

UNIVERSIDAD DE EL SALVADOR
FACULTAD MUTIDISCIPLINARIA DE OCCIDENTE
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA



TRABAJO DE GRADO:

***CARACTERIZACIÓN FÍSICOQUÍMICA DE LA ROCA BASÁLTICA (ESCORIA
NEGRA) DE EL SALVADOR***

PRESENTADO POR:

MANOLO ENRIQUE ECHEVERRIA MATA

**PARA OPTAR AL GRADO DE:
LICENCIADO EN CIENCIAS QUÍMICAS**

DOCENTE ASESOR:

M.Sc. ERICK EDGARDO MÉNDEZ

SEPTIEMBRE DEL 2018

SANTA ANA EL SALVADOR CENTRO AMÉRICA

UNIVERSIDAD DE EL SALVADOR
AUTORIDADES CENTRALES



M.Sc. ROGER ARMANDO ARIAS ALVARADO
RECTOR

DR. MANUEL DE JESÚS JOYA ÁBREGO
VICERRECTOR ACADÉMICO

ING. NELSON BERNABÉ GRANADOS ALVARADO.
VICERRECTOR ADMINISTRATIVO

LICDO. CRISTOBAL HERNÁN RÍOS BENÍTEZ
SECRETARIO GENERAL

M.Sc. CLAUDIA MARÍA MELGAR DE ZAMBRANA
DEFENSORA DE LOS DERECHOS UNIVERSITARIOS

LICDO. RAFAEL HUMBERTO PEÑA MARIN
FISCAL GENERAL

FACULTAD MULTIDISCIPLINARIA DE OCCIDENTE

AUTORIDADES



DR. RAÚL ERNESTO AZCÚNAGA LÓPEZ

DECANO

M.Ed. ROBERTO CARLOS SIGÜENZA CAMPOS

VICE - DECANO

M.Sc. DAVID ALFONSO MATA ALDANA

SECRETARIO DE LA FACULTAD

M.Ed. MIGUEL ANGEL CRUZ

JEFE DEL DEPARTAMENTO DE QUIMICA

AGRADECIMIENTO

Cuando se acaba una obra, pequeña o grande, se reconoce en ella el sello de todas aquellas personas que han participado de algún modo en su consecución. Yo quiero agradecer, en primer lugar, a mi madre Maria Aracely Mata por su amor incondicional, por siempre estar dispuestos a hacer cualquier sacrificio por su hijo, por enseñarme a valorar la vida y a luchar por conseguir cada una de mis metas propuestas en mi vida y porque siempre a estado a mi lado apoyándome en todos mis sueños, por su apoyo incondicional en todos los momentos de mi vida. A mi familia y amigos por su apoyo.

Miguel Angel Ramos Barahona por su apoyo y haber compartido sus conocimientos.

MSc. Erick Edgardo Méndez por confiar en mí esta investigación, dedicarme su tiempo, paciencia y apoyo en todo momento y por su orientación con la asesoría adecuada, basada en sus experiencias, para desarrollar la investigación de una manera profesional. Gracias por confiar en todo momento en mí y guiarme hasta el final y aportar su visión científica en la rama de la química.

A los miembros del departamento de química y a todos los docentes que tuve en el transcurso de la carrera especialmente a el Lic Salvador López por su motivación a la autosuperación, gracias por transmitirme ese conocimiento y enseñarme las herramientas que me ayudaron a entender el maravilloso mundo de la química y a tantos otros que aun sin nombrar, no puedo olvidar, amigos y compañeros.

INDICE DE CONTENIDO

<u>CONTENIDO</u>	<u>PAGINAS</u>
Resumen	
I. Planteamiento de problema.	1
II. Marco teórico.	
2.1 Antecedentes	2
2.2 Métodos de eliminación actual	2
2.3 Las Rocas	3
2.3.1 La Geología	4
2.3.2 El ciclo de la roca	4
2.3.3 Mineral de las rocas	5
2.4 Clasificación de las rocas	5
2.4.1 Clasificación genética de la roca Ígnea	6
2.4.2 Las rocas Plutónica o intrusiva	7
2.4.3 La roca Volcánica o extrusiva	7
2.4.3.1 Felsita	8
2.4.3.2 Riolita	8
2.4.3.3 Obsidiana	9
2.4.3.4 Pumita	9

2.4.3.5 Basalto	10
2.5 El área específica de la roca Basáltica	13
2.6 La composición de la roca Ígnea	15
2.7 Composiciones graníticas frente a composición basáltica.	15
2.8 Las rocas sedimentarias	16
2.9 Las rocas metamórficas	17
2.10 Adsorbato azul de metileno	18
2.11 Concepto de adsorción	20
2.12 Equilibrio de adsorción	22
2.13 Materiales de adsorbato	26
2.14 Isoterma de adsorción de Langmuir	29
2.15 Isoterma de adsorción de Freundlich	32
2.16 Isoterma de adsorción Temkin	34
2.17 Isoterma de adsorción de Henry	35
III. Objetivos	
3.1 General	35
3.2 Específicos.	35
IV. Hipótesis	
V. Diseño metodológico	

5.1 Universo	35
5.2 Muestra	35
5.3 Metodología empleado de investigación	36
5.4 Clase de investigación	36
5.5 Tipo de investigación	36
5.6 Diseño experimental	
5.6.1 La curva de calibración	36
5.6.2 Determinación de la ley cinética de adsorción	40
VI. Resultados y discusión	
6.1 Curva de calibración para medir la concentración del azul de metileno	40
6.2 Cinética del equilibrio de adsorción-desorción entre el azul de metileno y la roca basáltica	42
6.3 Isoterma de adsorción del azul de metileno	45
6.4 Isoterma de adsorción entre el azul de Metileno y la roca basáltica	
6.4.1 Isoterma de adsorción de Langmuir de azul de metileno sobre roca basáltica (Escoria negra)	45
6.4.2 Isoterma de adsorción de Freundlich de azul de metileno sobre roca basáltica (Escoria negra)	49
6.4.3 Isoterma de adsorción de Temkin de azul de metileno sobre roca basáltica (Escoria negra)	51

6.4.4 Isoterma de adsorción de Henry de azul de metileno sobre roca basáltica (Escoria negra)	52
6..5 Parámetros de los modelos de isothermas de adsorción de azul de Metileno sobre la roca basáltica (Escoria negra)	54
VII. Conclusión	56
VIII. Referencia bibliográfica	57

Resumen

Actualmente en nuestro país, la calidad de las aguas de los ríos ha venido a menos, constantemente vemos como cada cuenca, río o riachuelo están contaminados, por diversas causas, como los desechos químicos de actividades agrícolas, la basura, residuos fecales entre otros. Esto ha provocado que este recurso cada vez sea menos útil para su aprovechamiento como agua potable y como criadero de muchas especies acuáticas de plantas y animales.

El presente trabajo consistió en realizar un análisis fisicoquímico a la roca basáltica (Escoria negra) de El Salvador para determinar el modelo cinético de adsorción (isoterma de Langmuir, Freundlich, Temkin y Henry) al cual mejor se ajuste el equilibrio de adsorción entre el azul de metileno y la roca basáltica; medir la constante del equilibrio de adsorción-desorción formado entre el azul de metileno y la roca basáltica; determinar el área específica de la roca basáltica; establecer el número de sitios activos de absorción por nanómetro cuadrado de roca basáltica.

La técnica utilizada para el tratamiento del azul de metileno fue la adsorción ya que es económico, competitivo frente a otros métodos convencionales

Se estudió el efecto de adsorción con 5, 10, 15, 20, 25, 30, 33 ppm de azul de metileno en presencia de 1 g de roca basáltica pulverizada durante 1 hora, tomando alícuotas cada 5 minutos; la adsorción se midió con un espectrofotómetro UV-VIS Cary50.

I. Planteamiento del problema

Muchos de los contaminantes arrojados a las aguas de los ríos, arroyos, lagunas y mares, como los compuestos orgánicos volátiles (hidrocarburos clorados), compuestos orgánicos (aromáticos), los cuales son nocivos para animales y el ser humano, requieren para su eliminación un tratamiento terciario adicional a los ya establecidos en el tratamiento de aguas residuales para solucionar dicho problema.

Actualmente, existen diversos métodos para la eliminación de este contaminante, tales como adsorción, precipitación química, intercambio iónico, membrana de procesos entre otras. La adsorción es el método que más se emplea en los tratamientos ya sea con carbón activado o con resinas con alta capacidad de intercambio iónico, sin embargo, debido a su costo relativamente alto, se busca una alternativa mucho más favorable, de origen natural que pueda remover los contaminantes de las aguas residuales.

En los últimos años, ha aumentado el interés en la utilización de rocas basálticas para la eliminación de contaminantes orgánicos presentes en soluciones acuosas.

Es una de las rocas extrusivas más abundantes del planeta, caracterizada por su coloración gris oscuro, verde oscuro, café o negro y es generalmente muy pesado. Están compuestas de piroxena, feldespato plagioclasa y en algunos casos de olivino. Cuando las rocas basálticas se enfrían y contraen, frecuentemente se quiebran y juntan en columnas verticales. Es una roca ígnea volcánica magmática rica en silicatos de magnesio y hierro y bajo contenido en sílice, que constituye una de las rocas más abundantes en la corteza terrestre de color oscuro.

II. Marco teórico

2.1. Antecedentes.

A lo largo de la historia, la calidad del agua ha sido un factor determinante del bienestar humano. Las enfermedades propagadas por agua contaminada con materia fecal diezmaron a la población de ciudades enteras. Incluso actualmente, el agua insalubre contaminada por fuentes naturales o humanas sigue causando grandes problemas a las personas que se ven obligadas a usarlas, tanto para beber como para la irrigación de hortalizas y otras plantas comestibles crudas.

Generalmente, la mayor preocupación sobre la seguridad del agua es ahora la presencia potencial de contaminantes químicos. Estos pueden incluir productos químicos orgánicos e inorgánicos y metales pesados, procedentes de fuentes industriales, agrícolas y de la escorrentía urbana.¹

2.2 Métodos de eliminación actual de los contaminantes orgánicos

La eliminación de los contaminantes orgánicos peligrosos de las aguas subterráneas y las aguas residuales es uno de los temas de investigación ambiental más críticos y urgentes. Los contaminantes han sido declarados contaminantes peligrosos. Se les atribuye la presencia de estos contaminantes en el ambiente a los procesos industriales como el refinamiento del petróleo, la obtención del plástico, la producción de químicos sintéticos. Debido a la resistencia a los microorganismos comunes, los residuos fenólicos no pueden ser tratados por acción biológica ya que son tóxicos, incluso en bajas concentraciones, por lo tanto, el

tratamiento de los contaminantes será de suma importancia para la protección del medio ambiente.

Existen tecnologías para la eliminación de los contaminantes en aguas residuales tales como extracción, incineración, tratamiento biológico, oxidación química, oxidación húmeda, la oxidación fotocatalítica y adsorción catalítica, sin embargo, hay pocos procesos adecuados para hacer frente a altas concentraciones del efluente producido. Una alternativa para la remoción de estos contaminantes es la adsorción.

Una gran variedad de adsorbentes tanto naturales como sintéticos han sido evaluados para la eliminación de sustancias orgánicas a partir de soluciones acuosas, la mayoría de ellos presenta algunas limitaciones como la capacidad de retención y un alto costo de preparación. Hoy en día son carbones activados considerados como los más eficaces adsorbentes orgánicos ya que poseen buenas áreas superficiales. ¹

2.3. Las rocas

Las rocas son como “cajas negras” que graban en su interior una valiosa información sobre los procesos históricos de nuestro planeta. Una buena parte de la actividad de la Geología consiste en interrogar a las rocas para extraer de ellas la información necesaria y poder contar esta historia.

Las rocas son un agregado de origen natural, que puede estar formado por un solo mineral, como por ejemplo la caliza, formada únicamente por calcita, o por la asociación de varios minerales, como por ejemplo el granito que está formada al menos por cuarzo, feldespato y

mica. Existe una gran variedad de rocas, pero éstas pueden ser agrupadas en solo tres grandes grupos según su origen y su aspecto.²

2.3.1 La Geología

Es una palabra del idioma griego, que se puede traducir al español de la manera siguiente: *geo= tierra y logos= tratado*. Es la ciencia que estudia la forma exterior e interior del globo terrestre; la naturaleza de las materias que lo componen y su formación; los cambios o alteraciones que estas han experimentado desde su origen y su estado actual.

Son la litosfera, hidrósfera y atmósfera, a los que identificamos como factores abióticos, se desarrollan fenómenos muy importantes, que hace 3 500 millones de años, dieron origen a lo que conocemos como la corteza terrestre, donde hacen contacto esas tres grandes partes que la vida, y que hoy constituyen lo que se llama biósfera.²

2.3.2 El ciclo de las rocas

Muestra la transformación de cada uno de los tres tipos de rocas (ígneas, sedimentarias y metamórficas) en alguno de los otros dos, o incluso de nuevo en su mismo tipo.

Las rocas varían en color, tamaño de sus cristales o granos y los tipos de minerales que la componen. En la Figura 1 se ve el ciclo de las rocas.²

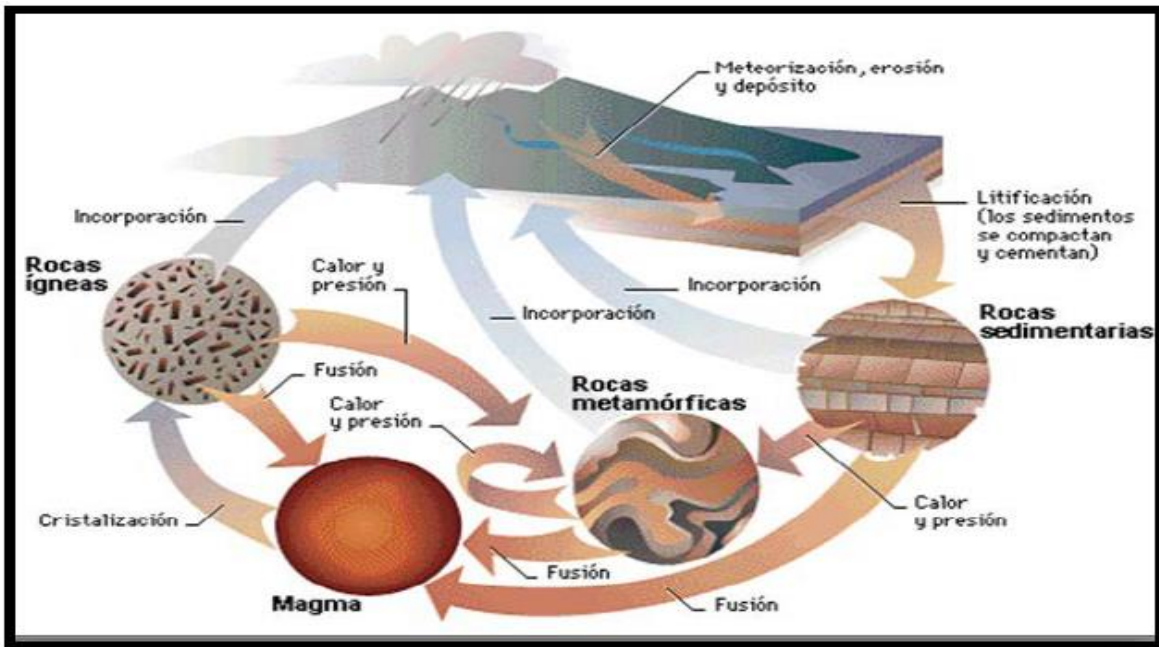


Figura 1. Ciclo de la roca²

2.3.3 Mineral de las rocas

Denominamos así a un material de la corteza terrestre caracterizada por su composición química y su estructura interna. En general, cualquier elemento o compuesto químico que se encuentre en la naturaleza; en mineralogía y geología, compuestos y elementos químicos formados mediante procesos inorgánicos.²

2.4. Clasificaciones de las rocas

- ✓ Genéticas: ígneas, metamórficas, sedimentarias
- ✓ Composicionales: silicatadas, carbonatadas
- ✓ Texturales: detríticas o clásticas, cristalinas.

