje de remoción fue de 60,42% alcanzado con una concentración inicial de 10mg/L

Terminados todos los análisis experimentales para remoción de ibuprofeno con tallo de rosa, es claro que a pesar que se varió todos los factores involucrados, este bioadsorbente comparado con posos de café no ofrece rentabilidad para ser usado en interacción con el ibuprofeno, ya que posos de café removió 94,74% y tallos de rosas 60,42%

3.6 ISOTERMA DE ADSORCIÓN EN EL EQUILIBRO

3.6.1 MODELO MATEMÁTICO DE LANGMUIR

A través de los datos obtenidos en la optimización de la concentración de la solución de ibuprofeno se puede construir la isoterma de adsorción con el modelo matemático de Langmuir cuyos datos se indican en la Tabla 23, para esto también se emplearon los resultados a diferentes temperaturas que se muestra en la Tabla 22.



Tabla 22. Valores experimentales a 30, 40 y 50°C

30°C			40°C			50°C		
Co (mg/L)	Cf (mg/L)	Porcentaje de remoción (%)	Co (mg/L)	Cf (mg/L)	Porcentaje de remoción (%)	Co (mg/L)	Cf (mg/L)	Porcentaje de remoción (%)
10.29	0.541	94.74	10.29	1.1518	88.81	8.892	2.153	75.79
20.5	1.492	92.72	20.5	2.734	86.66	17.8	4.558	74.39
30.25	3.342	88.95	30.25	4.822	84.06	28.58	7.412	74.07
41	5.774	85.92	41	7.122	82.63	35.93	9.712	72.97
51.37	8.945	82.59	51.37	10.56	79.44	42.3	11.46	72.91
57.66	10.32	82.10	57.66	12.33	78.62	57.29	15.82	72.39

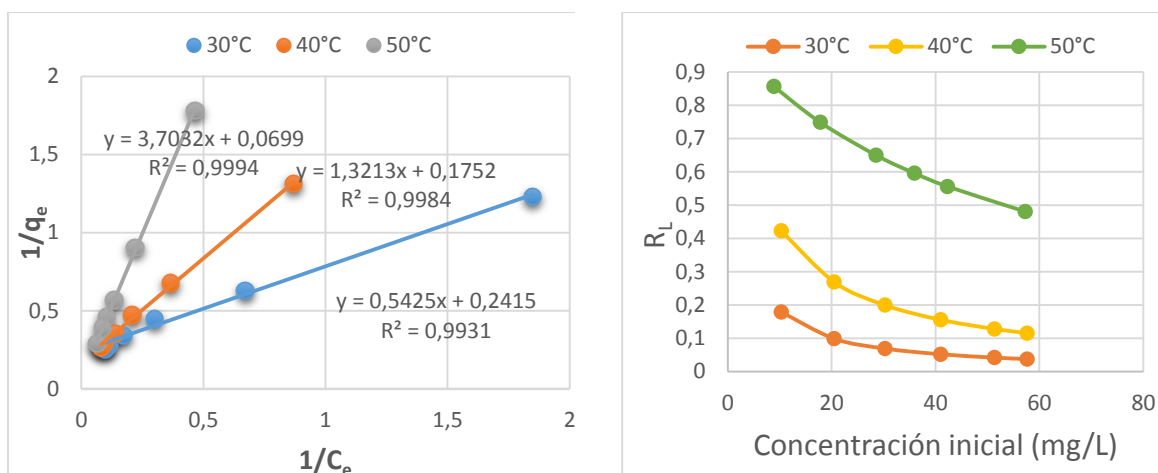
Tabla 23. Datos para ajustar al modelo de Langmuir

	Co (mg/L)	q _e (mg/g)	1/C _{eq}	1/q _e	q _e calculado	R _L
30°C	10	0,8124	1,8484	1,2309	0,8037	0,1792
	20	1,5840	0,6702	0,6313	1,6526	0,0988
	30	2,2423	0,2992	0,4460	2,4763	0,0691
	40	2,9355	0,1732	0,3407	2,9810	0,0519
	50	3,5354	0,1118	0,2829	3,3096	0,0419
	60	3,9450	0,0969	0,2535	3,4006	0,0375
40°C	10	0,7615	0,8682	1,3132	0,7562	0,4229
	20	1,4805	0,3658	0,6754	1,5186	0,2689
	30	2,1190	0,2074	0,4719	2,2261	0,1996
	40	2,8232	0,1404	0,3542	2,7722	0,1554
	50	3,4008	0,0947	0,2940	3,3297	0,1280
	60	3,7775	0,0811	0,2647	3,5416	0,1157
50°C	10	0,5616	0,4645	1,7807	0,5587	0,8563
	20	1,1035	0,2194	0,9062	1,1333	0,7485
	30	1,7640	0,1349	0,5669	1,7559	0,6496
	40	2,1848	0,1030	0,4577	2,2163	0,5959
	50	2,5700	0,0873	0,3891	2,5443	0,5560
	60	3,4558	0,0632	0,2894	3,2897	0,4805

Tiempo : 1 hora	Parámetros	Temperatura °C		
		30	40	50
Langmuir $q_e = (K_L * q_{max} * C_{eq}) / (1 + K_L * C_{eq})$	K _L (L/mg)	0,4452	0,1326	0,0189
	q _{max} (mg/g)	4,1408	5,7078	14,3062
	R ²	0,9931	0,9984	0,9994



Figura 28. Isoterma de adsorción ajustada al modelo de Langmuir a 30, 40 y 50°C y R_L



Al analizar las gráficas se puede indicar que este modelo de Langmuir se ajusta muy bien a los datos de adsorción manifestándose para las temperaturas de 30, 40 y 50°C valores de 0,9931, 0,9984 y 0,9994 respectivamente, teniendo un coeficiente de correlación promedio R^2 de 0,9969, lo que indica las superficie del adsorbente es energéticamente homogénea sin existir interacciones laterales entre las moléculas adsorbidas.

Es posible ver que el R_L se mantiene para todas las temperaturas en valores comprendidos entre 0,1 y 0,9 lo que revela que la isoterma es favorable.

El ajuste de los datos al modelo de Langmuir implica que la energía de unión en toda la superficie del adsorbente es uniforme, la interacción adsorbato y adsorbente es despreciable, las moléculas de ibuprofeno removidas no interaccionan ni compiten entre ellas y se formó una monocapa en la superficie del adsorbente al momento que se dio la biosorción (Mondal y col., 2016)

Estos resultados fueron también reportados por el estudio de Mestre y col. (2007) en el cual se removió ibuprofeno con carbón activado y se obtuvo un R^2 de 0,997 con el modelo de Langmuir, al igual reporta Mondal y col. (2016) ajustando mejor al modelo de Langmuir con un R^2 de 0,971 a 25°C.

3.6.2 MODELO MATEMÁTICO DE FREUNDLICH

La Tabla 24 muestra los valores experimentales y ajustados al modelo de Freundlich, para las temperaturas de 30, 40 y 50 ° C y concentraciones de ibuprofeno de 10 a 60mg/L

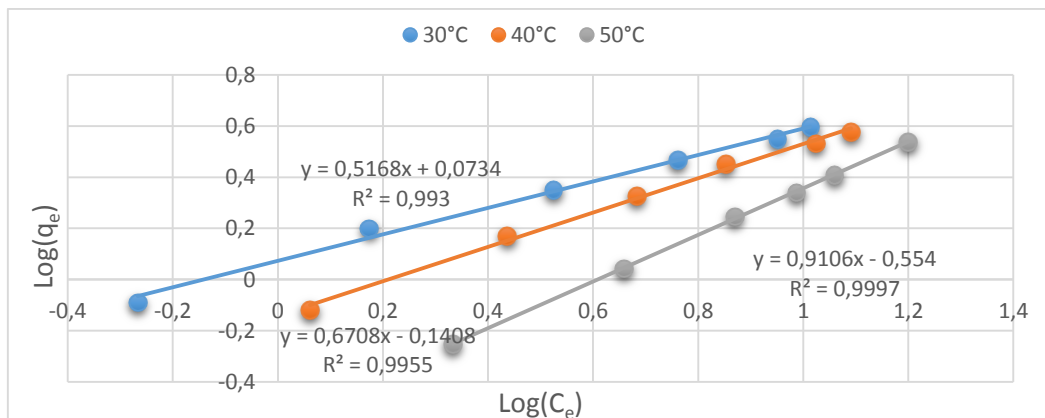


Tabla 24. Datos para ajustar al modelo matemático de Freundlich

	Co (mg/L)	q _e (mg/g)	Log (C _e)	Log (q _e)	q _e calculado
30°C	10	0,8124	-0,2668	-0,0902	0,8620
	20	1,5840	0,1738	0,1998	1,4561
	30	2,2423	0,5240	0,3507	2,2091
	40	2,9355	0,7615	0,4677	2,9304
	50	3,5354	0,9516	0,5484	3,6743
	60	3,9450	1,0137	0,5960	3,9561
40°C	10	0,7615	0,0614	-0,1183	1,5204
	20	1,4805	0,4368	0,1704	2,7152
	30	2,1190	0,6832	0,3261	3,9729
	40	2,8232	0,8526	0,4507	5,1609
	50	3,4008	1,0237	0,5316	6,7216
	60	3,7775	1,0910	0,5772	7,4579
50°C	10	0,5616	0,3330	-0,2506	7,1990
	20	1,1035	0,6588	0,0428	14,2521
	30	1,7640	0,8699	0,2465	22,1903
	40	2,1848	0,9873	0,3394	28,3820
	50	2,5700	1,0592	0,4099	32,9984
	60	3,4558	1,1992	0,5386	44,2586

Tiempo : 1 hora	Parámetros	Temperatura °C		
		30	40	50
Freundlich $q_e = K_F * [C_{eq}]^{(1/n_F)}$	K _F (L/mg)	1,1841	1,3829	3,5810
	n _F	1,9350	1,4908	1,0982
	R ²	0,993	0,9955	0,9997

Figura 29. Isotherma de adsorción ajustada al modelo de Freundlich a 30, 40 y 50°C





Como es posible definir los valores de R^2 obtenidos al ajustar los datos al modelo de Freundlich son similares a los que se presentaron para Langmuir, puesto que son de 0,993, 0,9955 y 0,9997 para 30, 40 y 50°C respectivamente con un R^2 promedio de 0,9960, valor que es ligeramente inferior a Langmuir.

