

ESTUDIO TEORICO-EXPERIMENTAL DEL EFECTO DEL PH Y LA FUERZA IONICA PARA LA ADSORCIÓN DE PARACETAMOL EN SÍLICA

THEORETICAL-EXPERIMENTAL STUDY OF THE EFFECT OF PH AND IONIC STRENGTH FOR THE ADSORPTION OF PARACETAMOL IN SILICA

Andres Díaz Compañ^{a,b}, Gabriel Roman^{a,c}, Emilia Nosedá Grau^{a,c}, Agustín Spaltro^d,
Matías Pila^e, Diego Colasurdo^e, Sandra Simonetti^{a,c} y Danila Ruiz^e

^aUniversidad Tecnológica Nacional (UTN), 11 de Abril 461, B8000LMI - Bahía Blanca, Argentina.

^bComisión de Investigaciones Científicas (CIC), Calle 526 e/10 y 11, 1900 – La Plata, Argentina.

^cInstituto de Física del Sur (IFISUR), Departamento de Física, Universidad Nacional del Sur (UNS),
CONICET, Av. L. N. Alem 1253, B8000CPB - Bahía Blanca, Argentina.

^dCEQUINOR (CONICET-CCT La Plata, UNLP), Bvd. 120 N° 1465, 1900 La Plata, Argentina

^eCEDECOR (UNLP-CICBA), CONICET, Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas,
Universidad Nacional de La Plata, 47 y 115, 1900 La Plata, Argentina

e-mail: ssimonet@uns.edu.ar

Palabras clave: Paracetamol, sílica, adsorción, DFT.

Resumen. En este trabajo estudiamos la adsorción de la droga paracetamol en medios ácido, neutro y básico, en un adsorbente comercial de sílica gel. Se obtienen las isothermas de equilibrio para el paracetamol y se discuten los resultados en relación con las propiedades fisicoquímicas del adsorbente y con las propiedades de la solución, como el pH y la fuerza iónica. En general, el modelo Langmuir proporciona el mejor ajuste para los datos de adsorción. La eficiencia de eliminación fue considerable para el gel de sílica. La cinética de adsorción sigue un modelo de pseudo segundo orden con un coeficiente de correlación (R^2) de 0.99. Los cálculos basados en la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT) proporcionan detalles atomísticos que complementan los estudios realizados.

Keywords: Paracetamol, silica, adsorption, DFT.

Abstract. In this work we study the adsorption of the drug paracetamol in acidic, neutral and basic media, in a commercial silica gel adsorbent. Equilibrium isotherms for paracetamol are obtained and the results are discussed in relation to the physicochemical properties of the adsorbent and to the properties of the solution, such as pH and ionic strength. In general, the Langmuir model provides the best fit to the adsorption data. The removal efficiency was considerable for silica gel. The adsorption kinetics follow a pseudo-second-order model with a correlation coefficient (R^2) of 0.99. Calculations based on Density Functional Theory (DFT) provide atomistic details that complement the studies.

1 INTRODUCCIÓN

Los contaminantes emergentes, como los residuos de medicamentos, productos farmacéuticos, veterinarios, cuidado personal, aditivos alimentarios, pesticidas y otros contaminantes se encuentran en aguas residuales, ríos y otras corrientes superficiales. En los últimos años, el desarrollo de métodos de análisis nuevos y más sensibles ha alertado la presencia de contaminantes emergentes en el agua. Su eliminación se ha convertido en una de las mayores preocupaciones ambientales, debido al impacto que tienen en la salud humana y los efectos nocivos que generan en la naturaleza (Lapworth D. J. et. 2012). Estos contaminantes llegan al medio ambiente a través de aguas residuales domésticas e industriales, desechos de plantas de tratamiento, efluentes hospitalarios, etc. Los contaminantes emergentes generalmente no son biodegradables y, a menudo, no se eliminan con los tratamientos convencionales de aguas residuales. Cuando los procesos de purificación no logran eliminar la cantidad de contaminantes, llegan a lagos, ríos y, a veces, a redes de agua potable.

