

Editor Científico

Yhors Alexander Ciro Monsalve

APROVECHAMIENTO DE RESIDUOS AGROINDUSTRIALES PARA LA BIORREMEDIACIÓN DE FÁRMACOS EN FUENTES HÍDRICAS



Cita este libro / Cite this book:

Ciro Monsalve, Y. A. (ed. científico). (2026). *Aprovechamiento de residuos agroindustriales para la biorremediación de fármacos en fuentes hídricas*. Cali, Colombia: Universidad Santiago de Cali. <https://doi.org/10.35985/9786287914049>

Palabras Clave / Keywords:

Adsorción, carbones activados, aguas contaminadas, desechos agroindustriales.

Adsorption, activated carbons, contaminated water, agro-industrial waste.

Contenido relacionado:

<https://www.usc.edu.co/investigaciones/>

APROVECHAMIENTO DE RESIDUOS AGROINDUSTRIALES PARA LA BIORREMEDIACIÓN DE FÁRMACOS EN FUENTES HÍDRICAS

*Valorization of Agro-industrial
Waste for the Bioremediation of Pharmaceuticals
in Water Sources*

Yhors Alexander Ciro Monsalve

Editor Científico



EDITORIAL

Aprovechamiento de residuos agroindustriales para la biorremediación de fármacos en fuentes hídricas /Yhors Alexander Ciro Monsalve. [Editor Científico]- Cali: Universidad Santiago de Cali; Facultad de ingeniería; Sello Editorial. 2025.

156 páginas: Tablas; Figuras; 24 cm Incluye Índice; Referencias Bibliográficas

ISBN Impreso: 978-628-7914-03-2

ISBN Digital: 978-628-7914-04-9

1. Marco teórico 2. Obtención de carbón activado a partir de bagazo de caña para descontaminación de tinidazol en aguas 3. Evaluación de la capacidad descontaminante in-vitro de las cáscaras de chontaduro en aguas contaminadas por ibuprofeno 4. Obtención de carbón activado a partir de cáscaras de mango y evaluación de su actividad descontaminante de ketoconazol en aguas. 5. Obtención de carbón activado a partir del desecho de cáscara de coco para la remoción in-vitro de fluconazol en aguas. 1. Yhors Alexander Ciro Monsalve. 2. Residuos sólidos. Universidad Santiago de Cali. Facultad de ingeniería

SCDD 634.773 C578

CO-CaUSC

IHMH /2026



Aprovechamiento de residuos agroindustriales para la biorremediación de fármacos en fuentes hídricas

© Universidad Santiago de Cali

© Editor científico: Yhors Alexander Ciro Monsalve

© Autores: Yhors Alexander Ciro Monsalve, Melisa Andrea Walteros, Marylin Urbano Montero, Betty Eliana García Becerra, Kevin Andrés Orozco, Alejandra Londoño Salamanca, Alexandra Coral Palacio y Laura Yineth Jara Sánchez.

1.ª Edición 50 ejemplares.

Cali, Colombia - 2026.

Fondo Editorial / Publishing Fund

Carlos Andrés Pérez Galindo
Rector

Anisbed Naranjo Rojas
Directora General de Investigaciones

Comité Editorial / Editorial Board

Anisbed Naranjo Rojas
Odín Ávila Rojas
Doris Lilia Andrade
Edgar Francisco Arcos
Florencio Arias Coronel
Jonathan Pelegrín
Héctor Cuevas Arenas
Liseth Suarez Osorio

Proceso de arbitraje doble ciego / "Double blind" peer-review

Recepción / Submission
Octubre (October) de 2024

Evaluación de contenidos / Peer-review outcome
Abril (April) de 2025

Correcciones de autor / Improved version submission
Julio (July) de 2025

Aprobación / Acceptance
Diciembre (December) de 2025



La editorial de la Universidad Santiago de Cali se adhiere a la filosofía de acceso abierto. Este libro está licenciado bajo los términos de la Atribución 4.0 de Creative Commons (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>), que permite el uso, el intercambio, adaptación, distribución y reproducción en cualquier medio o formato, siempre y cuando se dé crédito al autor o autores originales y a la fuente <https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>

Agradecimientos

A mis padres, abuelos y familiares que me han acompañado durante todo mi proceso de desarrollo personal y profesional.

A los estudiantes Melisa Andrea Walteros Ospina del programa de microbiología, Betty Eliana García, Marylin Urbano Montero, Kevin Andrés Orozco, Alejandra Londoño Salamanca, María Alexandra Coral Palacio y Laura Yineth Jara Sánchez del programa de Química Farmacéutica; por haberme dado el voto de confianza y acompañarlos en las actividades experimentales para el desarrollo del trabajo de grado. Gracias a su esfuerzo y dedicación fue posible tener los insumos suficientes para la escritura de este libro de investigación.

A la Universidad Santiago de Cali por proveer los equipos, instalaciones y recursos necesarios para el desarrollo de la parte experimental de los diferentes proyectos investigativos presentes en este documento.

A la Facultad de Ciencias Básicas de la Universidad Santiago de Cali por el voto de confianza depositado para afrontar los desafíos de la vida docente.

Al personal del Almacén de Laboratorios y del Laboratorio de Ciencias Básicas por el acompañamiento constante y su excelente disposición para atendernos.

A la Universidad de Antioquia, especialmente a los grupos de investigación DYFOMECA y GIRAB, representados por el PhD Jhon Jairo Rojas Camargo, quienes me encaminaron y nutrieron en el camino de la investigación.

Al estudiante Johan Stiven Yandi Suárez por su apoyo en el arte gráfico del documento.

Contenido

Resumen	13
----------------------	----

Prólogo	15
----------------------	----

Introducción	17
---------------------------	----

Capítulo 1

Marco teórico	19
----------------------------	----

Yhors Alexander Ciro Monsalve. *Universidad Santiago de Cali*. Colombia, Cali.

Contaminantes emergentes	19
Residuos agroindustriales en Colombia.....	21
Carbón activado.....	22
Economía circular.....	24
Referencias bibliográficas	25

Capítulo 2

Obtención de carbón activado a partir de bagazo de caña para descontaminación de tinidazol en aguas	29
--	----

Melisa Andrea Walteros. *Universidad Santiago de Cali*. Colombia, Cali.

Yhors Alexander Ciro Monsalve. *Universidad Santiago de Cali*. Colombia, Cali.

Resumen.....	29
Introducción	31
Materiales y métodos.....	33
Recolección y acondicionamiento del bagazo de caña.....	34
Activación física del bagazo de caña	34
Activación química del bagazo de caña.....	34
Caracterización de los materiales adsorbentes.....	35
Evaluación de la capacidad descontaminante de los materiales adsorbentes ...	35
Análisis microbiológico de material farmacéutico no estéril	36
Resultados y análisis.....	37
Recolección y acondicionamiento del bagazo de caña.....	37
Activación física del bagazo de caña	38
Activación química del bagazo de caña	39
Caracterización de los materiales adsorbentes.....	39
Conclusiones	51
Referencias bibliográficas	52

Capítulo 3

Evaluación de la capacidad descontaminante in vitro de las cáscaras de chontaduro en aguas contaminadas por ibuprofeno..... 57

Marylin Urbano Montero. *Universidad Santiago de Cali. Colombia, Cali.*

Betty Eliana García Becerra. *Universidad Santiago de Cali. Colombia, Cali.*

Yhors Alexander Ciro. *Universidad Santiago de Cali. Colombia, Cali.*

Resumen.....	57
Introducción	59
Materiales y métodos.....	62
Obtención y acondicionamiento de las cáscaras de chontaduro	63
Preparación de carbón activado a través de carbonización ácida (CAA) ..	63
Preparación de carbón activado a través de carbonización básica (CAB) ..	63
Caracterización de los materiales carbonizados.....	64
Caracterización estructural	64
Caracterización física.....	64
Caracterización funcional	65
Resultados y análisis.....	66
Preparación del carbón activado.....	66
Caracterización de los materiales carbonizados.....	67
Caracterización estructural por espectroscopía de infrarrojo	67
Caracterización física.....	69
Caracterización funcional	70
Conclusiones	80
Referencias bibliográficas	81

Capítulo 4

Obtención de carbón activado a partir de cáscaras de mango y evaluación de su actividad descontaminante de ketoconazol en aguas.....89

Kevin Andrés Orozco. *Universidad Santiago de Cali. Colombia, Cali.*

Alejandra Londoño Salamanca. *Universidad Santiago de Cali. Colombia, Cali.*

Yhors Alexander Ciro. *Universidad Santiago de Cali. Colombia, Cali.*

Resumen.....	89
Introducción	91
Materiales y métodos.....	95
Pretratamiento de las cáscaras de mango	95
Obtención de materiales adsorbentes.....	95
Caracterización del carbón activo.....	96
Titulación de Boehm.....	96
Caracterización infrarroja	97

Evaluación de la capacidad descontaminante de los materiales.....	97
Estudios de remoción.....	97
Resultados y discusión.....	98
Pretratamiento de las cáscaras de mango.....	98
Obtención de materiales adsorbentes.....	99
Caracterización de los materiales adsorbentes.....	100
Titulación de Boehm.....	100
Caracterización infrarroja de los diferentes materiales adsorbentes.....	101
Evaluación de capacidad descontaminante del material.....	105
Conclusiones.....	110
Referencias bibliográficas.....	111

Capítulo 5

Obtención de carbón activado a partir del desecho de cáscara de coco para la remoción in-vitro de fluconazol en aguas..... 117

Alexandra Coral Palacio. *Universidad Santiago de Cali. Colombia, Cali.*

Laura Yineth Jara Sánchez. *Universidad Santiago de Cali. Colombia, Cali.*

Yhors Alexander Ciro. *Universidad Santiago de Cali. Colombia, Cali.*

Resumen.....	117
Introducción.....	119
Materiales y métodos.....	121
Adecuación de los desechos de cáscara de coco.....	122
Obtención de carbón activado por tratamiento químico.....	122
Caracterización fisicoquímica por el método de Boehm.....	123
Estudios de remoción de fluconazol por agentes adsorbentes.....	124
Resultados y discusión.....	126
Activación química con ácido fosfórico.....	126
Activación química con cloruro de calcio.....	126
Caracterización fisicoquímica.....	126
Estudios de remoción de fluconazol por agentes adsorbentes.....	128
Efecto de la cantidad de fluconazol y de agente adsorbente.....	131
Efecto de la fuerza iónica en el medio.....	133
Efecto del pH del medio.....	133
Conclusiones.....	135
Referencias bibliográficas.....	136

Acerca del editor científico..... 147

Acerca de los autores..... 149

Pares evaluadores..... 155

Table of contents

Abstract	14
Prologue	15
Introduction	17
Chapter 1	
Theoretical framework	19
Yhors Alexander Ciro Monsalve. Universidad Santiago de Cali. Colombia, Cali.	
Emerging contaminants	19
Agro-industrial waste in Colombia.....	21
Activated carbon.....	22
Circular economy	24
References	25
Chapter 2	
Production of activated carbon from sugarcane bagasse for the decontamination of tinidazole in water	29
Melisa Andrea Walteros. Universidad Santiago de Cali. Colombia, Cali.	
Yhors Alexander Ciro Monsalve. Universidad Santiago de Cali. Colombia, Cali.	
Abstract	30
Introduction.....	31
Materials and Methods	33
Collection and conditioning of sugarcane bagasse.....	34
Physical activation of sugarcane bagasse.....	34
Chemical activation of sugarcane bagasse	34
Characterization of adsorbent materials	35
Evaluation of the decontamination capacity of adsorbent materials	35
Microbiological analysis of non-sterile pharmaceutical material.....	36
Results and Discussion.....	37
Collection and conditioning of sugarcane bagasse.....	37
Physical activation of sugarcane bagasse.....	38
Chemical activation of sugarcane bagasse	39
Characterization of adsorbent materials	39
Conclusions	51
References.....	52

Chapter 3

In vitro decontamination potential of chontaduro fruit peels in water contaminated with ibuprofen 57

Marylin Urbano Montero. Universidad Santiago de Cali. Colombia, Cali.

Betty Eliana García Becerra. Universidad Santiago de Cali. Colombia, Cali.

Yhors Alexander Ciro. Universidad Santiago de Cali. Colombia, Cali.

Abstract	58
Introduction.....	59
Materials and methods	62
Obtainment and conditioning of peach palm shells.....	63
Preparation of activated carbon via acid carbonization (CAA)	63
Preparation of activated carbon via basic carbonization (CAB)	63
Characterization of carbonized materials	64
Structural characterization	64
Physical characterization	64
Functional characterization	65
Results and discussion	66
Preparation of activated carbon	66
Characterization of carbonized materials	67
Structural characterization by infrared spectroscopy (FTIR)	67
Physical characterization	69
Functional characterization	70
Conclusions.....	80
References.....	81

Chapter 4

Production of activated carbon from mango peels for the assessment of ketoconazol decontamination in aqueous solutions89

Kevin Andrés Orozco. Universidad Santiago de Cali. Colombia, Cali.

Alejandra Londoño Salamanca. Universidad Santiago de Cali. Colombia, Cali.

Yhors Alexander Ciro. Universidad Santiago de Cali. Colombia, Cali.

Abstract	90
Introduction.....	91
Materials and methods	95
Pretreatment of mango peels.....	95
Obtainment of adsorbent materials	95
Characterization of activated carbon	96
Boehm titration	96
Infrared characterization	97

Evaluation of the decontamination capacity of the materials.....	97
Removal studies	97
Results and discussion	98
Pretreatment of mango peels.....	98
Obtainment of adsorbent materials	99
Characterization of adsorbent materials	100
Boehm titration	100
Infrared characterization of different adsorbent materials.....	101
Evaluation of the decontamination capacity of the material	105
Conclusions	110
References.....	111

Chapter 5

Synthesis of activated carbon from coconut shell waste for the in vitro decontamination of fluconazole in water

Alexandra Coral Palacio. Universidad Santiago de Cali. Colombia, Cali.

Laura Yineth Jara Sánchez. Universidad Santiago de Cali. Colombia, Cali.

Yhors Alexander Ciro. Universidad Santiago de Cali. Colombia, Cali.

Abstract	118
Introduction.....	119
Materials and methods	121
Preparation of coconut shell waste.....	122
Production of activated carbon via chemical treatment	122
Physicochemical characterization by the Boehm Method.....	123
Fluconazole removal studies using adsorbent agents	124
Results and discussion.....	126
Chemical activation with phosphoric acid.....	126
Chemical activation with calcium chloride	126
Physicochemical characterization	126
Fluconazole removal studies using adsorbent agents	128
Effect of fluconazole concentration and adsorbent dosage	131
Effect of ionic strength in the medium.....	133
Effect of medium pH	133
Conclusiones	135
References	136
About the scientific editor	141
About the authors	143
Peer evaluators.....	149

Resumen

El aprovechamiento de residuos agroindustriales para la producción de materiales adsorbentes capaces de interactuar con diferentes compuestos presentes en suelos y aguas ha ido en aumento ya que ayudan a mitigar los efectos de la contaminación ambiental y a dar un segundo uso a estos desechos. En este libro se describe la producción y caracterización de diferentes compuestos adsorbentes como lo son los carbones activados a partir de bagazo de caña y cáscaras de chontaduro, mango y coco, para evaluar su potencial de interacción con fármacos como tinidazol, ketoconazol, ibuprofeno y fluconazol, de los que se han dado reportes de su presencia en diferentes cuerpos de agua. Estos materiales se obtuvieron por tratamiento físico a alta temperatura y químico con el uso de ácido fosfórico, hidróxido de sodio y cloruro de calcio. Cada material obtenido mostró un comportamiento único de interacción con los fármacos evaluados a través de enlaces de hidrógeno, interacciones electrostáticas y de Van der Waals, obteniendo remociones desde 10%-95%. Con esto, este libro presenta alternativas sustentables de producción de materiales adsorbentes a partir de desechos que se encuentran altamente en el Valle del Cauca-Colombia.

Palabras clave: Adsorción, carbones activados, aguas contaminadas, desechos agroindustriales.



Abstract

The use of agro-industrial wastes to produce adsorbent materials capable of interacting with different compounds in soil and water has been increasing as they help to mitigate the effects of environmental pollution and give these a second use. This book describes the production and characterization of different adsorbent compounds such as activated carbon from cane bagasse and chontadur, mango, and coconut shells to evaluate their potential for interaction with drugs such as tinidazole, ketoconazole, ibuprofen, and fluconazole, which have been reported in different water bodies. These materials were obtained by high-temperature physical and chemical treatment with the use of phosphoric acid, sodium hydroxide, and calcium chloride. Each material obtained showed a unique interaction behavior with the drugs evaluated through hydrogen bonds, electrostatic interactions, and Van der Waals, obtaining removals from 10%-95%. With this, this book presents sustainable alternatives to produce adsorbent materials from wastes that are high in the Valle del Cauca-Colombia.

Keywords: Adsorption, activated carbons, contaminated water, agro-industrial waste.

Prólogo

Prologue

Los fármacos son esenciales para el desarrollo de la vida como hoy en día la conocemos. Gracias a estos la especie humana ha incrementado su calidad y tiempo de vida. Sin embargo, su alto consumo, ha generado altas descargas de estos en diferentes medios ambientales, especialmente cuerpos de aguas, afectando el ecosistema y la vida. Así, los fármacos se convierten en agentes contaminantes, muchos de ellos con poca degradabilidad y biocompatibilidad, conllevando a incrementar el daño ecológico. Una alternativa eficiente para remover poluentes en muestras de aguas es a través de la aplicación de materiales donde, por medio de procesos de adsorción, se favorece la interacción favorable del material con el poluyente para removerlo del cuerpo de agua. Por tanto, a partir de estos conceptos, el presente libro de investigación emplea diversas técnicas de laboratorio para la obtención de carbones activados a partir de biomasa residual proveniente de la producción de caña de azúcar, chontaduro, mango y coco, y evalúa su capacidad de retención de fármacos modelo como fluconazol, ketoconazol, ibuprofeno y tinidazol.

Los materiales formados y reportados en este documento presentan la particularidad que son atóxicos, biocompatibles con el medio ambiente y biodegradables, permitiendo ampliar el espectro de aplicación, sin afectar el medio ambiente. Además, son formados de biorresiduos, generando valor agregado sobre los mismos, y promoviendo una economía circular. Los datos reportados en este documento son altamente novedosos, dado que demuestran las altas capacidades de retención que presentan estos materiales frente a fármacos, como también, potencializan su aplicación. Por otro lado, la novedad del avance científico aquí presentado se fundamenta plenamente en conceptos y aportes de la literatura, lo que permite al lector comprender los diferentes mecanismos de interacción y remoción involucrados en los procesos de adsorción.



Además, abre la puerta a nuevas líneas de investigación orientadas al uso de biorresiduos en la obtención de carbones activados, así como al desarrollo de nuevas rutas de funcionalización, con el fin de incrementar su capacidad de retención y ampliar sus aplicaciones.

La lectura de este libro no sólo permitirá aprender sobre la producción de biomateriales aplicados a la remoción de fármacos, sino que motivará al lector a profundizar en aspectos más complejos que involucran los procesos de retención por medio de una mirada crítica del estado actual del conocimiento en este campo de investigación.

DR. ANDRÉS FELIPE CHAMORRO

*Profesor de la Facultad de Ciencias Básicas
Universidad Santiago de Cali
Colombia*



Introducción

Introduction

La contaminación de aguas por fármacos y sus metabolitos ha empezado a consolidarse como un problema ambiental ya que, la evidencia indica alteraciones en la bioquímica de los sistemas acuáticos, así como de las diferentes especies a las que da vida. Por otra parte, se tiene que durante la producción agrícola se pueden generar diferentes residuos los cuales, si no se eliminan de forma adecuada pueden resultar en graves efectos ambientales y para la salud humana.

De esta manera, en este libro se proponen soluciones a estas dos problemáticas mediante el aprovechamiento de residuos como cáscaras de chontaduro, coco y mango, así como del bagazo de caña, los cuales se generan y comercializan en gran medida en la región del Valle del Cauca. Estos residuos se transforman en materiales porosos adsorbentes mediante métodos físicos y/o químicos, capaces de interactuar con diversos fármacos presentes en el agua, contribuyendo así a la reducción de su carga en los sistemas acuáticos.

La información contenida en este libro es producto del trabajo investigativo desarrollado por los estudiantes del programa de Química Farmacéutica y Microbiología de la Facultad de Ciencias Básicas de la Universidad Santiago de Cali como requisito para la obtención de su título profesional.

En el primer capítulo se presenta la obtención de materiales adsorbentes a partir del bagazo de caña, mediante la activación química con ácido fosfórico y la activación física a alta temperatura, así como la evaluación de su potencial para la adsorción de tinidazol, un fármaco cuya estructura química le confiere alta estabilidad, lo que limita su degradación.



En el segundo capítulo se transforman las cáscaras de chontaduro tanto por tratamiento ácido como básico, y se evalúa su efecto de remoción de ibuprofeno, el cual es un fármaco de venta libre ampliamente empleado para el tratamiento del dolor, lo que propicia su consumo masivo.

En el tercer capítulo, a partir de cáscaras de mango, se obtienen diferentes materiales adsorbentes mediante la variación de la concentración de ácido fosfórico, con el fin de evaluar la retención de ketoconazol. Este fármaco, al ser un antifúngico, puede favorecer el aumento de la resistencia cuando está presente en el agua.

En el cuarto capítulo se removió fluconazol a partir de materiales obtenidos de las cáscaras de coco tratadas con ácido fosfórico y cloruro de calcio. Además, en la remoción se evaluó el efecto del pH, la cantidad de material adsorbente adicionado y la presencia de sales.

De esta forma, se da un valor agregado a estos diferentes residuos agroindustriales que normalmente se terminan depositando en los basureros, trayendo consigo problemas de salud pública, ya que llaman la atención de plagas como roedores y generan lixiviados que pueden contaminar las fuentes hídricas. Además, los materiales obtenidos pueden servir como punto de partida para futuras investigaciones orientadas al desarrollo de nuevos materiales, así como a la evaluación de su eficacia en la remoción de otros compuestos químicos.

YHORS CIRO



CAPÍTULO 1

Marco Teórico

Theoretical Framework

Yhors Alexander Ciro Monsalve

Universidad Santiago de Cali. Colombia

© <https://orcid.org/0000-0003-4093-8696>

✉ yhors.ciro00@usc.edu.co

Contaminantes Emergentes

El término “contaminantes emergentes” se refiere principalmente a los contaminantes para los cuales no existe actualmente ninguna reglamentación que exija la vigilancia o la notificación pública de su presencia en nuestro suministro de agua o aguas residuales. La Agencia de Protección del Medio Ambiente (EPA) de los Estados Unidos define un contaminante emergente como una sustancia química o material que, debido a su origen reciente o a una nueva vía que se ha desarrollado y para el cual no existen normas sanitarias publicadas, es una amenaza potencial o real para la salud humana o el medio ambiente (Gogoi et al., 2018; Deviller, Lundy & Fatta-Kassinou, 2020).

Una clasificación de estos compuestos se presenta a continuación:

Cita este capítulo / Cite this chapter

Ciro Monsalve, Y. A. (2026). Marco teórico. En: Ciro Monsalve, Y. A. (ed. científico). *Aprovechamiento de residuos agroindustriales para la biorremediación de fármacos en fuentes hídricas*. (pp. 19-28). Cali, Colombia: Universidad Santiago de Cali. <https://doi.org/10.35985/9786287914049.1>

Clase	Ejemplos
Compuestos farmacéuticos	Antibióticos, antiinflamatorios, hormonas, fármacos psiquiátricos, drogas ilícitas, medicamentos de uso veterinario.
Cosméticos y productos de cuidado personal	Ingredientes cosméticos (parabenos, triclosán, bisfenol), filtros UV, desinfectantes, biocidas.
Compuestos industriales	Surfactantes, alquilfenoles, compuestos perfluorados, nanopartículas.
Otras sustancias	Elementos raros de la tierra, metaloides, microplásticos, radionúclido, envases para alimentos, inhibidores de corrosión.
Pesticidas	Fungicidas (Triazoles), herbicidas, insecticidas (Neonicotinoides) bactericidas, rodenticidas, nematicidas.
Agentes biológicos	Bacterias patógenas, microorganismos resistentes a múltiples fármacos, genes de resistencia a los antibióticos y de resistencia antifúngica.
Contaminantes orgánicos persistentes no intencionales	Dioxinas, dioxinas bromadas, hidrocarburos aromáticos policíclicos halogenados, naftalenos policlorados, radicales libres medioambientalmente persistentes.

Tabla 1.

Clasificación de los contaminantes emergentes, Adaptado de (Morin-Crini et al., 2022).

La presencia de estos contaminantes en el medio ambiente es el resultado de la urbanización incontrolada, el desarrollo de la industria, las actividades de atención de la salud esenciales para apoyar el bienestar humano, la agricultura y el transporte. Estos se pueden encontrar en el agua en una amplia gama de concentraciones, del orden de ng/L a g/L, y sus efectos sobre los organismos vivos están asociados con efectos toxicológicos, disrupción endocrina, toxicidad aguda y crónica, resistencia de microorganismos a los antibióticos y amenazas para la salud humana (Gavrilescu et al., 2015; Geissen et al., 2015; Vasilachi et al., 2021).



Residuos Agroindustriales en Colombia

Colombia es el séptimo país en el mundo con mayor disponibilidad de áreas para la agricultura (González, 2024), ya que cuenta con 114 millones de hectáreas de las cuales 39.2 millones pueden ser aprovechadas para prácticas agrícolas (Econexia, 2025).

Con esto, no es raro que Colombia sea uno de los mayores productores y exportadores de diferentes alimentos como el café, banano, aguacate, entre otros. Sin embargo, no todo lo que se cosecha se puede aprovechar ya que, se pueden generar desechos agrícolas e industriales. Los residuos agrícolas pueden ser residuos de campo, es decir, durante la cosecha como tallos, vainas de semillas, hojas, o pueden ser residuos de proceso que son los obtenidos luego de la transformación del cultivo en productos de valor (Morales & Arrieta, 2023).

Además, durante el transporte y el almacenamiento, algunos productos sufren daños mecánicos que los hacen no aptos para el consumo; asimismo, debido a los procesos de maduración, pueden alcanzar un estado de deterioro total. Esto sumado a que son insumos de diferentes industrias donde no aprovechan por completo el material generando desechos como cáscaras, semillas y pulpas (Gonzalez et al., 2017).

Hay reportes que en el país se producen alrededor de 71 millones de toneladas de residuos anuales derivados de las actividades de cultivos agrícolas como el plátano, caña de azúcar, banano, caña panelera, arroz, café, maíz o palma de aceite. A modo de ejemplo, se estima que para la producción de 1000 kg de azúcar se generan entre 30 a 65 toneladas de residuos (Romero-Sáez, 2022).

Además, estos residuos generan diversos problemas ambientales, ya que, al ser quemados o dispuestos en basureros, producen contaminación del suelo, del agua y de otros entornos naturales, afectando la flora y la fauna. Asimismo, pueden atraer roedores y otros vectores de enfermedades que impactan la salud humana y la economía (Aguilar et al., 2022).



No obstante, para mitigar los efectos de estos residuos, se han implementado diversas estrategias orientadas a su aprovechamiento, otorgándoles un segundo uso y convirtiéndolos en productos de valor agregado, lo que a su vez genera nuevas fuentes de empleo. Entre estas aplicaciones, se destaca su uso como insumos en la alimentación de distintas especies animales, como materias primas ricas en metabolitos secundarios con propiedades antioxidantes, como aditivos en materiales de construcción, en la producción de bioplásticos, como biomasa para la obtención de biocombustibles y en la generación de materiales adsorbentes con diversos enfoques, desde su aplicación en sistemas de tratamiento de aguas hasta su uso como materia prima en la industria farmacéutica y cosmética (Escobar & Almario, 2023).

De esta forma, en este libro se presenta la producción y caracterización de diferentes materiales adsorbentes, tipo carbones activados, a partir de desechos agroindustriales comunes en el país, para la evaluación de su potencial en la remoción de diferentes fármacos en fuentes hídricas.

Carbón Activado

Los carbones activados son bien conocidos por su uso como adsorbentes a pesar de varias otras aplicaciones, principalmente debido a su naturaleza altamente porosa con una gran superficie para facilitar la adsorción (Ilomuanya et al., 2017; Sivanandan et al., 2018).

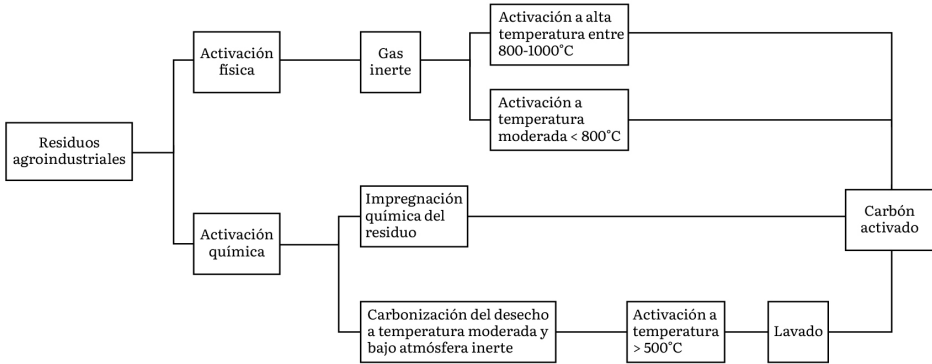
Hoy en día, se prefiere como material de partida diversos residuos agroindustriales debido a su bajo costo y a su reutilización en el ciclo productivo siguiendo los lineamientos de la economía circular. Además, los desechos de biomasa tienen varias propiedades que contribuyen a producir carbón activado con características eficientes, debido a las diferencias en la composición química de la biomasa lignocelulósica.

La síntesis de carbón activado se divide generalmente en dos vías principales: (1) activación física y (2) química. Las etapas de estos procesos se presentan a continuación:



Figura 1.1

Proceso de obtención del carbón activado.



Adaptado de (Gayathiri, Pulingam, Lee & Sudesh, 2022).

La carbonización elimina la humedad y las materias volátiles de los residuos de biomasa desarrollando poros por gasificación (Jjagwe et al., 2021). Durante la carbonización a alta temperatura de activación, se encontró que hubo una disminución de materia volátil y un aumento de carbono fijo (Aworn et al., 2008), por lo tanto, el material de partida con un alto contenido de cenizas y menos carbono fijo no es adecuado para generar carbón activado.

En contraste con la activación física, la activación química se lleva a cabo generalmente realizando de manera simultánea la carbonización y la activación mezclando agentes activadores químicos como el cloruro de cinc, el ácido fosfórico y el hidróxido de potasio, con los residuos agroindustriales. Este procedimiento presenta ventajas como la capacidad de completarse en un solo proceso a temperaturas más bajas, lo que resulta en la producción de un mejor carbón activado, con un mayor número de poros y los reactivos químicos utilizados en esta etapa se pueden recuperar para minimizar los efectos perjudiciales para el medio ambiente (Alzaydien, 2016). La etapa de activación química se lleva a cabo a temperaturas superiores a 500 °C seguida de la etapa de lavado para eliminar los restos de productos químicos de los residuos de biomasa carbonizados.

Además, factores como el tipo de activador químico utilizado durante la producción, tiempo de impregnación, temperatura y duración de carbonización, composición química de la materia prima y varios otros factores van a condicionar el desempeño del material obtenido.

Economía Circular

En los últimos años diferentes crisis económicas, sociales y ambientales han golpeado a la humanidad (Persis et al., 2021), conllevando a una reflexión profunda de los modelos económicos que se tienen en la actualidad donde se utilizan recursos finitos para la producción de un bien, generando en el acto diferentes residuos (Ellen MacArthur Foundation, 2015). Con esto, surge la economía circular como una opción donde se reduce, reutiliza, repara, renueva, reutiliza y recicla en cada etapa de la cadena productiva, para así generar un circuito cerrado que minimice la generación de residuos y reduzca los costos productivos (Echefaj et al., 2024).

En un principio, en el ámbito de la gestión de residuos, se contemplaban las tres R: reducir, reutilizar y reciclar. Sin embargo, para abarcar una visión más amplia de la economía, se incorporaron tres principios adicionales, dando lugar al modelo de las seis R, que incluye el rediseño, la recuperación y la refabricación (Illankoon & Vithanage, 2023).

De esta forma, las cadenas de residuos circulares se resumen por (Yang et al. 2018) como: 1) Los ciclos internos se priorizan sobre los externos, como ejemplo: se prioriza la reutilización y la recuperación sobre el reciclaje; 2) Se ralentizan los ciclos utilizando los recursos durante el mayor tiempo posible; 3) Hay una reducción de los residuos en todas las etapas; y 4) Reducir, reutilizar, reciclar y recuperar recursos. Además, una cadena de suministro circular también se refiere al flujo de residuos y subproductos, creando un uso en cascada de los recursos (Loomba & Nakashima, 2012, Ellen MacArthur Foundation, 2015), afectando las etapas de adquisición,



producción y logística (Bag et al., 2022), reduciendo los costos mediante la optimización de recursos y la participación del cliente (Ortner et al., 2022).

De esta manera, se pueden generar nuevas fuentes de empleo a partir del aprovechamiento de recursos alternativos y la creación de nuevos productos, que incrementa la sensibilización de la comunidad frente a las consecuencias negativas de las prácticas tradicionales sobre el medio ambiente. Además, se abren nuevos mercados y se construye una imagen corporativa alineada con las tendencias de protección de los recursos renovables (Korhonen et al., 2018).