3.7 ESTUDIO CINÉTICO DE REMOCIÓN DE IBUPROFENO CON POSOS DE CAFÉ

Con los resultados obtenidos en la prueba de tiempo de contacto se ajustaron a los modelos de pseudo primer orden y pseudo segundo orden.

3.7.1 LAGERGREN PSEUDO PRIMER ORDEN

En la Tabla 25 se muestran los resultados obtenidos experimentalmente y los calculados para ajustar a los modelos.

Tabla 25. Datos para ajustar al modelo cinético pseudo primer orden

C_o (mg/L)	C_f (mg/L)	Tiempo de agitación (min)	q_t	$q_e - q_t$	$\log(q_e - q_t)$	C_o/C_f	$\text{Log}(C_o/C_f)$	q_t calculado (mg/g)
56,52	56,52	0	0,00	4,12	0,62	1,00	0,00	0,00
56,52	22,87	3	4,04	0,08	-1,07	2,47	0,39	0,03
56,52	21,55	6	4,20	-0,07		2,62	0,42	0,05
56,52	17,38	10	4,70	-0,57		3,25	0,51	0,08
56,52	16,42	20	4,81	-0,69		3,44	0,54	0,17
56,52	13,33	40	5,18	-1,06		4,24	0,63	0,33
57,66	10,32	60	5,68	-1,56		5,59	0,75	0,48
58,74	9,71	180	5,88	-1,76		6,05	0,78	1,28
56,47	7,99	1200	5,82	-1,69		7,06	0,85	3,78
56,47	7,41	1440	5,89	-1,76		7,62	0,88	3,91
56,88								

q_e	4,12
k_1	0,0020727



Figura 30. Pseudo primer orden lineal

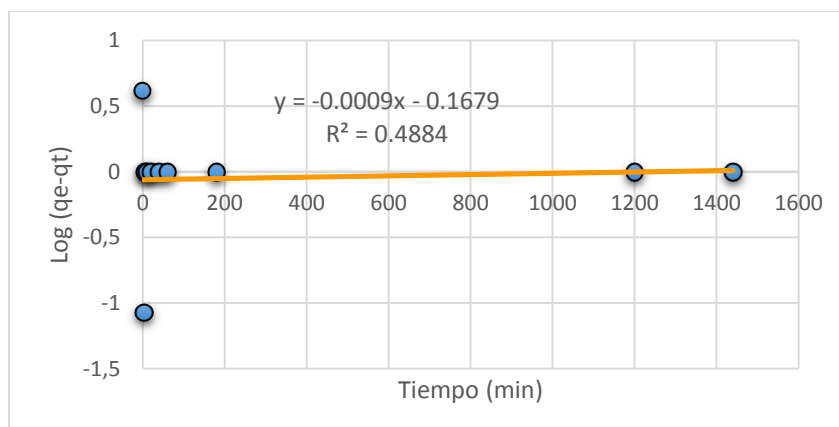
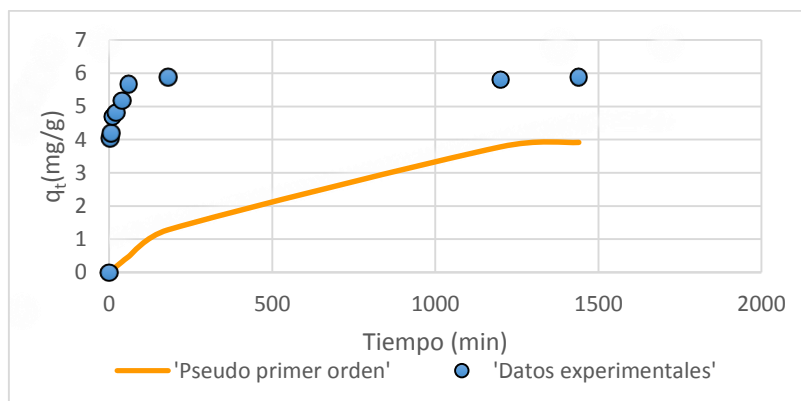


Figura 31. Ajuste al modelo cinético pseudo primer orden



Los datos obtenidos de las pruebas de optimización de tiempo de contacto fueron usados para ajustar al modelo de Lagergen pseudo primer orden, encontrándose que los datos experimentales eran muy desfavorables para encajar como se puede observar en la Figura 31.

3.7.2 PSEUDO SEGUNDO ORDEN

Los datos obtenidos en las pruebas de optimización de tiempo de contacto también fueron adaptados al modelo cinético de pseudo segundo orden, cuyos datos y cálculos se indican en la Tabla 26.



Tabla 26. Datos para ajustar al modelo cinético de pseudo segundo orden

Concentración inicial (mg/L)	Concentración final (mg/L)	Tiempo de agitación (min)	q_t	t/q_t	q_t calculado
		0	0		0
56,52	22,87	3	4,04	0,74	3,26
56,52	21,55	6	4,20	1,43	4,19
56,52	17,38	10	4,70	2,13	4,73
56,52	16,42	20	4,81	4,16	5,24
56,52	13,33	40	5,18	7,72	5,54
57,66	10,32	60	5,68	10,56	5,64
58,74	9,712	180	5,88	30,59	5,79
56,47	7,994	1200	5,82	206,29	5,86
56,47	7,412	1440	5,89	244,61	5,86

$1/q_e$	0,1704
q_e	5,8685446
$1/h$	0,4081
h	2,45037981
k_2	0,07114962

Figura 32. Pseudo segundo orden lineal

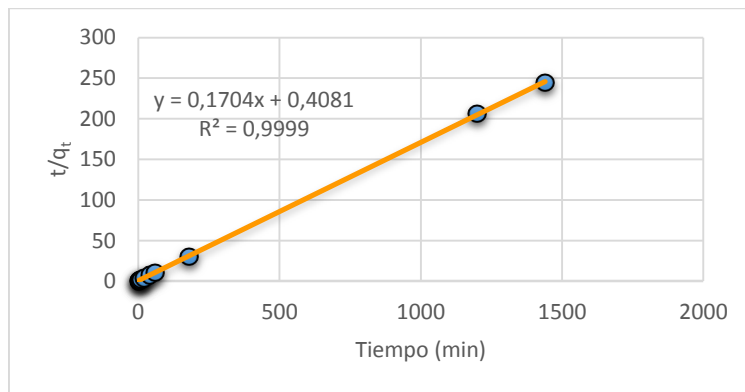
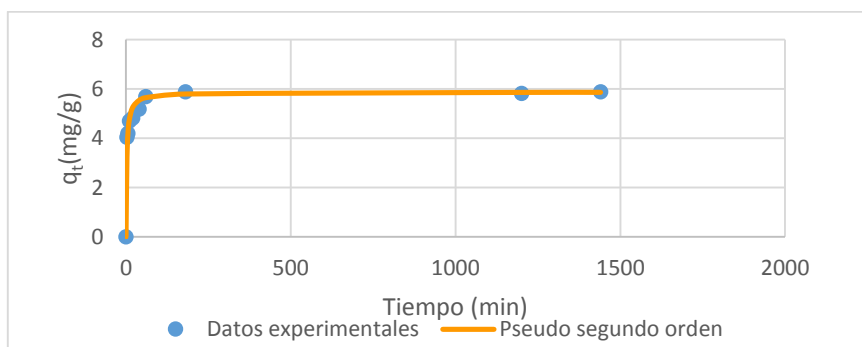


Figura 33. Ajuste al modelo cinético de pseudo segundo orden





Se encontró que el valor del coeficiente de correlación estaba cerca de la unidad como se observa en la Figura 32, siendo este de 0,99, determinándose este modelo como el más favorable para nuestra experimentación. Es posible notar en la Tabla 26 que el valor de q_t aumenta conforme el tiempo de contacto. Este ajuste a la cinética de pseudo segundo orden implica que la etapa de limitación de velocidad del proceso de biosorción puede ser quimisorción que quiere decir compartir o intercambiar electrones por fuerzas de valencia entre el adsorbente y el adsorbato (Mondal y col., 2006)

3.8 ESTUDIO TERMODINÁMICO

En la Tabla 27, se indican los parámetros termodinámicos obtenidos, en el cual R^2 señala que los valores de entropía y cambio de entalpía calculados para el adsorbente son confiables.

