

Capacidad adsortiva del carbón activado preparado a partir del bagazo de la caña de azúcar para la adsorción de fenol, 2-clorofenol, 2-nitrofenol y 2,4-dimetilfenol

Jefferson Contreras^{1,2}, Heberto Fuenmayor^{1,2}, Marinela Colina², Altamira Díaz¹, Nola Fernández¹, María Josefina Pérez de Scott³ y Gilberto Colina^{1*}

¹Departamento de Ingeniería Sanitaria y Ambiental (DISA), Facultad de Ingeniería.

²Laboratorio de Química Ambiental, Departamento de Química, Facultad Experimental de Ciencias. Universidad del Zulia. Maracaibo, Apartado Postal 526, Zulia, Venezuela. ³Escuela de Química, Universidad Central de Venezuela (UCV).

Recibido: 09-03-07 Aceptado: 30-01-08

Resumen

Se estudió la capacidad adsortiva del carbón activado obtenido a partir del bagazo de la caña de azúcar (CAB), utilizando una mezcla constituida por fenol, 2-clorofenol, 2-nitrofenol y 2,4-dimetilfenol. El carbón fue obtenido mediante un proceso de activación química del precursor con H_3PO_4 al 40% p/p y una temperatura de 500°C. La caracterización del adsorbente consistió en un análisis fisicoquímico (densidad aparente, contenido de cenizas y contenido de humedad) según las normas ASTM, así como también en la determinación de la superficie específica, siguiendo el método convencional de Brunauer-Emmett-Teller (BET), con isotermas de nitrógeno a 77 K, volumen total de poros, volúmenes de microporos y mesoporos, además de la difracción de rayos X. Se utilizó el carbón activado comercial Norit-A (CAC) como patrón de referencia. Las áreas superficiales específicas S_{BET} para el CAB y el CAC fueron 1293 m²/g y 794 m²/g, respectivamente. Se realizaron ensayos de adsorción en fase líquida a diferentes condiciones de pH y concentraciones. Los datos experimentales de las isotermas fueron ajustados a los modelos de Langmuir y Freundlich, y este último resultó con una mejor correlación lineal. En la adsorción de los compuestos fenólicos sobre el CAB a diferentes pH, se encontró que el pH óptimo de adsorción, según valores de K_F , fueron pH= 3,0 para el 2-clorofenol, pH = 4,5 para el 2,4-dimetilfenol, mientras que el pH para el 2-nitrofenol y el fenol fue de 6,5.

Palabras clave: Carbón activado, bagazo de caña de azúcar, compuestos fenólicos, activación química, adsorción.

Adsorptive capacity of activated carbon derived from sugar cane bagasse for the adsorption of phenol, 2-chlorophenol, 2-nitrophenol and 2,4-dimetilphenol

Abstract

The adsorptive capacity of activated carbon derived from sugar cane bagasse (CAB) was studied using a mixture represented by phenol, 2-chlorophenol, 2-nitrophenol and 2,4-dimetilphenol. This carbon was obtained by a chemical activation process from precursor with H_3PO_4

* Autor para la correspondencia. E-mail: gicolina@hotmail.com.

at 40% w/w and temperature at 500°C. The adsorbent characterization consisted on a physico-chemical analysis (apparent density, ashes content and humidity content) according to the ASTM norms, as well as the determination of the specific surface area according to the conventional method of Brunauer-Emmett-Teller (BET) with nitrogen isotherms at 77 K, total pores volume, micropores and mesopores volumes besides Ray-X diffraction. The specific surfaces areas S_{BET} for the CAB and the CAC were 1293 and 794 m²/g, respectively. The liquid-phase adsorption analyses were carried out with different pH and concentration conditions. The experimental isotherms data were fitted to Langmuir and Freundlich mathematical models, being the Freundlich model better linear correlation than Langmuir model. In the adsorption of phenolic compounds at different pH onto the CAB according to K_f values, it was found that the optimum adsorption pH was 3.0 for 2-chlorophenol, 4.5 for 2,4-dimetilphenol while 2-nitrophenol and phenol was 6.5.

Key words: Activated carbon, sugar cane bagasse, phenolic compounds, chemical activation, adsorption.

Introducción

Los compuestos fenólicos son un grupo de contaminantes orgánicos (1) que están presentes en el ambiente acuático debido a su amplio uso industrial. Estos compuestos son generados en la producción de plásticos, drogas, blanqueo de pulpa y papel, pesticidas, antioxidantes y por la industria petroquímica (2-3).

La oxidación química, la coagulación, la extracción con solventes y la adsorción se han propuesto como posibles métodos de tratamiento (4). De todos los métodos mencionados, la adsorción aparece como el mejor prospecto para el tratamiento general de efluentes cargados con fenoles, especialmente con concentraciones moderadas y bajas. Los carbones activados han sido los adsorbentes más ampliamente utilizados debido a su buena capacidad para adsorber materia orgánica (5-8). Los carbones activados son materiales complejos y heterogéneos con características adsortivas únicas influenciadas, principalmente, por la estructura del poro, el área superficial y la estructura química de la superficie (9).