Referencias Bibliográficas

- Aguilar, S., Enriquez, M. y Uvidia, H. (2022). Residuos agroindustriales: su impacto, manejo y aprovechamiento. *Revista Científica de Investigación, Docencia y Proyección Social*, 27, 5-10. <https://doi.org/10.26621/ra.vli27.803>
- Alzaydien, A.S. (2016). Physical, chemical and adsorptive characteristics of local oak sawdust based activated carbons. *Asian Journal of Scientific Research*, 9, 45-56. <https://doi.org/10.3923/ajsr.2016.45.56>
- Aworn, A., Thiravetyan, P. y Nakbanpote, W (2008). Preparation and characteristics of agricultural waste activated carbon by physical activation having micro- and mesopores. *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis*, 82,(2), 279-285. <https://doi.org/10.1016/j.jaap.2008.04.007>
- Deviller, G., Lundy, L., & Fatta-Kassinos, D. (2020). Recommendations to derive quality standards for chemical pollutants in reclaimed water intended for reuse in agricultural irrigation. *Chemosphere*, 240, 124911. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2019.124911>
- Econexia. (s.f.). ¿Qué papel juega el sector agrícola en la economía colombiana? <https://econexia.com/es/contenidos-articulo/agroindustria-y-alimentos/1262/Que-papel-juega-sector-agricola-en-economia-colombiana>



- Escobar, D. P. M., & Almario, Á. Á. A. (2023). Utilización de residuos agroindustriales en la elaboración de materiales. <https://doi.org/10.21892/9786287515413.10>
- Ellen MacArthur Foundation (EMAF), SUN, McKinsey & Co (2015). Growth Within: A Circular Economy Vision for a Competitive Europe.
- Gavrilescu, M., Demnerová, K., Aamand, J., Agathos, S., & Fava, F. (2015). Emerging pollutants in the environment: Present and future challenges in biomonitoring, ecological risks and bioremediation. *New Biotechnology*, 32, (1), 147–156. <https://doi.org/10.1016/j.nbt.2014.01.001>
- Gayathiri, M., Pulingam, T., Lee, K.T., & Sudesh, k. (2022). Activated carbon from biomass waste precursors: Factors affecting production and adsorption mechanism. *Chemosphere*, 294, 133764. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2022.133764>
- Geissen, V., Mol, H., Klumpp, E., Umlauf, G., Nadal, M., Van Der Ploeg, M., Van De Zee, S. E., & Ritsema, C. J. (2015). Emerging pollutants in the environment: A challenge for water resource management. *International Soil and Water Conservation Research*, 3(1), 57–65. <https://doi.org/10.1016/j.iswcr.2015.03.002>
- Gogoi, A., Mazumder, P., Tyagi, V.K., Tushara, G.G.T., An, A.K., & Kumar, M. (2018). Occurrence and fate of emerging contaminants in water environment: a review. *Groundwater for Sustainable Development*, 6, 169180. <https://doi.org/10.1016/j.gsd.2017.12.009>
- Gonzalez, L. V. P., Gómez, S. P. M., & Abad, P. a. G. (2017). Aprovechamiento de residuos agroindustriales en Colombia. *Revista De Investigación Agraria Y Ambiental*, 8(2), 141–150. <https://doi.org/10.22490/21456453.2040>
- González, X. (2024, May 24). “Colombia es el séptimo país en el mundo con mayor disponibilidad de tierra fértil para la agricultura” Redagrícola. <https://redagricola.com/colombia-es-el-septimo-pais-en-el-mundo-con-mayor-disponibilidad-de-tierra-fertil-para-la-agricultura/>



- Gu, J., Guo, F., Peng, X., & Wang, B. (2023). Green and Sustainable Construction Industry: A systematic literature review of the contractor's green construction capability. *Buildings*, 13(2), 470. <https://doi.org/10.3390/buildings13020470>
- Korhonen, J., Honkasalo, A., & Seppälä, J. (2017). Circular Economy: The Concept and its Limitations. *Ecological Economics*, 143, 37–46. <https://doi.org/10.1016/j.ecolecon.2017.06.041>
- Jjagwe, J., Olupot, P. W., Menya, E., & Kalibbala, H. M. (2021). Synthesis and Application of Granular Activated Carbon from Biomass Waste Materials for Water Treatment: A Review. *Journal of Bioresources and Bioproducts*, 6(4), 292–322. <https://doi.org/10.1016/j.jobab.2021.03.003>
- Ilomuanya, M., Nashiru, B., Ifudu, N., & Igwilo, C. (2016b). Effect of pore size and morphology of activated charcoal prepared from midribs of *Elaeis guineensis* on adsorption of poisons using metronidazole and *Escherichia coli* O157:H7 as a case study. *Journal of Microscopy and Ultrastructure*, 5(1), 32. <https://doi.org/10.1016/j.jmau.2016.05.001>
- Loomba, A.P., & Nakashima, K. (2012). Enhancing Value in Reverse Supply Chains by Sorting before Product Recovery. *Production Planning & Control*, 23, (2-3), 205–215. <https://doi.org/10.1080/09537287.2011.591652>.
- Morin-Crini, N., Lichtfouse, E., Liu, G., Balaram, V., Ribeiro, A. R. L., Lu, Z., Stock, F., Carmona, E., Teixeira, M. R., Picos-Corrales, L. A., Moreno-Piraján, J. C., Giraldo, L., Li, C., Pandey, A., Hocquet, D., Torri, G., & Crini, G. (2022). Worldwide cases of water pollution by emerging contaminants: a review. *Environmental Chemistry Letters*, 20(4), 2311–2338. <https://doi.org/10.1007/s10311-022-01447-4>
- Ortner, P., Tay, J. Z., & Wortmann, T. (2022). Computational optimization for circular economy product design. *Journal of Cleaner Production*, 362, 132340. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2022.132340>



- Persis, D. J., Venkatesh, V., Sreedharan, V. R., Shi, Y., & Sankaranarayanan, B. (2021). Modelling and analysing the impact of Circular Economy; Internet of Things and ethical business practices in the VUCA world: Evidence from the food processing industry. *Journal of Cleaner Production*, 301, 126871. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2021.126871>
- Romero-Sáez, M. (2022). Los residuos agroindustriales, una oportunidad para la economía circular. *TecnoLógicas*, 25(54), e2505. <https://doi.org/10.22430/22565337.2505>
- Sivanandan V, Rajalakshmi AS, Jayasree S, Lopez RM (2019). Surface area and porosity development on granular activated carbon by zirconium: adsorption isotherm studies. *J. Appl. Res. Technol.*, 16: 211-228. <https://doi.org/10.22201/icat.16656423.2018.16.3.719>
- Vasilachi, I., Asiminicesei, D., Fertu, D., & Gavrilescu, M. (2021). Occurrence and fate of emerging pollutants in water environment and options for their removal. *Water*, 13(2), 181. <https://doi.org/10.3390/w13020181>
- Yang, M., Smart, P., Kumar, M., Jolly, M., & Evans, S. (2018). Product-service systems business models for circular supply chains. *Production Planning & Control*, 29(6), 498–508. <https://doi.org/10.1080/09537287.2018.1449247>



CAPÍTULO 2

Obtención de Carbón Activado a partir de Bagazo de Caña para Descontaminación de Tinidazol en Aguas

*Production of Activated Carbon from Sugarcane Bagasse for the
Decontamination of Tinidazole in Water*

Melisa Andrea Walteros Ospina

Universidad Santiago de Cali. Colombia

© <https://orcid.org/0009-0008-5400-8100>

✉ melisa.walteros00@usc.edu.co

Yhors Alexander Ciro Monsalve

Universidad Santiago de Cali. Colombia

© <https://orcid.org/0000-0003-4093-8696>

✉ yhors.ciro00@usc.edu.co

Resumen

La contaminación de fuentes hídricas es una gran problemática a nivel mundial. El carbón activado producido a partir de desechos agroindustriales ha sido empleado para la remoción de contaminantes emergentes que afectan los cuerpos de agua. Para abordar esta problemática se planteó la obtención de carbón activado a partir del bagazo de caña para la descontaminación de tinidazol en aguas,

Cita este capítulo / Cite this chapter

Walteros Ospina, M. A. y Ciro Monsalve, Y. A. (2026). Obtención de carbón activado a partir de bagazo de caña para descontaminación de tinidazol en aguas En: Ciro Monsalve, Y. A. (ed. científico). *Aprovechamiento de residuos agroindustriales para la biorremediación de fármacos en fuentes hídricas*. (pp. 29-55). Cali, Colombia: Universidad Santiago de Cali. <https://doi.org/10.35985/9786287914049.2>



mediante la carbonización de los materiales a diferentes tiempos y temperaturas. Se obtuvo un resultado positivo con la activación física y química del bagazo, sin embargo, el mayor porcentaje de remoción fue obtenido mediante la activación química con ácido fosfórico con un resultado de 78% de remoción del tinidazol. Además, se realizaron análisis de productos farmacéuticos no estériles en este caso no crecieron *Pseudomonas aeruginosa* ni *Staphylococcus aureus* en ningunos de los materiales. Estos resultados demostraron la capacidad de adsorción del bagazo, con lo que se pueden generar alternativas de un segundo uso a los residuos agroindustriales y puedan ser usados como elementos de biorremediación.

Palabras clave: Contaminación, carbón activado, tinidazol, bagazo de caña.

Abstract

Pollution of water sources is a major problem worldwide. Activated carbon produced from agroindustrial waste has been used for the removal of emerging contaminants that affect water bodies. To address this problem, it was proposed to obtain activated carbon from sugarcane bagasse for the decontamination of tinidazole in water, through the carbonization of the materials at different times and temperatures. A positive result was obtained with the physical and chemical activation of the bagasse; however, the highest percentage of removal was obtained through chemical activation with phosphoric acid with a result of 78% removal of tinidazole. In addition, analyzes of non-sterile pharmaceutical products were carried out in this case, neither *Pseudomonas aeruginosa* nor *Staphylococcus aureus* grew in any of the materials. These results demonstrated the adsorption capacity of bagasse, which can generate alternatives for a second use of agroindustrial waste and can be used as bioremediation elements.

Keywords: pollution, activated carbon, tinidazole, sugarcane bagasse.



Introducción

El desarrollo acelerado de actividades urbanas, industriales, agrícolas y farmacéuticas ha provocado el deterioro en el medio ambiente debido a la descarga de aguas residuales con contaminantes emergentes (CE) en grandes cantidades, las cuales tienen como destino cuerpos de agua y suelos. La abundancia de CE en aguas residuales, ríos y océanos ha llamado la atención en años recientes, ya que son perjudiciales para los seres humanos y presentan ecotoxicidad incluso a bajas concentraciones debido a su baja tasa de degradabilidad. Dentro de este grupo de contaminantes, se encuentran los productos farmacéuticos, sus metabolitos y subproductos que, si bien no son considerados como sustancias persistentes, su uso frecuente y eliminación los hace estar presentes en nuestro entorno (Arcos, 2022).

Entre estos compuestos farmacéuticos, los antibióticos, debido a su metabolismo incompleto y a su naturaleza no biodegradable, pueden permanecer en el ecosistema durante largos periodos de tiempo. Uno de ellos, el tinidazol (TND) 1-[2-(etil sulfonil)etil]-2-metil-5-nitro-1H imidazol, se usa ampliamente para la prevención y el tratamiento de infecciones de amebiasis, giardiasis y tricomoniasis vaginal. La aparición de TND en las aguas residuales, incluso en concentraciones menores, presenta consecuencias adversas para el cuerpo humano y el ecosistema. (Qin et al., 2020) reportaron la presencia de TND en sistemas de aguas residuales y de agua dulce. Por lo tanto, se debe abordar la degradación efectiva de TND en las aguas residuales, ya que, debido a su estructura compleja, alta solubilidad acuosa y menor biodegradabilidad, este no puede degradarse por completo mediante estrategias convencionales, pero se han informado varios métodos para su eliminación, incluida la adsorción (Sohani et al., 2022).

Dentro de los tratamientos que han sido probados para la remediación de esta agua contaminada se ha usado la adsorción, un proceso económico y más viable que otros procedimientos, además de que puede ser utilizado como tratamiento de compuestos orgánicos. Se ha encontrado que su efectividad de remoción es específica para algunos CE y que el costo de regeneración es alto (Hinojosa et al., 2021).



Investigaciones concuerdan que procesos de adsorción por carbón activado y tratamientos de oxidación son efectivos para remover CE y esto se debe a las interacciones hidrofóbicas con los compuestos orgánicos polares (Wang, Wang & Dionysiou, 2023). Esto por el resultado de que el carbón activado es un adsorbente más eficaz, especialmente para aguas residuales que contienen materia orgánica recalcitrante y compuestos no biodegradables.

A pesar de ser un material muy eficiente, el costo del carbón activado a menudo restringe su uso, por lo tanto, hay un interés creciente en la búsqueda de diversas fuentes y alternativas para reducir los costos de su producción. Los productos utilizados en la síntesis de carbón activado deben tener un alto contenido de carbono y bajos niveles de compuestos inorgánicos en su estructura, estas dos condiciones las cumplen los desechos sólidos de la agricultura (cáscaras y semillas, madera y bagazo) o mayormente conocidos como residuos agroindustriales (Vidal et al., 2018).

La generación de subproductos o residuos agroindustriales en las diferentes etapas de los procesos productivos es actualmente una problemática a nivel mundial, debido a que en la mayoría de los casos no son procesados o dispuestos adecuadamente, situación que contribuye al proceso de contaminación ambiental. Los residuos agroindustriales poseen un alto potencial para ser aprovechados en diferentes procesos que incluyen elaboración de nuevos productos, aportar valor agregado a los productos originales y recuperar condiciones ambientales alteradas (Vargas & Pérez, 2018).

La producción mundial anual de 700 millones de toneladas de caña de azúcar da como resultado 210 millones de toneladas de bagazo (Hiranobe et al., 2024). En Colombia, la caña de azúcar ocupa el segundo lugar en extensión, después del café, con 249.384 hectáreas, contribuyendo significativamente al producto interno bruto (PIB) agrícola. El procesamiento de caña de azúcar genera toneladas de bagazo de caña, el cual está compuesto principalmente por celulosa, hemicelulosa y lignina (Cueva et al., 2017). Durante el 2022, la agroindustria de la caña colombiana tuvo una producción de: 23



millones de toneladas de caña y 2,09 millones de toneladas de azúcar. Este sector se caracteriza por gestionar de manera eficiente sus residuos y sacarle el mayor provecho a la materia prima fundamental: la caña de azúcar. Con la caña producen azúcar, energía, alcohol carburante y subproductos como el bagazo y la vinaza. El bagazo es utilizado por la industria papelera para la producción de artículos ecológicos y en las fábricas para la sustitución de carbón para las calderas (Asocaña, 2023).

Por esta razón, se planteó la obtención de materiales adsorbentes a partir de bagazo de caña de azúcar mediante procesos de activación física y química con ácido fosfórico. Los materiales fueron caracterizados por espectroscopía infrarroja, medición de pH y humedad y se evaluó la capacidad de remoción *in-vitro* de tinidazol, para así solventar dos grandes problemáticas en el país, el uso de subproductos agrícolas para la obtención de materiales con valor agregado, capaces de remover CE farmacéuticos en aguas.

Materiales y Métodos

Los materiales empleados en esta investigación fueron hipoclorito de sodio (Yes, concentración 3.6%), ácido fosfórico (Protokimica) y tinidazol (Donación). Las cepas de *Pseudomonas aeruginosa* ATCC 9027 y *Staphylococcus aureus* ATCC 25923 fueron adquiridas por la Universidad Santiago de Cali, la cual financió esta investigación. El bagazo de caña fue donado por una empresa de la región.

En primer lugar, se realizó el lavado y secado del bagazo de caña, luego se sometió a activación física y química con ácido fosfórico. Una vez obtenidos los materiales adsorbentes se caracterizaron por espectroscopía infrarroja, medición de pH y humedad. Por último, se evaluó la capacidad de remoción *in-vitro* de tinidazol en medio acuoso de cada material obtenido y el bagazo de caña sin ningún tratamiento (térmico o químico).



Recolección y Acondicionamiento del Bagazo de Caña

El bagazo de caña se trató inicialmente con agua hirviendo durante 30 minutos; al finalizar este tiempo, el agua fue retirada. Posteriormente, se sometió a un tratamiento con hipoclorito durante 30 minutos. Luego, se secó en una estufa de bandejas (Binder, ED23, Alemania) a 105 °C durante 24 horas, se trituró y se tamizó hasta alcanzar un tamaño de partícula de 0,15 mm, con el fin de garantizar una mayor área superficial durante los procesos de activación (Vera et al., 2015).

Activación Física del Bagazo de Caña

Se pesaron aproximadamente 10 g de bagazo de caña en una cápsula de porcelana y se sometieron a calcinación en una mufla (Maxtermo, MC5438, Taiwan) variando la temperatura a 600 °C, 750 °C y 900 °C, por tiempos de 1,5 h, 3,0 h y 5,0 h. Los materiales obtenidos en este proceso se denominaron como carbonizado 1 al 8 (Yakout & Sharaf, 2016).

Activación Química del Bagazo de Caña

Se pesaron aproximadamente 10 g de bagazo de caña y se pusieron en contacto con 100 mL de solución de ácido fosfórico (H_3PO_4) a concentración del 10 % (%P/V) durante 1 hora (ya que este es uno de los agentes de activación química más utilizados en este tipo de estudios), a temperatura ambiente, en cabina de extracción y con agitación constante. Posteriormente, la suspensión se dejó decantar, se eliminó el sobrenadante y el precipitado se carbonizó en mufla (Maxtermo, MC5438, Taiwan) a temperaturas de 600 °C, 750 °C y 900 °C por 3 horas. Luego, al material se le realizaron lavados con agua purificada hasta alcanzar un pH neutro, para eliminar los residuos de ácido sin reaccionar, y se llevó a la balanza termogravimétrica (Mettler Toledo, HE53, EE. UU) a temperatura de 120°C para determinar su porcentaje de humedad. Los materiales se denominaron como carbonizado 9 al 11 (Yakout & Sharaf, 2016).



Caracterización de los Materiales Adsorbentes

Rendimiento: Se calculó mediante la siguiente ecuación:

$$\text{Rendimiento} = \frac{\text{Peso final del material después del tratamiento}}{\text{Peso inicial del bagazo de caña}} * 100\%$$

Análisis infrarrojo: Aproximadamente 15 mg de cada material se mezclaron con 100 mg de bromuro de potasio en un mortero de ágata con ayuda de un pistilo de ágata. Posteriormente, esta mezcla se comprimió en un pellet y su espectro infrarrojo se registró en un espectrofotómetro (IRA-Affinity, Shimadzu, Japon) en el rango de 4000-400 cm^{-1} .

Evaluación de la Capacidad Descontaminante de los Materiales Adsorbentes

Se evaluó la capacidad de remoción de TND por parte del bagazo de caña y de los materiales obtenidos por activación física y química.

En primer lugar, se prepararon 50 mL de solución acuosa de TND a 8 $\mu\text{g}/\text{mL}$, se adicionaron 20 mg de cada material adsorbente y se dejó en agitación constante por 1 hora. Este proceso se realizó por triplicado. Posteriormente, las muestras se centrifugaron y se leyó la absorbancia del sobrenadante a $\lambda = 316 \text{ nm}$, la cual se interpoló en la curva de calibración obtenidas a concentraciones de TND entre 5 a 30 $\mu\text{g}/\text{mL}$ para conocer la concentración sin remover de TND, que se restó a la concentración inicial para hallar el porcentaje de remoción, de acuerdo con la ecuación:

$$\text{Cantidad de remoción de TND (\%)} = \frac{C_i - C_f}{C_i} * 100\%$$

Dónde C_i es la concentración inicial de la solución de TND y C_f la concentración de la solución de TND luego del proceso de remoción.

Adicionalmente, se realizó un ensayo empleando 50 mL de agua desionizada y el material adsorbente (Blanco) para corregir el posible efecto que pudiera presentar el material adsorbente en la cuantificación del TND.



Análisis Microbiológico de Material Farmacéutico no Estéril

Se realizaron pruebas para determinar la presencia/ausencia de bacterias patógenas como *Pseudomonas aeruginosa* y *Staphylococcus aureus* para el bagazo de caña acondicionado y los carbonizados 9, 10 y 11.

Determinación de *Pseudomonas Aeruginosa*

Aproximadamente 500 mg del material adsorbente se inoculó en 5 mL de caldo digerido de caseína y soja en un tubo de ensayo, se mezcló e incubó a 35 °C durante 24 horas. Posteriormente, se tomó 0.1 mL de la mezcla y se sub-cultivó en una placa de agar Cetrimida que se incubó a 35 °C durante 48 horas.

El crecimiento de colonias indica la posible presencia de *Pseudomonas aeruginosa*. Esto se confirma mediante pruebas de identificación. El producto cumple con la prueba si no se desarrollan colonias o si los resultados de las pruebas de identificación confirmatorias son negativos (Farmacopea de los Estados Unidos, 2024).

Determinación de *Staphylococcus Aureus*

Aproximadamente 500 mg del material adsorbente se inoculó en 5 mL de caldo digerido de caseína y soja en un tubo de ensayo, se mezcló e incubó a 35 °C durante 24 horas. Posteriormente, se tomó 0.1 mL de la mezcla y se sub-cultivó en una placa de agar Manitol salado que se incubó a 35 °C durante 48 horas. El crecimiento de colonias amarillas o blancas rodeadas de una zona amarilla indica la posible presencia de *Staphylococcus aureus*. Esto se confirma mediante pruebas de identificación. El producto cumple con la prueba si no se desarrollan colonias de los tipos descritos o si los resultados de las pruebas de identificación confirmatorias son negativos (Farmacopea de los Estados Unidos, 2024).

Prueba de Promoción de Crecimiento

Esta prueba se realizó para establecer que los medios de cultivo permitían el crecimiento apropiado de los microorganismos patógenos a evaluar. Para el caso de *Pseudomonas aeruginosa*, se



tomó 0.1 mL de suspensión de este microorganismo y se inoculó directamente al medio de cultivo por el método de agotamiento en una caja con agar Cetrimida, que se incubó a 35 °C durante 48 horas (Farmacopea de los Estados Unidos, 2024).

Por otra parte, para el caso de *Staphylococcus aureus*, se tomó 0.1 mL de suspensión de este microorganismo y se inoculó directamente al medio de cultivo por el método de agotamiento en una caja con agar Manitol salado, que se incubó a 35 °C durante 48 horas (Farmacopea de los Estados Unidos, 2024).

Resultados y Análisis

A continuación, se presentan los resultados de las diferentes pruebas realizadas en la obtención, caracterización y desempeño de los materiales adsorbentes, así como la explicación del porqué de estos hallazgos.

Recolección y Acondicionamiento del Bagazo de Caña

En la figura 2.1 se presentan los resultados del tratamiento que se realizó al bagazo de caña. Inicialmente, 375.36 g de bagazo de caña se lavaron y desinfectaron para eliminar impurezas y contaminación microbiológica. Luego, se secó, trituroó y tamizó para tener un material con un tamaño de partícula homogéneo, y así garantizar una mejor área superficial durante los procesos de activación. Al final, se obtuvieron 165.38 g de bagazo de caña acondicionado. La pérdida de peso se asocia a la deshidratación ocurrida durante el secado y pérdida de componentes por el tratamiento con hipoclorito de sodio.

Figura 2.1.

Tratamiento del bagazo de caña de azúcar.





Activación Física del Bagazo de Caña

El bagazo de caña de azúcar contiene un 24,7% de carbono con una composición química de hemicelulosa 25%, celulosa 50% y lignina 25%. El alto contenido de celulosa imparte una estructura microporosa al carbón activado (Raut et al., 2022). Por tanto, el bagazo de caña de azúcar se puede utilizar para fabricar carbón activado. Durante el proceso de carbonización a alta temperatura, ocurre pirólisis del material con lo que hay una despolimerización de la celulosa y hemicelulosa, transformándose en unidades más pequeñas (Narayanasamy et al., 2020). Además, se desprende materia volátil y se produce un sólido más rico en carbono. Por ende, en este proceso se pierde gran parte del material durante la carbonización como se observa en la tabla 1, dónde a medida que se incrementa la temperatura en la mufla, se disminuye el rendimiento en la producción del material (Bachrun et al., 2016). Por otra parte, los materiales obtenidos presentaron una coloración café claro.

La tabla 2.1. muestra los datos obtenidos para los carbonizados activados de manera física, el peso inicial y el peso después del tratamiento respectivo, así como el rendimiento en cada caso.

Tabla 2.1.

Condiciones de obtención de los materiales.

# Carbonizado	Temperatura (°C)	Tiempo de pirólisis (h)	Peso inicial (g)	Peso final (g)	Rendimiento (%)
1	600	1:30	10.02	0.449	4.5
2	750	1:30	10.00	0.372	3.7
3	900	1:30	9.99	0.350	3.5
4	600	3	10.00	0.310	3.1
5	600	5	10.02	0.198	2.0
6	600	1:30	10.01	0.230	2.3
7	600	3	10.08	0.217	2.2
8	600	5	10.01	0.414	4.1
9	600	3	10.00	1.37	13.7
10	750	3	10.01	0.618	6.2
11	900	3	10.01	1.51	15.1



Activación Química del Bagazo de Caña

La tabla 2.1 muestra los datos obtenidos para los carbonizados activados de manera física (los números 1 a 8) y los activados de manera química con ácido fosfórico (Los números 9 a 11). Se evidencia que la impregnación con este reactivo aumentó el rendimiento ya que facilitó la hidrólisis de la lignina y a la vez, pudo permitir un aumento de la porosidad. Aunque se evidencia en el carbonizado #10 un bajo rendimiento que pudo deberse a la pérdida de material durante el proceso de carbonización.

En el proceso de activación química, se empleó ácido fosfórico como agente activante para la obtención de carbones activados, teniendo varias ventajas con respecto al proceso de activación física, ya que involucra una única etapa de tratamiento térmico, requiere temperaturas considerablemente menores y se alcanzan mayores rendimientos y capacidades de adsorción disminuyendo así los costos del proceso.

Cabe señalar que la activación química con H_3PO_4 sólo se practica con materiales lignocelulósicos (Teng et al., 1998), además, en este proceso el carácter deshidratante del ácido fosfórico aceleró la ruptura de enlaces entre biopolímeros, facilitó la pérdida de hidrógeno y oxígeno, y convirtió unidades carbonadas grandes en unidades más pequeñas con mayor riqueza en carbono (Primera-Pedrozo et al., 2011). El ácido fosfórico aumenta la aromaticidad del carbón, la pérdida del carácter alifático y la formación de un sólido rígido entrecruzado (Teng et al., 1998; Primera-Pedrozo et al., 2011). Los materiales adsorbentes obtenidos presentaron una coloración entre grisácea y negra.

Caracterización de los Materiales Adsorbentes

Rendimiento

Los materiales activados de manera física mostraron resultados cercanos en cuanto a su rendimiento, sin superar el 4.5% en ninguno de los 8 materiales analizados. A diferencia de los materiales

carbonizados activados de manera química, en los que se evidenció un aumento en el rendimiento alcanzando el carbonizado #11 un 15.1% de rendimiento.

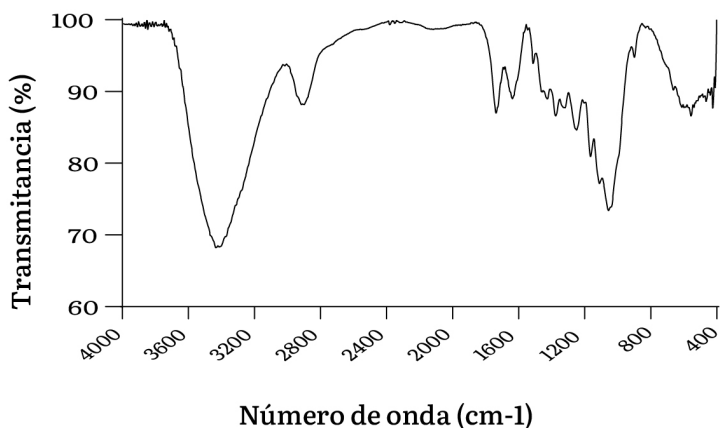
Análisis Infrarrojo

En las figuras 2.2 a 2.12 se presentan los espectros infrarrojos de los diferentes materiales adsorbentes obtenidos, el bagazo de caña y el tinidazol.

La figura 2.2. presenta el espectro del bagazo de caña, donde la banda amplia entre $3200\text{-}3600\text{ cm}^{-1}$ es debida al estiramiento de los enlaces de hidrógeno intramoleculares del grupo OH en la celulosa, la banda entre $2800\text{-}3000\text{ cm}^{-1}$ es por el estiramiento del grupo CH. La banda entre $1700\text{-}1800\text{ cm}^{-1}$ es por el estiramiento C-O para los enlaces acetilo y éster en lignina y hemicelulosa. Por otra parte, las bandas entre $1620\text{-}1649\text{ cm}^{-1}$, 1512 y 1595 cm^{-1} están asociadas con el anillo aromático presente en la lignina y el agua absorbida, respectivamente (Kumar et al., 2014).

Figura 2.2.

Espectro infrarrojo del Bagazo inicial.



La figura 2.3. muestra la estructura química del TND y la figura 2.4. su espectro infrarrojo. El espectro infrarrojo del TND exhibió una frecuencia vibratoria entre 2800 y 3200 cm^{-1} que se asocia al

estiramiento C-H. Las bandas entre 1400 y 1600 cm^{-1} se atribuyen a estiramientos asimétricos C=C (anillo de imidazol), C=N (anillo de imidazol) y N=O (NO₂). Las bandas que aparecieron entre 1200 y 1400 cm^{-1} se asociaron a estiramiento simétrico N=O, estiramiento asimétrico S=O y estiramiento CO. Por último, las bandas entre 800 y 1200 cm^{-1} se asignaron al estiramiento simétrico S=O y al estiramiento CN (Kumar et al., 2015).

Figura 2.3.

Estructura química del Tinidazol.

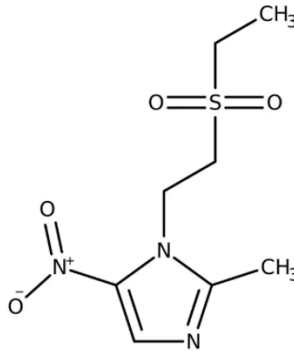
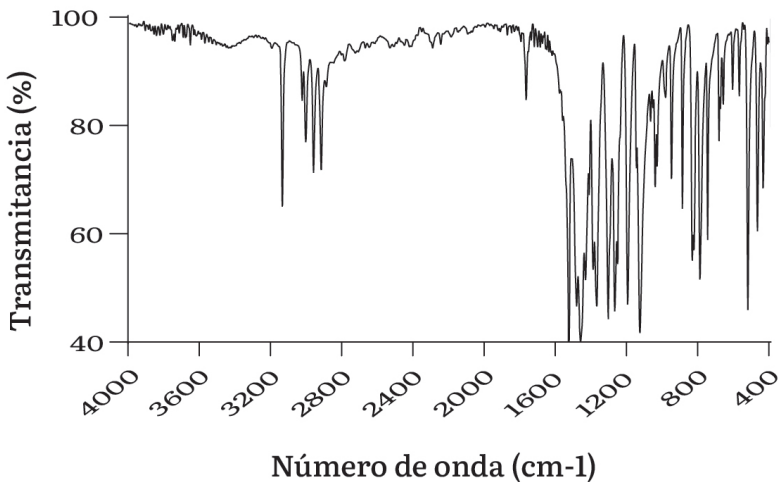


Figura 2.4.

Espectro infrarrojo del TND.



Por otra parte, los espectros infrarrojos, figuras 2.5. a 2.12, de los materiales obtenidos por activación física muestran numerosas bandas de adsorción, independientemente de las diferentes temperaturas de activación, que son similares a los del bagazo. Se evidencian bandas localizadas entre 3600 y 3200 cm^{-1} con una banda alrededor de 3300 cm^{-1} asociadas a la vibración de estiramiento O-H de los grupos hidroxilo unidos por enlaces de hidrógeno. Por otra parte, la aparición de la banda alrededor de 2900 cm^{-1} puede atribuirse a la vibración asimétrica de los grupos C-H. Las bandas entre 1800 y 1600 cm^{-1} se atribuyeron a la vibración de estiramiento C=C en el anillo aromático. Las bandas entre 1400 y 800 cm^{-1} se deben al estiramiento de grupos C-O. Por último, las bandas en 600 y 400 cm^{-1} pueden pertenecer a vibraciones de estiramiento C-C. Estos resultados muestran que los grupos funcionales obtenidos pudieron haberse formado debido a la degradación oxidativa por el tratamiento térmico (Somyanonthanakun et al., 2023).

Figura 2.5.

Espectro infrarrojo del carbonizado #1.

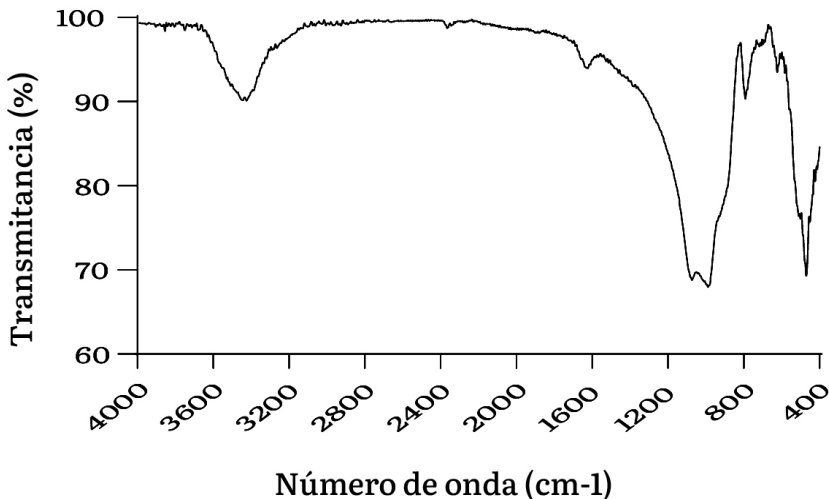




Figura 2.6.
Espectro infrarrojo del carbonizado #2.

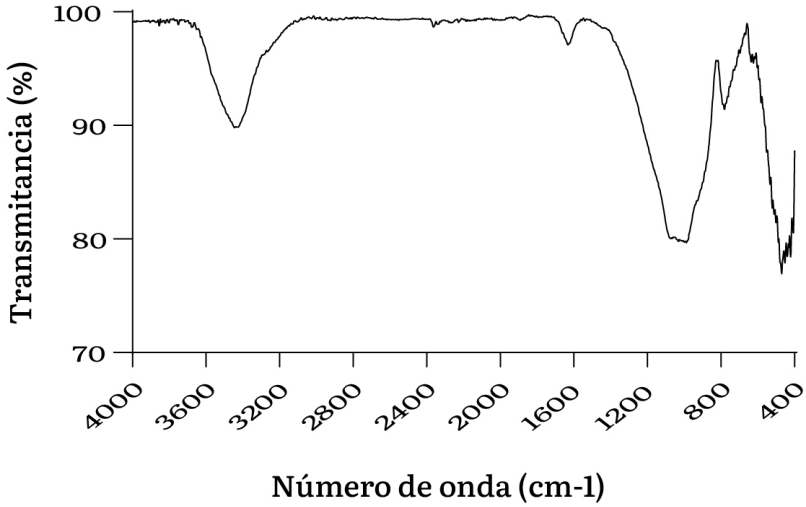


Figura 2.7.
Espectro infrarrojo del carbonizado #3.

