

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.

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 fotocatálisis, 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 Fisicoquímica 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.

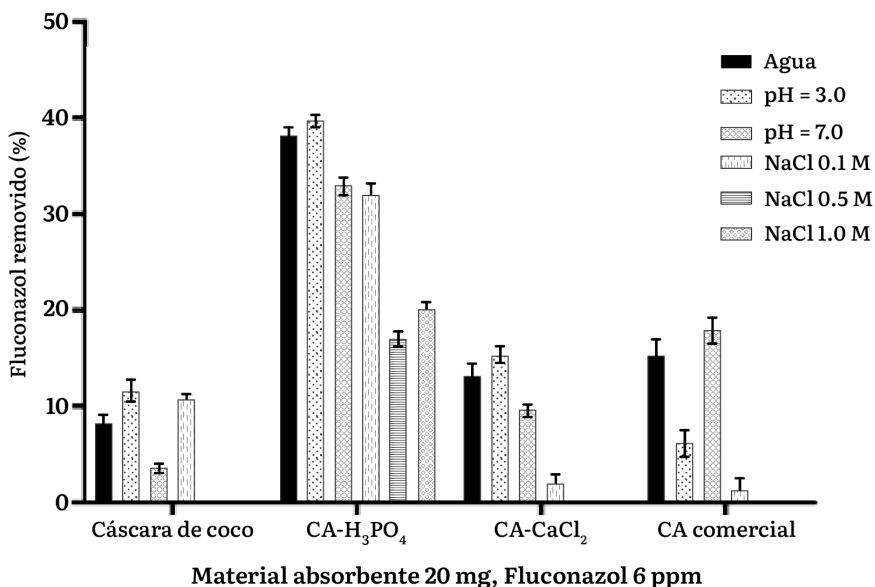
Muestra	Grupos funcionales superficiales (mmol/g)				
	Carboxílicos	Lactónicos	Fenólicos	Básicos	Total
Cáscara de coco	$2,13 \pm 0,05$	0	$1,67 \pm 0,61$	0	$3,80 \pm 0,20$
Carbón Activado (H_3PO_4)	$2,73 \pm 1,21$	0	$3,93 \pm 1,17$	0	$6,67 \pm 0,30$
Carbón Activado (CaCl_2)	$2,67 \pm 0,42$	$1,23 \pm 0,40$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

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 $\text{CA-H}_3\text{PO}_4 > \text{CA comercial} > \text{CA-CaCl}_2 > \text{cáscara de coco}$ 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.

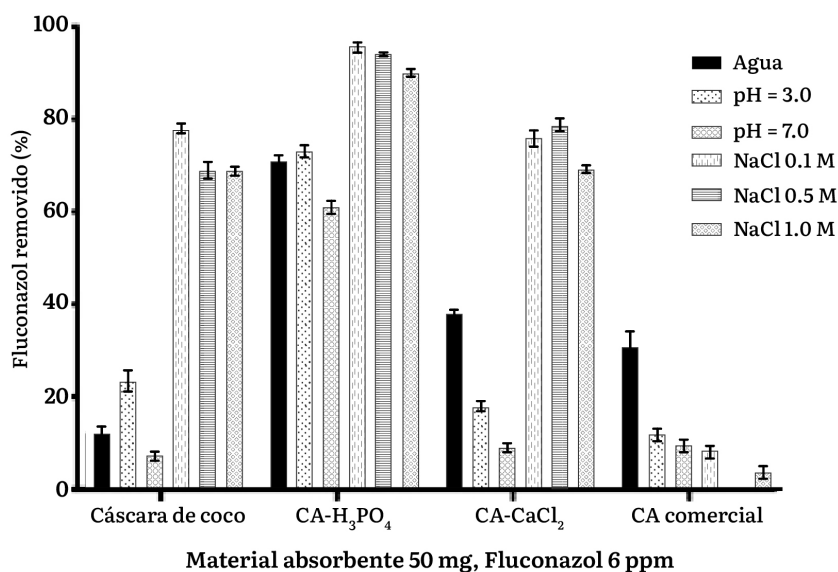


En la figura 5.2 se presentan los resultados de aumentar a 50 mg la cantidad de material adsorbente. Se observa una mejora en la capacidad de adsorción en todos los materiales evaluados. El $\text{CA-H}_3\text{PO}_4$ sigue demostrando la mayor capacidad de adsorción, manteniendo su efectividad en medios 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.



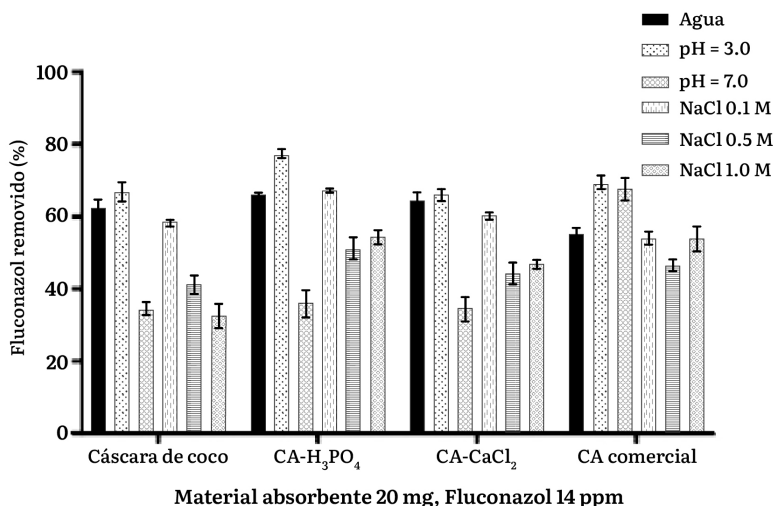
Por otra parte, la figura 5.3 presenta los resultados al aumentar la concentración de fluconazol a 14 ppm. El CA-H₃PO₄ sigue mostrando la mayor capacidad de adsorción, especialmente en condiciones neutras y ligeramente ácidas. La cáscara de coco y el CA-CaCl₂ exhiben una eficiencia menor, con una disminución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

