

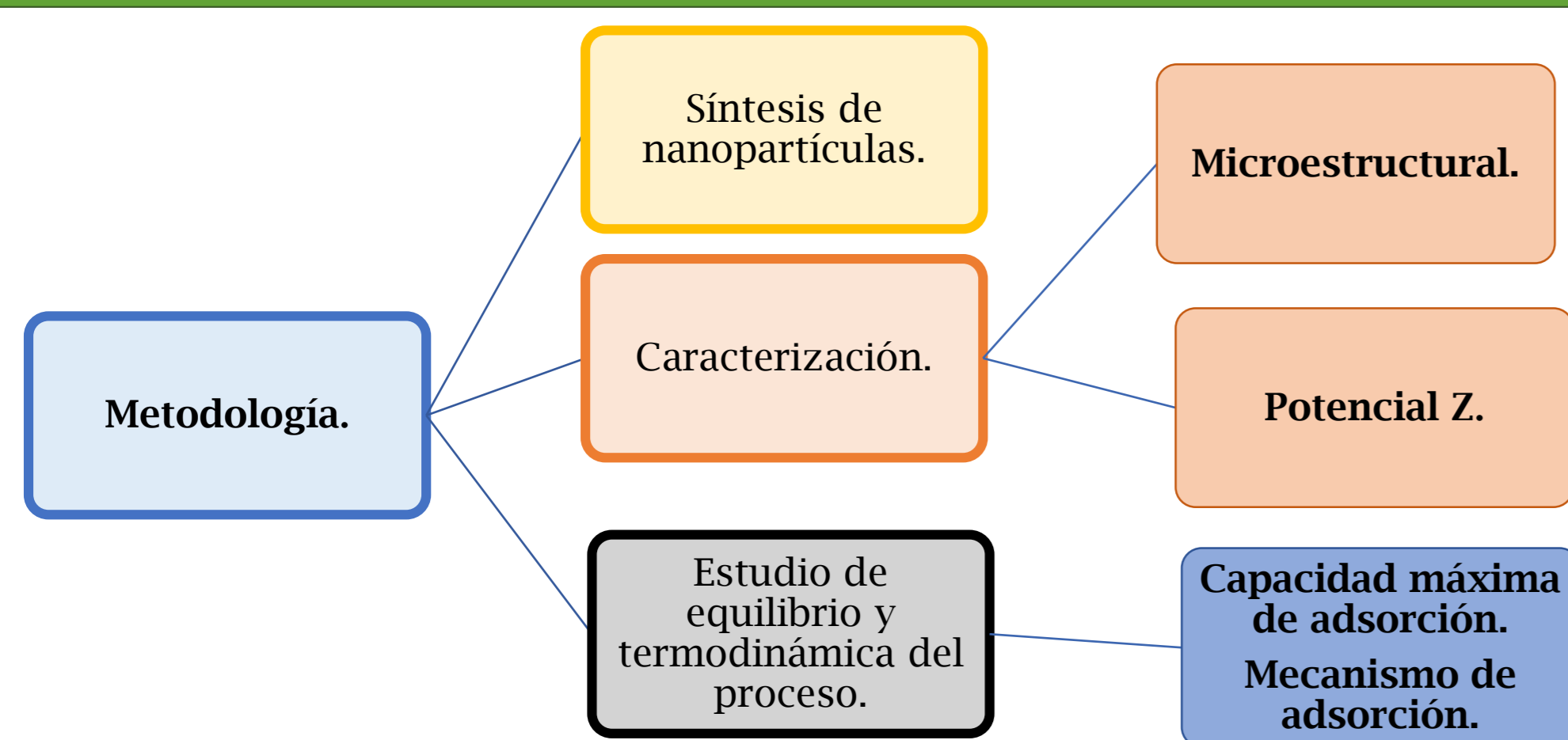
Estudio y desarrollo de nanopartículas base óxido de hierro con aluminio para la remoción simultánea de arsénico y flúor en agua.

Ing. Alberto Heiras Trevizo.
Directora de tesis: Dra. Patricia Amézaga Madrid.

Introducción.

