

INFORME FINAL

Programa Universitario de Investigación en Desarrollo Industrial - PUIDI

Programa Universitario de Investigación de la DIGI

Síntesis de dos nuevos azopolímeros sulfonados con capacidad de absorción de colorantes orgánicos catiónicos en agua

Proyecto de Investigación

4.8.63.0.49

Partida Presupuestaria

AP2-2022

Código del Proyecto de Investigación

Instituto de Investigaciones Químicas y Biológicas (IIQB)

Facultad de Ciencias Químicas y Farmacia

Unidad Académica Avaladora

Dr. Byron José López Mayorga
Coordinador del Proyecto de Investigación

Lic. Allan Ronaldo Vásquez Bolaños
Investigador

Br. Leonel Alejandro Flores Ramírez
Auxiliar de Investigación II

Br. María Fernanda Figueroa Estrada
Auxiliar de Investigación I

Coordinador del Proyecto y Equipo de Investigación Contratado por DIGI

Guatemala, 30 de enero de 2023

Lugar y Fecha de Presentación del Informe Final

Autoridades

Dra. Alice Burgos Paniagua
Directora General de Investigación

Ing. Agr. MARN Julio Rufino Salazar
Coordinador General de Programas

Inga. Liuba María Cabrera Ovalle de Villagrán
Coordinadora del Programa Universitario de Investigación en Desarrollo Industrial - PUIDI

Autores

Dr. Byron José López Mayorga
Coordinador del Proyecto de Investigación

Lic. Allan Ronaldo Vásquez Bolaños
Investigador

Br. Leonel Alejandro Flores Ramírez
Auxiliar de Investigación II

Br. María Fernanda Figueroa Estrada
Auxiliar de Investigación I

Colaboradores:

Dr. Edward Mario Augusto Guerrero Gutiérrez
Escuela de Ingeniería Química, Facultad de Ingeniería, Universidad de San Carlos de Guatemala.

Ing. Ricardo Díaz Pappa
Escuela de Ingeniería Química, Facultad de Ingeniería, Universidad de San Carlos de Guatemala.

Dr. Heriberto Pfeiffer.
Instituto de Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México.

M. en C. Carolina Guzmán Quilo.

Departamento de Toxicología, Escuela de Química Farmacéutica, Facultad de Ciencias Químicas y Farmacia, Universidad de San Carlos de Guatemala.

Lic. José León Castillo Arroyave, Universidad de San Carlos de Guatemala.

Universidad de San Carlos de Guatemala, Dirección General de Investigación (Digi), 2022. El contenido de este informe de investigación es responsabilidad exclusiva de sus autores.

Esta investigación fue cofinanciada con recursos del Fondo de Investigación de la Digi de la Universidad de San Carlos de Guatemala a través de la partida presupuestaria 4.8.63.0.49 con código AP2-2022 en el Programa Universitario de Investigación en Desarrollo Industrial - PUIDI.

Los autores son responsables del contenido, de las condiciones éticas y legales de la investigación desarrollada.



Universidad de San Carlos de Guatemala
Dirección General de Investigación



Informe Final

1	Índice general	
2	Resumen y palabras claves	9
2.1	Abstract and keywords	9
3	Introducción	10
4	Planteamiento del problema	12
5	Delimitación en tiempo y espacio	13
5.1	Delimitación en tiempo	13
5.2	Delimitación espacial	13
6	Marco teórico	14
6.1	Polímeros orgánicos porosos	14
6.2	Materiales sulfonados	15
6.3	Aplicaciones de azocompuestos	15
6.4	Materiales sulfonados para adsorción de contaminantes	16
6.5	Contaminantes emergentes	16
6.6	Cinéticas de adsorción	17
6.7	Isotermas de adsorción	18
7	Estado del arte	21
8	Objetivos	23
8.1	General	23
8.2	Específicos	23

Informe final proyecto de investigación 2022

Dirección General de Investigación –DIGI-

9	Hipótesis	23
10	Materiales y métodos	24
10.1	Enfoque de la investigación	24
10.2	Métodos	24
10.3	Recolección de información.....	25
10.4	Técnicas e instrumentos.....	27
10.5	Procesamiento y análisis de la información	28
11	Resultados y discusión	30
11.1	Resultados	30
11.2	Discusión de resultados.....	56
12	Referencias	59
13	Apéndice	70
14	Aspectos éticos y legales	71
15	Vinculación	71
16	Estrategia de difusión, divulgación y protección intelectual	71
17	Aporte de la propuesta de investigación a los ODS	75
18	Orden de pago final	76
19	Declaración del coordinador del proyecto de investigación.....	76
20	Aval de la directora del instituto de investigación	77
21	Visado de la Dirección General de Investigación.....	77

1.1 Índice de tablas

Tabla 1	<i>Delimitación espacial del proyecto titulado “Síntesis de dos nuevos azopolímeros sulfonados con capacidad de absorción y liberación de colorantes orgánicos catiónicos en agua”</i>	13
Tabla 2	<i>Diseño factorial 2³ para determinar las propiedades de adsorción</i>	26
Tabla 3	<i>Diseño factorial 2² para determinar la capacidad de liberación del colorante adsorbido</i> . 26	
Tabla 4	<i>Parámetros cinéticos para la adsorción de azul de metileno (50 ppm) por A2 a 25 °C</i>	31
Tabla 5	<i>Parámetros cinéticos para la adsorción de azul de metileno (100 ppm) por A2 a 25 °C</i>	32
Tabla 6	<i>Parámetros cinéticos para la adsorción de azul de metileno (200 ppm) por A2 a 25 °C</i>	33
Tabla 7	<i>Parámetros cinéticos para la adsorción de cristal violeta (50 ppm) por A2 a 25 °C</i>	40
Tabla 8	<i>Parámetros cinéticos para la adsorción de cristal violeta (100 ppm) por A2 a 25 °C</i>	41
Tabla 9	<i>Parámetros cinéticos para la adsorción de cristal violeta (200 ppm) por A2 a 25 °C</i>	42
Tabla 10	<i>Parámetros de modelos de isotermas de la adsorción de azul de metileno por A2</i>	49
Tabla 11	<i>Parámetros termodinámicos según el modelo de Langmuir para la adsorción de azul de metileno por A2</i>	50

1.2 Índice de figuras

Figura 1	<i>Reacción general para la síntesis de azopolímero sulfonado A1</i>	30
Figura 2	<i>Reacción general para la síntesis de azopolímero sulfonado A2</i>	30
Figura 3	<i>Azopolímeros sulfonados sintetizados</i>	Error! Bookmark not defined.
Figura 4	<i>Modelo de pseudo-primer orden para la adsorción de azul de metileno (50 ppm) por A2 a 25 °C</i>	34
Figura 5	<i>Modelo de pseudo-primer orden para la adsorción de azul de metileno (100 ppm) por A2 a 25 °C</i>	34
Figura 6	<i>Modelo de pseudo-primer orden para la adsorción de azul de metileno (200 ppm) por A2 a 25 °C</i>	35
Figura 7	<i>Modelo de pseudo-segundo orden para la adsorción de azul de metileno (50 ppm) por A2 a 25 °C</i>	35
Figura 8	<i>Modelo de pseudo-segundo orden para la adsorción de azul de metileno (100 ppm) por A2 a 25 °C</i>	36

Figura 9	<i>Modelo de pseudo-segundo orden para la adsorción de azul de metileno (200 ppm) por A2 a 25 °C.....</i>	36
Figura 10	<i>Modelo de difusión intrapartícula para la adsorción de azul de metileno (50 ppm) por A2 a 25 °C.....</i>	37
Figura 11	<i>Modelo de difusión intrapartícula para la adsorción de azul de metileno (100 ppm) por A2 a 25 °C.....</i>	37
Figura 12	<i>Modelo de difusión intrapartícula para la adsorción de azul de metileno (200 ppm) por A2 a 25 °C.....</i>	38
Figura 13	<i>Modelo de Elovich para la adsorción de azul de metileno (50 ppm) por A2 a 25 °C.....</i>	38
Figura 14	<i>Modelo de Elovich para la adsorción de azul de metileno (100 ppm) por A2 a 25 °C.....</i>	39
Figura 15	<i>Modelo de Elovich para la adsorción de azul de metileno (200 ppm) por A2 a 25 °C.....</i>	39
Figura 16	<i>Modelo de pseudo-primer orden para la adsorción de cristal violeta (50 ppm) por A2 a 25 °C.....</i>	42
Figura 17	<i>Modelo de pseudo-primer orden para la adsorción de cristal violeta (100 ppm) por A2 a 25 °C.....</i>	43
Figura 18	<i>Modelo de pseudo-primer orden para la adsorción de cristal violeta (200 ppm) por A2 a 25 °C.....</i>	43
Figura 19	<i>Modelo de pseudo-segundo orden para la adsorción de cristal violeta (50 ppm) por A2 a 25 °C.....</i>	44
Figura 20	<i>Modelo de pseudo-segundo orden para la adsorción de cristal violeta (100 ppm) por A2 a 25 °C.....</i>	44
Figura 21	<i>Modelo de pseudo-segundo orden para la adsorción de cristal violeta (200 ppm) por A2 a 25 °C.....</i>	45
Figura 22	<i>Modelo de difusión intrapartícula para la adsorción de cristal violeta (50 ppm) por A2 a 25 °C.....</i>	45
Figura 23	<i>Modelo de difusión intrapartícula para la adsorción de cristal violeta (100 ppm) por A2 a 25 °C.....</i>	46
Figura 24	<i>Modelo de difusión intrapartícula para la adsorción de cristal violeta (200 ppm) por A2 a 25 °C.....</i>	46
Figura 25	<i>Modelo de Elovich para la adsorción de cristal violeta (50 ppm) por A2 a 25 °C.....</i>	47
Figura 26	<i>Modelo de Elovich para la adsorción de cristal violeta (100 ppm) por A2 a 25 °C.....</i>	47

Figura 27	<i>Modelo de Elovich para la adsorción de cristal violeta (200 ppm) por A2 a 25 °C.....</i>	48
Figura 28	<i>Isoterma de Langmuir ajustada a los datos obtenidos de la adsorción de azul de metileno por A2.....</i>	50
Figura 29	<i>Isoterma de Freundlich ajustada a los datos obtenidos de la adsorción de azul de metileno por A2.....</i>	51
Figura 30	<i>Isoterma de Temkin ajustada a los datos obtenidos de la adsorción de azul de metileno por A2.....</i>	51
Figura 31	<i>Isoterma de Halsey ajustada a los datos obtenidos de la adsorción de azul de metileno por A2.....</i>	52
Figura 32	<i>Isoterma de Jovanovich ajustada a los datos obtenidos de la adsorción de azul de metileno por A2.....</i>	52
Figura 33	<i>Análisis termogravimétrico del azopolímero sintetizado a partir de ácido 2,5-diaminobencensulfónico</i>	53
Figura 34	<i>Análisis termogravimétrico del azopolímero sintetizado a partir de ácido 4,4'-diamino-2,2'-etilbendisulfónico</i>	53
Figura 35	<i>Comparación de espectros de infrarrojo entre el ácido 2, 5-diaminobencensulfónico y el azopolímero obtenido a partir del mismo</i>	54
Figura 36	<i>Espectro infrarrojo del azopolímero sintetizado a partir del ácido 4,4'-diamino-2,2'-etilbendisulfónico</i>	54
Figura 37	<i>Colorantes orgánicos catiónicos utilizados para las pruebas de adsorción</i>	70

2 Resumen y palabras claves

Debido a la demanda de nuevo conocimiento y tecnología para la remediación de contaminantes en agua, se sintetizaron dos nuevos azopolímeros a partir de floroglucinol con dos distintas anilinas sulfonadas por medio de una reacción de diazotización. Estos dos azopolímeros sulfonados fueron caracterizados químicamente por medio de espectroscopia FTIR. Las propiedades de adsorción de estos nuevos polímeros se determinaron en función de la concentración del contaminante (cristal violeta y azul de metileno) contenido en agua. Estos dos nuevos materiales no han sido reportados en la literatura; además, se evaluó su capacidad de adsorción y liberación de contaminantes colorantes de naturaleza orgánica catiónica para la reutilización del material, por lo que en un estudio posterior podrían ser aplicados como filtros en la purificación de agua selectiva de contaminantes orgánicos catiónicos, se respaldó la investigación realizando una simulación computacional energética de los materiales con los contaminantes a estudiar obteniendo una correlación en los resultados.

