

TECNOLÓGICO DE ESTUDIOS SUPERIORES DE TIANGUISTENCO

DIVISIÓN DE INGENIERÍA AMBIENTAL

OPCIÓN IX TESIS

Diseño y construcción de un reactor fotocatalítico para la degradación del
fármaco ibuprofeno y el colorante verde malaquita

**Que para obtener el Título de
INGENIERO AMBIENTAL**

PRESENTA

Miguel Angel Sernas González

DIRECTORA

Dra. Bethsabet Jaramillo Sierra

SEPTIEMBRE 2024

Dedicatoria

Esta Tesis esta dedicada principalmente a mis padres que Gaudencio Sernas Ramírez y Consuelo González Aguilar que han sido los principales en apoyarme económica y emocionalmente, así como Ximena Aguilar Alvirde por su apoyo emocional. A mis amigos que han estado en momentos esenciales y a mis maestros por sus enseñanzas.

Agradecimientos

Un agradecimiento al Tecnológico de estudios Superiores de Tianguistenco que gracias a su formación profesional fue posible la realización de este proyecto y de llegar a esta etapa final.

Un agradecimiento a mi director de tesis la Dra. Bethsabet Jaramillo Sierra ya que fue ella la que me brindo la oportunidad de unirme a su equipo de trabajo, así como gracias a sus conocimientos adquiridos durante mi desarrollo profesional.

Un agradecimiento a mis asesores Dr. Mario Ibáñez Olvera y Mtra. María Elena Alvarado Diaz por haberme brindado de su tiempo y guiarme correctamente en esta etapa final de mi formación profesional.

Un agradecimiento al Dr. Juan José Hernández Torres por realizar todos los tramites correspondientes de titulación y esta Tesis pueda participar en áreas de investigación.

Se agradece a Tecnológico nacional de México por el apoyo otorgado atreves de la convocatoria proyectos de investigación científica desarrollo tecnológico e innovación 2024 atreves del proyecto “Contaminación ambiental por fármacos: impacto en el agua y alternativa optima de oxidación (20409.24-PD)”.

RESUMEN

Considerando que el agua es un recurso natural no renovable y es de gran importancia para la supervivencia de los seres vivos, se debe garantizar su conservación, buen uso y disponibilidad dada su prioridad para garantizar la calidad de vida. El tratamiento por contaminación química y biológica de esta sigue siendo un desafío científico y técnico, ya que los métodos convencionales han demostrado desventajas por la formación de residuos de desinfección, que son nocivos para las personas y el medio ambiente. En este trabajo de investigación comprende el diseño, construcción y evaluación de un reactor fotocatalítico con una geometría cilíndrica para la degradación del fármaco ibuprofeno aplicando los POAs (Procesos de oxidación avanzada) se utilizó radiación ultravioleta 11 W con Peróxido de Hidrógeno (H_2O_2) como catalizador, aprovechando el Ozono (O_3) como agente oxidante, ya que estos generan e incrementan las reacciones de oxidación intensa, formando especies reactivas del Oxígeno y propiciando así una degradación eficiente de los contaminantes presentes en el agua, el resultado de estas reacciones son compuestos más simples, biodegradables y de poca toxicidad.

Para realizar este estudio, se utilizó la impresión en 3D siendo una tecnología nueva para diseñar distintos tipos de reactores en este caso un reactor fotocatalítico el material de este no reacciona con el proceso además este es económico y funcional en el desarrollo experimental. Para la evaluación se realizó una medición de parámetros y una simulación numérica. Los resultados muestran la eficiencia como el comportamiento del proceso.

Palabras clave: agua, contaminación, tratamiento, diseño, construcción, evaluación, reactor, Ibuprofeno, POAs.

ABSTRAC

Considering that water is a non-renewable natural resource and of great importance for the survival of living beings, its conservation, proper use, and availability must be ensured due to its priority in guaranteeing quality of life. Treatment of water pollution, both chemically and biologically, remains a scientific and technical challenge, as conventional methods have shown disadvantages due to the formation of disinfection byproducts that are harmful to people and the environment. In this research work, we designed, constructed, and evaluated a cylindrical photocatalytic reactor for the degradation of the pharmaceutical compound ibuprofen using Advanced Oxidation Processes (AOPs). We employed 11 *W* ultraviolet radiation with hydrogen peroxide (H_2O_2) as a catalyst, harnessing ozone (O_3) as an oxidizing agent. These processes enhance intense oxidation reactions, leading to the efficient degradation of contaminants present in water. The resulting reaction products are simpler, biodegradable, and less toxic.

To conduct this study, we utilized 3D printing technology, a novel approach for designing various reactor types. Specifically, we developed a photocatalytic reactor with material that does not react with the process, making it both cost-effective and functional in experimental development. The evaluation involved parameter measurements and numerical simulations, revealing the efficiency and behavior of the process.

Keywords: water, pollution, treatment, design, construction, evaluation, reactor, ibuprofen, AOPs.

Índice general

Contenido

COMPONENTES DE LA INVESTIGACIÓN	1
Introducción	2
Planteamiento del problema	3
Justificación	4
Objetivos.....	6
Objetivo general	6
Objetivos específicos	6
CAPITULO 1.....	7
Generalidades.....	7
1.1 Agua.....	8
1.1.1 Composición estructural y molecular del agua	8
1.1.2 Estado de agregación del agua	9
1.1.3 Propiedades del agua el agua	10
1.2 Contaminación del agua	12
1.3 Contaminantes emergentes	15
1.3.1 Fármacos	18
1.3.2 Ibuprofeno y medio ambiente	25
1.4 Procesos de oxidación avanzada	27
1.4.1 Fotocatálisis	30
1.5 Reactores fotocatalíticos.....	32
1.5.1 Aplicación de los reactores fotocatalíticos	33
1.5.2 Parámetros para el funcionamiento del reactor fotocatalítico.....	34
1.6 Dinámica de fluidos computacional	38
1.6.1 Simulación numérica de fluidos.....	38
1.6.2 Fundamento matemático.....	38
1.7 Antecedentes	40
CAPITULO 2. Desarrollo experimental	42
2.1 Descripción general	43
2.2 Estudio bibliográfico.....	44
2.3 Diseño de los reactores fotocatalíticos.....	44
2.3.1 Diseño del Prototipo A.....	45
2.3.2 Diseño del Prototipo B.....	46

2.4 Construcción	46
2.4.1 Segmentación	47
2.4.2 Calibración de la impresora 3D	47
2.4.3 Temperatura de impresión.....	49
2.5 Procedimiento experimental.	49
2.5.1 Reactivos e instrumentos utilizados en el desarrollo experimental	49
2.5.2 Preparación de la muestra.	52
2.5.3 Dispositivo experimental.	52
2.5.4 Selección del método de tratamiento	55
2.6 Simulación numérica de fluidos	56
2.6.1 Generación de malla	56
2.6.2 Configuración de entrada y salida	56
CAPITULO 3. Resultados y Discusión.....	58
3.1 Descripción general de los resultados	59
3.2 Diseño del reactor.....	59
3.3 Construcción del reactor	60
3.4 Caracterización de la muestra	62
3.4.1 Estudio cuantitativo	62
3.4.2 Estudio cualitativo	63
3.4.3 Curva de calibración.....	64
3.5 Degradación del fármaco Ibuprofeno: grado analítico	67
3.5.2 Efecto <i>UV/2ml de H₂O₂/O₃</i>	67
3.5.3 Efecto <i>UV/3ml de H₂O₂/O₃</i>	69
3.5.4 Efecto <i>UV/2ml de H₂O₂</i>	72
3.5.4 Efecto <i>O₃</i>	73
3.5.5 Efecto <i>UV</i>	76
3.6 Decoloración del colorante verde malaquita	77
3.6.1 Efecto <i>UV/1 ml de H₂O₂/O₃</i>	77
3.6.2 Efecto <i>UV/1ml de H₂O₂</i>	79
3.6.3 Efecto <i>UV/2ml de H₂O₂</i>	81
3.6.4 Efecto <i>UV/O₃</i>	82
3.6.5 Efecto <i>1ml de H₂O₂/O₃</i>	83
3.6.6 Efecto <i>UV</i>	85
3.6.7 Efecto <i>1 ml de H₂O₂</i>	86

3.6.8 Efecto θ_3	88
3.7 Simulación numérica de fluidos	90
Conclusiones	91
Recomendaciones	93
Referencias	94
Anexos	96

Índice de tablas

Tabla 1. Contaminantes químicos y biológicos Raffo & Ruiz (2014).

Tabla 2. Tipos de CEs Aranda (2022).

Tabla 3. Productos farmacéuticos más frecuentemente encontrados en el medio ambiente Rodea (2019).

Tabla 4. Información química del ibuprofeno BASF (2021).

Tabla 5. Propiedades físicas y químicas del ibuprofeno BASF (2021).

Tabla 6. Potencial de oxidación de diferentes especies Doménch (2004).

Tabla 7. POAs más comunes Doménch (2004).

Tabla 8. Ventajas y desventajas de los procesos de oxidación avanzada Doménch (2004).

Tabla 9. Clasificación de las POAs Terán (2016).

Tabla 10. Equipo y materiales utilizados para la impresión del reactor en 3D

Tabla 11. Descripción de los reactivos e instrumentos que se utilizaron en el desarrollo experimental

Tabla 12. Métodos de tratamiento realizados

Tabla 13. CAD, Segmentación e impresión

Tabla 14. Método de mínimos cuadrados del ibuprofeno

Tabla 15. Método de mínimos cuadrados del verde malaquita

Tabla 16. Determinación de variables efecto $UV/2ml$ de H_2O_2/O_3 ibuprofeno

Tabla 17. Determinación de variables efecto $UV/3ml$ de H_2O_2/O_3 ibuprofeno

Tabla 18. Determinación de variables efecto $UV/2ml$ de H_2O_2 ibuprofeno

Tabla 19. Constantes de velocidad (k en $L\ mol^{-1}s^{-1}$) del radical hidroxilo y ozono

Tabla 20. Determinación de variables efecto O_3 ibuprofeno

Tabla 21. Determinación de variables efecto $UV/1\ ml$ de H_2O_2/O_3 verde malaquita

Tabla 22. Determinación de variables efecto $UV/1\ ml$ de H_2O_2 verde malaquita

Tabla 23. Determinación de variables efecto $UV/2\ ml$ de H_2O_2 verde malaquita

Tabla 24. Determinación de variables efecto UV/O_3 verde malaquita

Tabla 25. Determinación de variables efecto $1ml$ de H_2O_2/O_3 verde malaquita

Tabla 26. Determinación de variables efecto UV verde malaquita

Tabla 27. Determinación de variables efecto $1\ ml$ de H_2O_2 verde malaquita

Tabla 28. Determinación de variables efecto O_3 verde malaquita

Índice de figuras

- Figura 1.** Agua estructura molecular
- Figura 2.** Representación de los estados de agregación del Agua H_2O
- Figura 3.** Ciclo Hidrológico.
- Figura 4.** Proceso fotocatalítico de especies oxidantes Fernández (2004).
- Figura 5.** a) reactor fotocatalítico de recirculación b) reactor fotocatalítico fijo Domínguez (2017).
- Figura 6.** Etapas de la experimentación
- Figura 7.** Plano del Prototipo A realizado en AnsysSpaceclaim
- Figura 8.** Plano del Prototipo B realizado en AnsysSpaceclaim
- Figura 9.** Configuración de nivelación
- Figura 10.** Puntos de nivelación
- Figura 11.** Distancia entre plancha y boquilla
- Figura 12.** Configuración de temperatura
- Figura 13.** Dispositivo experimental
- Figura 14.** Discretización del CAD. Realizado en AnsysAIM
- Figura 15.** Entrada
- Figura 16.** Salida.
- Figura 17.** Cota del Prototipo A, realizado en AnsysSpaceclaim
- Figura 18.** Cota del Prototipo B, realizado en AnsysSpaceclaim
- Figura 19.** Prototipo A
- Figura 20.** Prototipo B
- Figura 21.** Coloración visual del ibuprofeno
- Figura 22.** Decoloración visual del verde malaquita
- Figura 23.** Mecanismo cinético de las principales especies de la descomposición del ozono en agua pura por iones hidróxilo
- Figura 24.** Temperatura del reactor realizado en Ansys AIM
- Figura 25.** Simulación numérica de fluidos realizado en Ansys AIM
- Figura 26.** Constancia del 4° Congreso Internacional de Química
- Figura 27.** Constancia del 2° Congreso Internacional de Mecatrónica Control e Inteligencia artificial

Índice de graficas

Grafica 1. Barrido del ibuprofeno a 200 nm con una concentración de 100ppm.

Grafica 2. Barrido del verde malaquita a 580 nm con una de concentración de 100ppm.

Grafica 3. Curva de calibración Ibuprofeno grado analítico

Grafica 4. Curva de calibración Verde malaquita

Grafica 5. Espectro luz UV-VIS efecto $UV/2ml$ de H_2O_2/O_3 ibuprofeno

Grafica 6. Espectro luz UV-VIS efecto $UV/3ml$ de H_2O_2/O_3 ibuprofeno

Grafica 7. Espectro de luz UV-VIS efecto $UV/2ml$ de H_2O_2 ibuprofeno

Grafica 8. Espectro de luz UV-VIS efecto O_3 ibuprofeno

Grafica 9. Espectro de luz UV-VIS efecto UV ibuprofeno

Grafica 10. Espectro de luz UV-VIS efecto $UV/1 ml$ de H_2O_2/O_3 verde malaquita

Grafica 11. Espectro de luz UV-VIS efecto $UV/1 ml$ de H_2O_2 verde malaquita

Grafica 12. Espectro de luz UV-VIS efecto $UV/2 ml$ de H_2O_2 verde malaquita

Grafica 13. Espectro de luz UV-VIS efecto UV/O_3 verde malaquita

Grafica 14. Espectro de luz UV-VIS efecto $1ml$ de H_2O_2/O_3 verde malaquita

Grafica 15. Espectro de luz UV-VIS efecto UV verde malaquita

Grafica 16. Espectro de luz UV-VIS efecto $1 ml$ de H_2O_2 verde malaquita

Grafica 17. Espectro de luz UV-VIS efecto O_3 verde malaquita

COMPONENTES DE LA INVESTIGACIÓN

Introducción

La preocupación por el estado del medio ambiente es cada vez más evidente en la sociedad. La actividad humana ha llevado a la contaminación de diversas fuentes naturales, lo que resulta en la degradación ambiental y la reducción de la disponibilidad de nuestros recursos naturales para ciertos usos, alterando sus propiedades. Es un hecho que todas las actividades humanas generan residuos, y existe una correlación directa entre el nivel socioeconómico de una comunidad y la cantidad de desechos producidos. Los residuos domésticos, industriales, textiles y agrícolas representan un desafío significativo, al igual que los residuos de laboratorios industriales, aunque en menor medida. Sustancias como plaguicidas, fenoles, detergentes y colorantes son frecuentemente descargados sin tratamiento previo en el medio ambiente. Esta situación nos lleva a buscar y aplicar prácticas de gestión de residuos que sean compatibles con la preservación ambiental. En este trabajo de investigación, se considera diseñar y construir un reactor fotocatalítico que cumpliera las condiciones necesarias para el desarrollo de estos procesos de descontaminación.

Se utilizaron herramientas de ingeniería especializadas en el diseño y construcción del reactor fotocatalítico, este reactor aprovecha la radiación *UV* usando catalizadores con el fin de incrementar la concentración de especies reactivas de Oxígeno para generar una mayor degradación del fármaco ibuprofeno y colorante verde malaquita. La importancia en la construcción de este reactor son los beneficios que se obtendrán y las posibilidades que tendremos en brindar soluciones con nuevas tecnologías aplicadas al medio ambiente.

Se utilizaron muestras de agua contaminadas con el fármaco ibuprofeno y el colorante verde malaquita para evaluar el funcionamiento del reactor fotocatalítico durante la degradación de estos contaminantes aplicando POAs (procesos de oxidación avanzadas), proceso llevado a cabo en el laboratorio del Tecnológico de Estudios Superiores de Tianguistenco. La metodología empleada consiste en colocar la solución contaminada en el reactor fotocatalítico con determinaos catalizadores y evaluar la degradación haciendo mediciones de parámetros resaltando la absorbancia cada determinado tiempo.

Por último se realizó una simulación numérica de fluidos con el software ANSYS AIM para determinar el comportamiento del fluido dentro del reactor así como las variables que intervienen en el desempeño del reactor fotocatalítico.

Planteamiento del problema

La contaminación química es provocada por diferentes sustancias de uso industrial, doméstico y hospitalario, que se encuentran dispersas en el ambiente. Puede considerarse a esta contaminación más grave que la contaminación biológica, dichas sustancias se pueden encontrar en los tres estados de la materia (líquido, sólido y gaseoso) y por lo tanto, pueden depositarse en el suelo, aire y agua. Por esta razón, se pueden encontrar más en los organismos vivos debido a la inevitable interacción con el medio ambiente. También incorporarse de manera fácil en los ciclos bioquímicos principalmente el ciclo del agua, provocando de esta forma daños severos en el ambiente.

La contaminación del agua se define como la presencia de sustancias u organismos extraños en el cuerpo de agua en tal cantidad y en tales características que alteran su estado base trae consecuencias para el humano y todos los organismos vivos. El ciclo más conocido es el hidrológico. El agua en sus tres estados de segregación constantemente está en movimiento en el ambiente. El agua que termina sobre la superficie de la tierra retorna de la atmósfera, el agua continúa fluyendo o filtrándose por el subsuelo se convierte en agua subterránea que alimenta los lagos, ríos y eventualmente termina en el océano. Ya sean aguas subterráneas o superficiales, deben ser tratadas de cualquier manera ya que contiene concentraciones de contaminantes que causan daños a al medio ambiente y a la salud humana en general.

Los contaminantes emergentes son compuestos de distinto origen químico producto de las actividades humanas que han pasado desapercibidos ya que se generan en pequeñas cantidades por lo cual también son conocidos como micro contaminantes y en su mayoría no se encuentran regulados, pero aun en bajas concentraciones puede tener un efecto negativo en los seres vivos ya que se van acumulando en el entorno.

Es por este motivo, la importancia de aplicar nuevas tecnologías las cuales disminuyan significativamente la contaminación del agua. Con base en lo anterior se presenta el diseño y construcción de un reactor fotocatalítico para la degradación del fármaco ibuprofeno.

En el reactor se aplicarán POAs procesos de oxidación avanzada el cual genera especies reactivas oxidantes en medio acuoso, estas especies reaccionan con el contaminante degradando sin dejar otros contaminantes en el proceso.

Justificación

Nacional e Internacionalmente el tratamiento de aguas residuales es de carácter obligatorio para evitar el daño adverso que puede ocasionar un líquido con un grado de contaminación, ya que estos abastecen las necesidades de todos los seres vivos. Existen diversos compuestos que modifican la calidad del agua, entre los cuales se destacan los contaminantes emergentes (CEs), los cuales se caracterizan por encontrarse a bajas concentraciones, no son biodegradable, y actualmente la legislación no regula la disposición final de estos contaminantes, por lo tanto estos pasan inadvertidos en los tratamientos empleados, siendo nocivos causando impacto ambiental en la alteración del medio ambiente y afectando la salud de los seres vivos.

Entre las principales tecnologías de tratamiento para este tipo de contaminantes se encuentran los tratamientos de adsorción, filtración, ultrafiltración, osmosis inversa; carbón activado, membrana, sin embargo, suelen ser de alto costo, difíciles de implementar y su operación compleja.

Mientras que los Procesos de Oxidación Avanzada (POAs) han demostrado que tienen una elevada capacidad de reducir contaminantes ya sean químicos o biológicos, sienten una tecnología verde ya que no libera CO_2 , ni gases de efecto invernadero.

Los Procesos de Oxidación Avanzada (POAs), son una tecnología que ha sido ampliamente estudiada a nivel de laboratorio, pero que se ha aplicado recientemente en tratamiento de aguas residuales provenientes de industrial y hospitales mostrando buenos resultados en la foto degradación de contaminantes internos como

- Contaminantes emergentes.
- Virus, bacterias y hongos.

Para el funcionamiento de los POAs requieren tres elementos básicos:

- Un fotocatalizador (O_3 , H_2O_2 .)
- Una fuente de luz *UV* natural o artificial.
- Un reactor de tratamiento.

El diseño de reactores es fundamental para el tratamiento de contaminantes presentes en el medio ambiente, en donde el diseño y construcción depende de diversos factores principalmente:

- Características fisicoquímicas del analito
- El principio de los métodos que serán utilizados
- El volumen del tratamiento

- El espacio donde será operado

Considerando estas características es posible determinar la configuración, dimensiones y materiales a utilizar, cuando los reactores de tratamiento ya han sido construidos son puestos en operación y se determina su efectividad.

Para que se lleve a cabo un proceso óptimo y eficaz en el tratamiento propuesto las reacciones químicas que ocurren en el reactor son de suma importancia ya que si no se llevan adecuadamente el tratamiento será poco eficiente.

Depender únicamente de las pruebas de laboratorio para verificar los procesos químicos significa pérdida de materiales y de recurso. Dados los ciclos de diseño más cortos de hoy en día, la simulación de procesos químicos es una herramienta moderna que se ha hecho indispensable para la eficiencia adecuada de los procesos de tratamiento de aguas residual y lograr diseños rentables. Permite efectuar el análisis del proceso tratamiento de aguas residuales en operación.

Objetivos

Objetivo general

Diseñar, construir y evaluar un reactor fotocatalítico para la degradación del fármaco ibuprofeno y validar su funcionalidad con relación a los parámetros experimentales.

Objetivos específicos

DISEÑO: Determinar una geometría para que el reactor sea eficiente y optimo.

CONSTRUCCIÓN: Imprimir en 3D los prototipos diseñados de manera rápida y económica.

APLICACIÓN: Acondicionar el reactor en el laboratorio para utilizar correctamente los POAs seleccionados (UV , H_2O_2 y O_3).

EVALUACIÓN: Evaluar cada prueba realizada y determinar el proceso más eficiente para la degradación del contaminante.

SIMULACIÓN: Realizar una simulación numérica de fluidos para observar detalladamente el funcionamiento del reactor.

CAPITULO 1.

Generalidades

1.1 Agua

El agua es uno de los recursos más importantes para la vida en el planeta. Los seres humanos dependemos de su disponibilidad no sólo para el consumo doméstico, sino también para el funcionamiento y continuidad de las actividades agrícolas e industriales.

El agua es una sustancia de suma importancia para la vida con excepcionales propiedades consecuencia de su composición y estructura. Es una molécula sencilla formada por tres pequeños átomos, uno de oxígeno y dos de hidrógeno, con enlaces polares que permiten establecer puentes de hidrógeno no entre moléculas adyacentes. Este enlace tiene una gran importancia porque confiere el agua propiedades que corresponden con mayor masa molecular, de ahí sus elevados puntos de fusión y ebullición, impredecibles para que el agua se encuentre en estado líquido a la temperatura de la tierra Vaquero y Toxqui (2012).

Su alto calor específico la convierte en un excepcional amortiguador y regulador de los cambios térmicos, manteniendo la temperatura corporal constante, el alto valor del calor de vaporización permite eliminar, por medio del sudor, grandes cantidades de calor preservándonos de los golpes de calor. Otra propiedad que hace esta molécula sea única es su amplia capacidad como disolvente de sustancias polares. teniendo en cuenta mayormente agua, la casi totalidad de las reacciones químicas producidas en medio ambiente se realizan en medio acuoso. El transporte de nutrientes y metabolitos la extracción de sustancias de desecho también se realiza a través del agua Vaquero y Toxqui (2012).

El agua superficial y subterránea son de importancia para el funcionamiento y mantenimiento de los ecosistemas naturales y su biodiversidad. Sin el agua que garantice su función y mantenimiento, los ecosistemas naturales se degradan, pierden su biodiversidad y con ello dejan de proveer o reducen la calidad de los bienes y servicios ambientales que sostienen a las sociedades SEMARNAT (2008).

1.1.1 Composición estructural y molecular del agua

El agua es una molécula formada por dos átomos de hidrógeno (H) y uno de oxígeno (O). Unidos por enlaces covalentes muy fuertes que hacen que la molécula sea muy estable. Tiene una distribución irregular en la densidad electrónica, el oxígeno uno de los elementos más electronegativos, atrae hacia sí los electrones de ambos enlaces covalentes de manera que alrededor del átomo de oxígeno se concentre la mayor electrónica (carga negativa) y cerca de los hidrógenos la menor (carga positiva). La molécula tiene una geometría angular (los átomos de hidrógeno la menor carga positiva). La molécula tiene una geometría angular (los átomos de hidrógeno la menor carga positiva). La molécula tiene una geometría angular (los átomos de hidrógeno forman un ángulo de 105°) como se muestra en la figura 1a.

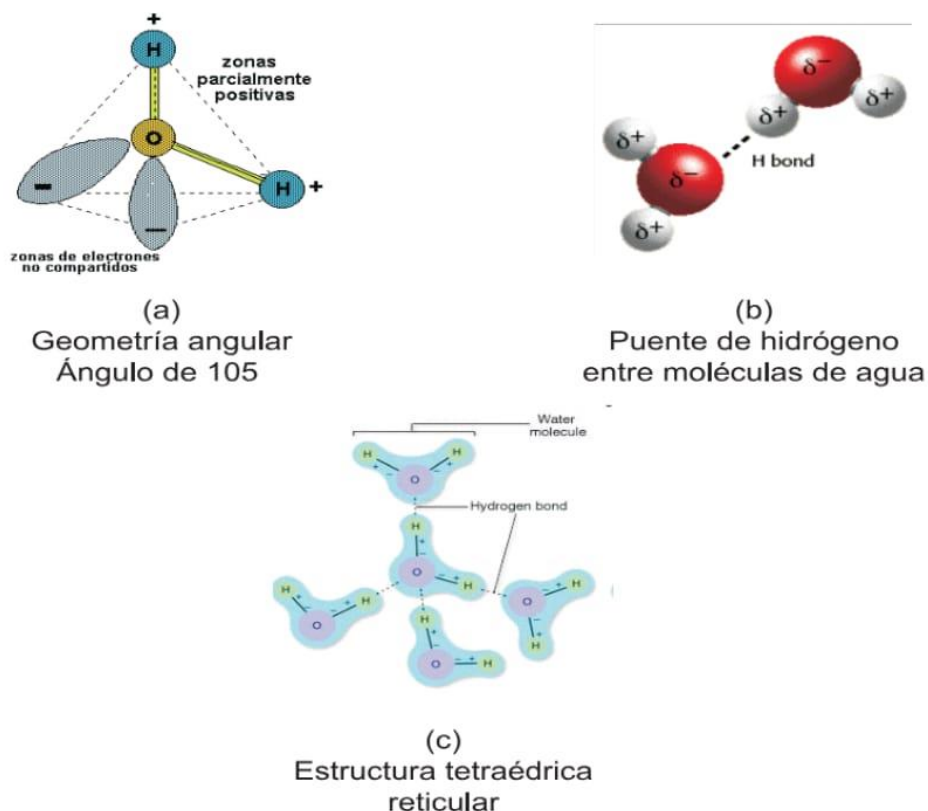


Figura 1. Agua estructura molecular.

La atracción electrostática entre la carga parcial positiva cercana a los átomos de hidrógeno de una molécula de agua y la carga parcial negativa cercana al oxígeno de otra, permite la unión de moléculas de agua mediante un enlace químico esencial para la vida y que explica sus propiedades físicas, químicas. El puente de hidrógeno se muestra en la figura 1b.

Este enlace solo requiere que el átomo electronegativo (el oxígeno) que atrae al hidrógeno tenga una geometría que permita que el hidrógeno haga un puente entre los dos átomos electronegativos. Cada molécula de agua puede potencialmente formar cuatro puentes de hidrógeno con otras tantas moléculas de agua dando lugar a una estructura responsable de sus propiedades fisicoquímicas. Como se muestra en la figura 1c.