La viabilidad del proceso es justificada con el valor negativo de la energía libre de Gibbs ΔG° , indica la naturaleza espontánea del proceso de adsorción de ibuprofeno. Mondal y col. (2016) menciona que al aumentar la temperatura aumenta también el valor de ΔG° lo que permite establecer que la adsorción favorable se da a la temperatura más baja. Además, Guedidi y col., (2013) indica que al estar ΔG° en valores comprendidos entre 80 y 400 KJ/mol la adsorción es química, mientras que a valores entre 0 y 20 KJ/mol se da una adsorción física, resultando en este estudio una quimisorción.

El valor negativo de entalpía ΔH° indica un fenómeno exotérmico del proceso según Mondal y col. (2016).

El valor positivo de entropía ΔS° indica un desorden en la interface sólido–solución, probablemente como consecuencia de la desorción de moléculas de disolvente (agua destilada y metanol) antes de la adsorción de ibuprofeno, siendo así el valor positivo de ΔS° podría indicar la adsorción competitiva entre ibuprofeno y moléculas de disolvente, similar caso sucedió en el estudio de Guedidi y col. (2013).

Tabla 27. Parámetros termodinámicos

Temperatura (°K)	ΔG° (KJ/mol)	ΔH° (KJ/mol)	ΔS° (J/mol K)	R^2
303	-89,41			
313	-90,89	-44,66	0,15	0,84
323	-92,37			



CAPITULO 4

4 CONCLUSIONES

El presente estudio investigó la utilización de posos de café y tallos de rosas como un potencial adsorbente eficiente y rentable del medicamento ibuprofeno presente en aguas preparadas. La experimentación demostró un máximo porcentaje de remoción de 94,74 y 60,42% respectivamente.

Así también mediante la espectrofotometría FT-IR, se evidenció los grupos funcionales presentes en los biosorbentes tales como -OH , -NH , metil, metileno, C=O , C-H , C-O-C , C-N y P-O , además, al reportarse una variación entre los espectros antes y después de la biosorción tanto para posos de café como para tallos de rosas en las bandas alrededor de 3400, y entre 1600 y 1450 cm^{-1} se prevé que se debe a la interacción del ibuprofeno con la biomasa lo que confirma su remoción.

Los estudios en laboratorio demostraron que para ambos adsorbentes se trabaja bajo las mismas condiciones, siendo las más favorables $\text{pH}=2$, dosis de adsorbente 12 g/L, tiempo de agitación de 1 h y concentración inicial del adsorbente de 10 mg/L. Para el caso de posos de café adicional a esto se encontró que la mejor temperatura de trabajo se establece en 30 °C. De todos estos parámetros el que demostró ser el más influyente fue el valor de pH .

Los modelos de isoterma de Langmuir y Freundlich se utilizaron para la descripción matemática del equilibrio de biosorción de ibuprofeno con posos de café. El modelo de Langmuir fue definido como el mejor ajuste para los datos de biosorción.

Este ajuste a Langmuir nos indica que la adsorción tuvo lugar en sitios homogéneos específicos con el adsorbente y una vez que el fármaco ocupó un sitio, ningún tipo de adsorción pudo tener lugar a partir de ese momento, se supone una atracción y posteriormente unión entre el contaminante y la superficie adsorbente, además que la superficie de adsorción es uniforme y la adsorción de soluto por el adsorbente se origina a partir de una monocapa, siendo la energía de adsorción constante.

Los modelos cinéticos de pseudo-primer orden y pseudo-segundo orden fueron utilizados para probar la cinética de biosorción. Se demostró que la adsorción de ibuprofeno podría proporcionar los mejores resultados por el modelo de pseudo-segundo orden, demostrando que en este proceso tiene gran influencia la química de los materiales, siendo esta quimisorción el factor limitante que controla la velocidad del proceso de adsorción.

En cuanto a los parámetros termodinámicos, estos demostraron la espontaneidad del proceso de biosorción, en razón del fenómeno exotérmico ΔH y del aumento de la entropía o desorden ΔS . Además, el aumento de los valores de la energía libre de Gibbs conforme aumenta la temperatura, demuestra que las bajas temperaturas favorecen el proceso de adsorción.

Los análisis de este estudio determinaron que el mejor biosorbente resultó ser el poso de café para ibuprofeno, pero a pesar de obtener solo un 60% de remoción con tallos de rosa es importante mencionar que esta biomasa resultó tener una afinidad mayor por



ibuprofeno antes que por los metales pesados ya que en otras investigaciones se logró únicamente un 41% de remoción de cadmio.

Se ha demostrado que el uso de desechos como adsorbentes naturales nos brinda una alternativa práctica y eficiente ante las técnicas que se utilizan para remover ibuprofeno ya que estas necesitan de altas inversiones económicas, personal calificado, empleo de recursos y sus productos finales muchas veces no satisfacen las expectativas puesto que generan productos finales que pueden perjudicar el medio ambiente, lo que nos impulsa a seguir realizando investigaciones de biosorción pues todos los estudios han demostrado ser efectivos, de bajo costo y sobre todo se le da utilidad a un producto que ha sido catalogado anteriormente como desecho sin producir sustancias más tóxicas.

4.1 RECOMENDACIONES

- Realizar una investigación a mayor profundidad acerca del tratamiento y acondicionamiento de las biomásas que van a ser empleadas en el proceso de biosorción con el fin de eliminar posibles interferencias de terceras sustancias.
- Analizar otras características físicas o químicas del biosorbente que pueden intervenir en el proceso, tal como la granulometría y contenido de celulosa, hemicelulosa y lignina.
- Experimentar ensayos de biosorción con el uso de diferentes biomásas y otros contaminantes emergentes específicamente fármacos. Así como analizar otros factores que intervienen en el proceso de biosorción en agitado.
- Estudiar la biosorción de fármacos con biomásas a través de columnas de lecho fijo, para de esta manera poder realizar una comparación en cuanto a efectividad de los procesos.



4.2 BIBLIOGRAFÍA

Aguirre-Martínez, G. V., Del Valls, T. A., & Martín-Díaz, M. L. (2013). Identification of biomarkers responsive to chronic exposure to pharmaceuticals in target tissues of *Carcinus maenas*. *Marine Environmental Research*, 87–88, 1–11. Recuperado a partir de <https://doi.org/10.1016/j.marenvres.2013.02.011>

Alami, S. B. D. (2010). *Aprovechamiento de hueso de aceituna: biosorción de iones metálicos*. Universidad de Granada. Recuperado a partir de <https://dialnet.unirioja.es/servlet/tesis?codigo=63772>

Álvarez Torrellas, Silvia. (2014). Eliminación de contaminantes emergentes presentes en aguas mediante adsorción en lecho fijo. UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID. Recuperado a partir de <http://eprints.ucm.es/27763/1/T35570.pdf>

Amaringo Villa, F. A. A. (2013). Determinación del punto de carga cero y punto isoeléctrico de dos residuos agrícolas y su aplicación en la remoción de colorantes. *Revista de Investigación Agraria y Ambiental*, 4(2), 27–36. Recuperado a partir de <https://doi.org/10.22490/21456453.982>

Antunes, M., Esteves, V. I., Guégan, R., Crespo, J. S., Fernandes, A. N., & Giovanela, M. (2012). Removal of diclofenac sodium from aqueous solution by Isabel grape bagasse. *Chemical Engineering Journal*, 192, 114–121. Recuperado a partir de <https://doi.org/10.1016/j.cej.2012.03.062>

Atarés Huerta, L. (2009). Determinación de las propiedades físicas. Recuperado a partir de <https://riunet.upv.es/bitstream/handle/10251/52102/20.%20Art%C3%ADculo%20docente.%20Determinaci%C3%B3n%20de%20la%20porosidad.pdf?sequence=1>

Behera, S. K., Oh, S. Y., & Park, H. S. (2011). Sorptive removal of ibuprofen from water using selected soil minerals and activated carbon. *International Journal of Environmental Science and Technology*, 9(1), 85–94. Recuperado a partir de <https://doi.org/10.1007/s13762-011-0020-8>

Benítez, L. T., Tovar, C. T., Bolívar, W. M., & Ortiz, Á. V. (2014). ESTUDIO DE MODIFICACIÓN QUÍMICA Y FÍSICA DE BIOMASA (*Citrus sinensis* Y *Musa paradisiaca*) PARA LA ADSORCIÓN DE METALES PESADOS EN SOLUCIÓN. *Revista Luna Azul*, (39), 124–142.