Materiales lignocelulósicos, tales como cáscaras de frutas, aserrín de madera y bagazo de caña de azúcar son muy buenos precursores para la producción de carbones ac-

tivados (10,11). En el sentido de la protección ambiental, ha existido un incremento en la tendencia de desarrollar la producción de carbones activados a partir de estos desechos agrícolas.

Sin embargo, la obtención de carbones activados a partir del bagazo de la caña de azúcar no ha sido exhaustivamente investigada. En diversos estudios publicados, su preparación se enfoca en los procesos de activación física o activación química, utilizando cloruro de zinc o ácidos inorgánicos como agentes activantes, durante tiempos prolongados de tratamiento térmico, generalmente entre 3 horas y 10 horas (11, 12). A pesar del empleo de estas condiciones severas, en algunos casos no se han alcanzado altas capacidades de adsorción. En particular, el proceso de activación química de residuos biomásicos, que emplea ácido fosfórico como agente activante para la obtención de carbones activados, tiene varias ventajas con respecto al proceso de activación física, ya que involucra una única etapa de tratamiento térmico, requiere temperaturas considerablemente menores, permite una eficiente recuperación del ácido mediante una extracción multietapas y se alcanzan mayores rendimientos y capacidades de adsorción, disminuyendo los costos del proceso (13).

Las técnicas analíticas usadas en la determinación de los fenoles son, principalmente, la cromatografía líquida de alta resolución (HPLC) y la electroforesis capilar (CE), en combinación con detección ultravioleta (UV) y arreglo de diodos (DAD), detección de fluorescencia, detección electroquímica o detección de espectroscopia de masas. También pueden determinarse por la cromatografía gaseosa (GC), usualmente después de una derivatización del fenol, utilizando detección de ionización en llama (FID) o detección por captura de electrones (ECD) (1-3, 14, 15).

El propósito de este trabajo es evaluar la capacidad de adsorción de una mezcla de fenol, 2-clorofenol, 2-nitrofenol y 2,4-dimetilfenol sobre el carbón activado, obtenido a partir del bagazo de la caña de azúcar a través de la activación química con ácido fosfórico.

Materiales y Métodos

Materiales

Adsorbatos

Se utilizaron cuatro compuestos fenólicos: fenol, 2-clorofenol, 2-nitrofenol y 2,4-dimetilfenol (Merck, Boston, Mass). Se seleccionaron para este estudio porque representan compuestos tóxicos y contaminantes comunes que generalmente están presentes en el agua potable y en efluentes industriales. Otra razón para su selección fueron las diferencias existentes en sus estructuras moleculares. Las moléculas de fenol, 2-clorofenol y 2-nitrofenol son planas, mientras que la molécula de 2,4-dimetilfenol es tridimensional. Los tamaños aproximados de las moléculas de fenol, 2-clorofenol, 2-nitrofenol y 2,4-dimetilfenol son: 5,79 Å x 4,32 Å; 5,79 Å x 4,86 Å; 6,08 Å x 5,78 Å; y 6,63 Å x 5,32 Å x 1,81 Å, respectivamente. Estos valores se calcularon mediante un *software* (Advanced Chemistry Development, ACDLabs, 5.0 software, Toronto, Canadá).

Adsorbentes

Se utilizó un carbón activado en polvo preparado a partir del bagazo de la caña de azúcar. El bagazo utilizado fue recolectado de los desechos generados al extraer el jugo de la caña de azúcar en un comercio de la localidad del municipio Santa Cruz de Mara, en el estado Zulia, Venezuela. Esta caña fue cultivada en una central azucarera situada en el estado Trujillo, Venezuela. La preparación del carbón activado a partir de este precursor fue llevada a cabo por medio de la activación química con una solución de ácido fosfórico y fue denominado CAB. También se utilizó un carbón activado comercial en polvo (Norit-A) para la comparación de algunas propiedades, el cual fue denominado CAC. Antes de realizar el análisis, ambos carbones se lavaron con agua desionizada y se secaron en un horno a 110°C por espacio de dos días para remover la humedad presente; posteriormente se colocaron en un desecador hasta el día de su utilización.

Métodos

Preparación del carbón activado

Se pesaron 50 g del bagazo de la caña de azúcar fresco, previamente molido y tamizado (partículas < 180 µm), se colocaron en un recipiente de vidrio y se les adicionó 150 mL de solución de ácido fosfórico al 40% p/p hasta obtener una pasta de suave consistencia. El producto obtenido se dejó en contacto durante toda la noche. Posteriormente se pirolizó en una mufla calentada eléctricamente a una temperatura de 500°C alrededor de una hora. Transcurrido este tiempo, el carbón activado obtenido fue lavado con suficiente agua caliente (entre 70°C y 80°C) y solución alcalina (hidróxido de sodio) hasta ajustar su pH entre 6,5 y 7,0.