Según el origen, las rocas se clasifican en tres grupos:

- ✓ Ígneas
- ✓ sedimentarias
- ✓ metamórficas.

La clasificación de las rocas está representada en la Figura 2.

	IGNEA	SEDIMENTARIA	METAMORFICA
			
Origen del material	Fusión de rocas en la corteza inferior y manto superior	Meteorización y erosión de rocas expuestas en superficie	Rocas sometidas a altas temperaturas y presiones en la corteza y el manto superior
Proceso formador de roca	Cristalización (solidificación del magma)	Deposición, enterramiento y litificación	Recristalización de nuevos minerales en estado sólido

Figura 2. Clasificación de las rocas ²

2.4.1. Clasificaciones genéticas de la Rocas Ígneas

La palabra ígnea se deriva del latín ignis, que significa “fuego”. Estas rocas, cuya consistencia es supremamente dura, se producen a partir de la solidificación del magma que en estado de fusión brota del interior de la Tierra por los cráteres volcánicos. Son las rocas que proceden del enfriamiento de un magma, entendiéndose como magma el material fundido que se genera en zonas profundas de la Tierra, y contiene materiales en estado líquido, sólido

y gaseoso. Las temperaturas de los magmas oscilan entre 700 y 1.200 °C. Por otro lado, cuando el magma no alcanza la superficie y se solidifica en el interior de la Tierra, entonces se forman las rocas intrusivas o plutónicas. Atendiendo a cómo se produzca el enfriamiento del magma se van a originar dos tipos diferentes de rocas ígneas, las rocas volcánicas y las rocas plutónicas.²

2.4.2 La roca plutónica o intrusiva

Granito, sienita, diorita, gabro (peridotita). Son las que se solidificaron en el interior profundo de la Tierra. Tienden a enfriarse lentamente y desarrollan una textura gruesa, compuesta de cristales minerales grandes se producen por un enfriamiento muy lento del magma en zonas profundas de la Tierra, aunque estas rocas plutónicas llegan a aflorar a la superficie por medio de la erosión.²

2.4.3 La roca Volcánica o extrusiva

Basalto, andesita, pórfido (traquita, Riolita). Son las que se forman cuando la roca en fusión se solidifica después de abrirse paso sobre la superficie terrestre. En forma de lava líquida fluyen de grandes grietas o de los cráteres de los volcanes. Se producen por un enfriamiento rápido del magma, como consecuencia de un ascenso muy rápido de este a la superficie por medio de una erupción volcánica. Al enfriarse tan rápidamente el magma se forman rocas con cristales muy pequeños, o rocas en las cuales no se observan cristales.²

Las rocas ígneas se diferencian de las rocas sedimentarias y de las metamórficas por su textura y su estructura, sus componentes minerales y su ausencia completa de fósiles. Las rocas de este tipo más significativas son:

2.4.3.1 Felsita

Es una roca de textura muy fina cuyos cristales solo pueden ser distinguidos con la ayuda del microscopio. Es sinónimo de afanítico o microcristalino.³

2.4.3.2. Riolita

Es el equivalente extrusivo del granito, la cual está compuesta esencialmente de silicatos claros, por esto sus colores suelen ser de marrón claro a rosa o, a veces, un gris claro. Tiene textura afanítica (o de granos muy finos), frecuentemente tiene fragmentos vítreos y huecos que indican que su enfriamiento fue rápido. Si esta contiene fenocristales (es decir que contiene cristales mucho mayores a la materia que la rodea), son comúnmente pequeños y están compuestos por cuarzo o por feldespato potásico. El depósito de la Riolita es muy poco frecuente y menos voluminoso que otros, un claro ejemplo en la Figura 3.



Figura 3. Muestra de mano de una Riolita.³

2.4.3.3 Obsidiana

Es una roca vítrea de color oscuro que se origina cuando la lava rica en Sílice se enfría rápidamente. Son normalmente de color negro o marrón rojizo con un contenido de Sílice elevado; por lo cual, su composición es similar o parecida a las rocas ígneas claras. El color oscuro es por la presencia de iones metálicos. En la Figura 4 se ve un claro ejemplo de Obsidiana.



Figura 4. Muestra de mano de una Obsidiana³

2.4.3.4 Pumita

Es una roca volcánica, que tiene una textura vítrea. Se caracteriza por su gran cantidad de acuolas o poros, su densidad es de 0.7 a $1.1 \frac{g}{cm^3}$, burdamente conocida como piedra pómez. Se forma cuando grandes cantidades de gases escapan a través de la lava para generar una masa gris y porosa, así como se observa en la Figura 5. En algunas rocas de este tipo, se pueden apreciar flujos, que indican que hubo algún movimiento antes de que se completa la solidificación.³



Figura 5 Muestra de mano de pumita, una roca vítrea que contiene numerosas vesículas³

2.4.3.5 Basalto

Esta roca es una de las más comunes, es de grano fino y de color verde oscuro a negro. Su composición principalmente es de piroxeno y plagioclasa rica en Calcio con cantidades menores de olivino y anfíbol o ferromagnesianos, feldespatos, plagioclasas.

Se solidifica presentando prima hexagonal conocido como basalto columnar. Se tiene la impresión de morfología tipo carst cuando esta se erosiona.

El basalto vítreo se denomina taquilita; el vidrio basáltico que contiene fenocristales de olivino y augita, los análisis sugieren que las son normalmente no saturadas. Son comunes los basaltos amigdaloides y porfidicos, las amígdalas están frecuentemente rellenas de zeolitas.

Las toleitas son un importante tipo de basalto, constituidas por unas plagioclasas básica y pigeonita (un piroxeno), con vidrio intersticial o crecimiento interno de feldesoato cuarzo-alcalino.

La absarocita es un basalto porfídico que contiene una pequeña cantidad de ortoclasa en la pasta. La augita está constituida por fenocristales de augita, algunas veces con biotita u hornblenda, disueltas en una pasta vítrea, generalmente rica en sodio. La ankaramita es un basalto olivínico rico en augita.

Con disminución en el contenido de feldespatos, los basaltos se transforman en tipos ultrabásicos, mientras que, con aumento en el contenido de sodio de la plagioclasa, andesina u oligoclasa, unido al desarrollo de la hornblenda, producen andesina. Un aumento en feldespato alcalino proporciona los traquibasaltos y basaltos alcalinos.

Los basaltos se encuentran generalmente en forma de mantos de lava que pueden ser extensos, siendo expulsados frecuentemente por fisuras, y algunas veces por chimeneas de tipo central. En pequeña escala, los diques y láminas de rocas básicas son a menudo de grano lo suficientemente fino como para permitir la utilización del término basalto. En regiones donde las coladas basálticas están desarrolladas, coexisten con pequeñas cantidades de otros tipos de lavas. Los basaltos son el equivalente volcánico (textura fina) de los gabros, como rocas plutónicas (textura gruesa) y de las doleritas de grano medio (hipoabisal).

Los basaltos se caracterizan por el bajo contenido de SiO_2 (45.50%), siendo los tholeíticos los que tienen la concentración más alta. Son en general abundantes FeO , MgO y CaO , mientras que Na_2O y K_2O se encuentran en pequeña proporción, especialmente en los basaltos olivínicos, un claro ejemplo en la Figura 6.

Si es porfídico (es decir con minerales relativamente grandes encajados en la pasta), comúnmente la roca contiene fenocristales de un tamaño pequeño de plagioclasa (una variedad de feldespato compuesta por Sodio y Calcio) de colores claros. Cuando la roca se ve alterada se da lugar a la formación de suelos calcio-sódico o magnesianos.



*Figura 6. Muestra de una roca basáltica*³

Para reconocer una roca volcánica básica (con bajo contenido SiO_2) normalmente se debe observar su coloración, negro o verde oscuro por la alteración de minerales ferromagnesianos (píroxeno y olivino), también puede ser color rojizo por la liberación de Óxidos de Hierro. Cuando la textura suele ser vítrea es porque solo está compuesta por vidrio volcánico, también puede ser microcristalino o porfídica.

Los minerales fundamentales en la composición de los basaltos son el olivino, los píroxenos y las plagioclasas cálcicas, aunque también pueden presentar en menor cantidad magnética, analcima y anfíbol, así como se puede observar en la Tabla 1.

Las rocas volcánicas básicas son el producto de la erupción de magmas maficos en superficie. Normalmente las estas rocas volcánicas van asociadas con un cortejo de rocas del mismo carácter, o en la profundidad que representan la fuente. Los basaltos son una de las rocas más abundantes en el planeta y se originan en diversos contextos tectónicos. Generalmente están

asociados a contextos de subducción, muy relacionados a arco isla, así como de colisión. La presencia de abundantes fenocristales de olivino de manifiesto el carácter alcalino de esta roca.

Los basaltos no suelen contener importantes cantidades de minerales metálicos, no están relacionados de manera indirecta con la generación de yacimientos de sulfuros masivos, entre otros. Este tipo de rocas han sido utilizadas como revestimiento, ya que son resistentes al desgaste, así como al ataque químico. Otro de sus usos ha sido como material de construcción y la pavimentación de calles y carreteras.³

Tabla 1. Composición química de la roca basáltica y del granito.³

Elemento	Basalto	Elemento	Basalto	Elemento	Basalto
SiO ₂	49.50%	MgO	6.80%	Cu	87ppm
TiO ₂	2.10%	CaO	9.60%	Zn	105ppm
Al ₂ O ₃	14.95%	Na ₂ O	2.85%	B	5ppm
Fe ₂ O ₃	3.70%	K ₂ O	1.15%	Mo	1.5ppm
FeO	8.70%	P ₂ O ₅	0.38%	Cr	220ppm
MnO	0.19%	Mn	1.500ppm	Co	48ppm
Ni	200ppm	Sr	465 ppm	Ba	333ppm

2.5 El área específica de la roca Basáltica.

Los datos de la referencia caen en el rango de datos previamente para grava de basalto; $1 \frac{m^2}{g}$

y para trituradas y $11.5 \frac{m^2}{g}$ para un 2-6 mm fracción de tamaño. Brady y Gíslason informan

un valor de $0.2 \frac{m^2}{g}$ para un 75-125 μm fracción de tamaño del basalto del fondo marino que se molió en el laboratorio para experimentos de disolución. Brantley y Mellott informan que el área de la superficie específica para varios tamaños de grano de feldespato, olivino y piroxeno, todos las cuales están presente en nuestras muestras de roca a granel. Superficies de estos minerales varían de 0.02 a $1.8 \frac{m^2}{g}$, con las fracciones de tamaño más pequeño que tienen el área de la superficie específica más grande. Sus valores más altos se superponen con el rango de valores que obtuvimos para rocas a granel (Tabla 2).

Tabla 2. Resumen de mediciones BET y de las propiedades físicas de las rocas basálticas.⁴

Analysis gas	Core, section	SSA (m ² /g)	SD (m ² /g)	RSD (%)	N	Sample wt (g)	Depth (mbsf)	Bulk density (g/cm ³)	Grain density (g/cm ³)	Porosity (%)	P-wave velocity (m/s)	Thermal conductivity (W/[m-K])	Lithology	Degree of alteration	
301-U1301B-															
Nitrogen	3R-1	1.8	0.2	12.3	3	6.93	361	2.77	2.85	4	5125	1.67	Pillow	Slight to moderate	
	5R-2	1.2	0.0	0.0	2	8.79	379	2.88	2.93	3	5426	1.71	Pillow	Slight to moderate	
	15R-2	5.4	NA	NA	1	4.89	445	2.68	2.86	9	4716		Massive	Slight	
	18R-2	2.5	0.1	3.6	2	5.91	473	2.55	2.87	17	3914	1.79	Massive	Slight	
	25R-1	1.5	0.0	1.2	2	8.12	510	2.71	2.82	6	5158	1.72	Pillow	Slight to moderate	
	35R-2	1.0	0.5	48.0	2	7.39	566	2.83	2.90	4	5260	1.81	Pillow	Slight	
	Breccia														
Pillow	1.4	0.3	25.0												
Massive	3.9	2.0	51.6												
301-U1301B-															
Argon	1R-1	52.0	16.0	30.8	2	5.15	351	1.87	2.23	30			Breccia	Moderate to high	
	3R-1	0.9	0.0	2.1	2	6.81	361	2.77	2.85	4	5125	1.67	Pillow	Slight to moderate	
	5R-2	0.6	0.0	3.1	2	9.26	379	2.88	2.93	3	5426	1.71	Pillow	Slight to moderate	
	9R-1	4.3	0.7	15.7	2	6.54	410	2.69	2.82	7			Pillow	Slight to moderate	
	11R-1	1.4	0.0	1.0	2		425	2.76	2.86	6	5087	1.74	Massive	Slight	
	15R-2	3.2	0.3	10.0	3	4.88	445	2.68	2.86	9	4716		Massive	Slight	
	17R-1	5.2	0.1	1.3	2		462	2.77	2.94	9	4568		Pillow	Slight to moderate	
	18R-2	1.9	0.0	0.1	2	5.88	473	2.55	2.87	17	3914	1.79	Massive	Slight	
	23R-1	2.1	0.0	1.2	2	6.73	500	2.78	2.87	5	5258		Pillow	Slight to moderate	
	27R-2	3.3	0.2	5.8	2		521	2.62	2.79	9	5039		Pillow	Slight to high	
	35R-1	29.0	0.4	1.4	2	5.38	565	2.55	2.79	14			Breccia	Moderate to high	
	35R-2	0.3	0.0	5.8	3	8.48	566	2.83	2.90	4	5260	1.81	Pillow	Slight	
	Breccia	40.5	16.3	40.2											
	Pillow	2.4	1.9	80.9											
	Massive	2.2	0.9	43.2											

Nota:

AES= área específica de la superficie.

DS= desviación estándar

DRE= Desviación relativa estándar

N= Cantidad de réplica.⁴

La ecuación para encontrar el área específica de la roca basáltica es:

$$S = n_o N A \quad \text{Ec. 1}$$

Donde:

A= Recubrimiento de una molécula de azul de metileno es $1.3 \times 10^{-18} \text{ m}^2$.

N= Número de Avogadro

n_o = Número total de sitios de adsorción en ausencia de azul de metileno⁵

2.6 La composición de la roca Ígneas

Las rocas ígneas principalmente se encuentran compuestas por silicatos. Sin embargo, la composición mineral de una roca ígnea está determinada por la composición química del magma que le dio origen a su cristalización. El magma tiene 8 elementos principales; Aluminio (Al), Calcio (Ca), Sodio (Na), Potasio (K), Magnesio (Mg), Oxígeno (O) y Sílice (Si). Conforme el magma se enfría y solidifica, los elementos se combinan para formar 2 grupos importantes de silicatos:

- ✓ Silicatos oscuros o ferromagnesianos: son minerales en hierro y en magnesio, o ambos, y comúnmente con bajo contenido en sílice. Los más comunes de la corteza terrestre son el olivino, piroxeno, el anfíbol y la bixita.