Buenaventura, C., & Castaño, J. (2002). Influencia de la altitud en la calidad de la bebida de muestras de café procedente del ecotopo 206B en Colombia. Recuperado a partir de [http://www.cenicafe.org/es/publications/arc053\(02\)119-131.pdf](http://www.cenicafe.org/es/publications/arc053(02)119-131.pdf)

Bustamante Alcántara, E. (2011). Adsorción de metales pesados en residuos de café modificados químicamente. Recuperado a partir de <http://cd.dgb.uanl.mx/handle/201504211/5120>

Calle Chumo, D. A., & Mendoza San Martín, J. C. (2017). Extracción de Taninos de la borra de café mediante lixiviación soxhlet. Recuperado a partir de <http://repositorio.ug.edu.ec/handle/redug/18205>

CENTRO DOCUMENTACIÓN DE ESTUDIOS Y OPOSICIONES. (2011). Propiedades físico-químicas que miden o identifican la materia. Instrumentos, aparatos y equipos de



laboratorio. Técnicas y métodos aplicados para su medida en el laboratorio. Recuperado a partir de https://www.serina.es/empresas/cede_muestra/203/TEMA%20MUESTRA.pdf

Ciríaco, L., Anjo, C., Correia, J., Pacheco, M. J., & Lopes, A. (2009). Electrochemical degradation of Ibuprofen on Ti/Pt/PbO₂ and Si/BDD electrodes. *Electrochimica Acta*, 54(5), 1464–1472. Recuperado a partir de <https://doi.org/10.1016/j.electacta.2008.09.022>

Cortacans, J., Hernández, A., Del Castillo, I., & Montes, E. (2006). Presencia de fármacos en aguas residuales y eficacia de los procesos convencionales en su eliminación. *Ciccp.es*, 1–13. Recuperado a partir de http://www.ciccp.es/biblio_digital/lcitema_III/congreso/pdf/010511.pdf

Dalfior, B. M. (2013). Evaluation of coconut mesocarp for removing paracetamol in aqueous medium by batch experiments. *Analytica*, 63, 94. Recuperado a partir de https://www.researchgate.net/publication/264552264_Evaluation_of_coconut_mesocarp_for_removing_paracetamol_in_aqueous_medium_by_batch_experiments

Delgadillo, G. A. (2011). Preparación-caracterización de Carbones Activados a Partir de Pepas de Níspero de Palo (*Mespilus Communi*) Y Su Aplicación Como Material Adsorbente de Fenol. Pontificia Universidad Católica del Perú. Escuela de Graduados. Mención : Química.

Dordio, A. V., Estêvão Candeias, A. J., Pinto, A. P., Teixeira da Costa, C., & Palace Carvalho, A. J. (2009). Preliminary media screening for application in the removal of clofibric acid, carbamazepine and ibuprofen by SSF-constructed wetlands. *Ecological Engineering*, 35(2), 290–302. Recuperado a partir de <https://doi.org/10.1016/j.ecoleng.2008.02.014>

Dubey, S. P., Dwivedi, A. D., Sillanpää, M., & Gopal, K. (2010). Artemisia vulgaris-derived mesoporous honeycomb-shaped activated carbon for ibuprofen adsorption. *Chemical Engineering Journal*, 165(2), 537–544. Recuperado a partir de <https://doi.org/10.1016/j.cej.2010.09.068>

Franks, G. V., & Meagher, L. (2003). The isoelectric points of sapphire crystals and alpha-alumina powder, The isoelectric points of sapphire crystals and alpha-alumina powder. Recuperado a partir de http://novaprd-lb.newcastle.edu.au:8080/vital/access/manager/Repository/uon:3393?exact=sm_create%3A%22Meagher%2C+Laurence%22

Ghaedi, M., Ansari, A., Habibi, M. H., & Asghari, A. R. (2014). Removal of malachite green from aqueous solution by zinc oxide nanoparticle loaded on activated carbon: Kinetics and isotherm study. *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*, 20(1), 17–28. Recuperado a partir de <https://doi.org/10.1016/j.jiec.2013.04.031>

Goertzen, S. L., Thériault, K. D., Oickle, A. M., Tarasuk, A. C., & Andreas, H. A. (2010). Standardization of the Boehm titration. Part I. CO₂ expulsion and endpoint determination. *Carbon*, 48(4), 1252–1261. Recuperado a partir de <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2009.11.050>



- Guedidi, H., Reinert, L., Lévêque, J.-M., Soneda, Y., Bellakhal, N., & Duclaux, L. (2013). The effects of the surface oxidation of activated carbon, the solution pH and the temperature on adsorption of ibuprofen. *Carbon*, 54(Supplement C), 432–443. Recuperado a partir de <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2012.11.059>
- Guedidi, H., Reinert, L., Soneda, Y., Bellakhal, N., & Duclaux, L. (2017). Adsorption of ibuprofen from aqueous solution on chemically surface-modified activated carbon cloths. *Arabian Journal of Chemistry*, 10(Supplement 2), S3584–S3594. Recuperado a partir de <https://doi.org/10.1016/j.arabjc.2014.03.007>
- Hernández Falcón, D., Lozano, L., Ernesto, O., García, F., Asela, L., & González García, E. (2015). Validación de un método cromatográfico para la determinación de cafeína en muestras acuosas de la Industria Farmacéutica. *Revista Cubana de Farmacia*, 49(2), 219–231.
- Lindqvist, N., Tuhkanen, T., & Kronberg, L. (2005). Occurrence of acidic pharmaceuticals in raw and treated sewages and in receiving waters. *Water Research*, 39(11), 2219–2228. Recuperado a partir de <https://doi.org/10.1016/j.watres.2005.04.003>
- Madhavan, J., Grieser, F., & Ashokkumar, M. (2010). Combined advanced oxidation processes for the synergistic degradation of ibuprofen in aqueous environments. *Journal of Hazardous Materials*, 178(1), 202–208. Recuperado a partir de <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2010.01.064>
- Matkovic, S. R., Valle, G. M., Galle, M., & Briand, L. E. (2004). Desarrollo y validación del análisis cuantitativo de Ibuprofeno en comprimidos por espectroscopía infrarroja. *Acta Farmacéutica Bonaerense*, 23, núm. 4. Recuperado a partir de <http://hdl.handle.net/10915/6697>
- Méndez, F., Esplugas, S., & Giménez, J. (2008). Photocatalytic degradation of non-steroidal anti-inflammatory drugs with TiO₂ and simulated solar irradiation. *Water Research*, 42(3), 585–594. Recuperado a partir de <https://doi.org/10.1016/j.watres.2007.08.002>
- Mestre, A. S., Pires, J., Nogueira, J. M. F., & Carvalho, A. P. (2007). Activated carbons for the adsorption of ibuprofen. *Carbon*, 45(10), 1979–1988. Recuperado a partir de <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2007.06.005>
- Mestre, A. S., Pires, J., Nogueira, J. M. F., Parra, J. B., Carvalho, A. P., & Ania, C. O. (2009). Waste-derived activated carbons for removal of ibuprofen from solution: Role of surface chemistry and pore structure. *Bioresource Technology*, 100(5), 1720–1726. Recuperado a partir de <https://doi.org/10.1016/j.biortech.2008.09.039>
- Ministerio de Agricultura, Ganadería, Acuicultura y Pesca. (2016). Rendimiento de café grano seco en el Ecuador 2016.pdf. Recuperado a partir de http://sinagap.agricultura.gob.ec/pdf/estudios_agroeconomicos/rendimiento_cafe_grano_seco2016.pdf
- Ministerio de Comercio exterior. (2016). ANALISIS ROSAS FRESCAS. Recuperado a partir de <http://www.proecuador.gob.ec/wp-content/uploads/2016/12/ANALISIS-ROSAS-FRESCAS-FINAL-1.pdf>
- Mondal, S., Aikat, K., & Halder, G. (2016). Biosorptive uptake of ibuprofen by chemically modified *Parthenium hysterophorus* derived biochar: Equilibrium, kinetics,



thermodynamics and modeling. *Ecological Engineering*, 92, 158–172. Recuperado a partir de <https://doi.org/10.1016/j.ecoleng.2016.03.022>

Mora, C. P., Tello, M. E., & Martínez, F. (2006). Validación de una metodología analítica para la cuantificación de naproxeno en estudios de reparto líquido/líquido mediante espectrofotometría ultravioleta. *Revista Colombiana de Ciencias Químico - Farmacéuticas*, 35(1), 81–105.

Nakada, N., Shinohara, H., Murata, A., Kiri, K., Managaki, S., Sato, N., & Takada, H. (2007). Removal of selected pharmaceuticals and personal care products (PPCPs) and endocrine-disrupting chemicals (EDCs) during sand filtration and ozonation at a municipal sewage treatment plant. *Water Research*, 41(19), 4373–4382. Recuperado a partir de <https://doi.org/10.1016/j.watres.2007.06.038>

Njoku, V. O., Asif, M., & Hameed, B. H. (2015). 2,4-Dichlorophenoxyacetic acid adsorption onto coconut shell-activated carbon: isotherm and kinetic modeling. *Desalination and Water Treatment*, 55(1), 132–141. Recuperado a partir de <https://doi.org/10.1080/19443994.2014.911708>

Ordoñez, J. L., & Moreno, R. A. (2013). Estudio del aprovechamiento de residuos orgánicos de cultivos de flores (tallos de rosa) como biosorbente de cadmio para el tratamiento de aguas residuales. Recuperado a partir de <http://dspace.ups.edu.ec/handle/123456789/4272>

Pinzón, M. L., & Cardona, A. (2008). Caracterización de la cáscara de naranja para su uso como material bioadsorbente.pdf. *Revista Bistua*, 6, 1–23.