Caracterización del carbón activado

La determinación de algunas propiedades fisicoquímicas, tales como densidad aparente, contenido de cenizas y contenido de humedad, se realizaron bajo las normas ASTM. Las isotermas de adsorción-desor-

ción a 77 K, tanto para el CAB como para el CAC, se llevaron a cabo en un sortómetro Micromeritics, modelo 2135, después de un período de secado de 2 horas a una temperatura de 200°C. La superficie específica S_{BET} fue determinada de los datos de la isoterma de adsorción de nitrógeno; el volumen total de poro V_p se calculó a partir del máximo volumen de nitrógeno adsorbido a la máxima presión relativa (0,95); el volumen de microporo V_{micro} se determinó a partir de la ecuación de Dubinin-Radushkevich; el volumen de mesoporo V_{meso} se calculó a partir de la diferencia entre V_p y el V_{micro} ; y el diámetro de poro promedio d_p se calculó a partir de $4V_i/S_{BET}$. Para el estudio de la estructura de la superficie del carbón activado se utilizó un difractómetro de rayos X marca Philips, modelo PW1840, usando una lámpara de Cu a una $\lambda = 1,54056 \text{ \AA}$, tensión del generador de 40 KV, corriente del generador de 25 mA, ángulo inicial de $100^\circ 2\theta$, ángulo final $80^\circ 2\theta$, velocidad de barrido de $0,02^\circ 2\theta/\text{seg}$ y tamaño de paso de $0,02^\circ 2\theta$.

Procedimiento analítico

Las concentraciones iniciales y finales de los diferentes fenoles fueron determinadas por cromatografía líquida de alta resolución (HPLC), utilizando un cromatógrafo marca Hewlett Packard, modelo 1050, equipado con un inyector de 6 puertos manual, una columna Hewlett Packard Spherisorb ODS- C_{18} de $5 \mu\text{m}$ y $125 \times 10 \text{ mm}$ de diámetro interno y un detector de arreglo de diodos (DAD), modelo 1100. La separación cromatográfica de los fenoles se realizó en modo isocrático con una solución compuesta por 70:30:5 agua-acetonitrilo-isopropanol, con una longitud de onda óptima de 270 nm para el fenol y 279 nm para el 2-clorofenol, 2-nitrofenol y 2,4-dimetilfenol. Los tiempos de retención fueron 2,15 min para el fenol; 3,30 min para el 2-clorofenol; 4,01 min para el 2-nitrofenol y 4,64 min para el 2,4-dimetilfenol.

Pruebas de adsorción

Los estudios de adsorción de los distintos fenoles fueron ejecutados a 25°C, con agitación constante de 100 rpm, en porciones de 100 mL de la solución contenidas en un frasco de vidrio de 250 mL con aproximadamente 100 mg de CAB. Para los estudios de equilibrio, las concentraciones iniciales estuvieron en un rango de 5 mg/L a 100 mg/L y los experimentos se ejecutaron en una hora, tiempo suficiente para alcanzar el equilibrio sólido-líquido. El CAB fue removido de la solución por filtración de la solución sobre papel de filtro Whatman N° 42. A las soluciones filtradas posteriormente se les midió la cantidad de fenoles a través del HPLC-UV.

Resultados y Discusión

Caracterización del adsorbente y propiedades fisicoquímicas

El proceso de conversión del bagazo de la caña de azúcar a carbón activado por el método de la activación química con una solución de ácido fosfórico al 40% p/p y a una temperatura de pirólisis de 500°C arrojó un rendimiento del 37%, valor cercano al obtenido por Basso y col. (11), el cual fue de 40% para la obtención de carbones activados en similares condiciones.

El análisis de las características fisicoquímicas tanto de los carbones activados como del precursor utilizado se muestran en la Tabla 1.

El contenido de cenizas del bagazo crudo es bajo, lo que justifica su uso para la preparación de carbones activados (11, 12). Este valor se incrementó en el CAB como consecuencia del proceso de activación al que fue sometido el precursor para su posterior conversión a carbón activado. La variación en el contenido de cenizas se debe al incremento en la cantidad de compuestos inorgánicos formados por la adición del agente activante (H_3PO_4) y por el aumento de la temperatura

Tabla 1
Características fisicoquímicas del bagazo de la caña de azúcar y de los carbones activados preparado y comercial

Muestras	Densidad aparente (g/mL)	Cenizas (%)	Humedad (%)
Bagazo (crudo)	0,1582	3,9	9,4
CAB	0,3072	17,5	2,7
CAC	0,3870	8,3	4,2

CAB: carbón activado del bagazo de caña de azúcar. CAC: carbón activado comercial.

del tratamiento térmico (13). Así mismo, el CAB mostró un valor de humedad mucho más bajo que el precursor de donde proviene, debido al proceso de activación al cual fue expuesto, en el que, generalmente, las moléculas de agua son evaporadas.

