

Simulador de isoterma de adsorción de Langmuir, Freundlich y Tempkin del colorante textil básico en diferentes bioadsorbentes

María del Rayo G. Guevara Villa, Leonardo Ismael Valle Jiménez, Kiichi Alatraste Trejo

Resumen. Se diseñó un simulador de isoterma que permite que el investigador en el área de biotecnología que desarrolla bioadsorbentes nuevos y que desconoce la forma de distribución del adsorbato retenido sobre el bioadsorbente utilizado pueda identificar el tipo de interacción que se está llevando a cabo en los productos que está generando al identificar si sus datos experimentales pueden comportarse como alguna de las isoterma de Freundlich, Langmuir o Tempkin lo que permitirá clasificar el nuevo bioadsorbente obtenido.

Palabras clave: Langmuir, Freundlich, Tempkin, isoterma, simulador.

Abstract. We design an isotherm simulator that help to biotechnology research develop new bioadsorbents and try to know the distribution form of the adsorbate retained on the adsorbent for understand the physical interaction between the material with the new materials and verify if the experimental data has a behavior of Freundlich, Langmuir or Tempkin isotherm. This can classify the new bioadsorbent used in the experiments.

Keywords. Langmuir, Freundlich, Tempkin, isotherm, simulator

1. INTRODUCCION

El desarrollo de nuevos adsorbentes basados en residuos sólidos como pueden ser las cáscaras de naranja, de plátano, de tomate o desechos como la cáscara de huevo o el hueso de pollo puede generar un mundo sostenible. Por un lado se están utilizando desperdicios para generar adsorbentes que por otro lado pueden utilizarse para retener los contaminantes existentes en los ríos como son los desechos de los colorantes utilizados en la industria textil y que son vertidos en los ríos. [1,2].

Actualmente la investigación dirigida a ciencias naturales y exactas que se han ido relacionando para complementar trabajos de investigación llegando a ser proyectos con carácter interdisciplinario destacando la resolución de problemas que son retos relacionados con nuestro entorno

María del Rayo Guevara Villa
Universidad Politécnica Metropolitana de Puebla.
dra.rayo.guevara@gmail.com

Anna María Gil-Lafuente
Universidad Politécnica Metropolitana de Puebla.
leoveracruz@hotmail.com

Kiichi Alatraste Trejo
Universidad Politécnica Metropolitana de Puebla.
ing.kiichi@gmail.com

cotidiano como el energético, comunicaciones, salud, alimentos entre otros.

La simulación computacional ha sido una herramienta para el área de Físicoquímica en especial en temas de adsorción para explicar aquellas interacciones moleculares que a simple vista es imposible y que puede ser interpretado por la animación computacional [3]. Sin embargo, hay otras aplicaciones en donde la simulación es utilizada para representaciones gráficas del proceso de remoción de contaminantes en aguas residuales y monitorear el avance de remoción al utilizar modelos matemáticos como el de Langmuir, Freundlich o Tempkin.

Aquí presentamos un simulador que permite que el investigador pueda colocar los datos experimentales obtenidos y poder presentarle en forma gráfica los resultados teóricos esperados empleando los modelos de las isoterma de Langmuir, Freundlich y Tempkin.

2. TEORÍA DE ISOTERMAS

Todas las isoterma de adsorción permiten calcular los valores teóricos que relacionan la C_e con la q_e . La C_e es la concentración de equilibrio que se grafica en función de la

q_e que representa la cantidad de soluto adsorbido en el equilibrio [4].

1.1 ISOTERMA DE LANGMUIR

La isoterma de Langmuir tiene la siguiente forma:

$$q_e = \frac{K_L C_e}{1 + a_L C_e}$$

Donde las variables K_L y a_L son las constantes de Langmuir y K_L representa la adsorción máxima que alcanza el adsorbente y a_L es la constante que se encuentra relacionada con la energía de enlace que existe entre el adsorbato y el adsorbente utilizado, su representación lineal es:

$$\frac{1}{q_e} = \frac{a_L}{K_L} + \frac{1}{K_L} \frac{1}{C_e}$$

Donde a_L/K_L representa al intercepto y $1/K_L$ corresponde a la pendiente de la función lineal [4, 5].