Entre estos tipos de contaminantes, el paracetamol (N- (4-hidroxifenil) acetamida) es uno de los analgésicos y antipiréticos más utilizados en todo el mundo. Este fármaco se acumula fácilmente en el medio acuático. Debido a su alta solubilidad e hidrofilia, se ha detectado en aguas superficiales, aguas residuales y agua potable en todo el mundo (Birch G.F.et. al. 2015; Oulton R.L. et. 2010).

El objetivo de este trabajo es determinar experimentalmente la influencia de la fuerza iónica, el pH y la composición química de la superficie del adsorbente en la adsorción de paracetamol de una solución acuosa. Se utiliza para el estudio experimental un gel de sílica comercial. El efecto de la fuerza iónica y el pH inicial en la capacidad de adsorción del compuesto se determina a partir de las isothermas de adsorción. Además, se estudian utilizando cálculos DFT las interacciones entre el grupo aromático y la sílica durante el proceso de adsorción, a través del análisis de las propiedades electrónicas como la densidad de estados y la densidad de carga.

2 MATERIALES Y MÉTODOS

El paracetamol fue suministrado por Sigma-Aldrich con un grado analítico de pureza superior al 99%. La Tabla 1 muestra las propiedades fisicoquímicas relevantes. Se utilizó sílica Grace Davison grado 62, malla 60 x 200. El área de superficie específica del adsorbente se examinó mediante isothermas de adsorción de N₂ aplicando el método BET.

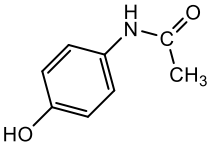
Paracetamol	Peso molecular (g mol ⁻¹)	pK _a	Solubilidad en agua 25°C (g L ⁻¹)
	151.163	9.4	13.85

Tabla 1: Estructura y propiedades fisicoquímicas del paracetamol

3 ISOTERMAS DE ADSORCIÓN

Las isothermas de adsorción de equilibrio para el paracetamol se llevaron a cabo a 25 °C. Los estudios de adsorción por lotes se realizaron agregando 10 mg de material adsorbente seco en matraces cónicos de 50 ml que contienen 30 ml de soluciones acuosas con diferentes concentraciones iniciales (5–40 mg L⁻¹) de paracetamol. Se investigó el efecto del pH de la solución sobre la adsorción de paracetamol regulando el pH a 3, 7 y 10.5, agregando soluciones

de HCl 0.1 M o NaOH 0.1 M (antes de la adición del adsorbente). Se utilizó agua desionizada en todos los experimentos y no se usaron soluciones tampón para evitar la posible formación de precipitados o la competencia con el soluto en el proceso de adsorción. Se investigó el efecto de la fuerza iónica sobre la adsorción usando NaCl 0.01, 0.50 y 1 M para preparar las soluciones de paracetamol y agregando una solución de HCl 0.1 M hasta alcanzar el pH=3.

En todos los casos, las muestras se agitaron durante 48 h, encontrando que el equilibrio de adsorción se logró dentro de este tiempo en todas las condiciones de operación experimentadas. Luego, las muestras se filtraron a través de un filtro de jeringa de nylon de 0,45 μm , y se tomaron 5 ml de extracto líquido de solución para el análisis UV/VIS. Las concentraciones iniciales y de equilibrio se determinaron en un espectrofotómetro de doble haz UV-vis (Shimadzu UV-1203) a 245 nm, donde el paracetamol tiene un máximo de adsorción. La curva de calibración se ajustó utilizando un análisis de regresión lineal. Cada experimento se realizó por triplicado.

Una isoterma de equilibrio expresa la relación entre la cantidad de adsorbato eliminado de la solución por unidad de masa de adsorbente, a temperatura constante, en equilibrio. La capacidad de adsorción de equilibrio, q_e (mg g^{-1}), se calculó de acuerdo con la Eq. 1:

$$q_e = \frac{(C_o - C_e)V}{W} \quad \text{Eq. 1}$$

donde C_o y C_e (mg L^{-1}) son las concentraciones de paracetamol en fase líquida en el tiempo inicial y de equilibrio, respectivamente, V es el volumen de la solución en litros y W es el peso del adsorbente en gramos. Para establecer las correlaciones más apropiadas para los datos de equilibrio experimentales, se probaron los dos modelos isotérmicos más comunes, Langmuir y Freundlich. El análisis de regresión lineal se utilizó para determinar la isoterma de mejor ajuste.