Palabras clave: azul de metileno, cristal violeta, naranja de metilo, cinética de adsorción, isoterma.

2.1 Abstract and keywords

Due to the demand for new knowledge and technology for the remediation of contaminants in water, two new azopolymers were synthesized from phloroglucinol with two different sulfonated anilines by means of a diazotization reaction. These two sulfonated azopolymers were chemically characterized by means of FTIR spectroscopy. The adsorption properties of these new polymers were determined as a function of the concentration of the contaminant (crystal violet and methylene blue) contained in water. These two new materials have not been reported in the literature; In addition, their adsorption capacity and release of cationic organic coloring pollutants for the reuse of the material were evaluated, measuring kinetic and thermodynamic parameters, so that in a subsequent study they could be applied as filters in the selective water purification of cationic organic pollutants. , the research was supported by performing an energetic computational simulation of the materials with the pollutants to be studied, obtaining a correlation in the results.

Keywords: methylene blue, violet crystal, methyl orange, adsorption kinetics, isotherm.

3 Introducción

La contaminación en sistemas acuosos se ha debido al mal manejo de recursos hídricos a nivel mundial y de manera específica en nuestro país, en donde incluso se carece de una ley que regule su uso y tratamiento. En Guatemala existen industrias alimentarias, textiles, de cuero, farmacéuticas y agrícolas, por mencionar algunas. En ellas existen procesos que generan descargas de aguas residuales con distintos tipos de contaminantes (fármacos, pigmentos, metales, etc.). Un ejemplo es el caso de pesticidas (malatión) en el río La Pasión y el río San Román en Guatemala (Sánchez, 2016). También ha habido serios problemas ecológicos en cuerpos de agua en el país debido a la descarga de aguas residuales (Pérez-Marroquín, 2018), uso general de medicamentos, tintes, productos del cuidado e higiene personal, entre otros. Nuevos problemas ecológicos se han generado debido a los contaminantes emergentes, los cuales alcanzan y afectan los ecosistemas por medio de las descargas de aguas residuales, que de manera indirecta pueden llegar a afectar también la cadena alimenticia (Deblonde et al., 2011; Geissen et al., 2015). Es por ello que se deben tomar acciones legales y de educación para la prevención de este tipo de problemas. Existen herramientas de la ciencia básica que desarrollan materiales que permiten subsanar estos problemas y sus consecuencias. En las etapas iniciales del desarrollo del material es donde radica la importancia de la química y su estructura para capturar un contaminante emergente de manera selectiva.

En las últimas décadas los materiales mesoporosos han sido tendencia en la ciencia de los materiales, debido a su gran versatilidad, estructura geométrica, tamaño de poro definido y una gran área superficial (Suib, 2017). Estas características los hacen adecuados para una gran diversidad de aplicaciones como la desalinización de agua (Elma et al., 2013; X. Xu et al., 2019), celdas de combustible (Nadeem et al., 2020; Shanahan et al., 2008; Yeung & Han, 2014), catálisis heterogénea (Phan et al., 2010; Sengupta et al., 2019; Sun et al., 2015; W. Wang et al., 2017) y adsorción de gases (Liu et al., 2013; Tehrani et al., 2019; Xie & Suh, 2013).

Estos materiales pueden fabricarse a partir de precursores orgánicos e inorgánicos, entre los que se pueden mencionar: sílica mesoporosa (SM), carbón mesoporoso (CM), marcos orgánicos metálicos (MOF), marcos covalentes orgánicos (COF) y polímeros orgánicos porosos (POP). Existen otros materiales como los azocompuestos, los cuales pueden modificar sus propiedades de acuerdo con un

estímulo externo. Estos materiales absorben radiación electromagnética en el rango de la luz visible, la cual funciona como un interruptor molecular e induce cambios estructurales debido a su isomerización geométrica (Balam-Villarreal et al., 2020; Pan et al., 2016). Debido a esto, se podrían generar materiales inteligentes y selectivos que cambien sus propiedades por medio de un estímulo externo como la luz (Chang et al., 2019; Ye et al., 2018).

Por lo mencionado anteriormente, el objetivo de este proyecto fue sintetizar dos nuevos azopolímeros orgánicos utilizando una reacción de diazotización. Se sintetizaron a partir de un polifenol (floroglucinol) y dianilina sulfonada. La química del material le brinda características particulares en medio ácido y alcalino que lo hacen selectivo a ciertas aplicaciones, como la captación y liberación de especies catiónicas. Por su estructura química podría tener mayor interacción con especies orgánicas. Las propiedades de adsorción de los azopolímeros se evaluaron en función de dos contaminantes colorantes (cristal violeta y azul de metileno) y su concentración. Ambos colorantes son utilizados en la tinción de textiles y aplicaciones biomédicas, pero a su vez poseen propiedades tóxicas para los seres vivos (Mani & Bharagava, 2016). Las propiedades de adsorción de los materiales se analizaron por medio de un diseño factorial en tres factores (concentración de colorante, colorante y el azopolímero) con dos niveles cada uno (diseño 2^3) y 5 repeticiones para cada una de las muestras; siendo en total 40 unidades experimentales. Todas las hipótesis fueron evaluadas con un nivel de confiabilidad del 95%, siendo rechazadas si el valor de p asociado al resultado observado fue igual o menor que el nivel de significancia ($p \leq 0.05$). La capacidad de liberación del colorante adsorbido en el azopolímero sulfonado se evaluó por medio de un estudio de dos factores (diseño 2^2) y 5 repeticiones en cada medición. Así mismo se calcularon las energías de afinidad de los analitos con cada material para evaluar la afinidad que tenían. El impacto del proyecto consiste en la síntesis de dos nuevos azopolímeros que no han sido reportados en la literatura científica y que contribuyen a la reducción de contaminantes emergentes, además de contribuir con los Objetivos de Desarrollo Sostenible de *Salud y Bienestar* (ODS 3) y *Agua Limpia y Saneamiento* (ODS 6) en Guatemala.

4 Planteamiento del problema

El auge en la remediación de problemas ambientales se debe a la búsqueda de soluciones ante la contaminación a nivel mundial y en nuestro país que afectan directamente la calidad de vida de las personas y la naturaleza (Orru et al., 2017). Por lo que es de suma importancia aportar al conocimiento para la generación de nuevas tecnologías que permitan captar, adsorber y/o filtrar contaminantes del agua de manera selectiva por medio de materiales que sean fáciles de desarrollar y puedan ser reutilizables.

Entre los contaminantes encontramos los catiónicos, los cuales incluyen varios tipos de metales (Khulbe & Matsuura, 2018) en su forma cargada positivamente. Estos pueden ser de distintos tamaños y cargas: plomo (Zhao et al., 2018), cobalto, cobre, hierro, manganeso (Shaban et al., 2017), entre otros. También hay contaminantes emergentes con carga positiva de naturaleza orgánica, como los pigmentos utilizados de manera industrial: azul de metileno, que se ha descrito como tóxico en recién nacidos (Albert et al., 2003) y cristal violeta, que puede llegar a ser cancerígeno, entre otros (C. Li et al., 2018; Mao et al., 2010). La gravedad de estos contaminantes se presenta como un gran problema de contaminación en los cuerpos de agua, produciendo problemas de salud en los seres vivos y deterioro de los ecosistemas.

Por las razones anteriormente mencionadas, se sintetizaron dos nuevos azopolímeros a partir de floroglucinol y dos distintas dianilinas sulfonadas. Este tipo de estructuras específicamente aún no han sido reportadas en la literatura y, por sus características químicas y estructurales, podrían tener muy buenas propiedades para la adsorción de especies catiónicas. Con anterioridad han sido reportados materiales para la adsorción de cationes, pero muchas veces su síntesis es complicada y es difícil conocer el grado de sulfonación de los materiales. En este trabajo se pretende partir de dianilinas que ya poseen el grupo funcional ácido sulfónico, asegurando y conociendo la cantidad de grupos funcionales que contendrían los azopolímeros.

5 Delimitación en tiempo y espacio

5.1 Delimitación en tiempo

Fecha inicio: febrero 2022

Fecha finalización: febrero 2023

5.2 Delimitación espacial

La Tabla 1 contiene la información relacionada a la delimitación espacial del proyecto.

Tabla 1

Delimitación espacial del proyecto titulado “Síntesis de dos nuevos azopolímeros sulfonados con capacidad de absorción y liberación de colorantes orgánicos catiónicos en agua”

Actividad	Ubicación
Síntesis de los azopolímeros	Laboratorio de investigación del Departamento de Química Orgánica, de la Escuela de Química de la Facultad de Ciencias Químicas y Farmacia de la Universidad de San Carlos de Guatemala
Caracterización química de los azopolímeros por medio de espectroscopía FTIR	Laboratorio del Instituto de Investigaciones Químicas, Biológicas, Biomédicas y Físicas, Universidad Mariano Gálvez.
Evaluación de adsorción de los azopolímeros por medio de espectrofotometría UV-visible	Laboratorio de investigación del Departamento de Química Orgánica, de la Escuela de Química de la Facultad de Ciencias Químicas y Farmacia de la Universidad de San Carlos de Guatemala. Laboratorio de Toxicología, antigua Facultad de Ciencias Químicas y Farmacia.