En la Figura 1 se observan los difractogramas de rayos X de muestras de carbón activado comercial (9) y de la muestra de CAB.

En la Figura 1(b) el difractograma indica una forma de carbón amorfo típico que es comparado con los difractogramas mostrados en la Figura 1(a) que presentan condiciones similares. Todos ellos muestran dos bandas asimétricas correspondientes a $2\theta \approx 25^\circ$ y $2\theta \approx 45^\circ$, las cuales pueden ser asignadas al grafito desordenado en el plano 002 y en el plano 10, respectivamente (9,16).

En la Figura 2 se ilustran las isotermas de adsorción de nitrógeno a 77 K obtenidas para el carbón activado preparado CAB y para el carbón activado comercial CAC. Los volúmenes de nitrógeno adsorbidos son considerablemente mayores para la muestra de CAB que para la muestra de CAC en todo el rango de presiones relativas. Ambas isotermas de adsorción son consideradas del tipo II, según la clasificación IUPAC, indicando la existencia de poros más grandes (mesoporos y macroporos), donde la condensación capilar toma lugar (17).

En la Tabla 2 se muestran los valores de superficie específica S_{BET} y la estructura porosa de los carbones activados.

El CAB presentó valores de S_{BET} y V_t mayores en comparación con los obtenidos para el CAC. De acuerdo con los valores de d_p obtenidos, estos pueden clasificarse como carbones con alta proporción de mesoporos, ya que los valores se encuentran dentro del rango establecido por la IUPAC, el cual es $20 < d_p < 500 \text{ \AA}$ (9).

Como puede observarse en la Figura 3, hay una significativa microporosidad, ya que hay una gran cantidad de nitrógeno adsorbido a bajas presiones relativas. La presencia de histéresis y un incremento en la cantidad de nitrógeno adsorbido a altas presiones relativas revelan mesoporosidad y macroporosidad (18).

Adsorción de los solutos

La cantidad de soluto adsorbido sobre el carbón activado CAB fue calculado de acuerdo a la siguiente ecuación:

$$q = \frac{(C_0 - C_e)}{m} \times V \quad [1]$$

donde q es la cantidad de adsorbato adsorbido (mg/g), C_0 es la concentración inicial de la solución (mg/L), C_e es la concentración en el equilibrio de la fase líquida (mg/L), m es el peso del adsorbente (g) y V es el volumen de la solución.

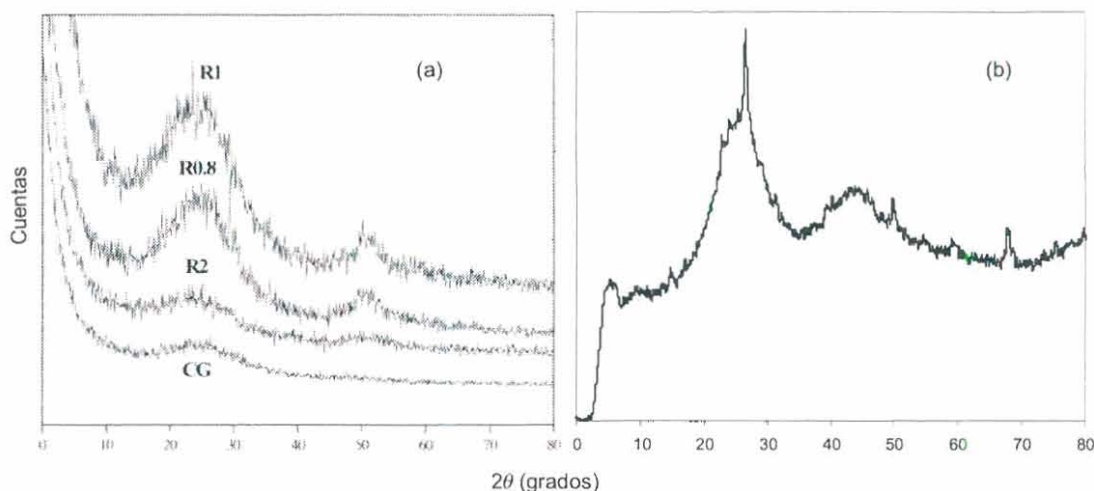


Figura 1. Difractogramas de rayos-X. (a) Carbones activados comerciales (R1, R0.8, R2 y CG). (b) Muestra de carbón activado preparado a 500°C (CAB).