La ecuación de Langmuir es aplicable a procesos de adsorción homogéneos donde la superficie adsorbente es uniforme, es decir, todos los sitios de adsorción son equivalentes, no hay interacciones entre las especies adsorbidas y solo es posible la formación de una monocapa. La forma lineal de esta isoterma está representada por la Eq. 2:

$$\frac{C_e}{q_e} = \frac{1}{K_L q_m} + \frac{C_e}{q_m} \quad \text{Eq. 2}$$

donde q_e es la cantidad de paracetamol adsorbido en equilibrio (mg g^{-1}), C_e es la concentración del adsorbato en equilibrio (mg L^{-1}), K_L es constante de Langmuir relacionada con la capacidad de adsorción (mg g^{-1}), y q_m es la capacidad máxima de adsorción en la monocapa (mg g^{-1}). La gráfica de C_e/q_e versus C_e da una línea recta con una pendiente y una ordenada al origen de $1/q_m$ y $1/K_L q_m$, respectivamente.

La isoterma de Freundlich es un modelo empírico que no se limita a la cobertura de monocapa, sino que también describe la adsorción multicapa y contempla además superficies heterogéneas. La Eq. 3 representa la forma lineal de esta isoterma.

$$\ln q_e = \ln K_F + \frac{\ln C_e}{n} \quad \text{Eq. 3}$$

donde q_e es la cantidad de paracetamol adsorbido en equilibrio (mg g^{-1}), C_e es la concentración (mg L^{-1}) del adsorbato en equilibrio; K_F y n son las constantes de Freundlich que incorporan los factores que afectan la capacidad de adsorción y la intensidad de adsorción, respectivamente. Las gráficas de $\ln q_e$ versus $\ln C_e$ dan un gráfico lineal con una pendiente y

una ordenada al origen de $1/n$ y $\ln K_F$, respectivamente.

4 CINÉTICA DE ADSORCIÓN

Se preparó una solución madre de paracetamol de 40 ppm en NaCl 1 M para mantener una fuerza iónica constante. Se pesaron 15,0 mg de adsorbente en un matraz cónico y se añadieron 500,0 ml de la solución del adsorbato.

Los experimentos se llevaron a cabo en un baño termostático a 25°C con agitación orbital a 250 rpm. Se tomaron muestras en diferentes momentos utilizando filtros de jeringa de nylon con un diámetro de poro de 0,45 μ m. Las concentraciones se determinaron por espectrofotometría UV-visible. Todos los experimentos fueron realizados por triplicado.

Para determinar el modelo cinético de sorción para el paracetamol, se aplicaron los modelos de pseudo primer orden, pseudo segundo orden y Elovich, a los datos obtenidos del trabajo experimental. Las constantes cinéticas modelizadas y los valores de R^2 obtenidos se presentan en la Tabla 2.

Modelo	Forma linealizada
pseudo primer orden	$\ln(q_e - q_t) = \ln q_e - k_1 \cdot t$
Pseudo Segundo orden	$\frac{t}{q_t} = \frac{1}{k_2 \cdot (q_e)^2} + \frac{t}{q_e}$
Elovich	$q_t = \left(\frac{1}{\beta}\right) \ln(\alpha \beta) + \left(\frac{1}{\beta}\right) \ln t$

Tabla 2: Las expresiones matemáticas de los modelos de cinética de adsorción.

donde:

q_e es la capacidad de adsorción en equilibrio (mg g^{-1}).

q_t es la capacidad de adsorción en el tiempo t , (mg g^{-1}).

k_1 es la constante de velocidad de pseudo primer orden (min^{-1}).

k_2 es la constante de velocidad de pseudo segundo orden ($\text{g mg}^{-1} \text{min}^{-1}$).

α es la velocidad de quimisorción a cobertura cero ($\text{mg g}^{-1} \text{min}^{-1}$).

β es el alcance de la cobertura de la superficie y la energía de activación para la quimisorción (g mg^{-1}).