	Escuela de Ingeniería Química, Facultad de Ingeniería de la Universidad de San Carlos de Guatemala
Evaluación de la capacidad de liberación del colorante adsorbido en el azopolímero sulfonado en función del pH y disolvente utilizado	Laboratorio de investigación del Departamento de Química Orgánica, de la Escuela de Química de la Facultad de Ciencias Químicas y Farmacia de la Universidad de San Carlos de Guatemala. Laboratorio de Toxicología, antigua Facultad de Ciencias Químicas y Farmacia

6 Marco teórico

6.1 Polímeros orgánicos porosos

Los polímeros orgánicos porosos pueden ser clasificados en diferentes categorías, como lo son: polímeros microporosos conjugados, marcos orgánicos covalentes (COF), polímeros hiperreticulados, marcos aromáticos porosos y polímeros con microporosidad intrínseca; algunos otros se pueden clasificar según su estereoquímica (3D, 2D) (Li & Yang, 2017). Todos estos son utilizados en una gran diversidad de aplicaciones como catálisis (Kristensen & Hansen, 2010), aplicaciones fotovoltaicas (Bildirir et al., 2017), adsorción selectiva de contaminantes (Shen et al., 2018), carga y liberación de fármacos (Xu et al., 2020), así como otras aplicaciones. Como su nombre lo indica son materiales de naturaleza orgánica, lo cual es ventajoso ya que son materiales estructuralmente modificables de acuerdo a las necesidades del problema a resolver. Además, tienen la ventaja de poseer una gran área superficial y tamaño de poro definido y ordenado, lo que les confiere una selectividad en la movilidad y separaciones de moléculas (Bhanja et al., 2019; Li et al., 2019; Trewin & Cooper, 2010).

6.2 Materiales sulfonados

Los ácidos sulfónicos son de amplio uso como catalizadores en síntesis orgánica, surfactantes, membranas y resinas de intercambio iónico. Muchos de los derivados de ácidos sulfónicos son dañinos por su acidez y persistencia, por lo que se ha optado por su uso en matrices (materiales) soportadas para su utilización reciclable, así como para evitar la contaminación.

Se han reportado derivados de ácidos sulfónicos soportados sobre sílices mesoporosas, quitosano, carbón activado, circonia, materiales híbridos, materiales magnéticos, materiales poliméricos, en marcos orgánicos metálicos, entre otros (Sharghi et al., 2018). En las últimas décadas una de sus aplicaciones en estudio ha sido como material polimérico para su uso en celdas de combustible por su viable intercambio iónico, buena conductividad y estabilidad térmica (H. Hou et al., 2012). Estos son materiales en los que se pueden modular propiedades físicas de acuerdo al pH del medio.

6.3 Aplicaciones de azocompuestos

Los azocompuestos se caracterizan por tener un doble enlace entre dos nitrógenos y tienen la particularidad de responder a estímulos térmicos y de luz. La síntesis clásica de éstos se origina a partir de sales de diazonio que a su vez se sintetizan a partir de aminas (aromáticas usualmente) y ácido nitroso.

Las principales características de los azocompuestos son sus absorciones en el rango del espectro visible y su isomerización geométrica. Ésta se aplica en interruptores moleculares como máquinas moleculares que pueden ser capaces de realizar una acción bajo un estímulo externo. Estos sistemas existen en dos diferentes estados que pueden ser interconvertidos reversiblemente entre sí. Esta acción se puede llevar a cabo mediante calor, luz visible, entre otros estímulos.

Los interruptores moleculares pueden ser modificados dependiendo del uso que se les quiera dar. Para una aplicación real, existen cuatro parámetros a tener en cuenta para una buena eficiencia sobre el rendimiento de interruptores (Crespi et al., 2019):

- Longitud de onda máxima de absorción y rendimiento cuántico de la isomerización (C.-W. Chang et al., 2004).
- Estabilidad térmica relativa de los dos isómeros (García-Amorós et al., 2010).
- Abundancia relativa de los isómeros E y Z cuando el compuesto está expuesto a una fuente de luz (o ninguna) (Simeth et al., 2018).
- Reproducibilidad del cambio fotoquímico en el tiempo (Mendonça et al., 2011).

6.4 Materiales sulfonados para adsorción de contaminantes

Existe una gran diversidad de materiales sulfonados reportados en la literatura para diversas aplicaciones debido a que este grupo funcional suele ser muy utilizado como catalizador de una gran variedad de reacciones orgánicas. Para mejorar las condiciones de reacción y evitar contaminantes se han desarrollado diversos soportes que se funcionalizan con grupos de ácido sulfónico para poder reutilizar el catalizador. Otra de las aplicaciones es la adsorción de metales pesados sobre soportes que poseen estos grupos funcionales. Se han desarrollado materiales sulfonados orgánicos, con sílica, MOF, de circonio, de carbón activo, magnéticos, entre otros (Sharghi et al., 2018).

6.5 Contaminantes emergentes

Las descargas de agua residual de origen industrial y de uso humano son causa de una contaminación grande a nivel global, en la que se ha enlistado una serie de contaminantes llamados “emergentes”. Estos tienen como origen productos químicos que no poseen una regulación en su uso y descarte. Actualmente, no se posee suficiente información sobre el daño ambiental y a la salud humana que estos puedan provocar. La Unión Europea anunció una lista de 33 sustancias que son prioridad, entre las cuales se incluyen metales (entre estos el plomo), pesticidas, ftalatos, hidrocarburos aromáticos policíclicos, disruptores endocrinos y pigmentos artificiales, a los cuales se les debe prestar particular atención debido a que se tiene la fuerte sospecha y evidencias parciales de que pueden estar generando un problema tanto a nivel ecológico como en tema de salud humana (Deblonde et al., 2011).

Muchos pigmentos de amplio uso industrial como textiles, tinciones biomédicas y tintas de impresión, son utilizados y muchas veces tienen como destino las aguas residuales. Por ejemplo, el cristal violeta es una molécula persistente y posee efectos tóxicos en los seres vivos que habitan en el agua (Mani & Bharagava, 2016). Otro pigmento de uso comercial y con aplicaciones biomédicas es el azul de metileno; sin embargo, hay evidencia que en sistemas de agua puede ser tóxico para los ecosistemas y también se ha encontrado que tiene una alta toxicidad en los neonatos (Albert et al., 2003). Asimismo, otros estudios han encontrado que se asocia a problemas sobre el sistema nervioso central, siendo un potencial neurotóxico (Vutskits et al., 2008).

6.6 Cinéticas de adsorción

El estudio cinético del proceso de adsorción permite comprender de mejor manera las rutas y mecanismos por los que éste se da y las interacciones que ocurren en la interfase adsorbato-adsorbente. De esta manera es posible diseñar y optimizar procesos como el tratamiento de aguas residuales con materiales adsorbentes. Existen varios modelos de distinta complejidad que describen la ley de velocidad del proceso de adsorción y el fenómeno fisicoquímico asociado, y puede determinarse experimentalmente a qué modelo se acopla mejor un sistema bajo estudio (Tran et al., 2017).

El modelo de pseudo-primer orden, propuesto por Lagergren (1898), se basa en la capacidad del adsorbente y describe el proceso de adsorción de acuerdo a la ecuación linealizada

$$\ln(q_e - q_t) = \ln q_e - k_1 t \quad (1)$$

donde q_t (mg/g) y q_e (mg/g) son las capacidades de adsorción del adsorbato sobre el adsorbente en un tiempo dado t (min) y en el equilibrio, respectivamente, y k_1 (min^{-1}) es la constante de velocidad de pseudo-primer orden. Este modelo se adapta mejor a los tiempos iniciales de contacto entre el adsorbato y el adsorbente (Tran et al., 2017).

El modelo de pseudo-segundo orden, por su parte, fue propuesto por Blanchard y colaboradores (1984) y describe el proceso de adsorción según la ecuación linealizada

$$\frac{t}{q_t} = \frac{1}{k_2 q_e^2} + \frac{1}{q_e} t \quad (2)$$

en la que q_t (mg/g) y q_e (mg/g) son las capacidades de adsorción del adsorbato sobre el adsorbente en un tiempo dado t (min) y en el equilibrio (teórico), respectivamente, y k_2 ($\text{g} \cdot \text{mg}^{-1} \cdot \text{min}^{-1}$) es la constante

de velocidad de pseudo-segundo orden. Tanto el modelo de pseudo-primero orden como el de pseudo-segundo orden combinan diferentes mecanismos de adsorción y son dos de los más utilizados en estudios cinéticos, con fines descriptivos más que predictivos (Tan & Hameed, 2017).

El modelo de difusión intrapartícula, descrito por Weber y Morris (1963), expresa el comportamiento de adsorción mediante la ecuación linealizada

$$q_t = k_p t^{0.5} + C \quad (3)$$

donde q_t (mg/g) es la capacidad de adsorción del adsorbato sobre el adsorbente en un tiempo dado t (min), k_p (mg·g·min^{-0.5}) es la constante de velocidad intrapartícula y C (mg/g) es una constante relacionada al grosor de la capa límite y a la adsorción inicial. Si la cinética está controlada exclusivamente por la difusión intrapartícula, es decir, el transporte del adsorbato de la superficie externa hacia los poros del adsorbente, el valor de C es cero y la recta pasa por el origen. Sin embargo, el sistema también puede presentar diferentes segmentos lineales, lo que implica que existen múltiples etapas en el mecanismo que controla el proceso de adsorción (Tran et al., 2017).

El modelo de Elovich, propuesto por Roginsky y Zeldovich (1934), se utiliza para describir procesos de quimisorción lejos del equilibrio según la ecuación linealizada

$$q_t = \frac{1}{\beta} \ln(\alpha\beta) + \frac{1}{\beta} \ln t \quad (4)$$

en la que q_t (mg/g) es la capacidad de adsorción del adsorbato sobre el adsorbente en un tiempo dado t (min), α (mg·g⁻¹·min⁻¹) es la velocidad inicial de adsorción y β (g/mg) es una constante de desorción que se relaciona con la extensión de la cobertura superficial y la energía de activación para la quimisorción. Al graficar q_t contra el $\ln t$, los sistemas que obedecen este modelo dan una recta a partir de cuya pendiente e intercepto se pueden obtener los valores de α y β (Tan & Hameed, 2017).

6.7 Isotermas de adsorción

Las isotermas de adsorción son gráficas que permiten analizar el equilibrio del sistema bajo estudio con condiciones controladas de temperatura, pH y velocidad de agitación, indicando las tendencias en la distribución del adsorbato en el adsorbente y la disolución. Gracias a ellas es posible

diseñar, optimizar y describir las propiedades de un sistema de adsorción. Una isoterma completa se obtiene al graficar la cantidad de adsorbato adsorbido al equilibrio (q_e ; mg/g) contra la concentración al equilibrio de adsorbato en disolución (C_e ; mg/L) a partir de experimentos cinéticos con diferentes concentraciones iniciales de adsorbato (C_0 ; mg/L). Existe una gran variedad de modelos para isotermas de adsorción que toman en consideración distintos parámetros, siendo los modelos de Langmuir y de Freundlich dos de los más utilizados debido a la utilidad de sus parámetros, baja complejidad y fácil interpretación (Tran et al., 2017).