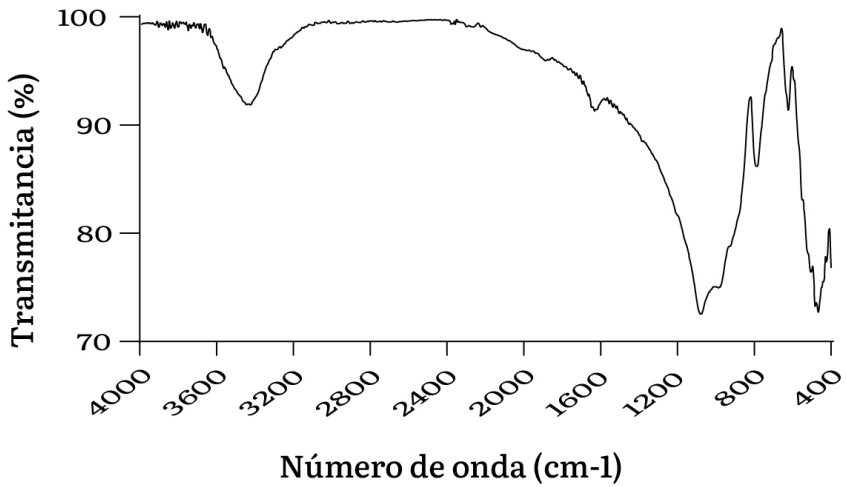




Figura 2.8.

Espectro infrarrojo del carbonizado #4.

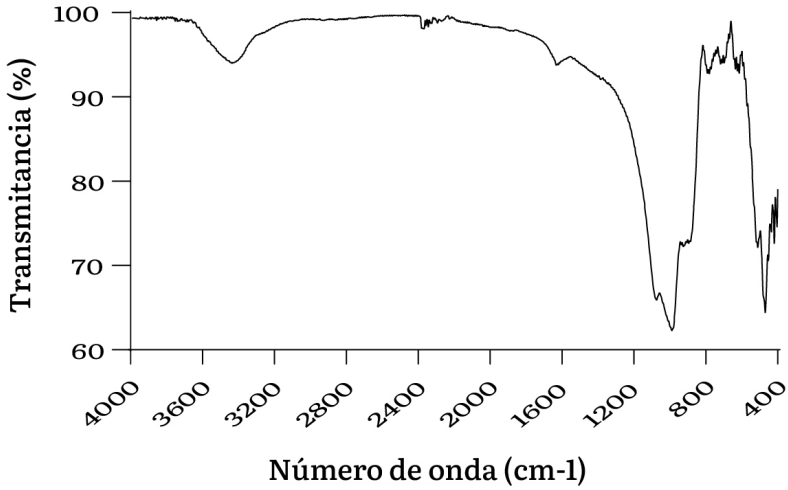


Figura 2.9.

Espectro infrarrojo del carbonizado #5.

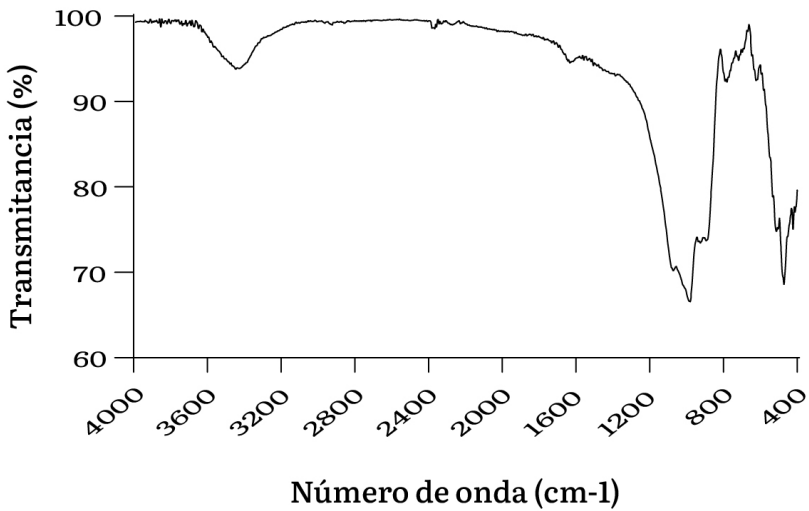




Figura 2.10.
Espectro infrarrojo del carbonizado #6.

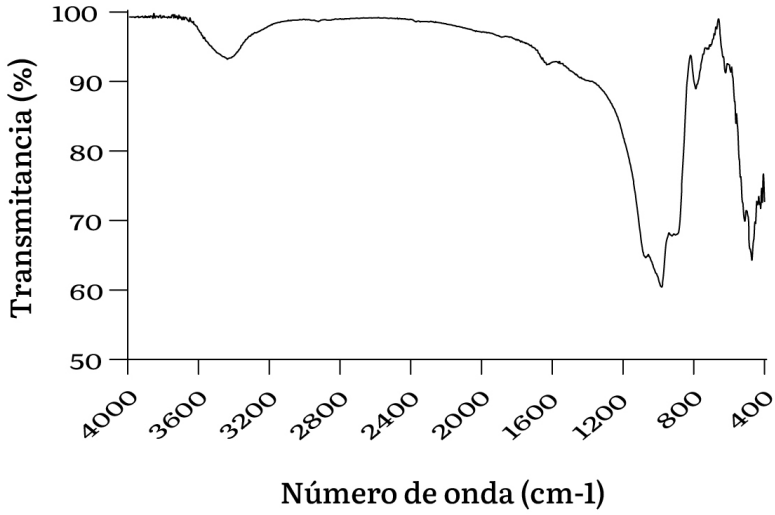


Figura 2.11.
Espectro infrarrojo del carbonizado #7.

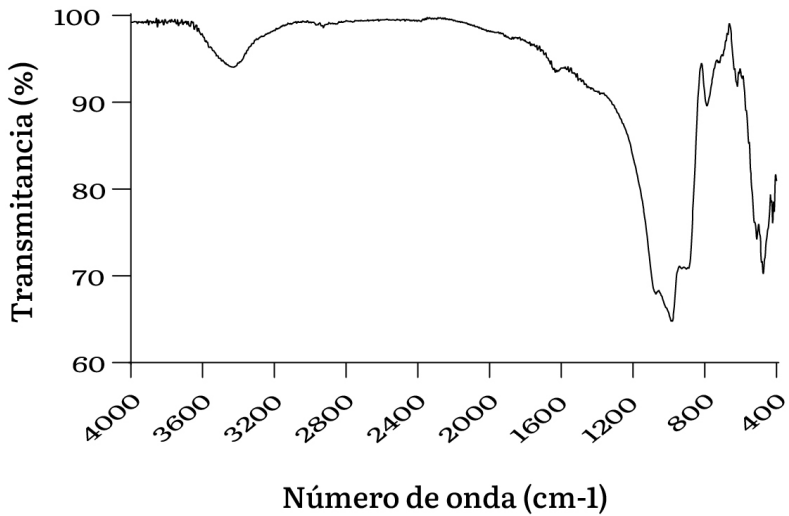
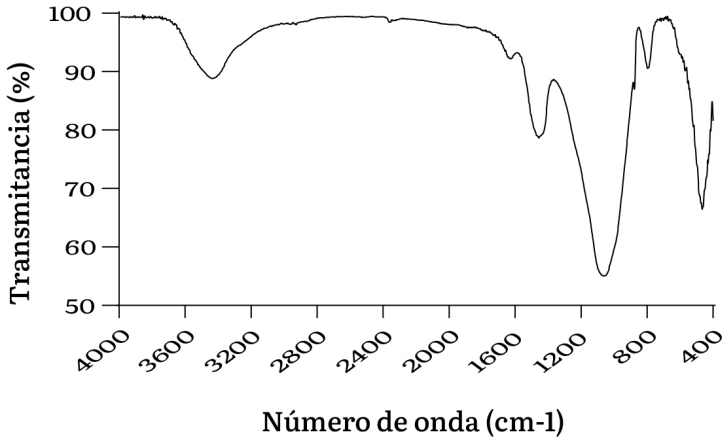




Figura 2.12.

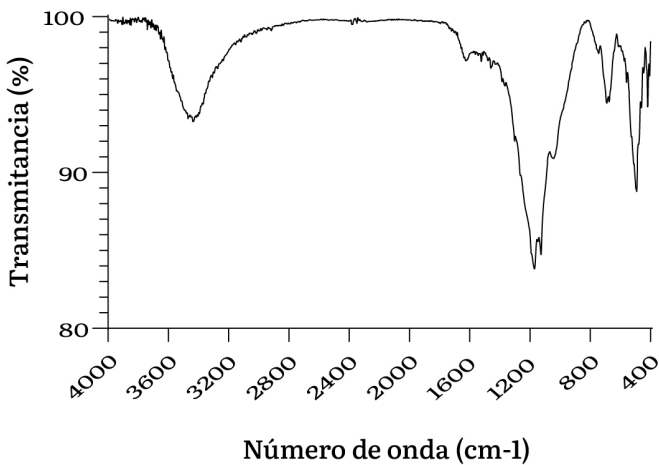
Espectro infrarrojo del carbonizado #8.



Además, el espectro infrarrojo en la figura 2.13 del material activado de forma química con ácido fosfórico presentó bandas entre 1100 y 1200cm-1 atribuibles a la flexión de los grupos P=O y P-O, indicando que la superficie del material fue efectivamente modificada (Mohtashami et al., 2018).

Figura 2.13.

Espectro infrarrojo del carbonizado #9.





Evaluación de la Capacidad Descontaminante de los Materiales Adsorbentes

La curva de calibración realizada presentó una ecuación de la recta de $y = 0.04x + 0.0376$ y un valor de $r^2 = 0.985$.

Los resultados de los estudios de remoción se presentan en la tabla 2.2. Se evidencia que el bagazo de caña por sí mismo tiene una capacidad de remoción del 19.8%, esto debido a interacciones por enlaces de hidrógeno que puede establecer entre el TND y los grupos OH de la estructura de celulosa, hemicelulosa y lignina. No obstante, con el tratamiento físico se evidenció una disminución en su capacidad adsorbente, ya que como se mencionó anteriormente, hay pérdida de la estructura de la celulosa, hemicelulosa y lignina lo que afecta negativamente su interacción con el TND.

Por otra parte, la activación química mejoró notablemente la capacidad de interacción con el TND. Esto se puede explicar por el hecho que el TND tiene un pKa de 4.7 (Patnala et al., 2017) y los ensayos se realizaron a un pH de alrededor de 5.5, con lo que el TND tiene una carga positiva en su grupo NO_2 , que puede interactuar a través de interacciones electrostáticas con los grupos fosfatos presente en la superficie de los materiales activados químicamente, con lo que se mejora su capacidad de retención de TND. No obstante, se evidencia que no hubo una correlación entre la temperatura de activación y el porcentaje de remoción de TND, lo cual podría indicar modificaciones diferentes en cuánto a grupos fosfatos en la superficie del material adsorbente, aunque algunos estudios de remoción empleando otros compuestos han demostrado que no hay una correlación entre el contenido de grupos fosfatos y el porcentaje de remoción. Además, es necesario tener presente que el área superficial de cada uno de los materiales adsorbentes juega un papel fundamental para la interacción con TND, ya que a una mayor área superficial hay mayor probabilidad de una mayor retención de este contaminante.



Tabla 2.2.

Resultados de remoción de TND por parte de los diferentes materiales adsorbentes.

# Carbonizado	Condiciones obtención materiales adsorbentes	Remoción tinidazol (%)
0	Bagazo	19.8 ± 3.1
1	1:30 h a 600 °C	2.8 ± 1.1
2	1:30 h a 750 °C	10.3 ± 1.7
3	1:30 h a 900 °C	10.7 ± 3.2
4	3 h a 600 °C	8.4 ± 2.6
5	5 h a 600 °C	5.1 ± 1.5
6	1:30 h a 600 °C	10.2 ± 1.3
7	3 h a 600 °C	13.7 ± 0.9
8	5 h a 600 °C	6.7 ± 0.9
9	3 h a 600 °C	78 ± 2.5
10	3 h a 750 °C	33.6 ± 1.3
11	3h a 900°C	7.9 ± 1.1

Análisis Microbiológico de Material Farmacéutico no Estéril

Los análisis de material farmacéutico no estéril dieron como resultado ausencia de bacterias patógenas, *Pseudomonas aeruginosa* y *Staphylococcus aureus* en los tres materiales carbonizados activados de manera química, lo cual se atribuye a que estos materiales pasaron por un proceso de activación con ácido fosfórico lo que pudo conllevar a que se inhibiera su crecimiento. Estos análisis microbiológicos son primordiales en la industria farmacéutica para las materias primas de uso cotidiano, que es el objetivo final de la producción de este carbón activado. Estos resultados se muestran en la tabla 2.3.



Tabla 2.3.
Resultados de los análisis microbiológicos.

	Microorganismos	
	<i>Pseudomonas aeruginosa</i>	<i>Staphylococcus aureus</i>
Bagazo de caña	Ausencia	Ausencia
Carbonizado #9	Ausencia	Ausencia
Carbonizado #10	Ausencia	Ausencia
Carbonizado #11	Ausencia	Ausencia

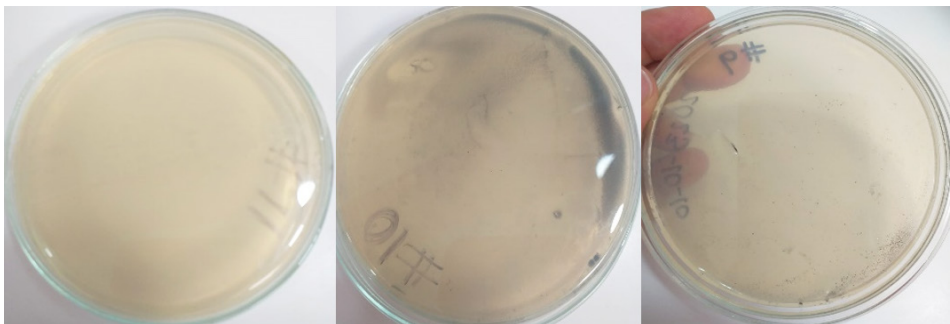
Determinación de *Pseudomonas Aeruginosa*

La *Pseudomonas aeruginosa* produce una amplia variedad de factores de virulencia, por lo tanto, la patogénesis de esta bacteria puede ser descrita como multifactorial. Puede colonizar partes del cuerpo humano, sin embargo, la prevalencia de esta colonización en personas saludables es baja. En su gran mayoría, las infecciones ocasionadas por *Pseudomonas aeruginosa* están relacionadas al ambiente hospitalario, constituyendo un grave problema clínico.

De acuerdo con los resultados presentes en la figura 2.14 se encontró que los materiales no tenían presencia de este microorganismo.

Figura 2.14.

Resultados de la detección de *Pseudomonas aeruginosa* en los materiales Carbonizados activados.





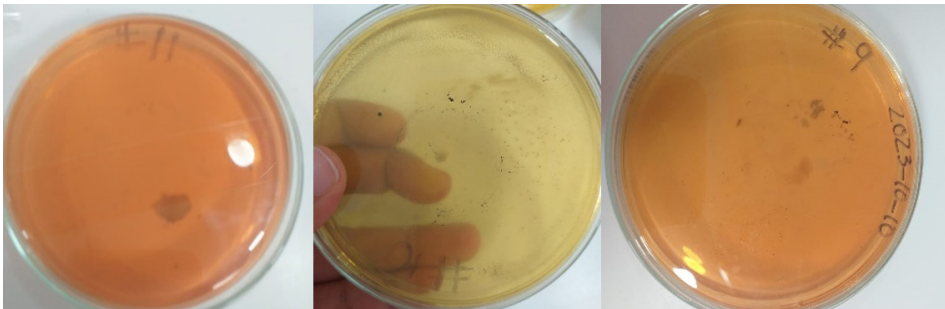
Determinación de *Staphylococcus Aureus*

Staphylococcus aureus es una bacteria considerada como oportunista, debido a que ocasiona enfermedades al humano, principalmente cuando éste atraviesa lapsos de vulnerabilidad asociados a circunstancias anómalas que disminuyen la competencia de su sistema inmunológico. Es una causa común de piodermitis, intoxicaciones alimentarias y toda una gran variedad de afecciones entre la población general (Taylor & Unakal, 2023).

De acuerdo con los resultados presentes en la figura 2.15 se encontró que los materiales no tenían presencia de este microorganismo.

Figura 2.15.

Resultados de la detección de *Staphylococcus aureus* en los materiales Carbonizados activados.



Prueba de Promoción de Crecimiento

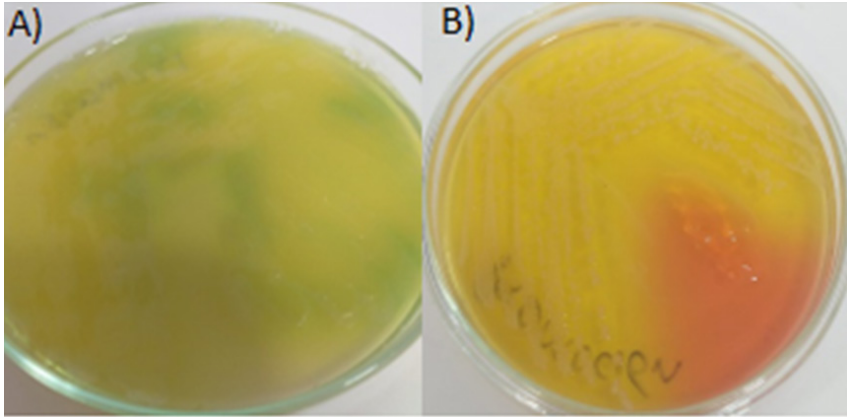
La prueba de promoción de crecimiento para el agar Manitol y Cetrimida, fue positiva ya que hubo presencia crecimiento de colonias características para estos microorganismos. En el caso de *Pseudomonas aeruginosa* hubo crecimiento y pigmentación de verde azulada a verde característica alrededor del crecimiento de este microorganismo (Kiska & Gilligan, 2003) como se puede ver en la figura 2.16A, en tanto, para *Staphylococcus aureus* se evidenció que la placa presenta crecimiento y pigmentación de colonias amarillas rodeadas o no de un halo amarillo, característica del crecimiento de



este microorganismo (Taylor & Unakal, 2023), tal como se muestra en la figura 2.16B.

Figura 2.16.

Prueba de promoción de crecimiento. A) *Pseudomonas aeruginosa* en agar Cetrimida. B) *Staphylococcus aureus* en agar Manitol Salado.



Conclusiones

El bagazo de caña de azúcar demostró una capacidad de adsorción de Tinidazol en todos los ensayos realizados de manera física y química, sin embargo, el carbonizado activado de manera química con ácido fosfórico a una temperatura de 600 °C durante 3 horas removió el 78% del tinidazol presente en la muestra, un porcentaje alto que muestra su efectividad. Además, hay que considerar que el bagazo sin ningún tratamiento también demostró un porcentaje de remoción considerable de 19.8%, un resultado incluso mayor que algunos de los materiales activados de manera física.

El carbón activado producido a partir del bagazo de caña es un material que presentó un alto grado de efectividad al remover en este caso tinidazol, esto pudo ser producido por las características fisicoquímicas del material, los tiempos y temperaturas a las que se realizaron las activaciones e incluso el ácido fosfórico con el que se realizó su activación química.



Con este trabajo se puede concluir que el carbón activado producido a partir de desechos agroindustriales como el bagazo de caña para el tratamiento de aguas residuales contaminadas con tinidazol es un gran avance en cuanto a temas de biorremediación, ya que se da un segundo uso a un desecho de la industria que no parecía tener un factor de aplicación en temas de descontaminación del medio ambiente. El desarrollo de este producto puede tener un impacto ambiental positivo para la descontaminación de cuerpos de agua contaminados con tinidazol y es de esperarse que otros materiales precursores para la producción de carbón activado funcionen de manera similar, logrando un aprovechamiento de desechos agroindustriales típicos de la zona y mitigando así los altos niveles de desperdicios.

Con lo anterior se abren las puertas al uso de diferentes materiales de desecho agroindustriales como posibles fuentes de descontaminación, se pueden generar alternativas de gran impacto ambiental que permitan realizar trabajos de biorremediación y explorar así otros ámbitos de aplicación. Además, se puede profundizar en diferentes metodologías para obtener así materiales carbonizados con otras características de acuerdo con los usos que se les puede dar como adsorbentes y mejorar así los resultados de remoción.

Referencias Bibliográficas

Arcos, J.C. (2022). Remoción de productos farmacéuticos de aguas residuales mediante el uso de adsorbentes zeolíticos”. Tesis de Pregrado. Universidad Central de Ecuador. <https://www.dspace.uce.edu.ec/server/api/core/bitstreams/c48b6ae2-d95c-4cbd-b369-6aa95ea98380/content>

Asocaña. (2023). Sector Agroindustrial de la Caña. <https://www.asocana.org/publico/info.aspx?Cid=215#:~:text=Durante%20el%202022%2C%20la%20agroindustria,partir%20de%20ca%20C3%Bl%20de%20az%20C3%BAcar>

Bachrun, S., AyuRizka, N., Annisa, S., & Arif, H. (2016). Preparation and characterization of activated carbon from sugarcane



- bagasse by physical activation with CO₂ gas. *IOP Conference Series Materials Science and Engineering*, 105, 012027. <https://doi.org/10.1088/1757-899x/105/1/012027>
- Cueva-Orjuela, J. C., Del Socorro Hormaza-Anaguano, A., & Merino-Restrepo, A. (2017). Sugarcane bagasse and its potential use for the textile effluent treatment. *DYNA*, 84(203), 291–297. <https://doi.org/10.15446/dyna.v84n203.61723>
- Farmacopea de los Estados Unidos de América (2024). Capítulo 62. Examen microbiológico de productos no estériles: pruebas de microorganismos específicos.
- Hinojosa, Y. González, C., & Pérez LR (2021). Contaminantes emergentes en el agua: causas y efectos. *Impluvium*, 10(8), 21-26.
- Hiranobe, C. T., Gomes, A. S., Paiva, F. F. G., Tolosa, G. R., Paim, L. L., Dognani, G., Cardim, G. P., Cardim, H. P., Santos, R. J. D., & Cabrera, F. C. (2024). Sugarcane Bagasse: Challenges and Opportunities for Waste Recycling. *Clean Technologies*, 6(2), 662–699. <https://doi.org/10.3390/cleantechnol6020035>
- Kiska, D.L., and P.H. Gilligan. 2003. Pseudomonas. In: Murray, P. R., E. J. Baron, J.H. Jorgensen, M. A. Pfaller, and R. H. Tenover (ed.). *Manual of clinical microbiology* 8th edition. *Diagnostic Microbiology and Infectious Disease*, 47(4), 625–626. [https://doi.org/10.1016/s0732-8893\(03\)00160-3](https://doi.org/10.1016/s0732-8893(03)00160-3)
- Kumar A, Singh Y, Chaudhary V, Bhardwaj N (2014). Characterization of Cellulose Nanocrystals Produced by Acid-Hydrolysis from Sugarcane Bagasse as Agro-Waste. *Journal of Materials Physics and Chemistry*, 2(1): 1-8. <https://doi.org/10.12691/jmpc-2-1-1>
- Kumar, A., Negi, Y. S., Choudhary, V., & Bhardwaj, N. K. (2020). Characterization of Cellulose Nanocrystals Produced by Acid-Hydrolysis from Sugarcane Bagasse as Agro-Waste. *Journal of Materials Physics and Chemistry*, 2(1), 1–8. <https://doi.org/10.12691/jmpc-2-1-1>



- Mohtashami, S., Kolar, N. A., Kaghazchi, T., Asadi-Kesheh, R., & Soleimani, M. (2018). Optimization of sugarcane bagasse activation to achieve adsorbent with high affinity towards phenol. *TURKISH JOURNAL OF CHEMISTRY*, 42(6), 1720–1735. <https://doi.org/10.3906/kim-1806-71>
- Narayanasamy, S., Chan, K. L., Cai, H., Razak, A. H. B. A., Tay, B. K., & Miao, H. (2019). Biobutanol production from sugarcane bagasse by *Clostridium beijerinckii* strains. *Biotechnology and Applied Biochemistry*, 67(5), 732–737. <https://doi.org/10.1002/bab.1865>
- Patnala, R. C. M., Khagga, M., Bhavani, R., & Bhavani, V. (2017). Synthesis, Characterization and Biological activity of Novel Salt/Molecular Salts of Tinidazole. *Oriental Journal of Chemistry*, 33(2), 859–872. <https://doi.org/10.13005/ojc/330235>
- Primera-Pedrozo O, Colpas-Castillo F, Meza-Fuentes E, Fernández-Maestre R (2011). Carbones activados a partir de bagazo de caña de azúcar y zuro de maíz para la adsorción de cadmio y plomo. *Revista de la Academia Colombiana de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales*, 35 (136), 387-396.
- Qin, Q., Qin, H., Li, K., Tan, R., Liu, X., & Li, L. (2020). The adsorption characteristics and degradation mechanism of tinidazole on an anatase TiO₂ surface: a DFT study. *RSC Advances*, 10(4), 2104–2112. <https://doi.org/10.1039/c9ra06665a>
- Raut, E. R., Bedmohata, M. A., & Chaudhari, A. R. (2022). Comparative study of preparation and characterization of activated carbon obtained from sugarcane bagasse and rice husk by using H₃PO₄ and ZnCl₂. *Materials Today Proceedings*, 66, 1875–1884. <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2022.05.413>
- Sohani, S., Ara, B., Khan, H., Gul, K., & Khan, M. (2022). RETRACTED: Photocatalytic assessed adsorptive removal of tinidazole from aqueous environment using reduced magnetic graphene oxide-bismuth oxychloride and its silver composite. *Environmental Research*, 215(Pt 2), 114262. <https://doi.org/10.1016/j.envres.2022.114262>



- Somyanonthanakun, W., Greszta, A., Roberts, A. J., & Thongmee, S. (2023). Sugarcane Bagasse-Derived Activated Carbon as a Potential Material for Lead Ions Removal from Aqueous Solution and Supercapacitor Energy Storage Application. *Sustainability*, 15(6), 5566. <https://doi.org/10.3390/su15065566>
- Taylor, T. A., Tobin, E. H., & Unakal, C. G. (2025, December 1). *Staphylococcus aureus* Infection. StatPearls - NCBI Bookshelf. <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/books/NBK441868/>
- Teng, H., Yeh, T., & Hsu, L. (1998). Preparation of activated carbon from bituminous coal with phosphoric acid activation. *Carbon*, 36(9), 1387-1395. [https://doi.org/10.1016/s0008-6223\(98\)00127-4](https://doi.org/10.1016/s0008-6223(98)00127-4)
- Vargas, Y.A., & Pérez, L.I. (2018). Aprovechamiento de residuos agroindustriales en el mejoramiento de la calidad del ambiente. *Revista Facultad De Ciencias Básicas*, 1(1), 59-72.
- Vera, L., Uguña, M.F., García, N., Flores, M., & Vázquez, V. (2015). Eliminación de los metales pesados de las aguas residuales mineras utilizando el bagazo de caña como biosorbente. *Revista de Química Teórica y Aplicada*, 73(573), 43-49.
- Vidal, M., Rodríguez, A., Martínez, K., Ocampo, J., & Barrios, W. (2018). Potencial de residuos agroindustriales para la síntesis de Carbón Activado: una revisión. *Scientia Et Technica*, 23(3), 412-420.
- Wang, H., Wang, Y., & Dionysiou, D. D. (2023). Advanced oxidation processes for removal of emerging contaminants in water. *Water*, 15(3), 398. <https://doi.org/10.3390/w15030398>
- Yakout, S., & El-Deen, G. S. (2011). Characterization of activated carbon prepared by phosphoric acid activation of olive stones. *Arabian Journal of Chemistry*, 9, S1155-S1162. <https://doi.org/10.1016/j.arabjc.2011.12.002>



CAPÍTULO 3

Evaluación de la Capacidad Descontaminante *In vitro* de las Cáscaras de Chontaduro en Aguas Contaminadas por Ibuprofeno

In vitro Decontamination Potential of Chontaduro Fruit Peels in Water Contaminated with Ibuprofen

Marylin Urbano Montero

Universidad Santiago de Cali, Colombia

✉ marylin.urbano00@usc.edu.co

© <https://orcid.org/0009-0009-3922-3299>

Yhors Alexander Ciro Monsalve

Universidad Santiago de Cali, Colombia

© <https://orcid.org/0000-0003-4093-8696>

✉ yhors.ciro00@usc.edu.co

Betty Eliana García Becerra

Universidad Santiago de Cali, Colombia

✉ betty.garcia00@usc.edu.co

© <https://orcid.org/0009-0006-5934-7537>

Resumen

Actualmente, el carbón activado es de los materiales adsorbentes más empleado para fines de remediación ambiental, en especial, de aguas contaminadas con fármacos. En este sentido, uno de los focos principales es su obtención a partir de materia prima renovable, como lo es la materia vegetal residual, la cual en muchos casos resulta siendo

Cita este capítulo / Cite this chapter

Urbano Montero, M.; García Becerra, B. E. y Ciro Monsalve, Y. A. (2026). Evaluación de la capacidad descontaminante *in vitro* de las cáscaras de chontaduro en aguas contaminadas por ibuprofeno. En: Ciro Monsalve, Y. A. (ed. científico). *Aprovechamiento de residuos agroindustriales para la biorremediación de fármacos en fuentes hídricas*. (pp. 57-87). Cali, Colombia: Universidad Santiago de Cali. <https://doi.org/10.35985/9786287914049.3>



poco aprovechada. Por ende, en este trabajo se obtuvo carbón activado a partir de cáscaras de chontaduro, un residuo generado en gran cantidad a nivel local, por medio de calcinación empleando un agente químico ácido (H_3PO_4) y un agente químico básico (NaOH). Posteriormente, los materiales obtenidos se caracterizaron por medio de espectroscopía de infrarrojo, titulación de Bohem y punto de carga cero. Además, se evaluó su capacidad de adsorción in-vitro de ibuprofeno en un medio acuoso a pH neutro, ácido y básico. Los resultados permitieron corroborar la obtención de carbón activado empleando ambas rutas propuestas, registrando más de 4000 mmol de grupos funcionales superficiales por gramo de material. Asimismo, se identificaron grupos funcionales como ácidos carboxílicos, fenoles, lactonas y aminas en la superficie de los materiales adsorbentes. Finalmente, se observó que estos grupos funcionales se pueden encontrar cargados en un amplio valor de pH, lo que permite potenciar la remoción de ibuprofeno en medio acuoso, que fue de hasta ~5mg por gramo de carbón activado. Con este trabajo, se evidenció el potencial de las cáscaras de chontaduro como materia prima alternativa en la obtención de materiales adsorbentes capaces de remover ibuprofeno en medio acuoso.

Palabras clave: Chontaduro, adsorbente, remoción, ibuprofeno, carbón activado.

Abstract

Currently, activated carbon is the most widely used adsorbent material for environmental remediation purposes, especially of water contaminated with pharmaceuticals. In this sense, one of the main focuses is its production from renewable raw materials, such as residual plant material, which in many cases is little used. Thus, in this work activated carbon was obtained from peach-palm shells, a residue generated in large quantities locally, by means of calcination using an acid chemical agent (H_3PO_4) and a basic chemical agent (NaOH). The materials obtained were subsequently characterized by means of infrared spectroscopy, Bohem titration and zero-charge point. In addition, the ability of ibuprofen to adsorb in-vitro in an aqueous medium at neutral, acidic, and basic pH was evaluated.



The results corroborated the production of activated carbon using both proposed routes, recording more than 4000 mmol of surface functional groups per gram of material. Functional groups such as carboxylic acids, phenols, lactones, and amines were also identified on the surface of adsorbent materials. Finally, it was observed that these functional groups can be found charged at a wide pH value, which allows to enhance the removal of ibuprofen in aqueous medium, which was up to ~5 mg per gram of activated carbon. With this work, the potential of peach-palm shells as an alternative raw material in obtaining adsorbent materials capable of removing ibuprofen in aqueous medium was evidenced.

Keywords: Peach palm, adsorbent, removal, ibuprofen, activated carbon.

Introducción

En la actualidad, la industria farmacéutica es un valioso elemento de sanidad a nivel mundial. No obstante, debido al incremento continuo en el uso de fármacos desde finales del siglo pasado, éstos han sido incluidos dentro de los denominados contaminantes emergentes (CE), los cuales en concentraciones muy bajas inducen efectos fisiológicos en seres humanos y efectos adversos en la vida silvestre acuática y terrestre. A través de diferentes rutas, los fármacos alcanzan ecosistemas terrestres, así como, diferentes cuerpos de agua como ríos, lagos y mares, llegando a afectar la calidad del agua potable (Artos et al., 2021). A nivel global, la fuente principal de esta polución son las aguas residuales urbanas, es decir, los residuos farmacéuticos son transportados al ciclo del agua por medio de la excreción humana, la eliminación de los productos no utilizados, uso agrícola, efluentes hospitalarios y efluentes de fábricas sin tratamiento o aguas inadecuadamente tratadas antes de ser liberadas a ríos y mares (Richardson & Bowron, 1985). Diferentes estudios han demostrado que a pesar de que las plantas de tratamiento de aguas residuales busquen eliminar estos contaminantes del agua, muchos de ellos permanecen aun cuando han pasado todo el tratamiento en estas plantas, incrementando la preocupación por esta problemática ambiental (Tejada et al., 2014).



Entre los diferentes fármacos que se incluyen dentro de los CE están los analgésicos/antiinflamatorios, antibióticos, antiepilépticos, β -bloqueantes, reguladores de lípidos, medios de contraste en rayos X, anticonceptivos orales, esteroides. Ejemplos particulares son el ibuprofeno, diclofenaco, carbamazepina, o el ácido clofibrico en aguas potables (Alean et al., 2021). Por su parte, el ibuprofeno resulta de interés investigativo ya que, aunque no posee la mayor toxicidad, al tener niveles de consumo tan altos, sus efectos en la fauna acuática resultan más marcados, afectando diferentes ecosistemas acuáticos, por ejemplo, en su capacidad de trasladarse, alimentarse e incluso reproducirse (Artos et al., 2021). En adición, la contaminación por ibuprofeno es creciente debido a que es el segundo analgésico más vendido dentro de los analgésicos antiinflamatorios no esteroides y esta cifra aumenta debido a su condición de venta libre (Foroambiental, 2018). También, otro factor influyente en la contaminación por ibuprofeno es su particular estructura química, la cual no se degrada fácilmente, por lo que, entre el 30% y el 90% de la dosis administrada es excretada en la orina como sustancia activa y permanece en las aguas por tiempos prolongados (Libretrext, 2022), .Además, se ha detectado ibuprofeno en agua superficial, subterránea y de consumo humano en 47 países en todo el mundo, con concentraciones ambientales promedio y máximas mundiales de 0.108 $\mu\text{g/L}$ y 303 $\mu\text{g/L}$, respectivamente (Alean et al., 2021).