5 ESTUDIO COMPUTACIONAL

Como el pH de la solución puede ejercer una influencia significativa, también se realizó un estudio computacional para obtener más información sobre el proceso de adsorción. Se utilizó el software Gaussian 09 para realizar los cálculos teóricos. El modelo de las superficies $\text{SiO}_2(111)$ se obtuvo del bulk de la β -cristobalita, la superficie fue saturada con grupos hidroxilo (Si-OH) y optimizada. Las optimizaciones de geometría se realizaron utilizando el método DFT con el conjunto funcional B3LYP y 6-311G (d, p) (Frisch M.J. *et. al.* 2010). Se calcularon las cargas electrónicas y la Densidad de Estados (DOS) de la molécula de paracetamol adsorbida en el material de sílica. Se utilizaron las geometrías optimizadas para el análisis de los orbitales de frontera (FMO).

6 RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Las superficies de sílica generalmente están cubiertas con una capa de grupos silanoles y siloxano. No hay otros grupos funcionales presentes, por lo tanto, no se realizó una caracterización química.

El área de superficie específica del adsorbente es de $264 \text{ m}^2 \text{ g}^{-1}$ la cual se determinó mediante isotermas de adsorción de N_2 aplicando el método BET.

6. Experimentos de adsorción

El proceso de adsorción está influenciado por las interacciones electrostáticas entre el adsorbente y el adsorbato. Por lo tanto, las modificaciones de pH pueden generar cambios en la estructura del adsorbato y las propiedades fisicoquímicas del adsorbente.

6.1 Efecto de la fuerza iónica

La fuerza iónica es un factor importante en el estudio del equilibrio de la fase acuosa. Se obtuvieron isotermas con tres concentraciones diferentes de solución de NaCl: 0.01, 0.50 y 1.00 M. Todos los experimentos se realizaron a la misma temperatura (25°C), $\text{pH}=3$ y utilizando 15 mg de adsorbente en 30 ml de soluciones de paracetamol con concentraciones iniciales entre 5-40 mg L^{-1} . La Figura 1 muestra las isotermas de adsorción del paracetamol en la sílica a diferentes fuerzas iónicas (IS).

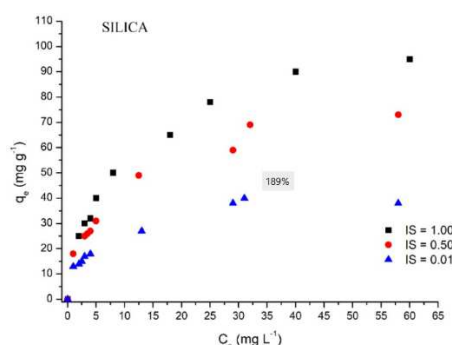


Figura 1: Isotermas de adsorción del paracetamol en la sílica a $\text{pH}=3$ y 25°C en presencia de NaCl.

El efecto de la modificación de la fuerza iónica es significativo. Cuanto mayor es la fuerza iónica, mayor es la cantidad de paracetamol adsorbido. La capacidad de adsorción se reduce de 95 a 73 mg g^{-1} (23%) al cambiar la fuerza iónica de 1M a 0.5M y se reduce a 38 mg g^{-1} (60% menos) al reducir la fuerza iónica a 0.01 M.

El aumento de la adsorción del paracetamol sobre este adsorbente con un aumento de la fuerza iónica también podría deberse a la disminución de la solubilidad del fármaco en solución salina, comúnmente llamado efecto salino. Los iones Na^+ y Cl^- de la disociación de NaCl en agua están fuertemente solvatados por las moléculas de agua, formando grandes esferas de hidratación. Estas moléculas de agua tendrán movilidad restringida y serán menos capaces de interactuar con las moléculas de paracetamol. Por lo tanto, la solubilidad del paracetamol en la solución disminuye y se favorece su difusión hacia la superficie adsorbente.

Al pH de trabajo, la sílica es neutra y los grupos silanol pueden interactuar con el paracetamol por medio de enlaces hidrógeno o formando un complejo donador-aceptor de electrones. No hay atracciones electrostáticas que favorezcan la adsorción. Al aumentar la fuerza iónica hubo un aumento de la capacidad de adsorción de sílica, debido al efecto salino.

6.2 Efecto del pH

Es bien sabido que el pH afecta el estado de ionización de un electrolito débil (este es el caso del paracetamol, con $pK_a \sim 9$). La Figura 2 muestra las isotermas de adsorción del paracetamol a diferentes valores de pH utilizando la sílica como adsorbente. En estos experimentos, la temperatura se mantuvo a 25 °C y la fuerza iónica se mantuvo constante mediante la adición de una solución de NaCl 1 M.