- ✓ Silicatos claros: son aquellos que contienen mayores cantidades de potasio, sodio y calcio que de hierro y magnesio. Como grupo son más ricos en sílice. Entre los silicatos claro se cuentan el cuarzo, la mascocita y feldespatos.²

2.7 Composiciones graníticas frente a composiciones basálticas.

A pesar de la variedad composicional, las rocas ígneas pueden clasificarse, en función de sus proporciones de minerales oscuros y claros. En la Figura 7 se puede apreciar a un extremo las rocas compuestas fundamentalmente por silicatos de colores oscuros y claros. Los claros son: cuarzo y feldespatos.

Las rocas que contiene cantidades sustanciales de silicatos oscuros y plagioclasas ricas en calcio, pero no es cuarzo, se dice que tiene una composición basáltica; las cuales contienen un elevado porcentaje de minerales ferromagnesianos o también conocidas como maficas, está por su contenido de hierro tienden a ser de colores oscuros y más densas que otras rocas ígneas.

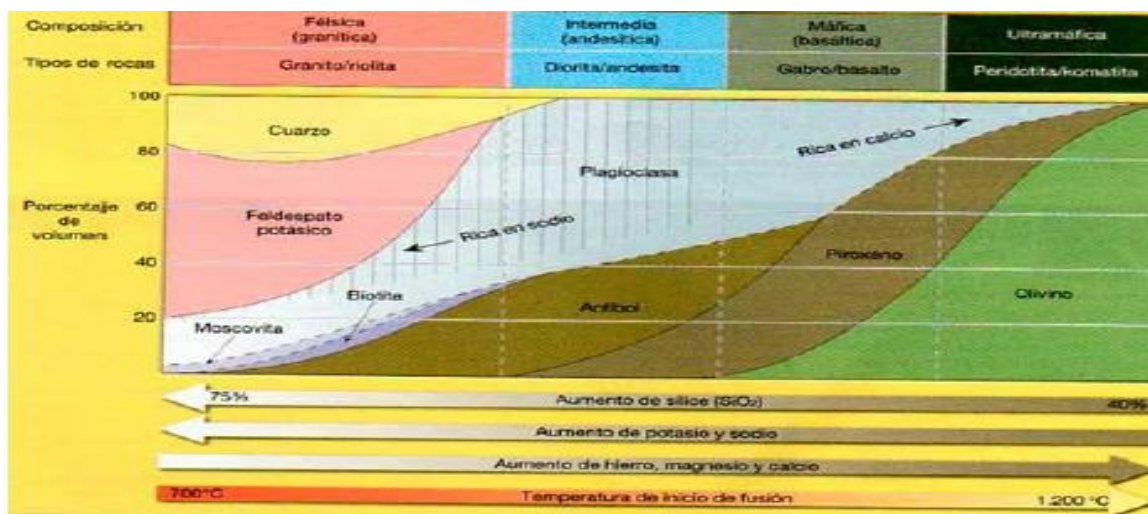


Figura 7 Mineralogía de las rocas ígneas comunes y de los magmas a partir de los que se forma²

2.8 Las Rocas sedimentarias

Este tipo de rocas se forman en la superficie terrestre. Son rocas que proceden de fragmentos de otras rocas preexistentes. Se forman como consecuencia de la destrucción de otras rocas por efecto de los agentes geológicos externos (ríos, glaciales, viento, mar, etc.). Los procesos geológicos en el interior o en la superficie de la Tierra son continuos; así, una roca ígnea intrusiva puede, por la acción del viento, el calor, el agua y otros fenómenos, quedar expuesta a la intemperie y desgastarse, originando así un nuevo material. A este fenómeno se le denomina meteorización o intemperización, y origina las rocas sedimentarias y las metamórficas. Los sedimentos así generados son transportados y depositados. A este proceso se denomina sedimentación. Durante la sedimentación suceden dos procesos diferentes que dan lugar a este tipo de rocas: la compactación de los sedimentos producida por el aumento de los materiales que se van depositando y la cementación de los mismos por la unión de los sedimentos mediante cementos naturales como el carbonato de calcio.

Detríticas: conglomerado, arenisca (limolita). Bioquímicas: caliza bioclástica, caladiza micrítica, toba calcárea, travertinos, dolomía (sílex, yeso).²

2.9 Las Rocas metamórficas

Son aquellas rocas formadas a partir de otras preexistentes que han sufrido un cambio (de forma, composición química o estructura cristalina) debido a un aumento de presión, de temperatura o de ambas. En algunos lugares del interior de la corteza terrestre las rocas se encuentran sometidas a presiones y temperaturas muy altas, aunque sin llegar a fundirse, en estas condiciones, las rocas experimentan un conjunto de cambios en su textura y en su composición mineralógica que recibe el nombre de metamorfismo.

Ejemplos de rocas metamórficas son las pizarras, que se producen a partir del metamorfismo de las arcillas; y los mármoles, producidos a partir del metamorfismo de las calizas. Estas rocas por lo general se originan en rocas ígneas o sedimentarias que han sido enterradas muy profundamente en la tierra y sufrido cambios minerales, o la cristalización de nuevos minerales. Así, la piedra caliza se puede transformar en mármol y la arenisca se puede transformar en cuarcita.

La textura principal de estas rocas metamórficas es pizarrosa, esquistosa, filítica, néisica y cataclástica.

Foliadas: pizarra, esquistos, gneis, migmatita (anfíbolita).²

2.10 Adsorbato azul de metileno

El Azul de Metileno es un colorante básico cuyo nombre científico es Cloruro de metilionina, su fórmula química es $C_{16}H_{18}N_3S \cdot Cl \cdot 3H_2O$; es un colorante heterocíclico aromático, su estructura química se muestra en las Figuras 8 y su estructura tridimensional de la Figura 9.

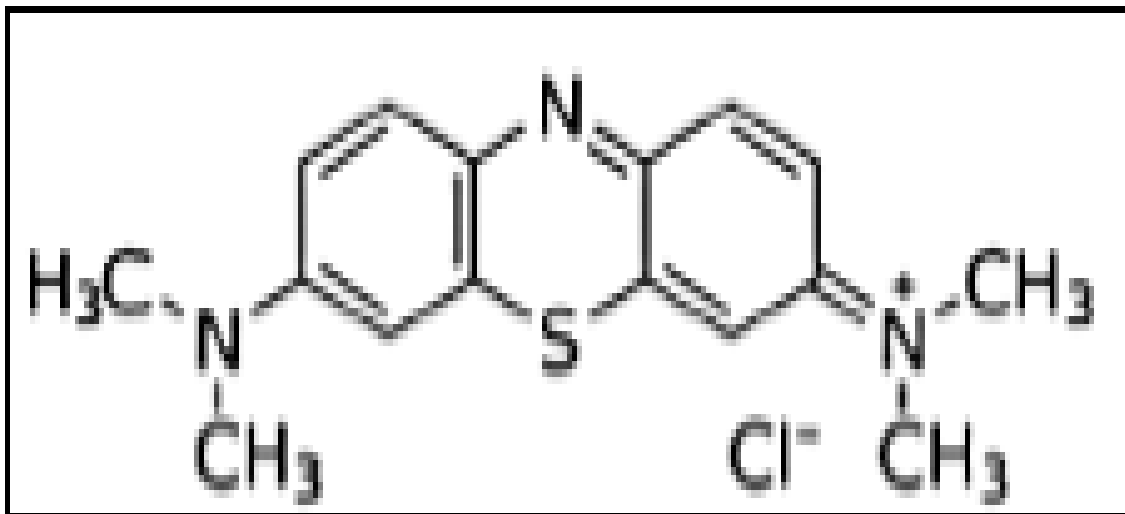


Figura 8. Estructura molecular del Azul de Metileno⁵

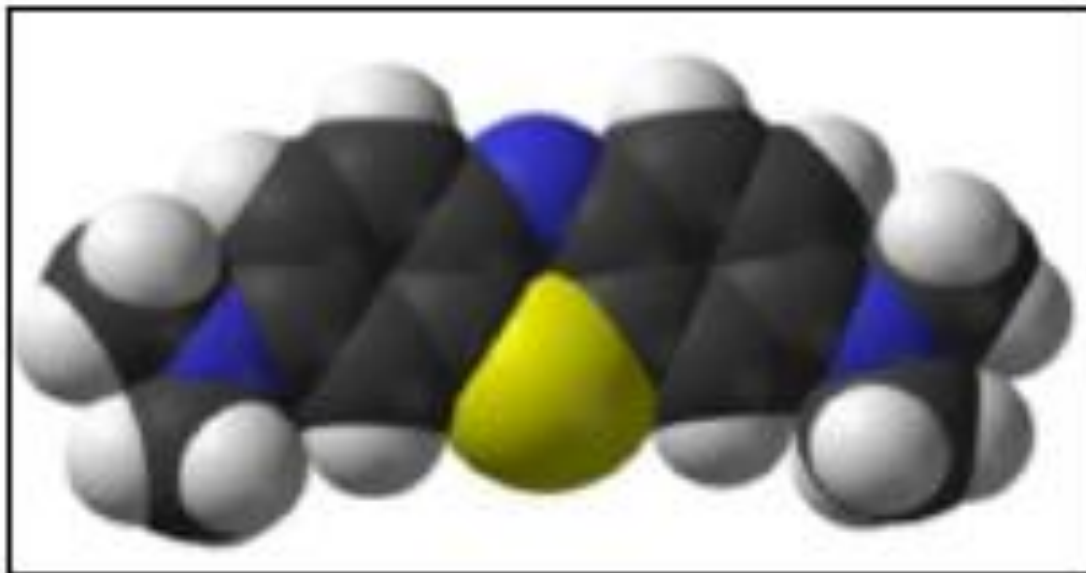


Figura 9. Estructura molecular tridimensional del Azul de Metileno⁵

Entre las características principales del azul de metileno se mencionan las siguientes: es un compuesto de color azul oscuro, es soluble en agua; poseen propiedades redox derivadas de su capacidad para aceptar o donar iones de hidrogeno; su masa molecular es de $319.85 \frac{g}{mol}$; su punto de fusión es a los $100^{\circ}C$; tiene carga positiva, por lo tanto, le es fácil unirse a componentes celulares cargados negativamente llamados componentes basófilos.

Debido a que este colorante es de origen sintético y con estructuras moleculares aromáticas complejas, es inerte y difícil de degradar, razón por la cual es vertido de las plantas de tratamiento convencionales sin ser tratado. En el ambiente natural su degradación es lenta por lo que suele acumularse e incrementar su concentración en los distintos nichos ecológicos.

Este colorante básico en especial, tiene varias áreas de aplicación ya sea para usos de laboratorio, análisis, investigaciones, química fina, medicina e incluso en acuicultura.⁵

2.11 Concepto de adsorción

El término adsorción, propuesto por Bois-Reymond, llega a la bibliografía en 1881 de la mano de Kayser. En esta época aparecen también los términos “isoterma” y “curva isoterma”, para definir los resultados de las medidas de adsorción a temperatura constante. En 1909 McBain introduce el término absorción para describir lo observado al estudiar la adsorción de hidrógeno por carbón. Este mismo investigador propuso el término sorción para incluir la adsorción y la absorción, procesos que en muchos casos no se pueden diferenciar de manera precisa. Por esto mismo, en casos dudosos se suelen utilizar los términos sorción, sorbible, sorbente y sorbido. La adsorción implica la concentración de uno o más componentes de un gas o un líquido en la superficie de un sólido. El sólido se denomina adsorbente y las moléculas adsorbidas en la superficie del sólido, con mayor concentración que en la fase fluida, se conocen como adsorbato. La adsorción se establece debido a las fuerzas de atracción entre las moléculas de fluido y la superficie sólida. Si las fuerzas son de tipo van der Waals, conllevan una Fisorción sobre la superficie del adsorbente, resultado de interacciones intermoleculares débiles entre el sólido y el fluido. La adsorción activada o Quimisorción ocurre cuando se forman enlaces químicos entre las moléculas de fluido y la superficie adsorbente.

Normalmente, la Quimisorción provoca la adsorción de una monocapa sobre la superficie adsorbente. La energía de adsorción en Fisorción es muy inferior a la que se implica en un enlace químico, y por tanto la reversibilidad del proceso se obtiene, bien sometiendo al sistema a un calentamiento o bien a vacío, de forma que se disminuya la presión del adsorbato. La Fisorción es un fenómeno exotérmico, aunque la energía puesta en juego es siempre superior a la correspondiente al fenómeno de condensación. Cuando la adsorción

se produce en poros de pequeño tamaño, la energía implicada aumenta considerablemente.

En este trabajo se utilizará el término de adsorción para designar la Fisisorción.

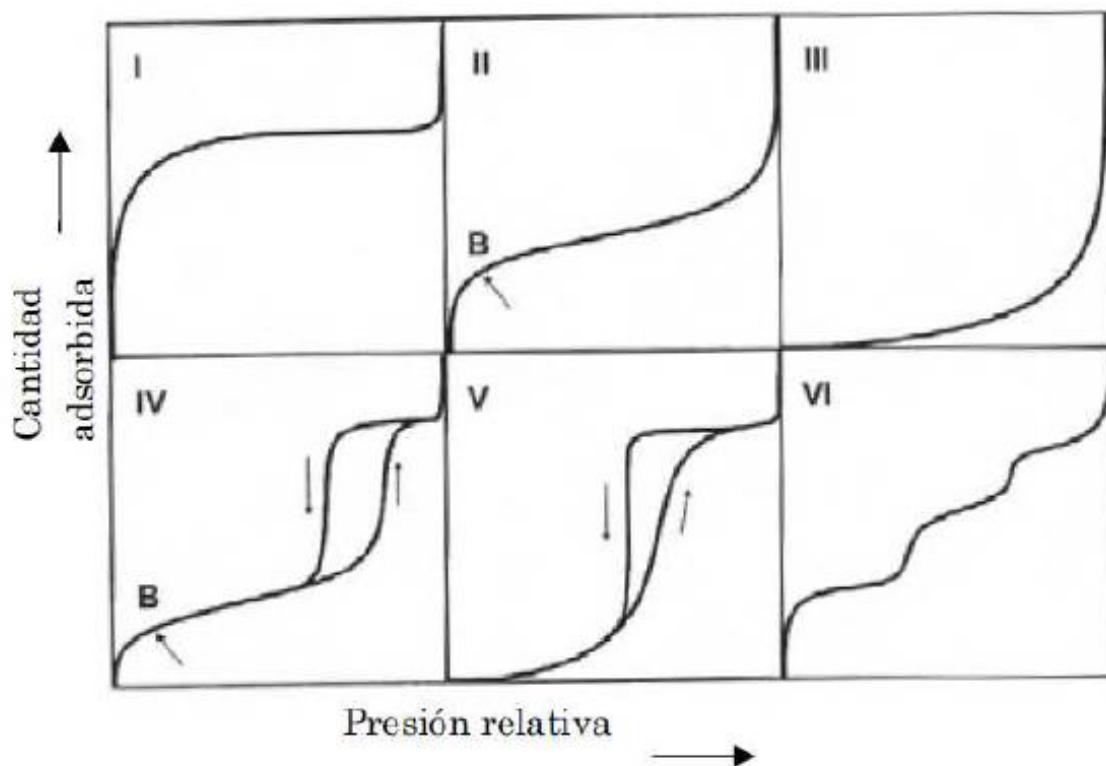


Figura 10 Clasificación de las isotermas según la IUPAC⁶

La adsorción en ingeniería química se considera como una operación de separación gas-sólido o líquido-sólido. A escala industrial se lleva a cabo en lechos adsorbentes, normalmente en lechos fijos. Además de su aplicación en la separación de compuestos de una mezcla, la adsorción se utiliza para el almacenamiento de gases. Esto resulta de especial interés en el desarrollo de aplicaciones de almacenamiento y estabilización de gases de uso en automoción, como pueden ser, actualmente, el gas natural y, en un futuro, el hidrógeno. En cualquiera que sea la forma de aplicación de la adsorción como operación de separación o almacenamiento, resulta fundamental el conocimiento de las características del adsorbente

y del equilibrio de adsorción que se establece entre éste y los compuestos de la corriente que se va a tratar.