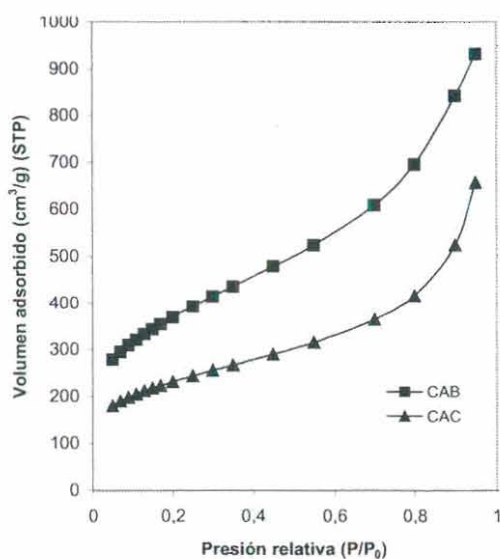


Figura 2. Isothermas de adsorción de las muestras de carbón activado CAB y CAC.

Básicamente, una isoterma de adsorción es importante porque describe cómo los adsorbatos interactúan con los adsorbentes. Las ecuaciones de adsorción de Freundlich y Langmuir fueron aplicadas a los datos de las isothermas de todos los fenoles a diferentes pH para el carbón activado preparado (CAB). Los datos experimentales fueron ajustados a la ecuación de Freundlich:

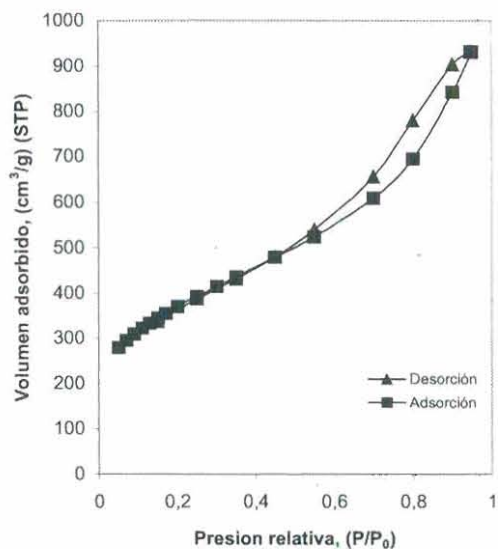


Figura 3. Isotherma de adsorción-desorción de la muestra de CAB.

$$q = K_F C_e^{1/n} \quad [2]$$

donde q es la cantidad de adsorbato adsorbido (mg/g), K_F es la constante de Freundlich que indica la capacidad de adsorción (L/g), C_e es la concentración en el equilibrio de la fase líquida (mg/L) y n es la constante de heterogeneidad de los sitios de energía. La forma lineal de la ecuación es la siguiente:

Tabla 2
Área superficial específica y estructura porosa de las muestras de carbón activado CAB y CAC.

Muestras	S _{BET} (m ² /g)	V _t (cm ³ /g)	V _{meso} (cm ³ /g)	V _{micro} (cm ³ /g)	d _p (Å)
CAB	1293	1,440	1,386	0,054	44,4
CAC	794	1,016	0,942	0,074	51,2

S_{BET}: área superficial específica; V_t: volumen total de poro; V_{meso}: volumen de mesoporo; V_{micro}: volumen de microporo; d_p: diámetro promedio de poro; CAB: carbón activado del bagazo de caña de azúcar; CAC: carbón activado comercial.

$$\log q = 1/n \log C_e + \log K_f \quad [3]$$

La isoterma de Freundlich puede ser graficada a partir de la ecuación 3 en donde la pendiente de la recta equivale a $1/n$ y el intercepto, al valor de K_f .

Los datos experimentales también fueron ajustados al modelo de Langmuir.

$$q = \frac{bK_e C_e}{1 + K_e C_e} \quad [4]$$

donde q es la cantidad de adsorbato adsorbido (mg/g). K_e es la constante de equilibrio de Langmuir (L/mg), b es la constante de la capacidad de adsorción de la monocapa (mg/g) y C_e es la concentración en el equilibrio de la fase líquida (mg/L). La forma lineal de la ecuación es la siguiente:

$$\frac{1}{q} = \frac{1}{bK_e C_e} + \frac{1}{b} \quad [5]$$

La isoterma de Langmuir puede ser graficada a partir de la ecuación 5 en donde la pendiente de la recta equivale a $1/bK_e C_e$ y el intercepto, al valor de b .

Los resultados obtenidos en la aplicación de los modelos matemáticos señalados anteriormente a los datos de isothermas experimentales a diferentes pH se muestran en la Tabla 3.

Los coeficientes de correlación r obtenidos para el ajuste de Freundlich mostraron mejor linealidad que los obtenidos para el ajuste de Langmuir; como consecuencia, este modelo se correlaciona de manera satis-

factoria con el conjunto de datos obtenidos experimentalmente. Todos los valores de n son mayores que la unidad. Esto muestra una adsorción multicapa favorable para la mayoría de los fenoles e indica la afinidad de los adsorbatos con el carbón activado (19).