En este trabajo se realizó la síntesis por Depósito Químico de vapor asistido por aerosol (AACVD) y caracterización microestructural de nanopartículas de magnetita dopada con aluminio, con dos relaciones de Fe:Al, con el fin de desarrollar un material nanoestructurado con propiedades adsorbentes, para la remoción de arsénico en sus dos especies (As^{+3} y As^{+5}) y flúor (F) simultáneamente. Se realizó el estudio de equilibrio mediante cinéticas de adsorción para determinar la concentración de el adsorbato que llega a la superficie del adsorbente y se llega al equilibrio, posteriormente se determina la capacidad de adsorción en el equilibrio y la termodinámica del proceso de adsorción, donde se establecieron algunos parámetros, los cuales ayudaron a determinar el proceso de adsorción por fisiorción por medio de los Isotermas de Langmuir, Freundlich, y Dubinin. Con estos resultados se determinó la capacidad de adsorción máxima de las nanopartículas de magnetita dopada con Al, para adsorber As^{+3} y As^{+5} [1][2].

Metodología.



Síntesis del nanomaterial por AACVD.

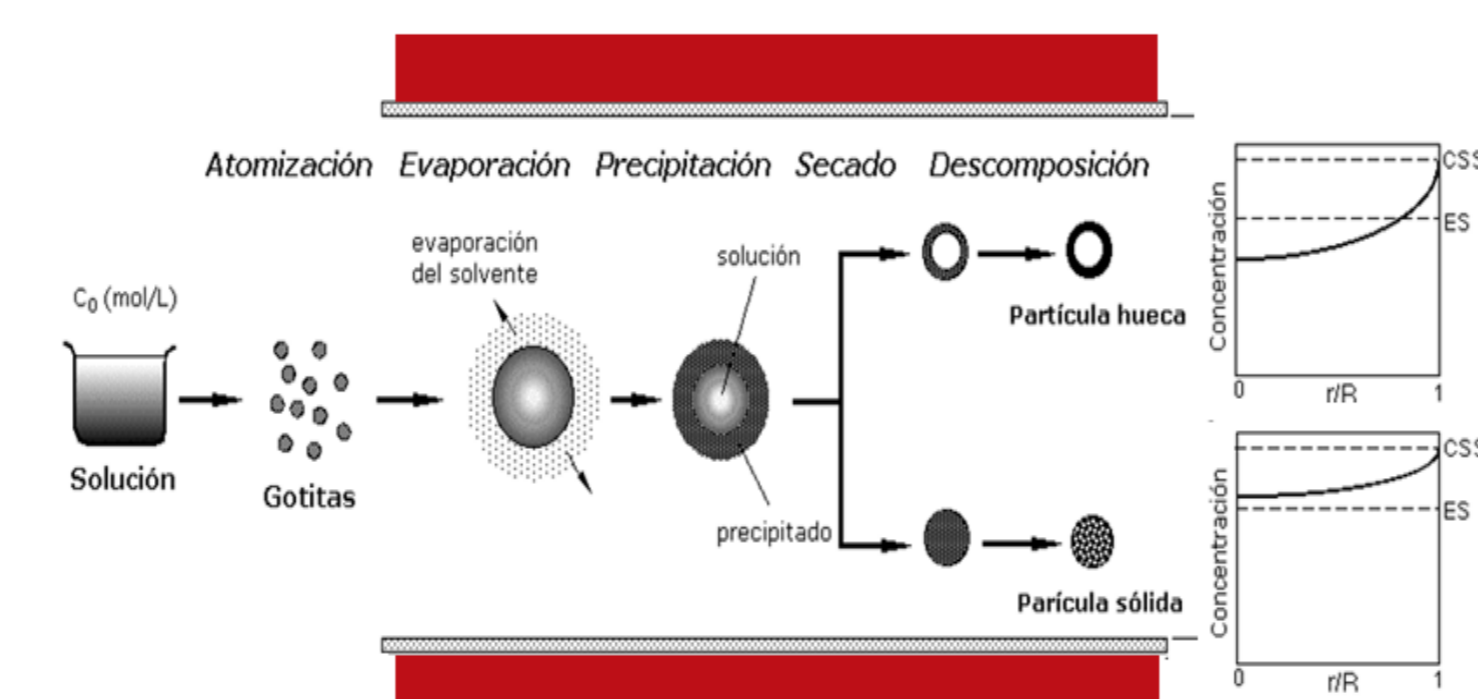


Figura 1. Esquema teórico de la evaporación de la gota, el cual explica la generación de nanopartículas huecas o sólidas [3].