El conocimiento del equilibrio de adsorción para un determinado sistema adsorbato-adsorbente posibilita el diseño de las condiciones de operación, presión y temperatura de trabajo. Además, a través de la información que se obtiene de los datos de equilibrio de adsorción, es posible establecer las características del adsorbente; por tanto, en ocasiones el equilibrio de adsorción se utiliza para caracterizar materiales para su posterior uso como adsorbente o catalizador.⁶

2.12 Equilibrio de adsorción

Una de las formas más habituales de representación del equilibrio de adsorción es mediante la relación entre la cantidad adsorbida y la presión, en el caso de gases o vapores, o la concentración en la fase líquida, en el caso de adsorción de líquidos, para una temperatura determinada. Esta relación se conoce como isoterma de adsorción para un determinado sistema adsorbato adsorbente.

Las isotermas de adsorción, se pueden clasificar atendiendo a seis tipos (Figura 10). Esta clasificación fue propuesta por Brunauer y sus colaboradores en el año 1938 y en la actualidad es la recomendada por la IUPAC (International Union of Pure and Applied Chemistry). Cuando el equilibrio de adsorción se utiliza para caracterizar la estructura porosa de los materiales, se suele utilizar la adsorción de gases a su temperatura de ebullición a presión atmosférica (nitrógeno a 77 K, argón a 87 K o CO₂ a 273 K). De esta forma, el grado de condensación del gas en la fase adsorbato hace que se refleje de una forma muy directa la

estructura del sólido. Utilizando la clasificación de Brunauer, se pueden inferir las características de los materiales porosos atendiendo a la forma de la isoterma, según los seis tipos antes mencionados:

1. La isoterma de tipo I es cóncava hacia el eje de abscisas, en el que se representa la presión relativa, y la cantidad adsorbida se aproxima a un valor constante al aumentar la presión relativa. Las isotermas de este tipo corresponden a sólidos microporosos. El límite de adsorción está determinado, en mayor extensión, por el volumen accesible frente al tamaño de poro.

2. La isoterma de tipo II es la forma normal de isoterma que se obtiene con un sólido no poroso o macroporoso. Representa una adsorción en monocapa y multicapa sin restricciones. Se admite frecuentemente que el punto B, indica el valor de presión relativa para el cual el recubrimiento de la monocapa se ha completado, indicando así el principio de adsorción por multicapa.

3. La isoterma de tipo III es convexa hacia el eje de abscisas para todo el intervalo de presión relativa. Este tipo de isoterma se presenta en materiales macroporoso o no porosos cuando existe poca afinidad entre el adsorbato y el adsorbente. Por tanto, al ser las interacciones adsorbato-adsorbente menores, no se observa el efecto de un campo de fuerzas a bajas presiones relativas.

4. La isoterma de tipo IV presenta un ciclo de histéresis, el cual se asocia con la condensación capilar propia de la adsorción/desorción en mesoporos, y un valor límite en la cantidad adsorbida para el intervalo superior de presión relativa. La parte inicial de la isoterma se atribuye a la adsorción en monocapa, puesto que coincide con la primera región de la

isoterma de tipo II. Este tipo de isoterma se presenta en los materiales adsorbentes mesoporosos.

5. La isoterma de tipo V se obtiene para materiales mesoporosos, pues presenta un ciclo de histéresis, cuando existe poca afinidad entre el adsorbato y el adsorbente. Es muy poco frecuente.

6. La isoterma de tipo VI representa la adsorción escalonada en multicapa sobre una superficie uniforme no porosa. Cada uno de los escalones que presenta corresponde a una capa adsorbida. Suele presentarse, por ejemplo, en la adsorción de argón a la temperatura del nitrógeno líquido (77 K) sobre negro de humo grafitizado.

Existen diversas teorías implicadas en el análisis del equilibrio de adsorción. En los siguientes párrafos se destacan las características principales de aquéllas que tienen mayor relevancia histórica o uso habitual. Las expresiones de cada una de estas isotermas se muestran en el Figura 10. La forma más sencilla de representar el equilibrio de adsorción es suponer que para concentraciones muy bajas de adsorbato en la superficie del adsorbente, las moléculas de adsorbato son independientes unas de otras. De esta forma, se puede asumir que la fase adsorbida, que se presenta diluida, se comporta como un gas ideal bidimensional, pudiéndole ser aplicada la ley de los gases ideales para el caso particular de un sistema no volumétrico. En este caso, se puede establecer la proporcionalidad entre la extensión de la adsorción y la concentración o la presión parcial del adsorbato en el límite de llenado cero, lo que al final se reduce a la ley de Henry.

La ecuación de Langmuir representa adecuadamente ciertos casos de Quimisorción y ha sido de especial relevancia para el desarrollo de posteriores modelos de Fisorción. Los fundamentos de esta teoría se basan en la teoría cinética de los gases. Así, se supone que el

adsorbente dispone de un número finito de sitios de adsorción, estando parte de ellos ocupados por moléculas de adsorbato y otra parte libres. La velocidad de adsorción depende de la presión y del número de sitios libres, mientras que la velocidad de desorción es dependiente del número de sitios ocupados. El estado de equilibrio se obtiene cuando ambas velocidades de adsorción y desorción se igualan, para cierto valor de presión y proporción de sitios libres. No se consideran las interacciones laterales entre las moléculas de adsorbato, por tanto, se puede establecer el valor de la energía del proceso de forma independiente al grado de llenado del adsorbente. En la ecuación de Langmuir, K es la constante del equilibrio de este proceso (Tabla 3). Cuando el adsorbente se ha saturado de adsorbato, la cantidad que recubre su superficie corresponde al llenado de la monocapa, n_m (Tabla 3).

Tabla 3.: Ecuaciones representativas de modelos para el equilibrio de adsorción⁶

Nombre	Ecuación	Observaciones
Ley de Henry	$n = K_H \cdot p$	K_H , constante de Henry
Langmuir	$n = \frac{K_L \cdot n^m \cdot p}{1 + K_L \cdot p}$	n^m , llenado de monocapa
BET	$\frac{p}{n(p_0 - p)} = \frac{1}{n^m \cdot C} + \frac{C-1}{n^m \cdot C} \cdot \frac{p}{p_0}$	$C \propto \exp\left(\frac{E_1 - E_L}{RT}\right)$ E_1 , energía adsorción E_L , energía condensación
n-BET	$\frac{n}{n^m} = \frac{C \cdot (p/p_0)}{1 - p/p_0} \cdot \frac{1 - (L+1) \cdot (p/p_0)^L + L \cdot (p/p_0)^{L+1}}{1 + (C+1) \cdot (p/p_0)^L + C \cdot (p/p_0)^{L+1}}$	L : número de capas
Fowler-Guggenheim	$n/n^m = \frac{K \cdot p \cdot \exp(c \cdot \varepsilon_{aa} \cdot (n/n^m)/k_B \cdot T)}{1 + K \cdot p \cdot \exp(c \cdot \varepsilon_{aa} \cdot (n/n^m)/k_B \cdot T)}$	ε_{aa} , energía interacciones laterales c , n° de interacciones $K = K^0 \cdot \exp(-U/k_B T)$
Freundlich	$n = D \cdot p^b$	D , b , parámetros empíricos
Sips	$n/n_L = \frac{(k \cdot p)^{1/m}}{1 + (k \cdot p)^{1/m}}$	n_L , capacidad de adsorción límite m , parámetro empírico
Toth	$n/n_L = \frac{p}{(b + p^m)^{1/m}}$	n_L , capacidad de adsorción límite m , parámetro empírico b , parámetro empírico

2.13 Materiales adsorbentes

Al ser la acumulación de adsorbato por unidad de superficie muy pequeña, la adsorción se suele llevar a cabo en materiales porosos, de elevada superficie específica y volumen de poros, disponiendo así de una elevada capacidad de adsorción. La superficie específica de un material poroso se define como la superficie de la estructura porosa del material sumada con la superficie externa de las partículas de adsorbente, por unidad de masa del mismo. El volumen de poros V_p de un adsorbente es el volumen de adsorbato que puede retener por unidad de masa. Ambos parámetros están relacionados con el tamaño de poro de que posea el material. Se pueden fabricar adsorbentes con un área superficial interna (superficie específica) desde los $100 \frac{m^2}{g}$, hasta valores de este parámetro $3000 \frac{m^2}{g}$, aunque los materiales que suelen aplicarse en la práctica en adsorción tienen una superficie específica entre 300 y $1200 \frac{m^2}{g}$. La IUPAC distingue materiales micro-, meso- y macroporoso, atendiendo al tamaño de poro: microporos ($d_p < 2 \text{ nm}$), mesoporos ($2 \text{ nm} < d_p < 50 \text{ nm}$) y macroporos ($d_p > 50 \text{ nm}$), en los que se distinguen diferentes mecanismos de adsorción: interacción muy favorecida en el caso de microporos, condensación capilar en los mesoporos y condensación de vapores en los macroporos. Las características principales de un material que son evaluables en su uso como adsorbente son: la capacidad de adsorción, la selectividad hacia determinados adsorbatos, su facilidad de regeneración, la cinética de adsorción, la compatibilidad con la totalidad de los componentes de la corriente, sus propiedades mecánicas y su coste.

1. La capacidad de adsorción es una de las características más importantes de un adsorbente. Se define como la cantidad de adsorbato que puede retenerse en el adsorbente por unidad de

masa o volumen. La capacidad de adsorción se relaciona directamente con la superficie específica del material y con su volumen de poros, así como con el tamaño de poro promedio del material. Este parámetro establece el costo de la operación de adsorción, pues determina tanto la cantidad de adsorbente necesaria, y por tanto su coste, como el volumen del equipo o dispositivo de adsorción (columna o tanque).

2. La selectividad es el cociente entre la capacidad de adsorción de un componente y la correspondiente a otro en una mezcla dada. De esta forma, la selectividad representa la manera más simple de descripción de un equilibrio multicomponente. Desde un punto de vista práctica, la selectividad relativa de un compuesto y respecto de otro se define como el cociente de sus relaciones molares en las fases adsorbida y fluida:

$$S_{ij} = \frac{x_i/x_j}{y_i/y_j} \quad \text{Ec. 2}$$

donde x es la fracción molar en la fase adsorbida e y es la fracción molar en la fase fluida. Otra forma de evaluar la selectividad consiste es la relación de las pendientes de las isotermas individuales para valores bajos de concentración o presión parcial, es decir se expresa mediante el cociente de las constantes de Henry para el equilibrio gas o liquido-solido:

$$S_{ij} = \frac{K_i}{K_j} \quad \text{Ec. 3}$$

3. La regenerabilidad de un adsorbente es la capacidad de mantener sus propiedades texturales y adsorbentes después de un número finito de ciclos de utilización. La regeneración de un adsorbente se puede llevar a cabo mediante la elución de un disolvente

que tenga mayor afinidad que el adsorbente por el adsorbato; este proceso se conoce como regeneración química. También puede hacerse por calefacción mediante un gas inerte o haciendo vacío. Es frecuente el uso de ciclos de presión y temperatura, integrando en un sistema continuo las etapas de adsorción y desorción.

4. La cinética de transferencia de materia se relaciona directamente con la resistencia al transporte en las zonas interarticulares. Resulta muy relevante, pues controla el tiempo de un ciclo en los procesos de adsorción en lecho fijo. En general, la velocidad del proceso de adsorción queda determinada por la difusión interna. Para solventar problemas difusionales se puede hacer uso de un tamaño de partícula inferior, pero este tipo de soluciones suele conllevar un aumento de la pérdida de carga del sistema, lo que en última instancia afecta notablemente al coste de operación. A veces, suele ser más efectivo aumentar la cantidad de adsorbente y mantener el tamaño de partícula.

5. Respecto de las propiedades mecánicas, un buen material adsorbente debe presentar una adecuada resistencia mecánica, si este se va a utilizar en un lecho fijo, y una buena resistencia a la abrasión, en el caso de adsorbentes para lechos móviles, fluidizados o tanques agitados.

Para ciertos adsorbentes resulta determinante el uso de un agente aglomerante que confiera estas propiedades a las partículas del adsorbente. Los adsorbentes se pueden fabricar a partir de materiales naturales y artificiales, y se pueden destacar: los tamices moleculares de tipo zeolítico, la alúmina activada, el gel de sílice, los adsorbentes poliméricos, las arcillas, el carbón activado, los tamices moleculares de carbono y, más recientemente, los adsorbentes mesoporosos silíceos y carbonosos, los nanotubos de carbono y otros adsorbentes de nueva generación, como son los Metal Organic Frameworks o las Periodic Mesoporous Silicas.⁶

2.14 Isoterma de adsorción de Langmuir

El modelo de la isoterma de Langmuir, tiene en cuenta las siguientes consideraciones:

1. Todos los sitios del sólido tienen la misma actividad para la adsorción.
2. No hay interacciones entre las moléculas adsorbidas.
3. Toda la adsorción se presenta por medio del mismo mecanismo y cada complejo del adsorbente tiene la misma estructura.
4. El grado de adsorción, es no más de una capa monomolecular sobre la superficie.

Esto describe cuantitativamente la formación de una monocapa que adsorbe en la superficie externa del adsorbente, y después de eso no tiene lugar ninguna adsorción adicional. Por lo tanto, el Langmuir representa la distribución de equilibrio de los iones metálicos entre las fases sólida y líquida.

Es un modelo termodinámico que se basa en las siguientes suposiciones: a) la adsorción máxima corresponde a una monocapa saturada de moléculas de soluto sobre la superficie del adsorbente, b) la energía de activación es constante, c) no existe migración de adsorbato sobre la superficie del adsorbente.⁷

La isoterma de Langmuir es válida para la adsorción monocapa sobre una superficie que contiene un número finito de sitios idénticos. El modelo asume energías uniformes de adsorción en la superficie y no transmigración de adsorbato en el plano de la superficie. Sobre la base de estas suposiciones.

Langmuir representó la siguiente ecuación

$$\theta = \frac{n_{ads}}{n_o}$$

Ec. 4

$$y \theta = \frac{K C}{1+K C} \quad \text{Ec. 5}$$

De la transformación lineal bajo la condición de equilibrio se obtiene:

$$\frac{1}{n_{ads}} = \frac{1}{n_0} + \frac{K C}{n_0 K C_{eq}} \quad \text{Ec. 6}$$

Dónde:

n_{ads} = Es el número de sitios ocupados por moléculas de azul de metileno ($\frac{1}{\mu mol}$)

n_0 = Es el número total de sitios de adsorción en ausencia de azul de metileno ($\frac{\mu mol}{g}$)

K = Constante de adsorción del azul de metileno sobre la superficie ($\frac{L}{mol}$).