1.1.2 Estado de agregación del agua.

Por lo menos al principio, de todas las sustancias pueden existir en tres estados: sólidos, líquidos y gas, como se muestra en la figura 2 los gases difieren de los líquidos y sólidos en la distancia que media entre las moléculas. En un sólido, las moléculas se mantienen juntas de manera ordenada, con escasa libertad de

movimiento, las moléculas de un líquido están cerca unas de otras, sin que se mantengan en una posición rígida, por lo que pueden moverse. En un gas, las moléculas están separadas entre sí por distancias grandes en comparación con el tamaño de las moléculas mismas, son posibles las conservaciones entre los tres estados de la materia sin que cambie la composición de la materia. Al calentar un sólido (hielo) se funde y se transforma en el líquido (agua), la temperatura en la que ocurre esa transición se denomina punto de fusión, esta conversión sobreviene en el punto de ebullición del líquido, por otra parte, el enfriamiento de un gas hace que se condense en la forma de líquido

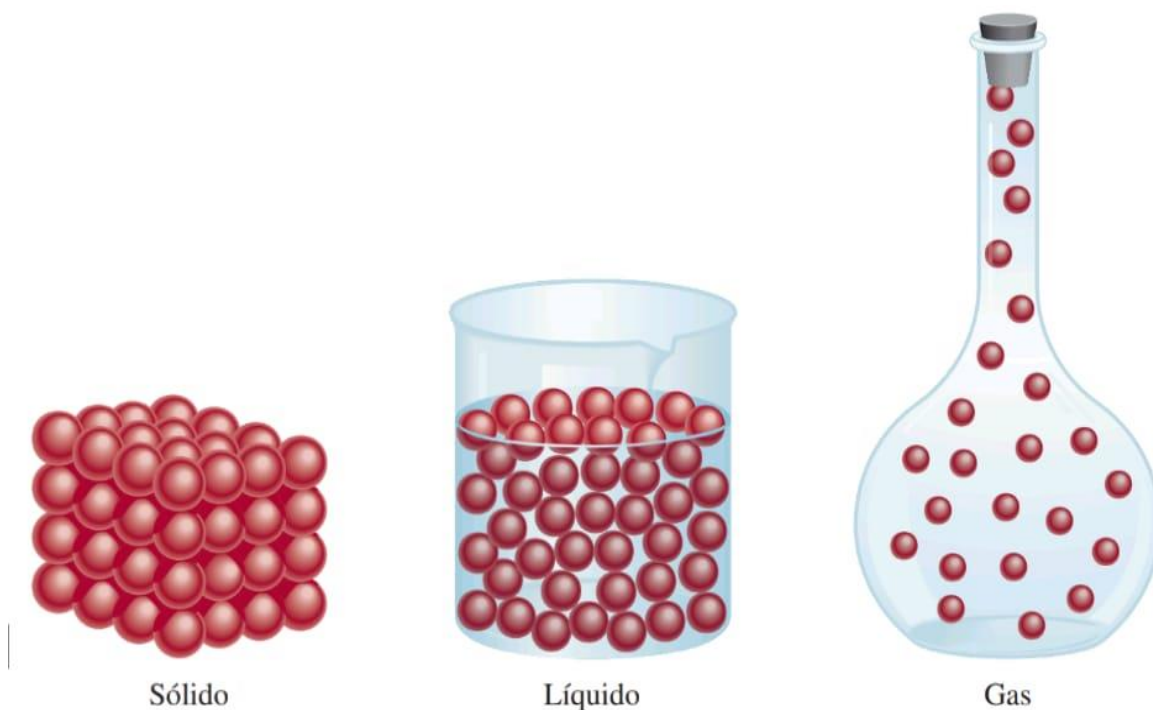


Figura 2. Representación de los estados de agregación del Agua H_2O .

1.1.3 Propiedades del agua el agua

Propiedades físicas

El agua es elemental para la vida posee cualidades que le convierten en una sustancia única y muy preciada.

Es la única sustancia que se puede encontrar en los tres estados de la materia (líquido, sólido y gaseoso) de forma natural en la tierra. El agua en su forma solida hielo es menos densa de la líquida.

No tiene color; sabor ni olor. Su punto de congelación es $0^{\circ}C$, mientras que la ebullición es a $100^{\circ}C$ (a nivel del mar). El agua del planeta está combinada constantemente y siempre está en movimiento.

El agua tiene un alto índice de calor, es decir que tiene la capacidad de absorber mucho calor antes de que suba su temperatura. Por este motivo, el agua es relevante como enfriador como enfriador en el sector industrial y ayuda a regular al cambio de temperatura del aire durante las estaciones del año.

El agua posee una tensión superficial muy alta, lo que significa que sea pegajosa y elástica. Se une en gotas en vez de separarse. Esta cualidad proporciona el agua la acción capilar, es decir que se puede desplazar por medio de las raíces de las plantas y los vasos sanguíneos y disolver sustancias CONAGUA (2018).

Propiedades químicas

La fórmula química del agua (H_2O). La molécula del agua tiene carga eléctrica positiva y del otro lado negativo. Debido a que las cargas eléctricas opuestas se atraen, las moléculas del agua se atraen, las moléculas del agua tienden a unirse unas con otras. También es conocida como el “solvente natural”, ya que disuelve más sustancias que cualquier otro líquido, contiene valiosos nutrientes y minerales importantes para organismo y el medio ambiente.

El potencial de hidrógeno (pH) es una medida natural de acidez o alcalinidad de una disolución el agua pura tiene un (pH) neutro de 7, lo que significa que no es ácida ni básica reacciona con los óxidos ácidos.

Otras de sus propiedades químicas son

- Reacciona con los óxidos y bases (combinación de un elemento metálico con el oxígeno.)
- Reacciona con metales.
- Reacciona con No metales.
- Se une en las sales formando hidratos

1.2 Contaminación del agua

La contaminación del agua o contaminación hídrica tiene lugar cuando los cuerpos de agua naturales (como aguas superficiales, subterráneas y mares), tienen presencia de diversos tipos de sustancias químicas externas a su composición original, que modifican sus propiedades haciéndola insalubre, dañina para la vida y por lo tanto no apta para la pesca, agricultura recreación y consumo humano. El agua es la sustancia líquida más abundante del planeta y solvente universal presente en la mayoría de las sustancias y en todos los seres vivos y que sin ella no podría existir la vida misma Guadarrama (2016).

Sin embargo eso no ha impedido que numerosas actividades humanas generen un impacto importante en la calidad del agua del planeta mediante el desecho de sustancias líquidas y sólidas e incluso gaseosas en el ambiente.

De acuerdo con la comisión nacional del agua (CONAGUA) más del 60% del agua potable en México tiene algún tipo de contaminación. Se han documentado muchos casos de contaminación del agua que han tenido impactos significativos en el medio ambiente, la salud pública y la economía. Estos casos demuestran la necesidad urgente de abordar la gestión del agua de manera integral y sostenible para garantizar su disponibilidad y la salud de todos los mexicanos.

En general las fuentes de contaminación se dividen en dos clases Aurora (2015):

- Fuentes puntuales, Descargan agentes contaminantes en lugares o localizaciones específicas.
- Fuentes difusas No se puede localizar fácilmente: es decir, afectan a las masas de aguas. Este tipo de contaminación es difícil de controlar.

El agua contaminada puede contener una amplia variedad de microorganismos, químicos y partículas que presentan un riesgo para la salud entre las enfermedades que se puedan contraer por la ingesta o contacto con el agua contaminada están: enfermedades gastrointestinales como diarrea, colera, giardiasis y amebiasis; enfermedades respiratorias como la constante de inhalación de vapores de agua contaminada durante la ducha o el baño; enfermedades de la piel causadas por la exposición a productos químicos en el agua y finalmente enfermedades renales y hepáticas entre otras.

Como se muestra en la figura 3 el ciclo hidrológico también conocido como el ciclo del agua, describe el movimiento continuo del agua en la tierra desde océanos hasta la atmósfera, sin embargo por las acciones humanas la contaminación del ciclo hidrológico se ha vuelto problema crucial que afecta la calidad y disponibilidad del agua, teniendo impacto mayor para las generaciones futuras.

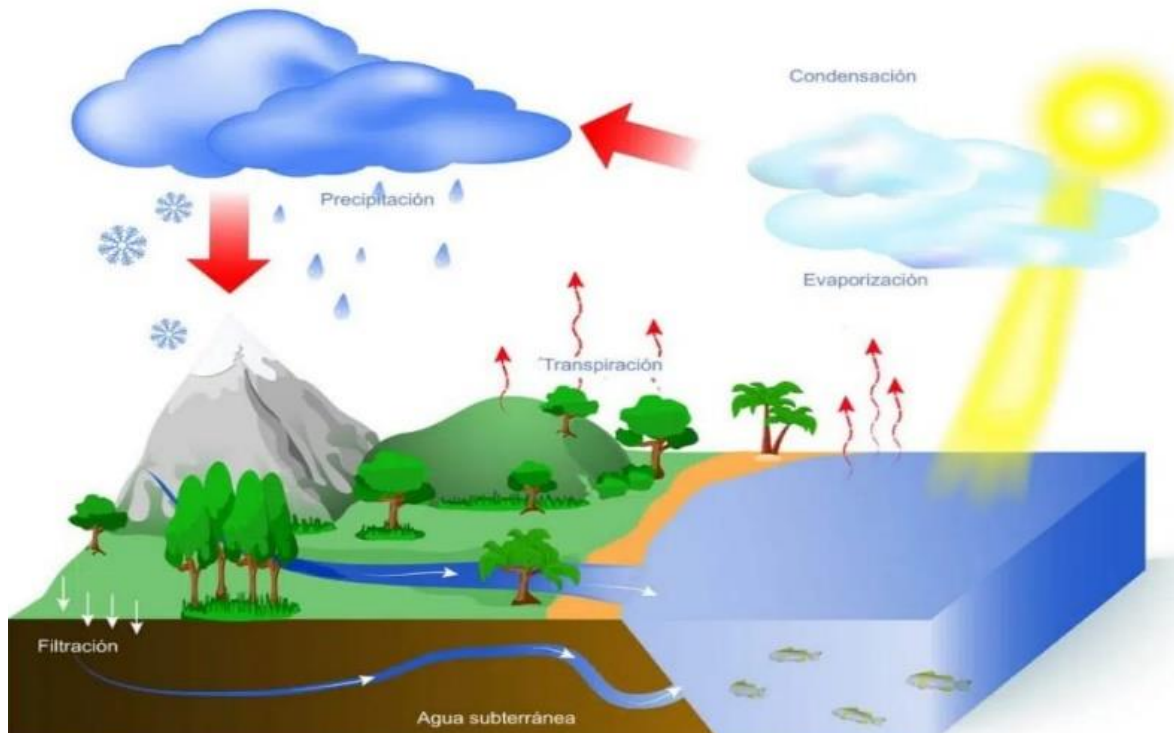


Figura 3. Ciclo Hidrológico.

1.2.1 Principales contaminantes del agua

Según Guadarrama los principales contaminantes del agua incluyen una variedad de sustancias que pueden tener efectos nocivos tanto en el medio ambiente como en la salud humano algunos de los contaminantes más comunes:

- Los agentes patógenos: algunas bacterias, virus y parásitos provenientes de desechos orgánicos, entran en contacto con el agua.
- Los desechos que requieren oxígeno: algunos desperdicios pueden ser descompuestos por bacterias que usan oxígeno para biodegradarlos. Cuando existen grandes poblaciones de estas bacterias pueden llegar agotar el oxígeno del agua, matando toda la vida acuática.
- Las sustancias químicas orgánicas como el petróleo, el plástico los plaguicidas y los detergentes amenazan la vida en el agua.
- Los nutrientes vegetales pueden ocasionar el crecimiento excesivo de plantas acuáticas. Estas mueren y se descomponen agotando en oxígeno del agua y provocando la muerte de varias especies acuáticas.
- La mayor fuente de contaminación proviene de los sedimentos o materia suspendida que enturbian el agua.
- El aumento de la temperatura disminuye la cantidad de oxígeno en el agua. Vulnerando la supervivencia de los organismos acuáticos.

Otras causas de la contaminación del agua por medio de las industrias

Desechos industriales, la industria es una enorme fuente de contaminación del agua, que produce contaminantes que son extremadamente perjudiciales para los seres vivos y el medio ambiente. Instalaciones de uso industrial de agua dulce suelen verter los residuos de la planta a aguas superficiales, subterráneas y océanos.

- Amianto, este contaminante es un grave peligro para la salud y además es cancerígeno. Las fibras de amianto pueden ser inhaladas y provocar enfermedades como la asbestosis, mesotelioma, el cáncer de pulmón, cáncer intestinal y cáncer de hígado.
- Plomo, este es un elemento metálico y puede causar problemas de salud y problemas ambientales, el plomo es nocivo para la salud de muchos animales este puede inhibir la acción de las enzimas corporales
- Mercurio, este es un elemento metálico y puede causar enfermedades a través de envenenamiento
- Nitratos y fosfatos

Los contaminantes de aguas residuales están clasificados en físicos, biológicos y químicos como se muestra en la tabla 1.

Tabla 1. Contaminantes químicos y biológicos Raffo & Ruiz (2014).

Químicos	Carácter antropogénico	Cianuros y Fenoles
	Químicos corrientes	Metales tóxicos como Hierro, Manganeso, Plomo, Mercurio, Arsénico, entre otros.
		Compuestos Nitrogenados
		Colorantes
		Sustancias orgánicas
Biológicos	Helminetos	<i>Ascarislumbricoides, Fasciola hepática, Taenia saginata, Trichuris.</i>
	Hongos	<i>Aspergillus fumigatus, Candida albanicans.</i>
	Bacterias	<i>Salmonella typhi, Escherichiacoli, Shigella.</i>
	Virus	<i>Adenovirus, rotavirus.</i>

1.3 Contaminantes emergentes

El término de contaminantes emergentes (CEs) se utiliza para referirse a compuestos de distinto origen y naturaleza química, cuya presencia en el medio ambiente no se considera significativa en términos de distribución y/o concentración, por lo que pasan inadvertidos. No obstante, actualmente son detectados en diversos cuerpos de agua y tienen el potencial de ocasionar un impacto ecológico negativo, provocando efectos adversos en la salud Gil et al., (2012).

Se les llama emergentes por que no cuentan con regulación ambiental ya que son difíciles de detectar, porque se encuentran en concentraciones generalmente partes por millón o partes por trillón Rodríguez (2019).

Los contaminantes emergentes son un grupo de amplia variedad que abarca compuestos químicos, productos farmacéuticos, productos de cuidado personal, agentes tensoactivos, plastificantes y aditivos industriales presentes principalmente en aguas residuales tanto domésticas como industriales que no reciben tratamientos para la degradación química para estos contaminantes emergentes, por este motivo la concentración aumenta y se convierte en significativa y peligrosa para los seres vivos Martínez (2020).

Entre los principales contaminantes emergentes, son destacados los productos farmacéuticos, surfactantes, plaguicidas, y una gran variedad de compuestos químicos que alteran las funciones endocrinas García (2011).

Diversos grupos de científicos a nivel internacional han definido entre las clases de contaminantes emergentes las que demandan una mayor atención por la escasez de datos ambientales, eco toxicológicos y métodos para su análisis, debido a posibles consecuencias de su presencia en el medio ambiente, según Gil et al., (2012). Esta clase de contaminantes emergentes son:

Pesticidas o Plaguicidas.

- Fármacos.
- Drogas ilícitas.
- Hormonas esteroides.
- Compuestos estilo de vida (Cafeína Nicotina).
- Surfactantes.
- Productos para tratamiento de agua.
- Parafinas cloradas.
- Metabolismos y/o productos de degradación de las clases de sustancias anteriores.
- Aditivos industriales y subproductos.
- Retardantes de llama/fuego.

- Aditivos alimentarios.

En la tabla 2 se muestra los tipos de Ces, así como su definición, sus efectos y su principal clasificación.

Tabla 2. Tipos de CEs Aranda (2022).

Ces	Definición	Efectos	Clasificación
Pesticidas o plaguicidas	Sustancias o mezclas de sustancias destinadas a prevenir, destruir, repeler o mitigar las plagas.	Metabólicos tóxicos.	a) Toxicidad en clases peligrosos A (extremadamente). Familia química organoclorados. Organofosforados, carbonatos, piretroides, inorgánicos.
Fármacos	Sustancias química purificada se utiliza para el tratamiento cura, prevención o diagnóstico de enfermedades.	Metabolitos tóxicos y resistencia bacteriana.	Su función: Analgésicos Antihipertensivos, antibióticos
Hormonas esteroides	Naturalmente el hombre las contiene en células específicas de los testículos, la corteza adrenal, ovarios y placenta; existen hormonas sintéticas de amplio uso.	Afectan metabolismo en seres vivos	Estrógeno, Andrógeno, Progesterona, Oxandrolona, Nandrolona.
Surfactantes	Residuos de agentes tensoactivos, (detergentes agentes adherente, dispersantes, emulsificantes, solubilizantes y agentes espumantes).	Los productos de degradación principalmente nonil y octal fenoles, adsorben sólidos suspendidos quedando con la propiedad de imitar hormonas naturales por integración con el receptor destrógenados, posiblemente unido a un recuento decreciente de esperma masculino y afectos cancerígenos.	Tensoactivos aniónicos del tipo sulfonato alquilbenceno lineal (LAS) y no aniónicos del tipo alquilfenolpolietoxilado (APEO).

1.3.1 Fármacos

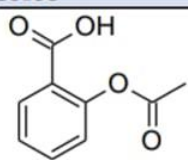
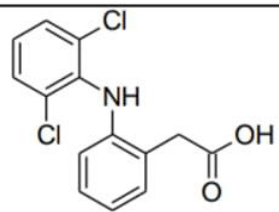
Los fármacos son sustancias químicas puras, utilizados en el tratamiento, curación, prevención o diagnóstico de una enfermedad, para evitar la aparición de un proceso fisiológico no deseado Osorio (2018). Los fármacos están diseñados para ejercer un trabajo terapéutico por lo que son persistentes y pueden mantener su estructura química así mismo algunos están diseñados para disolverse en aceite y no en agua.

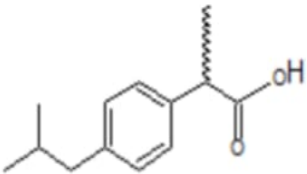
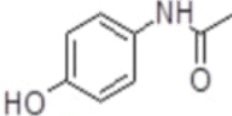
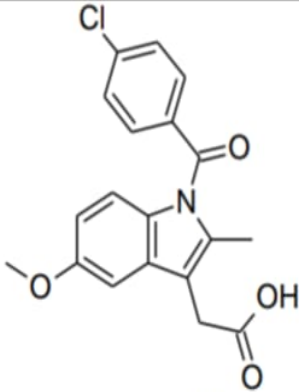
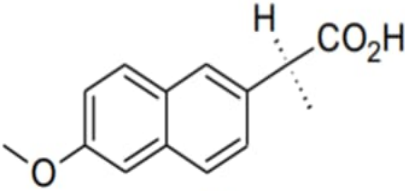
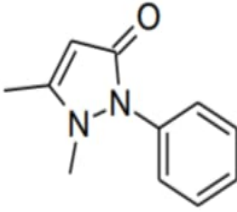
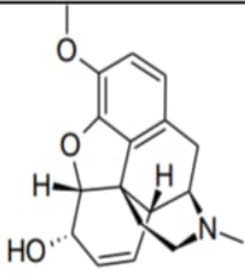
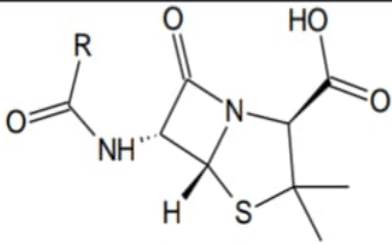
Actualmente los fármacos se consideran una nueva clase de contaminantes en el medio ambiente, estos pueden incluir hormonas, antibióticos, analgésicos, tranquilizantes, entre otros, estos contaminantes se han encontrado en el agua subterránea e incluso en el agua potable, estos provienen de excreción ya que, no todo se metaboliza en el organismo de las personas, también provienen de la fabricación y la mala disposición de los residuos de este.

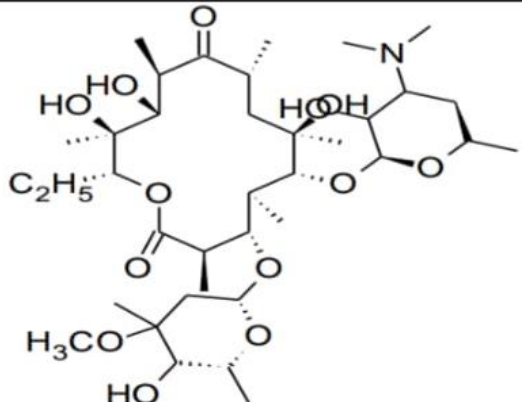
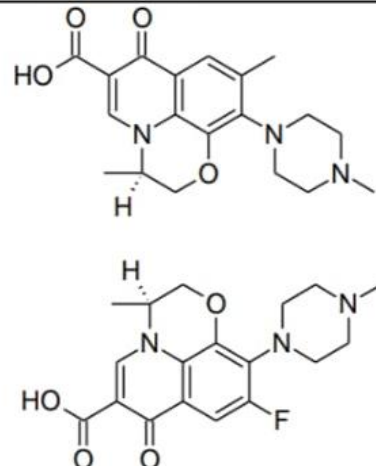
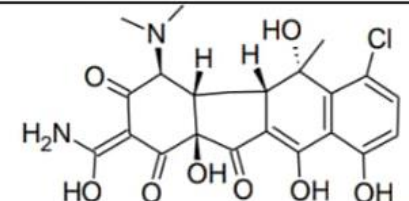
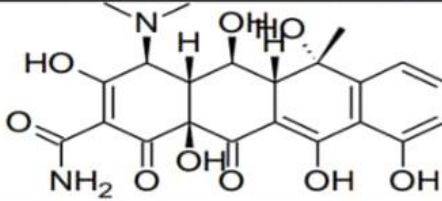
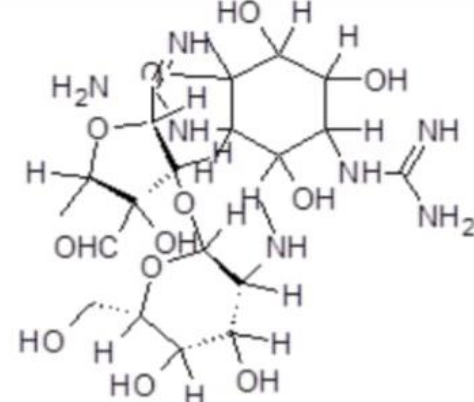
Los productos farmacéuticos cuando son liberados en el medio ambiente pueden imponer toxicidad, en cualquier nivel de la jerarquía biológica, desde células, órganos del cuerpo, organismos, población, ecosistemas o la ecosfera, además, de los efectos tóxicos, ciertas clases de productos farmacéuticos como los antibióticos pueden causar en cambio irreversible a lo largo plazo en el genoma de los microorganismos lo que los hace resistentes en su presencia Klavarioti (2009).

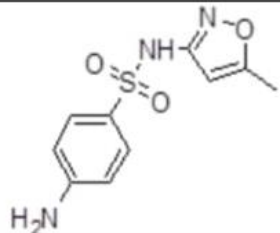
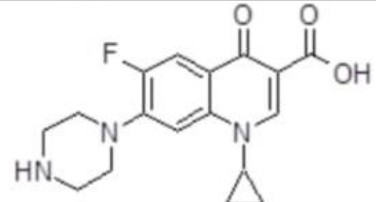
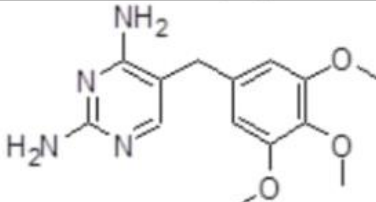
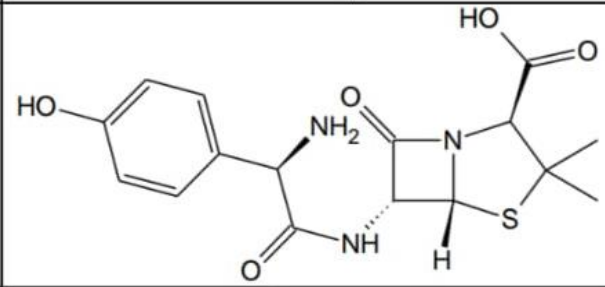
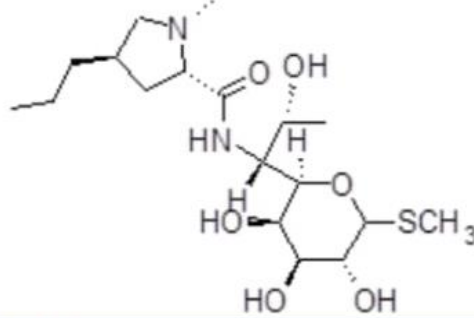
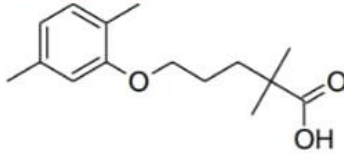
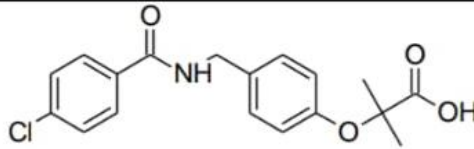
En la tabla 3 se presentan los fármacos más comúnmente encontrados en el medio ambiente.

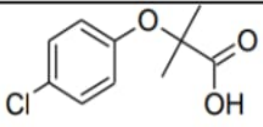
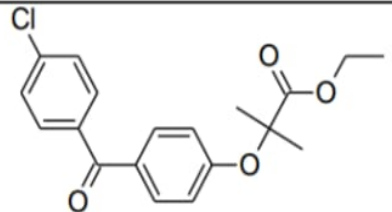
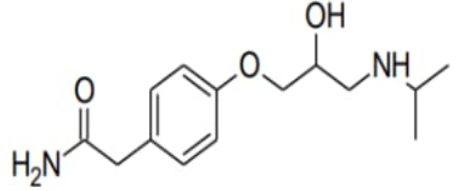
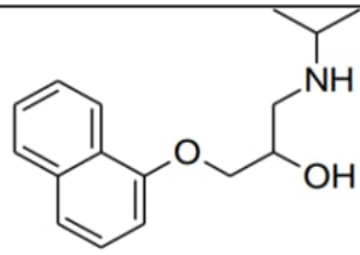
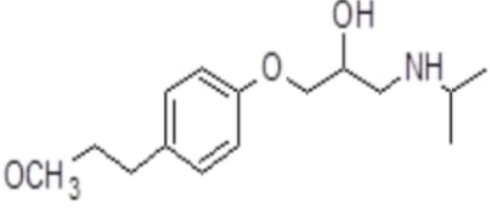
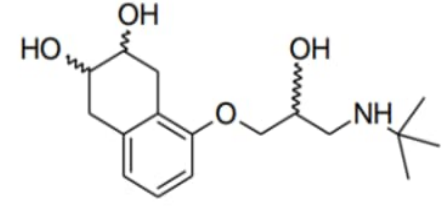
Tabla 3. Productos farmacéuticos más frecuentemente encontrados en el medio ambiente Rodea (2019).