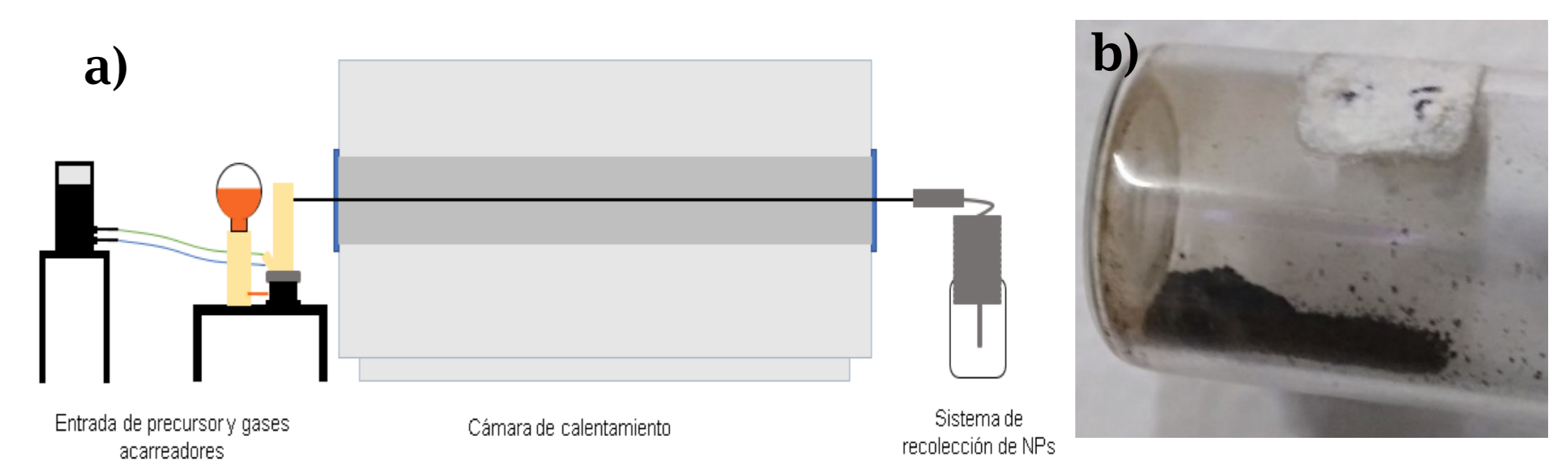


Figura 2(a-b). a) Esquema del sistema AACVD. Y b) Nanopartículas de magnetita dopadas con Al (relación 90:10).

Caracterización microestructural y propiedades.

Relación Fe:Al:

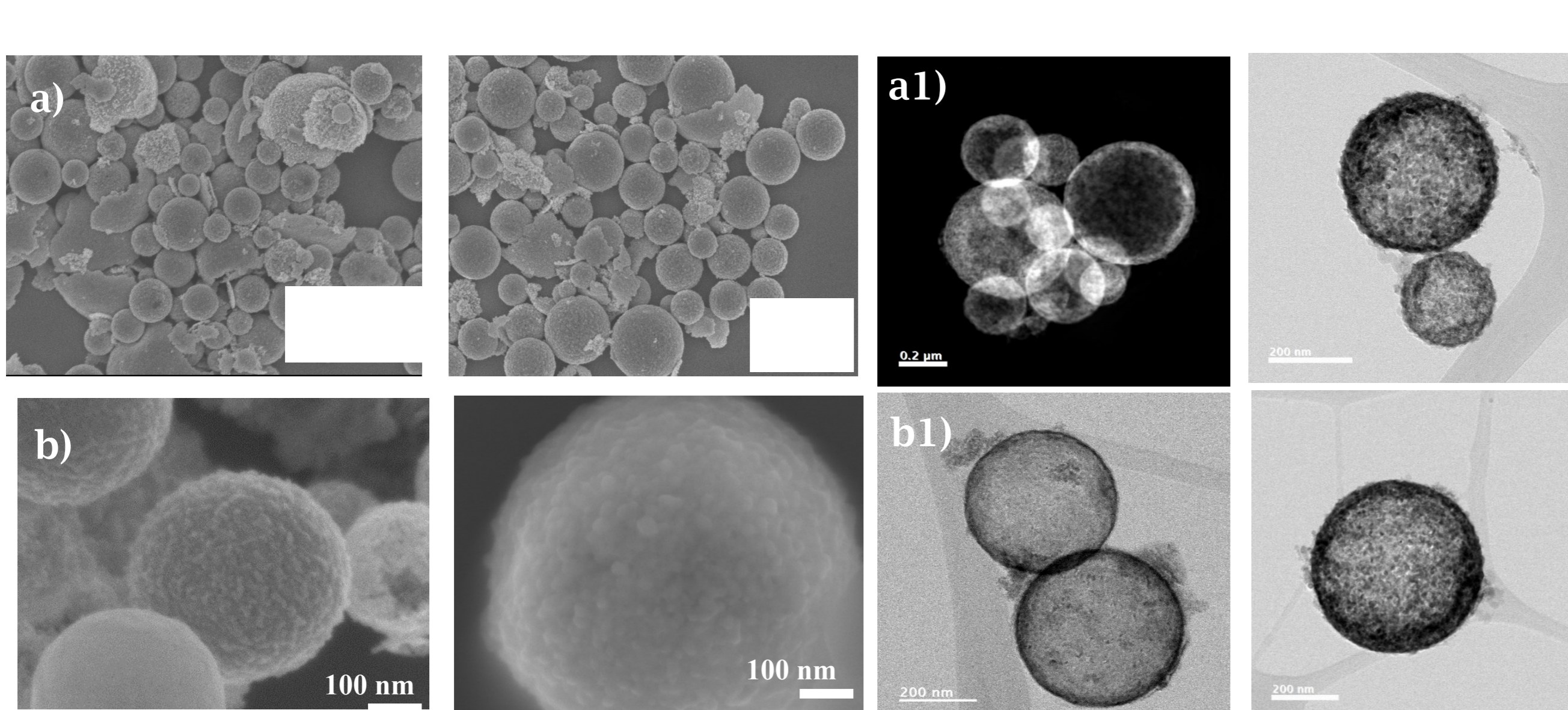


Figura 3(a-b). Micrografías de MEB-SE de las nanopartículas obtenidas a) relación 90:10 (Fe:Al) y b) relación 80:20 (Fe:Al) y Micrografías HR-MET de las nanopartículas a) relación 90:10 y b) relación 80:20.