1.2 ISOTERMA DE FREUNDLICH

La fórmula que corresponde a la ecuación de Freundlich es:

$$q_e = K_F C_e^{br}$$

ésta isoterma contiene las variable K_F y br , la br es adimensional y representa valores menores de la unidad y está relacionada con la intensidad de adsorción. Los adsorbentes que se comportan como la ecuación de Freundlich implican que la adsorción ocurre en multicapas en lugar de una sola capa [6].

La ecuación lineal de ésta isoterma queda como sigue:

$$\ln(q_e) = \ln(K_F) + br \ln(C_e)$$

$\ln(K_F)$ es la ordenada al origen de la ecuación lineal de Freundlich y br es la pendiente [4].

1.3 ISOTERMA DE TEMPKIN

La ecuación que representa la isoterma de Tempkin es:

$$q_e = B_T \ln(A_T C_e)$$

las constantes de Tempkin son B_T y A_T y su correspondiente lineal es

$$q_e = B_T \ln(A_T) + B_T \ln(C_e)$$

donde identificamos a la pendiente con B_T y el intercepto de la ordenada con $B_T \ln(A_T)$ [4].

Todas las isotermas requieren que primero se realicen experimentos en el laboratorio para identificar valores experimentales que puedan ser tratados mediante fórmulas

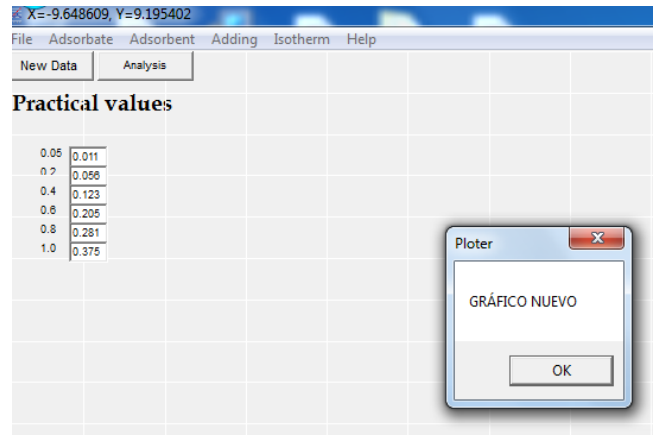


Figura 1. Interfaz inicial que permite al usuario introducir los datos obtenidos experimentalmente en el laboratorio.

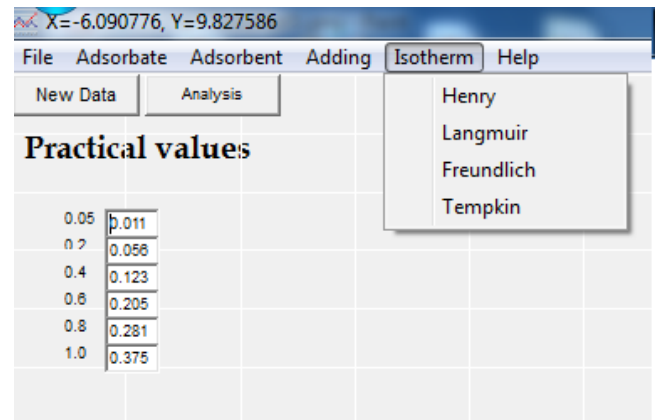


Figura 2. Interfaz que muestra los menús que permiten calcular las isotermas de Henry, Langmuir, Freundlich y Tempkin.