Por ende, la descontaminación de aguas con altos contenidos de CE resulta compleja desde varios puntos de vista. Primero, existe una amplia gama de características fisicoquímicas dentro del conjunto de CE, por lo que, desarrollar una metodología que los elimine totalmente es una tarea ardua. Segundo, el estado físico de los mismos y su tamaño restringe las posibilidades del uso de técnicas con mecanismos de eliminación a nivel molecular en agua. Tercero, la necesidad de descontaminar grandes volúmenes de agua requiere de una técnica que sea fácilmente escalable, sencilla de aplicar y económica (García-Gómez et al., 2011). Sin embargo, dentro de las diferentes técnicas propuestas, aquellas basadas en adsorción satisfacen en su gran mayoría todos estos requerimientos.



Es así como la descontaminación por adsorción empleando carbón activado destaca frente a otro tipo de materiales sintéticos de alto costo y limitada acción (Cabrita et al., 2010; Ahmed, 2017). Esto es porque el carbón activado puede obtenerse desde diferentes materias primas, principalmente de origen vegetal, con un alto contenido de carbono. De esta forma, se ha planteado su obtención desde residuos agrícolas, ya que son una fuente prometedora desde un punto de vista de aprovechamiento, química verde y principios de sostenibilidad (Vargas & Pérez, 2018).

Por ejemplo, en Colombia, los productos que más pérdidas y desperdicios generan son las frutas y verduras, llegando al 58% según el Ministerio de Agricultura (Redagrícola, 2021). Entre estos, la gulupa genera 16,120 ton/año de residuos, mientras que, la pitahaya ocasiona 5.870 ton/año y la uchuva 4,832 ton/año y el chontaduro 13,732 ton/año (Redagrícola, 2021; Jaramillo, 2022). Este último es común en la costa Pacífica, donde ha sido un alimento esencial, especialmente para los indígenas y afrodescendientes. Además, el chontaduro (*Bactris gasipaes*) es considerado uno de los alimentos más ricos en aminoácidos y se le atribuyen amplios beneficios para la salud, además de su significado cultural (Dias et al., 2022). En este sentido, resulta claro que la amplia comercialización y consumo del chontaduro promueven una alta generación de residuos, como su cáscara, los cuales resultan subutilizados en su mayoría. Este tipo de residuos pueden ser materia prima clave para la preparación de diferentes materiales funcionales, como se ha reportado para diferentes tipos de residuos agrícolas (Bouhcain, 2022).

Teniendo en cuenta lo anterior, en este trabajo se obtuvieron materiales adsorbentes a partir de las cáscaras de chontaduro mediante calcinación y tratamiento con agentes químicos como el ácido fosfórico y el hidróxido de sodio. Para así, establecer una metodología sustentable basada en el aprovechamiento de residuos locales para la obtención de material carbonoso adsorbente que contribuya a la remoción de contaminantes emergentes de aguas, en este caso, particularmente de ibuprofeno.

Materiales y Métodos

El ácido clorhídrico (HCl), ácido fosfórico (H_3PO_4 , 85%, Merck), bicarbonato de sodio ($NaHCO_3$, 99%), fenolftaleína (99%) y estándar de ibuprofeno se adquirieron de Merck. El verde de bromocresol (96%) e hidrogenoftalato de potasio (99%) se adquirieron de Sigma-Aldrich. El hidróxido de sodio (NaOH, 98%) se adquirió de Protokimica, el carbonato de sodio (Na_2CO_3 , 99%) de Mallinckrodt y el etanol (96%) de Ciacomeq SAS.

En la figura 3.1 se ilustra la ruta metodológica seguida para la preparación del carbón activado. A continuación, se describe cada uno de los pasos implementados.

En primer lugar, se realizó el lavado y secado de las cáscaras de chontaduro, luego se sometió a activación química con ácido fosfórico e hidróxido de sodio. Una vez obtenidos los materiales adsorbentes se caracterizaron por espectroscopía infrarroja, punto de carga cero y titulación e Boehm para obtener información de los grupos funcionales. Por último, se evaluó la capacidad de remoción in-vitro de ibuprofeno en medio acuoso de cada material obtenido y de las cáscaras sin ningún tratamiento, variando el tiempo de contacto.

Figura 3.1.

Ruta metodológica para la preparación de carbón activado a partir de cáscaras de chontaduro.





Obtención y Acondicionamiento de las Cáscaras de Chontaduro

Las cáscaras de chontaduro utilizadas como fuente de carbono se recolectaron en un punto de venta ambulante, a las afueras de la Universidad Santiago de Cali (Calle 5 No. 62 -00, Cuarto de Legua, Cali, Valle del Cauca). Posteriormente, se lavaron con abundante agua potable y jabón neutro. Luego, se secaron en horno a 150 °C durante 24 horas, para eliminar el exceso de agua, se molieron en un molino de martillo MF 10 Basic (IKA®) y se tamizaron por una malla # 40 para tener un tamaño de partícula menor a 425 µm.

Preparación de Carbón Activado a través de Carbonización Ácida (CAA)

Se pesaron 50 g de cáscara de chontaduro previamente tratada en crisoles y se añadieron 150 mL de H_3PO_4 al 30%, con agitación constante por 30 minutos. Posteriormente, la mezcla se dejó en reposo por 24 horas para generar una apropiada penetración de la solución ácida en la materia prima. Luego, se retiró el sobrenadante y el material resultante se calcinó en una mufla a 800 °C durante 3 horas. El material carbonizado resultante se dejó enfriar hasta temperatura ambiente en un desecador y se lavó con agua purificada hasta alcanzar una conductividad constante. Por último, la suspensión se centrifugó y el material sólido se secó en una balanza termogravimétrica a 120 °C y se tamizó por una malla # 40. El material obtenido mediante esta ruta se denominó CAA.

Preparación de Carbón Activado a través de Carbonización Básica (CAB)

Se pesaron 50 g. de cáscara de chontaduro previamente tratada en crisoles y se añadieron 150 mL de NaOH al 10%, con agitación constante por 30 minutos. Posteriormente, la mezcla se dejó en reposo por 24 horas para generar una apropiada penetración de la solución básica en la materia prima. Luego, se retiró el sobrenadante y el material resultante se calcinó en una mufla a 800 °C durante 3 horas. El material carbonizado resultante se dejó enfriar hasta temperatura ambiente



en un desecador y se lavó con agua purificada hasta alcanzar una conductividad constante. Por último, la suspensión se centrifugó y el material sólido se secó en una balanza termogravimétrica a 120 °C y se tamizó por una malla # 40. El material obtenido mediante esta ruta se denominó CAB.

Caracterización de los Materiales Carbonizados

A continuación, se presentan las diferentes pruebas de caracterización estructural, física y funcional de los materiales obtenidos, para observar el efecto del tratamiento térmico y químico en las cáscaras de chontaduro.

Caracterización Estructural

La caracterización estructural se realizó por espectroscopía de infrarrojo con transformada de Fourier acoplado a reflectancia total atenuada (FTIR-ATR) empleando un espectrofotómetro IRAffinity-1S (Shimadzu Co, Kioto, Japón), en el rango de 4000 a 600 cm^{-1} y una resolución de 4.0 cm^{-1} . Cada espectro FTIR-ATR fue procesado y graficado empleando Excel (Microsoft).

Caracterización Física

En esta sección se especifica cómo se realizaron las mediciones de la densidad asentada de los materiales bajo evaluación.

Densidad Asentada

Para la medida de la densidad asentada del material se utilizó el método de la probeta (Marín-Pesántez, 2017). Para esto, se tomó una probeta de plástico y se determinó su masa. Posteriormente, se vertió en ésta la muestra y se registró su peso. Finalmente, se agitó la probeta en su base rítmicamente unas 20 veces para conseguir el asentamiento de la muestra y se midió el volumen ocupado por la muestra en la probeta. La densidad asentada se calculó dividiendo la masa de la muestra (en gramos) entre el valor del volumen del polvo asentado (en mL). Este proceso se realizó por triplicado.



Caracterización Funcional

Punto de Carga Cero (PZC)

El PZC es el valor del pH en el cual el número de sitios negativos y positivos es equivalente, es decir, la carga externa e interna total de las partículas sobre la superficie del material adsorbente es nula. Para determinar esta propiedad en el carbón activado obtenido, se procedió a mezclar 10 mg de cada material con 10 mL de solución acuosa a pH de 1, 3, 4, 5, 7, 9, 10 y 11 (Ajustados con NaOH 0.1 N o HCl 0.1N, según el caso) por 24 horas bajo agitación constante. Finalmente, se midió el pH final de la solución y el PZC se determinó en el punto donde se unió la curva del valor del pH inicial vs el pH final (Amaringo, 2013).

Determinación de Grupos Funcionales Superficiales

Se realizó la determinación de grupos funcionales superficiales en los carbones activados obtenidos mediante la titulación de Boehm. Ésta consiste en un análisis cuantitativo de grupos funcionales en la superficie de los materiales con base en sus reacciones con HCl (ácido fuerte), NaHCO_3 ($\text{pKa} = 6,4$), Na_2CO_3 ($\text{pKa} = 10,3$) y NaOH (base fuerte). En este análisis que considera que los potenciales grupos funcionales superficiales pueden ser ácidos carboxílicos (R-COOH), fenoles (Ar-OH), lactonas (R-OCO-) y/o grupos básicos, por ejemplo, aminas (R-NH₂). Por ende, se asume que el NaOH reacciona con ácidos, fenoles y lactonas, mientras que, el Na_2CO_3 reacciona con grupos ácido carboxílico y lactonas, el NaHCO_3 únicamente con grupos ácidos carboxílicos y el HCl reacciona con grupos básicos (Mestre et al., 2007).

Para esto, se adicionaron 0.25 g de cada carbón activado a 25 mL de cada uno de los reactivos previamente mencionados a una concentración de 0.1 N, y se dejaron en contacto por cinco días. Transcurrido este tiempo, se centrifugaron las suspensiones a 4500 rpm por 15 minutos y se tomaron 10 mL del sobrenadante para proceder con la titulación, empleando NaOH o HCl 0.1 N según fuera el caso. Los indicadores empleados fueron verde de bromocresol para el carbonato y bicarbonato de sodio, y fenolftaleína para el ácido clorhídrico e hidróxido de sodio.



Estudios de Remoción In vitro de Ibuprofeno en Medio Acuoso

La capacidad de remoción de ibuprofeno in-vitro en medio acuoso de los carbones activados obtenidos, se llevó a cabo utilizando soluciones acuosas de 7 ppm del contaminante modelo a valores de pH de 4.0, 7.0 y 10.0. Para esto, 100 mL de solución de ibuprofeno se puso en contacto con 20 mg de cada material adsorbente por tiempo de 0.5 h a 5 h bajo agitación continua a 300 rpm. Luego, la mezcla se centrifugó a 4500 rpm por 30 minutos y el sobrenadante se filtró por membrana de 0.45 μm y su absorbancia se leyó a $\lambda = 276 \text{ nm}$ en un espectrofotómetro 600 (Merck, Darmstadt, Alemania). Posteriormente, la cantidad de ibuprofeno no removida se determinó por interpolación de la absorbancia en la curva de calibración construida a concentraciones de ibuprofeno entre 1 y 7 ppm. Finalmente, esta concentración se restó de la concentración inicial de ibuprofeno para calcular el porcentaje de remoción.

Resultados y Análisis

Preparación del Carbón Activado

Las cáscaras de chontaduro, al igual que muchas otras cáscaras de frutos, están compuestas principalmente de material lignocelulósico como celulosa, hemicelulosa y lignina, los cuales poseen un alto contenido de carbono y oxígeno, y otros heteroátomos como nitrógeno, siendo un excelente precursor para la preparación de carbón activado. En este caso, las cáscaras de chontaduro se trataron con dos agentes químicos, uno ácido (H_3PO_4) y otro básico (NaOH), para la obtención del carbón activado CAA y CAB, respectivamente, y/o material adsorbente. Estos agentes son comúnmente empleados para promover diferentes reacciones degradativas (e.j., eliminación, deshidratación, oxidación, etc.) de la estructura carbonosa nativa del material que promuevan la obtención de grupos funcionales como ácidos carboxílicos, fenoles, lactonas, entre otros, los cuales ejercen un papel clave en la capacidad de adsorción del material (Mopoung et al., 2015). La cantidad de estos grupos dependen de diferentes



aspectos, como el tipo de agente químico, el tiempo de contacto y la temperatura empleada, entre otros (Demiral et al., 2021).

De esta forma, con la ruta de preparación por carbonización ácida (CAA) se obtuvo un rendimiento en la producción de carbón activado del 30%, en tanto por la ruta de preparación por carbonización básica (CAB) se obtuvo un rendimiento de alrededor del 3%. Esta diferencia significativa en los rendimientos puede ser atribuida a los diferentes mecanismos mediante los cuales los agentes químicos pueden degradar la estructura carbonosa. Por un lado, se ha reportado que el ácido fosfórico es un agente que promueve la formación de carbón activado con altos rendimientos debido a que no promueve significativamente la formación de productos volátiles, como H_2O , CO , CO_2 , CH_4 , etc., mientras que, el $NaOH$ puede promover esto fácilmente debido al carácter altamente reactivo del ion hidróxido (Malini et al., 2023). Particularmente, este último puede promover una hidrólisis de la estructura lignocelulósica del material con mayor facilidad que el ácido fosfórico, lo que resulta en una mayor pérdida de material por generación de productos volátiles (Ngueabou et al., 2022). En este sentido, se hace necesario considerar la utilización de $NaOH$ en menores cantidades, con el fin de no afectar significativamente el rendimiento. Lo anterior puede ser considerado para el caso del ácido fosfórico, con el fin de aumentar notablemente el rendimiento en la producción del carbón activado.

Caracterización de los Materiales Carbonizados

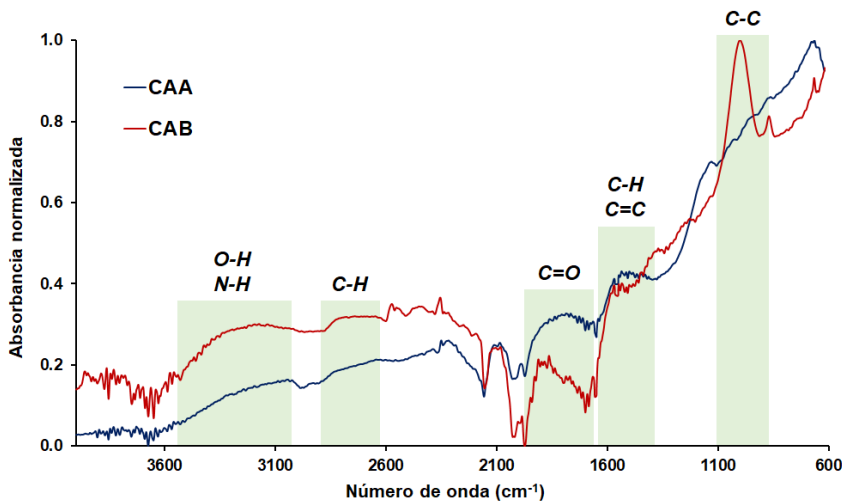
Caracterización Estructural por Espectroscopía de Infrarrojo

Los espectros FTIR-ATR de los carbones activados obtenidos se muestran en la Figura 3.2. En los espectros se evidencian señales para grupos funcionales con enlaces característicos como O-H, N-H, C-H, C=O, C=C y C-C. Particularmente, las bandas asociadas a la vibración de estiramiento de enlaces O-H y N-H, localizadas entre 3600 y 3000 cm^{-1} , son características de grupos funcionales como ácidos carboxílicos, fenoles y aminas. Lo anterior es un indicio de que este tipo de grupos pueden estar presentes

en ambos materiales adsorbentes preparados. Por otra parte, las bandas espectrales asociadas a grupos C-H y C-C, característicos de la estructura carbonosa formada, se aprecian entre 2900-2600 cm^{-1} y 1100-900 cm^{-1} , respectivamente. En este caso, la muestra CAB presentó una banda asociada a enlaces C-C más estrecha, en contraste con la presentada por la muestra CAA. Esto puede ser debido a que la estructura carbonosa de la muestra CAA presentó una diferencia notable de ambientes químicos para los diferentes grupos funcionales, en comparación con la muestra CAB. En otras palabras, la banda para CAA presentó una mayor distribución de energías de vibración (mayor ensanchamiento) en comparación con la banda para CAB. Dicha diferencia en ambientes químicos pudo haber sido promovida en mayor medida por el ácido (muestra CAA) que por la base (muestra CAB), debido a sus diferentes mecanismos de degradación de la estructura carbonosa (Malini et al., 2023).

Figura 3.2.

Espectros FTIR-ATR de los carbones activados obtenidos.



Por otra parte, se identificaron bandas espectrales asociadas a enlaces C=O y C=C entre 1800-1600 cm^{-1} y 1600-1450 cm^{-1} , respectivamente. Estos enlaces están presentes en grupos funcionales como ácidos



carboxílicos, aldehídos, cetonas, ésteres, lactonas y fenoles. La producción de este tipo de enlaces y grupos en la estructura carbonosa es resultado de una degradación oxidativa de la misma (Liu et al., 2018). Particularmente, la muestra CAA presentó una banda espectral asociada al estiramiento del C=O mucho más ancha que la muestra CAB, lo que están en congruencia con una mayor distribución de grupos funcionales en la estructura como se comentó anteriormente. En este caso, en la muestra CAA pueden estar presentes más tipos de grupos carbonilo en contraste con la muestra CAB. Para esta última, se evidencia que la banda se desplazó a números de onda mayores, lo que se asocia a una mayor presencia de grupos ácidos carboxílicos y lactónicos en el material (Moyo et al., 2016).

Los resultados de la figura 3.2 apuntan a una diferencia notable en términos de la estructura carbonosa de cada carbón activado obtenido, es decir, la presencia de grupos funcionales diversos, los cuales intervienen en los procesos de remoción de fármacos en aguas, y permiten el uso de estas matrices como materiales adsorbentes. En este punto, es importante aclarar que esta técnica permite determinar enlaces y grupos característicos presentes en el material, no obstante, resulta de interés determinar su disponibilidad a nivel superficial en el material (Kristianto et al., 2016). Esta disponibilidad a nivel superficial es la que garantiza que existan “sitios activos” en el material adsorbente que permita la interacción con el contaminante, siendo este el objetivo principal de la utilización de carbón activado para dichos fines. En este sentido, se procedió a contrastar estos resultados con el método de Boehm para la determinación de grupos funcionales superficiales en materiales carbonosos.

Caracterización Física

Densidad Asentada

Los resultados obtenidos para la determinación de la densidad asentada se presentan en la Tabla 3.1. Se puede apreciar que la densidad asentada fue mayor para la muestra CAA. Para explicar esto, resulta importante considerar que el valor de densidad asentada se



determina teniendo en cuenta el volumen asentado de cada muestra. Este volumen asentado tiene en cuenta principalmente el volumen de poro de las partículas, ya que, con el proceso de asentamiento se buscó minimizar en su mayoría el volumen ocupado por el aire entre partículas. Claramente, entre mayor sea el volumen asentado, más bajo es el valor de la densidad asentada obtenido (Marín-Pesántez, 2017). Por ende, se observa que el volumen asentado es mayor para la muestra CAB, por lo que la densidad asentada resulta ser menor. En otras palabras, el volumen ocupado por aire a nivel poro es mayor para el carbón CAB. Lo anterior puede ser correlacionado con la discusión realizada para el rendimiento de obtención de cada muestra. Es probable que la generación de productos volátiles haya sido mayor empleando un agente químico básico como el NaOH, por lo que, durante el proceso de formación del material adsorbente se generó una mayor cantidad de poros dentro de las partículas, disminuyendo su densidad asentada. Esta propiedad puede ser ventajosa para CAB ya que, una mayor porosidad implica una mayor área superficial, por lo que se aumenta el área disponible para interactuar con diferentes especies químicas, potenciando su capacidad de adsorción (Liu et al., 2018b; Li et al., 2019).

Tabla 3.1.

Datos obtenidos de densidad asentada para las muestras.

Muestra	Peso de la muestra (± 0.1 g)	Volumen asentado (± 0.1 mL)	Densidad asentada (mL)
CAA	3.0	5.3	0.57 ± 0.03
CAB	3.0	8.9	0.34 ± 0.02

Caracterización Funcional

Punto de Carga Cero (PZC)

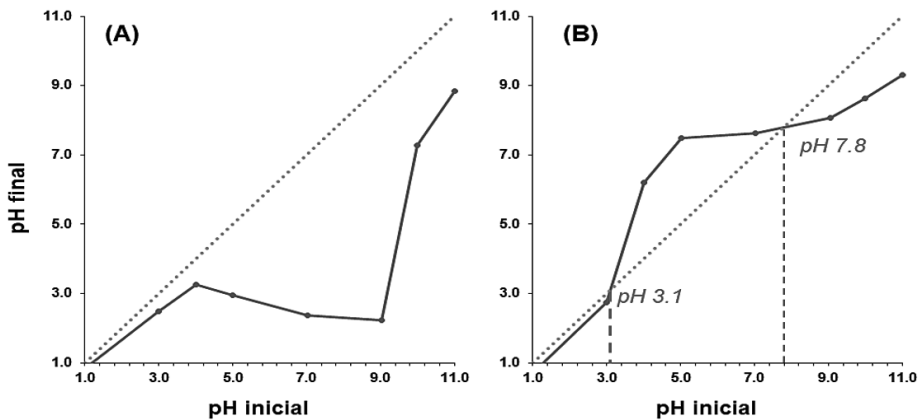
El PZC es el valor del pH en el cual una especie o material presenta una carga de neta nula, en este caso, se puede esperar que en este valor de pH el material carbonoso posea una carga superficial neta



de cero. La importancia de este valor radica en que permite predecir el comportamiento del material frente a su entorno en términos de interacciones mediante cargas superficiales, por ejemplo, adsorción de especies químicas (Souza, 2014). Este valor de pH depende del tipo y cantidad de grupos funcionales superficiales en el material. Experimentalmente, se determina mediante la intercepción entre la diagonal de la gráfica y la curva de valor de pH final contra valor de pH inicial (Amaringo, 2013). Para este caso, los resultados asociados a la determinación del PZC para CAA y CAB se presentan en la Figura 2.3.

Figura 3.3.

Resultados de la determinación del PZC para (A) CAA y (B) CAB.



En la figura 3.3A puede apreciarse que la muestra CAA genera un descenso del valor de pH en las soluciones evaluadas, mientras que, la figura 2.3B muestra que el CAB genera un incremento de esta propiedad en el rango de pH entre 3.0 y 7.5. Además, el CAA no presentó un PZC dentro del rango evaluado ya que, los valores de pH final vs pH inicial no se interceptaron con la diagonal, pero un mayor acercamiento se evidenció a valores de pH bajo. Lo anterior puede ser explicado teniendo en cuenta que la muestra CAA puede contener principalmente grupos ácidos en su superficie, por lo que, al entrar en contacto con una solución acuosa disminuye su pH por liberaciones



de iones H^+ . Por lo tanto, se espera que la muestra CAA posea una carga negativa superficial en el rango de pH de 1 a 11, considerando que son los grupos carboxilatos y fenolatos los que se forman en la superficie posterior a la liberación de H^+ (Michalek et al., 2023).

Un comportamiento contrario se presenta con la muestra CAB ya que, el aumento del pH puede atribuirse a la ionización de grupos básicos presentes en su superficie que, al reaccionar con el H_2O libera OH^- al medio. Adicionalmente, se observa que el CAB presentó 2 valores de PZC, uno a 3.1 y otro a 7.8. Por un lado, el valor a 3.1 puede ser entendido como el punto donde cierta cantidad de grupos ácidos tienden a protonarse, aumentando el número de cargas negativas, lo que neutralizaría el número de cargas positivas de los grupos básicos. Por otra parte, el valor de 7.8 puede ser entendido de forma contraria. En este caso, al aumentar el pH existe una mayor cantidad de grupos básicos que no se ionizan disminuyendo el número de cargas positivas, las cuales se neutralizan con las cargas negativas generadas por los grupos ácidos. En este sentido, puede esperarse que el carbón CAB posea tanto cargas negativas y positivas en valores de pH entre 3.1 y 7.8. La carga neta en este caso no puede predecirse cuantitativamente, por lo que, debe ser estudiada mediante técnicas de dispersión de luz (Dai, 1994). Sin embargo, estos resultados refuerzan la idea de que el carbón activado obtenido presenta grupos activos capaces de reaccionar a diferentes cambios de pH otorgándole funcionalidad al material para la remoción de contaminantes.

Determinación de Grupos Funcionales Superficiales

La determinación de los grupos funcionales con mayor disponibilidad en la superficie de los carbones activados se realizó mediante el método de Boehm, como se observa en la Tabla 3.2. Este análisis asume que los grupos funcionales superficiales como ácidos carboxílicos, fenoles y lactonas, pueden ser determinados cuantitativamente mediante su reacción con agentes básicos como el carbonato de sodio, bicarbonato de sodio y el hidróxido de sodio. Este tipo de grupos funcionales pueden producirse debido a diferentes reacciones degradativas de la estructura carbonosa



de las cáscaras de chontaduro durante la preparación del carbón activado [17]. Adicionalmente, grupos funcionales como las aminas también pueden obtenerse superficialmente en los carbonos sintetizados y pueden cuantificarse mediante titulación de Boehm utilizando ácido clorhídrico. Estos grupos amina se dan principalmente por la presencia de nitrógeno dentro de la materia prima carbonosa utilizada [20].

Tabla 3.2.

Resultados de la determinación de grupos funcionales superficiales mediante titulación de Bohem.

Muestra	Grupos funcionales superficiales (mmol/g)				
	Carboxílicos	Lactónicos	Fenólicos	Básicos	Total
CAA	1134.1 ± 54.0	0.3	2817.4 ± 68.2	68.6 ± 0.1	4020 ± 90.3
CAB	1164.3 ± 53.7	182.7 ± 48.3	2606.8 ± 162.7	949.5 ± 97.7	4903 ± 190.4

La relevancia de determinar cuantitativamente estos diferentes grupos funcionales para los carbonos activados obtenidos radica en la habilidad de estos para interactuar en la superficie del material con diferentes especies químicas, incluyendo agentes contaminantes en agua. Este fenómeno superficial es el que permite adquirir la habilidad de “material adsorbente” a los carbonos activados, puesto que los grupos funcionales superficiales pueden formar enlaces de hidrógeno o interactuar mediante fuerzas electrostáticas, lo que resultaría en una mejora de la capacidad de adsorción y retención de contaminantes (Borges et al., 2013).

Los resultados de la Tabla 3.2 muestran que el CAB posee una mayor cantidad de grupos funcionales superficiales que el CAA. De esta forma, el empleo de NaOH favoreció una mayor cantidad de grupos básicos en contraste con el uso de H₃PO₄. Este mismo comportamiento ocurrió con los grupos lactónicos, los cuales se obtuvieron en muy poca cantidad para el CAA. Lo anterior puede explicarse teniendo en cuenta que la capacidad degradativa de la estructura carbonosa puede ser mayor para el medio ácido que el medio básico, como se mencionó

inicialmente para los resultados por espectroscopía FTIR-ATR. En este sentido, grupos básicos como las aminas pueden ser eliminadas en forma de amoníaco y derivados, así mismo, los grupos lactónicos pueden ser fragmentados por protonación consecutiva de los átomos de oxígeno presentes (Gómez-Bombarelli et al., 2013). Por otro lado, es importante tener en cuenta que el H_3PO_4 cuenta con 3 equivalentes ácidos capaces de participar en la degradación de la estructura carbonosa, mientras que, el NaOH cuenta con un equivalente básico para tal función. Por ende, el tratamiento en medio ácido no sería útil para promover la presencia de grupos básicos dentro de la estructura (Malini et al., 2023). Así mismo, se puede considerar que la volatilidad de las especies que se generan en la metodología de obtención por carbonización, como H_2PO_4^- y HPO_4^{2-} , resulta ser menor que el H_2O que se genera cuando el ion OH^- logra abstraer hidrogeno de la estructura carbonosa, por lo que, se esperaría que el ácido tuviera más probabilidad de continuar el proceso de degradación (González, 2013).

También, estos resultados apuntan a que el CAB puede tener mayor capacidad de adsorción de compuestos por su mayor cantidad de grupos funcionales superficiales, aunque en la realidad se puede encontrar un comportamiento diferente. Es importante considerar que los grupos ácidos y básicos se comportan de manera diferente dependiendo del pH del medio. Por ejemplo, los ácidos carboxílicos pueden encontrarse en forma de carboxilatos (RCOO^-) en valores de pH levemente ácidos, neutro o básicos, mientras que, los grupos básicos como las aminas solo pueden estar neutros a pH básicos, permaneciendo en forma de RNH_3^+ en un amplio rango de pH. En este sentido, las interacciones electrostáticas y la capacidad de formación de enlaces de hidrógeno de los grupos funcionales superficiales pueden verse afectada por el pH del medio (Liu, 2017). Es así, como resulta necesario evaluar ambos tipos de materiales carbonosos para determinar su respectiva eficiencia de remoción de ibuprofeno.

Teniendo en cuenta lo anterior, la titulación de Boehm fue un método útil para la cuantificación de los grupos funcionales superficiales de los materiales, lo cual se puede correlacionar con otras de sus propiedades funcionales. Sin embargo, este método



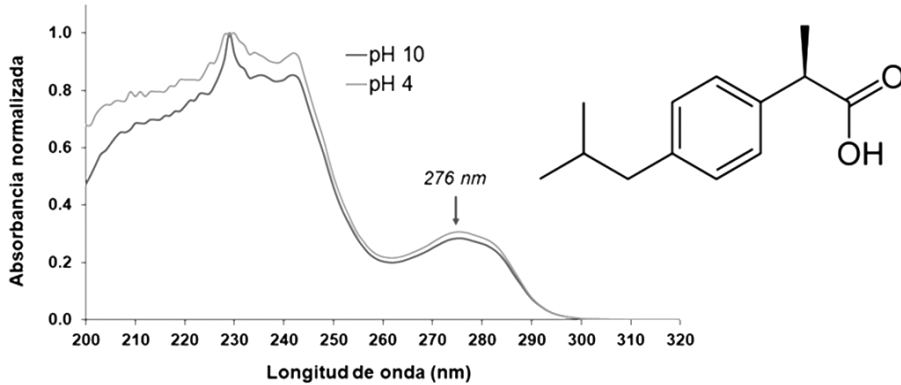
no es absoluto y los valores obtenidos a través de esta metodología pueden diferir de otras técnicas de determinación de grupos funcionales, como la desorción programada por temperatura (TPD, por sus siglas en inglés) o la espectroscopía de fotoelectrón de rayos X (XPS, por sus siglas en inglés), por lo que resulta importante a nivel de perspectiva hacer un contraste de resultados con este tipo de técnicas (Schönherr et al., 2018a). Por otra parte, algunos factores que pueden afectar los resultados obtenidos por titulación de Boehm son el tiempo de contacto entre el material carbonoso y la solución de agente básico o ácido, el tamaño de partícula y porosidad del material carbonoso, la cantidad de agente titulante utilizado y la metodología de separación de la fase sólida y líquida previa a la titulación (Schönherr et al., 2018b).

Estudios de Remoción de Ibuprofeno en Medio Acuoso

Posterior a la caracterización química y física de los carbones activados, se procedió a evaluar su capacidad de remoción, a través de adsorción, de ibuprofeno en agua. Primero, se registró el espectro del estándar de ibuprofeno en agua a dos valores de pH para determinar la longitud de onda más apropiada para realizar la cuantificación. En la Figura 3.4. se muestran los resultados respectivos, los cuales no difieren significativamente para los dos valores de pH. Si bien, la absorción de luz para el ibuprofeno resulta ser mayor a longitudes de onda menor a 260 nm, es probable que el alto valor del coeficiente de absorptividad molar en esta región no permita obtener una correlación lineal entre la absorbancia y la concentración, imposibilitando aplicar la ley de Beer-Lambert para la cuantificación. En este sentido, se eligió la banda a 276 nm para tal fin, que puede corresponder a una transición electrónica $\pi \rightarrow \pi^*$ de la estructura de ibuprofeno debido a la presencia de su anillo aromático. Esta banda también ha sido empleada por otros estudios para realizar su cuantificación (ThermoFisher Scientific, 2022; Keezim et al., 2017).

Figura 3.4.

Espectro UV y estructura del estándar de ibuprofeno en agua a pH ácido y pH básico.

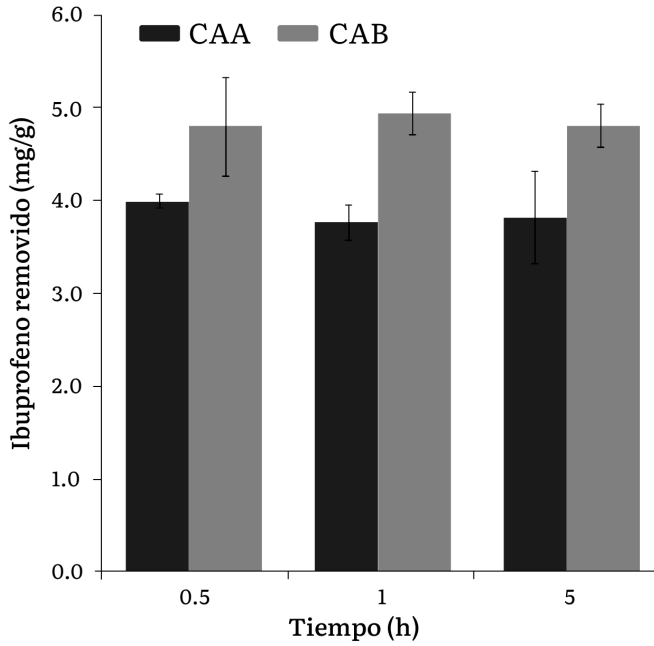


Los resultados de remoción de ibuprofeno para CAA y CAB empleando diferentes tiempos de contacto a pH neutro se muestran en la Figura 3.5., para observar si el tiempo de contacto influía en la capacidad de remoción. No obstante, se pudo observar que la capacidad de adsorción de los materiales se mantuvo casi constante desde la media hora a las 5 h, por lo que puede afirmarse que la adsorción máxima se alcanza en tiempos relativamente cortos de contacto, lo cual es acorde a resultados previamente publicados (Mestre, 2007; Fadzail et al., 2021). Además, el CAB presentó una remoción de ibuprofeno de ~5 mg/g de material adsorbente, mientras el CAA presentó una remoción de ~4 mg/g. Esta diferencia puede estar directamente relacionada con la cantidad relativa de grupos funcionales superficiales entre ambas muestras (ver Tabla 3.2), debido a que CAB presentó mayor cantidad grupos funcionales por lo que se esperaría que tuviera una mayor cantidad de sitios de interacción con el ibuprofeno, potenciando su remoción.