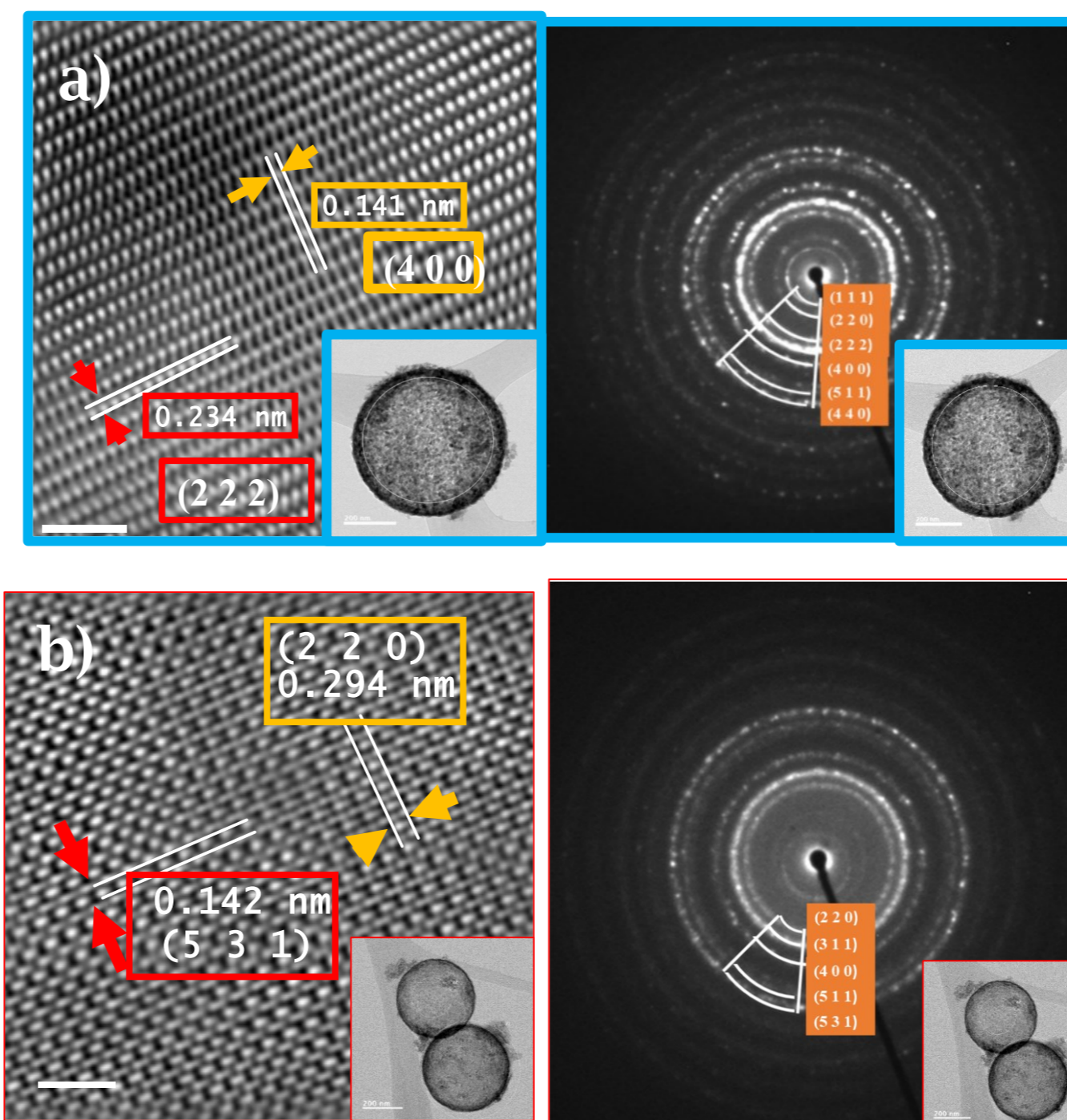


Figura 4(a-b). Patrón de difracción obtenido por STEM de las nanopartículas de magnetita dopadas con Al (relación a) 90:10 y b) 80:20 [4].

Tabla 1. Distancias Interplanares reales y calculadas de las nanopartículas de magnetita dopadas con Al (relación 90:10).

(h k l)	d_{real} (Å)	d_{calc} (Å)
(1 1 1)	4.847	4.842
(2 2 0)	2.968	2.967
(2 2 2)	2.424	2.479
(4 0 0)	2.09	2.081
(5 1 1)	1.616	1.654
(4 4 0)	1.484	1.476

Tabla 2. Distancias inter planares reales y calculadas para nanopartículas de magnetita dopada con aluminio relación 80:20.

(h k l)	d_{real} [PDF 00-077-1545] (Å)	d_{calc} (Å)
(2 2 0)	2.9688	2.9761
(3 1 1)	2.5318	2.5316
(4 0 0)	2.0992	2.1276
(5 1 1)	1.6160	1.6313
(5 3 1)	1.4193	1.4513