C_{eq} = Concentración molar en equilibrio del sustrato ($\frac{L}{\mu mol}$)

Los valores de n_0 y K se calcularon a partir de la pendiente e intersección de la gráfica de Langmuir.⁸

$$\frac{1}{C_e} \text{ vs } \frac{1}{n_{ads}} \quad \text{Ec. 7}$$

2.15 Isoterma de adsorción de Freundlich

El modelo de Freundlich es el modelo de isoterma no lineal más empleado, siendo un modelo adecuado para la interpretación de los casos de adsorción en superficies heterogéneas, a diferencia de la ecuación de Langmuir que considera la superficie como homogénea. Al aumentar la energía libre de adsorción el número de centros de adsorción disminuye exponencialmente, y no se desprecia la fuerza de interacción entre las moléculas de adsorbato.

Esta ecuación es empírica y se aplica en el equilibrio de adsorción de gases sobre sólidos y en la adsorción de sustancias en disolución sobre adsorbentes sólidos

Se usa comúnmente para describir las características de adsorción para la superficie heterogénea, en el modelo propuesto aparecen constantes que relacionan la capacidad de adsorción multicapas y la intensidad de la adsorción. Estos datos a menudo se ajustan a la ecuación empírica propuesta por Freundlich:

$$q_e = K C_e^{\frac{1}{n}} \quad \text{Ec. 8}$$

Donde:

K = constante empírica que indica la capacidad de adsorción y la afinidad del adsorbato por el adsorbente ($\frac{mg}{g}$)

n = constante que representa la velocidad de saturación del adsorbato.

C_e = La concentración en equilibrio de adsorbato ($\frac{mg}{L}$)

Q_e = la cantidad de metal adsorbido por gramo del adsorbente en equilibrio ($\frac{mg}{g}$).

La ecuación de linealización, tenemos:⁸

$$\log(q_e) = \log(K) + \frac{1}{n} \log(C_e) \quad \text{Ec. 9}$$

La constante K es un indicador aproximado de la capacidad de adsorción, mientras que $\frac{1}{n}$ es una función de la fuerza de adsorción en el proceso de adsorción. Si $n = 1$, entonces la partición entre las dos fases es independiente de la concentración. Si el valor de $\frac{1}{n}$ está por debajo de uno, indica una adsorción normal. En el otro lado, $\frac{1}{n}$ por encima de uno indica

adsorción cooperativa. La función tiene un máximo asintótico como la presión aumenta sin límite. A medida que la temperatura aumenta, las constantes **k** y **n** cambian para reflejar la observación empírica de que la cantidad adsorbida aumenta más lentamente y se requieren presiones más altas para saturar la superficie. Sin embargo, **K** y **n** son parámetros característicos del sistema sorbente-sorbato, que debe ser determinado por el ajuste de datos y considerando que la regresión lineal generalmente se usa para determinar los parámetros de cinética y modelos de isothermas. Específicamente, el método lineal de mínimos cuadrados y las ecuaciones transformadas linealmente se han aplicado ampliamente para correlacionar los datos de sorción donde $\frac{1}{n}$ es un parámetro de heterogeneidad, el $\frac{1}{n}$ más pequeño, el mayor la heterogeneidad esperada. Esta expresión se reduce a una isoterma de adsorción lineal cuando $\frac{1}{n} = 1$.⁷

2.16 Isoterma de adsorción de Temkin

Este isoterma contiene un factor que toma explícitamente en cuenta la interacción de adsorbente-adsorbato. Al ignorar el valor extremadamente bajo y grande de las concentraciones, el modelo asume que el calor de la adsorción (función de la temperatura) de todas las moléculas en la capa disminuiría linealmente en lugar de logarítmicamente con cobertura como implica la ecuación, su derivación se caracteriza por una distribución uniforme de las energías de enlace (hasta una energía de enlace máxima) se llevaron a cabo trazando la cantidad que absorbida contra $\ln C_e$ y las constantes se determinaron a partir de la pendiente y la intersección. .

La isoterma de Temkin puede obtenerse en base a la isoterma de Langmuir, suponiendo que el calor de adsorción disminuye linealmente al aumentar la capacidad de adsorción. El modelo es dado por la siguiente ecuación.

$$q_e = \frac{RT}{b_T} \ln A_T + \left(\frac{RT}{b}\right) \ln c_e \quad \text{Ec. 10}$$

$$B = \frac{RT}{b_T}$$

$$q_e = B \ln A_T + B \ln B_T \quad \text{Ec. 11}$$

Datos:

A_T = Constante de enlace de equilibrio isotérmico Temkin (μmole)

B_T = Constante de isoterma de Temkin

R = constante de gas universal ($8.314 \frac{J}{\text{mol.K}}$)

T = temperatura a 298 k.

B = constante relacionada con el calor de sorción ($\frac{J}{\text{mol}}$)

La isoterma de Temkin considera que la entalpía molar de adsorción disminuye linealmente a medida que aumenta el grado de recubrimiento debido a las interacciones adsorbato adsorbente. Además, supone que la adsorción posee una distribución uniforme de las energías de unión, hasta un cierto valor de energía de enlace máximo.⁹

2.17 Isoterma de adsorción de Henry

La isoterma de Henry, establece que la adsorción es directamente proporcional a la concentración del soluto. Asume como condiciones necesarias en la aplicación del mismo,

que el sistema se encuentra a temperatura constante, la superficie del adsorbente es lisa, homogénea e infinita y que no existen interacciones entre las moléculas adsorbidas.

Este modelo, linealiza la primera parte de una isoterma experimental del Tipo I o del Tipo II, y, por lo tanto, sólo se aplica a muy bajas concentraciones.

La Isoterma de Henry es una isoterma de carácter muy general que se cumplirá siempre que la fase adsorbida se comporte idealmente.

$$C_s = C_e \cdot K \quad \text{EC. 12}$$

Donde:

C_s = Cantidad de soluto adsorbida ($\frac{\mu\text{mol}}{g}$)

K = Capacidad de adsorción ($\frac{g}{L}$)

C_e = Concentración de soluto en la solución acuosa en equilibrio ($\frac{\mu\text{mol}}{L}$)

Características:

Esta isoterma se cumple en cualquier adsorbato-adsorbente para presiones relativas suficientemente bajas como para que el adsorbato se comporte como un gas ideal.

Significado de las constantes: adsorción, presión o concentración, la constante de Henry.¹⁰

III. Objetivos

3.1 Objetivo general.

- ✓ 3.1.1 Caracterizar fisicoquímicamente la roca basáltica escoria negra de El Salvador.

3.2 Objetivos específicos

- ✓ 3.2.1 Determinar el modelo cinético de adsorción al cual mejor se ajuste el equilibrio de adsorción entre el azul de metileno y la roca basáltica.

- ✓ 3.2.2 Medir la constante del equilibrio de adsorción-desorción formado entre el azul de metileno y la roca basáltica.
- ✓ 3.2.3 Determinar el área específica de la roca basáltica.
- ✓ 3.2.4 Establecer el número de sitios activos de absorción por nanómetro cuadrado de la roca basáltica.

IV. Hipótesis

Es posible caracterizar fisicoquímicamente la roca basáltica utilizando el azul de metileno como adsorbato.

V. Diseño metodológico

5.1 Universo

El universo es constituido por el azul de metileno a 5, 10, 15, 20, 25, 30, 33 ppm que simula los contaminantes.

5.2 Muestra

La alícuotas de la solución del azul de metileno (5, 10, 15, 20, 25, 30, 33 ppm) tomada del minuto cero hasta sesenta minutos con un rango de 5 minutos por alícuota.

5.3 Método empleado en la investigación

Hipotético-Deductivo

5.4 Clase de investigación.

Investigación aplicada-correlacional.

5.5 Tipo de investigación.

Investigación cuantitativa

5.6 Diseño Experimental

5.6.1 La curva de calibración

La curva de calibración se representó por la gráfica de que se midió en función de la concentración de azul de metileno y la absorbancia. La calibración incluye la selección de un modelo para estimar los parámetros que permitan determinar la linealidad de esa curva. y, en consecuencia, la capacidad de un método analítico para obtener resultados que sean directamente proporcionales a la concentración del azul de metileno con la roca basáltica. La etapa de calibración analítica se realizó mediante un modelo de línea recta que consistió en encontrar la recta de calibrado que mejor ajuste a una serie de “7” puntos experimentales, donde cada punto se encontró definido por una variable “x” (variable independiente, concentración del azul de metileno) y una variable “y” (variable dependiente, respuesta instrumental). La recta de calibrado se encuentra definida por una ordenada al origen (b) y una pendiente (m), mediante la ecuación $y = mx + b$.

A partir de la curva de calibración (conjunto de concentraciones que describen el intervalo en el cual se deberá cuantificar el compuesto por analizar) y a fin de asegurar que la recta encontrada con los puntos experimentales se ajuste correctamente al modelo matemático de la ecuación se calculó los valores de la ordenada al origen, la pendiente y el coeficiente de determinación (r^2).

Por tener una buena exactitud y confiabilidad estadística, el método que se empleó para encontrar los parámetros de la curva de calibrado es el método de los mínimos cuadrados. Este método busca la recta del calibrado que haga que la suma de los cuadrados de las distancias verticales entre cada punto experimental y la recta de calibrado sea mínima o tienda a cero. A la distancia vertical entre cada punto experimental y la recta de calibrado se le conoce como residual.

Las expresiones matemáticas para calcular la pendiente (m) y la ordenada al origen (b), así como el coeficiente de determinación (r^2) se observa en la Tabla 4.

Tabla 4. Expresiones matemáticas para calcular pendiente, ordenada al origen y coeficiente de determinación.

PENDIENTE	$m = \frac{n \sum xy - \sum x \sum y}{n \sum x^2 - (\sum x)^2}$
ORDENADA AL ORIGEN	$b = \frac{\sum y - m \sum x}{n}$
COEFICIENTE DE DETERMINACIÓN	$r^2 = \frac{(n \sum xy - (\sum x)(\sum y))^2}{(n \sum x^2 - (\sum x)^2)(n \sum y^2 - (\sum y)^2)}$

En la práctica donde se hizo la curva de calibración se utilizó disoluciones que contienen concentraciones conocidas del azul de metileno. Las soluciones de azul de metileno fueron para construir la recta de calibrado deben ser preparadas en forma independiente, a partir de una solución madre que fue de 33 ppm; el número de puntos a escoger fue siete. Si bien con dos puntos se puede construir una curva, estadísticamente se requieren por los menos tres para que la curva sea confiable; este número se suele aplicar a métodos de rutina perfectamente establecidos y validados (proceso por el cual se demuestra, por estudios de laboratorio, que la capacidad del

método satisface los requisitos para la aplicación analítica deseada). Sin embargo, si el método está en una etapa de desarrollo, el número de puntos mínimo será de cinco o seis para que la variabilidad sea mínima y el intervalo lineal sea suficiente. Hay que considerar que un aumento en el número de puntos experimentales implicara mayor confiabilidad en la recta de calibrado. La verificación del comportamiento del azul de metileno mediante una curva de calibración requiere un mínimo de cinco puntos para un intervalo de confianza del 95% y de ocho puntos para uno del 99%. Cabe mencionar que en la práctica fue muy importante efectuar la medida del “blanco” lo cual se ocupó agua destilada. Los blancos miden la respuesta del procedimiento analítico a las impurezas o especies interferentes que existan en los reactivos o, simplemente, a las especiales características del instrumento de medida.

La medida de la señal del blanco puede realizarse:

a) registrando directamente la señal del blanco e incluir este punto experimental en la recta de calibrado con $x=0$ como señal del blanco.

b) Restar a la señal medida con el analito, la señal media de varias lecturas del blanco (señal observada – blanco). Es importante señalar que los métodos analíticos son establecidos por instituciones nacionales o internacionales que proporcionan procedimientos y características del método y que concluyen con indicadores de calidad (denominados características del desempeño analítico) que suelen incluir: exactitud, precisión, especificidad, además de los parámetros que se determinan a partir de las curvas de calibración. Independientemente de la técnica instrumental responsable de la señal analítica (cuyas características se estudian en forma particular) los parámetros que se determinan a partir de las curvas de calibración obtenidas con

cualquiera de ellas son: • la linealidad • la sensibilidad • el límite de detección • el límite de cuantificación • el intervalo analítico.

La linealidad de la curva de calibración (habilidad para asegurar que los resultados obtenidos directamente o por medio de una transformación matemática definida) es un requerimiento fundamental en la práctica del análisis químico cuando se realizan curvas de calibración. En general la linealidad no se cuantifica, pero se observa por simple inspección o mediante pruebas significativas de no linealidad. La no linealidad se elimina mediante la selección de un intervalo de operación más restringido. Cabe mencionar que el intervalo lineal puede ser distinto para matrices diferentes de acuerdo al efecto de las interferencias procedentes de la matriz. Como ya se mencionó con anterioridad, para demostrar la linealidad se requieren cumplir ciertos criterios de aceptación en la que estadísticamente se puede justificar esa linealidad; para ello es necesario calcular: • la pendiente (m) • la ordenada al origen (b) • el coeficiente de determinación (r^2) Este cálculo se realiza fácilmente con una calculadora científica sencilla por lo que normalmente no se recurre a las conocidas ecuaciones. Como criterio de aceptación de la linealidad a partir de la curva de calibración (conjunto de concentraciones que describen el intervalo en el cual se deberá cuantificar el compuesto por analizar) se considera $r^2 > 0.98$.

Las concentraciones de 5, 10, 15, 20, 25, 30, 33 ppm sin la roca basáltica se ocupó para determinar la curva de calibración, se midió la absorbancia (este es el minuto cero) de cada concentración en el Espectrómetro UVVIS CARY50 para tener un parámetro de adsorción después de haber puesto la escoria negra.

5.6.2 Determinación de la ley cinética de adsorción

Se midió la cantidad de 50 ml de azul de metileno para las concentraciones 5, 10, 15, 20, 25, 30 y 33 ppm en un Erlenmeyer y se tomó el espectro de adsorción a tiempo cero. Se le adiciono 1 g de la roca basáltica negra y se tomó alícuotas cada 5 minutos hasta llegar a los 60 minutos, cada alícuota fue tomado por un gotero y puesta en tubo de hemolisis para centrifugarlo por 3 minutos para separar la roca basáltica negra del azul de metileno. Después de los 3 minutos en centrifugación se puso la solución por medio de un gotero en la celda de cuarzo y está en el Espectrómetro UVVIS CARY50. Desde la adición de la roca a las concentraciones deberá estar en agitación constante en un agitador magnético durante 60 minutos. Cada vez que se toma una alícuota se debe lavar el gotero antes y después de su uso igual que la celda, esto se repetirá para cada concentración. Es muy importante que las rocas estén muy pulverizadas para poder encontrar el área específica con cero márgenes de error.