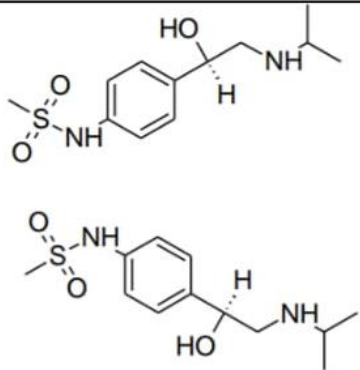
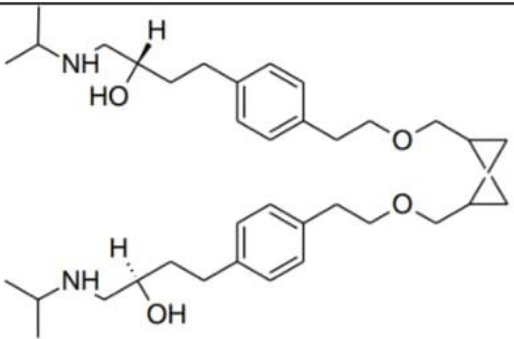
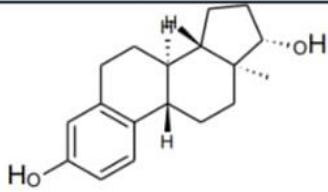
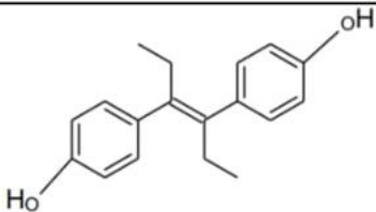
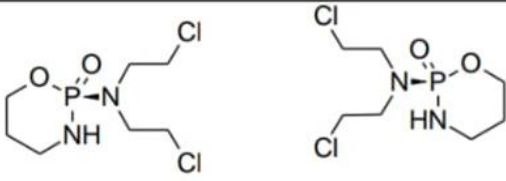
Fármacos más comúnmente encontrados en el medio ambiente	
Nombre	Estructura molecular
Antiinflamatorios y Analgésico	
Aspirina	
Diclofenaco	

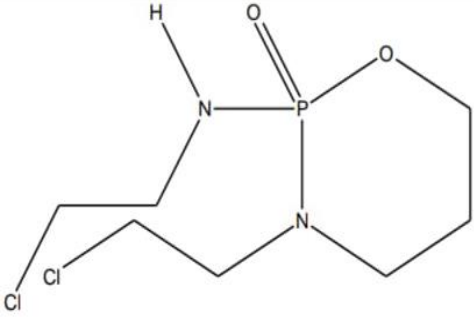
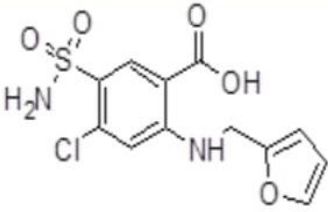
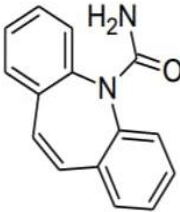
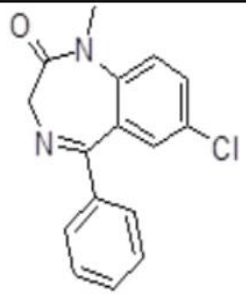
Ibuprofeno	
Paracetamol (acetaminofén)	
Indometacina	
Naproxeno	
Fenazona	
Codeína	
Antibióticos	
Penicilina	

Eritromicina	
Ofloxacin	
Clortetraciclina	
Oxitetraciclina	
Estreptomicina	

Sulfametoxazol	
Ciprofloxacina	
Trimetoprima	
Amoxicilina	
Lincomicina	
Reguladores lipídicos	
Gemfibrozil	
Benzafibrato	

Ácido clofibrico	
Fenofibrato	
B-Bloqueadores	
Atenolol	
Propranolol	
Metoprolol	
Nadolol	

Sotalol	
Betaxolol	
Esteroides Hormonas	
17 β -estradiol estroma	
17 α -etinilestradiol dietiltilbestrol	
Agentes citostáticos	
Ciflofosfamida	

Ifosfamida	
Diuréticos, Antiepilépticos y Sedativos	
Furosemida	
Carbamazepina	
Diazepan	

1.3.2 Ibuprofeno y medio ambiente

El ibuprofeno es un derivado quiral del ácido propiónico que pertenece a la clase de fármacos antiinflamatorios no esteroideos, por sus propiedades analgésicas, antipiréticas y antinflamatorias, se utiliza en el tratamiento de sus afecciones inflamatorias como artritis reumatoide, osteoartritis, dolor leve a moderado, dismenorrea, dolor de cabeza y fiebre (AINE).

La dosis de ingrediente activo común en tabletas es de 200, 400, 600 y 800 mg las formas de dosificación de venta libre son principalmente de 200 y 400 mg, otras formas de dosificación comunes son cápsulas, jarabes, suspensiones, supositorios, dosificaciones tópicas como cremas y geles. El ibuprofeno es administrado por vía oral se absorbe rápidamente en el tracto gastrointestinal, después de una dosis oral única con el estómago vacío, el ibuprofeno tiene una gran capacidad de unión a proteínas (98%) y se excreta a través de los riñones, la vida media biológica es de 2 a 4 h, después de 24 h el 100 % del principio activo se excreta en orina BASF (2021). En la tabla 4 se presenta la información química del Ibuprofeno y en la tabla 5 sus propiedades físicas y químicas.

Tabla 4. Información química del ibuprofeno BASF (2021).

<i>Ibuprofeno</i>	
Nombre químico	Ácido propanoico (2RS) – 2[4 – (2 – Metilpropil) Fenil]
Número CAS	156887 – 27 – 1
Número EINECS	239 – 784 – 6
Fórmula molecular	$C_{12}H_{18}O_2$
Peso molecular	$206,28 \frac{g}{mol}$

Tabla 5. Propiedades físicas y químicas del ibuprofeno BASF (2021).

Propiedades físicas y químicas del ibuprofeno	
Apariencia física	Polvo cristalino
Color	Blanco
Olor	Característico
Intervalo de fusión	75 – 78 °C

Solubilidad	5,2 $\frac{mg}{ml}$
Coeficiente de partición: <i>n</i> – octanol/agua	3.3

Una vez eliminados del organismo a través de las excretas, este fármaco pasa a la red cloacal, la cual recibe un tratamiento primario, secundario y en algunos casos terciarios, los cuales consisten en una combinación de procesos físicos, químicos y biológicos. La eficiencia de eliminación de los CE's luego de este tratamiento varía dentro de un amplio rango y depende de la estructura química de la molécula del fármaco, el ibuprofeno puede ser eliminado con una eficiencia de entre el 74% y 100% durante el tratamiento de estas aguas Thomas y Foster (2004).

Una característica general de los productos farmacéuticos es que no se metabolizan totalmente en el organismo, por lo que en muchos casos más del 70% es liberado al ambiente como compuesto alternativo a través de las heces y la orina Jembea (2006). Por otra parte, las tecnologías de tratamiento de aguas residuales conocidas hasta el momento resultan poco efectivas para eliminar la mayoría de los compuestos biológicamente activos así, estos compuestos pueden estar en contacto con los diferentes organismos del ecosistema Jones et al., (2005).

Debido a la presencia de fármacos en el ambiente es reciente hallazgo, todavía existe poca información acerca de los mecanismos de toxicidad y, por lo tanto, de estándares de concentración aceptables para la biota USEPA (2008). En Europa existen aproximadamente 400 compuestos químicos activos que se utilizan actualmente para curar la salud humana y animal, de este modo, la gran variedad de estructuras químicas que deberían ser monitoreadas en el ambiente, como así también sus diversas influencias sobre los organismos vivos, resulta tarea complicada, entre toda la variedad de compuestos químicos se destacan los antibióticos, los medicamentos que regulan el metabolismo de los lípidos, los agentes hormonales, los fármacos antiepilépticos los antiinflamatorios no esteroides.

Los antiinflamatorios no esteroides, conocidos como AINEs, tal como el ibuprofeno, se encuentran entre los fármacos más utilizados principalmente debido a la automedicación. a mayoría de los AINEs contienen grupos funcionales muy resistentes al metabolismo por ejemplo, grupos aromáticos ($-F$, $-Cl$, CF_3 etc.), lo que aumenta su vida media en el cuerpo humano y prolonga el tiempo de degradación en el ambiente, de este modo, son moléculas estables y pueden ser persistentes en los cuerpos de agua naturales por periodos de tiempo de entre días y meses Bennotti & Brownaweli (2009).

1.4 Procesos de oxidación avanzada

Los procesos de oxidación avanzada (POAs “Advanced Oxidation Processes”) son procesos fisicoquímicos capaces de producir cambios profundos en la estructura química de los contaminantes. El concepto fue inicialmente por Glaze y colaboradores, quienes definieron las POAs como los procesos que involucran la generación y uso de especies transitorias poderosas, fundamentalmente el radical hidroxilo ($OH\cdot$), este radical puede ser generado por medios fotoquímicos (incluida la luz solar) o por otras formas de energía, y posee la efectividad para la oxidación de materia orgánica Doménch (2004).

Algunos POAs, como la fotocatálisis heterogénea, la radiólisis y otras técnicas avanzadas, recurren además a reductores químicos que permiten realizar transformaciones en contaminantes tóxicos poco susceptibles a la oxidación, como iones metálicos o compuestos halogenados. El poder de oxidación de este radical es únicamente superado por el del flúor, en la tabla 6 se observa los potenciales de oxidación de distintas especies químicas

Tabla 6. Potencial de oxidación de diferentes especies Doménch (2004).

Especies	Potencial de oxidación $E^\circ(V, 25^\circ C)$
Flúor (F)	3.03
Radical hidroxilo ($OH\cdot$)	2.8
Oxígeno atómico (O_2)	2.42
Ozono (O_3)	2.07
Peróxido de hidrógeno (H_2O_2)	1.78
Radical Perhidroxilo ($HO_2\cdot$)	1.7
Permanganato (MnO_4)	1.68
Dióxido de cloro ($HClO$)	1.57
Ácido hipocloroso ($HClO$)	1.49
Cloro (Cl_2)	1.36
Bromo (Br_2)	1.09
Yodo (I_2)	0.59

Los procesos de oxidación avanzada se caracterizan por aprovechar la alta reactividad del radical OH – como agente oxidante para oxidar la materia orgánica disuelta en el agua hasta convertirla en dióxido de carbono y agua (mineralización) o al menos compuestos menos peligrosos, en la tabla 7 se presentan las principales tecnologías de oxidación avanzada Doménech (2004).

Tabla 7. POAs más comunes Doménch (2004).

Procesos de oxidación avanzada más comunes
<i>Ozonización (O_3)</i>
<i>Ozonización en combinación con peróxido de hidrógeno (O_3/H_2O_2)</i>
<i>Irradiación ultravioleta (UV)</i>
<i>Irradiación ultravioleta con ozono (UV/O_3)</i>
<i>Irradiación ultravioleta con ozono y peróxido de hidrógeno ($O_3/UV/H_2O_2$)</i>
<i>Cavitación hidrodinámica y acústica, procesos de fenton ($Fe_2 + /H_2O_2$)</i>
<i>Reacciones foto – fenton</i>
<i>Oxidación electroquímica</i>
<i>Fotocatálisis</i>

Los procesos de oxidación avanzada son aprovechados para el tratamiento de aguas residuales domésticas e industriales cuando no son efectivos los tratamientos convencionales o como complemento de estos para tratar contaminantes orgánicos más complejos que no han podido ser removidos; como son por ejemplo los contaminantes emergentes como fármacos, aditivos de la industria textil, cosmética, los plastificantes entre otros, en la tabla 8 se muestran algunas de las ventajas, así como los inconvenientes de los POAs.

Tabla 8. Ventajas y desventajas de los procesos de oxidación avanzada Doménch (2004).

Ventajas	Desventajas
-La mineralización completa del contaminante -No generan lodos que posteriormente necesitan tratamiento y/o disposición -Son efectivos para contaminantes resistentes a otros métodos de tratamiento, principalmente los biológicos -La mejora de las características organolépticas del agua tratada -Eliminan efectos sobre la salud de desinfectantes y oxidantes residuales como el cloro -La posibilidad de tratar contaminantes que se encuentran en muy baja concentración -Los reactivos utilizados como oxidantes son generalmente sustancias que se descomponen durante el proceso en productos inocuos.	-Elevado costo de algunos reactivos (<i>ozono y UV</i>) -Necesitan, en alguno procesos tiempos de reacción elevados -Los costos de inversión y operación pueden ser elevados -Es necesario mano de obra especializada

1.4.1 Fotocatálisis

La fotocatálisis inducida con luz solar es uno de los métodos empleados en el tratamiento de aguas residuales, siendo muy eficiente alcanzando en muchos casos la degradación completa de los contaminantes a la mineralización. En los últimos años, se ha reportado el uso de agentes oxidantes como fotocatalizador (fotocatálisis) para el tratamiento del agua; cuando un agente oxidante es irradiado con una longitud de onda $< 380\text{ nm}$, produce reactivos altamente activos como radicales hidroxilos generados a través de la oxidación del agua, se ha demostrado que estas especies mineralizan una amplia gama de compuestos orgánicos, incluidos los aromáticos y alifáticos, tintes, pesticidas y herbicidas Maroga et al., (2012).

Se han implementado diversos métodos de remediación, entre ellos los procesos de oxidación avanzada (POA) que son considerados eficientes y prometedores para degradar contaminantes. La fotocatálisis se define como una reacción catalítica que requiera la absorción de energía, donde la reacción se lleva a cabo por una acción fotoquímica de un determinado compuesto, a causa de su interacción con una especie química fotosensible Oturan y Aaron., (2014).

La clasificación de la fotocatálisis está determinada en fotocatálisis homogénea donde todos los elementos presentes en el proceso de degradación, como catalizador y el sustrato, se encuentran en la misma fase; caso contrario el que se presenta en la fotocatálisis heterogénea, donde dichos elementos deben encontrarse en diferente fase como sólido-líquido o sólido-gas. Una de las principales ventajas que presentan los sistemas de catálisis heterogénea, frente a los sistemas homogéneos, es la capacidad de retirar el catalizador y posteriormente reutilizarlo sin pérdida de la actividad catalítica Klavarioti et al., (2009).

El proceso de fotocatálisis homogénea es un proceso avanzado de oxidación en el cual todas las especies cinéticamente activas incluyendo al catalizador constituyen una misma fase (. Este proceso surge cuando Henry J.H Fenton demuestra que el peróxido de hidrógeno podía ser activado por las sales de hierro, el fenton es un sistema catalítico homogéneo en el cual la sal de hierro genera radicales gracias a la interacción del peróxido de hidrógeno con la forma reducida, el fenton posee varias limitantes como: reduce la velocidad de oxidación, la velocidad de reacción es baja, existe posibilidad de que los productos orgánicos e inorgánicos retengan hierro en el ciclo Gómez y Chacón (2014).

La fotocatálisis ha sido eficiente en la degradación y mineralización de compuestos orgánicos bajo la acción de semiconductores. Este proceso se desarrolla cuando la incidencia de la energía ($h\nu$) de un fotón es igual o mayor a la energía del ancho de banda del semiconductor (E_g), produciendo la excitación de un electrón desde la

banda de valencia (*BV*) hasta la banda de conducción (*BC*), generando un electrón hueco (ausencia del electrón: e^-/h^+ en la *BV* del material semiconductor Maroga et al., (2012). En la figura 4. se muestra el proceso que sufre el catalizador al reaccionar con la radiación UV, liberando radicales de hidroxilo que al tener contacto con contaminantes específicos estos son degradados o mineralizados.

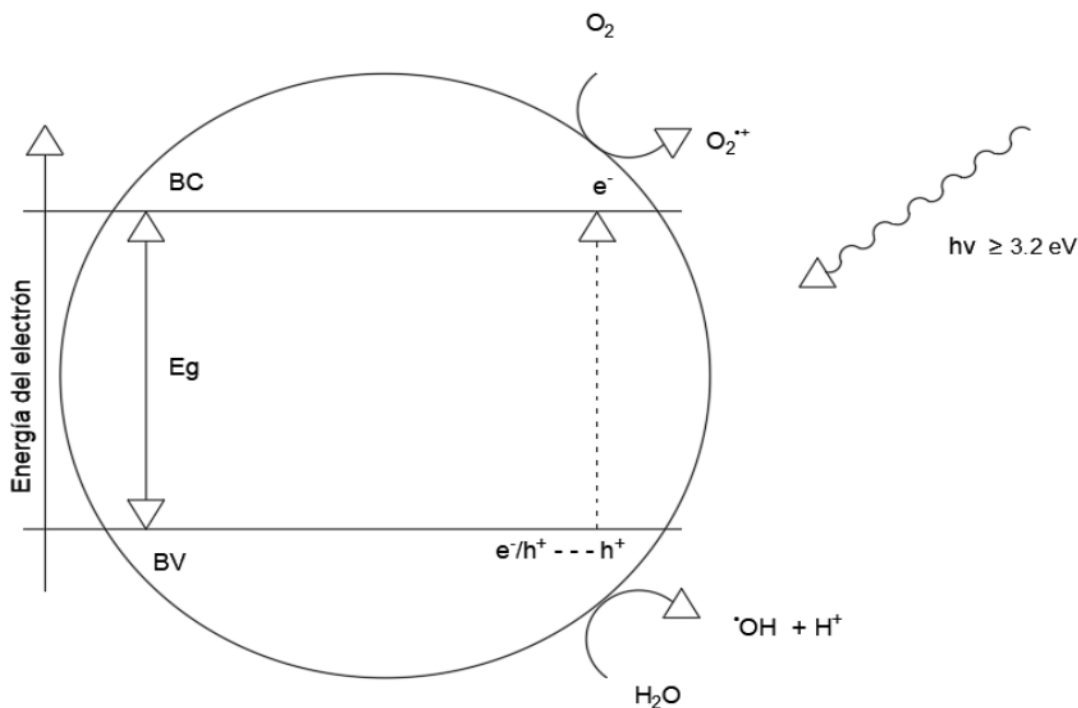


Figura 4. Proceso fotocatalítico de especies oxidantes Fernández (2004).

1.5 Reactores fotocatalíticos.

Un reactor fotocatalítico es un dispositivo diseñado para llevar a cabo reacciones foto catalíticas, las cuales son procesos químicos acelerados por la presencia de un catalizador y la absorción de luz. Estos reactores pueden variar en tamaño como forma, dependiendo del tipo de iluminación utilizada a su disposición, este tipo de reactor permite el análisis cualitativo como cuantitativo de las reacciones la descomposición y degradación de contaminantes hasta organismos presentes en las muestras de agua. los reactores fotocatalíticos para el tratamiento de agua se pueden clasificar de acuerdo con sus características de diseño Ramírez (2013).

- a) Estado del fotocatalizador: el fotocatalizador puede estar suspendido o adherido a un soporte:
 - Reactores fotocatalíticos agitados (catalizador en suspensión).
 - Reactores fotocatalíticos con el catalizador inmovilizado (fijado en un soporte).
- b) Tipo de iluminación: El tipo de irradiación es un asunto mayor en el diseño de foto reactores. Los reactores pueden ser irradiados usando
 - Lámparas de UV policromáticas
 - Luz solar

Los reactores iluminados por luz solar se dividen en dos categorías: los reactores solares no concentrados y los concentrados los primeros emplean intensidades iguales o menores a la radiación solar natural, mientras que los reactores solares concentrados utilizan intensidades de irradiación que supera la equivalente a la del sol.

- c) Posición de la fuente de irradiación: La composición de la lámpara o fuente de irradiación es una característica que resalta de un reactor fotocatalítico. La posición de la lámpara determina diferentes configuraciones:
 - Reactores con una fuente de luz inmersa
 - Reactores con una fuente de luz externa
 - Reactores con fuente de luz distribuidas

En los reactores con una fuente inmersa, la lámpara se ubica dentro de la unidad, en los de fuente externa, las lámparas se colocan fuera del reactor, en los reactores con fuentes distribuidas, la irradiación es transportada de la fuente de reactor por medio ópticos tales como reflectores o guías de luz. En la figura 6 se muestran los dos diseños más comunes de reactores foto catalíticos,

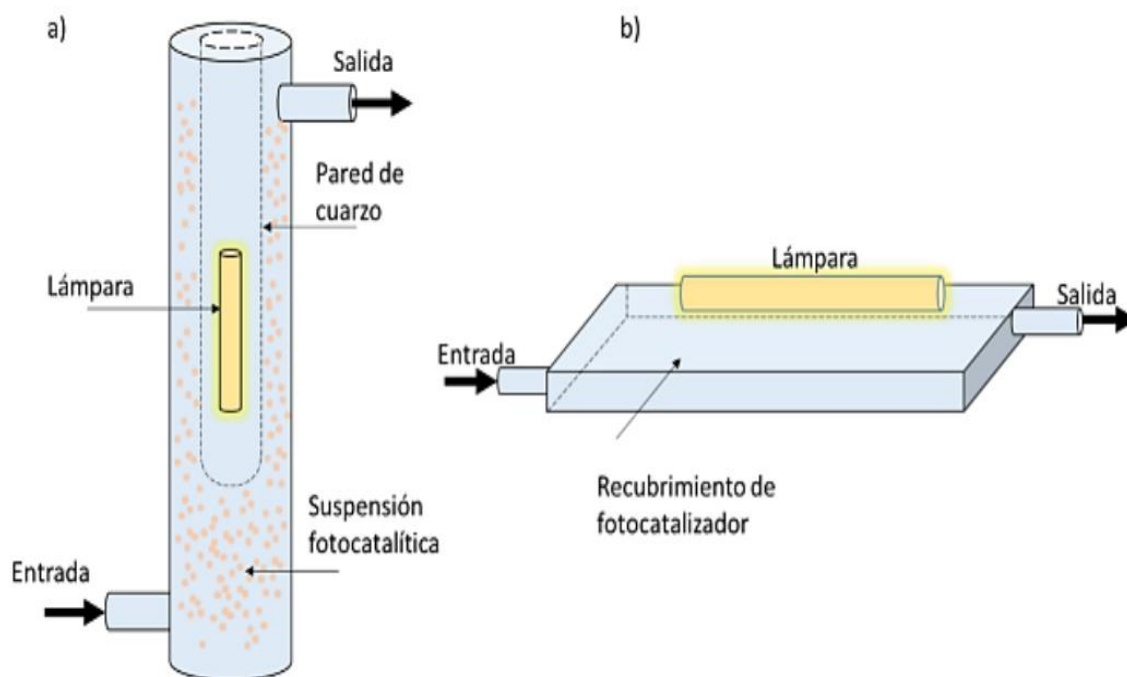


Figura 5.a) reactor fotocatalítico de recirculación b) reactor fotocatalítico fijo Domínguez (2017).

1.5.1 Aplicación de los reactores fotocatalíticos

Las aplicaciones de los reactores fotocatalíticos son diversas además aprovechan la capacidad de estos sistemas para la acelerar reacciones químicas mediante la luz, algunas de las aplicaciones más destacadas incluyen:

- Tratamiento de aguas residuales: los reactores fotocatalíticos pueden descomponer contaminantes orgánicos e inorgánicos presentes en el agua, convirtiéndolos en sustancias menos nocivas o inocuas.
- Vidrio auto limpiante: utilizando especies oxidantes (TiO_2 , H_2O_2 , O_3 etc.), los reactores fotocatalíticos pueden descomponer la materia orgánica presentes en la superficie del vidrio, manteniéndolas limpias.
- Desinfección del agua: mediante fotocatalizadores es posible desinfectar el agua eliminando microorganismos dañinos por medio de la luz solar.

Estas aplicaciones demuestran la versatilidad de los reactores fotocatalíticos y su potencial para contribuir en áreas de sostenibilidad ambiental y la salud pública.

En este trabajo de investigación se presenta el estudio de un reactor fotocatalítico, para la degradación de contaminantes emergentes, en este caso se utilizó el fármaco Ibuprofeno y colorante verde malaquita, en México es ampliamente usado

y necesita tratamiento antes de ser arrojados a las aguas superficiales, subterráneas y mares para ya no causen impactos ambientales.

Una aplicación bastante interesante es la desinfección de agua, tecnología que puede llegar a tener un alto grado de éxito de aplicabilidad, siendo una alternativa muy útil e indispensable para ayudar al mejoramiento del medio ambiente haciendo uso de estos reactores, ya que esta tecnología es capaz de degradar diferentes tipos de microorganismo y sustancias químicas presentes en el agua no potable que son perjudiciales para el ambiente y los seres vivos

1.5.2 Parámetros para el funcionamiento del reactor fotocatalítico.

Un gran número de parámetros influyen tanto cualitativamente como cuantitativamente en la reacción fotocatalítica y como consecuencia resultan determinantes en la eficiencia global del proceso a continuación se mencionan los parámetros más importantes.

a) calidad del agua a tratar

La presencia de turbidez, sólidos en suspensión materia orgánica e inorgánica en el agua a tratar pueden restar eficiencia a la oxidación fotocatalítica de las especies oxidantes, la turbidez interfiere en la interacción de la luz ultravioleta y la especie reduciendo la eficiencia de la reacción de detoxificación.

b) catalizador

A partir de una determinada concentración, los fenómenos de dispersión y apantallamiento de la radiación, debido a las partículas en suspensión, comienza a hacerse significativos, impidiendo la completa iluminación del sólido. Concentraciones elevadas de catalizador pueden dar lugar a una disminución de la velocidad de reacción, teniendo en cuenta lo anterior es recomendable trabajar con una concentración de foto catalizador cerca al punto donde se alcanza el estado estacionario, en este límite corresponde con la cantidad máxima de superficie expuesta, están completamente iluminadas, para cantidades mayores de catalizador ocurre un efecto de filtrado de las partículas en excesivo esto quiere decir la concentración óptima de foto catalizador corresponderá con la mínima cantidad de este para alcanzar la velocidad de reacción máxima.

c) concentración e iluminación de la especie oxidante

Estudios realizados sobre la influencia de la concentración de catalizador en la eficiencia del proceso, los resultados son muy diferentes pero de todos ellos se deduce que la forma en que la radiación incide sobre el reactor y la longitud del camino óptico de esta en su interior son fundamentales para determinar la concentración óptima de catalizador.

d) concentración del contaminante

- Al aumentar la concentración también aumenta la absorción, lo que conlleva una saturación de la superficie de la especie oxidante.
- La generación y migración de los electrones, huecos fotogenerados y su reacción con los compuestos orgánicos son dos procesos que tiene lugar en serie. Así cada etapa puede ser limitante del proceso, bajas concentraciones la reacción de los radicales con los compuestos orgánicos es la que controla el proceso y se incrementa al aumentar la concentración, sin embargo a altas concentraciones, la generación y migración de los radicales es la que controla el proceso y se incrementa al aumentar la concentración.
- Hay que tener en cuenta que al elevar la concentración se incrementa la concentración de intermedios que pueden interferir en la degradación del compuesto inicial.

e) presión de oxígeno

Generalmente, se asume que O_2 se adsorbe en la superficie del catalizador a partir de la fase líquida, donde su concentración, de acuerdo con la ley de Henry, es proporcional a la fase gaseosa, el comportamiento del oxígeno como aceptor de electrones permite el desarrollo de las reacciones fotocatalíticas minimizando los procesos de recombinación de los pares de electro/hueco, a la vez que no compite con el contaminante por los centros de adsorción. Sin embargo, algunos autores han encontrado que concentraciones demasiado altas de oxígeno se ralentiza la velocidad de degradación: esto ha sido atribuido a una alta hidroxilación de la superficie del semi conductor que inhibe la adsorción de los compuestos orgánicos a degradar en los centros activos.

f) propiedades del fluido

En este trabajo se tomará en cuenta las propiedades del fluido así como la turbulencia para posteriormente llevar a cabo una simulación del comportamiento del fluido dentro del reactor entre las propiedades que se tomaran en cuenta será la viscosidad, densidad, conductividad térmica y capacidad calorífica.

g) turbulencia del flujo

La forma en la que un fluido fluye a lo largo de una tubería puede dividirse en laminar y turbulento. En la primera las partículas fluyen de manera ordenada mientras que en la segunda se crean cambios bruscos de presión y velocidad que tienen por consecuencia el apareamiento de vórtices de diferentes escalas, uno de los principales requerimientos del reactor tubular es que se opere en la región turbulenta, esto es decir a números de Reynolds iguales o por encima de 4000. El número de Reynolds es una ecuación de Navier-Stokes que gobiernan el movimiento de los fluidos.

$$N_{Re} = \frac{\rho * V * D}{\mu}$$

N_{Re} = Número adimensional Reynolds

ρ = Densidad del fluido $\left(\frac{kg}{m^3}\right)$.