El modelo empírico propuesto por Langmuir (1918) es aplicable a procesos de adsorción con formación de una monocapa, y parte de cuatro suposiciones: 1) una cantidad fija de sitios está disponible en la superficie del adsorbente y todos los sitios activos poseen la misma energía (son homogéneos); 2) el proceso de adsorción es reversible, y la adsorción y desorción ocurren a la misma velocidad; 3) si un sitio es ocupado por el adsorbato, no puede ocurrir ninguna adsorción adicional en ese sitio; 4) no hay interacciones entre las especies de adsorbato (Tran et al., 2017). Una de las ecuaciones linealizadas para el modelo de Langmuir es

$$\frac{1}{q_e} = \frac{1}{C_e q_{m\acute{a}x}} + \frac{1}{K_L q_{m\acute{a}x}} \quad (5)$$

donde q_e (mg/g) es la capacidad de adsorción al equilibrio, $q_{m\acute{a}x}$ (mg/g) es la capacidad máxima de adsorción para una monocapa saturada, C_e (mg/L) es la concentración de adsorbato en el adsorbente al equilibrio, y K_L (L/mg) es la constante del modelo de Langmuir, relacionada con la afinidad entre adsorbato y adsorbente. Si la adsorción es efectiva, se espera que los valores teóricos de $q_{m\acute{a}x}$ y K_L sean altos. Si los datos experimentales de un sistema se ajustan al modelo de Langmuir, se debe calcular el factor de separación adimensional R_L

$$R_L = \frac{1}{1 + K_L C_0} \quad (6)$$

donde C_0 (mg/L) es la concentración inicial del adsorbato. Según este factor, la naturaleza de la adsorción puede ser lineal ($R_L = 1$), irreversible ($R_L = 0$), desfavorable ($R_L > 1$), o favorable ($0 < R_L < 1$) (Al-Ghouti & Da'ana, 2020).

La ecuación empírica propuesta por Freundlich (1906) describe la adsorción reversible al equilibrio sobre superficies heterogéneas y puede ser aplicada para procesos de adsorción con

formación de una multicapa. En el modelo de Freundlich, la ecuación linealizada que describe el proceso de adsorción es

$$\log q_e = \log K_F + \frac{1}{n} \log C_e \quad (7)$$

donde q_e (mg/g) es la capacidad de adsorción al equilibrio, C_e (mg/L) es la concentración de adsorbato en el adsorbente al equilibrio, $1/n$ es un parámetro adimensional que se relaciona con la intensidad del proceso de adsorción, y K_F (L/g) es la constante del modelo de Freundlich (Tran et al., 2017). Tanto $1/n$ como K_F dependen de la temperatura. Cuando $0 < 1/n < 1$, la adsorción es favorable; cuando $1/n > 1$, la adsorción es desfavorable; y cuando $1/n = 1$, es irreversible (Al-Ghouti & Da'ana, 2020).

El modelo empírico de Temkin es válido únicamente para un rango intermedio de concentraciones y asume que las energías de enlace entre adsorbato y adsorbente están distribuidas de manera uniforme. La ecuación linealizada que lo describe es

$$q_e = \left(\frac{RT}{b_T}\right) \ln A_T + \left(\frac{RT}{b_T}\right) \ln C_e \quad (8)$$

donde q_e (mg/g) es la capacidad de adsorción al equilibrio, C_e (mg/L) es la concentración de adsorbato en el adsorbente al equilibrio, R es la constante universal de los gases ($8.3144 \text{ J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$), T (K) es la temperatura absoluta, A_T (L/mg) y b_T ($\text{J}\cdot\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{mg}^{-1}$) son constantes del modelo de Temkin, la última relacionada con el calor de sorción (J/mol) (Al-Ghouti & Da'ana, 2020).

El modelo de isothermas de adsorción de Halsey describe la condensación de adsorbatos a una distancia relativamente grande de la superficie del adsorbente, en sistemas de adsorción con formación de multicapas sobre superficies heterogéneas. La forma linealizada de la ecuación que describe este modelo es

$$\ln q_e = \left(\frac{1}{n_H}\right) \ln K_H - \left(\frac{1}{n_H}\right) \ln C_e \quad (9)$$

donde q_e (mg/g) es la capacidad de adsorción al equilibrio, C_e (mg/L) es la concentración de adsorbato en el adsorbente al equilibrio, n_H es un coeficiente adimensional relacionado con las interacciones de enlace, y K_H ($\text{mg}^2\cdot\text{g}^{-1}\cdot\text{L}^{-1}$) es la constante de Halsey (Al-Ghouti & Da'ana, 2020).

El modelo de Jovanovich asume las mismas condiciones que el modelo de Langmuir, pero también considera el contacto mecánico entre las moléculas adsorbidas y desorbidas. Es poco utilizada para describir procesos de fisorción, pero tiene aplicación en procesos de adsorción con formación de monocapa sin interacciones laterales. Su ecuación linealizada es

$$\ln q_e = \ln q_{m\acute{a}x} - K_J C_e \quad (10)$$

donde q_e (mg/g) es la capacidad de adsorción al equilibrio, C_e (mg/L) es la concentración de adsorbato en el adsorbente al equilibrio, $q_{m\acute{a}x}$ (mg/g) es la capacidad de adsorción máxima, y K_J (L/mg) es la constante de Jovanovich (Al-Ghouti & Da'ana, 2020).

Además de las isothermas, los estudios termodinámicos también son indispensables para predecir los mecanismos de adsorción. A partir de los diferentes modelos para las isothermas de adsorción se pueden calcular algunos parámetros termodinámicos, como ΔG° (J/mol), ΔH° (J/mol) y ΔS° (J·mol⁻¹·K⁻¹), según las ecuaciones

$$\Delta G^\circ = -RT \ln K_c \quad (11)$$

$$\Delta G^\circ = \Delta H^\circ - T\Delta S^\circ \quad (12)$$

$$\ln K_c = \frac{\Delta S^\circ}{R} - \frac{\Delta H^\circ}{RT} \quad (13)$$

donde R es la constante universal de los gases (8.3144 J·mol⁻¹·K⁻¹), T (K) es la temperatura absoluta, y K_c es la constante adimensional de equilibrio, cuyo valor puede calcularse a partir de las constantes obtenidas en los diferentes modelos de isothermas de adsorción. El cambio en la energía libre de Gibbs puede calcularse directamente, mientras que los cambios de entalpía y entropía se obtienen, respectivamente, de la pendiente y el intercepto de una gráfica de $\ln K$ contra $\frac{1}{T}$ según la ecuación 13 (Tran et al., 2017). Si ΔG° es negativa, la reacción de quimisorción ocurre de manera espontánea. Cuando ΔH° es negativa, la adsorción es considerada exotérmica, y viceversa. Un valor positivo de ΔS° refleja afinidad entre el adsorbente y el adsorbato (Al-Ghouti & Da'ana, 2020).

7 Estado del arte

Muy pocos polímeros del tipo azoico han sido reportados en la literatura con aplicaciones muy particulares. Uno de ellos, hecho a partir de 4,4'-diaminoterfenil y floroglucinol como monómeros y

que posteriormente se mezcla con polidimetilsiloxano, se utilizó recubriendo una barra de agitación magnética y evaluando la microadsorción de diferentes derivados de benzotriazoles como contaminantes persistentes en agua, realizando una detallada caracterización del material y su evaluación de adsorción, obteniendo recuperaciones mayores al 80% (Wang et al., 2020).

Se reportó la síntesis de un polímero azoico, utilizando floroglucinol y distintas dianilinas, acompañada de estudios fisicoquímicos, como fenómenos de tautomerización, capacidad de adsorción con vapores de acetonitrilo y el estudio de la modificación de poros por estímulos externos (X. Liu et al., 2020).

También se ha reportado la síntesis de un polímero covalente orgánico con uniones azoicas, utilizando pireno como fuente de fluorescencia, al cual se le hizo una caracterización detallada, mostrando una alta capacidad de área superficial ($700 \text{ m}^2 \cdot \text{g}^{-1}$) y exhibiendo una selectividad de absorción y almacenamiento de dióxido de carbono (Gupta et al., 2017).

También se han desarrollado recientemente materiales bidimensionales tipo base de Schiff que tienen cierta similitud estructural y logran obtener hojas cristalinas (parecidas al grafeno). En dicho estudio se reportó su caracterización y las interacciones que tienen entre cada hoja cristalina, para entender mejor cómo podría aplicarse en diferentes áreas como la adsorción, sensores, catálisis, entre otros (Feriante et al., 2020).

Una de las investigaciones más actuales reportadas, es un polímero orgánico poroso del tipo azoico, utilizando una triaril triazina como co-bloque del polímero además de la dianilina y el floroglucinol, describiendo su estructura, morfología y alto grado de funcionalidad. Se evaluó su capacidad de adsorción (con azul de metileno) y se resaltó la cinética del proceso, que posee una constante muy superior a lo reportado. También se exaltó la ventaja de que este material puede ser reutilizado al menos siete veces sin perder sus propiedades, indicando que tiene un gran potencial para la aplicación en tratamientos de agua (Y. Zhang et al., 2021).

Aunado a lo mencionado anteriormente, se conocen materiales sulfonados que poseen características particulares, como la modificación de polaridad, acidez, su uso en catálisis o como materiales de adsorción en fase sólida. Por ejemplo, una reportada en la que se utilizó biomasa derivada

del desecho del té que posteriormente se sulfonó y se evaluó su capacidad de adsorción de contaminantes como azul de metileno, tetraciclina y Cr(VI), obteniendo muy buenos resultados (Ahsan et al., 2018). Existen también algunos reportes de polímeros orgánicos porosos con la función del grupo sulfónico, los cuales son estudiados en celdas de combustible por su excelente conductividad (Bhanja et al., 2020; Furtmair et al., 2021).

8 Objetivos

8.1 General

Sintetizar dos azopolímeros sulfonados con capacidad de absorber colorantes catiónicos en solución acuosa.

8.2 Específicos

1. Sintetizar un azopolímero (A1), a partir de floroglucinol y ácido 2,5-diaminobencensulfónico utilizando una reacción de diazotización.
2. Sintetizar un azopolímero (A2), a partir de floroglucinol y ácido 4,4'-diamino-2,2'-estilbendisulfónico utilizando una reacción de diazotización.
3. Caracterizar químicamente A1 y A2 por medio de espectroscopía FTIR.
4. Evaluar la capacidad de absorción del material (A1 y A2) en función de la concentración y tipo de colorante (cristal violeta o azul de metileno) en solución acuosa.
5. Evaluar la capacidad de liberación del colorante absorbido en el azopolímero sulfonado en función del pH y disolvente utilizado.

9 Hipótesis

- H_1 : El rendimiento de los azopolímeros A1 y A2 utilizando la reacción de diazotización es mayor a 50%.
- H_2 : Las propiedades de adsorción de los azopolímeros sulfonados están en función de su la composición química.

- *H₃*: La estructura química del colorante tiene un efecto significativo en las propiedades de adsorción de los materiales A1 y A2.
- *H₄*: La concentración del colorante tiene un efecto significativo en las propiedades de adsorción de los materiales A1 y A2.
- *H₅*: La capacidad de liberación del colorante adsorbido en el azopolímero aumenta significativamente en función del pH y disolvente utilizado.

10 Materiales y métodos

10.1 Enfoque de la investigación

Enfoque de investigación de esta propuesta es cuantitativo de tipo descriptivo.