Pujol, D., Liu, C., Gominho, J., Olivella, M. À., Fiol, N., Villaescusa, I., & Pereira, H. (2013). The chemical composition of exhausted coffee waste. *Industrial Crops and Products*, 50(Supplement C), 423–429. <https://doi.org/10.1016/j.indcrop.2013.07.056>

Rayo, K., & Rivera, T. (2014). Validación del método analítico de cuantificación de Ibuprofeno en tabletas de 600 mg por cromatografía líquida de alta resolución. Recuperado a partir de <http://riul.unanleon.edu.ni:8080/jspui/bitstream/123456789/4221/1/230204.pdf>

Revista Cubana de Farmacia. (2016). Ibuprofeno, 50. Recuperado a partir de http://scielo.sld.cu/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S0034-75152016000100018

Rodríguez, J. A. (2010). Propiedades: densidad y porosidad. Recuperado a partir de http://ocw.uniovi.es/pluginfile.php/4887/mod_resource/content/1/T3b-DensidadPorosidad.pdf

Ronda Gálvez, A., 2016. Preparación y aplicación de biosorbentes activados químicamente para la eliminación de plomo de medios acuosos., España, p. 241.

Sabri, N., Hanna, K., & Yargeau, V. (2012). Chemical oxidation of ibuprofen in the presence of iron species at near neutral pH. *The Science of the Total Environment*, 427–428, 382–389. Recuperado a partir de <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2012.04.034>

Saucier, C., Adebayo, M. A., Lima, E. C., Cataluña, R., Thue, P. S., Prola, L. D. T., Dotto, G. L. (2015). Microwave-assisted activated carbon from cocoa shell as adsorbent for removal of sodium diclofenac and nimesulide from aqueous effluents. *Journal of Hazardous Materials*, 289, 18–27. Recuperado a partir de <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2015.02.026>



Singh, R., & Hankins, N. P. (2016). *Emerging membrane technology for sustainable water treatment*. Boston: Elsevier. Recuperado a partir de <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B9780444633125000024>

Singh, K. P., Singh, A. K., Singh, U. V., & Verma, P. (2012). Optimizing removal of ibuprofen from water by magnetic nanocomposite using Box-Behnken design. *Environmental Science and Pollution Research International*, 19(3), 724–738. Recuperado a partir de <https://doi.org/10.1007/s11356-011-0611-4>

Tauguinas, A. L., & Báez, M. (2001). Estudio comparativo de las características de liberación in vitro de comprimidos de Ibuprofeno. Recuperado a partir de <http://www.unne.edu.ar/unnevieja/Web/cyt/cyt/2001/8-Exactas/E-028.pdf>

Tinoco, H. A., & Yomali Ospina, D. (2010). ANÁLISIS DEL PROCESO DE DESHIDRATACIÓN DE CACAO PARA LA DISMINUCIÓN DEL TIEMPO DE SECADO. *Revista EIA*, (13). Recuperado a partir de <http://www.redalyc.org/resumen.oa?id=149213727004>

Velandia, K. D. G., Rey, D. D., Amado, P. A. C., & González, C. M. (2016). Valuación De Las Propiedades Físicas Y Químicas De Residuos Sólidos Orgánicos a Emplearse En La Elaboración De Papel. *Revista Luna Azul*, (43), 499–517.

Vera, L., Uguña, M. F., García, N., Flores, M., Vázquez, V., & Aloma, I. (2016). Desarrollo de materiales sorbentes para la eliminación de metales pesados de las aguas residuales mineras. *Afinidad*, 73(574). Recuperado a partir de <http://www.raco.cat/index.php/afinidad/article/view/312048>

Vinueza, O., Luis, J., Farfán, M., & Andrés, R. (2013). Estudio del aprovechamiento de residuos orgánicos de cultivos de flores (tallos de rosa) como biosorbente de cadmio para el tratamiento de aguas residuales. Recuperado a partir de <http://dspace.ups.edu.ec/handle/123456789/4272>

Yargıç, A. Ş., Yarbay Şahin, R. Z., Özbay, N., & Önal, E. (2015). Assessment of toxic copper(II) biosorption from aqueous solution by chemically-treated tomato waste. *Journal of Cleaner Production*, 88(Supplement C), 152–159. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2014.05.087>

Yong, A. (2004). EL CULTIVO DEL ROSAL Y SU PROPAGACIÓN. Recuperado a partir de <http://www.redalyc.org/pdf/1932/193217832008.pdf>

Zhu, Y., Shi, J., Li, Y., Chen, H., Shen, W., & Dong, X. (2005). Storage and release of ibuprofen drug molecules in hollow mesoporous silica spheres with modified pore surface. *Microporous and Mesoporous Materials*, 85(1), 75–81. Recuperado a partir de <https://doi.org/10.1016/j.micromeso.2005.06.015>



4.3 ANEXOS

ANEXO A

Tabla 28. Valores obtenidos para determinar grupos básicos de posos de café

1B				2B				3B			
VOLUMEN NaOH	pH	Vol NaOH	DpH/Dvol	VOLUMEN NaOH	pH	Vol NaOH	DpH/Dvol	VOLUMEN NaOH	pH	Vol NaOH	DpH/Dvol
0	1,09	0	0,06	0	0,95	0	0,18	0	0,97	0	0,1
0.5	1.12	0.5	0.08	0.5	1.04	0.5	0.02	0.5	1.02	0.5	0.08
1	1.16	1	0	1	1.05	1	0.08	1	1.06	1	0.08
1.5	1.16	1.5	0	1.5	1.09	1.5	0.12	1.5	1.1	1.5	0.08
2	1.16	2	0.06	2	1.15	2	0.08	2	1.14	2	0.12
2.5	1.19	2.5	0.1	2.5	1.19	2.5	0.14	2.5	1.2	2.5	0.1
3	1.24	3	0.12	3	1.26	3	0.04	3	1.25	3	0.08
3.5	1.3	3.5	0.14	3.5	1.28	3.5	0.16	3.5	1.29	3.5	0.12
4	1.37	4	0.14	4	1.36	4	0.06	4	1.35	4	0.08
4.5	1.44	4.5	0.09	4.5	1.39	4.5	0.14	4.5	1.39	4.5	0.16
5.5	1.53	5.5	0.19	5	1.46	5	0.1	5	1.47	5	0.18
6.5	1.72	6.5	0.18	5.5	1.51	5.5	0.18	5.5	1.56	5.5	0.08
7.5	1.9	7.5	1.05	6	1.6	6	0.12	6	1.6	6	0.12
9.5	4	9.5	8.01	6.5	1.66	6.5	0.18	6.5	1.66	6.5	0.24
10.5	12.01	10.5	0.3	7	1.75	7	0.3	7	1.78	7	0.24
11	12.16	11	0.38	7.5	1.9	7.5	0.18	7.5	1.9	7.5	0.32
11.5	12.35	11.5	0.28	8	1.99	8	0.32	8	2.06	8	0.6
12	12.49			8.5	2.15	8.5	0.38	8.5	2.36	8.5	1.04
				9	2.34	9	1.88	9	2.88	9	1.78
				9.5	3.28	9.5	16.28	9.5	3.77	9.5	14.44
				10	11.42	10	0.9	10	10.99	10	1.64
				10.5	11.87	10.5	0.52	10.5	11.81	10.5	0.48
				11	12.13	11	0.32	11	12.05	11	0.34
				11.5	12.29			11.5	12.22	11.5	0.24
								12	12.34		



Tabla 29. Valores obtenidos para determinar grupos ácidos de posos de café

1A				2A				3A			
VOLUMEN HCl	pH	Vol HCl	DpH/Dvol	VOLUMEN HCl	pH	Vol HCl	DpH/Dvol	VOLUMEN HCl	pH	Vol HCl	DpH/Dvol
0	12.93	0	-0.1	0	12.94	0	-0.22	0	12.94	0	-0.18
0.5	12.88	0.5	-0.3	0.5	12.83	0.5	-0.18	0.5	12.85	0.5	-0.24
1	12.73	1	-0.28	1	12.74	1	-0.48	1	12.73	1	-0.3
1.5	12.59	1.5	-0.76	1.5	12.5	1.5	-0.56	1.5	12.58	1.5	-0.72
2	12.21	2	-1.04	2	12.22	2	-1.88	2	12.22	2	-1.46
2.5	11.69	2.5	-2.02	2.5	11.28	2.5	-1.78	2.5	11.49	2.5	-1.9
3	10.68	3	-2.86	3	10.39	3	-2.34	3	10.54	3	-2.6
3.5	9.25	3.5	-3.96	3.5	9.22	3.5	-4.58	3.5	9.24	3.5	-5.42
4	7.27	4	-2.3	4	6.93	4	-2.54	4	6.53	4	-2.94
4.5	6.12	4.5	-3.32	4.5	5.66	4.5	-2.42	4.5	5.06	4.5	-1.22
5	4.46	5	-2.58	5	4.45	5	-2.6	5	4.45	5	-2.58
5.5	3.17	5.5	-1.58	5.5	3.15	5.5	-1.64	5.5	3.16	5.5	-1.9
6	2.38	6	-0.6	6	2.33	6	-0.56	6	2.21	6	-0.84
6.5	2.08	6.5	-0.36	6.5	2.05	6.5	-0.46	6.5	1.79	6.5	-0.16
7	1.9	7	-0.26	7	1.82	7	-0.26	7	1.71		
7.5	1.77			7.5	1.69						