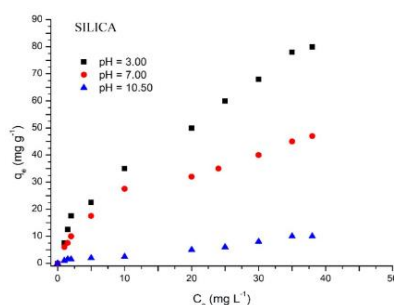


Figura 2: Isotermas de adsorción del paracetamol en la sílica a distintos valores de pH.

Los electrolitos débiles, como el paracetamol, pueden existir en forma ionizada (básica) y no ionizada (ácido) dependiendo del pH de la solución. El valor de pK_a del paracetamol es 9.3, por lo que se puede concluir que a $pH=3$ prevalece la forma ácida, mientras que a $pH=11$ predomina la forma básica. A $pH=7$, ambas formas coexisten en solución y pueden interactuar con la superficie del adsorbente. La interacción entre cada forma y la superficie del adsorbente puede favorecer o desfavorecer el proceso de adsorción dependiendo de la magnitud de las fuerzas de atracción o repulsión.

La isoterma de adsorción a $pH=3$ adaptada con los modelos de Freundlich y Langmuir se muestra en la Figura 3. Los parámetros característicos se presentan en la Tabla 3.

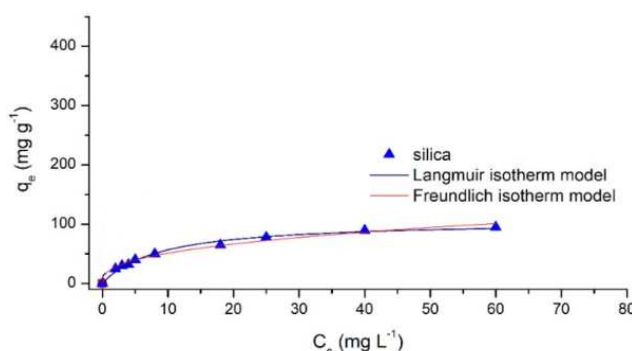


Figura 3: Isoterma de adsorción del paracetamol desde una solución acuosa a $pH=3$. Curvas representativas del ajuste de los datos para las ecuaciones de Freundlich y Langmuir.

Adsorbente	Freundlich	Langmuir
SILICA	K_F 21.33	q_{mcal} 106.4 mg g ⁻¹
	n 2.63	K_L 0.115
	R^2 0.984	R^2 0.999

Tabla 3: Resultados de la aplicación de las ecuaciones de Freundlich y Langmuir a la isoterma de adsorción del paracetamol a $pH=3$ y 25°C.

En todos los casos, el valor de q_{mcal} y el coeficiente R^2 muestran que el modelo de Langmuir es el que mejor se ajusta a los datos experimentales. El modelo de adsorción de Langmuir describe la adsorción en monocapa del adsorbato sobre una superficie adsorbente homogénea.

6.3 Cinética de la adsorción de paracetamol

Para cuantificar la cinética de adsorción del paracetamol en la sílica, se aplicaron dos modelos cinéticos. Como se señaló anteriormente, cada curva cinética se ensayó por triplicado. El análisis se llevó a cabo a 25 °C y utilizando el pH y la fuerza iónica con mayor capacidad de adsorción (pH=3 y fuerza iónica 1M).
La Tabla 4 muestra los parámetros obtenidos en los ajustes con su respectivo coeficiente de correlación.

MODELO CINÉTICO	SILICA
Pseudo-primer orden	k_1 0.0028 min ⁻¹
	q_e 53 mg g ⁻¹
	R ² 0.871
Pseudo-segundo orden	k_2 8.6 10 ⁻⁵
	q_e 80.7 mg g ⁻¹
	R ² 0.992
Elovich	α 1.71 mg g ⁻¹ min ⁻¹
	β 0.67 g mg ⁻¹
	R ² 0.969

Tabla 4: Parámetros del modelo cinético para la adsorción del paracetamol en la sílica.