10.2 Métodos

Los métodos utilizados se presentan a continuación:

- *Objetivos 1 y 2:*

Se realizó una reacción de diazotización entre el floroglucinol y cada respectiva dianilina para la obtención de los nuevos materiales A1 y A2 con modificación de métodos ya reportados (Wang et al., 2020).

- *Objetivo 3:*

Cada material se caracterizó por medio de espectroscopía FTIR-ATR, utilizando como parámetro de comparación las materias de partida y analizando desplazamientos, desaparición y aparición de señales específicas debidas a los grupos funcionales.

- *Objetivo 4:*

Se tomaron muestras de cada azopolímero, se agregaron en agua y se mezclaron con disoluciones de concentración conocida del colorante (cristal violeta o azul de metileno), dejándose en contacto

durante un tiempo. Posteriormente, se filtró el material y se cuantificó la concentración remanente en la disolución por medio de espectrofotometría UV-visible (Li et al., 2018).

- *Objetivo 5:*

Se tomaron muestras de cada azopolímero (A1 y A2) que adsorbieron azul de metileno y cristal violeta respectivamente, y se determinó si los materiales tienen la capacidad de liberar los colorantes adsorbidos.

10.3 Recolección de información

En esta investigación se sintetizaron dos azopolímeros sulfonados y se evaluaron sus propiedades de adsorción para la remoción de dos contaminantes colorantes catiónicos (cristal violeta y azul de metileno) en solución acuosa.

- *Objetivos 1 y 2:*

Para la obtención de los azopolímeros, se replicó su síntesis 5 veces para cada tipo de material (A1 y A2). Se obtuvo el promedio de estas repeticiones y se analizó por medio de prueba de hipótesis t de una muestra, comparándolo con el valor colocado en la hipótesis.

- *Objetivo 3:*

Para la caracterización de A1 y A2, se hizo un análisis detallado de los desplazamientos de bandas a diferentes números de onda, así como la aparición de nuevas señales con respecto a sus materias primas, debido a que los modos de vibración deberían ser distintos.

- *Objetivo 4:*

Las propiedades de adsorción se determinaron por la diferencia de concentración remanente en las disoluciones con analitos (cristal violeta y azul de metileno) luego de estar en contacto con los azopolímeros. Este procedimiento se realizó por mediciones en espectrofotometría UV-visible utilizando una curva de calibración en las concentraciones adecuadas.

- *Objetivo 5:*

Las propiedades de liberación se determinaron utilizando el material que mejor haya adsorbido (A2) y se le realizó un tratamiento con una disolución de etanol/agua con HCl 0.1 N, donde el cristal violeta y el azul de metileno liberado se cuantificaron por espectrofotometría UV-visible utilizando una curva de calibración. Los datos fueron tratados de acuerdo con un diseño factorial 2^2 con 5 réplicas por cada punto de medición: un total de 20 experimentos. Las cuantificaciones se evaluaron con un nivel de confianza al 95%.

Tabla 2

Diseño factorial 2^3 para determinar las propiedades de adsorción

Factores	Niveles
Concentración de colorante	50 ppm
	100 ppm
Colorante	Cristal violeta
	Azul de metileno
Azopolímero	Azopolímero A1
	Azopolímero A2

El proceso de toma de datos fue aleatorizado para eliminar el error experimental. Todos los experimentos se realizaron a temperatura ambiente.

Tabla 3

Diseño factorial 2^2 para determinar la capacidad de liberación del colorante adsorbido

Factores	Niveles
pH	3
	7
Disolvente	Agua
	Agua/etanol

El proceso de toma de datos fue aleatorizado para eliminar el error experimental. Todos los experimentos se realizaron a temperatura ambiente.

10.4 Técnicas e instrumentos

A continuación, se presentan las técnicas e instrumentos por objetivo específico.

- *Objetivos 1, 2 y 3:*

Para la síntesis se realizaron 5 réplicas de los materiales A1 y A2. Se utilizó 1 equivalente de floroglucinol en solución alcalina y en un rango de temperatura de 0-4 °C. Luego, en otro matraz se agregó la correspondiente dianilina (3 equivalentes) en una solución ácida en frío. Posteriormente se agregó una disolución acuosa de nitrito de sodio (3.2 equivalentes) al matraz que contiene la correspondiente dianilina en medio ácido, se agitó por 10-15 minutos (es importante que todo esté a una temperatura menor a 4 °C). Luego se agregó la mezcla de la dianilina ácida y nitrito de sodio al matraz con floroglucinol alcalino, y se dejó reaccionar por aproximadamente 20 minutos hasta temperatura ambiente. Ocurre la formación de un sólido que luego se filtra y se lava con agua fría, etanol frío y éter dietílico en frío. Los materiales se caracterizaron por espectroscopía FTIR-ATR.

- *Objetivo 4:*

Los estudios de adsorción se realizaron tomando 5 mg del material correspondiente (A1, A2), se dispersaron en 5 mL de agua destilada a temperatura ambiente y luego se agregó una disolución de 5 mL de cristal violeta o azul de metileno según la concentración que corresponda y la mezcla global se agitó vigorosamente (agitador magnético) a una velocidad determinada para analizar la capacidad de carga (adsorción) del material, determinando la concentración residual por medio de la ecuación

$$\text{Remoción \%} = \frac{C_0 - C_t}{C_0} * 100\% \quad (14)$$

donde C_0 (mg/L) es la concentración inicial y C_t (mg/L) es la concentración al tiempo t (min).

La capacidad de adsorción en un tiempo específico se obtiene por medio de la ecuación

$$q_t = \frac{(C_0 - C_t) V}{m} \quad (15)$$

donde q_t (mg/g) es la capacidad de adsorción en un tiempo específico t (min), V (L) indica el volumen de la disolución y m (g) representa la masa del adsorbente (material) utilizado. La determinación de

crystal violeta y azul de metileno se realizó por espectrofotometría UV-visible utilizando una curva de calibración con al menos 8 puntos en el rango de 25 a 150 ppm.

- *Objetivo 5:*

El experimento de liberación consistió en utilizar 50 mg del azopolímero con las mejores propiedades de adsorción (ver recolección de información del Objetivo 4). Se agregaron en 100 mL de una disolución de 100 ppm de azul de metileno y cristal violeta correspondientemente, con agitación por 12 horas. Después de adsorber los colorantes, el material se regeneró filtrando y lavando con un disolvente a un pH ácido y a un pH neutro. Los remanentes obtenidos de los lavados se cuantificaron por espectrofotometría UV-visible con su correspondiente curva de calibración.

10.5 Procesamiento y análisis de la información

La caracterización espectroscópica por FTIR es un método que sirve para poder interpretar la presencia o ausencia de grupos funcionales en una molécula, relacionado con el átomo, sus enlaces y el entorno de la molécula, la cual sirve para interpretar la síntesis de los materiales poliméricos esperados.

La cuantificación de cristal violeta y azul de metileno adsorbido se llevó a cabo por espectrofotometría UV-vis debido que son moléculas que poseen un coeficiente de absorción molar grande y en longitudes de onda en el rango visible, lo cual hace factible su medición a concentraciones bajas. La cuantificación se realizó haciendo una curva de calibración para cada concentración con 8 puntos cada una; 50 ppm (10, 20, 25, 30, 35, 40, 50, 60 ppm); 100 ppm (40, 50, 60, 70, 80, 90, 100, 110 ppm). La correlación debe de ser lineal con un R mayor al 98%.

Los datos de adsorción sobre el material se analizaron por medio de un diseño de tres factores (material, contaminante y concentración del contaminante) y dos niveles.

La cuantificación de cristal violeta y azul de metileno liberado se llevó a cabo por espectrofotometría UV-vis debido que son moléculas que poseen un coeficiente de absorción molar grande y en longitudes de onda en el visible, lo cual hace factible su medición a concentraciones bajas.

La cuantificación se realizó haciendo una curva de calibración para cada concentración con 8 puntos cada una. En este caso, dependiendo de la recuperación de contaminante colorante así será la curva de calibración. La correlación debe de ser lineal con un R mayor al 98%.

Los datos de liberación del colorante se analizaron por medio de un diseño de dos factores (pH y disolvente) y dos niveles (pH: 3 y 7, disolvente: agua y agua/etanol).

11 Resultados y discusión

11.1 Resultados

Figura 1

Reacción general para la síntesis de azopolímero sulfonado A1

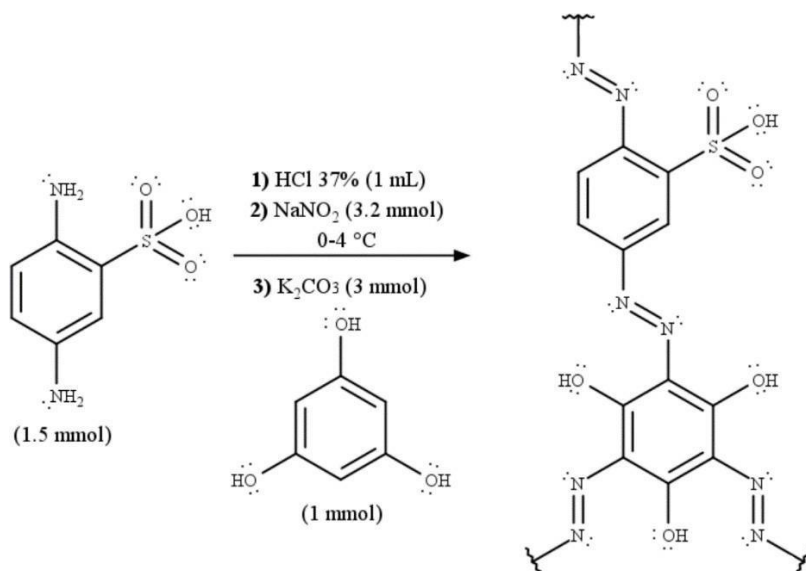


Figura 2

Reacción general para la síntesis de azopolímero sulfonado A2

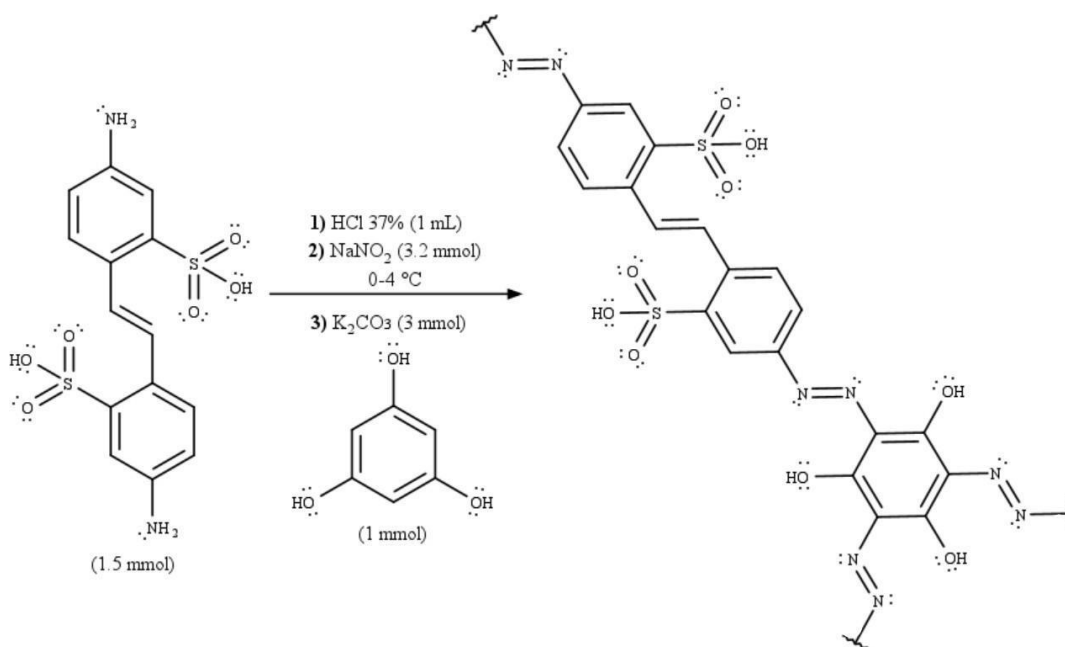


Tabla 4

Parámetros cinéticos para la adsorción de azul de metileno (50 ppm) por A2 a 25 °C