Figura 3.5.

Resultados de remoción de ibuprofeno en medio acuoso a pH neutro a diferentes tiempos.



Teniendo en cuenta los resultados de la figura 3.5, se escogió un tiempo de 1 h como tiempo apropiado de contacto para evaluar la remoción de ibuprofeno a valores de pH ácido y básico, y los resultados se presentan en la Figura 3.6. Fuera de eso, la tabla 3.3 presenta la comparación de los resultados de remoción de ibuprofeno a los tres valores de pH evaluados.



Figura 3.6.

Resultados de remoción de ibuprofeno a pH ácido y básico.

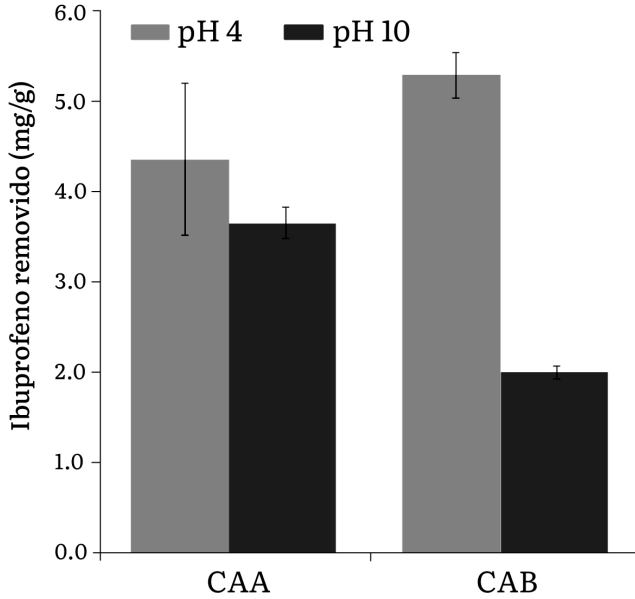


Tabla 3.3.

Capacidad de remoción de ibuprofeno a diferentes valores de pH.

Muestra	Remoción de ibuprofeno (mg/g)		
	pH 4	pH 7	pH 10
CAA	4.36 ± 0.84	4.00 ± 0.07	3.65 ± 0.17
CAB	5.28 ± 0.25	4.93 ± 0.23	2.00 ± 0.04

De acuerdo con los resultados mostrados en la Tabla 3.3, existe una tendencia de aumento en la remoción de ibuprofeno a medida que se disminuye el valor de pH. En particular, la muestra CAB alcanzó una remoción de ibuprofeno de ~5.3 mg/g cuando el valor de pH es 4, pero disminuyó a 2.0 mg/g cuando el pH alcanzó un valor de 10. Por otra parte, la capacidad de remoción de ibuprofeno del CAA disminuyó



de 4.4 mg/g a ~3.7 mg/g, al pasar de un pH ácido a uno básico. Este comportamiento se puede explicar por una mayor tendencia a la ionización de los grupos ácidos en ambos materiales una vez aumenta el pH, y a una menor ionización de los grupos básicos. Con esto, se tiene una menor densidad de cargas positivas que pueden interactuar con el ibuprofeno a pH alcalino, que presenta una carga neta negativa debido a la ionización de su grupo carboxílico (Vicenteno et al., 2010). Fuera de eso, como hay una mayor presencia de cargas negativas en los materiales adsorbentes al aumentar el pH esto favorece la repulsión electrostática con el ibuprofeno, disminuyendo su remoción. Con lo anterior, es claro que la muestra CAB tenga una disminución mayor en la remoción de ibuprofeno con el incremento del pH ya que, presentó una mayor cantidad de grupos básicos (ver Tabla 3.2).

Por otra parte, cuando se comparan los valores entre los dos materiales adsorbentes evaluados, puede apreciarse que la muestra CAB presentó la mayor capacidad de remoción de ibuprofeno (~5.3 mg/g) frente a la muestra CAA (~4.4 mg/g) a pH ácido, aunque los valores se invierten en pH básico (~3.7 mg/g para CAA y 2.0 mg/g para CAB). Para explicar esto, se debe tener en cuenta que a valores de pH menores a 4.6 el ibuprofeno se encuentra en su forma neutra o no ionizada, donde su grupo carboxílico no está ionizado (ver Figura 2.4), por lo cual es de esperarse que interaccione principalmente con los materiales adsorbentes a través de enlaces de hidrógeno y fuerzas de Van der Waals. Así, se esperaría que la muestra con mayor cantidad de grupos funcionales superficiales posea la mayor capacidad de adsorción de ibuprofeno, en este caso, la muestra CAB.

También, a valores de pH superiores a 4.6 y dentro de un rango básico, el ibuprofeno presenta una carga neta negativa por desprotonación de su grupo ácido carboxílico y no interacciona favorablemente con especies cargadas negativamente. En este sentido, la muestra CAB pudo presentar una mayor cantidad de grupos cargados negativamente (i.e., mayor cantidad de grupos ácidos ionizados) a un valor de pH 10, en comparación con la muestra CAA, por lo que no se promovió una adsorción significativa de ibuprofeno. El balance



de este tipo de interacciones intermoleculares resulta en un factor importante en la capacidad de adsorción de moléculas sobre las superficies de los materiales adsorbentes (Terzyk, 2004).

Finalmente, al comparar los valores de remoción de ibuprofeno con los reportados en otros estudios, se aprecia que los valores para la muestra CAA son similares a los obtenidos para otro tipo de carbón activado preparado mediante calcinación de cáscaras de *Dillenia Indica* (i.e, manzana de elefante) (Fadzail et al., 2021). No obstante, se han reportado valores de remoción de ibuprofeno más altos, de hasta 80 mg/g, para carbonos activados obtenidos a partir de calcinación de polvo de corcho en presencia de agente básico, lo que permitió la producción de un material con mayor cantidad de grupos funcionales superficiales y una gran área superficial, lo que potencia su capacidad de remoción de ibuprofeno (Mestre, 2007). Lo anterior permite incluir dentro de las perspectivas de este trabajo la evaluación de otras concentraciones y otros tipos de agentes químicos como el K_2CO_3 , con el fin de mejorar las condiciones para la obtención de un material con mejores propiedades de remoción de ibuprofeno.

Conclusiones

En este trabajo, se logró preparar dos tipos de carbonos activados (CAA y CAB) a partir de cáscaras de chontaduro mediante calcinación y activación mediada por dos tipos de agentes químicos, uno de tipo ácido (H_3PO_4) y otro de tipo básico (NaOH), respectivamente, encontrándose un mejor rendimiento en la producción del CAA que del CAB, debido a una mayor degradación en masa de la estructura carbonosa por acción del agente básico.

Los dos carbonos activados presentaron grupos funcionales superficiales tipo ácido carboxílicos, fenoles, lactonas y grupos básicos, aunque CAB presentó mayor cantidad de grupos básicos y una menor densidad asentada que la muestra CAA, lo que le proporcionó mayores ventajas en su comportamiento funcional,



presentando dos valores de PZC (3.1 y 7.8) y alcanzando valores de remoción de ibuprofeno de hasta ~5.3 mg/g, siendo comparable a estudios previamente publicados.

La muestra CAA no presentó valor de PZC y su capacidad de remoción de ibuprofeno alcanzó los ~4.4 mg/g. Esta capacidad de adsorción y remoción de ibuprofeno en medio acuoso estuvo regulada principalmente por el valor de pH del medio, siendo mayor a valores de pH ácidos, lo que se asoció a la efectividad de las interacciones entre el ibuprofeno y los grupos funcionales superficiales de los materiales en estas condiciones. Con esto, se pudo corroborar que las cáscaras de chontaduro representan una buena alternativa para la obtención de carbón activado capaz de presentar propiedades óptimas para la remoción de ibuprofeno en medio acuoso.

Como sugerencias de este trabajo se puede mencionar la realización de mayores pruebas de caracterización de los carbones activados como medición del área superficial específica. Además, que este es un punto de partida para mejorar las concentraciones y el tipo de agentes químicos durante la activación del material carbonoso.

Referencias Bibliográficas

- Ahmed, M.J. (2017). Adsorption of non-steroidal anti-inflammatory drugs from aqueous solution using activated carbons: Review. *Journal of Environmental Management*, 190, 274–282. <https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2016.12.073>
- Alean, J., Márquez, D., Burgos, S.M., Enamorado-Montes, G., & Marrugo, J. (2021). Productos farmacéuticos y de cuidado personal presentes en aguas superficiales, de consumo humano y residuales en el departamento de Córdoba, Colombia. *Revista de Investigación Agraria y Ambiental*, 12(2), 179–197. <https://doi.org/10.22490/21456453.4231>



- Amaringo, F.A. (2013). Determinación del punto de carga cero y punto isoeléctrico de dos residuos agrícolas y su aplicación en la remoción de colorantes. *Revista de Investigación Agraria y Ambiental*, 4(2), 27-36. <https://doi.org/10.22490/21456453.982>
- Artos, M. C., Del Castillo, D. S., Barzola, O. R., & Barcos-Arias, M. (2021). Presencia de productos farmacéuticos en el agua y su impacto en el ambiente. *Bionatura*, 6(1), 1618–1627. <https://doi.org/10.21931/rb/2021.06.01.27>
- Borges, J., Campiña, J.M., Silva, A.F. (2013). Probing the Contribution of Different Intermolecular Forces to the Adsorption of Spheroproteins onto Hydrophilic Surfaces. *The Journal of Physical Chemistry B*, 117(51), 16565-16576. <https://doi.org/10.1021/jp409238b>
- Bouhcain, B., Carrillo-Peña, D., Mansouri, F. E., Zoubi, Y. E., Mateos, R., Morán, A., Quiroga, J. M., & Zerrouk, M. H. (2022). Removal of Emerging Contaminants as Diclofenac and Caffeine Using Activated Carbon Obtained from Argan Fruit Shells. *Applied Sciences*, 12(6), 2922. <https://doi.org/10.3390/app12062922>
- Cabrita, I., Ruiz, B., Mestre, A., Fonseca, I., Carvalho, A., & Ania, C. (2010). Removal of an analgesic using activated carbons prepared from urban and industrial residues. *Chemical Engineering Journal*, 163(3), 249–255. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2010.07.058>
- Dai, M. (1994). The Effect of Zeta Potential of Activated Carbon on the Adsorption of Dyes from Aqueous Solution. *Journal of Colloid and Interface Science*, 164(1), 223–228. <https://doi.org/10.1006/jcis.1994.1160>
- Demiral, İ., Samdan, C., & Demiral, H. (2020). Enrichment of the surface functional groups of activated carbon by modification method. *Surfaces and Interfaces*, 22, 100873. <https://doi.org/10.1016/j.surfin.2020.100873>



- Fadzail, F., Hasan, M., & Mokhtar, Z. (2021). Adsorption of ibuprofen using activated carbon derived from *Dillenia Indica* peels. *IOP Conference Series Earth and Environmental Science*, 646(1), 012031. <https://doi.org/10.1088/1755-1315/646/1/012031>
- Foro Ambiental. (2018, September 12). *Ibuprofeno, un “dolor de cabeza” para los peces y el ambiente* | Foro Ambiental. <https://www.foroambiental.net/ibuprofeno-un-dolor-de-cabeza-para-los-peces-y-el-ambiente/>
- García-Gómez, C., Gortáres-Moroyoqui, P., Drogui, P. (2011). Contaminantes emergentes: efectos y tratamientos de remoción. *Revista Química Viva*, 2(10), 96–105.
- Gómez-Bombarelli, R., Calle, E., & Casado, J. (2013). Mechanisms of lactone hydrolysis in acidic conditions. *The Journal of Organic Chemistry*, 78(14), 6880–6889. <https://doi.org/10.1021/jo4002596>
- González, P. (2018). Activated carbon from lignocellulosics precursors: A review of the synthesis methods, characterization techniques and applications. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 82, 1393–1414. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2017.04.117>
- Jaramillo Bernat E (2022). El chontaduro, uno de los frutos de la restitución de tierras del que viven decenas de familias en Putumayo. <https://n9.cl/2yitm>
- Kezzim, A., Boudjemaa, A., Belhadi, A., & Trari, M. (2016). Photocatalytic degradation of ibuprofen over the new semiconducting catalyst α -(Cu,Fe) $_2$ O $_3$ prepared by hydrothermal route. *Research on Chemical Intermediates*, 43(7), 3727–3743. <https://doi.org/10.1007/s11164-016-2837-8>
- Kristianto, H., Arie, A. A., Susanti, R. F., Halim, M., & Lee, J. K. (2016). The effect of activated carbon support surface modification on characteristics of carbon nanospheres prepared by deposition precipitation of Fe-catalyst. *IOP Conference Series Materials Science and Engineering*, 162(1), 012034. <https://doi.org/10.1088/1757-899x/162/1/012034>



- Libretexts. (2022, November 2). 4.2: Toxicodinámica e interacciones moleculares. LibreTexts Español. <https://n9.cl/aidnp3>
- Liu, Y., Liu, X., Dong, W., Zhang, L., Kong, Q., & Wang, W. (2017). Efficient Adsorption of Sulfamethazine onto Modified Activated Carbon: A Plausible Adsorption Mechanism. *Scientific Reports*, 7(1), 12437. <https://doi.org/10.1038/s41598-017-12805-6>
- Li, D., Zhou, J., Wang, Y., Tian, Y., Wei, L., Zhang, Z., Qiao, Y., & Li, J. (2018). Effects of activation temperature on densities and volumetric CO₂ adsorption performance of alkali-activated carbons. *Fuel*, 238, 232–239. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2018.10.122>
- Liu, J., Liu, Y., Peng, J., Liu, Z., Jiang, Y., Meng, M., Zhang, W., & Ni, L. (2018). Preparation of High Surface Area Oxidized Activated Carbon from Peanut Shell and Application for the Removal of Organic Pollutants and Heavy Metal Ions. *Water Air & Soil Pollution*, 229(12). <https://doi.org/10.1007/s11270-018-4021-9>
- Liu, J., Liu, X., Sun, Y., Sun, C., Liu, H., Stevens, L. A., Li, K., & Snape, C. E. (2017). High Density and Super Ultra-Microporous-Activated Carbon Macrospheres with High Volumetric Capacity for CO₂ Capture. *Advanced Sustainable Systems*, 2(2). <https://doi.org/10.1002/adsu.201700115>
- Malini, K., Selvakumar, D., & Kumar, N. (2022). Activated carbon from biomass: Preparation, factors improving basicity and surface properties for enhanced CO₂ capture capacity – A review. *Journal of CO₂ Utilization*, 67, 102318. <https://doi.org/10.1016/j.jcou.2022.102318>
- Marín-Pesántez, D.G. (2017). Evaluación de la remoción del ibuprofeno mediante biosorción en tallos de rosas y posos de café”, Tesis de pregrado, Universidad de Cuenca, Cuenca, Ecuador.
- Mestre, A., Pires, J., Nogueira, J., & Carvalho, A. (2007). Activated carbons for the adsorption of ibuprofen. *Carbon*, 45(10), 1979–1988. <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2007.06.005>



- Michałek, T., Wojtaszek, K., Małecki, S., Kornaus, K., Wandor, S., Druciarek, J., Fitzner, K., & Wojnicki, M. (2023). Recovery of Pd(II) Ions from Aqueous Solutions Using Activated Carbon Obtained in a Single-Stage Synthesis from Cherry Seeds. C – *Journal of Carbon Research*, 9(2), 46. <https://doi.org/10.3390/c9020046>
- Mopoung, S., Moonsri, P., Palas, W., & Khumpai, S. (2015). Characterization and Properties of Activated Carbon Prepared from Tamarind Seeds by KOH Activation for Fe(III) Adsorption from Aqueous Solution. *The Scientific World JOURNAL*, 2015(1), 415961. <https://doi.org/10.1155/2015/415961>
- Moyo, M., Nyamhere, G., Sebata, E., & Guyo, U. (2014). Kinetic and equilibrium modelling of lead sorption from aqueous solution by activated carbon from goat dung. *Desalination and Water Treatment*, 57(2), 765–775. <https://doi.org/10.1080/19443994.2014.968217>
- Ngueabouo, A. M. S., Tagne, R. F. T., Tchuifon, D. R. T., Fotsop, C. G., Tamo, A. K., & Anagho, S. G. (2022). Strategy for optimizing the synthesis and characterization of activated carbons obtained by chemical activation of coffee husk. *Materials Advances*, 3(22), 8361–8374. <https://doi.org/10.1039/d2ma00591c>
- Redagícola, “Residuos de frutas exóticas se convertirían en protectores solares”. <https://www.redagricola.com/co/residuos-de-frutas-exoticas-se-convertirian-en-protectores-solares/>
- Richardson, M. L., & Bowron, J. M. (1985). The fate of pharmaceutical chemicals in the aquatic environment. *Journal of Pharmacy and Pharmacology*, 37(1), 1–12. <https://doi.org/10.1111/j.2042-7158.1985.tb04922.x>
- Schönherr, J., Buchheim, J., Scholz, P., & Adelhelm, P. (2018). Boehm Titration revisited (Part I): Practical aspects for achieving a high precision in quantifying Oxygen-Containing Surface Groups on Carbon Materials. C – *Journal of Carbon Research*, 4(2), 21. <https://doi.org/10.3390/c4020021>



- Schönherr, J., Buchheim, J. R., Scholz, P., & Adelhelm, P. (2018a). Boehm Titration Revisited (Part II): A Comparison of Boehm Titration with Other Analytical Techniques on the Quantification of Oxygen-Containing Surface Groups for a Variety of Carbon Materials. *C – Journal of Carbon Research*, 4(2), 22. <https://doi.org/10.3390/c4020022>
- Soares, S. D., Santos, O. V. D., Nascimento, F. D. C. a. D., & Da Silva Pena, R. (2022b). A review of the nutritional properties of different varieties and byproducts of peach palm (*Bactris gasipaes*) and their potential as functional foods. *International Journal of Food Properties*, 25(1), 2146–2165. <https://doi.org/10.1080/10942912.2022.2127761>
- Souza, C., Majuste, D., & Ciminelli, V. (2013). Effects of surface properties of activated carbon on the adsorption mechanism of copper cyanocomplexes. *Hydrometallurgy*, 142, 1–11. <https://doi.org/10.1016/j.hydromet.2013.11.003>
- Tejada, C., Quiñonez, E., & Peña, M. (2014). Contaminantes Emergentes en Aguas: Metabolitos de Fármacos. Una Revisión. *Revista Facultad De Ciencias Básicas*, 10(1), 80. <https://doi.org/10.18359/rfcb.341>
- Terzyk, A. P. (2004). Molecular properties and intermolecular forces—factors balancing the effect of carbon surface chemistry in adsorption of organics from dilute aqueous solutions. *Journal of Colloid and Interface Science*, 275(1), 9–29. <https://doi.org/10.1016/j.jcis.2004.02.011>
- ThermoFisher Scientific (2022). Spectrophotometric Analysis of Ibuprofen According to USP and EP Monographs.
- Vargas Corredor YA, Pérez Pérez LI (2018). Aprovechamiento de residuos agroindustriales en el mejoramiento de la calidad del ambiente. *Revista Facultad De Ciencias Básicas*, 59–72. <https://doi.org/10.18359/rfcb.3108>



Vicenteno-Vera, A. G., Campos-Hernandez, T., Ramirez-Silva, M. T., Galano, A., & Rojas-Hernandez, A. (2010). Determination of PKA values of diclofenac and ibuprofen in aqueous solutions by capillary zone electrophoresis. *ECS Transactions*, 29(1), 443–448. <https://doi.org/10.1149/1.3532340>

CAPÍTULO 4

Obtención de Carbón Activado a partir de Cáscaras de Mango y Evaluación de su Actividad Descontaminante de Ketoconazol en Aguas

Production of Activated Carbon from Mango Peels for the Assessment of Ketoconazol Decontamination in Aqueous Solutions

Kevin Andrés Orozco

Universidad Santiago de Cali, Colombia

✉ Kevin.orozco01@usc.edu.co

© <https://orcid.org/0009-0003-2703-8017>

Yhors Alexander Ciro Monsalve

Universidad Santiago de Cali, Colombia

© <https://orcid.org/0000-0003-4093-8696>

✉ yhors.ciro00@usc.edu.co

Alejandra Londoño Salamanca

Universidad Santiago de Cali, Colombia

✉ alejandra.londono00@usc.edu.co

© <https://orcid.org/0009-0001-1255-7274>

Resumen

La contaminación de aguas residuales con medicamentos, particularmente antimicóticos como ketoconazol desencadena una problemática global ya que diversos hongos aprovechan esto para mejorar sus mecanismos de adaptación a dichos medicamentos.

Cita este capítulo / Cite this chapter

Orozco, K. A.; Londoño Salamanca, A. y Ciro Monsalve, Y. A. (2026). Obtención de carbón activado a partir de cáscaras de mango y evaluación de su actividad descontaminante de ketoconazol en aguas. En: Ciro Monsalve, Y. A. (ed. científico). *Aprovechamiento de residuos agroindustriales para la biorremediación de fármacos en fuentes hídricas*. (pp. 89-115). Cali, Colombia: Universidad Santiago de Cali. <https://doi.org/10.35985/9786287914049.4>



Por otro lado, otra problemática de relevancia es el alto grado de desaprovechamiento de residuos agroindustriales como las toneladas de cáscaras de frutas, particularmente de mango que hay en el país. Para abordar estas problemáticas se planteó la obtención de materiales adsorbentes de ketoconazol a partir de estos desechos de frutas, ricos en lignina y celulosa, mediante tratamiento térmico y químico, variando la concentración de ácido fosfórico entre el 32% al 48%. Se encontró que el tratamiento térmico disminuyó la capacidad de remoción de ketoconazol de los desechos, en tanto el tratamiento con ácido fosfórico mejoró la habilidad de interacción, ya que este reactivo permite la modificación de la superficie del material de partida, aunque no hubo una correlación entre la concentración del ácido fosfórico y los grupos superficiales del material, de acuerdo con la titulación de Boehm. Además, se encontró que los materiales pudieron remover entre el 70%-90% de ketoconazol, sirviendo como una herramienta promisoriosa para la remoción de fármacos en aguas a partir de desechos agroindustriales.

Palabras claves: carbón activo; remoción; cáscaras de frutas, descontaminante, carbonización.

Abstract

The contamination of wastewater with medications, particularly antifungals such as ketoconazole, triggers a global problem since various fungi take advantage of this to improve their adaptation mechanisms to said medications. On the other hand, another relevant problem is the high degree of waste of agro-industrial waste such as the tons of fruit peels, particularly mango, that exist in the country. To address these problems, it was proposed to obtain ketoconazole adsorbent materials from these fruit wastes, rich in lignin and cellulose, through thermal and chemical treatment, varying the concentration of phosphoric acid between 32% to 48%. It was found that thermal treatment decreased the removal capacity of ketoconazole from the waste, while treatment with phosphoric acid improved the interaction ability, since this reagent allows the modification of the surface of the starting material, although there was no correlation



between the concentration of phosphoric acid and the surface groups of the material, according to the Boehm titration. In addition, it was found that the materials were able to remove between 70%-90% of ketoconazole, serving as a promising tool for the removal of drugs in water from agro-industrial waste.

Keywords: active carbon; elimination; fruit peels, decontaminant, carbonization.

Introducción

Una de las mayores problemáticas a nivel mundial es el manejo de los residuos en la parte industrial, puesto que la contaminación de colorantes y otras sustancias químicas, se ve reflejada en las aguas, ya sean en algunos casos para fines potables o de desechos (Moreno-Barragán et al., 2016). Un informe de la Organización de Naciones Unidas presentó que los factores como la gran cantidad de contaminantes en las aguas, la falta de saneamiento de las mismas, ya sea por escasez de recursos para hacer los procedimientos por sus costos, hacen que se dificulte la erradicación de pobreza extrema alrededor del mundo, afectando particularmente a los países más pobres (Organización de las Naciones Unidas, 2019).

De la misma forma, se asocia la escasez de agua, saneamiento inadecuado y aguas contaminadas con diferentes sustancias, patógenos y falta de higiene, con la causa de muerte de hasta 1,5 millones de niños en el año (Organización de las Naciones Unidas, 2019). Además, desde las industrias farmacéuticas, la eliminación de medicamentos como los antimicóticos en aguas residuales, presenta un riesgo inminente a la resistencia sobre los mismos ya que, queda expuestos a los distintos patógenos del ambiente (Yang et al., 2002; Hossain et al., 2022). Es así, cómo se ha reportado que diferentes hongos utilizan mecanismos de adaptación y resistencia a antimicóticos, lo que los hace más difíciles de combatir (Organization for Economic Co-operation and Development, 2020).



Esta resistencia comúnmente se encuentra en hongos que se alojan en aguas residuales, en las cuales se ha podido comprobar que poseen residuos de fármacos antifúngicos, como el caso de ketoconazol a concentraciones entre 3 ng/L – 8,2 ng/L. Esto ha dado evidencia de resistencia a ketoconazol por hongos tras su exposición a largos periodos de tiempo (Hokken et al., 2019).

En este orden de ideas, al saber que el agua es un recurso no sólo valioso e indispensable, si no también limitado; es de vital importancia diseñar diferentes estrategias para la purificación y limpieza de estas, que sean costo-efectivas y novedosas (Rojas et al., 2019; Hokken et al., 2019). No obstante, se han obtenido métodos costosos, difíciles de operar o que muchos países no gozan de tener acceso a esas tecnologías (United Nations, s.f.), dificultando la descontaminación de cuerpos de agua. Sin embargo, el uso de materiales adsorbentes como carbones activados, es promisorio debido a que es una alternativa costo-eficiente, y para su producción se tienen diversas y abundantes fuentes en la naturaleza (Organización Panamericana de la Salud, s.f.).

Además, los carbones activados son materiales adsorbentes que permiten la remoción de diferentes fármacos debido a su estabilidad abrasiva y alta porosidad, a diferencia de otros métodos como la oxidación química, la fotocatalisis y la degradación que son más costosos y en ocasiones no tan eficientes (Mejía et al., 2007). También, el uso de carbón activo contribuye en gran medida al aprovechamiento de residuos orgánicos de diversas fuentes y tiene un mayor grado de efectividad en comparación a los métodos anteriormente mencionados. Adicional a esto, es realmente asequible y económico, incluso para poblaciones con escasez de recursos y es un material renovable (Lellis et al., 2019).

De esta forma, el uso de carbón activado se constituye como una herramienta barata y eficiente dado que, para su producción se pueden emplear diferentes residuos agroindustriales, como las cáscaras de diferentes frutas, entre las que se destacan las de mango (que representan entre el 13%-16% en peso del fruto de mango



[Serna & Torres, 2014]). Este un residuo abundante ya que, solo en el Valle del Cauca se llegan a producir hasta 193.32 toneladas por semana, de los cuales una buena parte terminan en vertederos de basura contribuyendo al cambio climático, puesto que durante su descomposición producen gases de efecto invernadero como el metano (Beisenova et al, 2020), y lixiviados que pueden infiltrarse en el suelo y contaminar el agua subterránea (Sharma et al., 2021).

Por otra parte, durante el proceso de descomposición se atraen plagas y vectores de enfermedades, como moscas y ratas, que pueden transmitir enfermedades a los humanos. Fuera de eso, la quema de cáscaras de frutas para su eliminación puede generar emisiones tóxicas que pueden ser perjudiciales para la salud de las personas que viven cerca de los vertederos (Moult et al., 2018).

Igualmente, las cáscaras de mango presentan un contenido de celulosa y lignina de aproximadamente el 25%, que es favorable para los procesos de adsorción de agua y/o sustancias en medio acuoso, sumado al hecho que es un material poroso y esto proporciona áreas de superficie específica donde las moléculas pueden adherirse (Pacheco-Jiménez et al., 2022).

Por otra parte, el desaprovechamiento de estas cáscaras significa una pérdida de recursos que podrían ser utilizados en otras aplicaciones como alimentos o en la obtención de productos químicos y biotecnológicos por su versatilidad de usos, convirtiéndolo en un material que podría aportar en muchos aspectos al sostenimiento de una región (Pai et al., 2018). Asimismo, este desaprovechamiento tiene un impacto negativo en la economía para los agricultores y su reutilización podría crear nuevas oportunidades de empleo y de negocio en la región (Londoño-Franco et al., 2016).

Porello la problemática de la resistencia a medicamentos antimicóticos y el desaprovechamiento de los residuos agroindustriales son un flagelo que ya lleva tiempo causando impactos negativos en diferentes sectores como el de la salud, el ambiental, el económico y el social (Bahri et al., 2012).



De esta forma, se ha reportado la producción de carbón activado a partir de mazorca de maíz con tratamiento químico con KOH, sirviendo como un material eficaz en la remoción de iones de mercurio en agua (Liu et al., 2020). En otro estudio, se produjeron carbones activados a partir de residuos de palma de aceite, activada químicamente con concentraciones de 50, 100 y 150 mg/L de $ZnCl_2$, resultando eficaz para la remoción de azul de metileno por la obtención de un material altamente poroso (Ramírez et al., 2017).

Estos ejemplos y muchos más reportados en la literatura permiten observar el potencial del carbón activado en la remoción de distintos agentes, incluyendo fármacos en aguas. Se eligió el Ketoconazol como fármaco de referencia porque se encontró poca evidencia de estudios en donde se hable de su adsorción como medida de descontaminación de cuerpos de agua. Sumado a esto, se ha evidenciado presencia de pequeñas cantidades de ketoconazol en aguas, como se observa en un estudio realizado en España en 2013 en donde se encontraron concentraciones en aguas residuales de entre 1,6 ng/L y 28,2 ng/L (Kahle et al, 2008). También, en Brasil en 2014 se encontraron concentraciones de ketoconazol en aguas residuales de entre 10 ng/L y 490 ng/L, las cuales pueden ser suficientes para promover el desarrollo de resistencia antifúngica en los microorganismos (Huang et al, 2010).

Adicionalmente, se sabe que la gran mayoría de antimicóticos se aplican directamente sobre la piel, por lo que los procesos de lavado de las zonas del cuerpo que llevan el tratamiento constituyen la fuente principal de contaminantes antimicóticos en el sistema de aguas residuales, este mismo comportamiento podría darse en el uso de shampoos con acción anticasca que se formulan principalmente de ketoconazol (Casado, 2015), por lo cual el estudio de remoción de este fármaco es útil para aportar en esta problemática.

Por lo anterior, se planteó la obtención de carbón activado a partir de cáscaras de mango mediante activación química con ácido fosfórico a distintas concentraciones (32%, 36%, 40% y 48%) y física. Fuera de eso, se activaron las cáscaras por tratamiento físico únicamente



y también se empleó cáscaras sin tratar, para la evaluación de su capacidad de remoción de ketoconazol en aguas.

Materiales y Métodos

El ketoconazol fue una donación de parte de la Universidad de Antioquia, el hidróxido de sodio y el ácido fosfórico al 85% se adquirieron de Protokímica. El etanol al 96% se adquirió de agenquímicos. El bromuro de potasio para análisis infrarrojo y el carbonato de sodio se adquirió de Panreac. El hidróxido de sodio, ácido clorhídrico, fenoltaleína y verde de bromocresol se adquirieron de Merck.

En primer lugar, se realizó el lavado y secado de las cáscaras de mango, luego se sometió a activación física y química con ácido fosfórico a diferentes concentraciones. Una vez obtenidos los materiales adsorbentes se caracterizaron por espectroscopía infrarroja y titulación e Boehm para obtener información de los grupos funcionales. Por último, se evaluó la capacidad de remoción *in-vitro* de ketoconazol en medio acuoso de cada material obtenido y de las cáscaras sin ningún tratamiento.

Pretratamiento de las Cáscaras de Mango

En primer lugar, las cáscaras de mango fueron recolectadas de diferentes establecimientos comerciales de la Universidad Santiago de Cali, se lavaron con agua y jabón neutro y se cortaron en tamaños pequeños de 2-4 cm de diámetro. Posteriormente, las cáscaras se secaron en estufa de bandejas (Binder, Tuttlingen, Alemania) a 105 °C por 48 h, luego se trituraron haciendo uso de licuadora hasta obtener tamaños pequeños, los cuales se pasaron por un tamiz # 40.

Obtención de Materiales Adsorbentes

Activación Física

Las cáscaras secas que se obtuvieron en el apartado 2.1 se carbonizaron bajo atmósfera oxidativa en una mufla (Maxtermo, MC5438, Taiwan) a 600°C por 3 h.



Activación Química y Física

Se pesaron 5g de las cáscaras obtenidas en el apartado 2.1 y se pusieron en contacto por 1 h bajo agitación constante a 240 rpm, con 50 mL de solución de ácido fosfórico a concentraciones de 32%, 36%, 40% y 48%. Después de ello, las suspensiones se centrifugaron a 4500 rpm por 15 minutos en una centrífuga de 8 puestos (SL8, Thermo Scientific, EE. UU.), se eliminó el sobrenadante y el precipitado se retiró y colocó en cápsulas de porcelana, las cuales se llevaron a una mufla (Maxtermo, MC5438, Taiwan) por 3 h a 600 °C.

Posteriormente, el material carbonizado se suspendió en agua purificada, se neutralizó con NaOH y se le realizaron lavados hasta conductividad constante, las cuales fueron 2,33 mS/Cm (Carbón de 48%), 0,39 mS/Cm (Carbón de 40%), 0,34 mS/Cm (Carbón de 36%) y 2,25 mS/Cm (Carbón de 32%) para garantizar la remoción de diferentes impurezas. En cada etapa de lavado, se centrifugó el material a 4500 rpm por 10 minutos. Finalmente, el material se secó en balanza termogravimétrica (Mettler Toledo, HE53, EE. UU.) a 120°C y se tamizó por un tamiz # 40 (Diao et al., 2002).