Las isothermas de Freundlich no representan del todo el proceso de adsorción. Aunque los puntos experimentales comenzaron fuera de los límites, las isothermas de Freundlich obtenidas permiten estimar que la capacidad de equilibrio podría incrementarse proporcionalmente con el aumento en la concentración en la fase líquida (20).

El hecho de que las isothermas de Freundlich no expliquen del todo el proceso de adsorción se debe a que las concentraciones de partida son muy elevadas (21). Para todos los compuestos, las isothermas de Freundlich sobreestiman la cantidad adsorbida a altas concentraciones de compuestos fenólicos en la solución. Puesto que el modelo de Freundlich no impone algún requisito que en el fondo se acerque a un valor constante correspondiente a una monocapa completa cuando el valor de C_e es incrementado, el fallo de esta ecuación fue esperado a altas concentraciones del adsorbato (21).

Las isothermas ajustadas al modelo de Freundlich se muestran en la Figura 4. Los puntos representan los datos obtenidos experimentalmente, mientras que las líneas continuas representan el conjunto de datos ajustados al modelo de Freundlich.

Todas las isothermas mostraron la forma tipo L, de acuerdo con la clasificación de Giles. La forma L de las isothermas indica que

Tabla 3
 Datos de isoterma obtenidos experimentalmente y ajustados a los modelos de Freundlich y Langmuir

Adsorbatos	pH	Freundlich			Langmuir		
		K_F , L/g	$1/n$	r	K , L/mg	b , mg/g	r
Fenol	3,0	1,491	0,912	0,9996	0,009	156,250	0,9998
2-clorofenol		15,996	0,411	0,9910	3,535	28,571	0,9519
2-nitrofenol		8,519	0,636	0,9848	0,166	63,694	0,9950
2,4-dimetilfenol		11,087	0,563	0,9991	0,571	40,984	0,9881
Fenol	4,5	1,728	0,872	0,9974	0,004	333,333	0,9966
2-clorofenol		15,885	0,418	0,9943	2,716	31,746	0,9692
2-nitrofenol		10,466	0,567	0,9811	0,452	42,194	0,9830
2,4-dimetilfenol		11,855	0,541	0,9985	0,441	40,486	0,9892
Fenol	6,5	1,760	0,879	0,9995	0,021	84,034	0,9987
2-clorofenol		15,740	0,389	0,9916	5,118	28,736	0,9653
2-nitrofenol		10,637	0,581	0,9797	0,191	70,922	0,9965
2,4-dimetilfenol		11,585	0,564	0,9998	0,677	39,683	0,9877

no hay una competencia fuerte entre el solvente, en este caso agua, y el adsorbato por ocupar los sitios de la superficie del adsorbente. La débil interacción del agua con el plano basal del carbón y la débil energía de enlace del hidrógeno con los grupos que contienen átomos de oxígeno de la superficie del carbón explican esta tendencia. En este caso, el eje longitudinal de las moléculas adsorbidas es paralelo a la superficie del adsorbente (22).

De acuerdo con los resultados obtenidos, las características de adsorción de los fenoles sobre el carbón activado pueden ser interpretadas en términos de aspectos físicos y químicos. Es conocido que el tamaño de poro del adsorbente y el tamaño de la molécula pueden ser considerados cuando se explica el proceso de adsorción. El diámetro de la molécula puede ser estimado de las longitudes de enlace y el radio atómico de Van der Waals. Los diámetros de las moléculas (d_{mol}) de los diferentes compuestos fenólicos fueron calculados en un rango de apro-

ximadamente 5,7 Å a 6,6 Å. El valor promedio del diámetro de poro del carbón activado CAB es aproximadamente unas 6 a 7 veces mayor que los calculados para cada uno de los adsorbatos, lo que indica que es muy fácil para los fenoles difundirse hacia el interior de los poros del carbón activado y ser adsorbidos sobre la superficie interna del carbón activado. En otras palabras, el rango del diámetro de poro del adsorbente es apropiado para adsorber estos fenoles y, por lo tanto, en este caso no es un factor influyente en el proceso de adsorción.

Aunque la tendencia en la adsorción sobre los carbones activados no puede ser explicada únicamente por propiedades físicas tales como el área superficial o el diámetro de poro, se ha reportado en la literatura que la adsorción de fenoles sobre carbones activados puede estar controlada por interacciones físicas (fuerzas de Van der Waals), fuerzas electrostáticas y fuerzas dispersivas. Los mecanismos propuestos implican la formación de un complejo donador-aceptor,