Modelo	Parámetros	Primera Repetición	Segunda Repetición	Tercera Repetición
Pseudo-primero orden	q_e teórico (mg/g)	225.65	172.44	289.36
	q_e experimental (mg/g)	196.37	165.42	236.77
	k_1 (min^{-1})	0.089	0.081	0.073
	R^2	0.980	0.980	0.976
Pseudo-segundo orden	q_e teórico (mg/g)	227.18	186.95	300.08
	q_e experimental (mg/g)	196.37	165.42	236.77
	k_2 ($\text{g}\cdot\text{mg}^{-1}\cdot\text{min}^{-1}$)	0.0005	0.0006	0.0002
	R^2	0.995	0.995	0.991
Difusión intrapartícula	k_p ($\text{mg}\cdot\text{g}^{-1}\cdot\text{min}^{-0.5}$)	24.58	19.21	30.40
	C (mg/g)	19.75	21.38	4.41
	R^2	0.944	0.911	0.958
Elovich	α ($\text{mg}\cdot\text{g}^{-1}\cdot\text{min}^{-1}$)	60.03	51.60	47.42
	β (g/mg)	0.022	0.027	0.017
	R^2	0.975	0.969	0.969

Tabla 5

Parámetros cinéticos para la adsorción de azul de metileno (100 ppm) por A2 a 25 °C

Modelo	Parámetros	Primera Repetición	Segunda Repetición	Tercera Repetición
Pseudo-primero orden	q_e teórico (mg/g)	435.96	300.30	534.07
	q_e experimental (mg/g)	463.25	451.99	455.49
	k_1 (min^{-1})	0.018	0.013	0.035
	R^2	0.994	0.921	0.909
Pseudo-segundo orden	q_e teórico (mg/g)	540.00	457.95	554.38
	q_e experimental (mg/g)	463.25	451.99	455.49
	k_2 ($\text{g}\cdot\text{mg}^{-1}\cdot\text{min}^{-1}$)	0.00004	0.00012	0.00006
	R^2	0.963	0.997	0.996
Difusión intrapartícula	k_p ($\text{mg}\cdot\text{g}^{-1}\cdot\text{min}^{-0.5}$)	41.74	31.02	39.40
	C (mg/g)	-20.46	65.00	24.96
	R^2	0.990	0.903	0.940
Elovich	α ($\text{mg}\cdot\text{g}^{-1}\cdot\text{min}^{-1}$)	44.88	77.81	48.32
	β (g/mg)	0.012	0.012	0.009
	R^2	0.919	0.978	0.987

Tabla 6

Parámetros cinéticos para la adsorción de azul de metileno (200 ppm) por A2 a 25 °C

Modelo	Parámetros	Primera Repetición	Segunda Repetición
Pseudo-primero orden	q_e teórico (mg/g)	538.01	607.17
	q_e experimental (mg/g)	619.87	763.76
	k_1 (min^{-1})	0.010	0.006
	R^2	0.876	0.867
Pseudo-segundo orden	q_e teórico (mg/g)	674.61	739.16
	q_e experimental (mg/g)	619.87	763.76
	k_2 ($\text{g}\cdot\text{mg}^{-1}\cdot\text{min}^{-1}$)	0.00003	0.00003
	R^2	0.919	0.944
Difusión intrapartícula	k_p ($\text{mg}\cdot\text{g}^{-1}\cdot\text{min}^{-0.5}$)	39.83	44.16
	C (mg/g)	27.02	15.11
	R^2	0.973	0.935
Elovich	α ($\text{mg}\cdot\text{g}^{-1}\cdot\text{min}^{-1}$)	50.88	41.85
	β (g/mg)	0.009	0.007
	R^2	0.887	0.936

Figura 3

Modelo de pseudo-primer orden para la adsorción de azul de metileno (50 ppm) por A2 a 25 °C

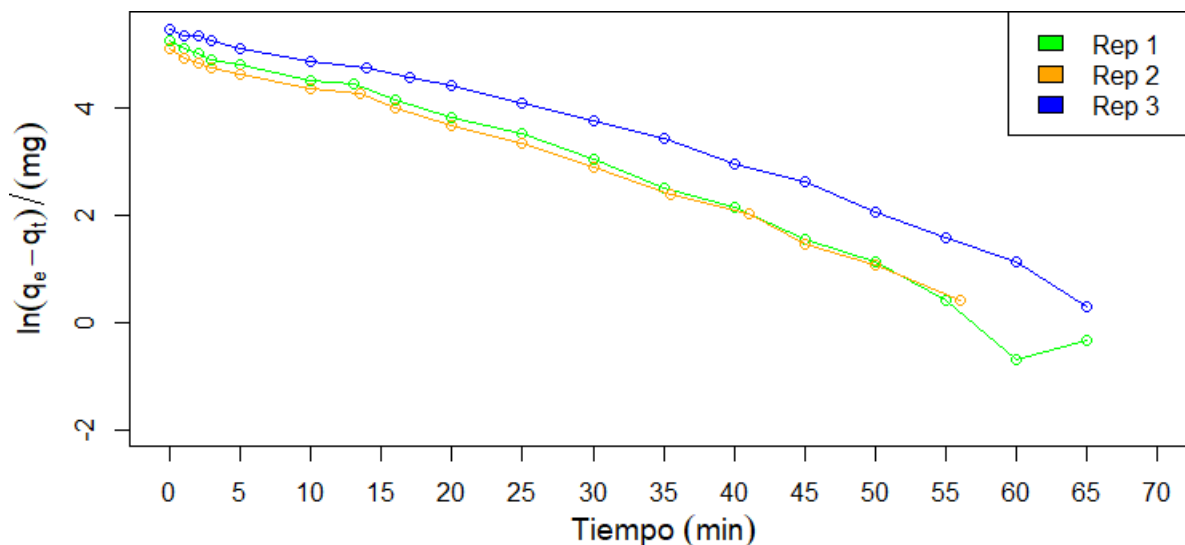


Figura 4

Modelo de pseudo-primer orden para la adsorción de azul de metileno (100 ppm) por A2 a 25 °C

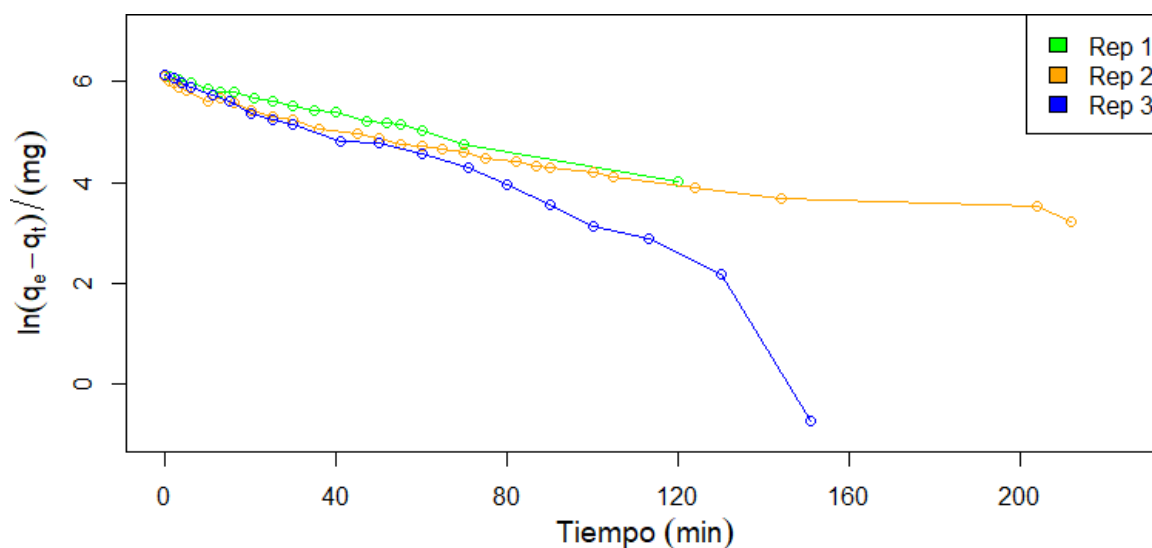


Figura 5

Modelo de pseudo-primer orden para la adsorción de azul de metileno (200 ppm) por A2 a 25 °C

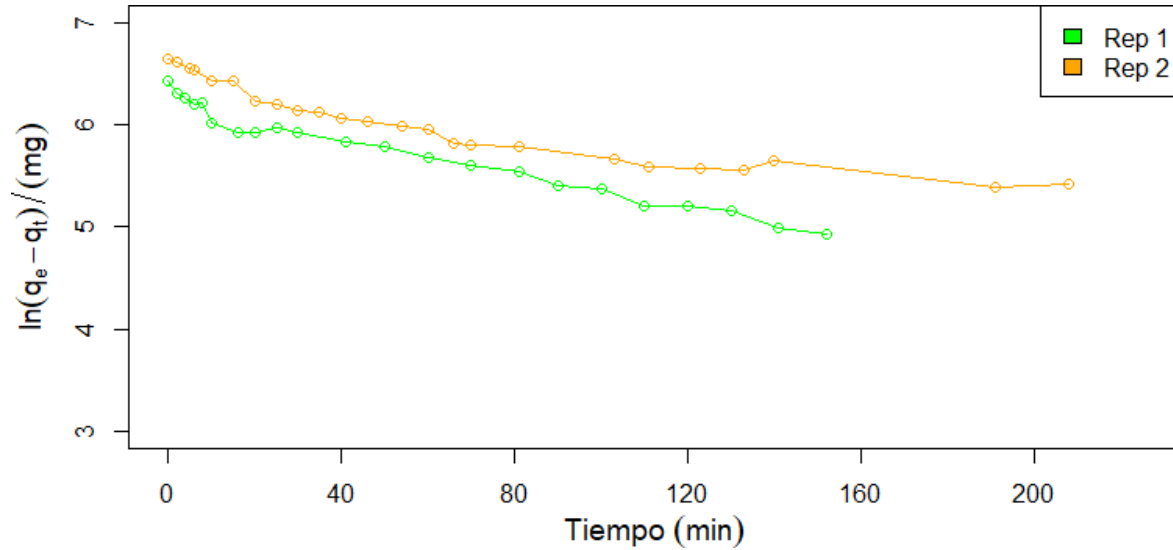


Figura 6

Modelo de pseudo-segundo orden para la adsorción de azul de metileno (50 ppm) por A2 a 25 °C

