

## Interpretación de datos experimentales de velocidad de adsorción por modelos difusionales y cinéticos

G. D. Valdez-García, R. Leyva-Ramos\*, D. H. Carrales-Alvarado, D. E. Villela-Martínez, U. Ortiz-Ramos

Universidad Autónoma de San Luis Potosí, Facultad de Ciencias Químicas, Centro de Investigación y Estudios de Posgrado, Ave. Dr. Manuel Nava 6, Zona Universitaria, San Luis Potosí S.L.P. México, C.P. 28210.

rlr@uaslp.mx

Palabras clave: adsorción, interpretación, modelamiento, velocidad.

### Introducción

La cinética de adsorción analiza la velocidad con la cual un soluto se adsorbe sobre la superficie de un material y evalúa los mecanismos de transporte de masa que controlan la velocidad global de adsorción. La velocidad de adsorción depende de tres etapas, la primera etapa es el transporte externo de masa, en la cual el soluto es transportado desde el seno de la solución hasta la superficie externa del adsorbente, la segunda etapa es la difusión intraparticular dentro de los poros y, por último, la adsorción en un sitio activo [1]. La velocidad de adsorción se puede interpretar por medio de modelos difusionales y modelos cinéticos. Los modelos difusionales incorporan las tres etapas anteriores y emplean los parámetros de transporte de masa como la difusividad molecular, el coeficiente de transporte externo de masa y los coeficientes de difusión en el volumen del poro y difusión superficial. Por otro lado, los modelos cinéticos más comúnmente usados son los de pseudo primer orden (PFO), segundo orden (PSO) y orden n; también, se usan los modelos de Elovich y Bangham. La diferencia principal entre los modelos difusionales y los modelos cinéticos es que los modelos cinéticos consideran que el paso limitante de la velocidad global de adsorción es la reacción en el sitio activo de la superficie del adsorbente. En cambio, los modelos difusionales consideran que el transporte externo de masa y la difusión intraparticular juegan un papel primordial en el proceso de adsorción. El objetivo de este proyecto es interpretar los datos experimentales de la velocidad de adsorción de diferentes sistemas de adsorción en solución acuosa con los modelos difusionales y modelos cinéticos. Además, se evaluaron los parámetros de transporte externo de masa y los coeficientes de difusión superficial y en el volumen del poro. También, se analizó el efecto de la cantidad de datos experimentales empleados para la determinación de las constantes de los modelos cinéticos.

### Experimental

Los datos experimentales analizados fueron obtenidos previamente en el grupo de investigación de Ingeniería Química Ambiental de la UASLP. Los sistemas de adsorción estudiados fueron: Cd(II) sobre cuatro diferentes materiales (Fibra de Carbón Activado FCA, Bentonita, Sepiolita y Vermiculita), Tetraciclina sobre Bentonita, Piridina sobre Carbón Activado Granular, Fenol sobre Organoarcilla, Se(IV) sobre Carbón Activado y Ampicilina sobre FCA. La interpretación de dichos sistemas se realizó por el modelo de difusión en el volumen de los poros (MDVP) y los modelos cinéticos de PFO, PSO, Orden n, Elovich y Bangham. El modelamiento de los datos experimentales de cada sistema se llevó a cabo por un método de optimización basado en un método de mínimos cuadrados utilizando los softwares STATISTICA 12 y COMSOL Multiphysics 4.3.