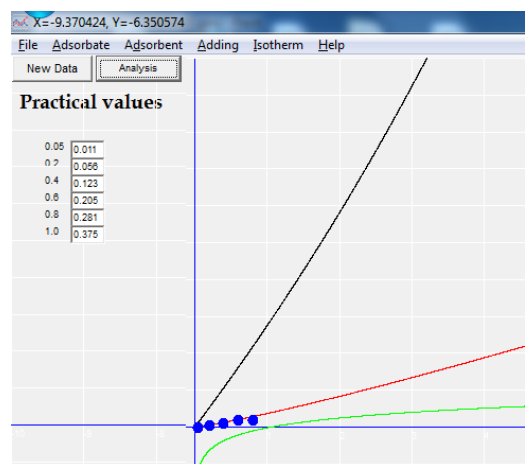


Figura 3. Interfaz que muestra las curvas teóricas de Langmuir (negro), Freundlich (rojo), Tempkin (verde) y los puntos analizados (azul)

estadísticas para calcular la pendiente como se muestra en la siguiente ecuación 1

$$b_1 = \frac{\sum (x - \bar{x})(y - \bar{y})}{\sum (x - \bar{x})^2} \quad (1)$$

y el intercepto como (ec 2)

$$b_0 = \frac{(\sum y)(\sum x^2) - (\sum x)(\sum xy)}{n(\sum x^2) - (\sum x)^2} \quad (2)$$

Una vez teniendo éstos datos, la isoterma se tiene que transformar en una ecuación lineal y con ella calcular sus respectivas constantes (que vienen siendo la correspondencia entre la pendiente y la ordenada al origen de sus respectivas transformaciones lineales) que permitirán poder construir los valores teóricos esperados.

2. SIMULADOR DE ISOTERMAS

La figura 1 muestra la interfaz inicial del simulador que se encarga de recabar los resultados obtenidos en el experimento para poder iniciar con el cálculo de las constantes de las isotermas de Langmuir, Freundlich y Tempkin para poder realizar el cálculo de los valores teóricos esperados.

Contiene un menú que permite obtener datos previamente analizados (Figura 1), guardar en un archivo los nuevos datos estudiados, elegir el adsorbato o adsorbente que se está analizando, permite agregar nuevos adsorbentes estudiados y generar las curvas de las isotermas teóricas de Henry, Langmuir, Freundlich y Tempkin con los valores experimentales calculados en el laboratorio (Figuras 2 y 3).

3. METODOLOGÍA

3.1 EXPERIMENTOS EN LABORATORIO

3.2 DISEÑO DEL SOFTWARE

Para poder realizar el modelado matemático teórico, primero se toman los datos experimentales obtenidos en el laboratorio (cantidad adsorbida contra concentración en equilibrio). Estos datos son almacenados y se procede a obtener las ecuaciones lineales de Langmuir, de Freundlich y de Tempkin a partir de sus respectivas isotermas.

Con los datos experimentales y las ecuaciones de las isotermas lineales se procede obtener los valores de la pendiente y del intercepto que correspondan a cada una de las ecuaciones lineales. Con ello tenemos 6 constantes, 2 para cada isoterma obtenidas con los datos experimentales.

Por último, se puede realizar el graficado de cada una de las funciones junto con los puntos que les dieron origen a las ecuaciones.

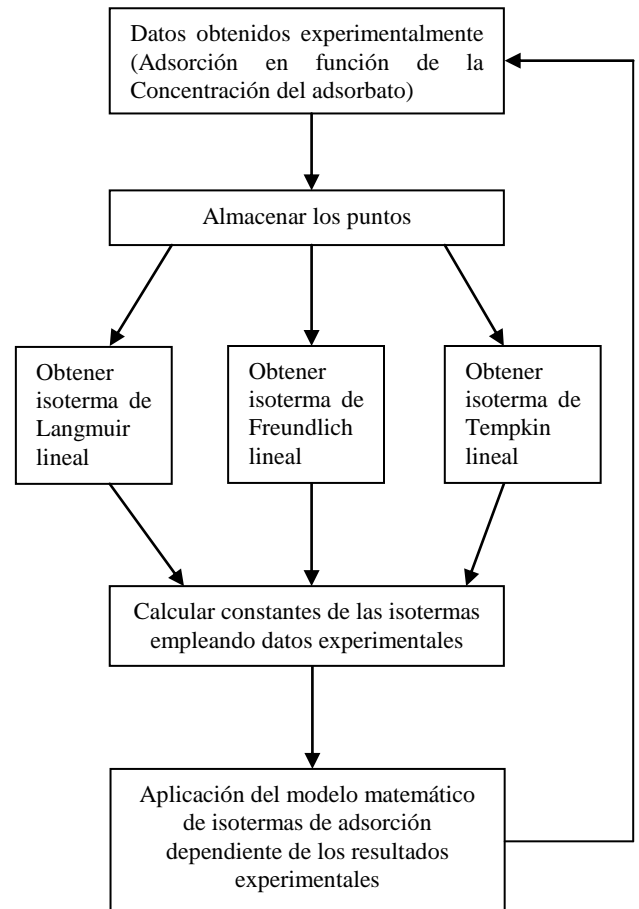


Figura 4. Diagrama general de la distribución de los datos en el simulador.