Figura 34. Obtención de volumen equivalente para grupos básicos con posos de café

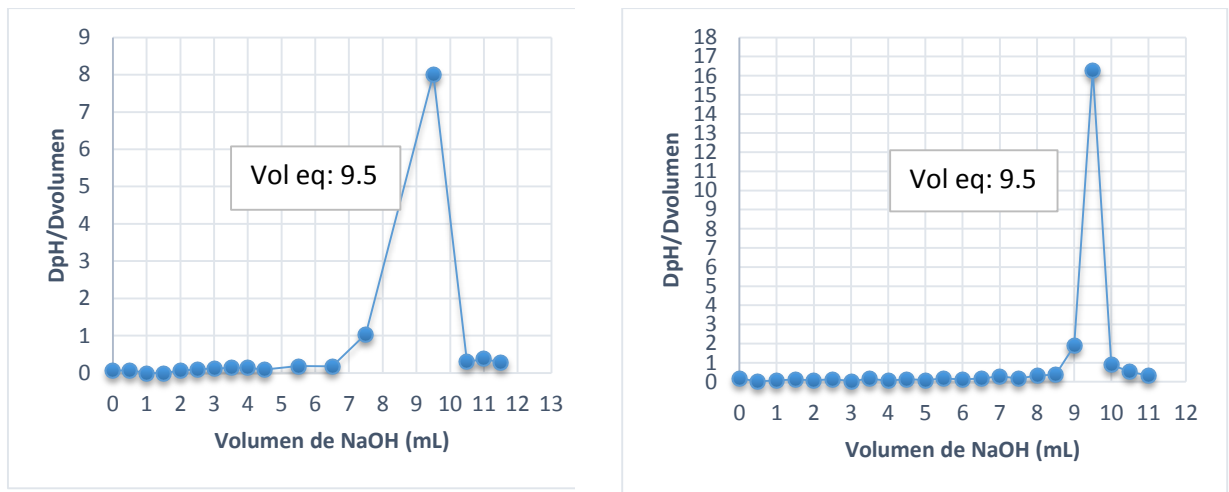
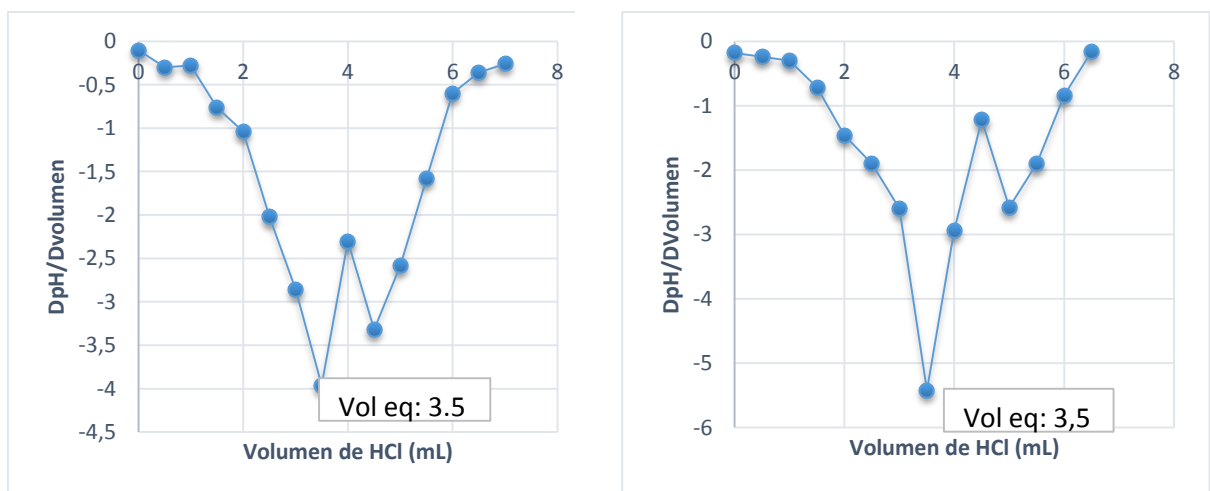


Figura 35. Obtención de volumen equivalente para grupos ácidos con posos de café





ANEXO B

Tabla 30. Valores obtenidos para determinar grupos básicos de TR

1B				2B				3B			
VOLUMEN NaOH	pH	Vol NaOH	DpH/Dvol	VOLUMEN NaOH	pH	Vol NaOH	DpH/Dvol	VOLUMEN NaOH	pH	Vol NaOH	DpH/Dvol
0	0.99	0	0.02	0	0.94	0	0.02	0	0.98	0	0.04
0.5	1	0.5	0.06	0.5	0.95	0.5	0.2	0.5	1	0.5	0.02
1	1.03	1	0.26	1	1.05	1	0.26	1	1.01	1	0.14
1.5	1.16	1.5	0.08	1.5	1.18	1.5	0.08	1.5	1.08	1.5	0.02
2	1.2	2	0.06	2	1.22	2	0.06	2	1.09	2	0
2.5	1.23	2.5	0.1	2.5	1.25	2.5	0.14	2.5	1.09	2.5	0.1
3	1.28	3	0.04	3	1.32	3	0.06	3	1.14	3	0.1
3.5	1.3	3.5	0.1	3.5	1.35	3.5	0.04	3.5	1.19	3.5	0.04
4	1.35	4	0.08	4	1.37	4	0.04	4	1.21	4	0.02
4.5	1.39	4.5	0.02	4.5	1.39	4.5	0.04	4.5	1.22	4.5	0.08
5	1.4	5	0.04	5	1.41	5	0.02	5	1.26	5	0.22
5.5	1.42	5.5	0.12	5.5	1.42	5.5	0.18	5.5	1.37	5.5	0.44
6	1.48	6	0.08	6	1.51	6	2	6	1.59	6	0.6
6.5	1.52	6.5	2.3	6.5	2.51	6.5	3.6	6.5	1.89	6.5	0.76
7	2.67	7	6.4	7	4.31	7	4.78	7	2.27	7	4.74
7.5	5.87	7.5	11.16	7.5	6.7	7.5	7.18	7.5	4.64	7.5	5.92
8	11.45	8	0.86	8	10.29	8	2.86	8	7.6	8	3.36
8.5	11.88	8.5	0.24	8.5	11.72	8.5	0.6	8.5	9.28	8.5	2.94
9	12	9	0.5	9	12.02	9	0.42	9	10.75	9	2.5
9.5	12.25	9.5	0.1	9.5	12.23	9.5	0.14	9.5	12	9.5	0.4
10	12.3	10	0.28	10	12.3	10	0.22	10	12.2	10	0.1
10.5	12.44			10.5	12.41			10.5	12.25		



Tabla 31. Valores obtenidos para determinar grupos ácidos de TR

1A				2A				3A			
VOLUMEN HCl (mL)	pH	VOLUMEN HCl (ml)	DpH/Dvol	VOLUMEN HCl (mL)	pH	VOLUMEN HCl (ml)	DpH/Dvol	VOLUMEN HCl (mL)	pH	VOLUMEN HCl (ml)	DpH/Dvol
0	13.15	0	-0.24	0	13.15	0	-0.04	0	12.82	0	-0.16
0.5	13.03	0.5	-0.24	0.5	13.13	0.5	-0.24	0.5	12.74	0.5	-0.4
1	12.91	1	-0.3	1	13.01	1	-0.3	1	12.54	1	-0.66
1.5	12.76	1.5	-0.36	1.5	12.86	1.5	-0.32	1.5	12.21	1.5	-1.76
2	12.58	2	-0.64	2	12.7	2	-0.5	2	11.33	2	-1.64
2.5	12.26	2.5	-1.64	2.5	12.45	2.5	-0.82	2.5	10.51	2.5	-1.42
3	11.44	3	-2.76	3	12.04	3	-3.42	3	9.8	3	-4.78
3.5	10.06	3.5	-5.94	3.5	10.33	3.5	-3.8	3.5	7.41	3.5	-2.02
4	7.09	4	-2.72	4	8.43	4	-4.14	4	6.4	4	-1.56
4.5	5.73	4.5	-1.78	4.5	6.36	4.5	-2.24	4.5	5.62	4.5	-1.64
5	4.84	5	-1.36	5	5.24	5	-0.98	5	4.8	5	-1.14
5.5	4.16	5.5	-1.72	5.5	4.75	5.5	-1.36	5.5	4.23	5.5	-2.58
6	3.3	6	-1.88	6	4.07	6	-2.9	6	2.94	6	-1.32
6.5	2.36	6.5	-0.64	6.5	2.62	6.5	-0.72	6.5	2.28	6.5	-0.48
7	2.04	7	-0.32	7	2.26	7	-0.52	7	2.04	7	-0.4
7.5	1.88	7.5	-0.04	7.5	2	7.5	-0.18	7.5	1.84		
8	1.86			8	1.91						