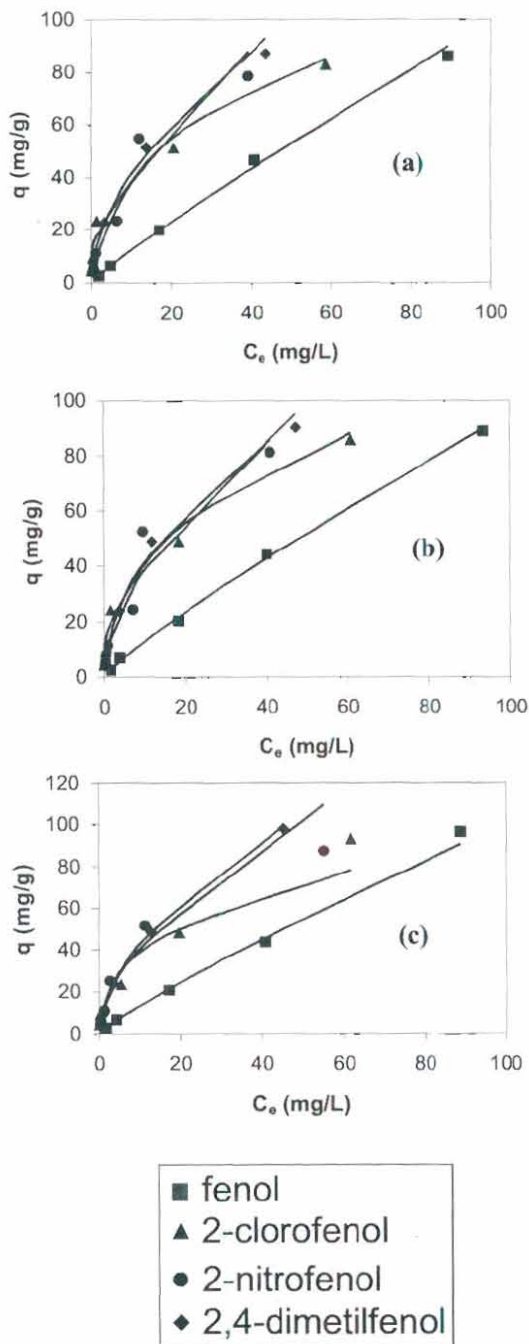


Figura 4. Isothermas de adsorción del CAB para la adsorción de los diferentes fenoles estudiados. (a) pH= 3,0; (b) pH= 4,5; y (c) pH= 6,5.

donde los grupos que contienen átomos de oxígeno y los grupos carbonílicos de la superficie del carbón actúan como donadores y los anillos aromáticos de los fenoles, como aceptores. El otro mecanismo de adsorción de fenoles indica que el proceso puede estar controlado por interacciones dispersivas entre los electrones del anillo aromático de los adsorbatos y los electrones de la superficie del carbón activado (17).

Según los valores de K_f mostrados en la Tabla 3, el orden general de adsorción de los compuestos fenólicos a diferentes pH es el siguiente: 2-clorofenol > 2,4-dimetilfenol > 2-nitrofenol > fenol, indicando que la capacidad de adsorción más alta es para el 2-clorofenol y la más baja, para el fenol.

Los cambios en la densidad electrónica en el anillo aromático por la presencia de grupos electrodonadores, tales como OH, CH₃, disminuyen la afinidad de estos adsorbatos por el carbón activado, ya que aumentan la densidad electrónica en el anillo aromático. Por el contrario, la presencia de grupos electroattractores, tales como NO₂, X = F, Cl, Br, aumentan la afinidad del adsorbato por el carbón activado, ya que disminuyen la densidad electrónica en el anillo aromático. Por lo tanto, la variación en la afinidad de los adsorbatos por los centros de adsorción del carbón activado se debe al efecto electrónico ejercido por aquellos grupos que se encuentran unidos al anillo aromático, que ocasionan un aumento o una disminución de las interacciones dispersivas que controlan el proceso de adsorción (9, 23-24).

En la evaluación de la adsorción de los fenoles a diferentes pH sobre los carbones activados, se encontró que el pH óptimo de adsorción, según valores de K_f , fueron pH= 3,0 para el 2-clorofenol, pH= 4,5 para el 2,4-dimetilfenol, mientras que el pH para el 2-nitrofenol y el fenol fue de 6,5.

Aproximadamente a un pH = 3,0 la adsorción de fenoles puede disminuir, ya que aumenta la adsorción de H⁺ en los sitios carbonílicos de la superficie del carbón activa-

do. Por otra parte, la disminución en la cantidad de fenoles adsorbidos a un pH > 6,5 es atribuida a dos factores: a la gran solubilidad del fenol disociado y al aumento en las fuerzas de repulsión entre la forma disociada del adsorbato y la superficie del carbón.

Las propiedades adsorptivas de una serie de compuestos fenólicos dado dependen de factores como pKa, solubilidad, posibles interacciones electrostáticas y efectos estéricos. La capacidad de adsorción de los compuestos fenólicos aumenta cuando se incrementa la hidrofobicidad de sus sustituyentes; estos grupos no están involucrados directamente en la interacción con la superficie del carbón activado, pero contribuyen a las características electrón-aceptor del anillo aromático del soluto (22).