4. RESULTADOS

A continuación se presentan los resultados obtenidos en el experimento en el laboratorio y con la simulación.

4.1 RESULTADOS EXPERIMENTALES

4.2 RESULTADOS DE LA SIMULACIÓN

Los valores obtenidos experimentalmente se utilizaron para el diseño de las isotermas de adsorción de Langmuir, Freundlich y Tempkin. El programa permite ver e identificar el comportamiento teórico que tendría el adsorbente utilizado (en este caso se utilizó desecho de maíz para retener el colorante textil básico). Dependiendo de la forma que tenga la curva, ésta alcanzará o no una meseta. Cuando no ha alcanzado la meseta es un indicador que el adsorbente no se ha saturado, es decir, toda la

superficie no ha alcanzado a cubrirse con el adsorbato (el colorante).

Si se aumentara la concentración del colorante entonces se tiene que ir saturando el sistema hasta lograr llenar toda la superficie del adsorbente lo que en la gráfica se representa cuando la curva (de Langmuir, Freundlich o Tempkin) han alcanzado la meseta.

Como se muestra en la figura 3, con los datos experimentales evaluados sólo la isoterma de Tempkin (representada con color verde) es la única que alcanza la meseta, más ninguna de las otras dos lo hace. Eso significa que si los datos analizados siguieran un comportamiento de Tempkin entonces el adsorbente ya estaría saturado por el colorante.

Al graficar los puntos obtenidos en el experimento (de color azul en la figura 3) pueden verse que caen perfectamente sobre la gráfica que representa la isoterma teórica de Freundlich (color rojo en la figura 3). Como los datos experimentales coinciden con este tipo de isoterma indica que el adsorbente utilizado contiene una superficie rugosa y que se adsorbe el colorante de forma compacta por monocapas.

5. CONCLUSIÓN

Los datos de la adsorción experimental en el laboratorio siguen el comportamiento teórico de la isoterma de Freundlich, lo que nos sugiere que el colorante utilizado se adsorbe en monocapas en una superficie que se considera rugosa.

6. AGRADECIMIENTOS

Al Cuerpo académico de la Ingeniería en sistemas computacionales de la Universidad Politécnica

Metropolitana de Puebla por su aporte en el diseño del software

7. BIBLIOGRAFÍA

- [1] S. Al-Asheh, F. B.-O. (2003). Predictions of binary sorption isotherms for the sorption of heavy metals by pine bark using single isotherm data. *Chemosphere*, 659-665.
- [2] Martín M. Dávila Jiménez, M. .. (2014). Using Akaike information criterion to selected the optimal isotherm equation for adsorption from solution. *Adsorption Science and Technology*, 605-622.
- [3] Serena, P. (19 de Octubre de 2013). *herencia genética y enfermedad*. Recuperado el Miércoles de Mayo de 2015, de Los biosensores del futuro hechos con sólo tres elementos: <http://herenciageneticayenfermedad.blogspot.mx/2013/10/los-biosensores-del-futuro-hechos-con.html>
- [4] Chen, C. (2013). Evaluation of equilibrium sorption isotherm equations. *The Open Chemical Engineering Journal*, 24-44.
- [5] Adams, M. (1995). *Fundamentos de química de suelos*. venezuela: Universidad Central de Venezuela.
- [6] González, M. (25 de 04 de 2011). *Isoterma de Freundlich*. Obtenido de Isoterma de Freundlich: <http://quimica.laguia2000.com/conceptos-basicos/isoterma-de-freundlich>