V = Velocidad del flujo (m^3/s)

D = Diametro de la tuberia

μ = Viscosidad dinamica del fluido

h) tiempo de residencia

Se refiere al tiempo que una sustancia o partícula permanece dentro de un reactor, en este trabajo es el tiempo en el que el ibuprofeno están expuestos a la luz ultravioleta y las especies oxidantes. Un tiempo de residencia adecuado garantiza que las moléculas del Ibuprofeno interactúen con los fotones y el catalizador lo que favorece la degradación de los contaminantes.

i) flujo fotónico

El flujo fotónico se define como la cantidad de radiación en mW/cm^2 adsorbida por el catalizador. Así se han determinado dos regímenes de la reacción foto catalítica respecto al flujo fotónico de la radiación ultravioleta. Se han indicado que para flujos de asta $25 mW/cm^2$ los electrones y huecos generados son consumidos preferentemente por los reactivos químicos más que por la velocidad de recombinación.

j) radiación

Las propiedades desinfectantes de la luz UV por si solas (fotólisis), han demostrado ser muy efectiva para propósitos de desinfección, sin embargo, deben ser considerados aspectos como que las diferentes respuestas de ibuprofeno a los efectos de degradación de la luz UV . La elección de la longitud de onda UV es importante ya que el mecanismo de inactivación inducida por la luz UV difiere con las diferentes longitudes de onda utilizadas, los mecanismos reparaciones en ausencia de luz también puede tener lugar, sin embargo se considera que la reactivación con foto es el más problemática de los métodos, ya que en algunos casos puede revertir los efectos de la desinfección UV en varias horas de tratamiento Robertson et al., (2005).

k) radiación $UV - A$, $UV - B$ y $UV - C$

La radiación solar comprende desde rayos infrarrojos hasta espectro ultravioleta UV se define en cuatro regiones cada uno con distintos rangos de longitud de ondas: UV al vacío entre 100 y $200 nm$, UV de onda corta $UV - C$ entre 200 y $280 nm$, UV

de onda media $UV - B$ 280 y 315 nm UV-B y UV onda larga $UV - A$ 315 y 400 nm . La luz solar consiste principalmente en radiación $UV - A$ ya que tanto las radiaciones $UV - B$ y $UV - C$ no alcanza la tierra debido a que la capa de ozono las absorbe, la radiación más eficaz es la UV de onda corta de $UV - C$ con longitud de onda de 253,7 nm Martínez (2020).

l) Intensidad de radiación

La radiación es un factor importante para considerar ya que si esta es menor la cantidad de fotones se reduce y directamente proporcional varia la concentración del catalizador, esto sucede porque los fotones proporcionan energía al catalizador, entre mayor cantidad de fotones mayor cantidad de catalizador para aprovechar esa energía y generar la degradación, así mismo si la intensidad de radiación es menor el porcentaje de degradación será menor Tipaz y Morales (2012).

m) lámparas de luz ultravioleta (UV)

El mecanismo que usa la lámpara ultravioleta es sencillo: dentro de la lámpara que es un tubo hecho de cuarzo o sílice, un arco eléctrico golpea una mezcla de vapor de mercurio y argón que hay en el interior. Los átomos de mercurio se excitan y cuando los electrones de las órbitas externas descienden a órbitas de menor nivel energético, emiten la energía sobrante en forma de radiación ultravioleta. Las lámparas más empleadas son de mercurio, xenón y los denominados simuladores solares. Estas lámparas proporcionan luz en un rango de longitudes de onda por debajo de los 400 nm , esencial para la excitación del catalizador, algunas lámparas proporcionan luz monocromática y otras un intervalo de longitudes de onda; en ocasiones se usan filtros a fin de obtener luz monocromática. Las intensidades más empleadas van de los 2 – 135 mW/cm^2 y las potencias de unas pocas decenas a cientos de vatios, el empleo de lámparas permite la caracterización precisa del tipo e intensidad de luz que se obtiene.

1.6 Dinámica de fluidos computacional

La dinámica de fluidos computacional (Computational Fluid Dynamics, CFD) se ha convertido en una herramienta útil en el análisis de sistemas de interés práctico, que incluyen fenómenos físicos y químicos involucrados con el movimiento de fluidos; tales fenómenos se puede transferir masa, cantidad de movimiento energía y especie química (que puede reaccionar o no) de una región a otra o de un tiempo inicial a otro tiempo.

Para simular el flujo, se tiene dos alternativas:

- Simulación Numérica de fluidos (Direct Numerical Simulation, DNS);
- Simulación de grandes escalas Largeeddy simulation, LES);

En este trabajo de investigación se realizará una simulación numérica (DNS).

1.6.1 Simulación numérica de fluidos

La DNS consiste en discretizar directamente las ecuaciones instantáneas que gobiernan el movimiento del flujo, validadas tanto para flujo laminar como para flujo turbulento y resolverlas numéricamente, la discretización resuelve todas las escalas espaciales y temporales de las variables del flujo, por lo tanto no requiere de ningún modelo adicional, en un flujo turbulento no reactivo para capturar todas las escalas, el número de puntos de discretización es función prácticamente el Número de Reynolds elevado al cubo, por lo que la DNS requiere de medios de computación considerables debido a que los tiempos de cálculo son exigentes por ser siempre de cálculo tridimensional y temporal.

1.6.2 Fundamento matemático

El fundamento matemático para la simulación numérica de fluidos se basa en resolver ecuaciones que describen los flujos de fluidos. Estas ecuaciones son generalmente Navier-stokes, ecuaciones de conservación y las ecuaciones gobernantes. En esta simulación numérica se utilizarán las ecuaciones gobernantes debido a las variables que influyen en el proceso.

- ecuaciones gobernantes

También conocido como el método de volumen de control es una técnica numérica utilizada para resolver ecuaciones diferenciales parciales (EDP), a diferencia del método de los elementos finitos, que se centra en la aproximación de soluciones a puntos nodales, el método de volumen finito se basa en la discretización del dominio en volúmenes o celdas.

El método de volumen finito tiene la ventaja de conservar las propiedades físicas las cantidades conservativas en el dominio, lo que lo hace especialmente adecuada para problemas de conservación, dinámica de fluidos, transferencia de calor y

reacciones basado en volumen de control permite una buena captura de los gradientes y discontinuidades en el dominio. Este método garantiza la conservación de la variable sobre cada celda es decir: los flujos entrantes a la celda deber ser iguales a los flujos salientes esta propiedad, debido a la formulación, se cumple sea cual sea el volumen de las celdas.

Ecuación de continuidad.

$$\partial \rho / \partial t + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = 0$$

Ecuación de conservación de momentum.

$$\rho \cdot D\vec{v}/Dt = \nabla \tau_{ij} - \nabla p + \rho F$$

Ecuación de conservación de energía

$$\rho \cdot DE/Dt + \rho \cdot (\nabla \cdot \vec{v}) = \partial \rho / \partial t - \nabla p + \rho F$$

Para obtener la Ecuación de Navier-Stokes

$$\rho \cdot D\vec{v}/Dt = \rho(\partial \vec{v}/\partial t + \vec{v} \cdot \nabla \vec{v}) = -\nabla p + \theta \nabla^2 \vec{v}$$

Donde

ρ = Es la densidad del fluido

∇ = Es un operador vectorial de sistema de coordenadas.

$\vec{v}$ = Es el vector de velocidades

E = Energía interna

F = Fuerza

q = Fuente de calor

∇q = Perdida de calor por conducción

τ_{ij} = Viscosidad

t = tiempo

θ = Coeficiente de viscosidad dinámica.

1.7 Antecedentes.

Existen distintos trabajos reportados en relación con el tratamiento de contaminantes presentes en el agua utilizando Procesos de Oxidación Avanzada, sin embargo, es de importancia el análisis bibliográfico con el objetivo de conocer condiciones de operación diversas para lograr una mejor optimización de cada proceso. En la tabla 10 se describen algunos de los estudios reportados más representativos de los últimos años:

Tabla 10. Estado del arte.

Método	Descripción (Tipo de reactor, datos, y resultados)	Autor
$UV - A/TiO_2$	Esta propuesta comprende la construcción de un reactor foto catalítico utilizando $UV - A$ y TiO_2 como catalizador, aprovechando el oxígeno molecular y el peróxido de hidrógeno como agentes oxidantes, formando especies reactivas del oxígeno y propiciando así una degradación eficiente de los contaminantes presentes en el agua, el resultado es compuestos de mínima bioacumulación y de poca toxicidad. usando el reactor fotocatalítico diseñado se evalúa la degradación del contaminante <i>1,2 - dihidroxibenceno</i> e inactivación microbiana de <i>E. coli</i> en aguas simuladas.	Lasso (2023)
$UV - A/TiO_2$	Se construyó un reactor con lámpara ultravioleta UV artificial, alrededor del cual se movilizarían los tratamientos durante un período de 120 min , se utilizó el espectrofotómetro “Agilent Technologies” (modelo Cary 8454), el límite de detección $\left(1.60 \frac{mg}{L}\right)$ y de cuantificación $5.34 \frac{mg}{L}$ del Diuron, se analizaron 15 tratamientos, los cuales estaban compuestos por concentraciones de 3, 6, 9, 15 y $20 \frac{mg}{L}$ de Diuron con 0, 100 y $200 \frac{mg}{L}$ de TiO_2 , las muestras fueron tomadas de 0 a 120 min .	Alfaro (2020)
$UV - A/TiO_2$	Esta investigación plantea la construcción y evaluación de un reactor tubular fotocatalítico $UV - A$. Para el proceso se utilizó TiO_2 (Degussa P25) la cual impulsa el proceso de decoloración de las sustancias contaminantes a tratar, el seguimiento del proceso se realizó evaluando la degradación del colorante <i>Rodamina B</i> mediante pruebas de absorbancia. Los resultados obtenidos corroboran la efectividad del proceso fotocatalítico, dado que se logran altos porcentajes de degradación de la especie química; demostrando con ello la aplicabilidad de esta técnica para el tratamiento eficiente de residuos orgánicos	Ramírez (2013)
$UV - A/TiO_2$	En esta investigación en diseñar, construir y evaluar un reactor fotocatalítico de placa plana para degradar <i>acido tereftálico</i> $C_6H_4(COOH_2)$. Para construir el reactor, se procedió a realizar los diseños del distribuidor de la tubería perforada; se calculó el diámetro de la tubería y la potencia de la bomba requerida para mantener el régimen de flujo	Guzman & Castilla (2012)

	pertinente. El área total del reactor fue de $1.25 m_2$ y se construyó con una inclinación de 10.4°. Se realizaron corridas sin catalizador para estimar un blanco de degradación y con el catalizador para estimar el efecto de la fotocatalisis, los resultados mostraron que el reactor de placa plana degrada aceptablemente el ácido tereftálico	
Simulación numérica de fluidos	La CFD puede utilizarse para simular y optimizar el diseño de reactores químicos, permitiendo analizar el flujo de reactantes, la distribución de la temperatura, la cinética de reacción y otros parámetros importantes. En este trabajo se mostrará el diseño y la simulación de un mezclador térmico utilizando dinámica de fluidos computacional (CFAD) modelando y analizando el flujo de fluidos y la transferencia de calor en el dispositivo.	<i>Sernas et, al (2023)</i>
$UV - A/TiO_2/O_3/H_2O_2$	Este proyecto propone el diseño, construcción y evaluación de un reactor con una geometría en forma de espiral para degradar ácido salicílico aplicando los POAs (procesos de oxidación avanzada) basados en la generación de especies químicas oxidantes y altamente reactivas. Entre los más estudiados se encuentran los procesos $UV - A, O_3$ y H_2O_2 que se presentan en esta investigación. se efectuó el diseño del rector que permitiera tratar nuestro contaminante y se pudieran llevar todos los POAs antes mencionados.	<i>Aranda (2022)</i>
$UV - A/O_3/H_2O_2$	Se efectuó un análisis cuantitativo y cualitativo de la oxidación de <i>Paracetamol</i> $C_8H_9NO_2$, se lograron eficiencias de hasta 99.99 % en un tiempo de 60 min cuando fue utilizado 2 mL de $H_2O_2/UV - A/O_3$.	<i>Palermo (2022)</i>
$UV - A/O_3/H_2O_2$	Se llevó a cabo la degradación del <i>Naproxeno</i> $C_{14}H_{13}NaO_3$ en solución acuosa, se aplicaron diversos métodos de oxidación avanzada, para lo cual se adicionaron diferentes agentes oxidantes y la fuente de radiación $H_2O_2/UV - A/O_3$. se evaluaron parámetros experimentales como: la concentración inicial del contaminante y de los agentes, <i>pH</i> y el tiempo de tratamiento. se obtuvieron eficiencias de degradación de hasta 99% cuando fue utilizado 4 mL de los catalizadores	<i>Vázquez (2021)</i>

CAPITULO 2. Desarrollo experimental

2.1 Descripción general

En este capítulo, se detalla la metodología empleada para diseñar y construir un reactor fotocatalítico con la finalidad de degradar dos contaminantes emergentes de interés científico: el fármaco ibuprofeno y el colorante verde malaquita, aplicando diversos Procesos de Oxidación Avanzada (POA), específicamente: UV , H_2O_2 , O_3 , UV/H_2O_2 y $UV/H_2O_2/O_3$.

El desarrollo del proyecto de investigación se dividió en cinco etapas las cuales se observan en la figura 6, cada una de ellas son descritas en las secciones posteriores.

Desarrollo Experimental

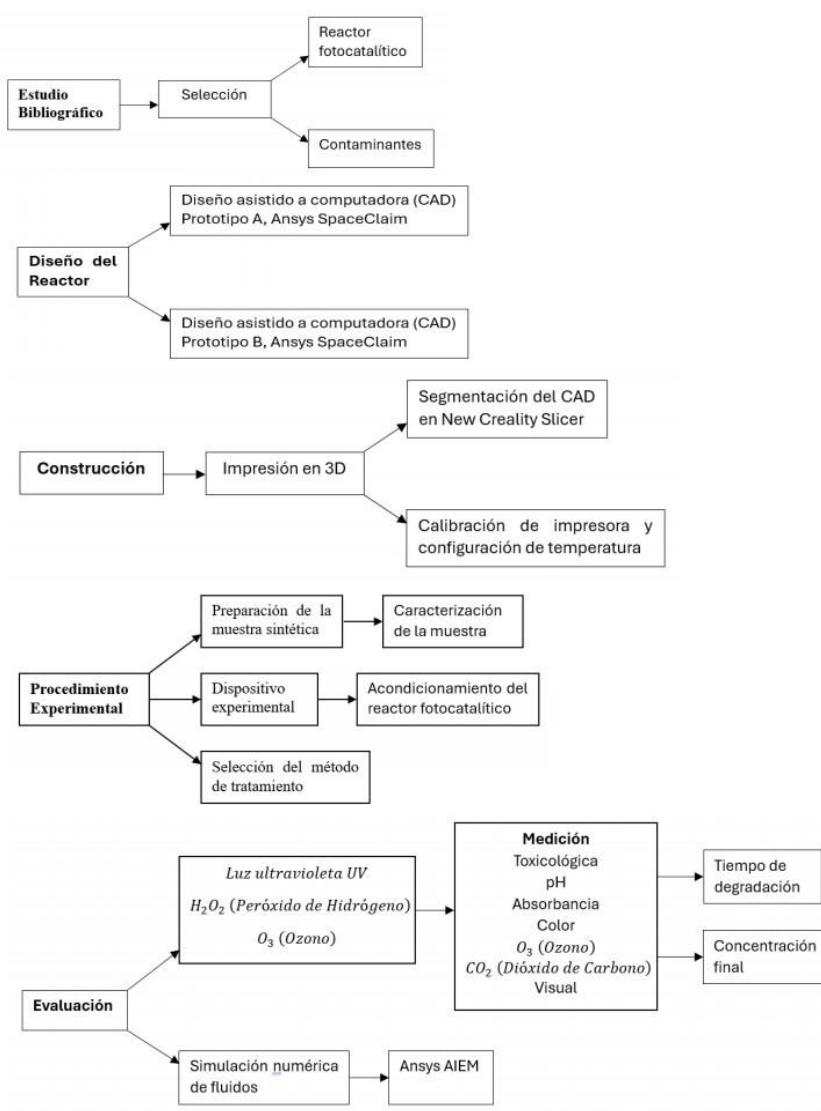


Figura 6. Etapas de la experimentación.

2.2 Estudio bibliográfico

En este trabajo de investigación, se llevó a cabo el estudio bibliográfico para diseñar construir y validar un reactor fotocatalítico. Se recopiló información relevante para establecer las configuraciones operativas necesarias, asegurando el funcionamiento adecuado del reactor en combinación con tecnologías de oxidación avanzada, considerando los siguientes parámetros:

- **Diseño del Reactor:**

Se consideraron las características específicas de los procesos de oxidación avanzada (POAs) al diseñar el reactor.

- **Selección del Contaminante:**

Se eligió el fármaco ibuprofeno y el colorante verde malaquita como contaminantes objetivo debido a su amplio uso como su presencia en aguas residuales, se investigaron sus propiedades y comportamiento en sistemas fotocatalíticos.

- **Validación del reactor fotocatalítico**

Se seleccionaron los reactivos adecuados para el tratamiento de los contaminantes, estableciendo parámetros de operación, como concentraciones, tiempos de tratamiento y flujo de reactivos.

- **Simulación Numérica de Fluidos:**

Para comprender el comportamiento del flujo dentro del reactor, se consultaron manuales y se realizó una simulación numérica, esto permitió optimizar el diseño y predecir el rendimiento del sistema.

2.3 Diseño de los reactores fotocatalíticos

Al diseñar el reactor fotocatalítico, fue indispensable considerar diversos factores que intervienen en el funcionamiento óptimo, algunos de los aspectos más importantes se enlistan a continuación:

- **Propiedades del fluido:**

Las características físicas y químicas del fluido (como viscosidad, densidad y conductividad) influyen en el diseño del reactor. Estas propiedades afectan la transferencia de masa y calor, así como la cinética de la reacción.

- **Caudal y velocidad del fluido:**

El caudal (volumen de fluido por unidad de tiempo) debe ajustarse para garantizar una reacción eficiente. La velocidad del fluido afecta la mezcla y la distribución de reactivos.

- **Intercambio de calor:**

El control de la temperatura es crucial para mantener condiciones óptimas de reacción. se deben considerar sistemas de enfriamiento o calentamiento según las necesidades.

- Eficiencia energética:

Diseñar reactores con alta eficiencia energética minimiza pérdidas y costos operativos. Se pueden emplear técnicas como el uso de intercambiadores de calor o aislamiento térmico.

- Parámetros de la reacción química:

La cinética de la reacción, la concentración de reactivos y los productos deseados influyen en el diseño. se busca maximizar la conversión de reactivos y minimizar subproductos no deseado, considerando estos factores, se desarrollaron dos prototipos de reactores, denominados Prototipo A y Prototipo B cada uno tiene dimensiones y características específicas. Se utilizó el software Ansys SpaceClaim para elaborar los modelos

2.3.1 Diseño del Prototipo A

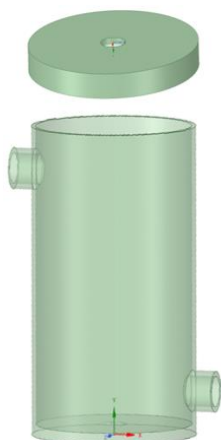
El Prototipo A es un sistema para el tratamiento de contaminantes emergentes mediante la inyección controlada del analito, peróxido de hidrógeno (H_2O_2) y ozono (O_3) a continuación, se describen sus características principales:

El sistema cuenta con una entrada principal por donde se introduce la solución acuosa.

- Orificio superior: donde se inyecta el peróxido de hidrógeno(H_2O_2).
- Orificio inferior: se utiliza para la inyección de ozono (O_3).

Funcionamiento:

La solución acuosa fluye desde la entrada hacia el interior del sistema. el peróxido de hidrógeno (H_2O_2) se introduce a través del orificio superior, mientras que el ozono O_3 se inyecta por el orificio inferior. El sistema está diseñado para garantizar una mezcla homogénea y controlada de los componentes, en la figura 7 se muestra el diseño en un plano 3D y las dimensiones del Prototipo A.



Pieza 1 Tapa con un orificio en la parte superior para la entrada de lámpara UV

Pieza 2 Reactor tubular con una entrada y dos orificios.

- ✓ Diámetro de 19 cm
- ✓ Altura de 23 cm
- ✓ Grosor 0.5 cm
- ✓ Volumen $7624 \text{ cm}^3 = 7.626 \text{ L}$

Figura 7. Plano del Prototipo A realizado en AnsysSpaceClaim.

2.3.2 Diseño del Prototipo B

Debido a él volumen y a que se presentaron fugas en el proceso el diseño del prototipo A, se rediseñó un consiguiendo un nuevo modelo conservando su funcionamiento como sus características solo modificando sus dimensiones para cambiar el volumen y este no presente fugas, en la figura 8 se muestra las nuevas dimensiones y la forma adecuadas del Prototipo B.



Pieza 1 Tapa con un orificio en la parte superior para la entrada de lampara UV

Pieza 2 Reactor tubular con una entrada y dos orificios.

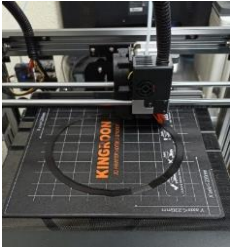
- ✓ Diámetro de 5 cm
- ✓ Altura de 23 cm
- ✓ Grosor 0.5 cm
- ✓ Volumen $450 \text{ cm}^3 = 0.45L$

Figura 8. Plano del Prototipo B realizado en AnsysSpaceClaim.

2.4 Construcción

La impresión en 3D ofrece la posibilidad de crear objetos únicos, personalizando cada creación, reducción de costo, a partir de un software de diseño y una impresora 3D. a continuación se presenta los pasos que se realizaron para una adecuada impresión del reactor fotocatalítico posteriormente realizar la construcción de este, en la tabla 10 se muestra el quipo y material utilizado en esta etapa.

Tabla 10. Equipo y materiales utilizados para la impresión del reactor en 3D

Equipo	Materiales
Impresora Creality Sermion modelo D1 3D Drucker  Plancha magnetica  Boquilla  Software NEW CREALITY SLICER  New Creality Slicer Aplicación	PLA,BLACK 195 – 210 °C. 

2.4.1 Segmentación

Después de haber realizado los diseños de los prototipos estos fueron exportados en el software New Creality Slicer donde se prepararon para poder ser impresos.

2.4.2 Calibración de la impresora 3D

Para poder imprimir adecuadamente las piezas del reactor es necesario un proceso de calibración consiste en nivelar la cama de la impresora 3D correctamente. Sin una correcta a nivelación, las impresiones del reactor salen mal o simplemente no salen. El primer paso de este proceso configurar la impresora en modo de nivelación haciendo un auto home y después un Disable Steppers que permite mover con libertad el eje Y (la cama) y el eje Z (el cabezal de la boquilla), como se muestra en la figura 9.



Figura 9. Configuración de nivelación.

El segundo paso de este proceso es pasar una hoja opalina entre la boquilla y la cama de los cinco puntos que se marcan en la figura 10, la hoja opalina de rozar ligeramente esto se hace manualmente como se muestra en la figura 11, la distancia optima debe de ser de 0.015mm aproximadamente.



Figura 10. Configuración de nivelación.

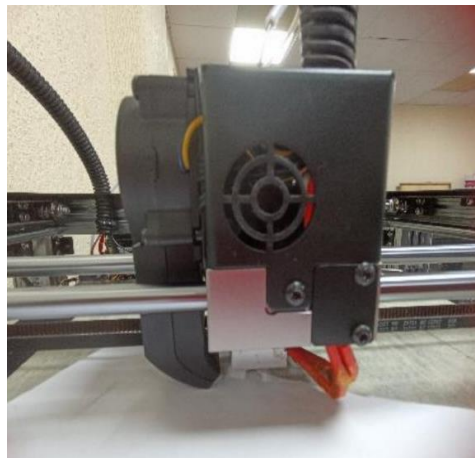


Figura 11. Distancia entre plancha y boquilla.

2.4.3 Temperatura de impresión

Por último se configuro la temperatura de la boquilla a 210 °C y el de la cama de 60 °C como se muestra en la figura 12.



Figura 12. Configuración de temperatura.

2.5 Procedimiento experimental.

Esta etapa del desarrollo experimental es la más dinámica por ello se divide en la preparación de la muestra, el acondicionamiento del reactor basado en el dispositivo experimental, la selección de los métodos utilizados y por último como se realizó la simulación numérica de fluidos., a continuación se describe cada una de ellas.

2.5.1 Reactivos e instrumentos utilizados en el desarrollo experimental

Durante el proceso experimental, fueron utilizados diversos reactivos e instrumentos sus características principales se describen en la tabla 11.

Tabla 11. Descripción de los reactivos e instrumentos que se utilizaron en el desarrollo experimental.

Reactivos	
<i>Ibuprofeno (C₁₃H₁₈O₂)</i>	
Peso molecular:	206.28 $\frac{g}{mol}$
Fórmula molecular:	C ₁₃ H ₁₈ O ₂
Estado de agregación:	Polvo finamente cristalizado
Punto de fusión:	76°C
Punto de ebullición:	75 – 77°C

Solubilidad:	$0.30 \frac{g}{ml}$
Clasificación:	Para la salud
Ecotoxicidad:	El producto sustancias peligrosas para el medio ambiente y toxicas organismos terrestres como acuáticos.
Verde Malaquita ($C_{23}H_{25}ClN_2$)	
Peso molecular:	$369.91 \frac{g}{mol}$
Fórmula molecular:	$C_{23}H_{25}ClN_2$
Estado de agregación:	Polvo cristalino
Punto de fusión:	159 °C
Punto de ebullición:	N/A
Solubilidad:	Completamente soluble en agua
Clasificación:	Colorante industrial
Ozono (O_3)	
Peso molecular:	$48.0 \frac{g}{mol}$
Fórmula molecular:	O_3
Estado de agregación:	Gas incoloro o azulado, con olor
Punto de fusión:	característico
Punto de ebullición:	-193°C
Solubilidad:	-112°C
Clasificación:	NA
Peligros químicos:	Comburente, toxicidad aguda y peligro grave para la salud La sustancia se descompone al calentar suavemente, produciendo oxígeno y originando peligro de incendio y explosión. Reacciona violentamente con compuestos orgánicos e inorgánicos, originando peligro de incendio y explosión.
Peróxido de Hidrógeno (H_2O_2)	
Peso molecular:	$34.0147 \frac{g}{mol}$

Fórmula molecular:	H_2O_2
Estado de agregación:	Líquido
Punto de fusión:	$-33\text{ }^{\circ}\text{C}$
Punto de ebullición:	108°C
Solubilidad:	Completamente soluble en agua.
Clasificación:	Comburente, corrosivo y peligroso para la salud.
Persistencia y degradabilidad:	El peróxido de Hidrógeno en ambiente acuático es sujeto a varios procesos de reducción u oxidación y se descompone en agua y oxígeno.
Agua (H_2O)	
Peso molecular:	$18.02 \frac{g}{mol}$
Fórmula molecular:	H_2O
Estado de agregación:	Líquido
Punto de fusión:	$0\text{ }^{\circ}\text{C}$
Punto de ebullición:	100°C
Instrumentos	
✓ Reactor fotocatalítico fijo tipo batch con forma cilíndrica impreso en 3D ✓ Lámpara de tratamiento <i>UV de 11 W</i> ✓ Agitador magnético ✓ Generador de Ozono (O_3) <i>modelo cgoldenwall zo – 30N</i> ✓ Un espectrómetro <i>UV – visible de la marca Velab modelo VE – 5000V</i> ✓ Medidor de <i>pH de la marca Hanna instrument modelo Hi98103</i> ✓ Tiras reactivas <i>peróxido de hidrógeno(H_2O_2) 0 – 90 ppm de la marca instaTest</i> ✓ Colorímetro de la marca <i>Hanna instrument modelo Hi711</i> ✓ Kit de prueba para determinación de ozono (O_3) <i>de la marca Hanna instument modelo Hi 38054</i> ✓ Kit de prueba para determinación de dióxido de carbono (CO_2) <i>la marca Hanna instrument modelo Hi 3812</i> ✓ Softwares especializados	

2.5.2 Preparación de la muestra.

Se llevo a cabo la validación del reactor fotocatalítico mediante el tratamiento de dos contaminantes emergentes a concentraciones conocidas, la preparación de la muestra se describe a continuación:

- Ibuprofeno: La concentración inicial del ibuprofeno fue $30 \frac{mg}{L}$ variando el volumen inicial en $200 mL$ y $150 mL$ para la primera solución se pesó $0.006 g$ y $0.0045 g$ para la segunda solución, se utilizó ibuprofeno grado analítico en forma de polvo cristalino, se mantuvo en agitación durante $60 min$, aproximadamente antes de la experimentación utilizando un agitador electromagnético.
- Verde malaquita: Se preparó una solución de verde malaquita grado analítico con una concentración inicial de $30 \frac{mg}{L}$, para lo cual se pesó con $0.0045 g$ en un volumen de $150 mL$, se mantuvo en agitación durante $60 min$ aproximadamente antes de la experimentación utilizando un agitador electromagnético.