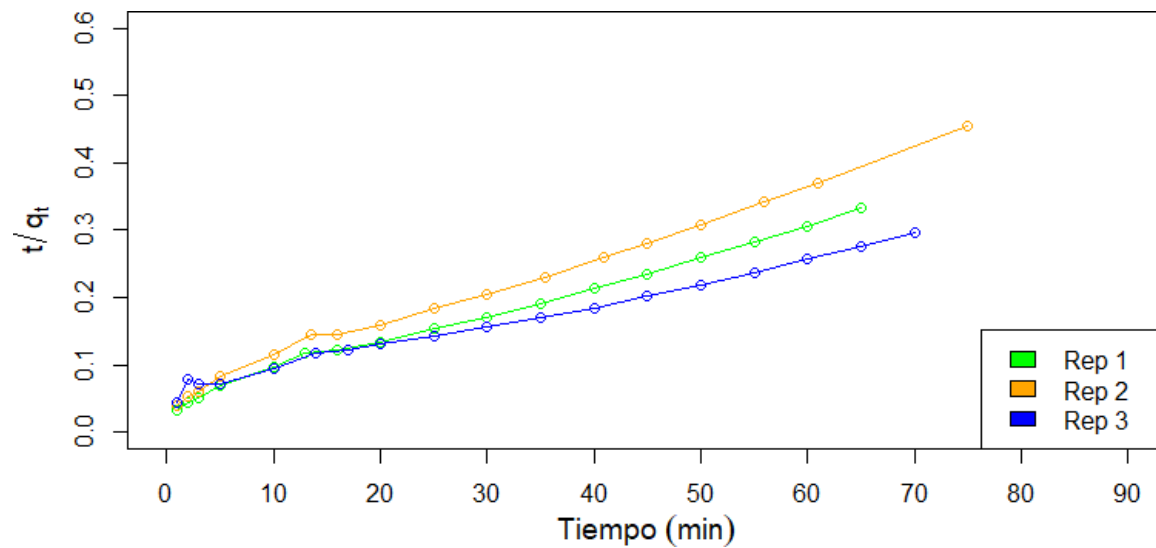


Figura 7

Modelo de pseudo-segundo orden para la adsorción de azul de metileno (100 ppm) por A2 a 25 °C

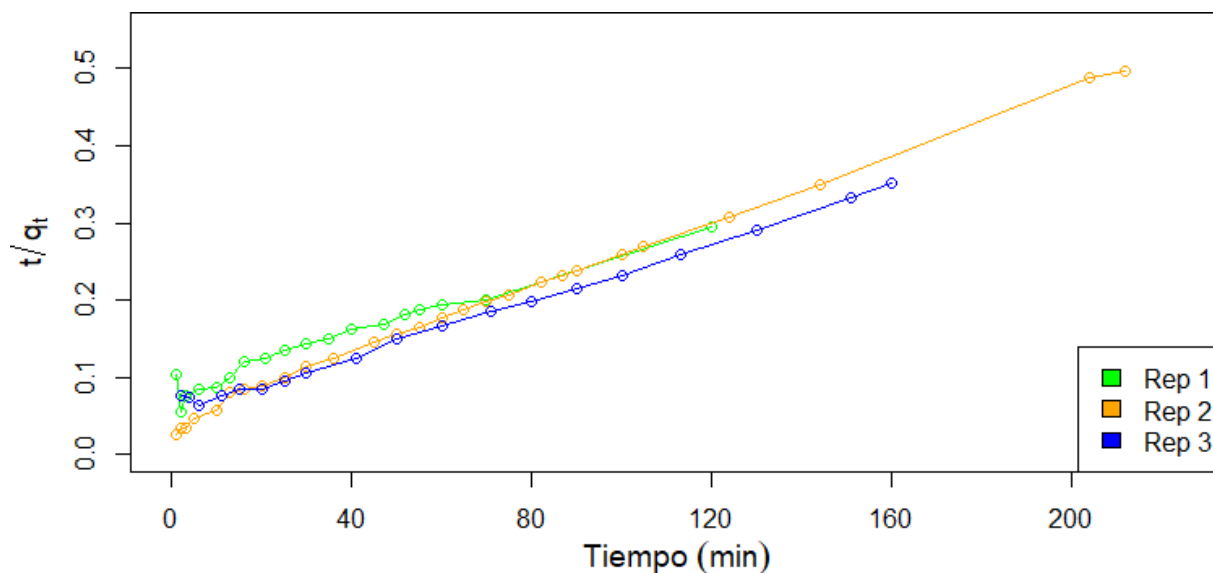


Figura 8

Modelo de pseudo-segundo orden para la adsorción de azul de metileno (200 ppm) por A2 a 25 °C

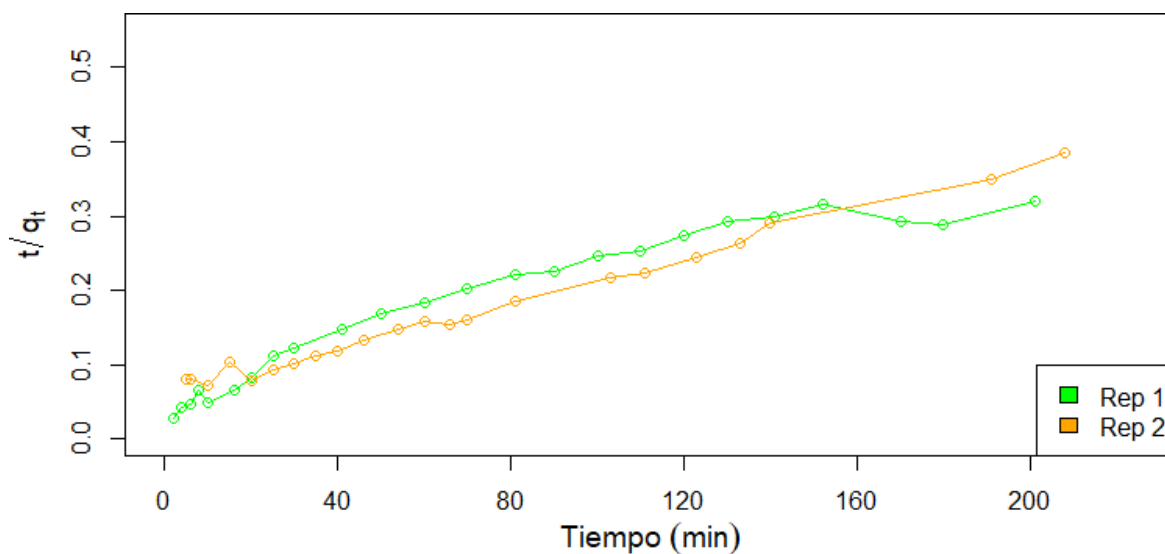


Figura 9

Modelo de difusión intrapartícula para la adsorción de azul de metileno (50 ppm) por A2 a 25 °C

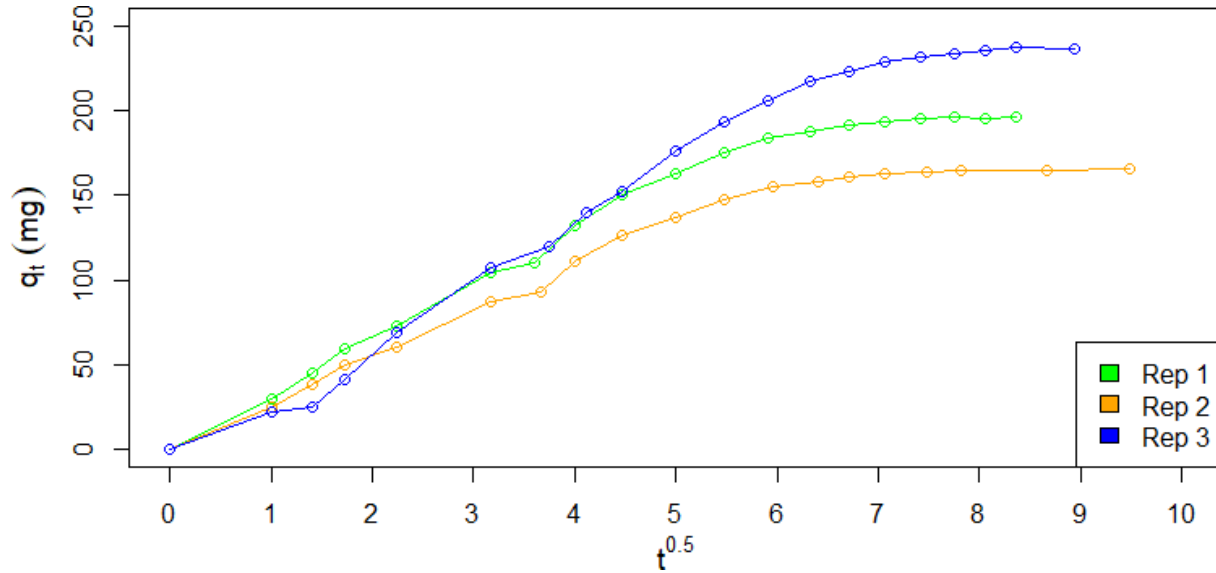


Figura 10

Modelo de difusión intrapartícula para la adsorción de azul de metileno (100 ppm) por A2 a 25 °C

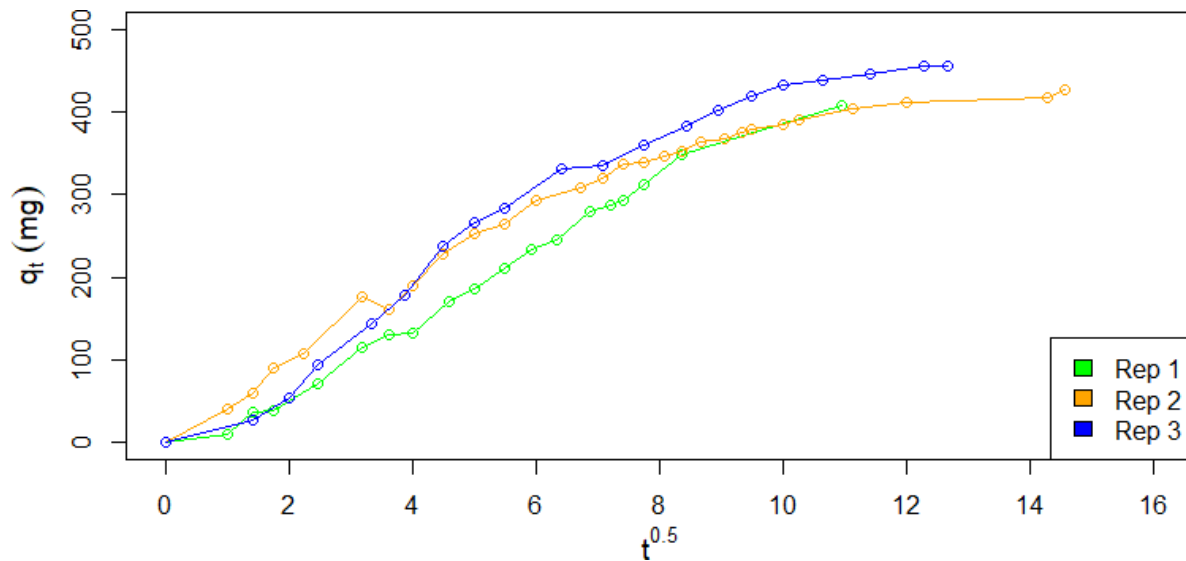


Figura 11

Modelo de difusión intrapartícula para la adsorción de azul de metileno (200 ppm) por A2 a 25 °C