Figura 36. Obtención de volumen equivalente para grupos básicos con TR

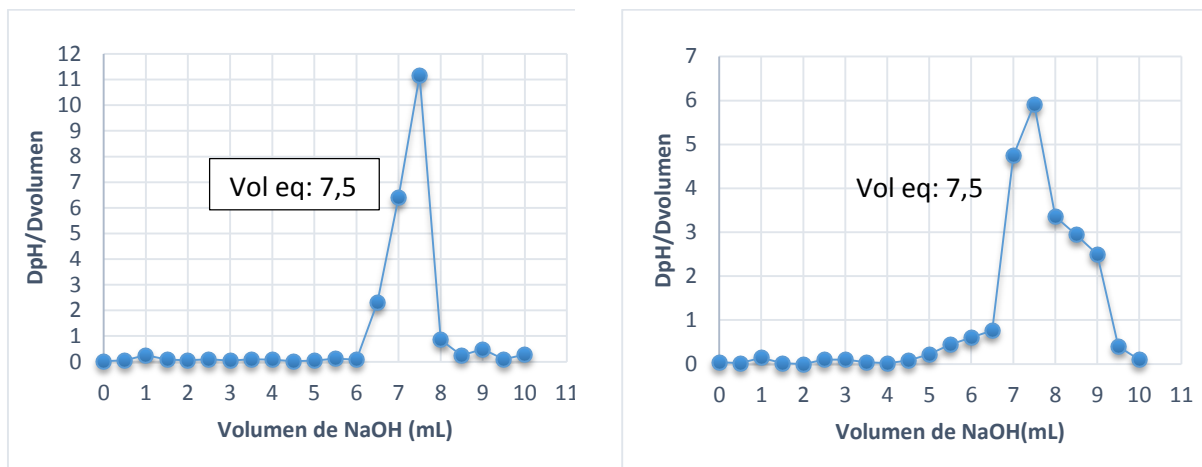


Figura 37. Obtención de volumen equivalente para grupos ácidos con TR

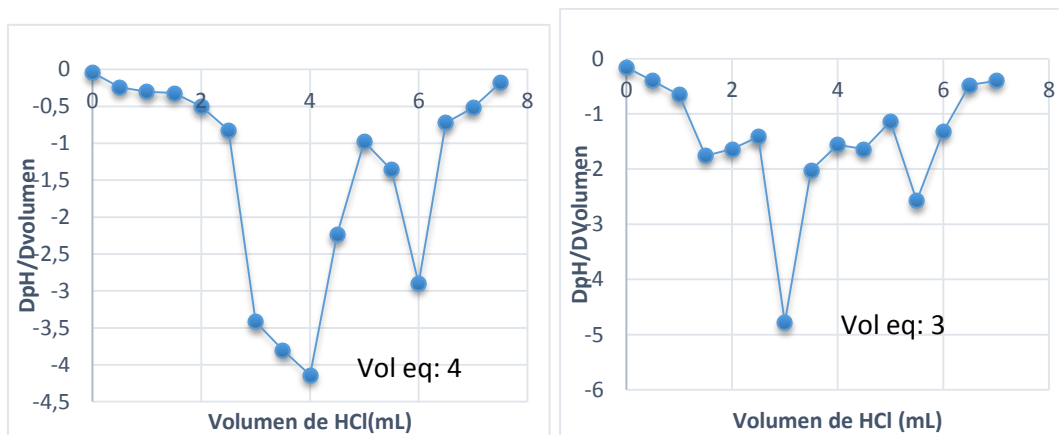




Tabla 32. Valores obtenidos para determinar grupos básicos de TRSC

1B				2B				3B			
VOLUMEN NaOH	pH	Vol NaOH	DpH/Dvol	VOLUMEN NaOH	pH	Vol NaOH	DpH/Dvol	VOLUMEN NaOH	pH	Vol NaOH	DpH/Dvol
0	0.99	0	0.68	0	1.24	0	1.68	0	1.25	0	1
0.5	1.33	0.5	1.32	0.5	2.08	0.5	0.06	0.5	1.75	0.5	0.52
1	1.99	1	0.34	1	2.11	1	0.08	1	2.01	1	0.24
1.5	2.16	1.5	0.18	1.5	2.15	1.5	0.1	1.5	2.13	1.5	0.08
2	2.25	2	0.16	2	2.2	2	0.16	2	2.17	2	0.16
2.5	2.33	2.5	0.1	2.5	2.28	2.5	0.06	2.5	2.25	2.5	0.14
3	2.38	3	0.16	3	2.31	3	0.26	3	2.32	3	0.2
3.5	2.46	3.5	0.24	3.5	2.44	3.5	0.2	3.5	2.42	3.5	0.22
4	2.58	4	0.64	4	2.54	4	0.62	4	2.53	4	0.6
4.5	2.9	4.5	0.64	4.5	2.85	4.5	0.64	4.5	2.83	4.5	0.32
5	3.22	5	0.7	5	3.17	5	1.34	5	2.99	5	1.62
5.5	3.57	5.5	0.38	5.5	3.84	5.5	1.54	5.5	3.8	5.5	1.5
6	3.76	6	0.62	6	4.61	6	0.76	6	4.55	6	0.4
6.5	4.07	6.5	0.62	6.5	4.99	6.5	0.76	6.5	4.75	6.5	1.7
7	4.38	7	0.62	7	5.37	7	0.76	7	5.6	7	0.42
7.5	4.69	7.5	4.92	7.5	5.75	7.5	3.06	7.5	5.81	7.5	3.58
8	7.15	8	9.46	8	7.28	8	8.88	8	7.6	8	6.54
8.5	11.88	8.5	0.24	8.5	11.72	8.5	0.78	8.5	10.87	8.5	0.52
9	12	9	0.5	9	12.11	9	0.26	9	11.13	9	0.94
9.5	12.25	9.5	0.1	9.5	12.24	9.5	0.16	9.5	11.6	9.5	1.1
10	12.3	10	0.28	10	12.32	10	0.26	10	12.15	10	0.2
10.5	12.44			10.5	12.45			10.5	12.25		



Tabla 33. Valores obtenidos para determinar grupos ácidos de TRSC

1A				2A				3A			
VOLUMEN HCl	pH	VOL HCl	DpH/Dvol	VOLUMEN HCl	pH	VOL HCl	DpH/Dvol	VOLUMEN HCl	pH	VOL HCl	DpH/Dvol
0	14.42	0	-2.78	0	14.2	0	-0.42	0	13.92	0	-0.66
0.5	13.03	0.5	-0.22	0.5	13.99	0.5	-0.36	0.5	13.59	0.5	-0.36
1	12.92	1	-0.36	1	13.81	1	-0.36	1	13.41	1	-0.18
1.5	12.74	1.5	-0.34	1.5	13.63	1.5	-0.4	1.5	13.32	1.5	-0.4
2	12.57	2	-0.68	2	13.43	2	-2.7	2	13.12	2	-2.22
2.5	12.23	2.5	-1.12	2.5	12.08	2.5	-0.88	2.5	12.01	2.5	-0.9
3	11.67	3	-3.14	3	11.64	3	-2.42	3	11.56	3	-2.86
3.5	10.1	3.5	-1.12	3.5	10.43	3.5	-0.2	3.5	10.13	3.5	-0.68
4	9.54	4	-6.08	4	10.33	4	-0.4	4	9.79	4	-0.66
4.5	6.5	4.5	-3.32	4.5	10.13	4.5	-7.78	4.5	9.46	4.5	-3.32
5	4.84	5	-1.26	5	6.24	5	-4.56	5	7.8	5	-7.34
5.5	4.21	5.5	-1.82	5.5	3.96	5.5	-0.4	5.5	4.13	5.5	-2.38
6	3.3	6	-0.74	6	3.76	6	-1.3	6	2.94	6	-1.32
6.5	2.93	6.5	-0.76	6.5	3.11	6.5	-1	6.5	2.28	6.5	-0.48
7	2.55	7	-0.36	7	2.61	7	-0.46	7	2.04	7	-0.4
7.5	2.37	7.5	-1.18	7.5	2.38	7.5	-0.5	7.5	1.84		
8	1.78			8	2.13						