2.5.3 Dispositivo experimental.

En la figura 13 se observa el dispositivo experimental utilizado para el tratamiento de los contaminantes (*Ibuprofeno y verde malaquita*):

- 1) Entrada de la solución
- 2) Lámpara ultravioleta (UV) comercial de $11 W$ que emite en longitudes de onda entre $\lambda = 200 nm - 280 nm$, destacando que los procesos químicos deseables en esta investigación se efectúan en $254 nm$.
- 3) Inyección de ozono (O_3), fue utilizado un generador comercial modelo *cgoldenwall zo - 30N* con una potencia de $12 W$ que utiliza aire atmosférico, con el objetivo de minimizar los costos de operación, fue inyectado utilizando un difusor para garantizar el contacto con la solución.
- 4) Inyección de peróxido de hidrógeno (H_2O_2).
- 5) Toma de muestra
- 6) Depósito de muestra
- 7) Medición de pH , se utilizó un instrumento de marca *Hanna Instrument modelo Hi 98103*.
- 8) Determinación de color, se utilizó un colorímetro de la marca *Hanna instrument modelo Hi 711*, el cual utiliza un método estándar de unidades *platino cobalto (UPC)*, con una medición máxima de $500 (UPC)$.
- 9) Cuantificación de peróxido de hidrógeno (H_2O_2), se utilizaron tiras reactivas marca *inta Test 0 - 90 ppm*
- 10) Espectrómetro UV - visible de la marca *Velab modelo Ve - 5000V* cuenta con un software, especializado para la caracterización química. Determinación de dióxido de carbono (CO_2) disuelto en agua, se utilizó un kit de la marca

Hanna instrument modelo Hi 3812, que utiliza el método volumétrico de titulación.

- 11) Determinación de *ozono (O_3)*, se utilizó un kit de la marca *Hanna instrument modelo Hi 38054*, que utiliza un método colorimétrico mediante la adición de *yoduro de potasio (KI)*.
- 12) Determinación de *dióxido de carbono (CO_2)* disuelto en agua, se utilizó un kit de la marca *Hanna instrument modelo Hi 3812*, que utiliza el método volumétrico de titulación.

La muestra sintética es ingresada en la parte superior del reactor fotocatalítico de tratamiento. Se adiciona *peróxido de hidrógeno (H_2O_2)* directamente en el orificio superior del reactor además, se determinó el efecto de la concentración inicial 2, 4 y 6 ml. El *ozono (O_3)* fue inyectado en el orificio inferior del reactor, utilizando una piedra difusora con el objetivo de generar burbujas e incrementar el contacto con la solución. La caracterización de la muestra fue efectuada antes del tratamiento mediante un espectrómetro *UV – visible* obteniendo una curva de calibración para cada contaminante esta se mostrará en el capítulo 3, para el *Iburpofeno* se tomaron muestras cada 10 min donde el tiempo total fue de 60 min y cada 20 min cuando el tiempo de tratamiento fue de 4 hrs, para el caso del verde malaquita se tomaron muestras cada 5 min durante 30 min de tratamiento. Es importante mencionar que para cada toma de muestra se realizó la determinación del *color, pH, peróxido de hidrógeno (H_2O_2)* y *absorbancia* al finalizar el tratamiento se determinó la generación de *dióxido de carbono (CO_2)* y *ozono (O_3)* en el líquido residual.

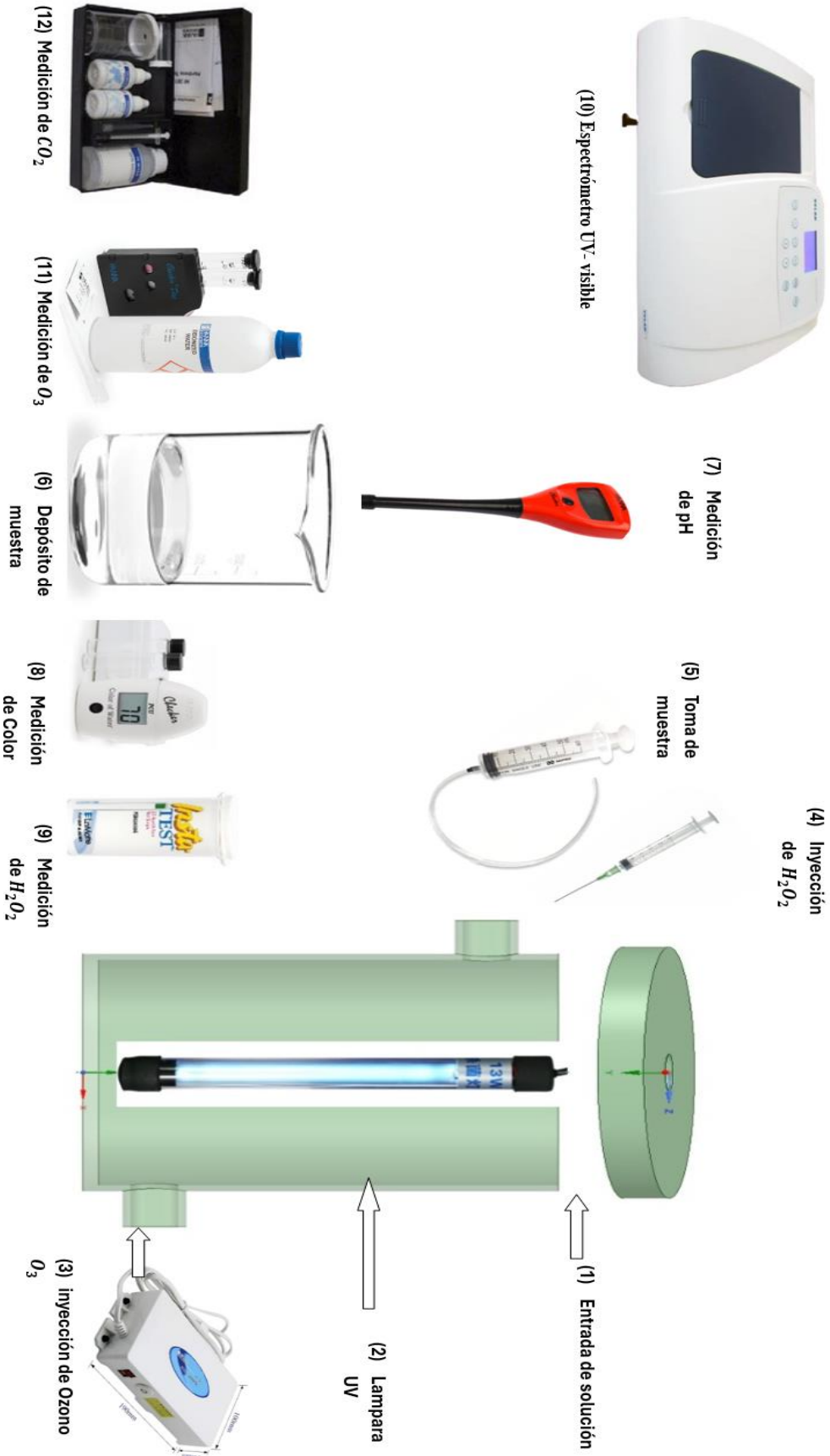


Figura 13. Dispositivo experimental.

2.5.4 Selección del método de tratamiento

Se utilizaron diversos POAs para el tratamiento del fármaco y el colorante, en la tabla utilizados diversos Procesos de Oxidación Avanzada para el tratamiento del fármaco y el colorante, en la Tabla 7 se observan cada uno de estos.

Tabla 12. Métodos de tratamiento realizados

<i>Faramaco ibuprofeno</i>									
Método de tratamiento	Tiempo de tratamiento								
	10 min	20 min	30 min	40 min	50 min	60 min	2 hrs	3 hrs	4 hrs
<i>UV/H₂O₂/O₃</i>	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓
<i>UV/H₂O₂/O₃</i>	✓	✓	✓	✓	✓	✓			
<i>UV/O₃</i>	✓	✓	✓	✓	✓	✓			
<i>UV/H₂O₂</i>	✓	✓	✓	✓	✓	✓			
<i>UV</i>	✓	✓	✓	✓	✓	✓			
<i>Colorante verde malaquita</i>									
Método de tratamiento	Tiempo de tratamiento								
	10 min	20 min	30 min	40 min	50 min	60 min			
<i>UV/H₂O₂/O₃</i>	✓	✓	✓	✓	✓	✓			
<i>UV/H₂O₂/O₃</i>	✓	✓	✓						

2.6 Simulación numérica de fluidos

En esta última etapa del desarrollo experimental se realizó una simulación en el software AnsysAIM para comprender y observar el funcionamiento del reactor antes de llevar a cabo su construcción.

2.6.1 Generación de malla

La generación de malla se refiere al proceso de crear una estructura de malla computacional en un entorno de simulación o modelado (discretización del CAD), la malla se compone de una serie de elementos finitos en la figura 14 se observa la discretización del diseño asistido a computadora.



Figura 14. Discretización del CAD. Realizado en ANSYS AIM.

2.6.2 Configuración de entrada y salida

En esta simulación se tendrá una entrada de agua a temperatura constante y para la velocidad se harán dos simulaciones para saber dónde es más factible colocar la entrada del caudal para llevar a cabo una mejor recirculación del reactor, mismas que pasaran por la *luz ultravioleta UV* para llevar a cabo la reacción de oxidación y así obtener la simulación del flujo en el reactor basada en el tiempo de tratamiento, en la figura 15 se muestra la entrada donde se colocan las siguientes características:

- Velocidad de entrada aproximadamente entre $15 - 30 \frac{m}{s}$
- Temperatura de entrada de $24^{\circ}C$.

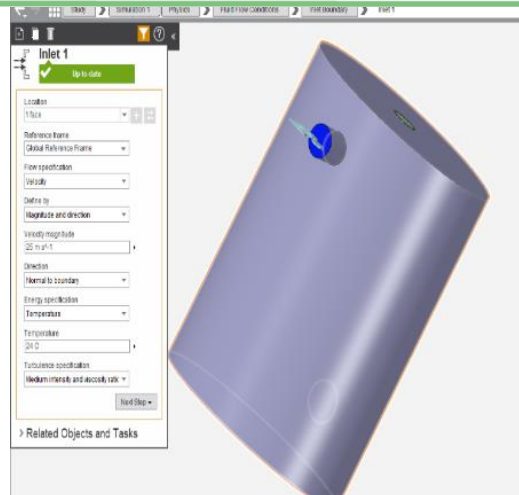


Figura 15. Entrada.

En la figura 16 se muestra la salida con una presión de 0 Pa con este valor indicamos que no hay presión alguna que se oponga en el proceso de experimentación.

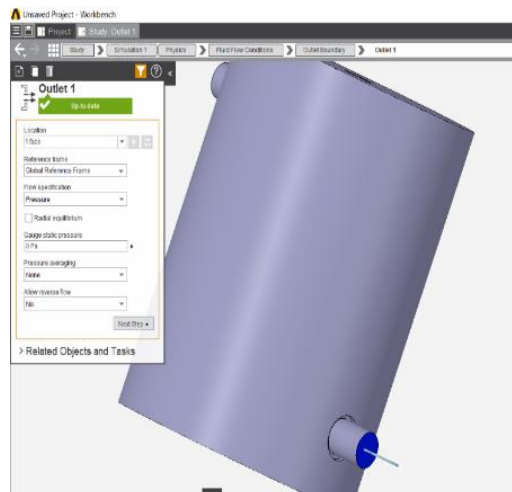


Figura 16. Salida.

CAPITULO 3.

Resultados y Discusión

3.1 Descripción general de los resultados

En este capítulo se prestan los resultados obtenidos del desarrollo experimenta basado en seis etapas a continuación se describe de manera general cada una de estas, 3.2 Diseño donde se muestra la cota del CAD, 3.3 Construcción del reactor donde se muestra las piezas impresas en 3D del Prototipo A y el Prototipo B, 3.4 Caracterización de la muestra sintética donde se muestra la determinación de los parámetros de manera cuantitativa como cualitativa 3.5 Degradación del ibuprofeno donde se muestran la evaluación de los destinos POAs utilizados, 3.6 Degradación del verde malaquita donde se muestra la evaluación de los distintos POAs utilizados y por último 3.7 Simulación numérica de fluidos donde se muestra la simulación realizada.

3.2 Diseño del reactor

En la figura 17 se muestra la cota (*dimensión en cm*) del diseño asistido a computadora (CAD) del Prototipo A y en la figura 18 se muestra la cota (*dimensiones en mm*) del diseño asistido a computadora (CAD) del Prototipo B.

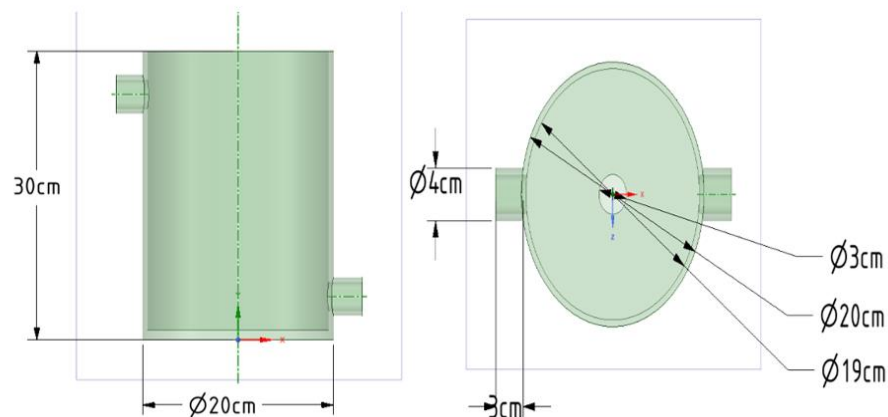


Figura 17. Cota del Prototipo A, realizado en AnsysSpaceclaim

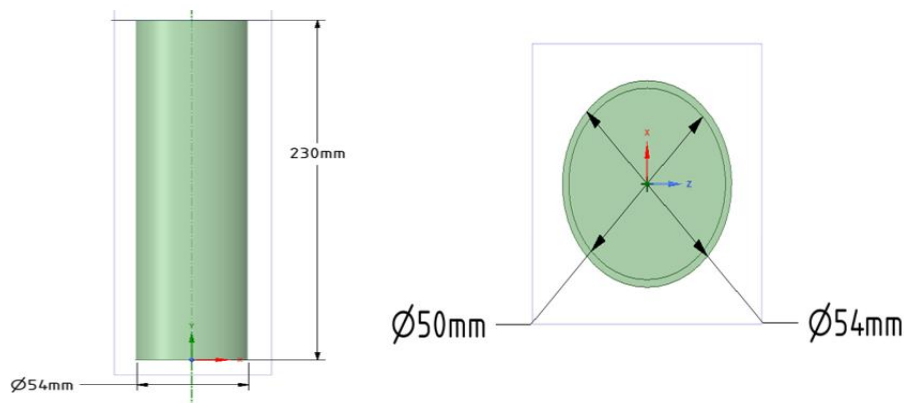


Figura 18. Cota del Prototipo B, realizado en AnsysSpaceclaim

3.3 Construcción del reactor

A partir de la impresión en 3D, se realiza la construcción del reactor siendo fundamental para llevar al diseño en forma tangible como se mencionó en el capítulo II solo el Prototipo B se utilizó para el procedimiento experimental. En la tabla 13, se muestra el diseño, la segmentación y la impresión de cada pieza.

En la figura 19, se muestra el resultado de la impresión en 3D y la construcción del prototipo B y en la figura 20 se muestra la impresión del Prototipo B listo para ser probado en procesos de oxidación avanzada siendo un diseño óptimo para degradar contaminantes químicos en aguas sintéticas.

Tabla 13. CAD, Segmentación y impresión

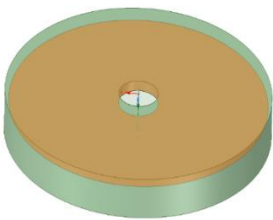
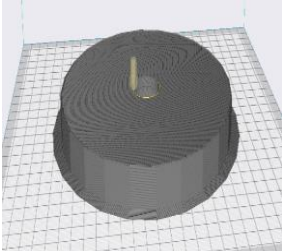
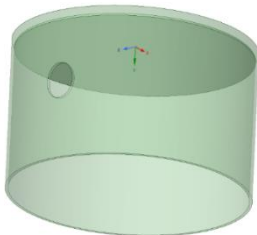
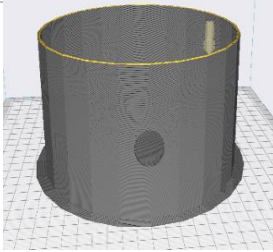
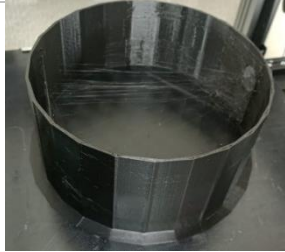
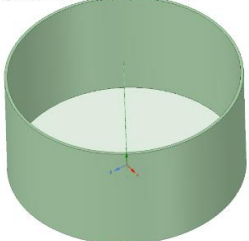
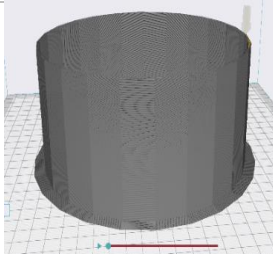
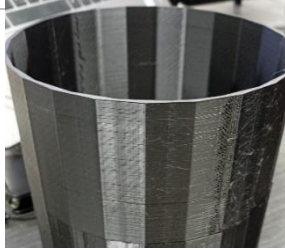
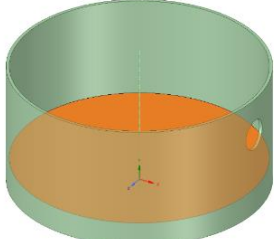
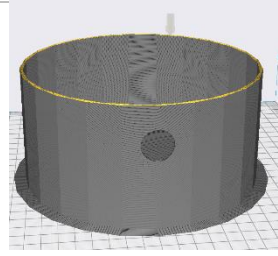
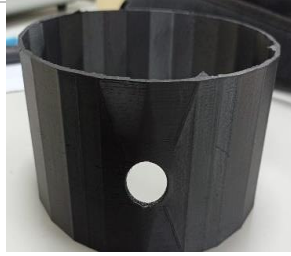
Diseño asistido computadora (CAD)	Segmentación	Impresión
Prototipo A		
		
		
		
		
Prototipo B		



Figura 19. Prototipo A



Figura 20. Prototipo B

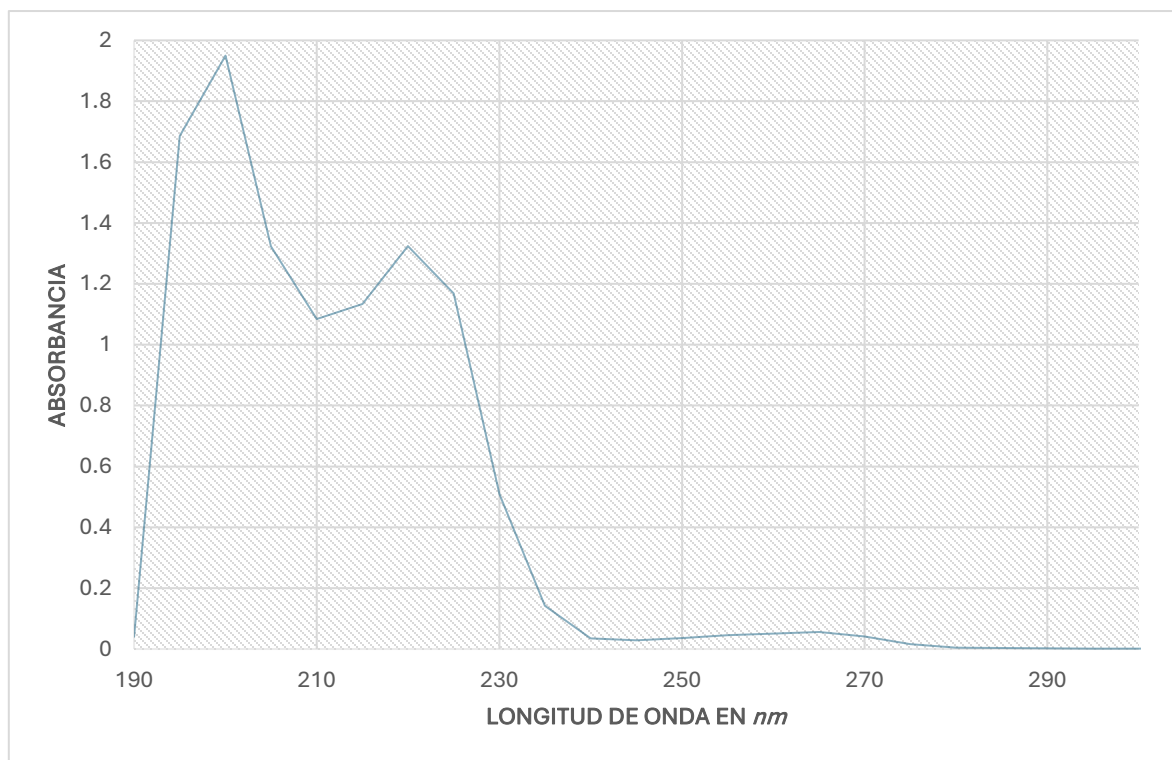
3.4 Caracterización de la muestra

La caracterización de la muestra consistió en un estudio cuantitativo en el cual se determinan variables importantes para la degradación de los contaminantes también se realizó un estudio cualitativo en donde fue observado el cambio de coloración de las muestras en función del tiempo de tratamiento.

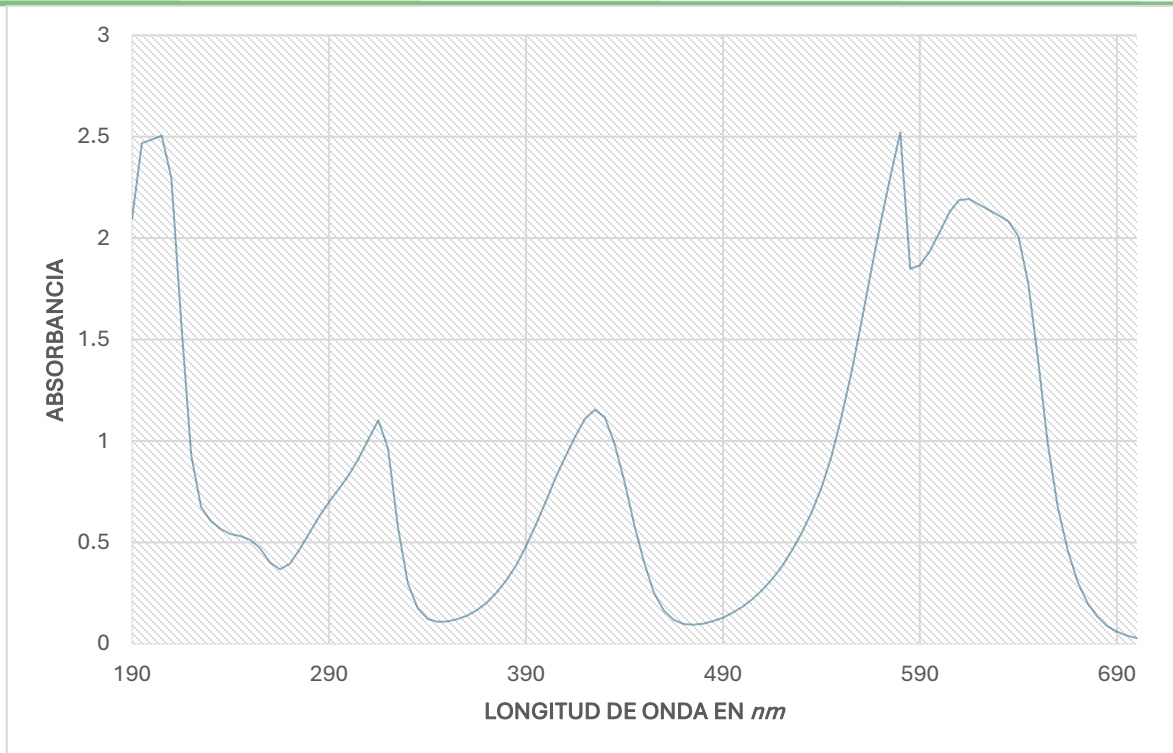
Es importante mencionar que en el estudio cuantitativo se realizó una curva de calibración para obtener la máxima absorbancia de los contaminantes con soluciones sintéticas a concentraciones conocidas.

3.4.1 Estudio cuantitativo

Previo a el tratamiento de los contaminantes mediante los procesos de oxidación avanzada, se determinó una longitud máxima de absorción, para lo cual se realizó un barrido en longitudes de onda de 190 *nm* a 600 *nm*, determinando una longitud máxima para el ibuprofeno de 200 *nm* siendo 220 *nm* la banda de mayor absorción reportada por Santos (2006) y para el verde malaquita 580 *nm*, En la gráfica 1 se muestra la longitud de onda máxima del ibuprofeno y en la gráfica 2 se muestra la longitud de onda máxima para el verde malaquita.



Grafica 1. Barrido del ibuprofeno a 200 *nm* con una concentración de 100 *ppm*.



Grafica 2. Barrido del verde malaquita a 580 nm con una de concentración de 100 ppm.

3.4.2 Estudio cualitativo

El estudio cualitativo consistió en la observación del cambio de color en las muestras antes, durante y después del tratamiento, esto fue efectuado debido a que el cambio de coloración es asociado en la generación de subproductos en la figura 21 se muestra el líquido residual del ibuprofeno con tratamientos realizados y en la figura 22 se muestran el cambio de coloración del verde malaquita antes, durante y después del tratamiento.



Figura 21. Coloración visual del ibuprofeno

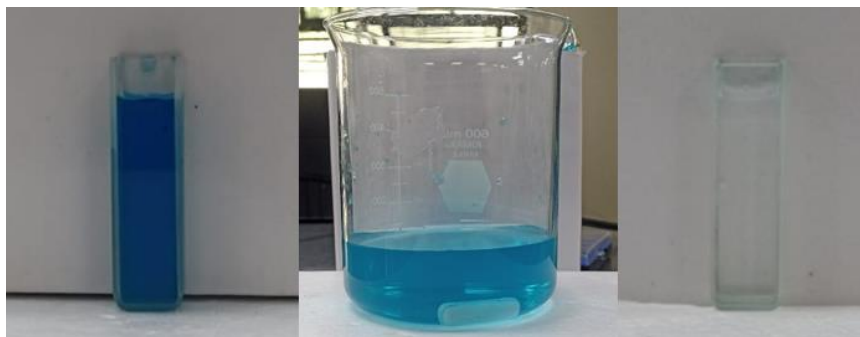


Figura 22. Decoloración visual del verde malaquita

3.4.3 Curva de calibración

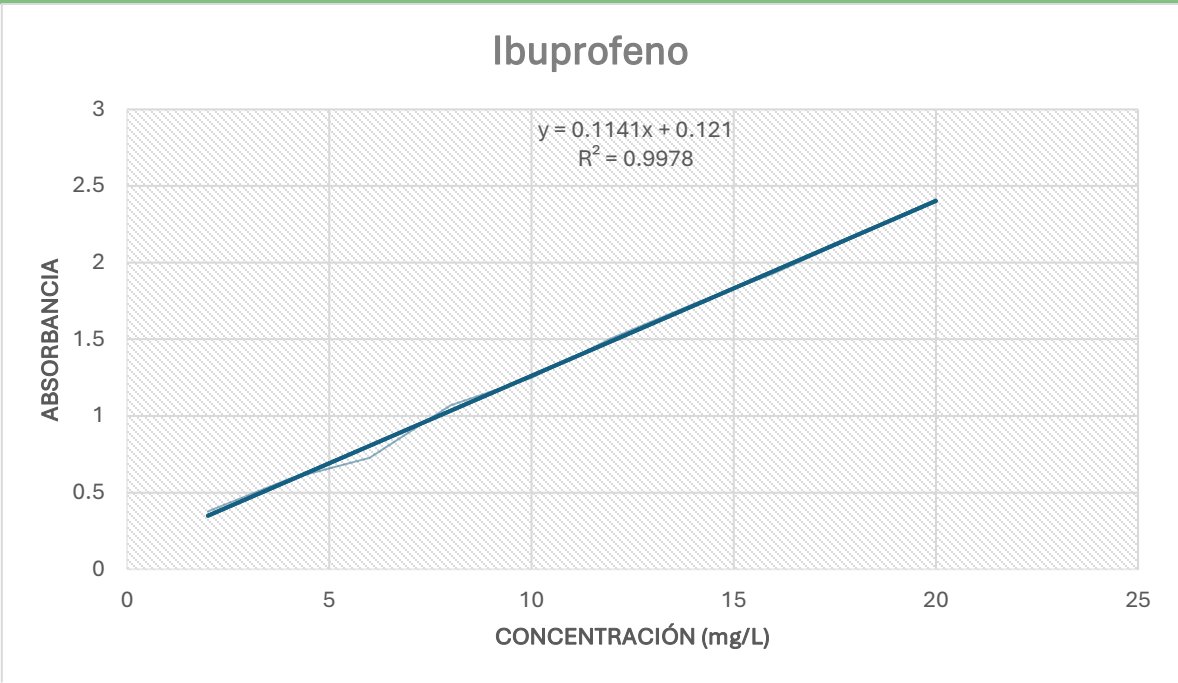
La curva de calibración es un gráfico que muestra la relación entre la concentración de un analito y la respuesta del espectro UV-VIS. Se utiliza para determinar la concentración de una sustancia en una muestra desconocida, asegurando que el equipo de medición esté funcionando correctamente. A continuación, se presentan las curvas de calibración realizadas para el ibuprofeno y la del verde malaquita.