Caracterización del Carbón Activo

Titulación de Boehm

De cada muestra activada químicamente con ácido fosfórico a las diferentes concentraciones se tomaron aproximadamente 0,1g y se sumergieron, de forma independiente, en 10,0 mL de solución de bicarbonato de sodio al 0,1 M, carbonato de sodio al 0,1 M, hidróxido de sodio al 0,1 M y ácido clorhídrico al 0,1 M. Este procedimiento se realizó por triplicado en cada muestra. Estas mezclas se dejaron en contacto por 2.5 h, agitándose con regularidad (cada 15 minutos), con el fin de que el material entrara en contacto con las distintas soluciones. Posteriormente, se centrifugaron a 4500 rpm por 5 minutos y del sobrenadante se tomaron 5,0 mL para titularse.

Para la titulación de las muestras con NaOH, bicarbonato de sodio al 0,1 M y carbonato de sodio al 0,1 M se utilizó HCl al 0,1 M, en el caso de las muestras con HCl al 0,1 M, se titularon con NaOH



0,1M. Los indicadores utilizados fueron fenolftaleína para HCl y NaOH, y verde de bromocresol para el bicarbonato de sodio y para el carbonato de sodio.

Esta titulación permite conocer los grupos funcionales del material ya que el NaOH neutraliza grupos carboxílicos, lactónicos y fenólicos. En tanto, el carbonato de sodio neutraliza grupos carboxílicos y lactónicos y el bicarbonato de sodio solo neutraliza grupos carboxílicos. Además, el HCl neutraliza grupos básicos (Rojas et al., 2019).

Caracterización Infrarroja

Aproximadamente 15 mg de cada material se mezcló con 100 mg de bromuro de potasio en un mortero de ágata con ayuda de un pistilo de ágata. Posteriormente, esta mezcla se comprimió en un pellet y su espectro infrarrojo se registró en un espectrofotómetro (IRA-Affinity, Shimadzu, Japon) en el rango de 4000-400 cm^{-1} .

Evaluación de la Capacidad Descontaminante de los Materiales

Estudios de Remoción

Se pesaron aproximadamente 50 mg de los materiales adsorbentes (cáscaras de mango sin tratamiento, material con activación física, material activado de forma física y química) y se pusieron en contacto con 100 mL de solución acuosa de ketoconazol a 10 $\mu\text{g}/\text{mL}$ por 1 h en agitación magnética a 240 rpm. Posteriormente, la mezcla se centrifugó a 4500 rpm por 15 minutos y se leyó la absorbancia del sobrenadante a $\lambda = 226 \text{ nm}$. Este valor se interpoló en la curva de calibración obtenida a concentraciones de ketoconazol entre 0,8-6,5 $\mu\text{g}/\text{mL}$ y se estableció la concentración sin remover de ketoconazol, que se restó a la concentración inicial para obtener el porcentaje de remoción, de acuerdo con la siguiente ecuación:

$$\text{Cantidad remoción de ketoconazol (\%)} = \frac{c_i - c_f}{c_i} * 100\%$$



Dónde C_i es la concentración inicial de la solución de ketoconazol y C_f la concentración de la solución de ketoconazol luego del proceso de remoción.

Adicionalmente, se realizó un ensayo empleando 100 mL de agua purificada y el material adsorbente como blanco para corregir el posible efecto que pudiera presentar el material en la cuantificación del ketoconazol.

Resultados y Discusión

Pretratamiento de las Cáscaras de Mango

La figura 4.1 presenta los resultados del proceso de pretratamiento de los residuos de mango. Inicialmente en el proceso de preparación las cáscaras de mango se pasaron por horno y se trituraron, generando pérdida de material por el proceso de evaporación y deshidratación de las cáscaras, que presentan un contenido considerable de agua. Al finalizar el proceso de pretratamiento, se recuperaron 287,3 g de desechos de mango los cuales se usaron para la producción de los diferentes materiales adsorbentes.

Figura 4.1.

Pretratamiento de las cáscaras de mango.





Obtención de Materiales Adsorbentes

En la tabla 4.1 se presentan los resultados del rendimiento del proceso de activación. Durante el tratamiento térmico, se produce la pirólisis de los mayores componentes de las cáscaras de mango como son la celulosa, hemicelulosa y lignina (Ghosh et al., 2019; Filippín et al., 2017).

En cada caso, se partió de una cantidad muy cercana a 5 g de la matriz de mango pretratado y se obtuvo un rendimiento promedio de 40,51%, el cual es bastante favorable, lo cual garantiza que el pretratamiento de la muestra es el idóneo ya que previamente se ha removido una suma significativa de humedad.

Tabla 4.1.

Rendimientos del proceso de activación física y química de las cáscaras de mango.

Material adsorbente	Cantidad inicial (g)	Cantidad obtenida (g)	% rendimiento
Cáscaras de mango secas y tamizadas	2109	287,3	13,61%
Carbón 32%	5,012	2,012	40,24%
Carbón 36%	5,059	2,128	42,56%
Carbón 40%	5,018	1,986	39,72%
Carbón 48%	5,023	1,976	39,52%

La activación haciendo uso del ácido fosfórico en las diferentes concentraciones actúa potencializando el efecto deshidratante y de descomposición térmica, lo que lleva a la generación de un material altamente poroso a nivel estructural, aumentando el área superficial y su capacidad de adsorción. Esto se puede evidenciar al comparar los resultados del mango sin tratar con los demás materiales obtenidos en los estudios de remoción que se presentan más adelante.



No obstante, el rendimiento de este proceso se podría mejorar con el uso de atmósfera inerte durante el tratamiento térmico, es decir, el empleo de nitrógeno durante el proceso de activación química (Ngueabouo et al., 2022), aunque esto generaría costos adicionales en el proceso y, en este trabajo, se pretende obtener un producto a través de un proceso que se pueda realizar sin la necesidad de demasiada indumentaria y reactivos.

Caracterización de los Materiales Adsorbentes

Titulación de Boehm

La tabla 4.2 presenta los resultados de la titulación de Boehm. Se observa una mayor prevalencia de grupos básicos en los materiales, como en el caso del carbón 32% con un contenido de 9.5 mmol/g, el carbón 36% que presentó 11,8 mmol/g y el carbón 40% que presentó 7,6 mmol/g, aunque el carbón 48% presentó la menor cantidad de grupos básicos. Esto se puede deber a residuos de ácido fosfórico que pueden haber quedado en la superficie del material, los cuales no se eliminaron con los lavados posteriores a la activación.

Tabla 4.2.

Resultados de la titulación de Boehm.

Contenido (mmol/g)*				
Grupos	Carbón 32%	Carbón 36%	Carbón 40%	Carbón 48%
Grupos básicos	9,5	11,8	7,6	4,5
Grupos ácidos totales	6,9	7,3	6,1	8,5
Grupos carboxílicos	2,1	2,9	2,6	2,5
Grupos lactónicos	0	0	0	0,7
Grupos fenólicos	6,2	6,3	5,1	5,3

*Se presenta el valor promedio únicamente de los análisis realizados por triplicado.



Por otro lado, se obtuvieron grupos ácidos totales correspondientes a 6,9 mmol/g, 7,3 mmol/g, 6,1 mmol/g y 8,5 mmol/g para los carbones activados obtenidos a concentraciones de 32%, 36%, 40% y 48% respectivamente, demostrando una prevalencia constante de grupos carboxílicos y fenólicos. En el caso de los grupos lactónicos, pese a ser igual un compuesto ácido cíclico, solo estuvo presente en el carbón 48% en una proporción de 0,7 mmol/g. Esto puede deberse a que una mayor cantidad de ácido fosfórico puede potenciar diferentes reacciones en el material que propenden por la aparición de este grupo específico.

Se evidenciaron grupos carboxílicos equivalentes a 2,1 mmol/g, 2,9 mmol/g, 2,6 mmol/g y 2,5 mmol/g para el tratamiento con ácido fosfórico al 32%, 36%, 40% y 48% respectivamente. La presencia de estos grupos favorece el perfil de adsorción del carbón en sus diversas concentraciones ya que estas especies químicas permiten reacciones de ácido – base, permitiendo una mayor interacción con contaminantes en aguas.

También, se evidenció grupos fenólicos correspondientes a 6,166 mmol/g, 6,266 mmol/g, 5,1 mmol/g y 5,266 mmol/g, para el tratamiento con ácido fosfórico al 32%, 36%, 40% y 48% respectivamente. Estos grupos fenólicos favorecen reacciones ácido – base y se benefician en medios acuosos por medio de enlaces de hidrogeno y de intercambio iónico, por lo cual pueden mejorar la capacidad de adsorción del material carbonizado.

No obstante, se debe destacar que no hay una relación lineal entre el contenido de grupos ácidos y la concentración de ácido fosfórico empleada para la producción de los diferentes materiales adsorbentes, lo cual se ha reportado anteriormente en estudios.

Caracterización Infrarroja de los Diferentes Materiales Adsorbentes

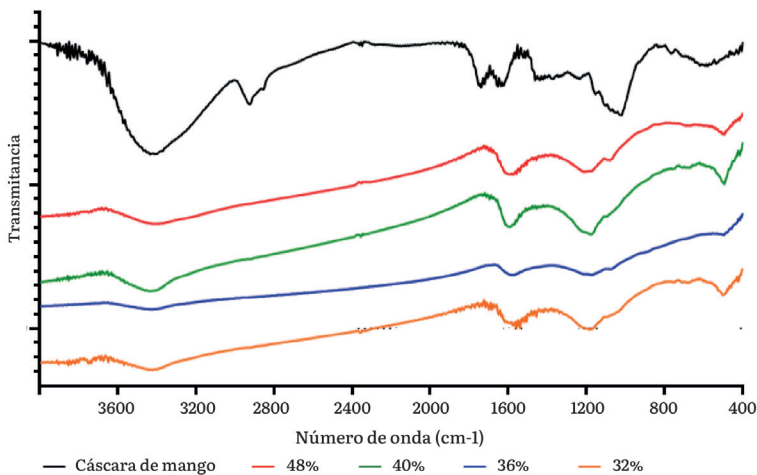
La figura 4.2 presenta los espectros infrarrojos de los diferentes materiales adsorbentes. En el espectro infrarrojo de las cáscaras de mango se pueden observar bandas de absorción a 3400 cm^{-1} debido a estiramientos del grupo OH y de agua posiblemente adsorbida por el material. No obstante, en esta región se presentan señales por la

interacción de puentes de hidrógeno de grupos OH de alcoholes que pueden estar presente en un rango de $3550 - 3200 \text{ cm}^{-1}$ (Al-Qodah & Shawabkiah, 2009). La señal de 2900 cm^{-1} se presenta por el estiramiento simétrico del CH. Las bandas presentes entre $1600 - 1750 \text{ cm}^{-1}$ se atribuyen a los estiramientos del C=O y C-O de esteres fenólicos, estructuras cetónicas conjugadas y ácidos carboxílicos (Cuhadaroglu & Uygun, 2008) También, en la banda de 1650 cm^{-1} se podría encontrar tensión de C=C y, por último, la señal entre $1190 - 1000 \text{ cm}^{-1}$ puede asignarse a la tensión del grupo funcional éter alifático y alcohol primario.

Por otra parte, en el espectro infrarrojo de las cáscaras activadas con 32% de ácido fosfórico se observa una señal a 3400 cm^{-1} , la cual se puede atribuir a la tensión del OH del alcohol, además se presenta un ensanchamiento de la banda entre $3200 - 3600 \text{ cm}^{-1}$ debido a los puentes de hidrogeno generados entre grupos funcionales como carboxilos, los fenoles o alcoholes. Las señales en la región entre $1450 - 1650 \text{ cm}^{-1}$ son debidas a la flexión C-H, a la tensión de C=C y flexión de N-H. La señal comprendida entre $1300 - 1100 \text{ cm}^{-1}$ está gracias a la activación de carbones oxidados y ocurre por los estiramientos C-O en ácidos, alcoholes, fenoles, éteres o esteres y la banda que se encuentra en 1100 cm^{-1} se da por un enlace ionizado P-O en esteres del H_3PO_4 (Suárez, 2019).

Figura 4.2.

Espectros infrarrojos de los materiales adsorbentes evaluados.





En el espectro infrarrojo de las cáscaras activadas con 36% de ácido fosfórico, se observa una banda entre $3200 - 3700 \text{ cm}^{-1}$ por la tensión del grupo O-H y tensión de una amina alifática primaria, el ensanchamiento del pico puede deberse a los puentes de hidrogeno generados por grupos funcionales como carboxilos, los fenoles o alcoholes. Las señales presentes entre $1500 - 1700 \text{ cm}^{-1}$ es debido al estiramiento del enlace C=O de ácidos carboxílicos y ésteres, la señal de 1590 cm^{-1} corresponde al enlace de alquenos y la señal en 1190 cm^{-1} representa la flexión C-O-C de éteres y O-C de ésteres, también indica la presencia de N-H de aminas secundarias. Por último, la banda que se extiende desde $1300 - 1000 \text{ cm}^{-1}$ puede deberse a tensión de enlaces P=O y P-O, indicativo de grupos fosfato en la estructura del material (Suárez, 2019).

En el espectro infrarrojo de las cáscaras activadas con 40% de ácido fosfórico se observa una señal en 3400 cm^{-1} atribuida a la tensión del OH. En esta zona de la banda hay un ensanchamiento desde $3200 - 3600 \text{ cm}^{-1}$, esto es debido a los puentes de hidrogeno fuertes provocados por grupos funcionales como carboxilos, fenoles o alcoholes. Las señales entre $1650 - 1500 \text{ cm}^{-1}$ es por la flexión C-H y tensión de C=C. Finalmente, la señal entre $1300 - 1100 \text{ cm}^{-1}$ indica el estiramiento de enlaces P=O y P-O, lo cual confirma la inserción de grupos fosfato en el material carbonizado activado.

En el espectro infrarrojo de las cáscaras activadas con 48% de ácido fosfórico se observa una señal en 3400 cm^{-1} , la cual se puede atribuir a la tensión del OH del alcohol, en esa zona del pico hay un ensanchamiento desde $3190 - 3600 \text{ cm}^{-1}$, esto es debido a los puentes de hidrogeno fuertes provocados por grupos funcionales, como lo son grupos carboxilos, los fenoles o alcoholes. La señal entre $1700 - 1450 \text{ cm}^{-1}$ se debe a la tensión C=C de alqueno cíclico y tensión de C=O de cetona conjugada. Además, el ensanchamiento de esta banda se debe a la presencia de estiramiento de enlace C=O de aldehídos, ésteres y ácidos carboxílicos, por la razón de que tienen rangos de vibración similar. Por último, la señal en 1200 cm^{-1} es atribuida al estiramiento del hidrogeno unido a P=O, o a vibraciones de estiramiento del O-C



en el enlace P=OOH y P-O-C (Suárez, 2019). La presencia de estos alquenos cíclicos y ésteres da cabida a corroborar la presencia de grupos lactónicos en el carbón activado producido con concentración del 48% de ácido fosfórico.

Comparando el espectro de las cáscaras de mango con el material activado al 32% de ácido fosfórico, se observó la desaparición de la señal de 2900 cm^{-1} indicando que la activación con H_3PO_4 puede haber generado la conversión de compuesto alifáticos a aromáticos (Yang et al., 2002), lo cual se aprecia en el espectro de los demás materiales activados. Adicionalmente, hubo cambios en las bandas entre 1300 – 1000 cm^{-1} debido a las vibraciones del enlace C-H, gracias a la pérdida de oxígeno en la superficie de los materiales. De la misma manera, el ensanchamiento de la banda entre 1300 – 1100 cm^{-1} está presente por la inserción de enlaces P=O y P-O en el material, aspecto que no muestra el material sin activar.

En tanto el espectro del material activado con 36% de ácido fosfórico presentó cambios respecto a las cáscaras de mango en el rango de 1750 – 1650 cm^{-1} por bandas más anchas a número de onda menores entre 1700 – 1500 cm^{-1} debido al estiramiento del C=O de las cetonas, aldehídos, lactonas o ácidos carboxílicos. La presencia de una banda en 1300 – 1050 cm^{-1} , señal representativa del estiramiento de los enlaces P=O y P-O (Suárez, 2019).

Además, al comparar el espectro de las cáscaras de mango con el de material activado con 40% de ácido fosfórico se observó la desaparición de la señal en 2900 cm^{-1} debida a la tensión C-H, y con ello se podría decir que con la presencia de una banda en 1600 cm^{-1} que es indicativo de tensión C=C, se dio la conversión de compuesto alifáticos a aromáticos por la adición de H_3PO_3 . Otra diferencia es la aparición de la banda entre 1300 – 1100 cm^{-1} , por la presencia de grupos fosfatos del ácido fosfórico, además que el hombro en 1136 cm^{-1} puede ser atribuido al enlace ionizado de P-O en ésteres de H_3PO_4 y a vibraciones simétricas del enlace P-O-P.



Comparando el espectro de las cáscaras de mango con el espectro de 48% de ácido fosfórico, la banda que antes estaba entre 1750 – 1650 cm^{-1} ahora está en el rango de 1700 -1450 cm^{-1} , en el cual está la vibración de C=O de cetonas, aldehídos, ácidos carboxílicos y amida. La banda que aparece en el espectro del material activado a 1598 cm^{-1} , no aparece en las cáscaras de mango, el cual pertenece a tensión de C=C de alquenos y aromáticos, indicando que pudo haber conversión de compuesto alifáticos a aromáticos, sumado a que la banda a 2900 cm^{-1} que corresponde a tensión C-H desaparece en el espectro del material activado con 48% de ácido fosfórico. Finalmente, la aparición de la banda entre 1350 – 1100 cm^{-1} es por el estiramiento de los enlaces P=O y P-O. En ese mismo rango aparece un hombro en 1200 cm^{-1} , que se observa por el estiramiento del hidrogeno unido a P=O, o a vibraciones de estiramiento del O-C en el enlace P-O-C (Suárez, 2019).

Evaluación de Capacidad Descontaminante del Material

La curva de calibración para el ketoconazol mostró una alta correlación entre la absorbancia y la concentración expresada en un valor de $R^2 = 0,9997$ y una ecuación de la recta de $y = 0,1533x + 0,0135$

En la tabla 4.3 y figura 4.3 se presentan los resultados de los ensayos de remoción. Se evidencia una diferencia significativa en la capacidad de remoción al comparar las muestras con activación química y la física, además de una mayor remoción de las cáscaras sin tratamiento en comparación a las que tienen un proceso de activación física.



Tabla 4.3.

Resultados de los ensayos de remoción de ketoconazol.

Material	Cantidad removida (%)*
Carbón 32%	91.16 ± 0.05a
Carbón 36%	77.81 ± 0.01b
Carbón 40%	73.29 ± 0.01b
Carbón 48%	78.23 ± 0.02b
Cáscaras de mango	51.44 ± 0.02c
Cáscaras de mango activadas físicamente	17.17 ± 0.06d

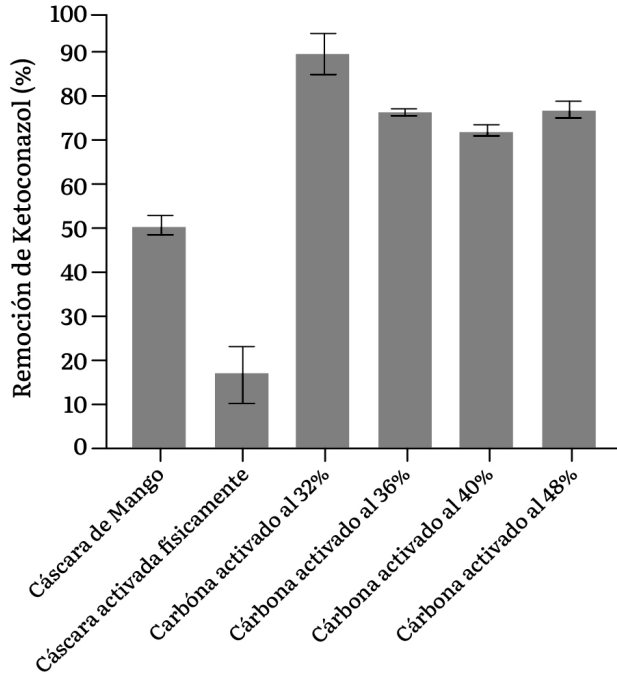
*Letras diferentes en los superíndices representan diferencias estadísticamente significativas (Valor $p < 0.05$) en los ensayos de remoción según el test de Tukey.

Las cáscaras de mango que se convierten en carbón activado por el tratamiento con ácido fosfórico a diferentes concentraciones presentan una mayor remoción que el material de partida, lo cual puede explicarse porque estos materiales tienen grupos ácidos y básicos que favorecen enormemente la adsorción de ketoconazol a través de interacciones ácido – base, puentes de hidrogeno y electrostáticas. Además, el ketoconazol tiene un comportamiento anfótero que aumenta la posibilidad de proporcionar estas interacciones con mayor facilidad, esto gracias a que al poderse comportar tanto como ácido y como base, puede interactuar con los grupos ácidos o básicos de los materiales activados, según sea el caso.



Figura 4.3.

Porcentajes de remoción de ketoconazol por parte de los materiales adsorbentes.



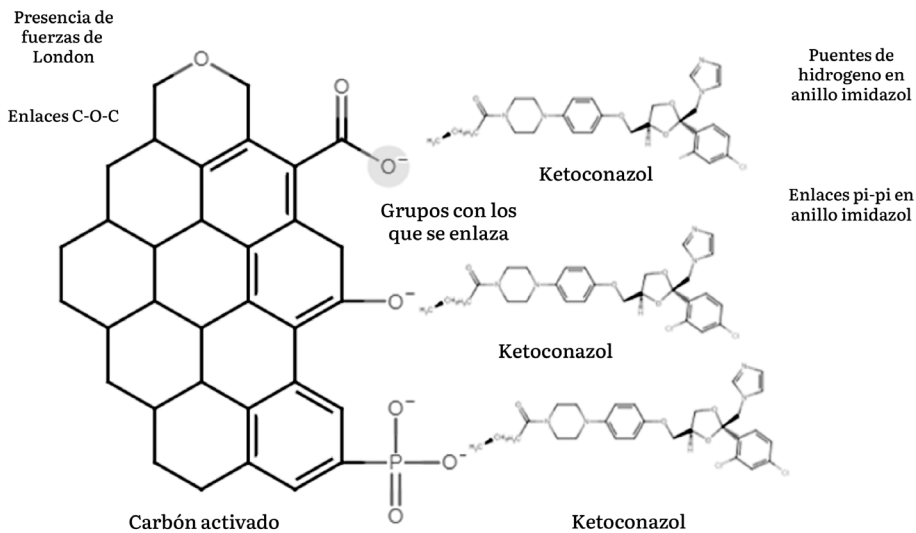
También, se deben considerar el perfil de adsorción físico que puede darse principalmente por fuerzas de Van Der Waals, además que los grupos fosfatos presentes en la superficie del carbón activado y que están cargados negativamente ($-PO_4$) pueden interactuar con los iones catiónicos en solución a través de interacciones electrostáticas. De esta forma, los cationes se acercan a los grupos fosfato debido a la atracción por cargas opuestas, con esto los iones catiónicos en la solución pueden reemplazar a los iones fosfato en la superficie del carbón activado en una reacción de intercambio. Esto resulta en la adsorción de los iones catiónicos en la superficie del carbón activado.



Lo anterior, se pudo presentar con el ketoconazol que es una base débil con valores de pKa de 6,51 y 2,94, y ya que los estudios se realizaron a pH de 6,61 se puede dar la ionización de unos de sus grupos, favoreciendo la interacción con el material adsorbente. En la Figura 4.4 se representan las posibles interacciones que pudieron generarse entre los materiales activados químicamente y el ketoconazol.

Figura 4.4.

Representación de las interacciones entre los materiales adsorbentes activados y el ketoconazol.



Además, de acuerdo con el tratamiento estadístico se encontró que la concentración del 32% de ácido fosfórico aumenta en mayor medida la remoción de ketoconazol, en tanto que con las demás concentraciones se obtienen resultados similares, lo que indicaría que no hay necesidad de un aumento de la concentración del ácido por encima del 32% para mejorar la capacidad de adsorción de las cáscaras de mango.

Por otra parte, la cáscara de mango presenta un porcentaje de adsorción de hasta el 51% de efectividad, esto se puede explicar por:



La adsorción física por parte de la cáscara de mango que es porosa, lo que significa que tiene una superficie interna con poros y grietas. Las impurezas pueden quedar atrapadas en estos poros debido a fuerzas de atracción Van Der Waals y otros procesos físicos. Esta adsorción se basa principalmente en interacciones físicas y no involucra reacciones químicas.

La adsorción química por parte de la cáscara de mango puede darse por interacciones como enlaces de hidrógeno debido a la prevalencia de grupos hidroxilo (-OH) presentes en la lignina, hemicelulosa y celulosa.

También, se puede presentar interacciones hidrofóbicas debido a núcleos apolares en la superficie de la cáscara de mango, que pueden interactuar con el esqueleto hidrocarbonado del ketoconazol. Asimismo, puede tener núcleos con carga superficial neta que atraerán especies químicas de carga opuesta a través de interacciones electrostáticas. Fuera de eso, la morfología de las partículas de cáscara de mango y su tamaño también pueden influir en la capacidad de adsorción ya que, superficies más rugosas o estructuras más finas pueden tener una mayor capacidad de adsorción debido a una mayor área superficial.

Por otra parte, el tratamiento físico disminuyó la capacidad de remoción de ketoconazol de las cáscaras de mango, lo cual se puede atribuir a la pérdida de sus componentes principales como celulosa, hemicelulosa y lignina que limita su capacidad de interacción con otros compuestos.

Finalmente, se evidenció una significativa respuesta de remoción por parte de aquellas muestras de carbón activo, lo cual comprueba que sigue siendo un material altamente efectivo para este fin, así como se ha evidenciado en otros estudios (He et al., 2023).



Conclusiones

Los desechos agroindustriales como las cáscaras de mango permitieron la producción de diferentes materiales adsorbentes favoreciendo la sostenibilidad y reduciendo el impacto ambiental de la contaminación de cuerpos de agua contaminados con ketoconazol.

La cáscara de mango resultó ser una matriz idónea para la remoción de ketoconazol en solución ya que removió el 51,44% del ketoconazol presente, lo cual es un porcentaje bastante alto. Sin embargo, su activación física redujo su capacidad de remoción por la pérdida de estructuras ricas en carbono y oxígeno.

La activación química de las cáscaras de mango aumentó la capacidad de remoción de ketoconazol, aunque se evidenció que con una concentración del 32% se obtienen los mejores resultados. En los ensayos se observó una eficacia de remoción del ketoconazol con resultados de hasta 90%, esto gracias a su alta lipofilidad representado en un Log P de 4,35, que puede contribuir a su adsorción, además de interacciones electrostáticas.

Finalmente, otros futuros estudios que se podrían aplicar a este material serían la optimización del proceso de activación, es decir, investigar el efecto de parámetros como: temperatura, tiempo, tipo de agente activador, etc para aumentar su capacidad de remoción. También, se podría hacer estudios cinéticos de adsorción del material y la evaluación del efecto de variables como pH, temperatura y concentración de los adsorbatos en la remoción. Además, se podrían emplear otros desechos agroindustriales distintos al mango como fuente de producción de diferentes materiales adsorbentes promisorios para la descontaminación de aguas, dándoles un segundo uso y generándoles valor agregado.



Referencias Bibliográficas

- Al-Qodah, Z., & Shawabkha, R. (2009). Production and characterization of granular activated carbon from activated sludge. *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, 26(1), 127–136. <https://doi.org/10.1590/s0104-66322009000100012>
- Bahri, M. A., Calvo, L., Gilarranz, M., & Rodriguez, J. (2012). Activated carbon from grape seeds upon chemical activation with phosphoric acid: Application to the adsorption of diuron from water. *Chemical Engineering Journal*, 203, 348–356. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2012.07.053>
- Beisenova, R., Tulegenova, S., Tazitdinova, R., Kovalenko, O., & Turlybekova, G. (2020). Purification by Ketoconazole Adsorption from Sewage. *Systematic Review Pharmacy*, 11(6): 550-554.
- Casado, J. (2015). Nuevas estrategias analíticas enfocadas a estudios de determinación y distribución de contaminantes emergentes azólicos en el medio ambiente. Tesis Doctoral. Universidad de Santiago de Compostela.
- Cuhadaroglu, D., & Uygun, O. A. (2008). Production and characterization of activated carbon from a bituminous coal by chemical activation. *African Journal of Biotechnology*, 7(20), 3703-3710
- Diao, Y., Walawender, W., & Fan, L. (2002). Activated carbons prepared from phosphoric acid activation of grain sorghum. *Bioresource Technology*, 81(1), 45–52. [https://doi.org/10.1016/s0960-8524\(01\)00100-6](https://doi.org/10.1016/s0960-8524(01)00100-6)
- Filippín J, Luna NT, Pozzi MT, Pérez JD (2017). Obtención y caracterización de carbón activado a partir de residuos olivícolas y oleícolas por activación física. *Avances en Ciencias e Ingeniería*, 8(3), 59-71.
- Hokken, M. W., Zwaan, B., Melchers, W., & Verweij, P. (2019). Facilitators of adaptation and antifungal resistance mechanisms in clinically relevant fungi. *Fungal Genetics and Biology*, 132, 103254. <https://doi.org/10.1016/j.fgb.2019.103254>



- Huang, Q., Yu, Y., Tang, C., & Peng, X. (2010). Determination of commonly used azole antifungals in various waters and sewage sludge using ultra-high performance liquid chromatography–tandem mass spectrometry. *Journal of Chromatography A*, 1217(21), 3481–3488. <https://doi.org/10.1016/j.chroma.2010.03.022>
- Ghosh, A., Chakravorty, D., Rahaman, M., & Bose, S. (2019). Efficiency of Mango Peel Derived Activated Carbon Prepared via Different Routes as Adsorbent for Rhodamine B. In *Waste Water Recycling and Management* (pp. 111–122). https://doi.org/10.1007/978-981-13-2619-6_10
- He, S., Ling, L., Wu, Y., Yang, S., Hua, Z., Tang, K., Wang, M., Zhu, M., & Fang, J. (2023). Roles of activated carbon in UV/Chlorine/Activated Carbon–TIO₂ process for micropollutant abatement and DBP control. *Environmental Science & Technology*, 57(24), 9055–9063. <https://doi.org/10.1021/acs.est.3c01989>
- Hossain, C. M., Ryan, L. K., Gera, M., Choudhuri, S., Lyle, N., Ali, K. A., & Diamond, G. (2022). Antifungals and drug resistance. *Encyclopedia*, 2(4), 1722–1737. <https://doi.org/10.3390/encyclopedia2040118>
- Kahle, M., Buerge, I. J., Hauser, A., Müller, M. D., & Poiger, T. (2008). Azole fungicides: Occurrence and fate in wastewater and surface waters. *Environmental Science & Technology*, 42(19), 7193–7200. <https://doi.org/10.1021/es8009309>
- Lellis, B., Fávaro-Polonio, C. Z., Pamphile, J. A., & Polonio, J. C. (2019). Effects of textile dyes on health and the environment and bioremediation potential of living organisms. *Biotechnology Research and Innovation*, 3(2), 275–290. <https://doi.org/10.1016/j.biori.2019.09.001>
- Liu, Z., Sun, Y., Xu, X., Meng, X., Qu, J., Wang, Z., Liu, C., & Qu, B. (2020). Preparation, characterization and application of activated carbon from corn cob by KOH activation for removal of Hg(II) from aqueous solution. *Bioresource Technology*, 306, 123154. <https://doi.org/10.1016/j.biortech.2020.123154>



- Londoño-Franco, L.F., Londoño-Muñoz, P.T., & Muñoz-García, F.G. (2016). Los riesgos de los metales pesados en la salud humana y animal. *Bioteología en el Sector Agropecuario y Agroindustrial*, 14(2), 145-153. [https://doi.org/10.18684/BSAA\(14\)145-153](https://doi.org/10.18684/BSAA(14)145-153)
- Mejía-Giraldo, L.F., Martínez-Correa, H.A., Betancourt-Gutiérrez, J.E., & Castrillón-Castaño, C.E. (2007). Aprovechamiento del residuo agroindustrial del mango común (*Mangifera indica* L.) en la obtención de azúcares fermentables. *Ingeniería y Ciencia*, 3(6), 41-62.
- Moreno-Barragán, A.S., Benalcázar-Pozo, C.A., & Bermúdez-del-Sol, A. (2023). Contaminación ambiental por productos farmacéuticos y su impacto en la salud humana. *Revista de Ciencias Médicas de Pinar del Río*, 27(S1), e5855
- Moult, J., Allan, S., Hewitt, C., & Berners-Lee, M. (2018). Greenhouse gas emissions of food waste disposal options for UK retailers. *Food Policy*, 77, 50–58. <https://doi.org/10.1016/j.foodpol.2018.04.003>
- Ngueabouo, A. M. S., Tagne, R. F. T., Tchuifon, D. R. T., Fotsop, C. G., Tamo, A. K., & Anagho, S. G. (2022b). Strategy for optimizing the synthesis and characterization of activated carbons obtained by chemical activation of coffee husk. *Materials Advances*, 3(22), 8361–8374. <https://doi.org/10.1039/d2ma00591c>
- Organización de las Naciones Unidas. (2019). El agua y el saneamiento, una cuestión de pobreza extrema. <https://www.un.org/sustainabledevelopment/es/water-and-sanitation/>
- Organization for Economic Co-operation and Development (2020). Agua y saneamiento. En *Panorama de la Salud: Latinoamérica y el Caribe 2020*. https://www.oecd-ilibrary.org/social-issues-migration-health/panorama-de-la-salud-latinoamerica-y-el-caribe-2020_4a7e30c6-es
- Organización Panamericana de la Salud. (sf). Agua y saneamiento. <https://www.paho.org/es/temas/agua-saneamiento>.