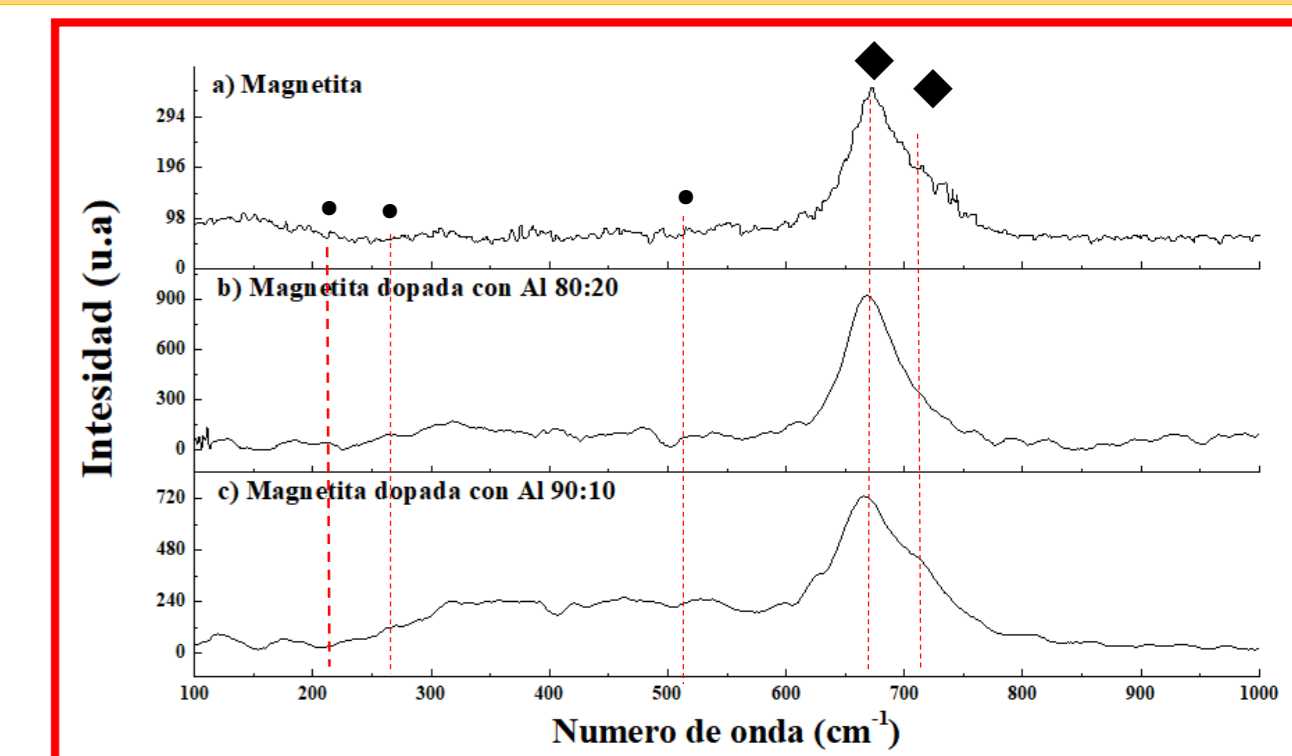
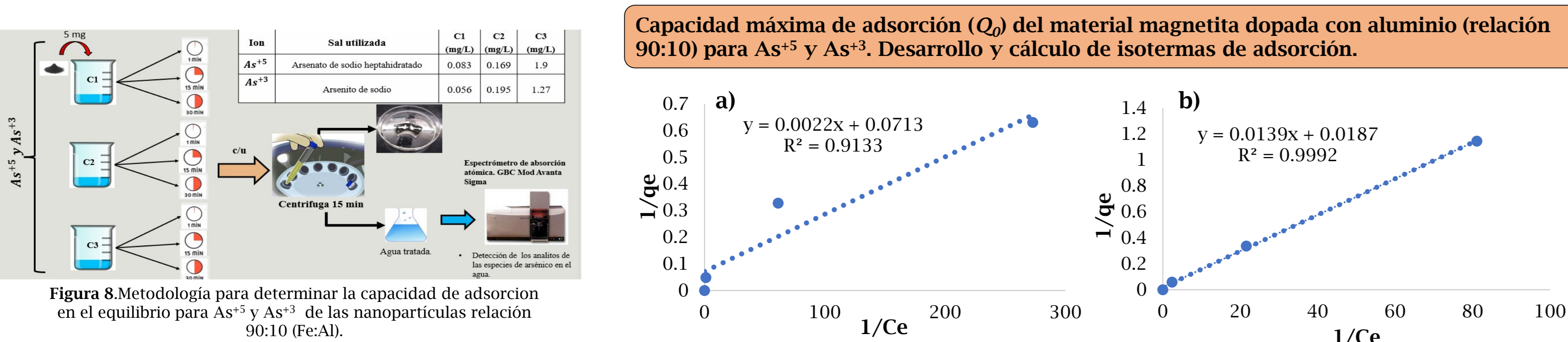


Figura 6 (a-c). Espectroscopia Raman. a) Magnetita pura, b) magnetita dopada con Al 80:20 y c) Magnetita dopada con Al 90:10.