Curva de calibración Ibuprofeno

Para la elaboración de la curva de calibración, se prepararon soluciones de ibuprofeno a diferentes concentraciones conocidas:

$$100 \frac{mg}{L}, 90 \frac{mg}{L}, 80 \frac{mg}{L}, 70 \frac{mg}{L}, 60 \frac{mg}{L}, 50 \frac{mg}{L}, 40 \frac{mg}{L}, 30 \frac{mg}{L}, 20 \frac{mg}{L}, 10 \frac{mg}{L}$$

En la gráfica 3 se presenta cada una de las soluciones se obtuvo la absorbancia con el espectro UV-visible, posteriormente se realizó una regresión de mínimos cuadrados como se muestra en la tabla 14.



Gráfica 3. Curva de calibración Ibuprofeno grado analítico

Tabla 14. Método de mínimos cuadrados del ibuprofeno

Concentración (X)	Absorbancia (Y)	(X)(Y)	(X ²)	(Y ²)
20	2.4134	48.268	400	5.8244
18	2.1683	39.0294	324	4.7015
16	1.9309	30.8944	256	3.7283
14	1.7287	24.2018	196	2.9884
12	1.5094	18.1128	144	2.2782
10	1.2475	12.475	100	1.5562
8	1.0681	8.5448	64	1.1408
6	0.7261	4.3566	36	0.5272
4	0.5893	2.3572	16	0.3472
2	0.3772	0.7544	4	0.1422
$\Sigma = 110$	$\Sigma = 13.7589$	$\Sigma = 188.9944$	$\Sigma = 1540$	$\Sigma = 23.2344$

Posteriormente, se determinó la ecuación matemática que relaciona la concentración y la respuesta analítica obtenida

$$y = 0.1141x + 0.121$$

Donde y representa la absorbancia y x la concentración. La ecuación obtenida es de forma:

$$y = mx + b$$

Donde b y m son determinados mediante las siguientes ecuaciones.

$$m = \frac{n\sum(xy) - \sum x \sum y}{n\sum x^2 - (\sum x)^2}$$

$$b = \frac{\sum y \sum x^2 - \sum x \sum (xy)}{n\sum x^2 - (\sum x)^2}$$

Que al aplicarlo en los datos analíticos de la tabla 14 se obtiene:

$$m = \frac{(10)(188.9944) - (110)(13.7589)}{(10)(1540) - (110)^2} = 0.1140$$

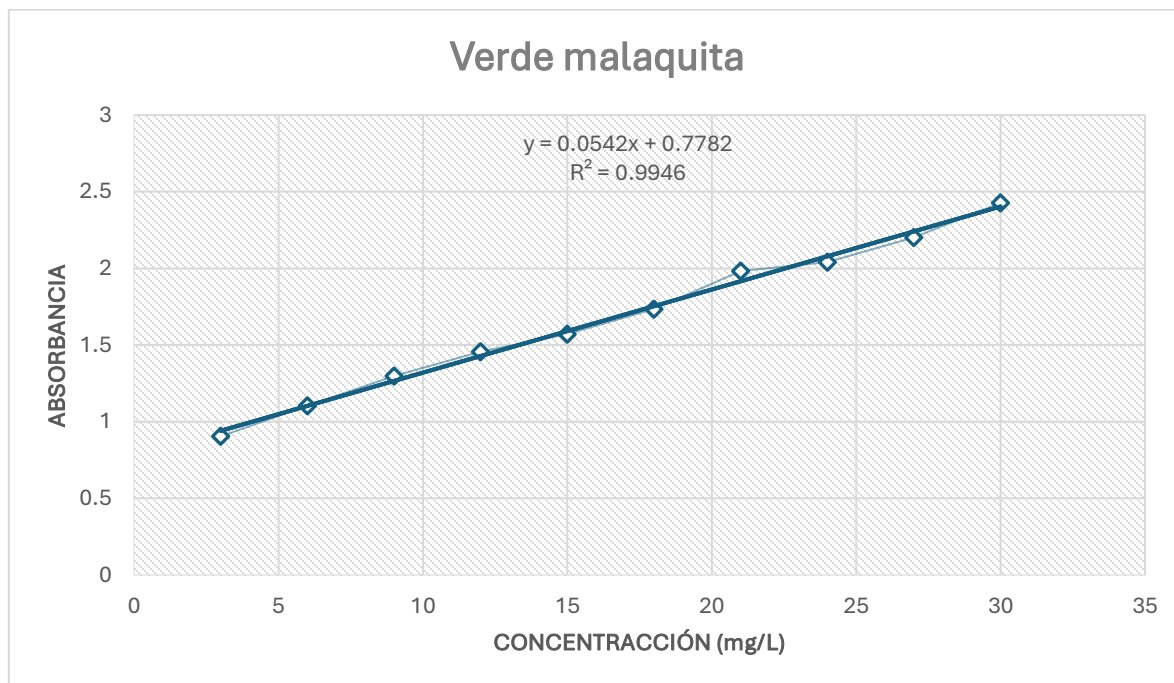
$$b = \frac{(13.7589)(1540) - (110)(188.9944)}{(10)(1540) - (110)^2} = 0.1210$$

Curva de la calibración Verde malaquita

A continuación, se presenta la curva de calibración la cual obtuvo al preparar soluciones a diferentes concentraciones conocidas de verde malaquita:

$$100 \frac{mg}{L}, 90 \frac{mg}{L}, 80 \frac{mg}{L}, 70 \frac{mg}{L}, 60 \frac{mg}{L}, 50 \frac{mg}{L}, 40 \frac{mg}{L}, 30 \frac{mg}{L}, 20 \frac{mg}{L}, 10 \frac{mg}{L}$$

En la gráfica 4 de cada una de las soluciones se obtuvo la absorbancia en el espectro UV-VIS, posteriormente se realizó una regresión de mínimos cuadrados en la tabla 15.



Grafica 4. Curva de calibración Verde malaquita

Tabla 15. Método de mínimos cuadrados del verde malaquita

Concentración (X)	Absorbancia (Y)	(X)(Y)	(X²)	(Y²)
30	2.4271	72.813	900	5.8908
27	2.2011	59.4297	729	4.8448
24	2.0409	48.9816	576	4.1652
21	1.9822	41.6262	441	3.9291
18	1.7353	31.2354	324	3.0112
15	1.5714	23.571	225	2.4692
12	1.4568	17.4816	144	2.1222
9	1.2991	11.6919	81	1.6876
6	1.1048	6.6288	36	1.2205
3	0.9048	2.7144	9	0.8187
$\Sigma = 165$	$\Sigma = 16.7235$	$\Sigma = 316.1736$	$\Sigma = 3465$	$\Sigma = 38.3276$

Luego entonces se determinó la ecuación matemática que relaciona la concentración y la respuesta analítica obtenida mediante las ecuaciones anteriores.

3.5 Degradación del fármaco Ibuprofeno: grado analítico

Debido a las características químicas del ibuprofeno en todos los POAs aplicados la absorbancia de los subproductos se sobreponen a la longitud máxima del ibuprofeno siendo imposible determinar el porcentaje de degradación, esto ha sido reportado por diversos autores principalmente Santibañez (2014) & Pineda (2024).

El incremento de la absorbancia en el pico característico para el ibuprofeno se puede deber a la formación de especies intermediarias generadas durante el proceso de degradación Figueredo (2015), las cuales absorben en la misma longitud de onda que el ibuprofeno, en las gráficas 5, 6, 7, y 8 se muestra como los subproductos se sobreponen a la absorbancia del ibuprofeno

Santibañez (2014) reporto absorbancias similares a las de este trabajo por lo que opto realizar cromatografía de gases utilizando TiO_2 como catalizador y luz ultravioleta a un con este método de medición obtuvo fue la identificación de la degradación del ibuprofeno.

Pineda (2024) utilizó por un reactor electroquímico modificando el *pH inicial* (10, 6.5 y 3) con esta metodología empleada reporto absorbancias similares, determino el porcentaje de degradación mediante un modelo cinético demostrando que un *pH* acido favorece la degradación del ibuprofeno.

A continuación, se muestran la determinación de variables cuantitativos que son indicadores de un tratamiento efectivo es importante mencionar que estos parámetros cambian dependiendo el POAs utilizadas.

3.5.2 Efecto UV/2ml de H_2O_2/O_3

En la tabla 14 se muestra la determinación de variables en un tiempo de tratamiento de 240 min, con muestreos cada 20 min. Al inicio el *pH* es de 5.8, pero disminuye a

2.90 a los 40 *min*, lo que sugiere un tratamiento efectivo. Esta disminución de *pH* está relacionada con la formación de ácidos durante las reacciones de oxidación.

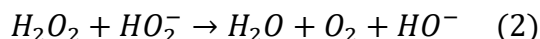
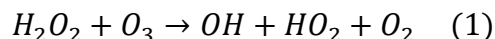
En cuanto el color, se observan variaciones en diferentes tiempos de tratamiento el color inicial es 0 característico en una solución de ibuprofeno en el minuto 60, 80, 100, 120, 220 y 240 se observa variación de color siendo en 15 minutos la variación más alta para los fármacos, estas variaciones indican que se están llevando reacciones de oxidación en el proceso.

El peróxido de hidrógeno (H_2O_2) es indispensable, al agregar los 2 *ml* iniciales este aumenta a 50 es importante mencionar se adicionaron 2 *ml* de peróxido de hidrógeno (H_2O_2) en el *min* 60, 120 y 180 se observa este se mantuvo constante, pero disminuye cuando no se adiciona. Esto indica que el peróxido de hidrógeno (H_2O_2) se está consumiendo en las reacciones de oxidación llevadas en el proceso además afecta al *pH*.

En la gráfica 5 se observa que la absorbancia de la banda principal 200 *nm* aumenta respecto al tiempo, siendo esto contrario a lo esperado, ya que al considerar que el proceso es de degradación se esperaría una disminución proporcional de la concentración del fármaco respecto a la absorbancia de la banda. Por otra parte, se presenta una deformación del espectro a desde el inicio hasta el final del efecto esto y con el incremento de la absorbancia, se considera una evidencia de la presencia de productos de degradación.

La degradación de contaminantes como el ibuprofeno se ve afectada por la inyección de ozono empleada, ya que conforme esta aumenta, la generación, de especies reactivas es mayor, incrementándose así la degradación del contaminante Moreira et al., (2017).

La adición de peróxido de hidrógeno a los sistemas de ionización es una de las formas más inmediatas de acelerar la descomposición de ozono a la formación de radicales hidroxilos *OH*. El H_2O_2 es un ácido débil, un poderosos oxidante y compuesto inestable. El uso de estos oxidantes combinados permiten aprovechar los efectos sinérgicos entre ellos, lo que produce un mecanismo cinético que favorece la degradación del contaminante. El proceso pretende combinar la oxidación directa del ozono con la reacción rápida y poco selectiva de los radicales H_2O_2 con los compuestos orgánicos, esto mediante el siguiente mecanismo González (2013):



La combinación de los tres oxidantes produce una aceleración de la reacción ya que ocurre en ausencia de luz ultravioleta, especialmente la reacción entre el ozono y el peróxido de hidrógeno reacción (16) Doménech (2004):

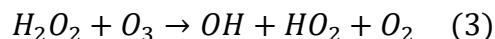
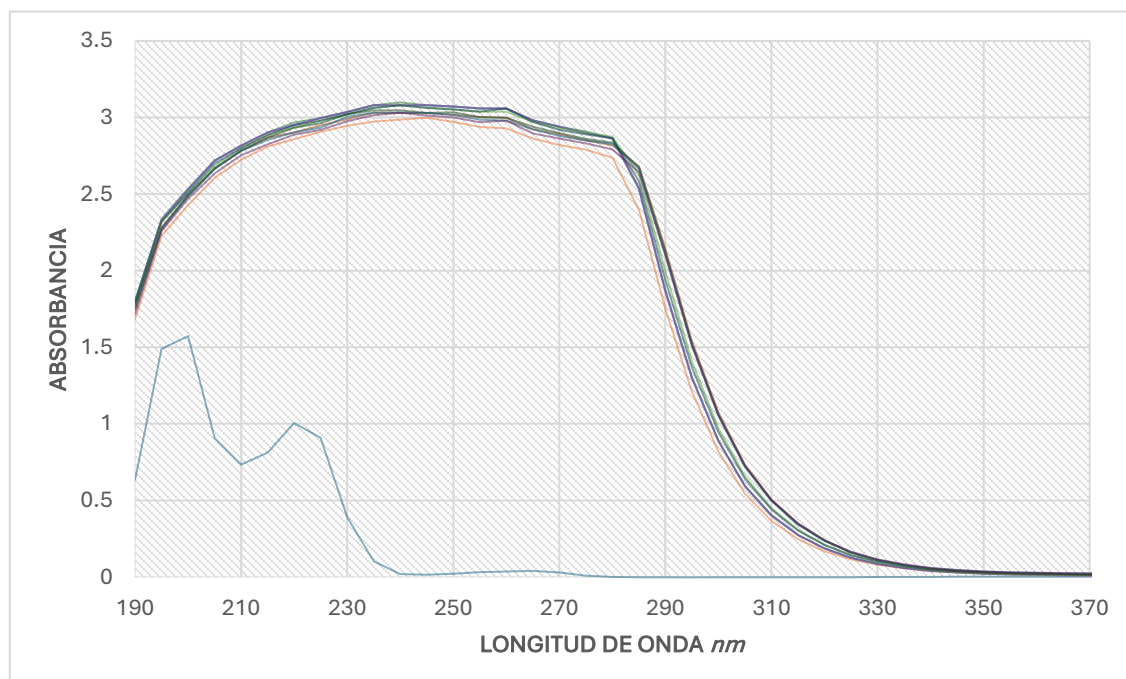


Tabla 16. Determinación de variables efecto $UV/2ml$ de H_2O_2/O_3 ibuprofeno

<i>Tiempo min</i>	<i>pH</i>	<i>Color (UPC)</i>	<i>H₂O₂</i>
0	5.28	0	-----
20	3.35	0	50
40	2.90	0	-----
60	2.78	15	40
80	2.60	15	50
100	2.73	5	-----
120	2.51	5	30
140	2.46	0	-----
160	2.37	0	-----
180	2.33	0	30
200	2.29	0	40
220	2.27	5	-----
240	2.24	10	50



Grafica 5. Espectro de luz UV-VIS efecto $UV/2ml$ de H_2O_2/O_3 ibuprofeno

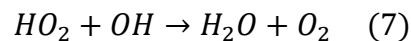
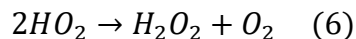
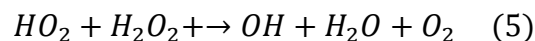
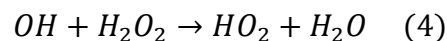
3.5.3 Efecto $UV/3ml$ de H_2O_2/O_3

Este efecto es similar al anterior combinando $UV/H_2O_2/O_3$, con la diferencia de inyectar 3 ml de peróxido de hidrógeno (H_2O_2) al principio del tratamiento y disminuyendo la concentración de:

0.006 g de ibuprofeno en 150 ml a 0.0045 g de ibuprofeno en 150 ml .

En la tabla 15 se muestra la determinación de variables a lo largo de un tiempo de tratamiento de 240 *min*, con muestreos cada 20 *min*. Al inicio el *pH* es de 6.47, pero disminuye a 2.79 a los 120 *min* siendo 2.27 el mínimo registrado en el 240 *min* similar al tratamiento anterior. En cuanto el color, se observan dos variaciones en diferentes momentos 60 y 100 *min* siendo 15 la variación más.

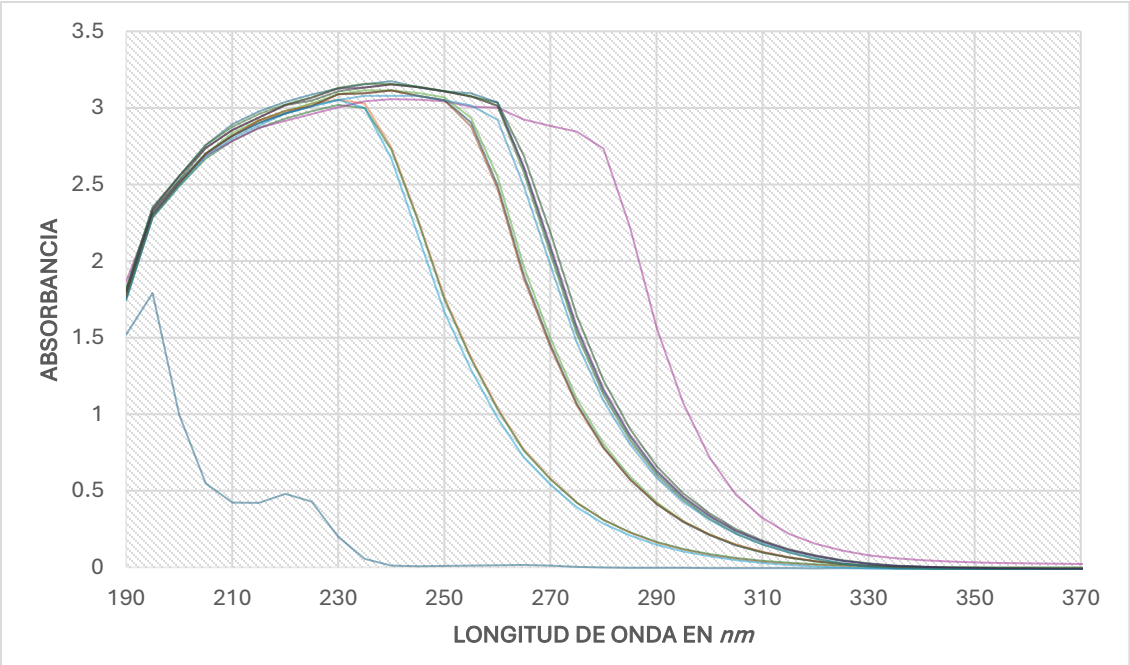
El peróxido de hidrógeno (H_2O_2) en este efecto fue saturado ya que se inyectaron 3 *ml* cada 60 *min* se observa que este no se consumió, Rodea (2019) reportó que al inyectar más peróxido de hidrógeno (H_2O_2) la eficacia de degradación disminuye considerablemente, esto puede ser atribuido a los excesos de peróxido de hidrógeno y con altas concentraciones de OH , tiene lugar las reacciones competitivas que producen un efecto inhibitorio para la degradación. Los OH susceptibles de recombinarse o de reaccionar de acuerdo con las siguientes reacciones:



En la gráfica 6 se observa que los resultados fueron muy similares a los del efecto anterior ya que la absorbancia también aumenta en lugar de disminuir. Además, se observa cómo se presenta la deformación del espectro, pero en este caso se deforma en distintas longitudes de onda, por lo cual esto nos indica la presencia de productos de degradación.

Tabla 17. Determinación de variables efecto UV/3*ml* de H_2O_2/O_3 ibuprofeno

<i>Tiempo min</i>	<i>pH</i>	<i>Color (UPC)</i>	H_2O_2
0	6.47	0	40
20	4.01	0	-----
40	3.55	0	20
60	3.29	5	-----
80	3.15	0	40
100	5.80	15	-----
120	2.79	0	30
140	-----	0	-----
160	2.37	0	30
180	2.30	0	-----
200	2.37	0	30
220	-----	0	-----
240	2.27	0	40



Grafica 6. Espectro de Luz UV-VIS efecto *UV/3ml de H₂O₂/O₃* ibuprofeno

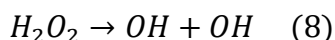
3.5.4 Efecto UV/2ml de H_2O_2

A partir de este efecto el tiempo de tratamiento se redujo de 240 min a 60 min, con muestreos cada 10 min, en la tabla 16 se incluyeron mediciones medición de ozono(O_3) y dióxido de carbono(CO_2).

Como se muestra en la tabla 16 el pH inicial se modifico a alcalino siendo 8.66 inicio este no vario mucho disminuyendo asta 7.41 esto se puede deber al tiempo de tratamiento y que no se adiciono mas peróxido de hidrógeno (H_2O_2).El color se mantubo en 0, se observa que el peroxidohidrogeno inyectado se consumo de 50 disminuyendo a 20 es importante mencionar que no se adiciono peroxido de hidrogeno en este efecto, el ozono (O_3) y dióxido de carbono (CO_2) se determinaron al final del tratamiento como se observa estos muetsran valores altos indicando que existen reacciones de oxidación llevandose acabo a pesar de que el monitoro del tratamiento a finalizado.

Enl grafica 7 se observa los resultados obtenidos de la absorbancia siendo similares es importante mncionar que a comparación de los anteriores las longitudes de onda no se deforman en el espectro.

Rodea (2019) reporto que al aidionar 2 ml de *peróxido de hidrógeno* (H_2O_2) con UV el porcentaje de degradación es de 43%. La degradación del ibuprofeno es debido a su colisión con radicales OH, los cuales son generados mediante la reacción (5) Santos (2009) y Jaramillo (2011).



La presencia de UV, conlleva a la aceleración de la descomposición de H_2O_2 , mediante la reacción (6) favoreciendo el proceso, así mismo es generada la fotólisis del agua permite la generación de una mayor cantidad de radicales OH y por tanto la degradación del contaminante (reacción 9) González (2017).

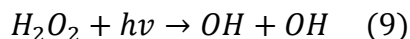
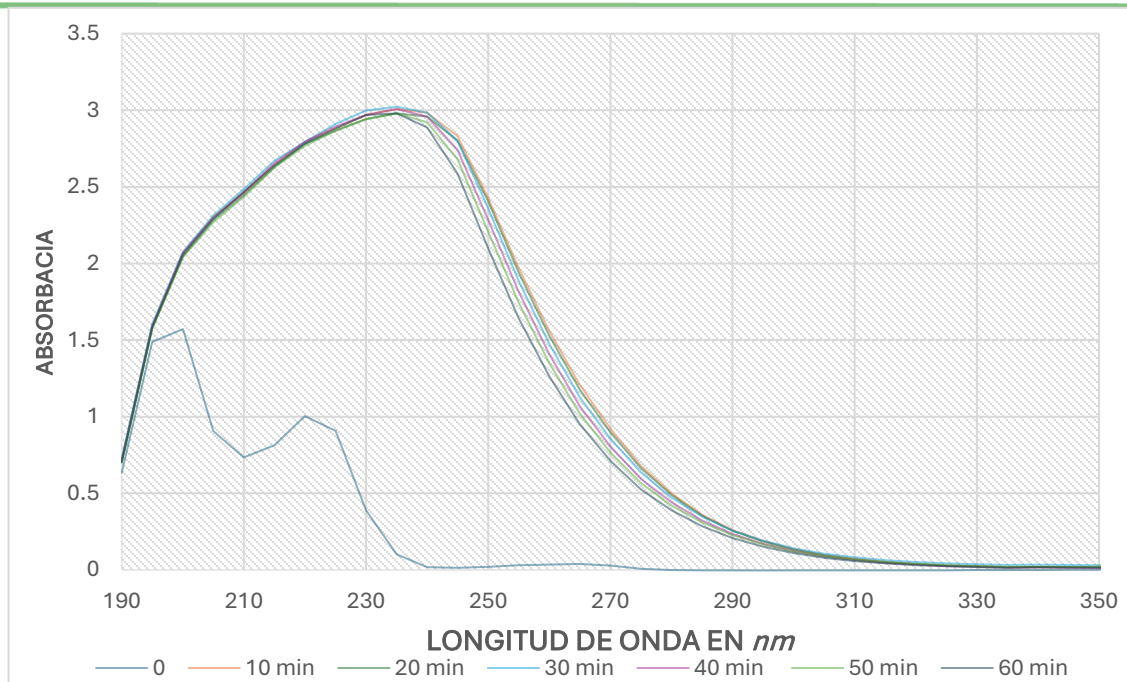


Tabla 18. Determinación de variables efecto UV/ 2ml de H_2O_2 ibuprofeno

Tiempo min	pH	Color (UPC)	H_2O_2	O_3	CO_2
0	8.66	0	20	Mayor a 2.3	$20 \frac{mg}{L}$
10	7.99	0			
20	7.76	0			
30	7.59	0			
40	7.50	0			
50	7.46	0			
60	7.31	0			



Grafica 7. Espectro de luz UV-VIS efecto $UV/2ml$ de H_2O_2 ibuprofeno

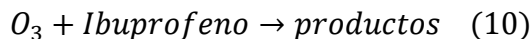
3.5.4 Efecto O_3

En este efecto solo se utilizó ozono (O_3) en la tabla 17 se presenta la determinación de variables con un tiempo de tratamiento de 60 min, con muestreos cada 10 min. Como se muestra el pH inicial es de 8.63 y el final 7.76 con esto demostramos que el peróxido de hidrógeno es el encargado de disminuir pH teniendo en cuenta una dosificación correcta para que este pueda ser consumido y no saturar en el tratamiento.

En la gráfica 8, se observa la desaparición de la banda de absorción del ibuprofeno desde los 10 min, al igual que en los casos anteriores, se relaciona con la formación de productos de degradación. Con esto comprobamos que sería imposible identificar estos productos, por lo que se necesita una técnica de separación para observar en qué momento se degrada el fármaco y en qué tiempo se forman los productos y a su vez conocer si son persistentes o inestables.

El ozono presenta dos vías de reacción para lograr la oxidación del contaminante: (a) vía directa y (b) vía indirecta Vicent (2017).

La primera consiste en la colisión del ozono en el contaminante generando subproductos primarios (*hidroquinonas y benzoquinonas*) este proceso es llevado a cabo por la reacción (10) la cual se caracteriza por ser selectiva González (2017).

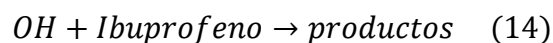
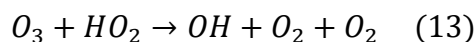
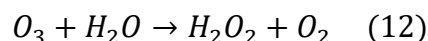
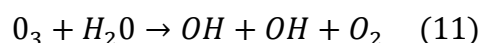


Por otra parte, la vía indirecta consiste en la descomposición del ozono molecular en agua produciendo radicales hidroxilos, los cuales poseen una constante de

velocidad mayor con relación al ozono en diferentes compuestos orgánicos tabla 17 y no son selectivos Doménch (2004), el mecanismo cinético es llevado a cabo principalmente por las reacciones químicas (11), (12) y (13) Castañeda (2014) y Mercado (2017).

Tabla 19. Constantes de velocidad (k en $L\ mol^{-1}s^{-1}$) del radical hidroxilo y ozono

Compuesto	HO	O_3
Alquenos colorados	$10^9 - 10^{11}$	$10^{-1} - 10^3$
Fenoles	$10^9 - 10^{10}$	10^3
Aromáticos	$10^8 - 10^{10}$	$1 - 10^2$
Cetonas	$10^9 - 10^{10}$	1
Alcoholes	$10^8 - 10^9$	$10^{-2} - 1$
Alcanos	$10^6 - 10^9$	10^{-2}



A sí mismo, son generadas otras especies oxidantes que también favorecen al proceso de degradación reacción (14).