Conclusiones

El carbón activado preparado a partir del bagazo de caña de azúcar presentó una alta área superficial y una estructura porosa adecuada para la adsorción de compuestos como fenol, 2-clorofenol, 2-nitrofenol y 2,4-dimetilfenol. Se optimizaron condiciones de pH y concentración para el proceso de adsorción de fenoles en soluciones acuosas sobre carbón activado obtenido a partir del bagazo de la caña de azúcar. Los datos obtenidos de las isotermas fueron ajustados a los modelos de Langmuir y Freundlich; este último resultó con una mejor correlación lineal de los datos obtenidos experimentalmente. De los valores de K_f obtenidos, se encontró que el orden de adsorción fue: 2-clorofenol > 2,4-dimetilfenol > 2-nitrofenol > fenol, y que el valor de pH óptimo para la adsorción de estos compuestos sobre los carbonos activados fue: pH= 3,0 para el 2-clorofenol, pH = 4,5 para el 2,4-dimetilfenol, mientras que el pH para el 2-nitrofenol y el fenol fue de 6,5.

Agradecimientos

Deseamos expresar nuestro agradecimiento al Consejo de Desarrollo Científico y Humanístico (CONDES) de la Universidad del Zulia (LUZ), por el financiamiento recibido para el desarrollo de este estudio a la Escuela de Química de la Universidad Central de Venezuela y al Laboratorio de Espectroscopia Molecular y Atómica (LEMA) de la Facultad Experimental de Ciencias de LUZ, por su valiosa colaboración en el trabajo de investigación.

Referencias Bibliográficas

- GONZÁLEZ T., PRAT M., ALPENDURADA M. *J Chromatogr A* 923(1): 45-52, 2001.
- ZHAO L., LEE J. *J Chromatogr A* 931(1): 95-105, 2001.
- RODRÍGUEZ I., LLOMPART M., CELA R. *J Chromatogr. A* 885(2): 291-92, 2000.
- JUANG S., WU F., TSENG R. *J Chem Eng Data* 41(3): 487-92, 1996.
- CATURLA F., MARTIN M. J., MOLINA S. M., RODRÍGUEZ R. F., TORREGROSA R. *J Colloid Inter Sci* 124(2): 528-34, 1988.
- DVORAK B., LAWLER D., SPEITEL G., JONES D., BADWAY D. *Water Environ Res* 65(7): 827-38, 1993.
- STREAT M., PATRICK J., PEREZ M. *Water Res* 29(2): 467-72, 1995.
- CHREN J., CHIEN Y. *Water Res* 37(10): 2347-56, 2003.
- JUNG M., AHN K., LEE Y., KIM K., RHEE J., PARK J., PAENG K. *Microchem J* 70(2): 123-31, 2001.
- GIRGIS B., KHALIL L., TAWFIK A. *J. Chem. Tech. Biotechnol.* 61(1): 87-92, 1994.
- BASSO M., CERELLA E., CUKIERMAN A. **Remoción de Cadmio (II) de soluciones acuosas mediante carbón activado preparado a partir de caña.** Universidad de Buenos Aires, Buenos Aires (Argentina), p. 4, 2001.
- BLANCO J., BONELLI P., CERRELLA E., CUKIERMAN A. *Ind Eng Chem. Res.* 39(11): 4166-72, 2000.

13. KHAIL L. **Adsorp Sci and Tech** 13(5): 317-25, 1996.
14. LACORTE S., FRAISSE D., BARCELÓ D. **J Chromatogr A** 857(1): 97-106, 1999.
15. MASQUÉ N., MARCÉ R., BORRULL F. **J Chromatogr A** 793(2): 257-63, 1998.
16. BISCOE J., WARREN B. **J Appl Phys** 13(8): 364-71, 1942.
17. ALVAREZ P., GARCIA J., BELTRAN F., MASA F., MEDINA F. **J Colloid and Interface Sci** 283(2): 503-12, 2005.
18. TANCREDI N., MEDERO N., MÖLLER F., PÍRIZ J., PLADA K., CORDERO T. **J Colloid and Interface Sci** 279(2): 357-63, 2004.
19. AYGÜN A., YENISOY K.S., DUMAN I. **Microporous and Mesoporous Materials** 66(2): 189-95, 2003.
20. ROOSTAEI N., TEZEL H. **J Environ Management** 70(2): 157-164, 2004.
21. SALAME I., BANDOSZ T. **J Colloid Interface Sci** 264(2): 307-12, 2003.
22. DABROWSKI A., PODKOSCIELNY P., HUBICKI Z., BARCZAK M. **Chemosphere** 58(8): 1049-70, 2005.
23. DENG X., YUE Y., GAO Z. **J Colloid Interface Sci** 192(2): 475-80, 1997.
24. ZHOU M., MARTIN G., TAHA S., SANT'ANNA F. **Water Res** 32(4): 1109-18, 1998.