Para los modelos cinéticos de Pseudo-primer orden y Elovich, los datos experimentales se desvían de la linealidad. Por lo tanto, el modelo de pseudo primer orden y el modelo de Elovich no son aplicables para el sistema actual. Por el contrario, el coeficiente de correlación y el valor q_e que se determinaron a partir del modelo de pseudo-segundo orden están en buen acuerdo con los datos experimentales. Esto indicaría que el paso limitante en el proceso de adsorción sería la transferencia de masa desde la solución a la superficie del adsorbente.

6.4 Estudio computacional

La estructura química optimizada del paracetamol adsorbido en la sílica se muestra en la Figura 4.

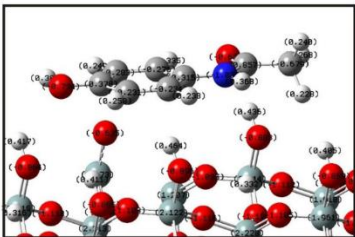


Figura 4: Vista lateral del paracetamol adsorbido en la sílica. Se indica la carga atómica.

El mapa de energía potencial electrostática muestra las distribuciones de carga en el paracetamol aislado y permite visualizar las regiones con carga diferente en la molécula. Se observa una gran densidad negativa alrededor de los grupos C=O y C-OH del paracetamol. Estas dos áreas están en oposición a la parte ligeramente positiva restante de la molécula. La adsorción de compuestos farmacéuticos de la fase acuosa se debe principalmente a las interacciones entre los grupos funcionales del fármaco y los grupos en la superficie del adsorbente. Por otro lado, el efecto del pH sobre las interacciones adsorbato-adsorbente y la distribución de carga en estos grupos tienen efectos significativos sobre la capacidad de adsorción. El conocimiento adicional sobre las distribuciones de carga puede ser útil para explicar cómo interactúa la molécula con la superficie del adsorbente. Para ello se considera la distribución de la densidad electrónica inicial en la molécula y se compara con su estructura electrónica después de la adsorción (ver Figura 5 y Tabla 5).

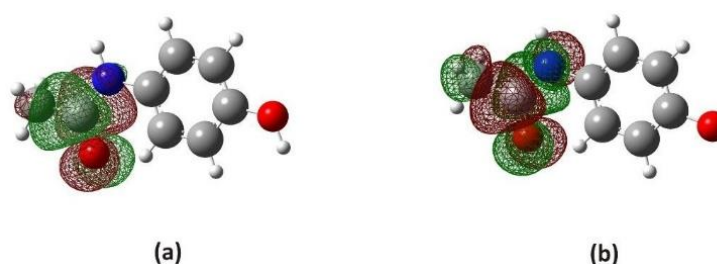


Figura 5: Orbitales HOMO y LUMO de las especies (a) neutra y (b) desprotonada, de la molécula de paracetamol.

Átomo	Paracetamol	
	<u>aislado</u>	<u>en sílica</u>
C	-0.2269	-0.2757
C	0.2131	0.3148
C	-0.2236	-0.2340
C	-0.2216	-0.2311
C	0.2114	0.3783
C	-0.2468	-0.2827
C	0.4830	0.8571
C	-0.7297	-0.6793
H	0.2605	0.2395
H	0.1994	0.2275
H	0.2256	0.2680
H	0.2018	0.3811
H	0.3190	0.3354
H	0.2519	0.2375
H	0.2521	0.2583
H	0.2721	0.2493
H	0.3586	0.3682
N	-0.6580	-1.0352
O	-0.5423	0.6312
O	-0.3997	-0.7336

Tabla 5: Carga parcial en los átomos de paracetamol aislado y adsorbido en la sílica.