VI. Resultados y discusión

6.1 Curva de calibración para medir la concentración de azul de metileno.

Para la curva de calibración se utilizó las concentraciones de 5, 10, 15, 20, 25, 30, 33 ppm y le se tomó espectros de absorción en el Espectrómetro UVVIS Cary50. La longitud de onda máxima se muestra a 665.03772 nm, lo cual nos indica el punto máximo de absorción de las concentraciones a diferentes soluciones iniciales del azul de metileno. Conociendo la longitud de onda de las concentraciones se toma la absorbancia respectivamente para graficar absorbancia vs concentración; esta grafica nos dio una ecuación lineal que mejor ajustó la serie de 7 puntos experimentales, donde cada punto se encuentra definido por una variable “x” (variable independiente, concentración del azul de metileno) y una variable “y” (variable

dependiente, absorción). La recta de calibrado se encuentra definida por una ordenada al origen (b) y una pendiente (m), mediante la ecuación $y = mx + b$.

Los valores de la ecuación línea son: pendiente $(0.0586 \pm 0.0019) \text{ ppm}^{-1}$, el punto de corte de la recta con el eje Y es (0.417 ± 0.0441) Absorción, Coeficiente de Correlación es 0.9949 lo cual indica que los datos son muy confiables, como se puede observar en la Figura 11.

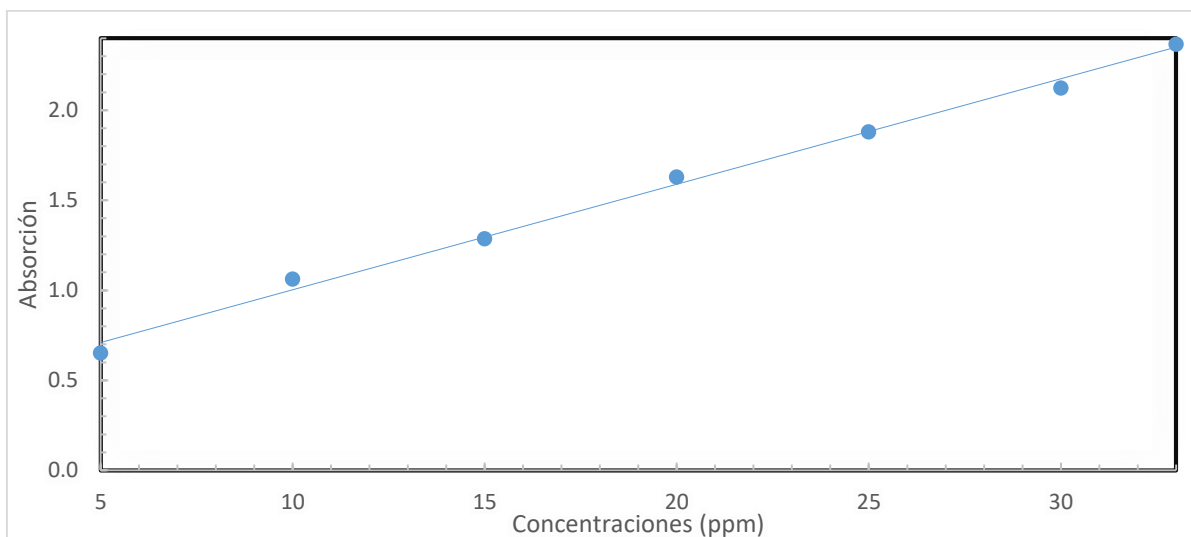


Figura 11. Curva de calibración para las concentraciones de azul de metileno a 0 minutos

El valor obtenido para ϵ es de $(4.8937 \times 10^4 \pm 0.0071) \frac{1}{\text{cm M}}$. Donde la ecuación de Ley de Beer-

Lambert es:

$$A = C \cdot \epsilon \cdot L$$

Donde:

A = Absorbancia de la muestra

C = Concentración del Azul de metileno

L = Longitud del paso óptico que contiene la muestra

ϵ = Absorptividad molar. Depende del azul de metileno en sí mismo. Ya que la absorbancia es adimensional las unidades son $\text{concentración}^{-1} \text{ longitud}^{-1}$.

6.2 Cinética del equilibrio de adsorción-desorción entre el azul de metileno y la roca basáltica

Se realizó una serie de ensayos cinéticos para determinar el tiempo necesario para alcanzar el equilibrio en el proceso de adsorción. Se usó soluciones con concentraciones iniciales de 5, 10, 15, 20, 25, 30, 33 ppm del azul de metileno en presencia de 1 g de roca basáltica. Se pulverizó la roca basáltica, se hace para saber con exactitud el área específica ya que el área de adsorción aumenta, el mortero y el pistilo fueron instrumentos necesarios para esta labor. Se tomó el primer espectro en el Espectrómetro UVVIS CARY50 sin la presencia de la roca basáltica ya que esto será nuestro tiempo “0” minutos, esto nos ayudó para saber la absorción inicial hasta que concrete el tiempo en equilibrio. Se le agregó 1 g de la roca basáltica pulverizada a las concentraciones de las diferentes soluciones; en ese momento se ubica el Erlenmeyer en un agitador magnético esto es para que las partículas de la roca tengan un contacto uniforme; luego se estuvo tomando muestras con un gotero para ubicarlo en una centrifugadora con su respectivo tubo de hemolisis cada 5 minutos hasta llegar a 20-30 minutos, la centrifugación ayudó a que se separe las partículas de la roca y el azul de metileno para que no afectará en la lectura en el Espectrómetro UVVIS CARY50; luego de 1 minuto de centrifugación se tomó del tubo de hemolisis una muestra para depositarlo en la celda del Espectrómetro UVVIS CARY50 y así se tomó el espectro.

En la Figura 12, 13 y 14 se muestran las curvas cinéticas obtenidas con la roca basáltica, se ha tomado 3 Figuras de 7 porque son repetitivas. En todos los casos, puede apreciarse que la cantidad de azul de metileno se absorbe con forme avanza el tiempo de contacto, luego su capacidad de absorción va disminuyendo.

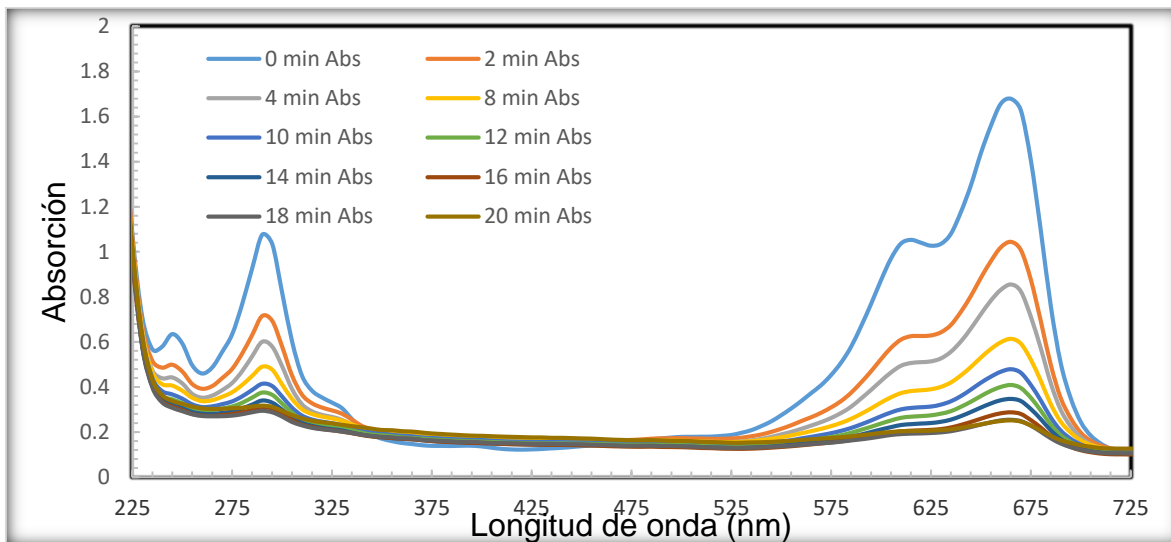


Figura 12. Espectros de Adsorción UV-VIS en función del tiempo para una solución de azul de metileno a una concentración de 20 ppm en presencia de 1 gramo adsorbente (roca basáltica).

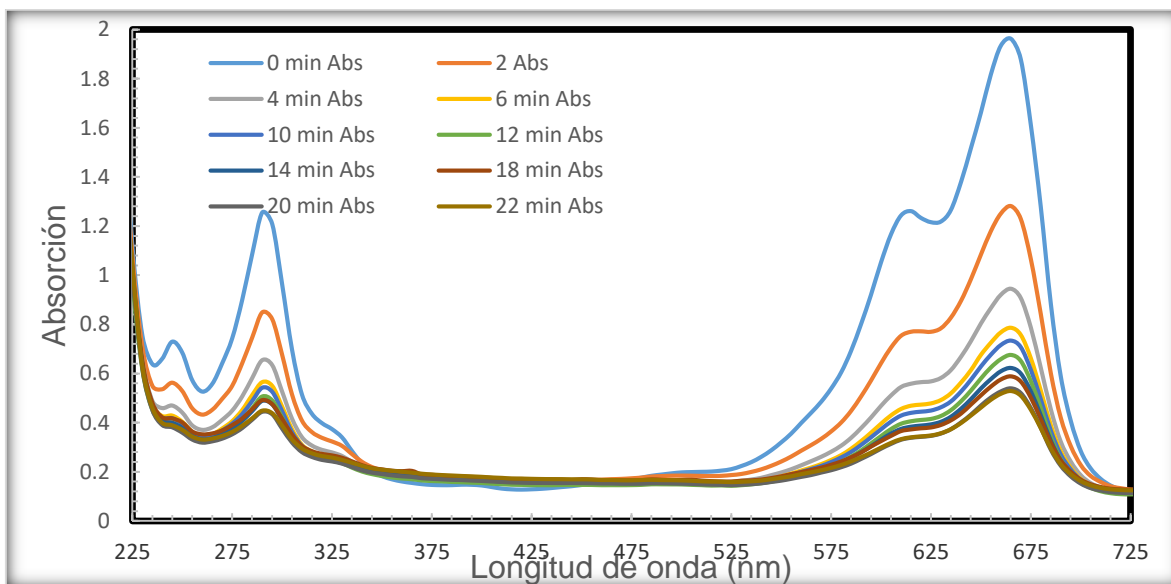


Figura 13. Espectros de Adsorción UV-VIS en función del tiempo para una solución de azul de metileno a una concentración de 25 ppm en presencia de 1 gramo adsorbente (roca basáltica).

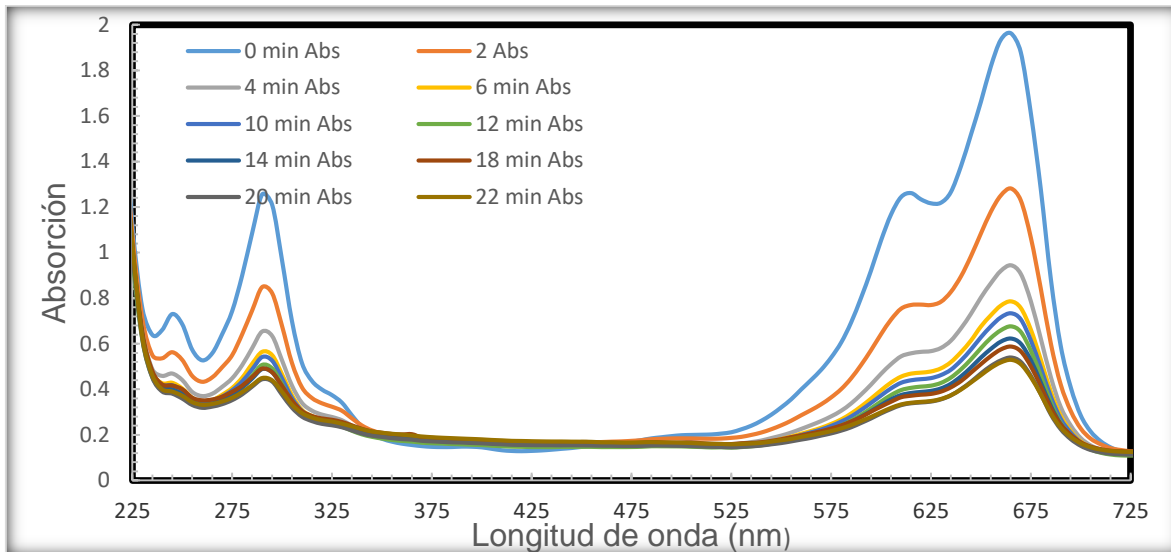


Figura 14. Espectros de Adsorción UV-VIS en función del tiempo para una solución de azul de metileno a una concentración de 30 ppm en presencia de 1 gramo absorbente (roca basáltica).

6.3 Isotherma de adsorción del azul de metileno

Las relaciones de las concentraciones del azul de metileno con el tiempo de adsorción permitieron determinar el tiempo de equilibrio, es decir el tiempo a partir del cual la roca basáltica no adsorbe más colorante, en este caso, este tiempo fue de 20 minutos para las diferentes concentraciones de colorantes, como se observa en la Figura 15.

Conociendo el tiempo de equilibrio, sabemos cuál será la absorción de equilibrio en cada concentración de azul de metileno y así se graficó los respectivos isotermas.

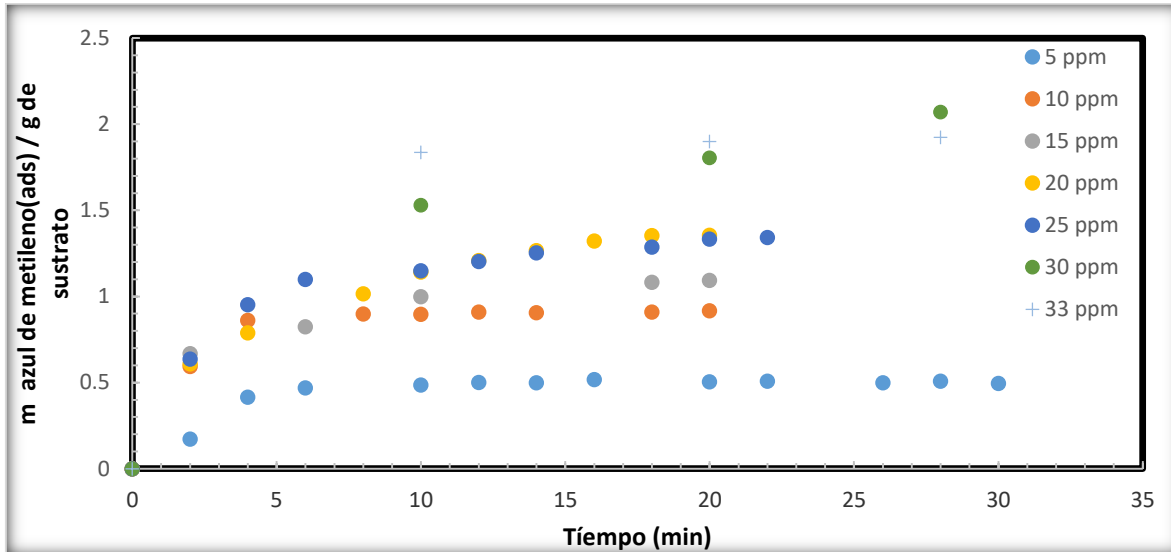


Figura 15. Cinética de adsorción en función de masa de azul de metileno/g de sustrato contra tiempo, las soluciones de azul de metileno a concentraciones de 5, 10, 15, 20, 25, 30, 33 ppm en presencia de 1 gramo absorbente (roca basáltica).