Figura 38. Obtención de volumen equivalente para grupos básicos con TRSC

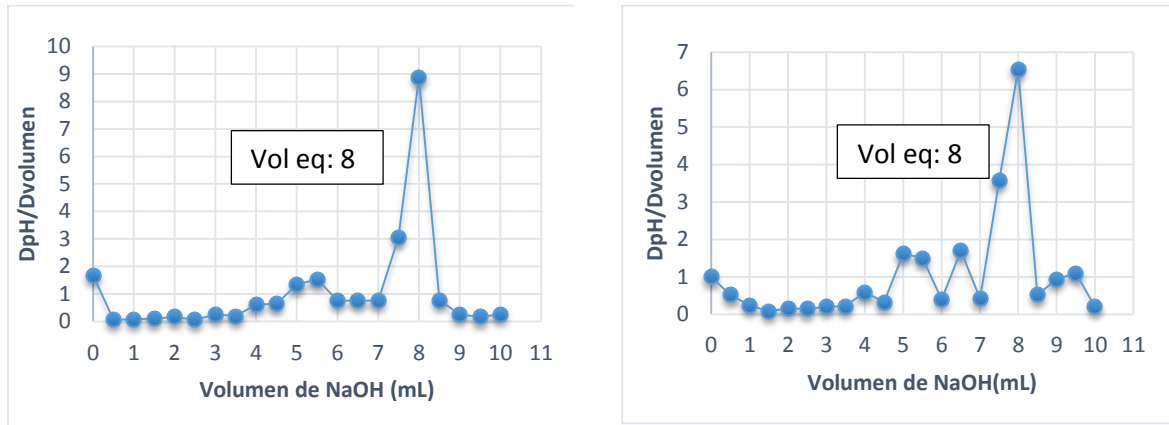
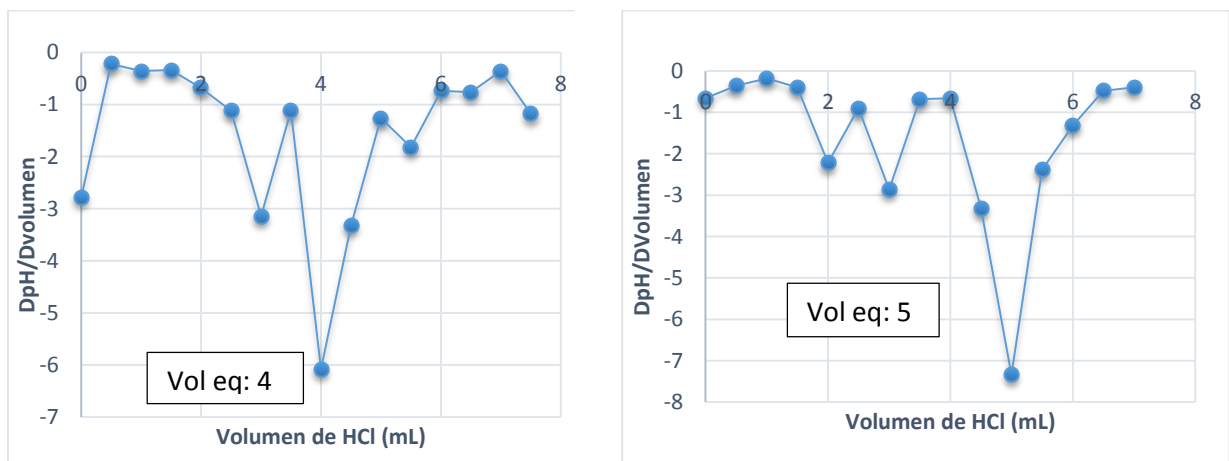


Figura 39. Obtención de volumen equivalente para grupos básicos con TRSC



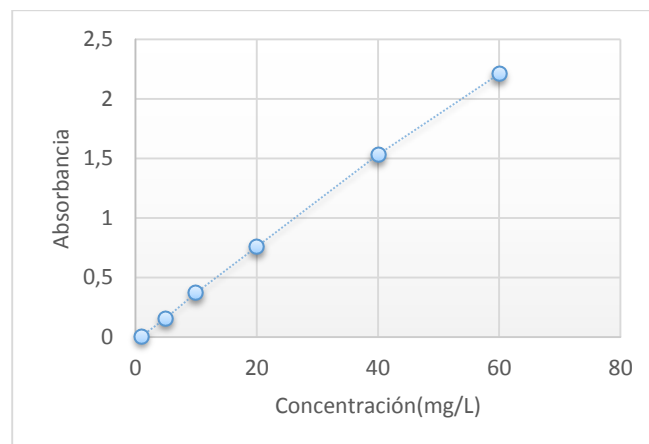


ANEXO C

Tabla 34. Valores de absorbancia a una longitud de onda de 221nm y pH=4

CONCENTRACION (mg/L)	REGULACION DE PH PARA LA CURVA	ABSORBANCIA
60	4.09	2.21
40	4.2	1.533
20	4.43	0.757
10	4.67	0.371
5	4.66	0.159
1	4.5	0.007

Figura 40. Curva de calibración de ibuprofeno a 221nm, pH=4

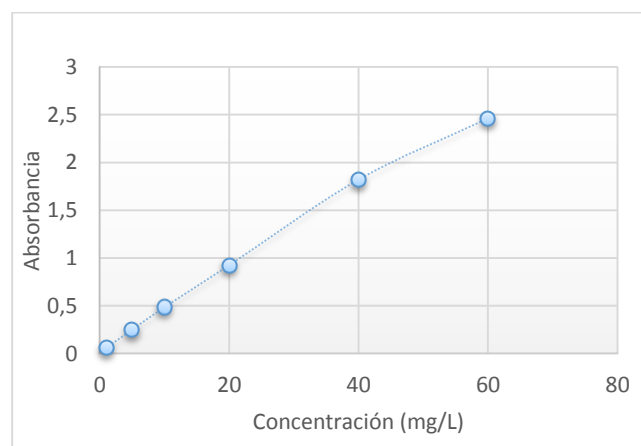


R=1.00 x10⁰⁰
 Pendiente: 0.0378
 Desviación estándar: 2,72x10⁻²

Tabla 35. Valores de absorbancia a una longitud de onda de 221nm y pH=6

CONCENTRACION (mg/L)	REGULACIÓN DE PH PARA LA CURVA	ABSORBANCIA
60	6.45	2.46
40	6.82	1.82
20	6.88	0.925
10	6.77	0.487
5	6.87	0.25
1	6.6	0.063

Figura 41. Curva de calibración de ibuprofeno a 221nm, pH=6



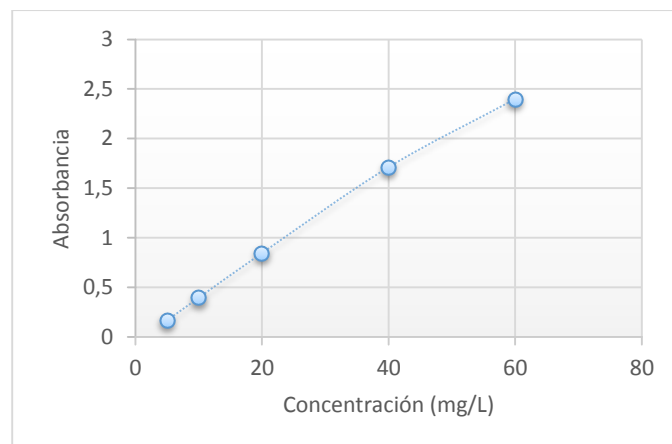
R=9,98x10⁻¹
 Pendiente= 0.0412
 Desviación estándar= 7.26x10⁻²



Tabla 36. Valores de absorbancia a una longitud de onda de 221nm y pH=10

CONCENTRACION	REGULACIÓN DE PH PARA LA CURVA	ABSORBANCIA
60	10.78	2.398
40	10.05	1.712
20	10.34	0.847
10	10.66	0.397
5	10.66	0.17

Figura 42. Curva de calibración de ibuprofeno a 221nm, pH=10



R=9.99x10⁻¹
 Pendiente=0.0413
 Desviación estándar= 5.69x10⁻²

ANEXO D

	abs	conc (mg/L)
	2,258	58.5
	2,268	58.77
	2,313	59.95
	2,334	60.51
	2,239	58
	2,247	58.21
	2,322	60.19
	2,336	60.56
	2,269	58.79
	2,299	59.58
MEDIA		59.306
DESV. ESTA		0.966289582
COEF. VARIA		0.016293285
REPETIBILIDAD		1%
	M	0.0378
	B	0.0445
	R2	0.999
	DESV	0.025
LIM. DETECCION		0.806878307
LIM. CUANTIF		5.436507937
SENSIBILIDAD		0.0378



ANEXO E

ESTUDIO PRELIMINAR DE CAFEINA

Se ha realizado una prueba preliminar de detección de cafeína del agua filtrada luego de proceso de agitación, este estudio se lo efectuó por cromatografía de líquidos de alta resolución (HPLC) previo un proceso de extracción de fase sólida en el cual se trató y concentró la muestra, se obtuvo un valor 0,047mg/L de cafeína, este valor es comparado con la concentración de 0,02 y 0,3 mg/L detectado en aguas residuales domésticas y con 0,0015mg/L detectado en los ríos (Hernández y col., 2015)