### Resultados y discusión

A continuación, se describen solamente los resultados obtenidos para el sistema de Cd(II) sobre FCA. La interpretación de los datos de velocidad de adsorción de este sistema reveló que tanto el modelo difusional (MDVP) como los modelos de PFO, PSO y Orden n, interpretaron satisfactoriamente los datos experimentales de la velocidad de adsorción, debido a que presentaron porcentajes de desviación menores al 8.7 %. A manera de ejemplo, en la Figura 1 se presentan los resultados obtenidos para el experimento No. 3E de Cd(II) sobre FCA. En general, de los 5 experimentos de este sistema de adsorción, el modelo MDVP presentó los menores porcentajes de desviación en un intervalo de 1.2 a 5.6 %. La interpretación de los datos empleando el MDVP reveló que la velocidad de adsorción de Cd(II) en FCA es controlada por difusión intraparticular debido exclusivamente a la difusión del catión metálico en el volumen de los poros de la FCA. Además, los resultados de esta interpretación mostraron que la difusión intrafibra del Cd(II) es restringida considerablemente por efectos de exclusión, fricción y obstrucción. En el caso de la interpretación de este sistema de adsorción por modelos cinéticos, el modelo cinético que interpretó mejor los datos experimentales fue el modelo de orden n al presentar menor porcentaje de desviación 3.9 %, sin embargo, los valores de n variaron en un intervalo de 1.5 a 2.7, por lo que el modelo de PSO también presentó una interpretación adecuada de los datos con un porcentaje de desviación de 6 %. Los modelos de Elovich y Bangham presentaron mayores porcentajes de desviación, 3.8 – 21.6 % y 5.3 – 39 %, respectivamente, lo cual se atribuye a que los modelos de Elovich y Bangham sobreestimaron el equilibrio de adsorción experimental. Por otro lado, al evaluar el efecto de la variación de la cantidad adsorbida sobre las constantes cinéticas de primero y segundo orden, se observó que el valor de las constantes varió significativamente sin tendencia clara y se observó un comportamiento similar al disminuir la cantidad de datos experimentales empleados para la interpretación.

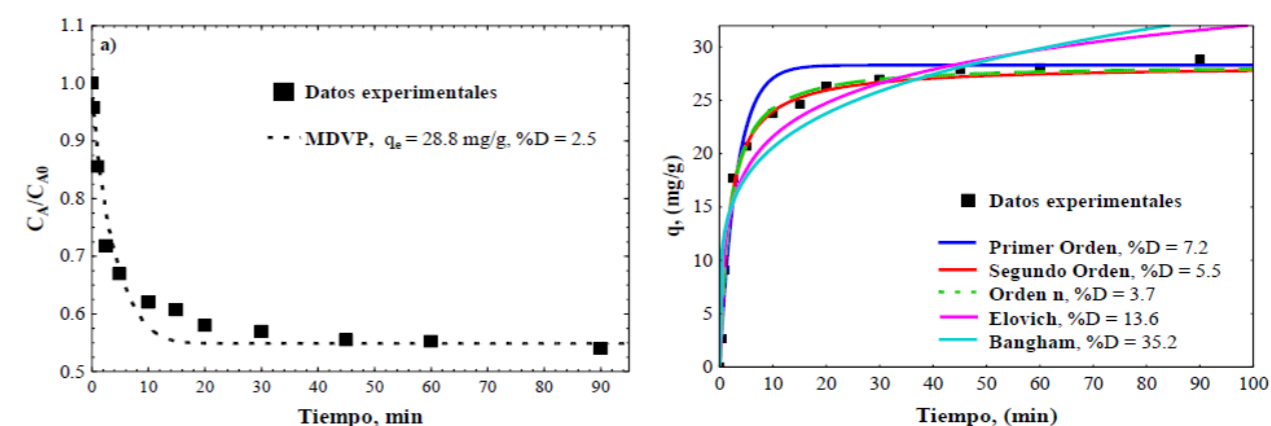


Figura 1. Interpretación de la velocidad de adsorción de Cd(II) sobre FCA por el modelo MDVP (a) y por modelos cinéticos (b).

### Conclusiones

De acuerdo con los resultados obtenidos, se concluye que tanto los modelos cinéticos como los modelos difusionales predicen un comportamiento matemático similar de los datos cinéticos experimentales para ciertos intervalos de tiempo y cantidad adsorbida; sin embargo, los modelos cinéticos son modelos empíricos y carecen de significados físicos específicos. Por lo que, es imposible investigar los mecanismos de transferencia de masa mediante estos modelos, debido que las consideraciones son limitadas para comprender la naturaleza del proceso cinético de adsorción. Además, es de gran importancia emplear una cantidad de datos experimentales suficientes, en especial los datos en la zona de decaimiento drástico de concentración, para obtener valores confiables de los diferentes parámetros.

### Referencias

- [1] Leyva-Ramos, R., Ocampo-Pérez, R., Flores-Cano, J. V., Padilla-Ortega, E., Comparison between diffusional and first-order kinetic model, and modeling the adsorption kinetics of pyridine onto granular activated carbon. *Desalination and Water Treat.*, 2015; 55: 637-646.