La vía indirecta es de importancia en medios ácidos y para solutos que reaccionan muy rápido con el ozono, ejemplo de ellos son los compuestos orgánicos no saturados, con grupos aminos.

Por lo tanto, al inicio de la ozonización es más eficiente en medios alcalinos, la figura 23 se muestra un esquema global de las principales especies de la descomposición de ozono en agua iniciada por iones hidróxido Forero (2005).

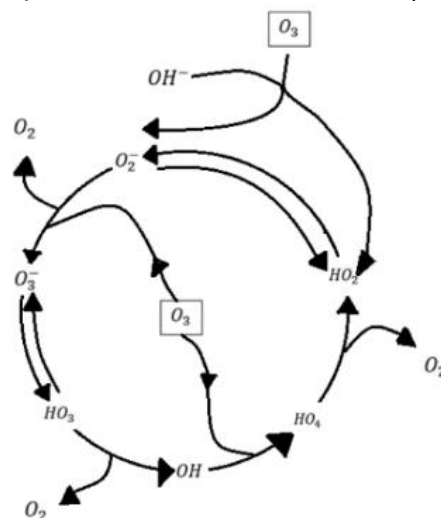


Figura 23. Mecanismo cinético de las principales especies de la descomposición del ozono en agua pura por iones hidróxido

En la figura 23, también es observado el efecto sinérgico mediante la combinación del agente oxidante y la radiación ultravioleta incrementando la eficiencia de degradación, por lo que es benéfico la combinación de estos. En este caso, son llevados a cabo las reacciones químicas mencionadas con anterioridad, sin embargo, son generados una mayor cantidad de radicales OH , mediante la siguiente reacción química Rodríguez (2008).

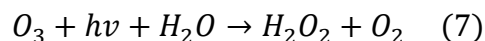
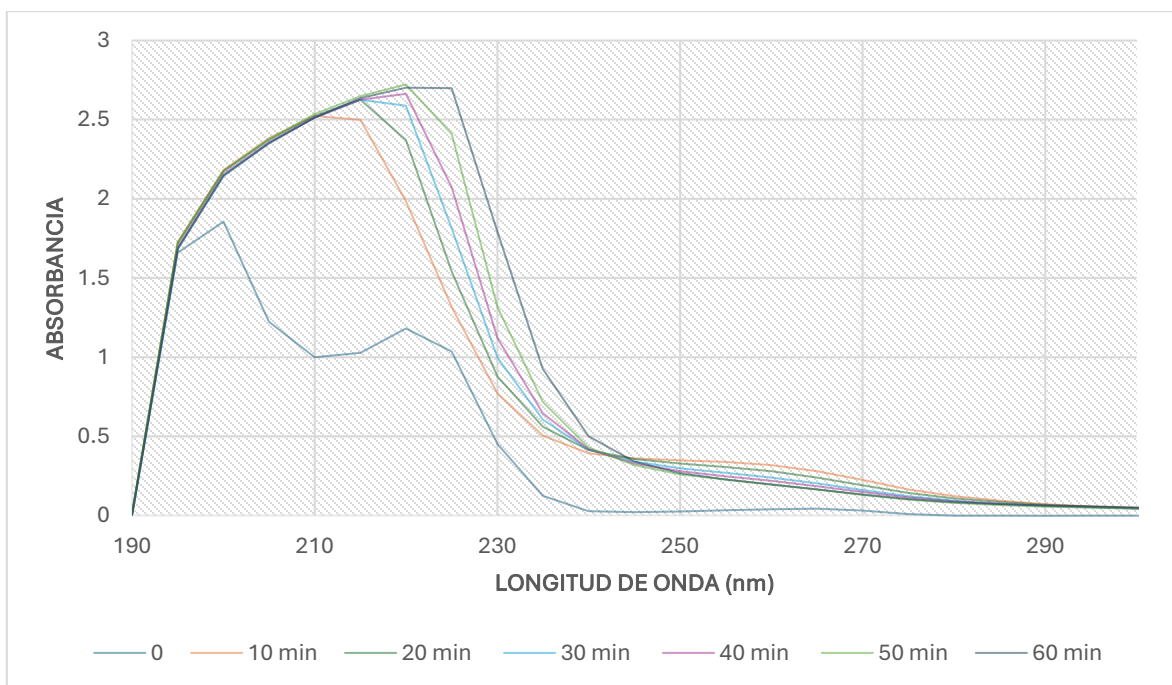


Tabla 20. Determinación de variables efecto O_3 ibuprofeno

<i>Tiempo min</i>	<i>pH</i>	<i>O₃</i>	<i>CO₂</i>
0	8.63	Mayor a 2.3	$13 \frac{mg}{L}$
10	8.20		
20	-----		
30	-----		
40	-----		
50	8.01		
60	7.76		



Grafica 8. Espectro de luz UV-VIS efecto O_3 ibuprofeno

3.5.5 Efecto UV

A diferencia de los anteriores tratamientos, solo utilizando luz ultravioleta se observa como la longitud de onda disminuye a diferencia de Santibáñez (2014) en su caso aumento la longitud de onda. Dicho esto en este efecto se puede calcular el porcentaje de degradación con la siguiente formula:

$$\text{Porcentaje de degradación \%} = \frac{A_0 - A_t}{A_0} * 100$$

Donde

A_0 = Absorbancia inicial

A_t = Absorbancia en tiempo de tratamiento

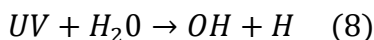
En la gráfica 9 se muestra como desde los 20 min de tratamiento la longitud de onda disminuye, pero hasta las 24 hrs es donde disminuye positivamente a continuación se muestra el porcentaje de degradación en los tiempos donde se realizó la determinación de la absorbancia.

$$20 \text{ min} = \frac{2.0048 - 1.9724}{2.0048} * 100 = 1.6161\%$$

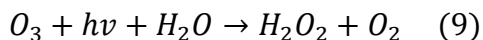
$$60 \text{ min} = \frac{2.0048 - 1.8359}{2.0048} * 100 = 7.2725\%$$

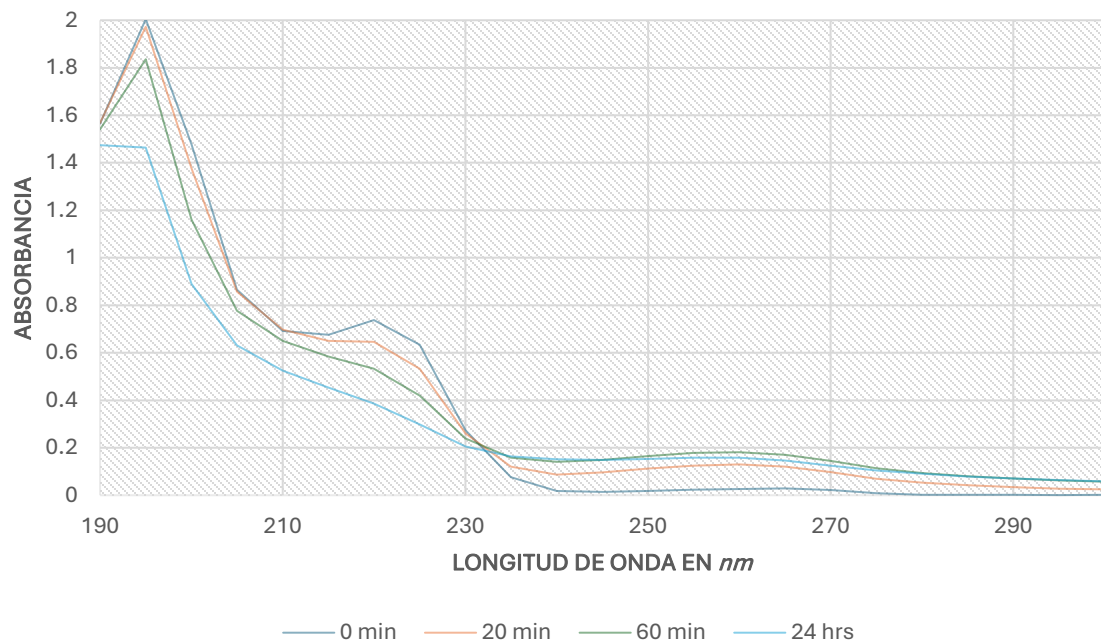
$$24 \text{ hrs} = \frac{2.0048 - 1.4645}{2.0048} * 100 = 26.9503\%$$

Los resultados son atribuidos a diversos mecanismos cinéticos que tienen la finalidad de generar radicales con un alto potencial de oxidación, específicamente OH, los cuales al colisionar con el contaminante puede lograr su degradación e incluso su mineralización, la generación de estas especies químicas dependerán del método de tratamiento utilizado, Para el caso específico de UV, esto es debido a la fotólisis del agua reacción (8) González (2013)



benéfico la combinación de estos. En este caso, son llevados a cabo las reacciones químicas mencionadas con anterioridad, sin embargo, son generados una mayor cantidad de radicales OH, mediante la siguiente reacción química Rodríguez (2008).





Grafica 9. Espectro de luz UV-VIS efecto UV ibuprofeno

3.6 Decoloración del colorante verde malaquita

A continuación, se muestra los tratamientos realizados con el contaminante verde malaquita cada es importante mencionar se utilizaron 0.0045 g en 150 ml de agua destilada, a diferencia del ibuprofeno se determinarán los porcentajes de degradación de cada efecto los tratamientos van desde 60 minutos a una reducción de 30 minutos.

3.6.1 Efecto UV/1 ml de H_2O_2/O_3

En la tabla 19 se presenta la determinación de variables en un tiempo de tratamiento de 60 min, con muestreos cada 10 min. Al inicio el pH es de 4.46, pero disminuye a 3.00 a los 60 min.

En cuanto el color, se observan variaciones significativas en diferentes tiempos de tratamiento. El color inicial es de 500 UPC característico en soluciones de colorantes desde el minuto 10 se observa una disminución significativa de 500 a 30 UPC y en el minuto 50 se obtiene la decoloración completa del colorante.

El peróxido de hidrógeno (H_2O_2) es indispensable, al agregar 1 ml, este aumenta a 80 es importante mencionar se adiciono 1 ml de peróxido de hidrógeno (H_2O_2) en el min 20 y 40 . Se observa este se mantuvo constante, pero disminuye cuando no se adiciona. Esto indica que el peróxido de hidrógeno (H_2O_2) se está consumiendo.

En la gráfica 10 se observa que la absorbancia de la banda principales de 580 nm disminuye a partir de los 10 min. A continuación se presenta el porcentaje de degradación en los tiempos donde se determinó la absorbancia.

$$10 \text{ min} = \frac{2.4939 - 0.0243}{2.4939} * 100 = 99.0256\%$$

$$20 \text{ min} = \frac{2.4939 - 0.01}{2.4939} 0 * 100 = 99.5990\%$$

$$30 \text{ min} = \frac{2.4939 - 0.0078}{2.4939} * 100 = 99.6872\%$$

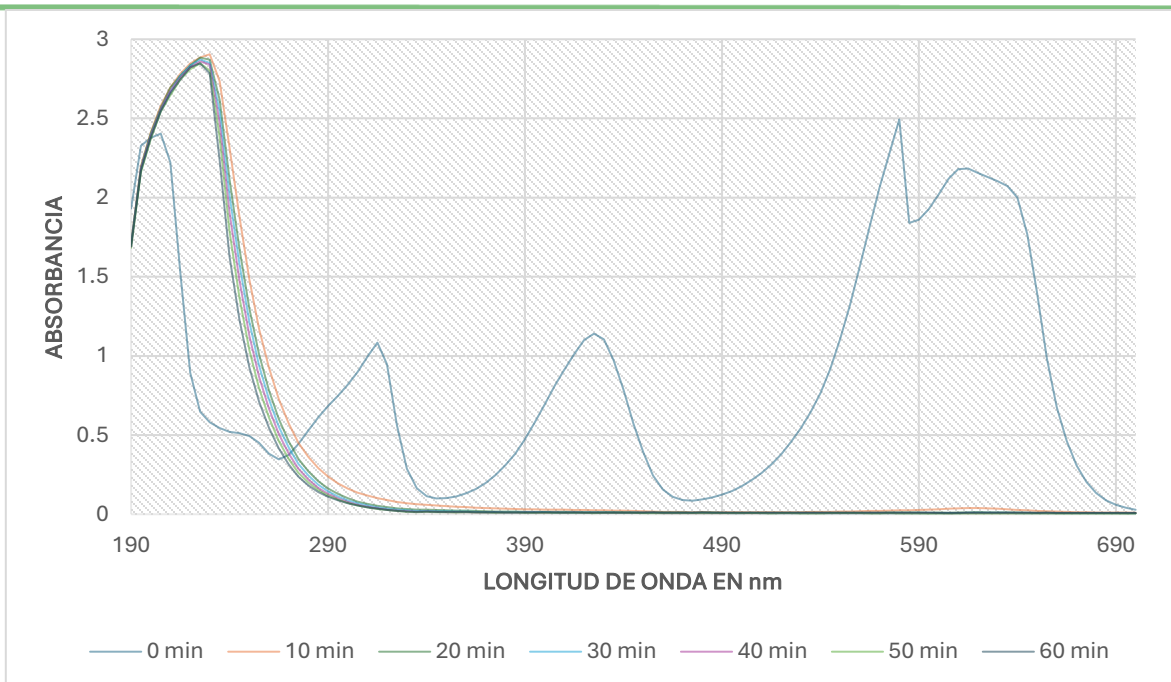
$$40 \text{ min} = \frac{2.4939 - 0.0065}{2.4939} * 100 = 99.7393\%$$

$$50 \text{ min} = \frac{2.4939 - 0.0053}{2.4939} * 100 = 99.7874\%$$

$$60 \text{ min} = \frac{2.4939 - 0.0112}{2.4939} * 100 = 99.5509\%$$

Tabla 21. Determinación de variables efecto UV/1 ml de H_2O_2/O_3 verde malaquita

<i>Tiempo min</i>	<i>pH</i>	<i>Color (UPC)</i>	<i>H₂O₂</i>	<i>O₃</i>	<i>CO₂</i>
0	4.46	500	80	Mayor a 2.3	$97 \frac{mg}{L}$
10	3.81	30	50		
20	3.53	10	-----		
30	3.27	10	60		
40	3.18	5	-----		
50	3.07	0	70		
60	3.00	0	70		



Grafica 10. Espectro de luz UV-VIS efecto UV/1 ml de H_2O_2/O_3 verde malaquita

3.6.2 Efecto UV/1ml de H_2O_2

En la tabla 20 se presenta la determinación de variables en un tiempo de tratamiento de 30 min, con muestreos cada 5 min. Inicialmente el pH es de 4.57, disminuyendo a 3.89 al finalizar el tratamiento.

En cuanto el color, se observan que las variaciones no son tan favorables como en el tratamiento anterior el color inicial es de 500 UPC y disminuye a 25 UPC al minuto 30, sin alcanzar una decoloración completa.

Se utilizó 1 ml de peróxido de hidrógeno (H_2O_2), el cual se fue consumiendo durante el tratamiento. En la gráfica 11 se muestra que la absorbancia de la banda principal es de 580 nm disminuye a partir de los 10 min. A continuación se presenta el porcentaje de degradación en los tiempos donde se determinó la absorbancia.

$$5 \text{ min} = \frac{2.5214 - 1.675}{2.5214} * 100 = 33.5686\%$$

$$10 \text{ min} = \frac{2.5214 - 0.5273}{2.5214} * 100 = 79.0870\%$$

$$15 \text{ min} = \frac{2.5214 - 0.1907}{2.5214} * 100 = 92.4367\%$$

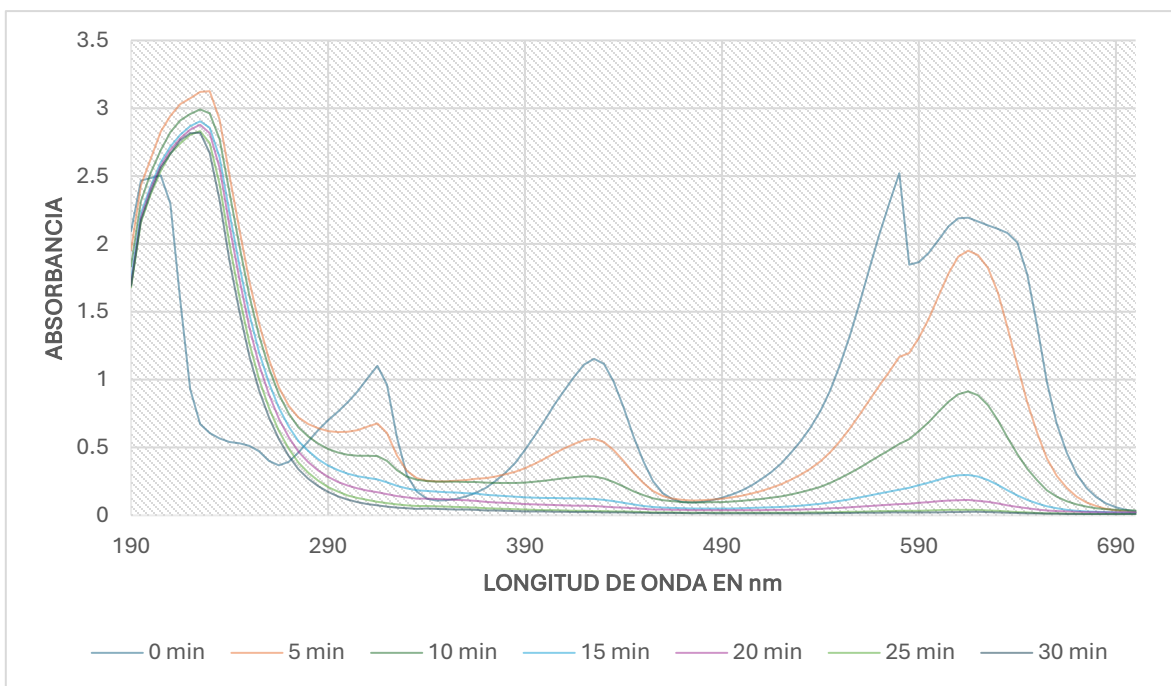
$$20 \text{ min} = \frac{2.5214 - 0.0835}{2.5214} * 100 = 96.6883\%$$

$$25 \text{ min} = \frac{2.5214 - 0.0337}{2.5214} * 100 = 98.6634\%$$

$$30 \text{ min} = \frac{2.5214 - 0.022}{2.5214} * 100 = 99.1274\%$$

Tabla 22. Determinación de variables efecto UV/1 ml de H₂O₂ verde malaquita

Tiempo min	pH	Color (UPC)	H ₂ O ₂	O ₃	CO ₂
0	4.57	500	70	Mayor a 2.3	52 $\frac{mg}{L}$
5	4.31	495	-----		
10	4.19	300	50		
15	4.05	160	-----		
20	3.95	85	40		
25	3.91	65	-----		
30	3.89	25	20		



Grafica 11. Espectro de luz UV-VIS efecto UV/1 ml de H₂O₂ verde malaquita

3.6.3 Efecto UV/2ml de H_2O_2

En la tabla 21 se presenta la determinación de variables durante un tiempo de tratamiento de 30 *min*, con muestreos cada 5 *min*. Inicialmente, el *pH* es de 4.49, disminuyendo a 3.88 al finalizar el tratamiento.

En cuanto el color, las variaciones no son tan favorables como en el tratamiento anterior. El color inicial es de 500 *UPC* y disminuye a 60 *UPC* al minuto 30, sin alcanzar una decoloración completa.

Se utilizaron 2 *ml* de peróxido de hidrógeno (H_2O_2) el cual no se consumió durante el tratamiento. En la gráfica 12 se muestra que la absorbancia de la banda principal es de 580 *nm* disminuye a partir desde los 10 *min*. A continuación se presenta el porcentaje de degradación en los tiempos donde se determinó la absorbancia.

$$5 \text{ min} = \frac{2.4618 - 1.3385}{2.4618} * 100 = 45.6292\%$$

$$10 \text{ min} = \frac{2.4618 - 0.7808}{2.4618} * 100 = 68.2833\%$$

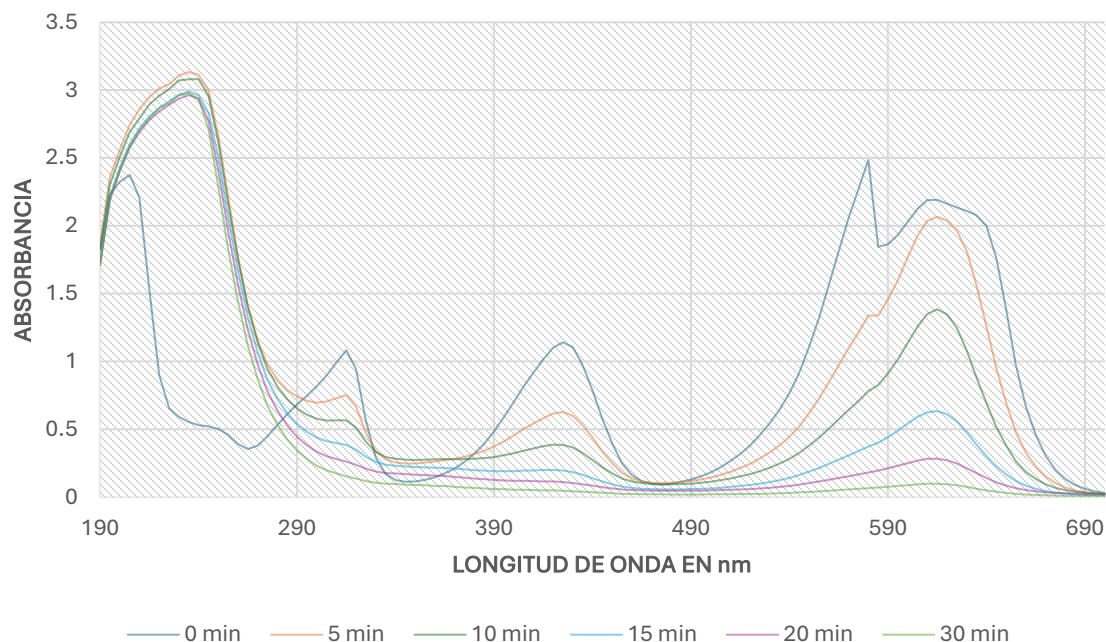
$$15 \text{ min} = \frac{2.4618 - 0.3731}{2.4618} * 100 = 84.8444\%$$

$$20 \text{ min} = \frac{2.4618 - 0.1837}{2.4618} * 100 = 92.5379\%$$

$$30 \text{ min} = \frac{2.4618 - 0.0681}{2.4618} * 100 = 97.2337\%$$

Tabla 23. Determinación de variables efecto UV/2 ml de H_2O_2 verde malaquita

Tiempo min	pH	Color (UPC)	H_2O_2	O_3	CO_2
0	4.49	500	70	Mayor a 2.3	$44 \frac{mg}{L}$
5	4.38	480	-----		
10	4.18	380	-----		
15	4.12	225	-----		
20	3.99	155	-----		
25	3.95	45	-----		
30	3.88	60	60		



Grafica 12. Espectro de luz UV-VIS efecto $UV/2\text{ ml de }H_2O_2$ verde malaquita

3.6.4 Efecto UV/O_3

En la tabla 22 se presenta la determinación de variables durante un tiempo de tratamiento de 30 *min*, con muestreos cada 5 *min*. Inicialmente el *pH* es de 4.45, disminuyendo a 3.32 al finalizar el tratamiento.

En cuanto el color, se observan variaciones favorables, el color inicial es de 500 *UPC* y entre los minutos 15 y 25 se alcanza su decoloración.

En la gráfica 13 se muestra que la absorbancia de la banda principal es de 580 *nm* disminuye a partir de los 10 *min*. A continuación se presenta el porcentaje de degradación en los tiempos donde se determinó la absorbancia.

$$5\text{ min} = \frac{2.2741 - 0.0671}{2.2741} * 100 = 97.0493\%$$

$$10\text{ min} = \frac{2.2741 - 0.0177}{2.2741} * 100 = 99.22167\%$$

$$15\text{ min} = \frac{2.2741 - 0.0123}{2.2741} * 100 = 99.4591\%$$

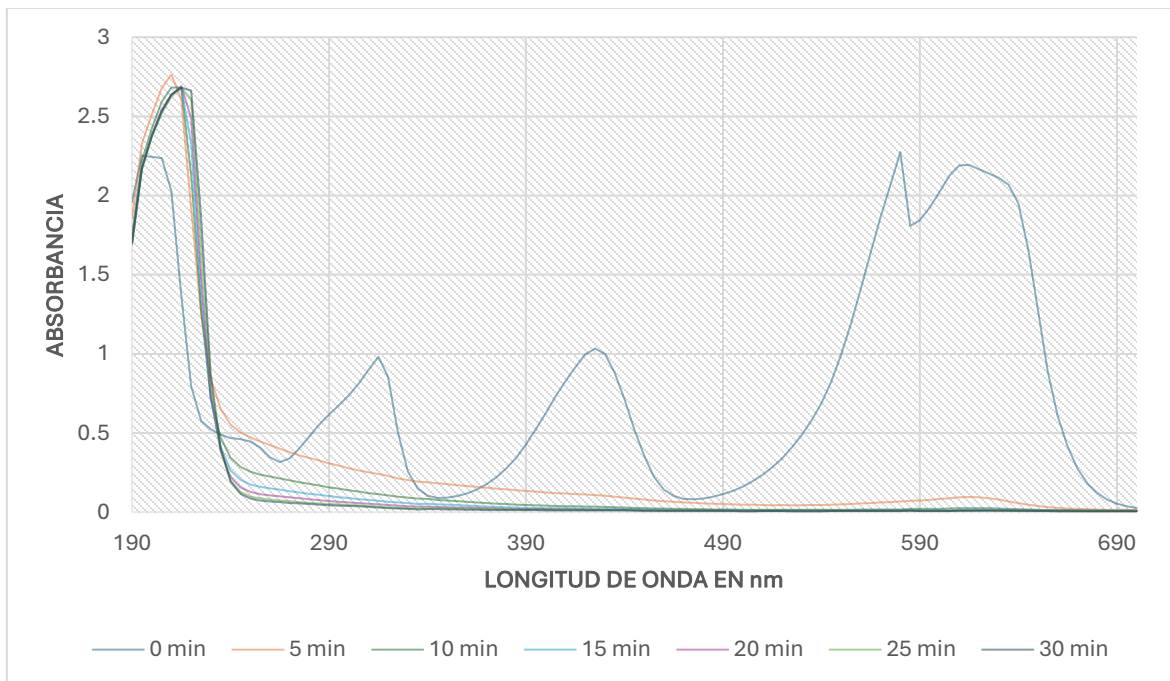
$$20\text{ min} = \frac{2.2741 - 0.0098}{2.2741} * 100 = 99.5690\%$$

$$25\text{ min} = \frac{2.2741 - 0.0099}{2.2741} * 100 = 99.5646\%$$

$$30 \text{ min} = \frac{2.2741 - 0.0071}{2.2741} * 100 = 99.6877\%$$

Tabla 24. Determinación de variables efecto UV/O_3 verde malaquita

Tiempo min	pH	Color (UPC)	O_3	CO_2
0	4.45	465	0.9	$77 \frac{mg}{L}$
5	4.12	225		
10	3.83	35		
15	3.63	15		
20	3.50	5		
25	3.44	0		
30	3.32	0		



Grafica 13. Espectro de luz UV-VIS efecto UV/O_3 verde malaquita

3.6.5 Efecto 1ml de H_2O_2/O_3

En la tabla 23 se presenta la determinación de variables durante un tratamiento de 30 min, con muestreos cada 5 min. Inicialmente el pH es de 4.41, disminuyendo a 3.29 al finalizar el tratamiento.

En cuanto el color, se observan variaciones favorables el color inicial es de 500 UPC entre los minutos 25 y 30 alcanza la máxima decoloración. Aunque no se logra su decoloración completa, los resultados son positivos considerando el tiempo de tratamiento.