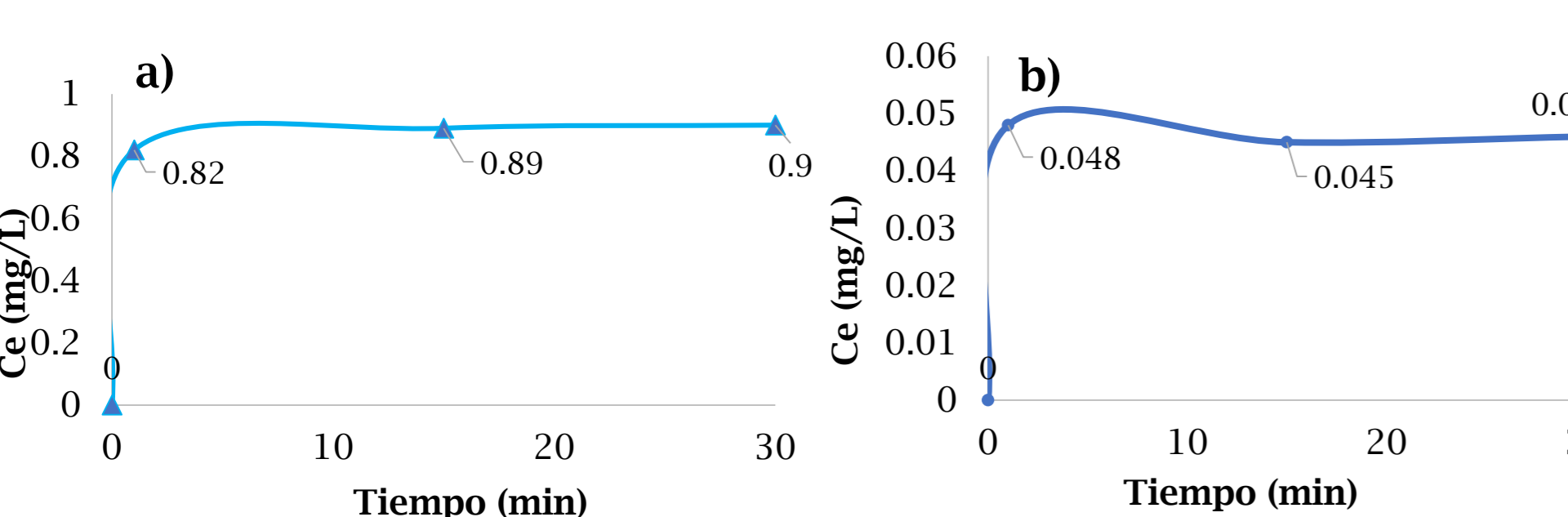
Nanopartículas de magnetita dopadas con aluminio (relación 90:10)				Material:	
Numero	mg	Potencial zeta (mV)	pH	Magnetita	Alumina
1A	5	31.521	7	>+80mV y <-80mV	>+20mV y <-20mV
1B	10	30.521	7	>+80mV y <-80mV	>+20mV y <-20mV
1C	5	32.962	4.11	>+80mV y <-80mV	>+20mV y <-20mV
1D	5	22.571	9.25	>+80mV y <-80mV	>+20mV y <-20mV

Figura 7. Potencial zeta de las nanopartículas de magnetita dopadas con Al (relación 90:10 y 80:20).

Estudio de equilibrio y termodinámica del proceso de adsorción para nanopartículas de magnetita dopada con aluminio relación 90:10 para As^{+5} y As^{+3} .



Estudio de equilibrio: Capacidad de adsorción en el equilibrio (q_e) del material magnetita dopada con aluminio (relación 90:10) para As^{+5} y As^{+3} .



$$q_{eAs^{+5}} = \frac{(C_i - C_e)V}{W} = \frac{(1.9 \frac{mg}{L} - 0.87 \frac{mg}{L}) 0.1[L]}{0.005 [g]} = 20.6 \frac{mg}{g}$$

$$q_{eAs^{+3}} = \frac{(C_i - C_e)V}{W} = \frac{(0.195 \frac{mg}{L} - 0.46 \frac{mg}{L}) 0.1[L]}{0.005 [g]} = 2.97 \frac{mg}{g}$$

Modelo de Langmuir		
Parámetros	As^{+5}	As^{+3}
Capacidad máxima de adsorción Q_0 ($\frac{mg}{g}$)	454.54	71.94
Constante de Langmuir K_L ($\frac{L}{mg}$)	0.030	0.74
Parámetro de homogeneidad R_L	0.94	0.87
R^2	0.91	0.99
Modelo de Freundlich		
Parámetro de heterogeneidad $1/n$	0.32	0.27
R^2	0.99	0.99
Modelo de Dubinin		
Constante de Langmuir K_D ($\frac{L}{mg}$)	0.013	0.026
R^2	0.94	0.98

Tabla 4. Termodinámica del proceso: Energía libre de Gibbs y Energía libre de adsorción para As^{+5} y As^{+3} .

Termodinámica del proceso		
Parámetros	As^{+5}	As^{+3}
Energía libre de Gibbs ΔG ($\frac{kJ}{mol}$)	-8.69	-0.72
Energía libre de adsorción E ($\frac{kJ}{mol}$)	6.06	4.31

Eficiencia de adsorción de las nanopartículas de magnetita dopada con aluminio relación 90:10 y 80:20 para la remoción de Flúor.