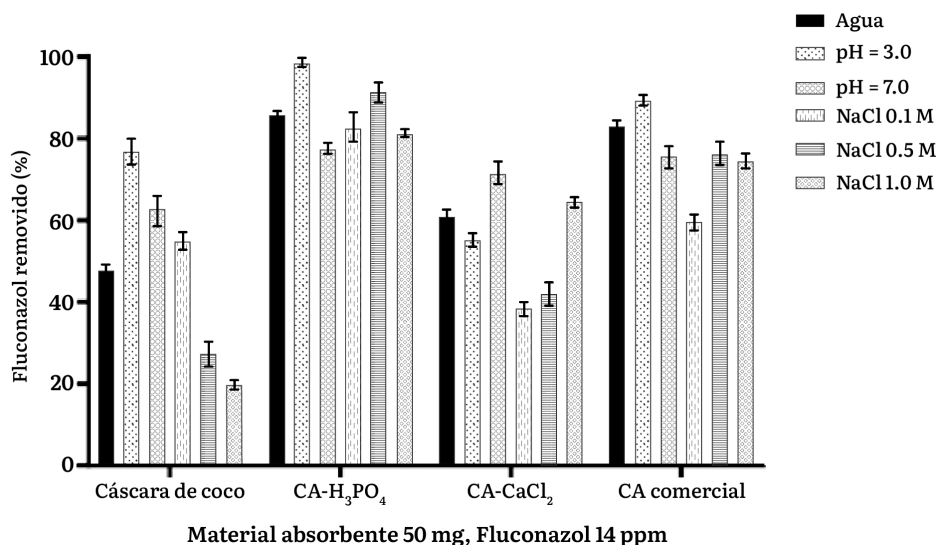


Al igual que en las concentraciones más bajas, el aumento de la cantidad de adsorbente a 50 mg como se presenta en la figura 5.4, mejora significativamente la capacidad de adsorción de fluconazol. El CA-H₃PO₄ sigue siendo el más eficiente, especialmente en condiciones ácidas y neutras, con una menor 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.

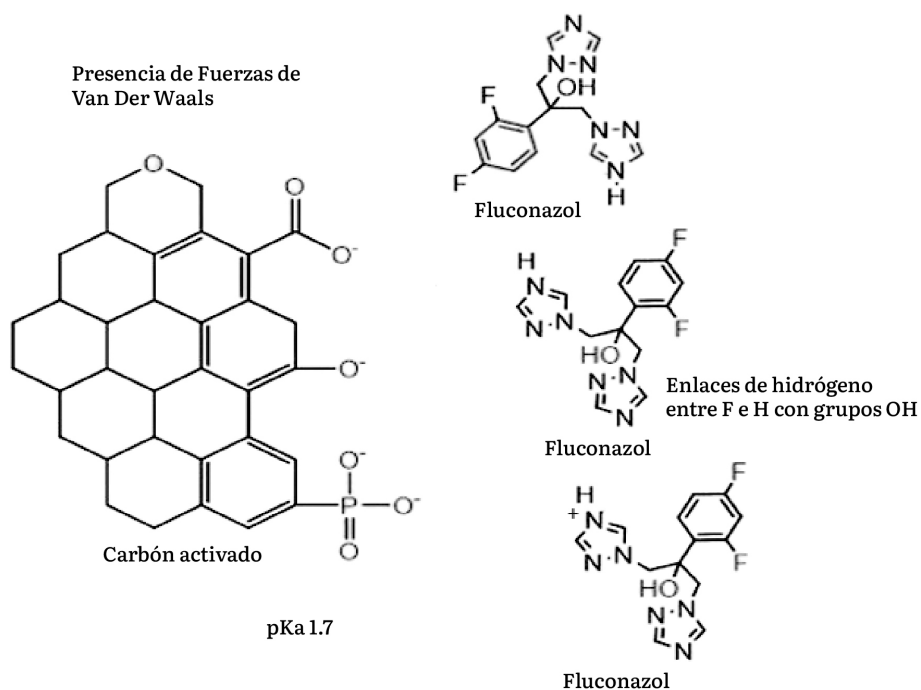
Las interacciones de Van der Waals pueden encontrarse entre las regiones hidrofóbicas que normalmente se encuentran en la superficie heterogénea de los materiales adsorbente y las regiones

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 $\text{CA-H}_3\text{PO}_4$ 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.

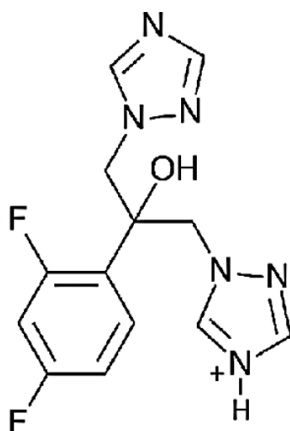
Efecto del pH del Medio

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 triazólico 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 (Tangsathikulchai 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 coconutshellforsupercapacitormaterial. *Results in Engineering*, 18:101070. <https://doi.org/doi.org/10.1016/j.rineng.2023.101070>
- Tangsathitkulchai C, Naksusuk S, Wongkoblap 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>