Se utilizó 1 *ml* de peróxido de hidrógeno (H_2O_2) el cual no se consumió durante el tratamiento. En la gráfica 14 se muestra que la absorbancia de la banda principal es de 580 *nm* disminuye a partir de los 10 *min*. A continuación se presenta el porcentaje de degradación en los tiempos donde se determinó la absorbancia.

$$5 \text{ min} = \frac{2.3906 - 0.0818}{2.3906} * 100 = 96.5782\%$$

$$10 \text{ min} = \frac{2.3906 - 0.0291}{2.3906} * 100 = 98.7827\%$$

$$15 \text{ min} = \frac{2.3906 - 0.0187}{2.3906} * 100 = 99.2177\%$$

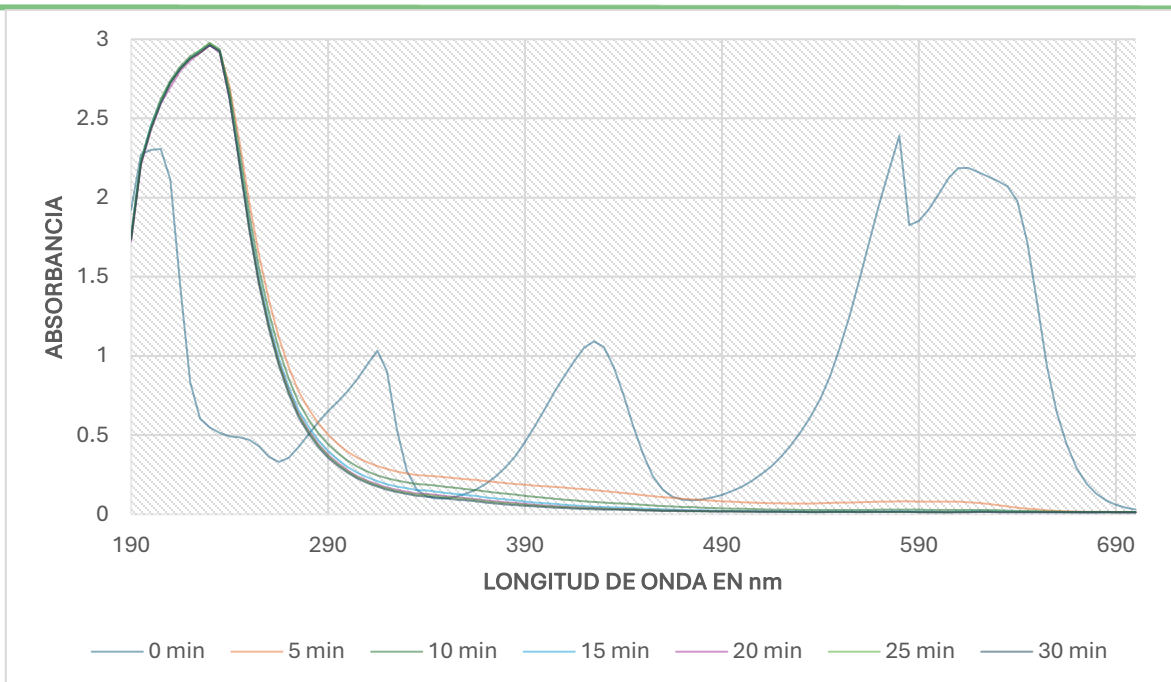
$$20 \text{ min} = \frac{2.3906 - 0.0152}{2.3906} * 100 = 99.36418\%$$

$$25 \text{ min} = \frac{2.3906 - 0.0158}{2.3906} * 100 = 99.3390\%$$

$$30 \text{ min} = \frac{2.3906 - 0.0149}{2.3906} * 100 = 99.3767\%$$

Tabla 25. Determinación de variables efecto 1*ml* de H_2O_2/O_3 verde malaquita

<i>Tiempo min</i>	<i>pH</i>	<i>Color (UPC)</i>	H_2O_2	O_3	CO_2
0	4.41	500	70	Mayor 2.3	$66 \frac{mg}{L}$
5	4.14	385	-----		
10	3.83	115	-----		
15	3.63	65	-----		
20	3.52	25	50		
25	3.38	25	-----		
30	3.29	15	50		



Grafica 14. Espectro de luz UV-VIS efecto 1ml de H_2O_2/O_3 verde malaquita

3.6.6 Efecto UV

Se ha demostrado que el tratamiento que produce menos subproductos es el efecto UV, pero este necesita de un largo periodo de exposición a la luz UV teniendo como consecuencia uso de energía eléctrica. En la tabla 22 se presenta la determinación de variables en un tiempo de tratamiento de 30 min, con muestreos cada 5 min. Inicialmente el pH es de 4.37, disminuyendo a 4.20 al finalizar el tratamiento.

En cuanto el color, se observan variaciones no favorables el color inicial es de 500 UPC y solo disminuye a 280 UPC. En la gráfica 15 se muestra que la absorbancia de la banda principal es de 580 nm disminuye a partir de los 10 min. A continuación se presenta el porcentaje de degradación en los tiempos donde se determinó la absorbancia.

$$5 \text{ min} = \frac{2.4508 - 1.4793}{2.4508} * 100 = 39.6401\%$$

$$10 \text{ min} = \frac{2.4508 - 1.0436}{2.4509} * 100 = 57.4179\%$$

$$15 \text{ min} = \frac{2.4508 - 0.672}{2.4508} * 100 = 72.5803\%$$

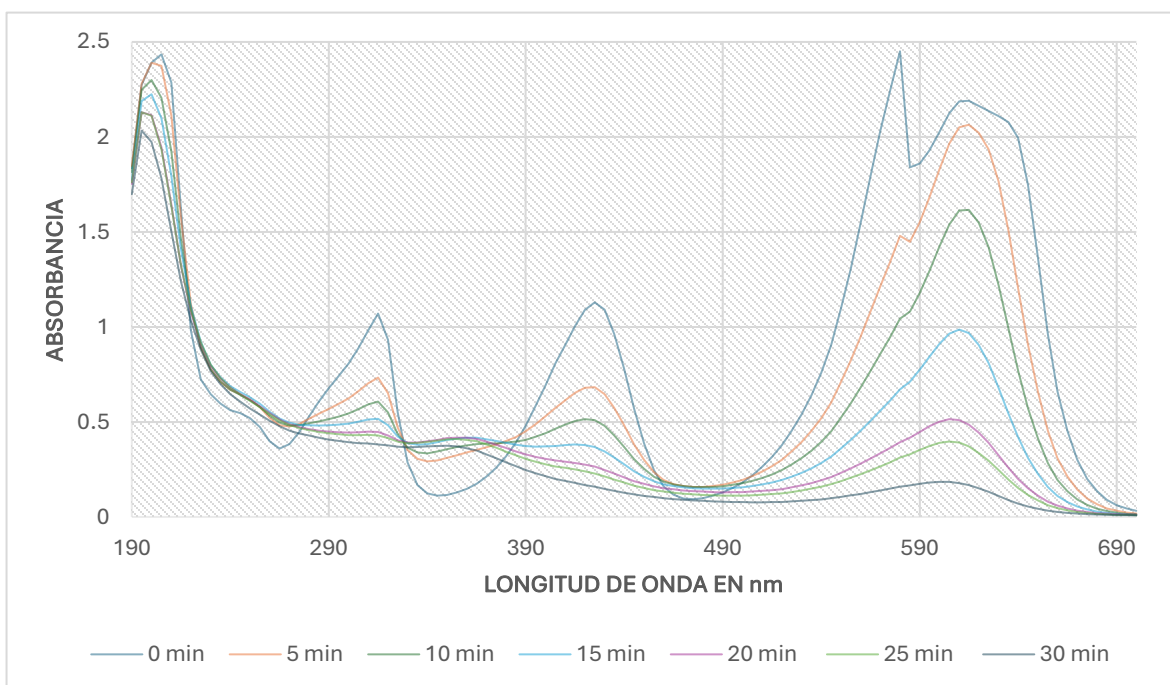
$$20 \text{ min} = \frac{2.4508 - 0.3939}{2.4508} * 100 = 83.9277\%$$

$$25 \text{ min} = \frac{2.4508 - 0.3118}{2.4508} * 100 = 87.2776\%$$

$$30 \text{ min} = \frac{2.4508 - 0.1588}{2.4508} * 100 = 93.5204\%$$

Tabla 26. Determinación de variables efecto *UV* verde malaquita

Tiempo min	pH	Color (UPC)	O ₃	CO ₂
0	4.37	500	2.3	22 $\frac{mg}{L}$
5	4.37	480		
10	4.34	430		
15	4.29	400		
20	4.28	350		
25	4.23	320		
30	4.20	280		



Grafica 15. Espectro de luz UV-VIS efecto *UV* verde malaquita

3.6.7 Efecto 1 ml de H₂O₂

Considerado como el tratamiento menos efectivo debido a que necesita de otras especies químicas o luz *UV* para reaccionar correctamente. En la tabla 25 se presenta la determinación de variables durante un tratamiento de 30 min, con muestreos cada 5 min. Inicialmente el pH es de 4.50, disminuyendo a 4.43 al final

del tratamiento se observa que la variación no es significativa. Además, el peróxido de hidrógeno fue consumido.

En la gráfica 16 se muestra como el rango de la longitud de onda 190 – 290 nm el peróxido se sobrepone al contaminante, indicando que es el encargado de deformar el espectro en todos los tratamientos anteriores. A continuación, se presente el porcentaje de degradación en los tiempos donde se determinó de la absorbancia.

$$5 \text{ min} = \frac{2.3059 - 2.2152}{2.3059} * 100 = 3.9333\%$$

$$10 \text{ min} = \frac{2.3059 - 2.1908}{2.3059} * 100 = 4.9915\%$$

$$15 \text{ min} = \frac{2.3059 - 2.1676}{2.3059} * 100 = 5.9976\%$$

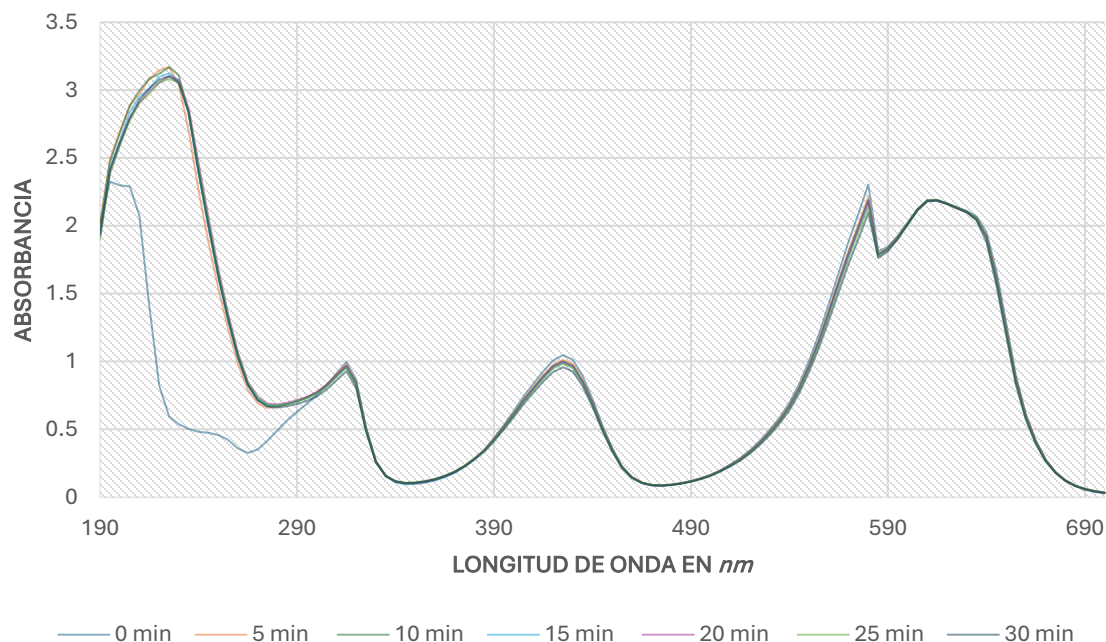
$$20 \text{ min} = \frac{2.3059 - 2.1848}{2.3059} * 100 = 5.2517\%$$

$$25 \text{ min} = \frac{2.3059 - 2.135}{2.3059} * 100 = 7.4114\%$$

$$30 \text{ min} = \frac{2.3059 - 2.095}{2.3059} * 100 = 9.1461\%$$

Tabla 27. Determinación de variables efecto 1 ml de H_2O_2 verde malaquita

<i>Tiempo min</i>	<i>pH</i>	<i>H₂O₂</i>	<i>O₃</i>	<i>CO₂</i>
0	4.50	70	Mayor a 2.3	11 $\frac{mg}{L}$
5	4.50	-----		
10	4.43	-----		
15	4.43	50		
20	4.43	-----		
25	4.43	-----		
30	4.43	30		



Gráfica 16. Espectro de luz UV-VIS efecto 1 ml de H_2O_2 verde malaquita

3.6.8 Efecto O_3

Este tratamiento ha demostrado ser el más efectivo en comparación con el UV , que tarda mucho tiempo en la degradación y el peróxido de hidrógeno, que no muestra una decoloración significativa.

Inicialmente el pH es de 4.37, disminuyendo a 3.25 al finalizar el tratamiento. En cuanto el color, se observa que las variaciones son positivas: el color inicial es de 500 UPC y hasta el minuto 30 es cuando este disminuye hasta 45 UPC sin embargo, no alcanza su decoloración completa debido al tiempo de tratamiento

En la gráfica 17 se muestra cómo, en el rango de la longitud de onda 190 – 290 nm , el ozono apenas se sobrepone al contaminante, a diferencia de solo usar un 1ml de peróxido de hidrógeno. A continuación, se presenta el porcentaje de degradación en los tiempos donde se determinó la absorbancia.

$$5 \text{ min} = \frac{2.3533 - 0.0503}{2.3533} * 100 = 97.8625\%$$

$$10 \text{ min} = \frac{2.3533 - 0.0177}{2.3533} * 100 = 99.2478\%$$

$$15 \text{ min} = \frac{2.3533 - 0.0195}{2.3533} * 100 = 99.2478\%$$

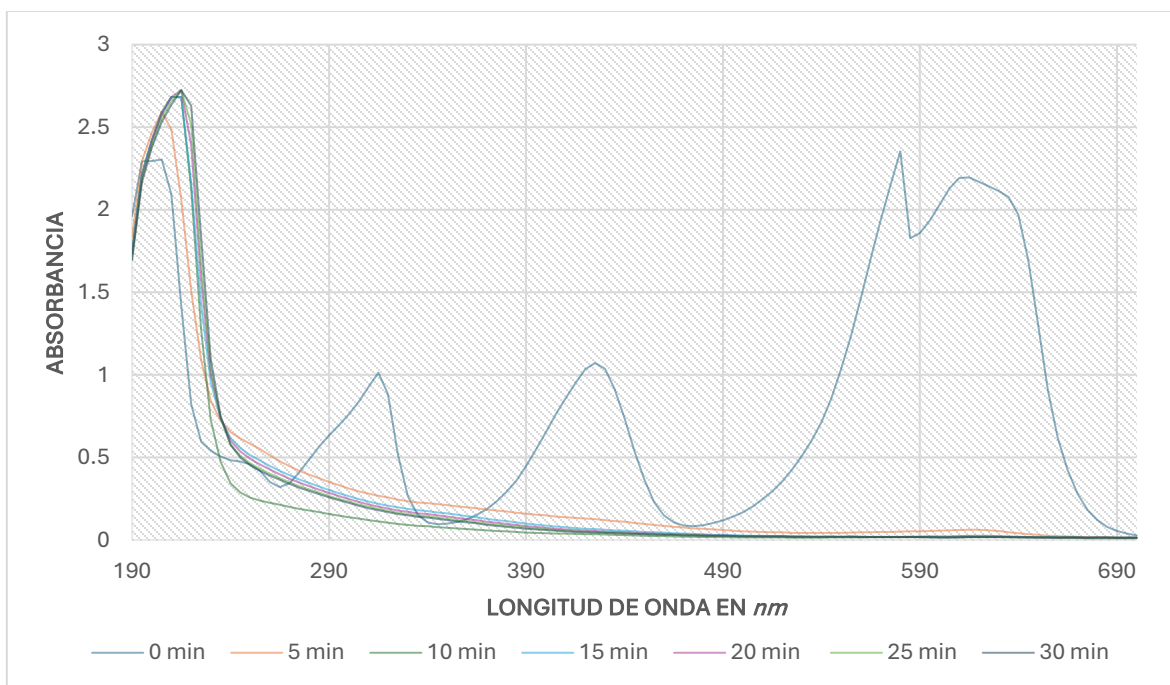
$$20 \text{ min} = \frac{2.3533 - 0.0178}{2.3533} * 100 = 99.2436\%$$

$$25 \text{ min} = \frac{2.3533 - 0.0174}{2.3533} * 100 = 99.2606\%$$

$$30 \text{ min} = \frac{2.3533 - 0.0179}{2.3533} * 100 = 99.2393\%$$

Tabla 28. Determinación de variables efecto O_3 verde malaquita

<i>Tiempo min</i>	<i>pH</i>	<i>Color (UPC)</i>	<i>O₃</i>	<i>CO₂</i>
0	4.37	500	0.2	$61 \frac{mg}{l}$
5	3.83	285		
10	3.66	145		
15	3.54	110		
20	3.40	80		
25	3.39	65		
30	3.25	45		



Grafica 17. Espectro de luz UV-VIS efecto O_3 verde malaquita

3.7 Simulación numérica de fluidos

En la figura se puede ver el resultado obtenido de la temperatura siendo esta constante.

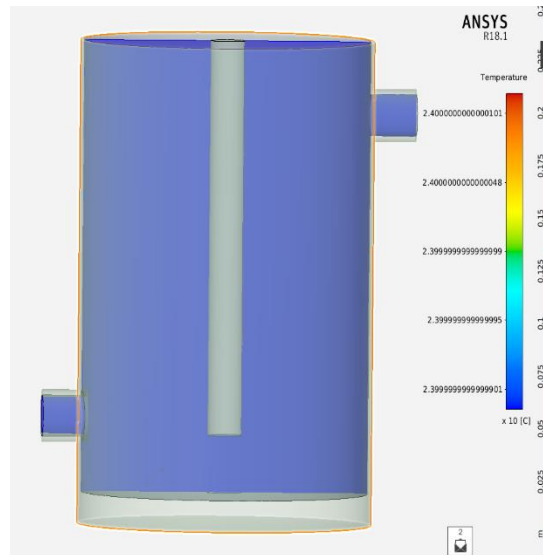
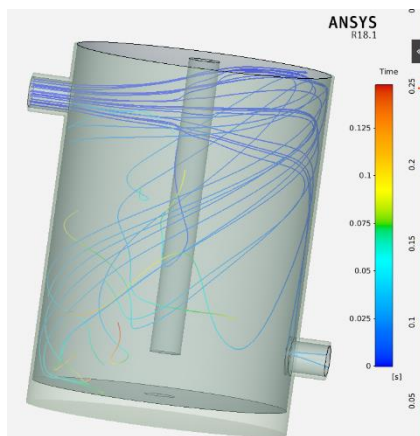


Figura 24. Temperatura del reactor realizado en Ansys AIM

En este proceso especializado se requieren valores precisos de la velocidad del flujo para saber a detalle cómo se comporta en el reactor, en este caso se hicieron dos simulaciones para determinar en cual entrada el flujo recircula más en el reactor en la figura. 25 se presentan las líneas de corriente de las dos simulaciones

a)



b)

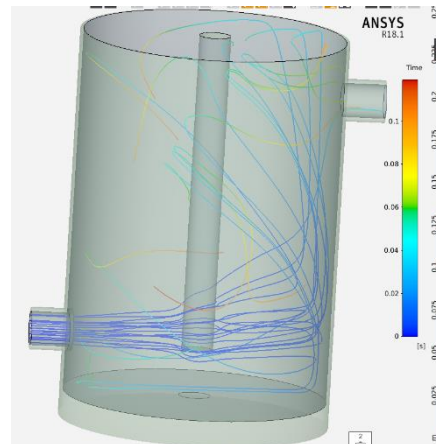


Figura 25. Simulación numérica de fluidos realizado en Ansys AIM

Conclusiones

El reactor de tratamiento diseñado y construido de acuerdo con las características establecidas es adecuado para la evaluación de los procesos de oxidación avanzada.

La configuración del reactor de tratamiento fue construida, considerando las características fisicoquímicas de los agentes oxidantes, con el objetivo de potencializar los efectos deseables en los contaminantes de estudio.

La impresión en 3D ofrece una reducción de costo y tiempo, además facilita la creación de geometrías complejas, en este trabajo de investigación fue personalizado y modificado para adaptarse a los procesos de oxidación avanzada que al evaluarse demostró ser óptimo y eficiente.

En los diversos procesos de oxidación avanzada POAs, se ha observado que el incremento del tiempo de tratamiento tiene un efecto favorable en la obtención de mejores eficiencias esto se debe a varios factores como la mayor generación de radicales, descomposición completa, optimización de condiciones y reducción de toxicidad.

Los resultados obtenidos cuando se utilizaron únicamente un agente oxidante o radiación ultravioleta fueron menores en comparación al utilizar la combinación de estos, por lo que se concluye que un efecto positivo del efecto sinérgico de los métodos utilizados.

El peróxido de hidrógeno (H_2O_2) es un oxidante potente y un compuesto inestable. Es importante considerar que, al aumentar su concentración, la eficiencia de degradación puede disminuir. Esto se debe a que un exceso de peróxido de hidrogeno genera una mayor cantidad de radicales OH, lo que provoca reacciones que inhiben la degradación.

La inyección de ozono (O_3) demostró ser la más eficiente sin necesidad de combinarse con otras especies reactivas, obtenido porcentajes de degradación positivos en tiempos cortos de tratamiento. Sin embargo este efecto libera subproductos de toxicidad desconocida, aunque no mayores que los liberados por el H_2O_2 y el efecto $UV/H_2O_2/O_3$.

El tratamiento de UV demostró ser el que menos subproductos genera, pero este tarda bastante tiempo en degradar los contaminantes lo que supone un uso excesivo de electricidad.

En todos los efectos de tratamiento aplicados al ibuprofeno, excepto al de UV la absorbancia se deformó, lo que impidió determinar con exactitud la cantidad de degradación. No obstante gracias a la medición de otras variables se pudo confirmar que durante el proceso de tratamiento se están generando las reacciones de degradación.

Los fármacos son contaminantes complejos de degradar en este caso se logró una degradación del 26.95% para el ibuprofeno por medio del tratamiento UV es

importante mencionar que pocos autores han obtenido esta degradación utilizando distintos equipos de medición como cromatografía de gases y raxos X.

La verde malaquita reporta porcentajes de degradación del 99 % registrando el más alto 99.78% con el efecto $UV/1ml \text{ de } H_2O_2/O_3$ y los menos eficientes 9.12% con el efecto $1 ml \text{ de } H_2O_2$.

La simulación numérica de fluidos nos demuestra previamente cómo funciona el reactor antes de que este sea construido y llevado a laboratorio además

Recomendaciones

Utilizar otro tipo de instrumentos para determinar el porcentaje de degradación en los fármacos.

Diseñar e imprimir otro tipo de reactores.

Utilizar otras especies reactivas así como diferentes contaminantes químicos para seguir evaluando el reactor.

Degradar contaminantes biológicos para que la evaluación del reactor sea más completa.

Participar en todos los eventos científicos posibles con este trabajo de investigación.

Dar continuidad a este trabajo de investigación con posibilidad de realizar una maestría o un posgrado.

Referencias

Semarnat. (2008). *Informe de la situación del Medio Ambiente en México. Edición 2008. Compendio de estadísticas ambientales*, Pp- 260. México.

Arellano, J. D., Guzmán, P. E. (2011). *Ingeniería Ambiental*. Editorial Alfaomega, México.

Mihelcic, J. R., Zimmerman, J. B. (2012). *Ingeniería Ambiental Fundamentos, Sustentabilidad y Diseño*. Editorial Alfaomega, México.

Aranda, A. Z. (2022). *Construcción y Evaluación de un Reactor de Tratamiento para la degradación de Ácido Salicílico*, Tecnológico de Estudios Superiores de Tianguistenco, México.

Vázquez, Z. M. (2021). *Aplicación de Proceso de Oxidación Avanzada en la Degradación de pastilla comercial de Naproxeno en Solución Acuosa*, Tecnológico de Estudios Superiores de Tianguistenco, México.

Borrachero, R. V., Paya, B. J., et al. (2010). *Introducción a los problemas medio Ambientales Problemas y Cuestiones*. Editorial REPROVAL, S.L. España.

Skoog, D. A., Holler F. J., et al. (2015). *PRINCIPIOS DE ANÁLISIS INSTRUMENTAL*. Editorial Concepción Fernández Madrid, España.

Doménch X., Jardim W, F., Litter M. I., (2004) *Procesos Avanzada de oxidación para la eliminación de contaminantes*. *ResearchGate*, 1-26.

Guadarrama R., Kido J., Rolden G., Salas M., (2016). *Contaminación del agua*. *Revista de Ciencias Ambientales y Recursos Naturales* 2(5), 1-10.

Gil M.J., Soto A. M., Usma J. I., Gutiérrez O, D., (2012). *Contaminantes emergentes en aguas efectos y posibles tratamientos*. *Producción + Limpia*.7(2), 52-73.

García C., Gortántes P., Drogui, P, (2011). *Contaminantes emergentes: Efectos y tratamiento de remoción*. *Química viva*, 10 (2), 96-105

Santivañez, S. M. (2014). *Determinación de la cinética de degradación de diclofenaco, ibuprofeno, y su mezcla, a temperatura ambiente*. Tesis de químico farmacéutico biólogo. Universidad Autónoma del Estado de México, México.

Pineda, V. L. (2024). *Estudio Cinético de la Degradación de ibuprofeno Mediante la Aplicación de un Método Electroquímico de Oxidación Avanzada en Muestra Acuosas*. Tesis de licenciado en diseño molecular y nanoquímica, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, México.

Rodea, J. G. (2019). *Aplicación de procesos de oxidación avanzada para la degradación de paracetamol en soluciones acuosas: pastilla comercial y reactivo*

grado analítico. Tesis de Ingeniero ambiental, Tecnológico de Estudios Superiores de Tianguistenco, México.

Aranda, Z. A. (2022). Construcción y Evaluación de un reactor de tratamiento para la degradación de ácido salicílico. Tesis de ingeniero ambiental, Tecnológico de Estudios Superiores de Tianguistenco, México.

Jaramillo, S. B., Mercado, C. A., López C. R., López, J. A., (2011). Phenol degradation in aqueous solution by a gas-liquid pashe DBD reactor. The European Physical Journal Applied Physics. 56, 1-5.

Gonzalez, L. K., Quesada, P. I., Velichkova, F., Manéro, M. H., (2016). Degradation of paracetamol in aqueous solution: comparison of diferent UV induced advanced oxidation processes. Latin American Applied Research. 46(3), 115-120.

Vaquero, M. P., Toxqui, L. (2012). Agua para la salud, pasado, presente y futuro. Consejo Superior de Investigaciones Científicas. España

CONAGUA (2017). Propiedades del agua. Disponible en:

<https://www.gob.mx/conagua/articulos/las-propiedades- delagua?idiom=es>

Norma Oficial Mexicana (NOM) 001-SEMARNAT-2021

Anexos



Figura 26. Constancia del 4º Congreso Internacional de Química

Universidad Nacional Autónoma de México
Facultad de Estudios Superiores Cuautitlán
Departamento de Ingeniería



Otorgan la presente

Constancia

**A: Mario Ibáñez Olvera, Bethsabet Jaramillo
Sierra y Miguel Ángel Sernas González**

Por su participación como ponente de la conferencia
Diseño y Simulación de Mezclador Térmico
En el **2º Congreso Internacional de Mecatrónica, Control
e Inteligencia Artificial (CIMCIA)**
realizado del 8 al 10 de noviembre de 2023.

"POR MI RAZA HABLARÁ EL ESPÍRITU"
Cuautitlán Izcalli, Estado de México, noviembre de 2023.



Folio: 202300661

Dr. David Quintanar Guerrero
Director

Figura 27. Constancia del 2º Congreso Internacional de Mecatrónica Control e Inteligencia artificial