Tabla 5. Eficiencia de adsorción de las nanopartículas de magnetita dopada con aluminio relación 90:10 y 80:20 para la remoción de F

Adsorbente	Adsorbato	Cantidad (mg)	pH	Tiempo	C_0 F (mg/L)	C_0 As^{+5} (mg/L)	C_1 As^{+5} (mg/L)	%R (F)	%R (As^{+5})			
Magnetita dopada con aluminio (90:10)	F-	10	7	30	1.56	1.3572		13				
			5.5		1.9	1.89						
			6.5		1.9	1.89						
		F-	10	9	30	1.9	1.89		0			
				10		1.9	1.89					
				10	30	1.8	1.7836	0.056	0.056	2	0	
	F-/ As^{+5}	10	10	5.5	30	1.8	1.8	0.056	0.0224	0	60	
				6		1.79	1.79	0.056	0.051	0	9	
				9		1.84	1.84	0.056	0.056	0	0	
		F-/ As^{+5}	10	10	7	30	1.8	1.566	0.056	0.0006	13	99
					7	50	1.8	1.566	0.056	0.0011	13	98
					7	30	1.48	1.1544			22	
Magnetita dopada con aluminio (80:20)	F	10	7	30	1.56	1.248			20			
				30	1.56	1.0764			31			

C_0 = concentración inicial, C_1 = concentración final y %R= porcentaje de remoción.

Conclusiones.

- La capacidad máxima de adsorción de las nanopartículas de magnetita dopadas con aluminio (relación 90:10) fue de 454.54 mg de As^{+5} por cada gramo de nanopartículas, y de 71.94 mg de As^{+3} por cada gramo de nanopartículas.
- El porcentaje de remoción de flúor para las nanopartículas de magnetita dopadas con aluminio (relación 90:10) fue de un 17%, mientras que para las nanopartículas de magnetita dopadas con aluminio (relación 80:20) se logró un 30% de remoción.
- Para el material de magnetita dopada con aluminio (relación 90:10) se obtuvo un potencial zeta de 31.5mV, mientras que para el material de magnetita dopada con aluminio (80:20) se logró un potencial zeta de 47.5 mV, indicando que los dos nanomateriales al ser aplicados para un proceso de adsorción se comportan de manera estable y dispersa aunque se cambie el pH.
- La energía de adsorción calculada, se requiere para que se del proceso de adsorción de la energía libre de Gibbs fue de -6.54 kJ/mol para As^{+5} y -0.72 kJ/mol para As^{+3} indicando un proceso espontáneo, la energía libre de adsorción calculada fue de 6.06 y 4.31 kJ/mol para As^{+5} y As^{+3} respectivamente comprobando con estos resultados que el proceso de adsorción se da por fisiorción.

REFERENCIAS.

[1] B. E. Monárrez-Cordero, P. Amézaga-Madrid, L. Fuentes-Cobas, M. E. Montero-Cabrera, y M. Miki-Yoshida, "High and fast adsorption efficiency of simultaneous As^{+3} , As^{+5} and F by Al-doped magnetite synthesized via AACVD", *J. Alloys Compd.*, vol. 718, pp. 414-424, 2017.

[2] P. L. Smedley y D. G. Kinniburgh, "A review of the source, behaviour and distribution of arsenic in natural waters", *Appl. Geochemistry*, vol. 17, núm. 5, pp. 517-568, 2002.

[3] Wuled, T. Hata, F. Iskandar, M. Lunden, K. Okuyama, An experimental and modeling investigation of particle production by spray pyrolysis using a laminar flow aerosol, *Journal of Material Research*, 15, Issue 03,pp. 733-743, 1993.

[4] E. Johannsen, C. Hvingel, M. Aschan, y B. Bogstad, "Survey based estimation of consumption: spatial and seasonal aspects of cod predation on shrimp.", *NAFA SCR Document*, núm. 07/80, p. 17, 2019.

Agradecimientos.

Se agradece el apoyo en este trabajo a Pedro Pizá Ruiz, Karla Campos V., Carlos Ornelas Gutiérrez, Silvia Miranda, Alejandro Benavidez, Patricia Peregrino, Lilia Magdalena Bautista.