6.4 Pruebas de los modelos matemáticos de adsorción entre azul de Metileno y roca basáltica

6.4.1 Isotherma de adsorción de Langmuir de azul de metileno sobre roca basáltica (escoria negra).

Conociendo la longitud de la onda máxima la cual es 665.03772, se tomó la absorbancia cada 2 minutos hasta llegar a 20-30 minutos. Cada absorbancia fue restada por la absorbancia inicial (al minuto 0); a este resultado fue dividido por el resultado de la multiplicación entre ϵ (Absorptividad molar) que es $0.153 \frac{1}{cm}$ y L (Longitud del paso óptico que contiene la muestra) que es 1 cm, obteniendo así la concentración molar. La concentración fue multiplicada por el volumen de azul de metileno ocupado que fue de 0.150 L para obtener la molaridad. Se tomó la molaridad inicial (tiempo cero) de las concentraciones de 5, 10, 15, 20, 25, 30, 33 ppm respectivamente para ser restada por la molaridad final (o molaridad en

equilibrio que fue a los 20 minutos) debido que este es el tiempo de equilibrio donde llega a ser constante la adsorción, para encontrar la cantidad de azul de metileno adsorbido se multiplico por 0.15 litros y por el peso molecular del azul de metileno que es de $319.852 \frac{g}{mol}$, luego se hizo la conversión a $\mu moles$ y para luego encontrar la inversa para obtener $\frac{1}{n_{ads}}$ (las unidades son $\frac{1}{\mu mol}$). La concentración en equilibrio (C_{eq}) es decir al tiempo de 20 minutos se convertirá las unidades a $\frac{\mu mol}{L}$ para luego sacar su inversa para obtener $\frac{1}{C_{eq}}$ (La unidad es $\frac{L}{\mu mol}$). Se graficó $\frac{1}{C_{eq}}$ vs $\frac{1}{n_{ads}}$ para obtener la ecuación de la recta lineal donde la pendiente es $(0.5596 \pm 0.1087) \frac{1}{L}$, el punto de corte de la recta con el eje Y es $(0.1333 \pm 0.0238) \frac{1}{\mu mol}$, Coeficiente de Correlación es 0.8687, lo que se muestra en la Fig. 13.

$$\frac{1}{n_{ads}} = \frac{1}{n_o} + \frac{KC}{n_o KC_{eq}}$$

Con el valor del punto de corte de la recta Y se encontró n_o con la formula $n_o = \frac{1}{b}$ con un resultado de 7.5×10^{-6} mol en 1 g de roca basáltica, este dato es de gran importancia para calcular la cantidad de masa de roca basáltica que es necesaria para eliminar cualquier otro elemento químico que esté en el agua. Basándonos en la Figura 12 se seleccionó la concentración de Manganeso y Hierro que está presente en una muestra de agua residual ordinarias de Ciudad Real, en el municipio de San Sebastián Salitrillo en el departamento de Santa Ana en el año 2014 para saber la cantidad necesaria de roca basáltica necesaria para eliminar estos 2 elementos del agua donde:

- ✓ La concentración del Manganeso en el agua residual es de 0.03 ppm lo que implica que necesita 71.84 g de roca basáltica para su adsorción total en 1 Litro.

- ✓ La concentración del Hierro en el agua residual es de 0.103 ppm lo que implica que necesita 242.11 g de roca basáltica para su adsorción total en 1 litro.

Por medio de la pendiente de la gráfica del Isoterma de Langmuir encontramos el valor de la constante por medio de la formula $K = \frac{1}{m n_o}$ (la unidades es de $\frac{L}{mol}$) donde el valor es de $238.21 \times 10^{-3} \frac{L}{mol}$, este tiene el menor valor de contante entre los demás isotermas utilizados.

S = no N A

Conociendo el recubrimiento de una molécula de azul de metileno que es $1.3 \times 10^{-18} \text{ m}^2$, el Número de Avogadro y el Número total de sitios de adsorción en ausencia de azul de metileno se encuentra el área superficial de la roca basáltica que es de $5.87 \frac{\text{m}^2}{\text{mol}}$ lo cual indica que cumple en el rango de $1-11.5 \frac{\text{m}^2}{\text{mol}}$.

Los números de sitios activos totales es de $3.597 \frac{\text{sitios}}{\text{nm}^2}$ este valor se obtiene de una regla de tres partiendo del Número total de sitios de adsorción en ausencia de azul de metileno.

Ecuación con los parámetros de adsorción del isoterma de Langmuir es:

$$\frac{1}{n_{ads}} = 133.33 \times 10^3 \frac{1}{\text{mol}} + 5.597 \times 10^6 \frac{1}{L}$$



INSTITUTO DEL AGUA

UNIVERSIDAD DE EL SALVADOR
FACULTAD MULTIDISCIPLINARIA DE OCCIDENTE
APARTADO 1808, SANTA ANA, EL SALVADOR, C.A.

TELÉFONOS (503)2484-0887
2484-0888

INFORME DE LABORATORIO

N° 01 – 2014

IDENTIFICACION DE LA MUESTRAS:

Procedencia : Aguas residuales ordinarias
 Ubicación : Ciudad Real
 Municipio : San Sebastián Salitrillo
 Departamento : Santa Ana
 Fecha y hora de muestreo : 22 de mayo de 2014 2:00 pm
 Fecha de recepción : 22 de mayo de 2014
 Fecha de análisis : 22-27 de mayo de 2014
 Fecha de informe : 28 de mayo de 2014
 Tomó la muestra : Br. Miguel Angel Ramos
 Solicitante : Br. Miguel Angel Ramos, Departamento de Química, FMO - UES

ANÁLISIS PRACTICADOS:

Determinación Físicoquímica	Unidades	Método	Resultados	NºO 13.48.01.08
Color aparente	Pt-Co	Espectrofotométrico	482	(1)
Turbidez	FTU o NTU	Absorimétrico	85	(2)
Sólidos suspendidos totales	mg/l	Gravimétrico	66	60
Sólidos sedimentables	mg/l	Directo	<0.1	1
DBO	mg/l	Manométrico	80	60
DQO	mg/l	Digestión	120	150
Aceites y grasas	mg/l	Gravimétrico	1.2	20
Dureza total	mg/l CaCO ₃	EDTA	140	—
Cloro residual	mg/l	Colorimétrico	0.00	—
Nitritos	mg/l NO ₂	Reducción	18.92	—
Sulfatos	mg/l	Turbidimétrico	45	—
Cloruros	mg/l	Argentométrico	40	—
Hierro	mg/l	Colorimétrico	0.103	—
Manganeso	mg/l	AA	0.03	2
Zinc	mg/l	AA	ND	5
Determinación Bacteriológica				
Coliformes totales	UFC/100 ml	Membrana filtrante	1,300,000	10,000
E. Coli	UFC/100 ml	Membrana filtrante	800,000	—

(1) No deberá incrementar color visible en cuerpo receptor

(2) No se incrementará en 5 unidades la turbidez del cuerpo receptor



Vilma de Caballero
Gerente de Calidad

Figura 12 Resultados de los análisis de los parámetros críticos fisicoquímicos y microbiológicos del agua residual provenientes de la urbanización Ciudad Real de San Sebastián Salitrillo.¹⁰

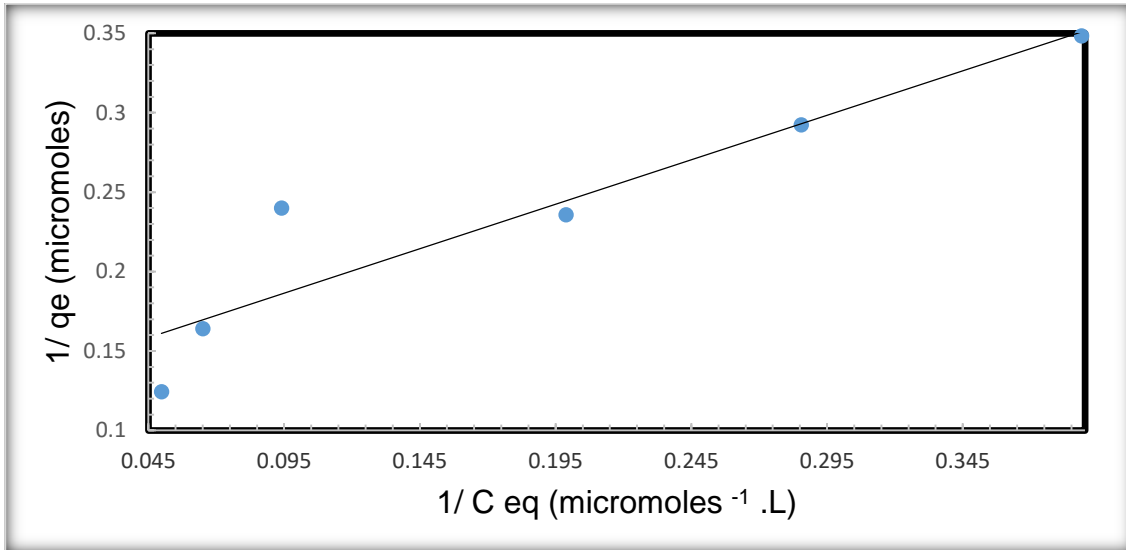


Figura 13. Isoterma de Langmuir para los Espectros de Adsorción UV-VIS en función del tiempo para soluciones de azul de metileno a concentraciones de 5, 10, 15, 20, 25, 30, 33 ppm en presencia de 1 gramo adsorbente (roca basáltica).

6.4.2 Isoterma de adsorción de Freundlich de azul de metileno sobre roca basáltica (escoria negra).

Conociendo la longitud de la onda máxima la cual es 665.03772 nm, se tomó la absorbancia cada 2 minutos hasta llegar a 20-30 minutos. Cada absorbancia fue restada por la absorbancia inicial (al minuto 0); a este resultado fue dividido por el resultado de la multiplicación entre ϵ (Absorptividad molar) que es $0.153 \frac{1}{cm}$ y L (Longitud del paso óptico que contiene la muestra) que es 1 cm, obteniendo así la concentración molar. La concentración fue multiplicada por el volumen de azul de metileno ocupado que fue de 0.150 L para obtener la molaridad. Se tomó la molaridad inicial de 5, 10, 15, 20, 25, 30, 33 ppm respectivamente para ser restada por la molaridad final de las concentraciones al tiempo 20 minutos debido que este es el tiempo de equilibrio, para encontrar la cantidad de azul de metileno adsorbido se multiplico por 0.15 litros y por el peso molecular del azul de metileno que es de 319.852

$\frac{g}{mol}$, por ley de conversión se paso a μmoles y luego se le saco logaritmo natura ($\text{Log}(q_e)$).

La concentración en equilibrio es decir al tiempo 20 minutos se convertirá las unidades a

$\frac{\mu\text{moles}}{L}$ para luego sacar el logaritmo natural ($\text{Log}(C_{eq})$). En la Fig. 14 se muestra el gráfico

$\text{Log}(C_{eq})$ vs $\text{Log}(q_e)$ donde se puede observar un comportamiento lineal donde la pendiente

es (0.5596 ± 0.1087) L, el punto de corte de la recta con el eje Y es (0.1333 ± 0.0238)

μmoles , Coeficiente de Correlación es 0.8687.

$$\log(q_e) = \log(K) + \frac{1}{n} \log(C_e)$$

Con el valor del punto de corte de la recta Y se encontró **k** con la formula $k = 10^m$ con un

resultado de 1.9369 μ moles, encontramos el valor de la constante **n** por medio de la formula

$n = \frac{1}{b}$ donde el valor es de $2.3332 \frac{1}{L}$, es decir que el valor de $\frac{1}{n}$ es de 0.4286 lo que indica que

es una adsorción normal.

Ecuación con los parámetros de adsorción de Freundlich

$$\text{Log}(q_e) = \text{Log}(1.93686 (\mu \text{ mol})) + (0.429 \text{ L}) \text{Log}(C_e)$$

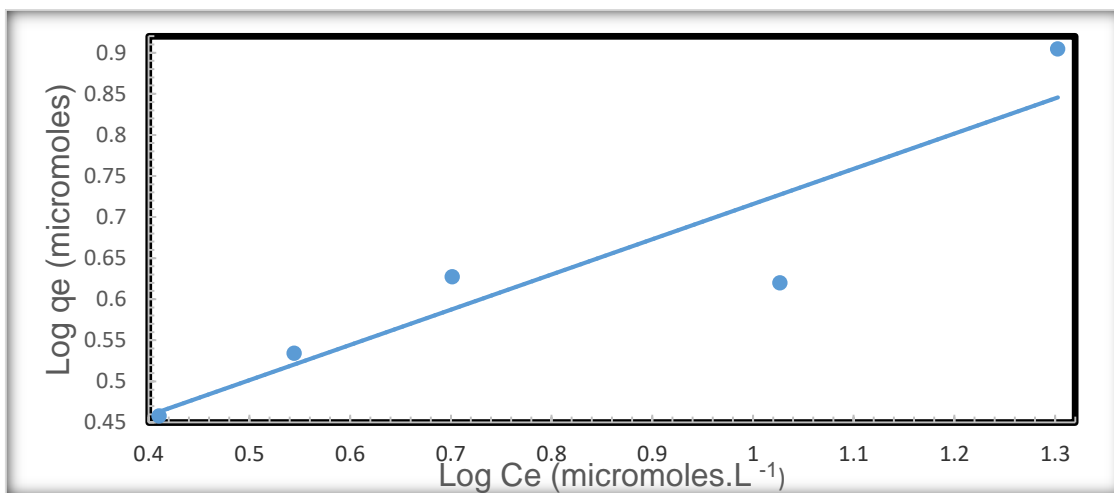


Figura 14. Isoterma de Freundlich para los Espectros de Adsorción UV-VIS en función del tiempo para soluciones de azul de metileno a concentraciones de 5, 10, 15, 20, 25, 30, 33 ppm en presencia de 1 gramo absorbente (roca basáltica).