- Pacheco-Jiménez, A. A., Heredia, J. B., Gutiérrez-Grijalva, E. P., Quintana-Obregón, E. A., & Muy-Rangel, M. D. (2022). Potencial industrial de la cáscara de mango (*Mangifera indica* L.) para la obtención de pectina en México. *TIP Revista Especializada En Ciencias Químico-Biológicas*, 25. <https://doi.org/10.22201/fesz.23958723e.2022.419>
- Pai, V., Ganavalli, A., & Kikkeri, N. (2018). Antifungal resistance in dermatology. *Indian Journal of Dermatology*, 63(5), 361. https://doi.org/10.4103/ijd.ijd_131_17
- Ramirez, A., Giraldo, S., Flores, E., Acelas, N. (2017). Preparación de carbón activo a partir de residuos de palma de aceite y su aplicación para la remoción de colorantes. *Revista colombiana de química*, 46(1), 33-41.
- Rojas, J., Suarez, D., Moreno, A., Silva-Agredo, J., & Torres-Palma, R. A. (2019). Kinetics, Isotherms and Thermodynamic Modeling of Liquid Phase Adsorption of Crystal Violet Dye onto Shrimp-Waste in Its Raw, Pyrolyzed Material and Activated Charcoals. *Applied Sciences*, 9(24), 5337. <https://doi.org/10.3390/app9245337>
- Serna L. Torres C (2014). Potencial agroindustrial de cáscaras de mango de las variedades Keitt, y Tommy Atkins (*Mangifera indica*). *Acta Agronómica*, 64(2), 110–115. <https://doi.org/10.15446/acag.v64n2.43579>
- Sharma, M., Usmani, Z., Gupta, V. K., & Bhat, R. (2021). Valorization of fruits and vegetable wastes and by-products to produce natural pigments. *Critical Reviews in Biotechnology*, 41(4), 535–563. <https://doi.org/10.1080/07388551.2021.1873240>
- Suarez, D. (2019). Evaluación de exoesqueletos de camarones y sus carbonizados como descontaminantes para reducir su impacto ambiental. Tesis de Maestría. Universidad de Antioquia.
- United Nations. (s/f). Agua | Naciones Unidas. <https://www.un.org/es/global-issues/water>



Yang, Y., Ji, Y., Gao, Y., Lin, Z., Lin, Y., Lu, Y., & Zhang, L. (2022). Antibiotics and antimycotics in waste water treatment plants: Concentrations, removal efficiency, spatial and temporal variations, prediction, and ecological risk assessment. *Environmental Research*, 215(Pt 1), 114135. <https://doi.org/10.1016/j.envres.2022.114135>

CAPÍTULO 5

Obtención de Carbón Activado a partir del Desecho de Cáscara de Coco para la Remoción *In vitro* de Fluconazol en Aguas

Synthesis of Activated Carbon from Coconut Shell Waste for the in Vitro Decontamination of Fluconazole in Water

María Alexandra Coral Palacio

Universidad Santiago de Cali, Colombia

✉ maría.coral02@usc.edu.co

© <https://orcid.org/0009-0006-4614-2735>

Yhors Alexander Ciro Monsalve

Universidad Santiago de Cali, Colombia

© <https://orcid.org/0000-0003-4093-8696>

✉ yhors.ciro00@usc.edu.co

Laura Yineth Jara Sánchez

Universidad Santiago de Cali, Colombia

✉ laura.jara04@usc.edu.co

© <https://orcid.org/0009-0001-4369-2276>

Resumen

El incremento de contaminantes emergentes en las fuentes de agua potable representa un desafío significativo para la salud pública y el medio ambiente. Entre estos contaminantes, el fluconazol, un fármaco antifúngico ampliamente utilizado en la práctica clínica, ha sido identificado como una sustancia problemática debido a

Cita este capítulo / Cite this chapter

Coral Palacio, M. A.; Jara Sánchez, L. Y. y Ciro Monsalve, Y. A. (2026). Obtención de carbón activado a partir del desecho de cáscara de coco para la remoción in vitro de fluconazol en aguas. En: Ciro Monsalve, Y. A. (ed. científico). *Aprovechamiento de residuos agroindustriales para la biorremediación de fármacos en fuentes hídricas*. (pp. 117-140). Cali, Colombia: Universidad Santiago de Cali. <https://doi.org/10.35985/9786287914049.5>



su persistencia y potencial impacto negativo en los ecosistemas acuáticos. No obstante, el uso de carbones activados derivados de fuentes renovables ha surgido como una alternativa prometedora, con potencial para la adsorción eficiente de contaminantes en aguas. De esta forma, se desarrollaron materiales adsorbentes a partir de los desechos de cáscara de coco por tratamiento químico con CaCl_2 y H_3PO_4 , que se caracterizaron por titulación de Boehm, y su capacidad de adsorción de fluconazol se evaluó a diferentes dosis del fármaco (6 y 14 ppm), cantidad de material adsorbente (20 y 50 mg), pH (3.0 y 7.0) y fuerza iónica (0.5, 1.0 y 1.5 M). La activación con CaCl_2 y H_3PO_4 produjo rendimientos del 10.17% y 16.3%, respectivamente. La titulación de Boehm reveló grupos funcionales carboxílicos, fenólicos y lactónicos. El carbón activado con H_3PO_4 mostró resultados sobresalientes, logrando una adsorción de fluconazol del 83.1% en pH neutro y del 98.7% a pH ácido. La eficacia de adsorción varió con el pH y la fuerza iónica, siendo menor en presencia de NaCl. Estos hallazgos destacan el potencial del carbón activado de cáscaras de coco tratado con H_3PO_4 como una solución sostenible y eficiente para la descontaminación de aguas.

Palabras clave: fluconazol, carbón activado, activación química, cáscara de coco, descontaminación de aguas.

Abstract

The increase in emerging pollutants in drinking water sources poses a significant challenge to public health and the environment. Among these contaminants, fluconazole, an antifungal drug widely used in clinical practice, has been identified as a problematic substance due to its persistence and potential negative impact on aquatic ecosystems. However, the use of activated coals derived from renewable sources has emerged as a promising alternative with potential for efficient adsorption of pollutants into water. Thus, adsorbent materials were developed from the coconut shell waste by chemical treatment with CaCl_2 and H_3PO_4 , which were characterized by Boehm titration, and their fluconazole adsorption capacity was evaluated at different doses of the drug (6 and 14



ppm), amount of adsorbent material (20 and 50 mg), pH (3.0 and 7.0) and ionic strength (0.5, 1.0 and 1.5 M). Activation with CaCl_2 and H_3PO_4 yielded yields of 10.17% and 16.3%, respectively. Boehm titration revealed carboxyl, phenolic and lactonic functional groups. Activated carbon with H_3PO_4 showed outstanding results, achieving an adsorption of fluconazole of 83.1% at neutral pH and 98.7% at acid pH. The adsorption efficiency varied with pH and ionic strength, being lower in the presence of NaCl. These findings highlight the potential of H_3PO_4 treated coconut shell activated carbon as a sustainable and efficient solution for water decontamination.

Keywords: fluconazole, activated carbon, chemical activation, coconut shell, water decontamination.

Introducción

Actualmente, el uso de fármacos para tratar enfermedades en humanos y animales es común. Sin embargo, una considerable proporción de estos fármacos no se absorbe por completo en el organismo y se excreta a través de la orina y las heces, encontrando su destino final en cuerpos de agua como ríos, lagos y acuíferos (Caban & Stepnowski, 2021). Esta realidad ha generado la presencia de diversos compuestos farmacéuticos en los recursos hídricos, lo que conlleva implicaciones perjudiciales tanto para la vida acuática como para los seres humanos que dependen del agua para sus actividades cotidianas, incluyendo el consumo (Zhang et al., 2020).

La contaminación por fármacos, por tanto, se manifiesta como un problema ambiental de alcance global y una preocupación significativa en términos de salud pública. Un caso ejemplar es el fluconazol, un antifúngico empleado para tratar infecciones, detectado en concentraciones elevadas en aguas superficiales y subterráneas a nivel mundial. Esto ha desencadenado efectos adversos tanto en la salud humana como en la vida acuática, tales como la capacidad de los hongos para desarrollar resistencia al medicamento e impactos en el sistema endocrino de los organismos acuáticos debido a su exposición a este compuesto (Caicedo-Bejarano et al., 2023).



La resistencia a este antifúngico no solo puede resultar en una respuesta inadecuada al tratamiento, prolongando o agravando la enfermedad, sino que también aumenta la necesidad de utilizar antifúngicos más potentes con posibles efectos secundarios más serios. En casos graves, esta resistencia puede poner en peligro la vida del paciente al limitar las opciones de tratamiento eficaz. Además, esta resistencia puede dar lugar a infecciones recurrentes y la propagación de cepas resistentes, lo que supone un desafío para la salud pública al limitar las opciones terapéuticas disponibles y aumentar la complejidad en el manejo de infecciones fúngicas (Cárdenas & Pérez, 2020).

A pesar de la existencia de diferentes métodos para la eliminación de fármacos en el agua, como la oxidación avanzada o la fotocatalisis, es relevante señalar que, a pesar de su histórica percepción de ser costosos y no siempre eficaces, la investigación reciente ha demostrado avances notables en su eficacia y costo. Por ejemplo, un estudio realizado por (Vargas & Palacios, 2017) enfatiza la necesidad de buscar soluciones sostenibles y económicamente viables para la eliminación de contaminantes en el agua, lo que sugiere que estos métodos pueden estar evolucionando hacia alternativas más pragmáticas.

Entre estas alternativas, se destaca el uso del carbón activado, un material poroso utilizado en diversas aplicaciones, incluyendo la eliminación de contaminantes en el agua (Lee, Kim & Park, 2023). La porosidad y la capacidad de adsorción de este material se ven incrementadas mediante la activación química con ácido fosfórico (Shah et al., 2020).

Además, se ha comprobado que el carbón activado tiene el potencial para eliminar varios fármacos que se encuentran en el entorno acuoso como diclofenaco, acetaminofén, naproxeno, simvastatina, tetraciclina, amoxicilina y benzodiazepinas, entre otros (Sandoval-González et al., 2022). Fuera de su eficacia, el carbón activado puede obtenerse a partir de diversos residuos agroindustriales, como la cáscara de coco, que representa una fuente natural de fibra con una composición promedio del 36 % de celulosa, 25 % de hemicelulosa y 28 % de lignina (Freitas et al., 2019; Sasono et al., 2023).



Esta cáscara de coco es apta para la activación química con ácido fosfórico (Kumar et al., 2022), lo que da lugar a una estructura porosa que proporciona una amplia superficie para la adsorción de contaminantes (González et al., 2018). Además, la cáscara de coco se presenta como una fuente de materia prima sostenible para la producción de carbón activado (Onigemo et al., 2024). El proceso de activación química con ácido fosfórico resulta ser un procedimiento sencillo y escalable, como lo han señalado Molina-Sabio y Rodríguez-Reinoso en 2004.

Sin embargo, es importante destacar que la disponibilidad de cáscaras de coco puede variar según la región o el país. En algunos lugares, como en el Valle del Cauca-Colombia, estas cáscaras son fácilmente accesibles y abundantes, pero no se aplica universalmente. Fuera de eso, es crucial señalar que, hasta el momento, no se ha investigado si el carbón activado derivado de la cáscara de coco es eficaz en la remoción del fluconazol.

Por ende, en este trabajo se llevó a cabo la evaluación de la capacidad de remoción de fluconazol de carbón activado derivado de cáscaras de coco. Se produjeron dos carbones activados mediante activación química con ácido fosfórico y cloruro de calcio, además que se realizó la titulación de Boehm para caracterizar los grupos funcionales presentes en los materiales adsorbentes. De esta forma, este proyecto finaliza con un material adsorbente capaz de emplearse en procesos de remoción de contaminantes farmacéuticos en agua, a la vez que se genera un valor agregado a los residuos de cáscara de coco.

Materiales y Métodos

El ácido fosfórico (H_3PO_4) e hidróxido de sodio (NaOH) se adquirieron de Protokimica, el cloruro de calcio ($CaCl_2$) se adquirió de Quiminet. El bicarbonato de sodio ($NaHCO_3$), carbonato de sodio (Na_2CO_3), ácido clorhídrico (HCl), cloruro de sodio (NaCl), verde de bromocresol y fenolftaleína se adquirieron de Merck.



En primer lugar, se realizó el lavado y secado de las cáscaras de coco, luego se sometió a activación química con ácido fosfórico y cloruro de calcio. Una vez obtenidos los materiales adsorbentes se caracterizaron por titulación e Boehm para obtener información de los grupos funcionales. Por último, se evaluó la capacidad de remoción *in-vitro* de fluconazol en medio acuoso de cada material obtenido y de las cáscaras sin ningún tratamiento, variando el pH y fuerza iónica del medio, la cantidad de material adsorbente y la concentración de fluconazol.

Adecuación de los Desechos de Cáscara de Coco

Los desechos de cáscara de coco se recolectaron en Cali, Valle del Cauca, y fueron sometidos a un proceso de limpieza y adecuación. Se eliminaron los residuos externos mediante un cepillado con cerdas suaves, seguido de una inmersión en una solución jabonosa de pH neutro durante 30 minutos. Este enfoque con un jabón de pH neutro garantiza la preservación de las condiciones iniciales de la muestra (Onigemo et al., 2024). Después de la inmersión, se procedió a un nuevo cepillado para eliminar cualquier suciedad persistente. Posteriormente, la cáscara se secó a temperatura de 110 °C durante 2 días en una estufa de bandejas (ED056UL-120V Binder). Posteriormente, el residuo se trituró en un molino de martillo (MF 10Basic, IKA®) y se tamizó por una malla # 100 para obtener un tamaño de partícula homogéneo de 0.15 mm.

Obtención de Carbón Activado por Tratamiento Químico

Activación Química con Ácido Fosfórico

El método de activación química con H_3PO_4 utilizado, se basó en las técnicas descritas por (Correa & Velásquez, 2019). En este proceso, se prepararon 100 mL de una solución acuosa de H_3PO_4 al 27%, la cual se puso en contacto con 50 g de residuos de cáscaras de coco durante 24 horas para asegurar una impregnación adecuada. Posteriormente, la muestra impregnada fue filtrada y sometida a un proceso de carbonización a 600 °C durante 3 horas en una mufla (Maxtermo MC5438, Taiwan). Tras la carbonización, se neutralizó con una



solución de NaOH al 0.1 M y se realizaron varios lavados con agua desionizada para eliminar los residuos ácidos (Thangarajah et al., 2020). Finalmente, la muestra se secó en una balanza infrarroja (HE53, Mettler Toledo,) a 120 °C y se tamizó por malla #100. Este proceso busca optimizar la eficacia del carbón activado en la remoción de fluconazol en aguas contaminadas, por la modificación de los grupos funcionales en su superficie.

Activación Química con Cloruro de Calcio

La activación química con CaCl_2 se realizó siguiendo una metodología análoga al proceso de activación con ácido fosfórico. Se emplearon 100 mL de una solución de cloruro de calcio al 10%, la cual fue preparada mediante la disolución de 10 g de cloruro de calcio en 100 mL de agua replicando así las condiciones experimentales establecidas (Martinez et al., 2007). En esta solución, se activaron 50 g de residuos de cáscaras de coco durante 24 horas.

Posteriormente, la mezcla se carbonizó a 600 °C durante 3 horas en una mufla (Maxtermo, MC5438, Taiwán) y luego se neutralizaron con NaOH al 0.1M. Después, se realizaron lavados con agua desionizada para eliminar cualquier remanente de cloruro de calcio. Finalmente, la muestra tratada se secó en una balanza infrarroja (HE53, Mettler Toledo) a 120 °C y se tamizó con una malla #100, con el objetivo de homogeneizar el tamaño de partícula y mejorar la eficacia en la adsorción de fluconazol en aguas contaminadas. Este proceso busca optimizar la eficacia del carbón activado en la remoción de fluconazol debido a la modificación de los grupos funcionales en su superficie.

Caracterización Físicoquímica por el Método de Boehm

Para evaluar los grupos funcionales en la superficie del carbón activado, se prepararon soluciones de hidróxido de sodio (NaOH), carbonato de sodio (Na_2CO_3), ácido clorhídrico (HCl) y bicarbonato de sodio (NaHCO_3) a una concentración de 0.1 M, siguiendo el método descrito por (Boehm, 1994). Seguidamente, 10 mL de cada solución se mezcló con 0.1 g de cada carbón activado, se agitó durante 1 h y se dejó en reposo por 24 h. Luego, se centrifugó por 15 minutos a 4500 rpm.



Las titulaciones ácido-base se llevaron a cabo agregando gradualmente NaOH a cada muestra para reaccionar con grupos ácidos presentes en el carbón activado, y HCl para reaccionar con grupos básicos. Se registraron con precisión los volúmenes de NaOH y HCl utilizados para calcular las cantidades de moles consumidas, esenciales para determinar la acidez y basicidad del carbón activado. Se utilizó una alícuota de 5 mL de cada muestra para realizar las titulaciones por triplicado, garantizando la precisión de los resultados.

Para la titulación de los bicarbonatos y carbonatos presentes en el carbón activado, se utilizó una solución de HCl con verde de bromocresol como indicador de pH. Para determinar la capacidad básica del carbón activado, se empleó una solución de HCl con fenolftaleína como indicador de punto final, mientras que para la capacidad ácida se utilizó una solución de NaOH con fenolftaleína. Esta caracterización es crucial para evaluar la eficacia del carbón activado en la remoción de fluconazol.

Estudios de Remoción de Fluconazol por Agentes Adsorbentes

Los estudios de remoción se realizaron empleando como agentes adsorbentes las cáscaras de coco, los carbones activados obtenidos con el tratamiento con ácido H_3PO_4 y con $CaCl_2$ y un carbón activado comercial.

Efecto de la Cantidad de Fluconazol y de Agente Adsorbente

Se prepararon soluciones acuosas de fluconazol a concentraciones de 6 ppm y 14 ppm. Posteriormente, 100 mL de cada concentración de fluconazol se pusieron en contacto con 20 mg o 50 mg de cada material adsorbente bajo agitación constante durante 1 h. Luego, la muestra se centrifugó a 4500 rpm por 15 minutos. Esta fase a alta velocidad fue esencial para inducir una sedimentación eficaz de las partículas de carbón activado, permitiendo así la separación entre la fase sólida y líquida de la muestra.

Posteriormente, la absorbancia se leyó a una $\lambda = 277$ nm y la cantidad de fluconazol no adsorbida se determinó por interpolación en curva



de calibración obtenida a concentraciones de fluconazol de 0.99 ppm, 1.98 ppm, 3.3 ppm, 4.6 ppm, y 5.9 ppm. La cantidad de fluconazol adsorbido se determinó con la ecuación 1.

Cantidad de fluconazol removido (%) =

$$\frac{(\text{Concentración solución fluconazol} - \text{Concentración fluconazol no adsorbida})}{\text{Concentración solución fluconazol}} \times 100$$

Efecto de la Fuerza Iónica en el Medio

Se prepararon soluciones de fluconazol a concentraciones de 6 ppm y 14 ppm en solución de NaCl a concentración de 0.1 M, 0.5 M y 1.0 M (Bian et. al, 2018). Posteriormente, 100 mL de cada concentración de fluconazol se pusieron en contacto con 20 mg o 50 mg de cada material adsorbente bajo agitación constante durante 1 h. Luego, la muestra se centrifugó a 4500 rpm por 15 minutos y su absorbancia se leyó a una $\lambda = 277$ nm. La cantidad de fluconazol no adsorbida se determinó por interpolación en curva de calibración y la cantidad removida se determinó con la ecuación 1.

Efecto del pH del Medio

Se prepararon soluciones de fluconazol a concentraciones de 6 ppm y 14 ppm en agua purificada con pH ajustado a 3.0 con H_3PO_4 y pH de 7.0, ajustado con NaOH (Alrowais et al, 2024). Posteriormente, 100 mL de cada concentración de fluconazol se pusieron en contacto con 20 mg y 50 mg de cada material adsorbente bajo agitación constante durante 1 h. Luego, la muestra se centrifugó a 4500 rpm por 15 minutos y su absorbancia se leyó a una $\lambda = 277$ nm. La cantidad de fluconazol no adsorbida se determinó por interpolación en curva de calibración y la cantidad removida se determinó con la ecuación 1.



Resultados y Discusión

Activación Química con Ácido Fosfórico

El material obtenido tras el proceso de activación química exhibió una estructura sólida, porosa y granular de color oscuro característico, sugiriendo una modificación significativa respecto al material inicial. Esta morfología única resalta la efectividad del proceso de activación química. Se logró obtener un peso de 8.1610 g de carbón activado con ácido fosfórico, lo que representa un rendimiento del 16.3%.

Activación Química con Cloruro de Calcio

Luego de aplicar el proceso de activación química utilizando Cloruro de Calcio (CaCl_2) como catalizador en cáscara de coco, se generó un producto sólido de carbono activado con una apariencia uniforme, textura más suave y coloración oscura. La masa final del carbón activado alcanzó los 5.0870 gramos, lo que corresponde a un rendimiento del proceso del 10.17%.

Caracterización Fisicoquímica

Método de Boehm

El análisis detallado de los resultados obtenidos mediante el método de Boehm presentados en la tabla 5.1 revelan diferencias significativas en la composición superficial de cada material adsorbente evaluado para la remoción de fluconazol del agua. Entre ellos, el carbón activado tratado con ácido fosfórico (H_3PO_4) destaca por su alta concentración de grupos carboxílicos y fenólicos en la superficie, con valores de $2,73 \pm 1,21$ mmol/g y $3,93 \pm 1,17$ mmol/g, respectivamente. Por otro lado, el carbón activado tratado con cloruro de calcio (CaCl_2) presenta una concentración comparativamente menor de grupos carboxílicos, fenólicos y, además, una presencia significativa de grupos lactónicos en la superficie, con valores de $2,67 \pm 0,42$ mmol/g, $3,30 \pm 0,76$ mmol/g y $1,23 \pm 0,40$ mmol/g, respectivamente.

Estos grupos funcionales, conocidos por su capacidad de formar enlaces de hidrógeno y participar en interacciones ácido-base,



potencian la afinidad del adsorbente hacia el fluconazol, facilitando su adsorción en soluciones acuosas (Patel et al., 2019). La presencia de grupos lactónicos en el carbón activado tratado con CaCl_2 , aunque en menor medida que los grupos carboxílicos y fenólicos, también puede contribuir a su capacidad de adsorción, al proporcionar sitios adicionales de interacción química con el fluconazol.

Esta riqueza en grupos carboxílicos y fenólicos en el carbón activado tratado con H_3PO_4 ($\text{CA-H}_3\text{PO}_4$) contrasta con otros adsorbentes evaluados, como la cáscara de coco, el carbón activado tratado con CaCl_2 (CA-CaCl_2) y el carbón comercial, que muestran concentraciones comparativamente más bajas de estos grupos funcionales. La ausencia de grupos básicos en todos los adsorbentes sugiere que las interacciones con el fluconazol se basan principalmente en enlaces de hidrógeno e interacciones ácido-base, enfatizando aún más la importancia de los grupos carboxílicos y fenólicos en el proceso de adsorción (Yang et al., 2019).

Tabla 5.1.

Contenido y caracterización de grupos funcionales superficiales presentes en las diferentes muestras tratadas.

Muestra	Grupos funcionales superficiales (mmol/g)				
	Carboxílicos	Lactónicos	Fenólicos	Básicos	Total
Cáscara de coco	2,13 ± 0,05	0	1,67 ± 0,61	0	3,80 ± 0,20
Carbón Activado (H_3PO_4)	2,73 ± 1,21	0	3,93 ± 1,17	0	6,67 ± 0,30
Carbón Activado (CaCl_2)	2,67 ± 0,42	1,23 ± 0,40	3,30 ± 0,76	0	7,20 ± 0,40
Carbón Comercial	1,13 ± 0,50	0	2,60 ± 1,40	0	2,67 ± 1,97

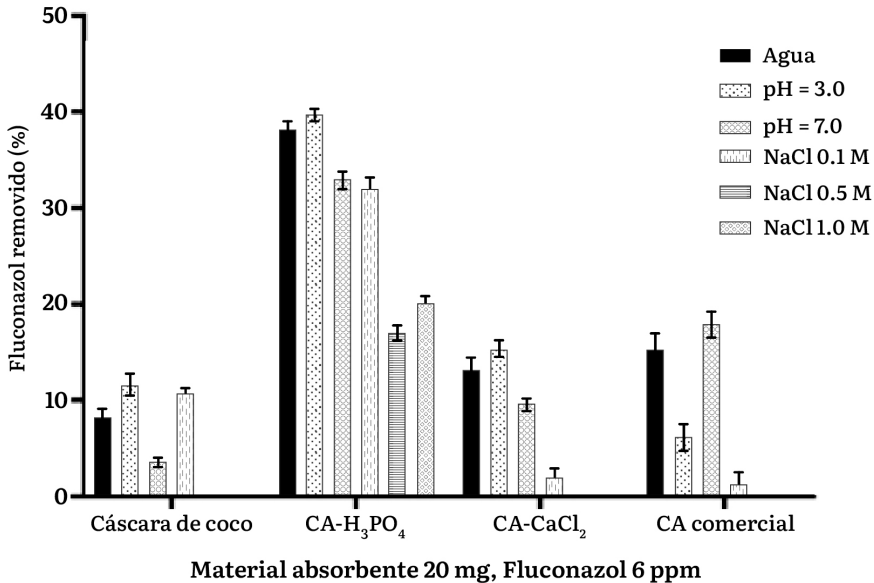


Estudios de Remoción de Fluconazol por Agentes Adsorbentes

Los resultados de los estudios de remoción se presentan en las figuras 5.1 a 5.4. La figura 5.1 presenta los resultados de remoción de fluconazol a 6 ppm empleando 20 mg de cada material adsorbente, se evidencia que la remoción de $CA-H_3PO_4 > CA \text{ comercial} > CA-CaCl_2 >$ cáscara de coco para el fluconazol. Con esto, se demuestra el efecto positivo de la modificación de la cáscara de coco con el tratamiento con ácido fosfórico.

Figura 5.1.

Evaluación de la adsorción de Fluconazol (6 ppm) con 20 mg de material adsorbente en diferentes condiciones de pH y fuerza iónica.



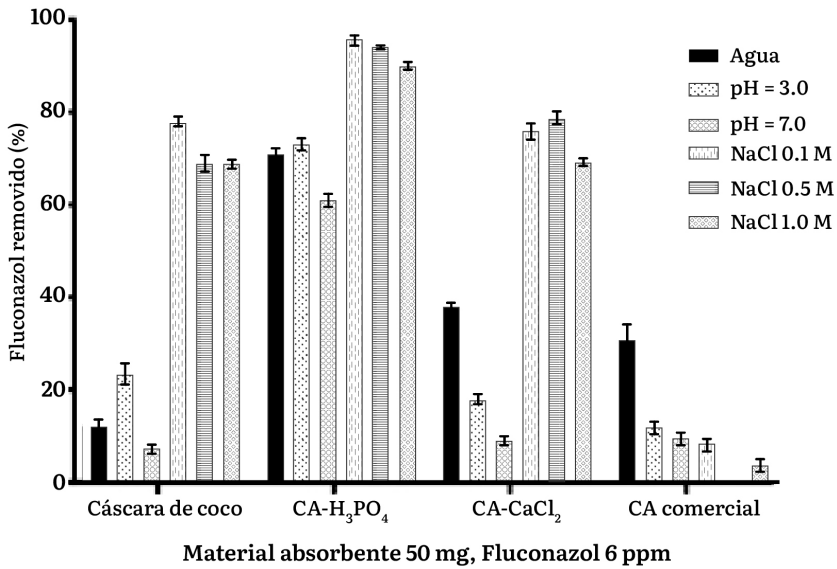
En la figura 5.2 se presentan los resultados de aumentar a 50 mg la cantidad de material adsorbente. Se observa una mejora en la capacidad de adsorción en todos los materiales evaluados. El $CA-H_3PO_4$ sigue demostrando la mayor capacidad de adsorción, manteniendo su efectividad en medios neutros y ligeramente ácidos. La cáscara de coco también muestra una adsorción significativa en pH 3.0, aunque su eficiencia disminuye en presencia de NaCl. La



mejora general en la capacidad de adsorción con 50 mg de material adsorbente se debe a la mayor disponibilidad de sitios activos para la adsorción. Además, la eficacia del carbón comercial es comparable a la del CA-CaCl₂, destacándose en medios neutros y ligeramente ácidos. Estos resultados subrayan la importancia de la cantidad de material adsorbente disponible para la remoción efectiva de fluconazol.

Figura 5.2.

Evaluación de la adsorción de Fluconazol (6 ppm) con 50 mg de material adsorbente en diferentes condiciones de pH y fuerza iónica.



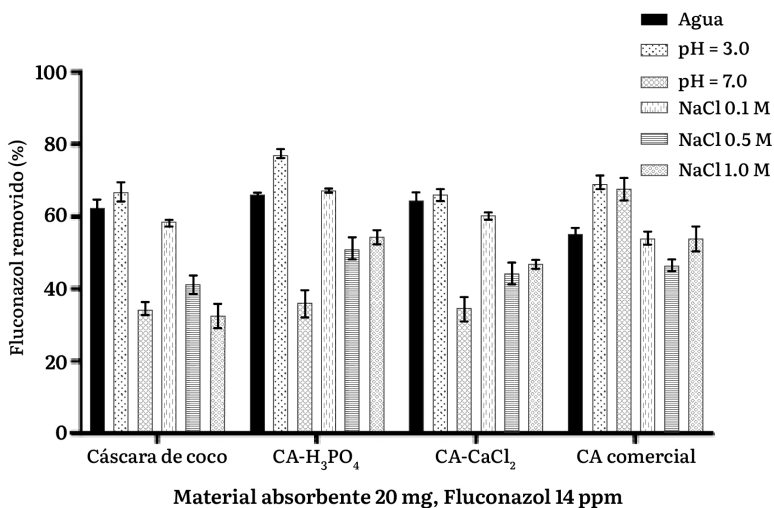
Por otra parte, la figura 5.3 presenta los resultados al aumentar la concentración de fluconazol a 14 ppm. El CA-H₃PO₄ sigue mostrando la mayor capacidad de adsorción, especialmente en condiciones neutras y ligeramente ácidas. La cáscara de coco y el CA-CaCl₂ exhiben una eficiencia menor, con una disminución notable en presencia de NaCl.

El carbón comercial mantiene una capacidad de adsorción consistente, aunque inferior a la del CA-H₃PO₄, destacándose en medios neutros y ligeramente ácidos. Estos resultados sugieren

que, aunque la concentración de fluconazol es más alta, los mismos factores que afectan la adsorción a concentraciones más bajas siguen siendo relevantes.

Figura 5.3.

Evaluación de la adsorción de Fluconazol (14 ppm) con 20 mg de material adsorbente en diferentes condiciones de pH y fuerza iónica.



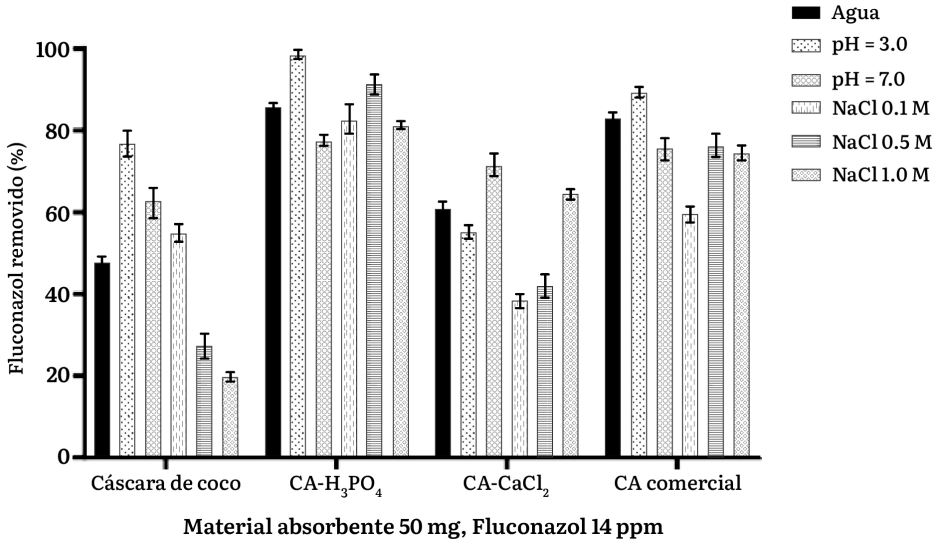
Al igual que en las concentraciones más bajas, el aumento de la cantidad de adsorbente a 50 mg como se presenta en la figura 5.4, mejora significativamente la capacidad de adsorción de fluconazol. El CA-H₃PO₄ sigue siendo el más eficiente, especialmente en condiciones ácidas y neutras, con una menor influencia negativa del NaCl en comparación con concentraciones de adsorbente más bajas. La cáscara de coco muestra una capacidad de adsorción notable en pH 3.0, pero su eficiencia disminuye en presencia de NaCl.

El CA-CaCl₂ y el carbón comercial también muestran una mejora en la adsorción con 50 mg de material adsorbente, aunque siguen siendo menos efectivos que el CA-H₃PO₄. Estos resultados refuerzan la importancia de la cantidad de adsorbente y la naturaleza de los grupos funcionales presentes en la superficie del adsorbente para la remoción efectiva de fluconazol.



Figura 5.4.

Evaluación de la adsorción de Fluconazol (14 ppm) con 50 mg de material adsorbente en diferentes condiciones de pH y fuerza iónica.



Efecto de la Cantidad de Fluconazol y de Agente Adsorbente

Las interacciones entre el material adsorbente y el fluconazol son cruciales en el proceso de adsorción. Estas interacciones pueden ser de naturaleza física o química, incluyendo interacciones de Van der Waals, enlaces de hidrógeno, interacciones ácido-base y formación de complejos. La composición química y la estructura superficial de cada adsorbente determinan estas interacciones y su capacidad de adsorción del fluconazol (Bernal, Giraldo & Moreno-Piraián, 2018). Las figuras 5.3 y 5.4 ilustran cómo diferentes materiales adsorbentes, como el carbón comercial y cáscara de coco, exhiben capacidades de adsorción distintas, enfatizando la importancia de seleccionar el adsorbente adecuado según su tratamiento y composición.