Como podemos observar, todos los cambios son de pequeña magnitud, y esto concuerda con un proceso de adsorción de tipo físico. Por otro lado, se producen cambios importantes en los átomos de los grupos NH , C=O y C-OH de la molécula de paracetamol (Tabla 5). La formación de un complejo aceptor-donador de electrones es posible entre los grupos con pares de electrones libres, como los oxígenos del silanol en la sílica y los átomos electronegativos

(nitrógeno y oxígeno) en la molécula de paracetamol. A pH bajo y neutro, la molécula de paracetamol existe como especie neutra. La molécula neutra presenta baja densidad electrónica y se puede atribuir principalmente al grupo carbonilo (ver Fig. 5(a)). A valores de pH superiores a 10, predomina la forma aniónica de paracetamol. Las regiones con alta densidad electrónica se ubican en el grupo carbonilo y, además, en los grupos amina y metilo (ver Fig. 5 (b)). La interacción de las especies del paracetamol con la superficie sólida (ionizadas o no ionizadas) puede favorecer o desfavorecer el proceso de adsorción cuando prevalecen las fuerzas de atracción o repulsión, respectivamente, es decir, la disminución/aumento de la capacidad de adsorción puede estar relacionado con el mismo/diferente signo en la carga de las especies interactuantes. Cuando la adsorción ocurre a pH bajo/neutro, el adsorbente positivo/neutro puede atraer las cargas electrónicas más altas de la molécula de paracetamol neutral ubicada en los grupos -NH , -C=O y C-OH . Las cargas de paracetamol pueden ser débilmente atraídas por los grupos superficiales de silanol a través de la adsorción física.

Las energías de adsorción del paracetamol en sílica es de -1.85 eV, confirmando la naturaleza física de la interacción molécula-superficie. La molécula de paracetamol tiene dos grupos aceptores y donantes de protones que favorecen la formación de enlaces hidrógeno con la superficie de la sílica. Las distancias mínimas entre los átomos de oxígeno del paracetamol y los átomos de hidrógeno de la sílica (distancias O-H) son 2.44 Å y 2.81 Å, respectivamente. Por otro lado, la distancia mínima entre el átomo de nitrógeno del paracetamol y el átomo de hidrógeno de la sílica (distancia N-H) es de 2.94 Å. A un pH más alto, las interacciones entre la molécula y la sílica son mínimas debido a la repulsión entre el paracetamol con carga negativa y los silanoles desprotonados. En tal caso, la fisisorción es menos significativa en magnitud (-1.26 eV). Como se indicó anteriormente, el proceso de adsorción del paracetamol está estrictamente influenciado por las interacciones electrostáticas entre el adsorbente y el adsorbato. Por lo tanto, los cambios de pH en el medio pueden cambiar la estructura del adsorbato y las propiedades fisicoquímicas del adsorbente. En resumen, los mecanismos de adsorción del paracetamol sobre el gel de sílica corresponden a interacciones donador-aceptor de electrones y formación de enlaces hidrógeno.

7 CONCLUSIONES

Se analizó el efecto de la fuerza iónica y el pH sobre la capacidad de adsorción del paracetamol en la sílica, corroborando que la capacidad de adsorción del adsorbente está fuertemente influenciada por el pH y la fuerza iónica de la solución, obteniendo los mejores valores en condiciones ácidas ($\text{pH}=3$) y la fuerza iónica 1M . Los cambios se deben a la alteración de la química de la superficie de acuerdo con el pH de la solución acuosa.

Los cálculos DFT mostraron una buena correlación con los resultados experimentales, proporcionando detalles atomísticos a través del modelado molecular. Las cargas del paracetamol pueden ser débilmente atraídas por los grupos superficiales silanol de la sílica a través de la adsorción física. La adsorción sigue una cinética de pseudo segundo orden, y los datos de equilibrio pueden ajustarse utilizando el modelo de Langmuir. Los experimentos de adsorción sobre la sílica mostraron que sus capacidades de adsorción son adecuadas para la eliminación del paracetamol presente en el agua.

REFERENCIAS

- Birch G.F., Drage D.S., Thompson K., Eaglesham G., Mueller J.F.. *Marine Pollution Bulletin* 97(1-2):56, 2015.
- Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B, Scuseria G.E., Robb M.A., Cheeseman J.R., Scalmani G., Barone V., Mennucci B., Petersson G.A., et al. *Gaussian 09*, Revision C.01; Gaussian,

- Inc.: Wallingford, CT, USA, 2010.
- Lapworth D. J., Baran N., Stuart M. E., Ward R. S., A review. *Environmental Pollution* 163:287, 2012.
- Oulton R.L., Kohn T., Cwiertny D.M.. *J. Environ. Monit.* 12(11): 1956, 2010.