6.4.3 Isoterma de adsorción de Temkin de azul de metileno sobre roca basáltica (escoria negra).

Conociendo la longitud de la onda máxima la cual es 665.03772 nm, se tomó la absorbancia cada 2 minutos hasta llegar a 20-30 minutos. Cada absorbancia fue restada por la absorbancia inicial (al minuto 0); a este resultado fue dividido por el resultado de la multiplicación entre ε (Absorptividad molar) que es $0.153 \frac{1}{cm}$ y L (Longitud del paso óptico que contiene la muestra) que es 1 cm, obteniendo así la concentración molar. La concentración fue multiplicada por el volumen de azul de metileno ocupado que fue de 0.150 L para obtener la molaridad. Se tomó la molaridad inicial de 5, 10, 15, 20, 25, 30, 33 ppm respectivamente para ser restada por la molaridad final de las concentraciones al tiempo 20 minutos debido que este es el tiempo de equilibrio, para encontrar la cantidad de azul de metileno adsorbido se multiplico por 0.15 litros y por el peso molecular del azul de metileno que es de 319.852 $\frac{g}{mol}$, por ley de conversión se paso a $\mu moles$ (q_e). La concentración en equilibrio es decir al tiempo 20 minutos se convertirá las unidades a $\frac{\mu moles}{L}$ para luego sacar el logaritmo natural ($\ln(C_{eq})$). Se graficó $\ln(C_{eq})$ VS q_e para obtener la ecuación de la recta lineal donde la pendiente es $(2.0732 \pm 0.1087)L$, el punto de corte de la recta con el eje Y es $(0.6888 \pm 0.0238) \mu mole$, Coeficiente de Correlación es 0.8121.

$$q_e = \frac{RT}{b_T} \ln A_T + \left(\frac{RT}{b}\right) \ln B_T$$

$$B = \frac{RT}{b_T}$$

$$q_e = B \ln A_T + B \ln B_T$$

Con el valor del punto de corte de la recta Y se encontró A_t (Constante de enlace de equilibrio isotérmico Temkin) con la formula $A_t = e^{a/Bt}$ con un resultado de 1.3936 μ moles, con el valor de la pendiente se encontró el valor de la B_t (Constante de isoterma de Temkin) por medio de la fórmula $b = B_T$ donde el valor es de 2.0732 Estos son los parámetros para el isoterma.

$$q_e = B \ln(1.3936 \mu\text{moles}) + B \ln(2.0732 L)$$

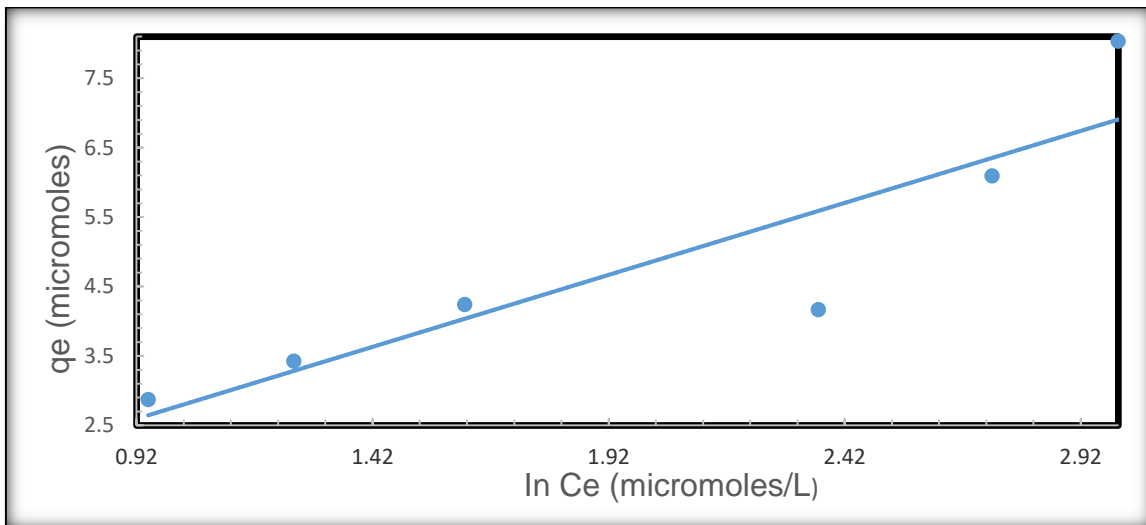


Figura 15. Isoterma de Temkin para los Espectros de Adsorción UV-VIS en función del tiempo para soluciones de azul de metileno a concentraciones de 5, 10, 15, 20, 25, 30, 33 ppm en presencia de 1 gramo adsorbente (roca basáltica).

6.4.4 Isoterma de adsorción de Henry de azul de metileno sobre roca basáltica (escoria negra).

Conociendo la longitud de la onda máxima la cual es 665.03772 nm, se tomó la absorbancia cada 2 minutos hasta llegar a 20-30 minutos. Cada absorbancia fue restada por la absorbancia inicial (al minuto 0); a este resultado fue dividido por el resultado de la multiplicación entre

ϵ (Absorptividad molar) que es $0.153 \frac{1}{cm}$ y L (Longitud del paso óptico que contiene la muestra) que es 1 cm, obteniendo así la concentración molar. La concentración fue multiplicada por el volumen de azul de metileno ocupado que fue de 0.150 L para obtener la molaridad. Se tomó la molaridad inicial de 5, 10, 15, 20, 25, 30, 33 ppm respectivamente para ser restada por la molaridad final de las concentraciones al tiempo 20 minutos debido que este es el tiempo de equilibrio, para encontrar la cantidad de azul de metileno adsorbido se multiplico por 0.15 litros y por el peso molecular del azul de metileno que es de 319.852 $\frac{g}{mol}$, por ley de conversión se paso a $\mu moles$ (q_e). La concentración en equilibrio es decir al tiempo 20 minutos se convertirá las unidades a $\frac{\mu moles}{L}$ (C_{eq}). Se graficó C_{eq} VS q_e para obtener la ecuación de la recta lineal donde la pendiente es $(0.1591 \pm 0.1087) L$, el punto de corte de la recta con el eje Y es $(2.8897 \pm 0.0238) \mu moles$, Coeficiente de Correlación es 0.8192.

$$C_s = C_e \cdot K$$

Encontramos el valor de la constante **k** (Capacidad de adsorción) por medio de la fórmula

$$k = b \text{ donde el valor es de } 0.1591 L$$

$$C_s = C_e \cdot (0.1591 L)$$

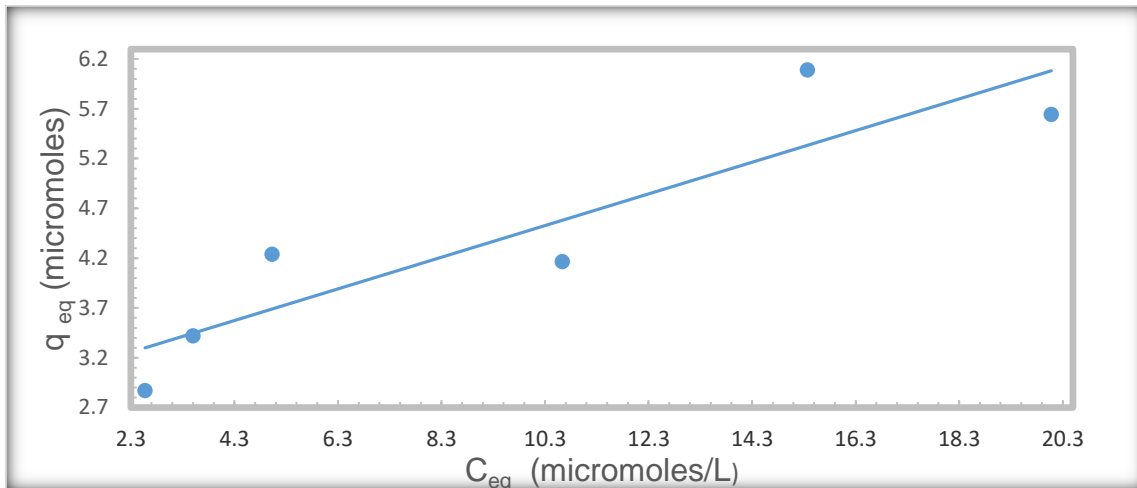


Figura 16. Isoterma de Henry para los Espectros de Adsorción UV-VIS en función del tiempo para soluciones de azul de metileno a concentraciones de 5, 10, 15, 20, 25, 30, 33 ppm en presencia de 1 gramo absorbente (roca basáltica).

6.5 Parámetros de adsorción de los diferentes modelos de isotermas para azul de metileno y la roca basáltica.

En la Tabla 4 se comparan los resultados del análisis, el isoterma que más se asemeja a este análisis es el Isoterma de Langmuir debido a que con su coeficiente de correlación es 0.8687, el isoterma tiene un valor más cercano a 1 comparándolo con los otros isotermas.

Para comparar el valor del área de la roca basáltica ocupamos el “*Data report: specific surface area and physical properties of subsurface basalt samples from the east flank of Juan de Fuca Ridge. College of Oceanic and Atmospheric Sciences, 104 Ocean Administration Building, Oregon State University, Corvallis OR 97331, USA.*”⁴ Donde especifica que el rango de área de la roca basáltica pulverizada debe estar $1-11.5 \frac{m^2}{g}$, el área de nuestra roca es $5.87 \frac{m^2}{g}$ con lo cual si cumple con los requisitos.

Los número de sitios activos totales disponibles en la superficie de la roca basáltica es de $3.597 \frac{\text{sitios}}{\text{nm}^2}$, la constante del Isoterma de Langmuir es de $238.205 \times 10^{-3} \frac{L}{\text{mol}}$ y la cantidad de adsorbato necesario para formar una monocapa sobre gramo de roca de basalto es de 7.5×10^{-6} moles; se utilizó una área de partícula de azul de metileno de $1.3 \times 10^{-18} \text{ m}^2$.

Tabla 4 Parámetro de los modelos de isotermas de adsorción del azul de metileno sobre roca basáltica.

	Isoterma de Langmuir	Isoterma de Freundlich	Isoterma de Temkin	Isoterma de Henry	Area Especifica ⁴
R²	0.8687	0.8589	0.8121	0.8172	
n₀(moles)	($7.502 \times 10^{-6} \pm 0.0113$)				
K	($238 \times 10^{-3} \pm 0.047$) $\frac{L}{\text{mol}}$	(1.94 ± 0.06) μmol		(0.16 ± 0.06) L	
N ($\frac{1}{L}$)		(2.33 ± 0.05)			
S ($\frac{\text{m}^2}{\text{g}}$)	5.9 ± 0.2				1.0–11.5
Los números de sitios activos totales. ($\frac{\text{sitios}}{\text{nm}^2}$)	3.6 ± 0.2				

A_t (Constante de equilibrio isoterma de Temkin) μmol			(1.3974 \pm 0.3068)		
B_t (Constante de isoterma de Temkin) L			(2.0732 \pm 0.2571)		

VII. Conclusiones

- La efectividad de remoción de azul de metileno sobre la roca basáltica (escoria negra) es muy buena debido que a 20 minutos llega la adsorción a ser constante. El isoterma que más se adapta es Langmuir con un coeficiente de correlación de 0.8687 este valor es el más cercano a 1 a comparación de las otras isotermas.
- La constante del equilibrio de adsorción-desorción formado por el azul de metileno con la roca basáltica es la del Isoterma de Langmuir es de $238.205 \times 10^{-3} \frac{L}{mol}$ que nos indica la formación de una monocapa.
- La superficie específica se puede calcularse a partir de la capacidad de la monocapa, el área de nuestra roca basáltica es de $5.87 \frac{m^2}{g}$ la cual está en el rango de la tabla 1 que es de $1-11.5 \frac{m^2}{g}$. Estos datos nos indica que la superficie de la roca basáltica es homogénea, asumiendo que cada sitio de adsorción puede adherir sólo una molécula de adsorbato. La cantidad de adsorbato necesario para formar una monocapa en la roca de basalto es de 7.5×10^{-6} moles con este valor se conoce la cantidad de la roca

basáltica que es necesaria para ocuparlo de filtro conociendo la concentración de los elementos químicos del agua a ocuparse; se utilizó una área de partícula de azul de metileno de $1.3 \times 10^{-18} m^2$.

- Los número de sitios activos totales disponibles en la superficie de la roca basáltica es de $3.597 \frac{\text{sitios}}{nn^2}$, donde las partículas de azul de metileno está en la roca basáltica.

VIII. Referencia bibliográficas

1. *“Caracterización y activación química de arcilla tipo bentonita para su evaluación en la efectividad de remoción de fenoles presentes en aguas residuales.”* Diana Paola Largo Castro y Katherine Marcela Villamarin Coral. Para optar a Ingeniera en Química Industrial. Universidad Tecnológica de Pereira Facultad de Tecnologías Escuela de Química. Química Industrial Pereira, Risaralda 2013
2. *“Comportamiento dela producción del cultivo de chile dulce (capsicum annum) aplicando diferentes dosis de lombriz de abono en combinación con harina de roca, en el cantón San José la labor, municipio de San Sebastián, departamento de San Vicente, año 2013”*, por: María del Carmen Cornejo Rivera, Jessica Roxana Valladares Alemán, Ana Maricela Hernández Hernández. Requisito para optar al título de: Ingeniera Agrónoma San Vicente, mayo 2014. Universidad de El Salvador Facultad Multidisciplinaria Paracentral Departamento de Ciencias Agronómicas
3. *“Clasificación de basaltos utilizando métodos radiactivos en la región de Atlixco, cholula y Huejotzigo en el estado de puebla, México”*. presentado por: María Aracely

Guzmán Andrews, Thalía Elizabeth Lara Rodríguez. Para optar a Ingeniero Geofísico. Instituto Politécnico Nacional, Escuela Superior de Ingeniería y Arquitectura Ciencias de la Tierra Unidad Ticomán. México, D.F. 16 de enero del 2014.

4. *“Data report: specific surface area and physical properties of subsurface basalt samples from the east flank of Juan de Fuca Ridge”* presentado por Mark E. Nielsen and Martin R. Fisk. Fisher, A.T., Urabe, T., Klaus, A., and the Expedition 301 Scientists. Proceedings of the Integrated Ocean Drilling Program, Volume 301. Ocean Administration Building, Oregon State University, Corvallis OR 97331, USA.
- 5- *“Fitorremediación para la extracción del colorante “azul de metileno” mediante el uso de Eichhornia crassipes”*. Presentada: Lizbeth Lara González. Toluca de Lerdo, Estado de México; agosto de 2017. Presentada para obtener el título de Licenciada en Ciencias Ambientales. Universidad Autónoma del Estado de México Facultad de Planeación Urbana y Regional.
- 6- Libro *“Adsorción física de gases y vapores por carbones”*. Autor José Miguel Martín Martínez. UNIVERSIDAD DE ALICANTE
- 7- *“Desarrollo de materiales para adsorción”*. Tesis Doctoral Enrique Vilarrasa García García Málaga, 2014. Facultad de Ciencias Dpto. Química Inorgánica, Cristalografía y Mineralogía.

- 8- *“Langmuir, Freundlich, Temkin and Dubinin–Radushkevich Isotherms Studies of Equilibrium Sorption of Zn²⁺ Unto Phosphoric Acid Modified Rice Husk Dada”*, for Olalekan, A.P, Olatunya, A.M., DADA, O.
Department of Physical Sciences (Industrial Chemistry Unit), Landmark University, P.M.B. 1001, Omu-Aran, Kwara, State, Nigeria.
Department of Chemical Engineering, Landmark University, P.M.B. 1001, Omu-Aran, Kwara State, Nigeria. 3Department of Chemistry, Ekiti State University, P.M.B. 5363, Ado-Ekiti, Ekiti State, Nigeria.
Department of Chemistry, University of Ilorin, P.M.B. 1515, Ilorin, Kwara State, Nigeria.
- 9- *“Evaluación sobre el uso de arcillas para la adsorción de colorantes utilizados en la industria textil”* Tesis de Doctorado. Susana Yamila Martínez Stagnaro. Para acceder al grado académico de DOCTOR EN INGENIERÍA. Dirección de Tesis Dra. Ing. Cristina Volzone. Presentada ante la Facultad de Ingeniería. Universidad Nacional de La Plata.
- 10- *“Tratamiento Fotocatalítica De Las Aguas Residuales Domésticas Vertidas Por La Urbanización Ciudad Real, Ubicada En El Kilómetro 70 De La Carretera A Chalchuapa”*. Tesis para optar al grado de: Licenciado en Ciencias Química. Presentado por: Miguel Angel Ramos Barahona. Presentada En Universidad De El Salvador Facultad Mutidisciplinaria De Occidente Departamento De Química.