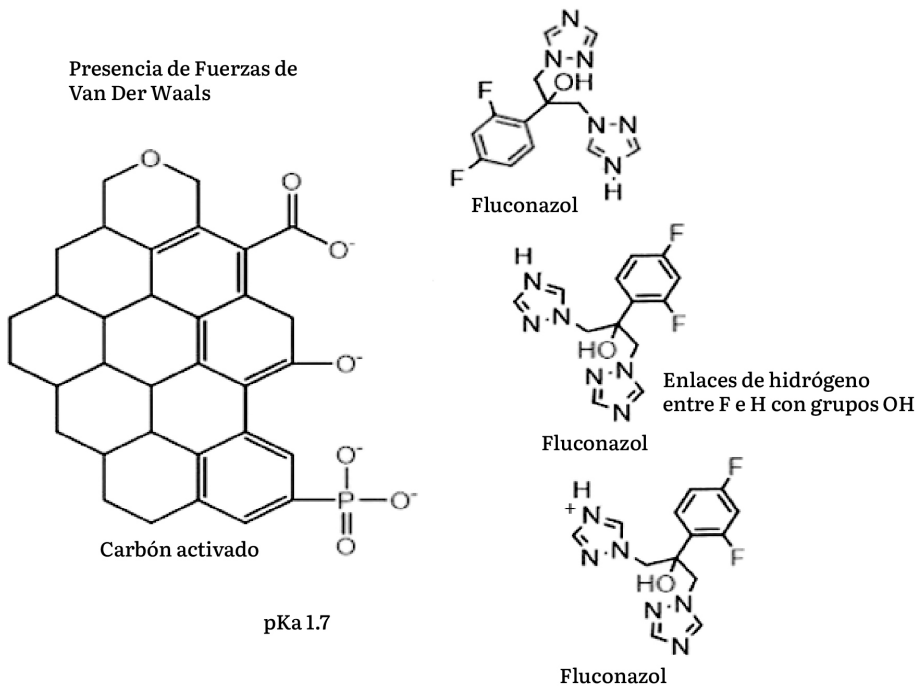
Las interacciones de Van der Waals pueden encontrarse entre las regiones hidrofóbicas que normalmente se encuentran en la superficie heterogénea de los materiales adsorbente y las regiones

apolares del fluconazol. Además, los enlaces de hidrógeno pueden generarse entre el F e H del grupo OH del fluconazol como se observa en la Figura 5.5.

La variabilidad en la capacidad de adsorción entre diferentes materiales adsorbentes, influida por su composición química y tratamiento previo, es significativa. Por ejemplo, el $CA-H_3PO_4$ exhibe una mayor capacidad de adsorción debido a la presencia de grupos carboxílicos y fenólicos en su superficie, intensificando su afinidad por el fluconazol, que es una base débil como se observa en la Figura 5.5.

Figura 5.5.

Representación de las interacciones entre los materiales adsorbentes activados y el fluconazol.



Estudios anteriores han explorado la remoción de fluconazol de aguas utilizando enfoques como carbón activado modificado, nanomateriales y procesos de oxidación avanzada. Este estudio



ofrece una perspectiva diferente al evaluar materiales adsorbentes más convencionales y económicos, como la cáscara de coco y el carbón activado tratados con diferentes agentes activantes. Esto resalta la diversidad de enfoques disponibles para la remoción de fluconazol y la importancia de seleccionar el método más adecuado según las condiciones específicas, considerando la disponibilidad de materiales, la viabilidad económica y la eficacia de remoción deseada. Mientras Sharma et al. investigaron nanopartículas de óxido de hierro, este trabajo se enfoca en materiales adsorbentes más tradicionales, ofreciendo un contraste en términos de escalabilidad, costos y facilidad de implementación práctica.

Efecto de la Fuerza Iónica en el Medio

La presencia de NaCl en el medio de adsorción compite con el fluconazol por los sitios de adsorción en los materiales, disminuyendo así su eficiencia de adsorción (Bernal, Giraldo & Moreno-Piraján, 2018). Este efecto se observa claramente en la figura 5.3, donde se muestra una disminución progresiva en la capacidad de adsorción con el incremento de la concentración de NaCl. Este fenómeno se debe a la competencia iónica que modifica la estructura de la doble capa eléctrica en la interfaz sólido-líquido, afectando la capacidad de los adsorbentes para interactuar con el contaminante. Es evidente que, para aplicaciones prácticas es necesario controlar la concentración de sales en el medio acuoso para mantener una alta eficiencia de adsorción.

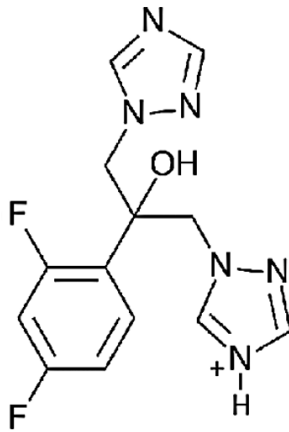
Efecto del pH del Medio

La variación del pH del medio influye notablemente en la carga superficial de los materiales adsorbentes y en la ionización del fluconazol, modificando la disponibilidad de grupos funcionales y su capacidad de interacción con el contaminante. El fluconazol al ser una base débil con un pKa de 1.7 (Dash & Elmquist, 2001), producto de la ionización del N-4 del anillo 1,2,4 triazolico como se observa en la figura 5.6, indica que en el rango de pH evaluado tiene una carga positiva que puede interactuar con las cargas negativas de los

diferentes grupos funcionales ácidos presentes en la superficie de los adsorbentes (Tangsathitkulchai et al., 2021). Las figuras 5.1 y 5.2 muestran cómo la capacidad de adsorción varía significativamente con el pH, destacando una mayor eficiencia de remoción en condiciones ligeramente alcalinas. Esta tendencia sugiere que la optimización del pH es crucial para maximizar la adsorción.

Figura 5.6.

Ionización del fluconazol.



Fuente: Liapatas, Kousoulos and Koupparis, 2015.

El carbón comercial, utilizado como referencia, mostró una capacidad de adsorción consistente y efectiva en medios neutros y ligeramente ácidos, aunque ligeramente inferior al CA-H₃PO₄. Su eficacia en la adsorción de fluconazol en condiciones estándar respalda su idoneidad para aplicaciones prácticas y permite una comparación directa con los materiales adsorbentes desarrollados en este estudio. Esta referencia es crucial para evaluar la competitividad de los nuevos adsorbentes en términos de eficiencia y costo.

Los ensayos realizados indican que las mejores condiciones para la remoción de fluconazol son aquellas que utilizan carbón activado tratado con H₃PO₄ en medios neutros y ligeramente ácidos. La cantidad de adsorbente es crucial, ya que mayores cantidades aumentan



significativamente la capacidad de adsorción. Sin embargo, la presencia de sales como NaCl puede reducir la eficacia de adsorción, por lo que es esencial considerar la composición del medio acuoso en aplicaciones prácticas (Chon & Tam, 2020).

Conclusiones

La investigación sobre la obtención de carbón activado a partir de cáscara de coco para la remoción de fluconazol en aguas ha producido hallazgos importantes y reveladores. En primer lugar, el carbón activado tratado con ácido fosfórico (H_3PO_4) se destacó por su notable eficiencia de adsorción, logrando un rendimiento del proceso del 16.3%. Esta alta eficacia se atribuye a la presencia de grupos funcionales ácidos, específicamente carboxílicos y fenólicos, en la superficie del carbón activado. Estos grupos funcionales son cruciales para la adsorción del fluconazol, otorgando a este material un alto potencial para la remoción del contaminante en condiciones específicas.

Por otro lado, la caracterización fisicoquímica de los adsorbentes mostró que el carbón activado tratado con cloruro de calcio ($CaCl_2$) presentó una capacidad de adsorción inferior, con un rendimiento del 10.17%. Este resultado resalta la influencia determinante del agente activante en las propiedades del adsorbente final. Aunque el carbón activado con $CaCl_2$ contenía grupos lactónicos que contribuyen a la adsorción, su impacto fue menor en comparación con los grupos carboxílicos y fenólicos presentes en el carbón activado con H_3PO_4 .

La fuerza iónica y el pH del medio afectan significativamente la capacidad de adsorción del fluconazol. En ambientes ácidos, la cáscara de coco mostró una adsorción significativa. Sin embargo, la presencia de altas concentraciones de NaCl redujo esta capacidad, indicando posibles interacciones competitivas o alteraciones en la estructura superficial del adsorbente. En contraste, el CA- H_3PO_4 mantuvo su eficacia en diversas condiciones de pH y fuerza iónica, evidenciando una mayor resistencia a las interferencias iónicas.



El carbón comercial, utilizado como referencia, demostró ser eficaz en medios neutros y ligeramente ácidos, respaldando su idoneidad para aplicaciones estándar de adsorción de contaminantes. La evaluación comparativa reveló que el carbón activado a partir de residuos de cáscara de coco, especialmente el tratado con H_3PO_4 , ofrece una competitividad significativa, destacándose como una alternativa sostenible y de bajo costo frente a los carbones comerciales.

En síntesis, los carbones activados obtenidos, especialmente el tratado con H_3PO_4 , se presentan como adsorbentes prometedores para la remoción de fluconazol en aguas contaminadas. Además, el uso de carbón activado derivado de residuos de cáscara de coco destaca su potencial como una alternativa sostenible y de bajo costo. La elección del agente activante y la consideración de las condiciones ambientales son factores críticos para maximizar la eficacia de la adsorción, subrayando la importancia de una evaluación detallada según las aplicaciones específicas prevista.

Referencias Bibliográficas

- Alrowais R, Abdel MM, Nasef BM, Said N (2024). Activated carbon fabricated from biomass for adsorption/bio-adsorption of 2,4-D and MCPA: Kinetics, isotherms, and artificial neural network modeling. *Sustainability*, 16(1): 299. <https://doi.org/10.3390/su16010299>
- Bernal V, Giraldo J, Moreno-Piraján J (2018). Adsorción de acetaminofén sobre carbones activados a diferente pH. Entalpía y entropía del proceso. *Edu.co*. Recuperado el 11 de mayo de 2024, de <https://revistas.unal.edu.co/index.php/rcolquim/article/view/68213/67429>
- Bian Y, Sun H, Luo Y, Gao Q, Li G, Wang Y (2018). Effect of inorganic salt ions on the adsorption of quinoline using coal power. *Water Science & Technology*, 78(3): 496-505. <https://doi.org/10.2166/wst.2018.300>



- Boehm HP (1994). Some aspects of the surface chemistry of carbon blacks and other carbons. *Carbon*, 32(5): 759-769. [https://doi.org/10.1016/0008-6223\(94\)90031-0](https://doi.org/10.1016/0008-6223(94)90031-0)
- Caban M & Stepnowski P (2021). How to decrease pharmaceuticals in the environment? A review. *Environmental Chemistry Letters*, 19: 3115–3138. <https://doi.org/10.1007/s10311-021-01194-y>
- Caicedo-Bejarano LD, Osorio-Vanegas LS, Ramírez-Castrillón M, Castillo JE, Martínez-Garay CA, Chávez-Vivas M (2023). Water Quality, Heavy Metals, and Antifungal Susceptibility to Fluconazole of Yeasts from Water Systems. *International Journal of Environmental Research and Public Health*. 20(4): 3428. <https://doi.org/10.3390/ijerph20043428>
- Cárdenas Parra LY, Perez Cárdenas JE (2020). Mecanismos de resistencia a fluconazol expresados por *Candida glabrata*: una situación para considerar en la terapéutica. *Investigación en Enfermería Imagen y Desarrollo*, 22. <https://doi.org/10.11144/javeriana.ie22.mrfe>.
- Chong MY, Tam YJ (2020). Bioremediation of dyes using coconut parts via adsorption: a review. *SN Applied Sciences*, 2:187. <https://doi.org/10.1007/s42452-020-1978-y>
- Correa ML, Velásquez J (2019). Optimización de la producción de carbón activado de cáscara de coco mediante steam explosion. <https://repository.upb.edu.co/handle/20.500.11912/7150>
- Dash AK, Elmquist WF (2001). Fluconazole. Analytical profiles of drug substances and excipients, 27: 67-113. [https://doi.org/10.1016/S1075-6280\(01\)27005-0](https://doi.org/10.1016/S1075-6280(01)27005-0)
- Freitas JV, Nogueira FGE, Farinas CS (2019). Coconut shell activated carbon as an alternative adsorbent of inhibitors from lignocellulosic biomass pretreatment. *Industrial Crops and Products*, 137: 16-23. <https://doi.org/10.1016/j.indcrop.2019.05.018>



González JF, Encinar JM, & Gutiérrez Ortiz FJ (2018). Activated carbons from lignocellulosic precursors: A review of the synthesis methods, characterization techniques and applications. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 82(Part1): 1393-1414. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2017.04.117>

Kumar DP, Ramesh D, Subramanian P, Karthikeyan S, Surendrakumar A (2022). Process optimization and synthesis of activated carbon from coconut shell using phosphoric acid. *Pollution Research*, 41(2): 735-738. <http://doi.org/10.53550/PR.2022.v41i02.047>

Lee S-H, Kim N, Park D. Insights into the Adsorption Performance of Emerging Contaminants on Granular Activated Carbon. *Separations*. 2023; 10(9):501. <https://doi.org/10.3390/separations10090501>

Liapatas G, Kousoulos C, Koupparis MA (2015). LC-Ion Trap-MS Method for the Determination of Fluconazole in Plasma for Bioequivalence Studies of Pharmaceutical Formulations Using Semi-Automated Sample Handling. *Journal of Liquid Chromatography & Related Technologies*, 38: 1808-1814. <https://doi.org/10.1080/10826076.2015.1113545>

Ofomata EC, Okonkwo NA, Iloameke I (2022). Production of activated carbon from coconut Shell using different chemicals and comparative analysis of the adsorption efficiencies. *Journal of Chemical Society of Nigeria*, 47(3): 641-650.

Onigemo MT, Balogun AA, Odeh LU, Udoh EA, Mohammed A, Omolusi AR, Ankomah NO, Akyea Mensah SB, Onele EJ, Akoh MD (2024). Production and Characterization of Activated Carbon from Coconut Shell for Adsorption of Lead (II) Ion from Waste Water, *Advance Journal of Chemistry B: Natural Products and Medical Chemistry*, 6: 266-280. <https://doi.org/10.48309/AJCB.2024.472061.1240>



- Patel M, Kumar R, Kishor K, Misna T, Pittman CU, Mohan D (2019). Pharmaceuticals of Emerging Concern in Aquatic Systems: Chemistry, Occurrence, Effects, and Removal Methods. *Chemical Reviews*, 119(6): 3510-3673. <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.8b00299>
- Shah JA, Butt TA, Mirza CR, Shaikh AJ, Khan MS, Arshad M, Riaz N, Haroon H, Gardazi SMH, Yaqoob K, et al (2020). Phosphoric Acid Activated Carbon from Melia azedarach Waste Sawdust for Adsorptive Removal of Reactive Orange 16: Equilibrium Modelling and Thermodynamic Analysis. *Molecules*, 25(9): 2118. <https://doi.org/10.3390/molecules25092118>
- Sandoval-González A, Robles I, Pineda-Arellano CA, Martínez-Sánchez C (2022). Removal of anti-inflammatory drugs using activated carbon from agro-industrial origin: current advances in kinetics, isotherms, and thermodynamic studies. *Journal of the Iranian Chemical Society*, 19(10):4017-33. <https://doi.org/doi.org/10.1007/s13738-022-02588-7>
- Sasono SRA, Rois MF, Widiyastuti W, Nurtono T, Setyawan H (2023). Nanofiber-enrich dispersed activated carbon derived from coconutshell for supercapacitor material. *Results in Engineering*, 18:101070. <https://doi.org/doi.org/10.1016/j.rineng.2023.101070>
- Tangsathitkulchai C, Naksusuk S, Wongkoblaph A, Phadungbut P, Borisut P (2021). Equilibrium and Kinetics of CO₂ Adsorption by Coconut Shell Activated Carbon Impregnated with Sodium Hydroxide. *Processes*, 9(2):201. <https://doi.org/10.3390/pr9020201>
- Thangarajah, V, Wijesundara, W, Kumari A, Thilakarathna M (2020) Aqueous Lead Removal under Optimized Conditions Using Phosphoric Acid Activated Coconut Coir Activated Carbon. *American Journal of Analytical Chemistry*, 11: 389-405. <https://doi.org/10.4236/ajac.2020.1112031>.



Vargas MA, & Palacios JR (2017). Propuesta de clasificación de los procesos de oxidación avanzada (POA). *Revista Ambiental Agua, Aire y Suelo*, 1: 1-21.

Yang X, Wan Y, Zheng Y, He F, Yu Z, Huang J, Wang H, Ok YS, Jiang Y, Gao B (2019). Surface functional groups of carbon-based adsorbents and their roles in the removal of heavy metals from aqueous solutions: A critical review. *Chemical Engineering Journal*, 15: 366:608-621. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2019.02.119>

Zhang X, Yan S, Chen J, Tyagi RD, Li J (2020). Physical, chemical, and biological impact (hazard) of hospital wastewater on environment: presence of pharmaceuticals, pathogens, and antibiotic-resistance genes. *Current Developments in Biotechnology and Bioengineering*, 2020:79–102. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-819722-6.00003-1>

Listado de Figuras

Figura 2.1. Tratamiento del bagazo de caña de azúcar	37
Figura 2.2. Espectro infrarrojo del Bagazo inicial	40
Figura 2.3. Estructura química del Tinidazol.....	41
Figura 2.4. Espectro infrarrojo del TND.	41
Figura 2.5. Espectro infrarrojo del carbonizado #1.	42
Figura 2.6. Espectro infrarrojo del carbonizado #2.	43
Figura 2.7. Espectro infrarrojo del carbonizado #3.	43
Figura 2.8. Espectro infrarrojo del carbonizado #4.....	44
Figura 2.9. Espectro infrarrojo del carbonizado #5.	44
Figura 2.10. Espectro infrarrojo del carbonizado #6.....	45
Figura 2.11. Espectro infrarrojo del carbonizado #7.	45
Figura 2.12. Espectro infrarrojo del carbonizado #8.....	46
Figura 2.13. Espectro infrarrojo del carbonizado #9.....	46
Figura 2.14. Resultados de la detección de Pseudomonas aeruginosa en los materiales Carbonizados activados.....	49
Figura 2.15. Resultados de la detección de Staphylococcus aureus en los materiales Carbonizados activados.....	50
Figura 2.16. Prueba de promoción de crecimiento. A) Pseudomonas aeruginosa en agar Cetrimida. B) Staphylococcus aureus en agar Manitol Salado.	51
Figura 3.1. Ruta metodológica para la preparación de carbón activado a partir de cáscaras de chontaduro.	62
Figura 3.2. Espectros FTIR-ATR de los carbones activados obtenidos	68
Figura 3.3. Resultados de la determinación del PZC para (A) CAA y (B) CAB.	71
Figura 3.4. Espectro UV y estructura del estándar de ibuprofeno en agua a pH ácido y pH básico.....	76
Figura 3.5. Resultados de remoción de ibuprofeno en medio acuoso a pH neutro a diferentes tiempos.....	77
Figura 3.6. Resultados de remoción de ibuprofeno a pH ácido y básico ...	78
Figura 4.1. Pretratamiento de las cáscaras de mango.....	98

Figura 4.2. Espectros infrarrojos de los materiales adsorbentes evaluados ...	102
Figura 4.3. Porcentajes de remoción de ketoconazol por parte de los materiales adsorbentes.	107
Figura 4.4. Representación de las interacciones entre los materiales adsorbentes activados y el ketoconazol.	108
Figura 5.1. Evaluación de la adsorción de Fluconazol (6 ppm) con 20 mg de material adsorbente en diferentes condiciones de pH y fuerza iónica.	128
Figura 5.2. Evaluación de la adsorción de Fluconazol (6 ppm) con 50 mg de material adsorbente en diferentes condiciones de pH y fuerza iónica.	129
Figura 5.3. Evaluación de la adsorción de Fluconazol (14 ppm) con 20 mg de material adsorbente en diferentes condiciones de pH y fuerza iónica.	130
Figura 5.4. Evaluación de la adsorción de Fluconazol (14 ppm) con 50 mg de material adsorbente en diferentes condiciones de pH y fuerza iónica.	131
Figura 5.5. Representación de las interacciones entre los materiales adsorbentes activados y el fluconazol.	132
Figura 5.6. Ionización del fluconazol.	134

List of Figures

Figure 2.1. Sugar cane bagasse treatment.....	37
Figure 2.2. Infrared spectrum of the initial Bagasse.....	40
Figure 2.3. Chemical structure of Tinidazole	41
Figure 2.4. Infrared spectrum of TND.....	41
Figure 2.5. Infrared spectrum of char #1	42
Figure 2.6. Infrared spectrum of char #2.....	43
Figure 2.7. Infrared spectrum of char #3	43
Figure 2.8. Infrared spectrum of char #4	44
Figure 2.9. Infrared spectrum of char #5.....	44
Figure 2.10. Infrared spectrum of char #6	45
Figure 2.11. Infrared spectrum of char #7.....	45
Figure 2.12. Infrared spectrum of char #8	46
Figure 2.13. Infrared spectrum of char #9	46
Figure 2.14. Detection results of <i>Pseudomonas aeruginosa</i> in activated char materials	49
Figure 2.15. Detection results of <i>Staphylococcus aureus</i> in activated char materials.....	50
Figure 2.16. Growth promotion test. A) <i>Pseudomonas aeruginosa</i> on Cetrimide agar. B) <i>Staphylococcus aureus</i> on Mannitol Salt agar	51
Figure 3.1. Methodological pathway for the preparation of activated carbon from chontaduro (peach palm) shells.....	62
Figure 3.2. FTIR-ATR spectra of the obtained activated carbons	68
Figure 3.3. PZC (Point of Zero Charge) determination results for (A) CAA and (B) CAB	71
Figure 3.4. UV spectrum and structure of the ibuprofen standard in water at acidic and basic pH	76
Figure 3.5. Results of ibuprofen removal in aqueous medium at neutral pH at different time intervals	77
Figure 3.6. Results of ibuprofen removal at acidic and basic pH.....	78
Figure 4.1. Pretreatment of mango peels	98

Figure 4.2. Infrared spectra of the evaluated adsorbent materials	102
Figure 4.3. Ketoconazole removal percentages by the adsorbent materials.....	107
Figure 4.4. Representation of interactions between activated adsorbent materials and ketoconazole.....	108
Figure 5.1. Evaluation of Fluconazole adsorption (6 ppm) with 20 mg of adsorbent material under different pH and ionic strength conditions.....	128
Figure 5.2. Evaluation of Fluconazole adsorption (6 ppm) with 50 mg of adsorbent material under different pH and ionic strength conditions.....	129
Figure 5.3. Evaluation of Fluconazole adsorption (14 ppm) with 20 mg of adsorbent material under different pH and ionic strength conditions.....	130
Figure 5.4. Evaluation of Fluconazole adsorption (14 ppm) with 50 mg of adsorbent material under different pH and ionic strength conditions.....	131
Figure 5.5. Representation of interactions between activated adsorbent materials and fluconazole	132
Figure 5.6. Ionization of fluconazole	134

Listado de Tablas

Tabla 1. Clasificación de los contaminantes emergentes	20
Tabla 2.1. Condiciones de obtención de los materiales.....	38
Tabla 2.2. Resultados de remoción de TND por parte de los diferentes materiales adsorbentes.....	48
Tabla 2.3. Resultados de los análisis microbiológicos.	49
Tabla 3.1. Datos obtenidos de densidad asentada para las muestras.	70
Tabla 3.2. Resultados de la determinación de grupos funcionales superficiales mediante titulación de Bohem.....	73
Tabla 3.3. Capacidad de remoción de ibuprofeno a diferentes valores de pH.....	78
Tabla 4.1. Rendimientos del proceso de activación física y química de las cáscaras de mango	99
Tabla 4.2. Resultados de la titulación de Boehm.....	100
Tabla 4.3. Resultados de los ensayos de remoción de ketoconazol	106
Tabla 5.1. Contenido y caracterización de grupos funcionales superficiales presentes en las diferentes muestras tratadas	127

List of Tables

Table 1. Classification of emerging pollutants.....	20
Table 2.1. Conditions for obtaining the materials	38
Table 2.2. TND removal results by the different adsorbent materials.....	48
Table 2.3. Microbiological analysis results.....	49
Table 3.1. Tap density data obtained for the samples.....	70
Table 3.2. Results of surface functional group determination via Boehm titration.....	73
Table 3.3. Ibuprofen removal capacity at different pH values	78
Table 4.1. Yields of the physical and chemical activation process of mango peels	99
Table 4.2. Boehm titration results	100
Table 4.3. Ketoconazole removal assay results.....	106
Table 5.1. Content and characterization of surface functional groups present in the different treated samples.....	127



Acerca del Editor Científico

About the Scientific Editor

Yhors Alexander Ciro Monsalve

Editor científico y autor

© <https://orcid.org/0000-0003-4093-8696>

✉ yhors.ciro@usc.edu.co

Programa de Química Farmacéutica. Facultad de Ciencias Básicas.
Universidad Santiago de Cali. Campus Pampalinda.

Grupo de Investigación en Química y Biotecnología (QUIBIO).

Químico farmacéutico y PhD en Ciencias Farmacéuticas y Alimentarias de la Universidad de Antioquia, con experiencia investigativa en proyectos que buscan el aprovechamiento de subproductos agroindustriales y de camarones para la obtención de productos versátiles para la industria farmacéutica, cosmética y alimentaria. Además, he participado del diseño, desarrollo y control de calidad de formulaciones sólidas y semisólidas de liberación inmediata y modificada de uso farmacéutico y cosmético, entendiendo los fenómenos de compactación, compresibilidad y disminución de tensión superficial implicados en estos procesos.

Se desempeña actualmente como docente de dedicación exclusiva en la Universidad Santiago de Cali para el programa de Química Farmacéutica.



Acerca de los Autores

About the Authors

Melisa Andrea Walteros Ospina

© <https://orcid.org/0009-0008-5400-8100>

✉ melisa.walteros00@usc.edu.co

Programa de Microbiología. Facultad de Ciencias Básicas. Universidad Santiago de Cali. Campus Pampalinda.

Grupo de Investigación en Química y Biotecnología (QUIBIO).

Microbióloga de la Universidad Santiago de Cali. Su formación y experiencia se orientan al área de la microbiología aplicada, con énfasis en el análisis y control microbiológico en alimentos, aguas y productos cosméticos.

Su trabajo se enfoca en la evaluación de la calidad microbiológica, el control de microorganismos y la aplicación de métodos de análisis para garantizar la inocuidad y seguridad de diferentes productos de interés sanitario. Ha desarrollado actividades relacionadas con el estudio y monitoreo de microorganismos en matrices alimentarias, ambientales y cosméticas.

Betty Eliana García Becerra

© <https://orcid.org/0009-0006-5934-7537>

✉ betty.garcia00@usc.edu.co

Programa de Química Farmacéutica. Facultad de Ciencias Básicas. Universidad Santiago de Cali. Campus Pampalinda.

Grupo de Investigación en Química y Biotecnología (QUIBIO).

Tecnóloga Química de la Universidad del Valle y Química Farmacéutica de la Universidad Santiago de Cali. Cuenta con nueve años de experiencia en la industria farmacéutica, desempeñándose



en el área de control de calidad. Actualmente trabaja como analista química, con experiencia en análisis fisicoquímicos y técnicas cromatográficas, aplicadas al aseguramiento y control de la calidad de productos farmacéuticos.

Marylin Urbano Montero

© <https://orcid.org/0009-0009-3922-3299>

✉ marylin.urbanoo0@usc.edu.co

Programa de Química Farmacéutica. Facultad de Ciencias Básicas. Universidad Santiago de Cali. Campus Pampalinda.

Grupo de Investigación en Química y Biotecnología (QUIBIO).

Química Farmacéutica y Regente de Farmacia de la Universidad Santiago de Cali, con más de 13 años de experiencia en el sector farmacéutico, en el ámbito administrativo- asistencial de los servicios farmacéuticos. Su ejercicio profesional se ha orientado al fortalecimiento de los procesos relacionados con la gestión, manejo y uso seguro de medicamentos y dispositivos médicos, en concordancia con los principios de calidad y cumplimiento de la normatividad sanitaria. Cuenta con experiencia en control de calidad, elaboración de informes técnicos, auditorías y cumplimiento regulatorio, así como en coordinación de equipos y optimización de los servicios farmacéuticos, con énfasis en la atención farmacéutica y el mejoramiento continuo de los procesos asistenciales.

Kevin Andrés Orozco

© <https://orcid.org/0009-0003-2703-8017>

✉ kevin.orozco01@usc.edu.co

Programa de Química Farmacéutica. Facultad de Ciencias Básicas. Universidad Santiago de Cali. Campus Pampalinda.

Grupo de Investigación en Química y Biotecnología (QUIBIO).



Químico farmacéutico egresado de la Universidad Santiago de Cali. Cuenta con experiencia en el ámbito hospitalario y en la gestión del servicio farmacéutico, con énfasis en farmacovigilancia, seguridad del paciente y manejo de medicamentos de control especial. Durante cerca de dos años y medio se desempeñó en la Clínica San Fernando en la ciudad de Cali, participando en procesos relacionados con farmacovigilancia, reactivo-vigilancia y fortalecimiento de los procesos del servicio farmacéutico. Actualmente se encuentra vinculado al Hospital Santa Margarita y trabaja en el fortalecimiento y gestión de servicios farmacéuticos en el ámbito comunitario y hospitalario. Sus áreas de interés incluyen la gestión del servicio farmacéutico, farmacovigilancia y mejora continua en procesos asistenciales.

Alejandra Londoño Salamanca

© <https://orcid.org/0009-0001-1255-7274>

✉ alejandra.londono00@usc.edu.co

Programa de Química Farmacéutica. Facultad de Ciencias Básicas. Universidad Santiago de Cali. Campus Pampalinda.

Grupo de Investigación en Química y Biotecnología (QUIBIO)

Química Farmacéutica egresada de la universidad Santiago de Cali que cuenta con experiencia en farmacovigilancia, especialmente en el área oncológica, adquirida en la Clínica San Rafael de Popayán, donde participó en la evaluación integral de factores que garantizan la seguridad del paciente, desde la preparación y manejo de medicamentos hasta el análisis de características fisiológicas que influyen en la respuesta terapéutica y el riesgo asociado.

Cuenta con experiencia adicional en farmacovigilancia en instituciones de alta complejidad, fortaleciendo competencias en la detección, análisis y gestión de eventos adversos, así como en la implementación de estrategias orientadas al uso seguro de medicamentos.



Actualmente se desempeña en la Dirección Técnica del Hospital Luis Ablanque de la Plata, liderando acciones enfocadas en la mejora de la gestión farmacéutica, la optimización de procesos y el cumplimiento de estándares de calidad en el servicio farmacéutico.

Su enfoque profesional está orientado a la seguridad del paciente y la farmacoseguridad, con una visión integral que articula el ámbito hospitalario y la farmacia comunitaria, promoviendo el uso racional de medicamentos y la reducción de riesgos asociados a su utilización.

Laura Yineth Jara Sánchez

© <https://orcid.org/0009-0001-4369-2276>

✉ laura.jara04@usc.edu.co

Programa de Química Farmacéutica. Facultad de Ciencias Básicas. Universidad Santiago de Cali. Campus Pampalinda.

Grupo de Investigación en Química y Biotecnología (QUIBIO).

Química Farmacéutica egresada de la Universidad Santiago de Cali (2025). Durante mi formación académica desarrollé mi trabajo de investigación enfocado en la fabricación de carbón activado a partir de desechos agroindustriales para la remoción in vitro de fluconazol en agua, orientado a la búsqueda de alternativas sostenibles para el tratamiento de contaminantes farmacéuticos.

Actualmente me desempeño como Directora Comercial en el sector farmacéutico, donde enfoco mi labor en el fortalecimiento de la gestión documental, la optimización de procesos, contribuyendo al cumplimiento normativo y al fortalecimiento del servicio farmacéutico



Maria Alexandra Coral

© <https://orcid.org/0009-0006-4614-2735>

✉ maria.coral02@usc.edu.co

Programa de Química Farmacéutica. Facultad de Ciencias Básicas.
Universidad Santiago de Cali. Campus Pampalinda.

Grupo de Investigación en Química y Biotecnología (QUIBIO).

Química farmacéutica con formación en análisis de muestras químicas y experiencia profesional como analista químico, desempeñándose en el desarrollo de análisis cualitativos y cuantitativos de muestras y en el seguimiento de procesos analíticos orientados al aseguramiento de la calidad y la confiabilidad de los resultados.

Ha participado en procesos de investigación y en actividades relacionadas con el análisis de sistemas de tratamiento de agua y otras matrices, contribuyendo a la evaluación y control de parámetros fisicoquímicos. Actualmente cursa la Maestría en Investigación y Uso Racional del Medicamento, donde fortalece sus competencias en investigación científica y farmacoterapia, con interés en promover el uso seguro y adecuado de los medicamentos.



Pares Evaluadores

Peer Evaluators

Wilfred Fabian Rivera Martinez

Centro de Desarrollo Tecnológico Creativ. Popayán, Colombia
Investigador Asociado (I)

© <https://orcid.org/0000-0003-2888-7929>

Adriana Orejuela Upegui

Institución Universitaria Escuela Nacional del Deporte. Cali, Colombia
Investigador Junior (IJ)

© <https://orcid.org/0000-0002-2544-3567>

Angie Milena Cárdenas Silva

Fundación Hospital Infantil Los Ángeles. Pasto, Colombia
Investigador Junior (IJ)

© <https://orcid.org/0000-0002-6190-8341>

Rodrigo Andrés Sarria Villa

Universidad del Cauca. Popayán, Colombia
Investigador Junior (IJ)

© <https://orcid.org/0000-0003-1295-7865>

Anibal Vicente Arteaga Noriega

Corporación Universitaria Remington. Medellín, Colombia
Investigador Senior (IS)

© <https://orcid.org/0000-0002-6612-1169>

Pedro Antonio Calero Saa

Institución Universitaria Escuela Nacional del Deporte. Cali, Colombia
Investigador Asociado (I)

© <https://orcid.org/0000-0002-9978-7944>

Distribución y Comercialización

Distribution and Marketing

Universidad Santiago de Cali
Publicaciones / Editorial USC

Bloque 7 - Piso 5

Calle 5 No. 62 - 00

Tel: (57+) (602) 518 3000

Ext. 9130 - 9131 - 848

✉ editor@usc.edu.co

✉ publica@usc.edu.co

Cali, Valle del Cauca

Colombia

Diseño y Diagramación

Design and layout by

Juan Diego Tovar Cardenas

Universidad Santiago de Cali

✉ librosusc@usc.edu.co

Tel. 5183000 - Ext. 9130

Cel. 301 439 7925

Este libro fue diagramado utilizando
fuentes tipográficas Literata en el contenido
del texto y Open Sans para los títulos.

Impreso en el mes de abril.
Se imprimieron 50 ejemplares en los
Talleres de la Editorial Díké.

Bogotá-Colombia

Tel: (57+) 301 242 7399

dikesasgerencia@gmail.com

www.editorialdike.co

2026

Fue publicado por la Facultad de Ciencias Básicas
de la Universidad Santiago de Cali.