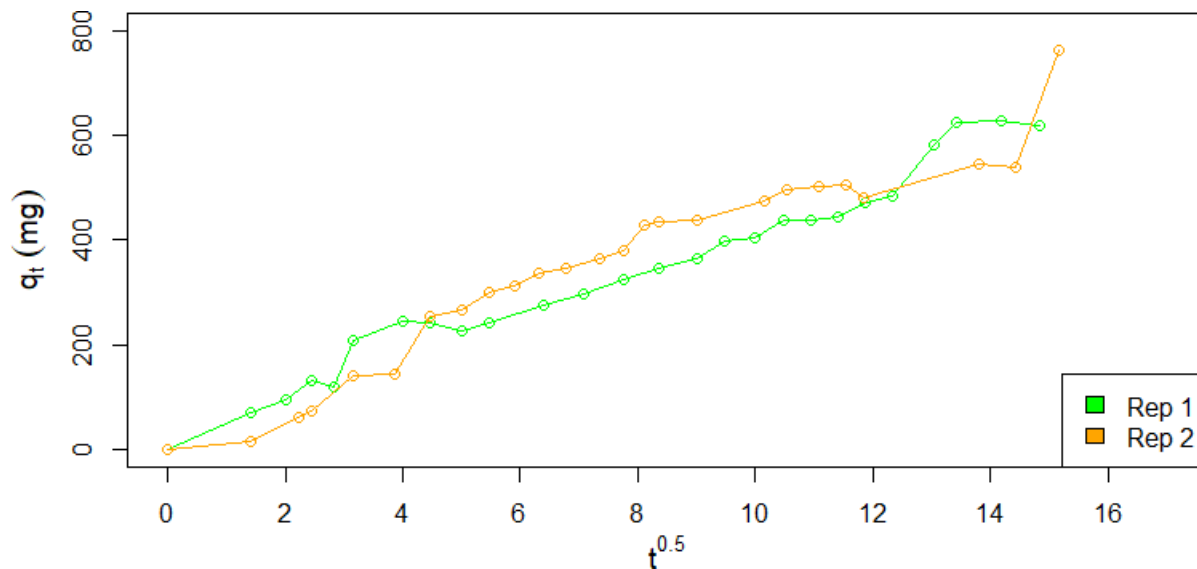


Figura 12

Modelo de Elovich para la adsorción de azul de metileno (50 ppm) por A2 a 25 °C

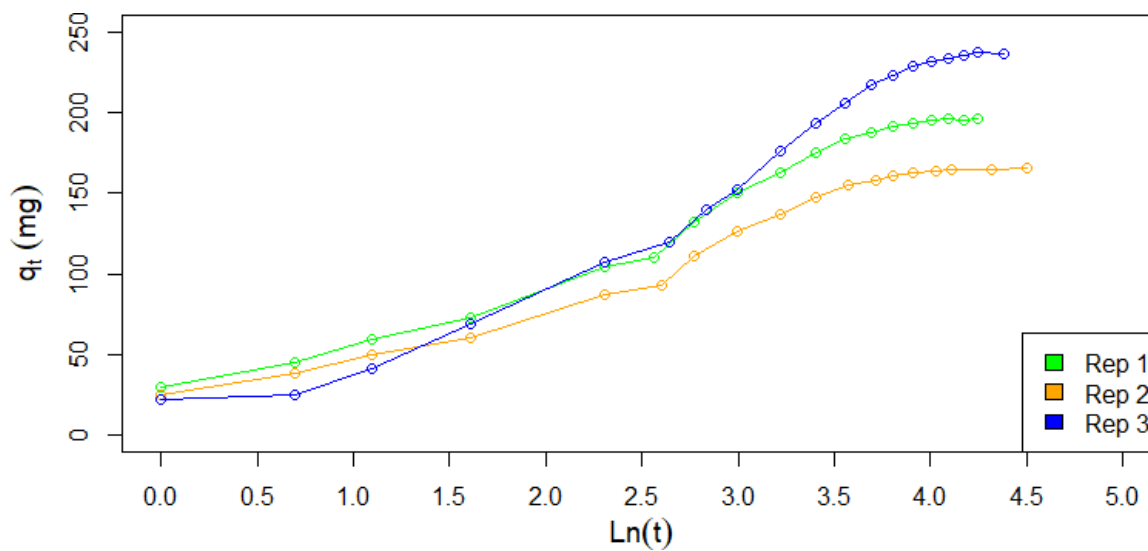


Figura 13

Modelo de Elovich para la adsorción de azul de metileno (100 ppm) por A2 a 25 °C

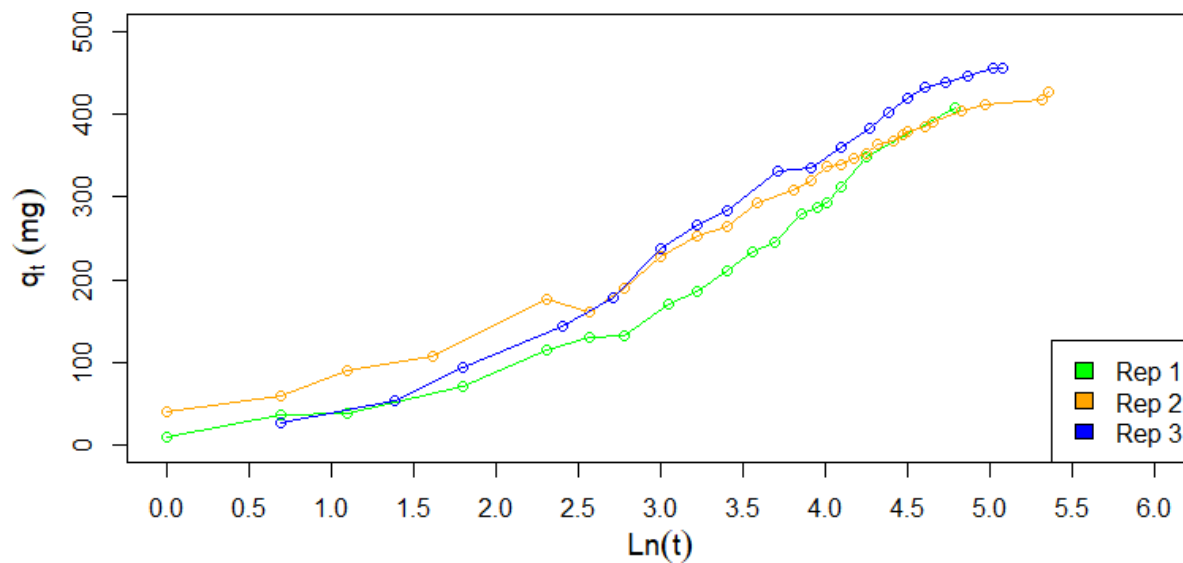


Figura 14

Modelo de Elovich para la adsorción de azul de metileno (200 ppm) por A2 a 25 °C

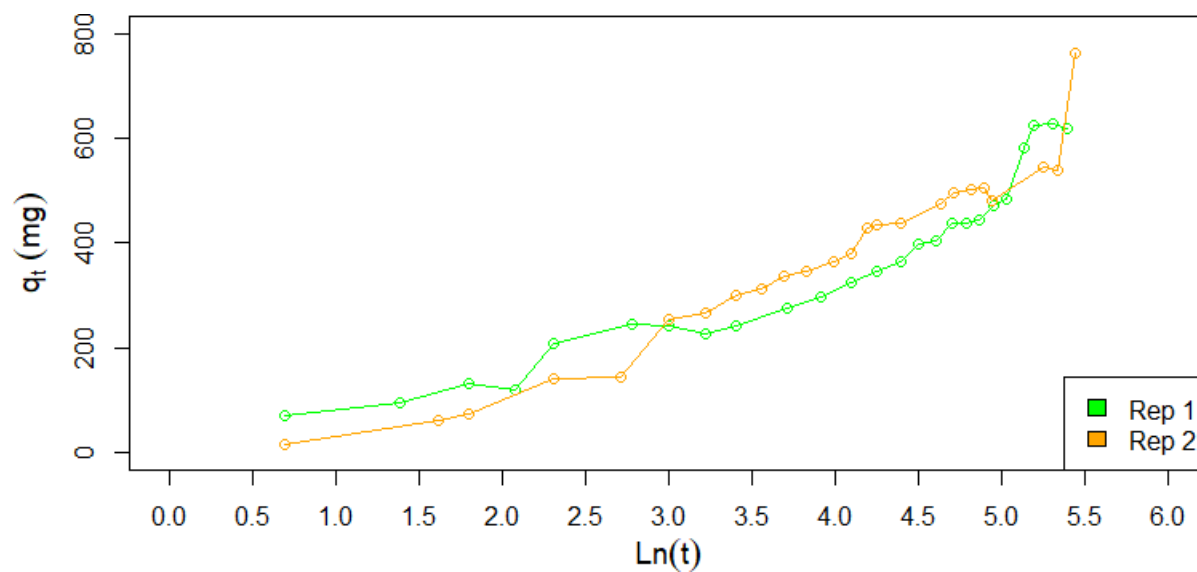


Tabla 7

Parámetros cinéticos para la adsorción de cristal violeta (50 ppm) por A2 a 25 °C

Modelo	Parámetros	Primera Repetición	Segunda Repetición
Pseudo-primero orden	q_e teórico (mg/g)	237.36	182.41
	q_e experimental (mg/g)	265.20	167.25
	k_1 (min^{-1})	0.010	0.020
	R^2	0.992	0.949
Pseudo-segundo orden	q_e teórico (mg/g)	287.82	260.88
	q_e experimental (mg/g)	265.20	167.25
	k_2 ($\text{g}\cdot\text{mg}^{-1}\cdot\text{min}^{-1}$)	0.00006	0.00004
	R^2	0.967	0.896
Difusión intrapartícula	k_p ($\text{mg}\cdot\text{g}^{-1}\cdot\text{min}^{-0.5}$)	14.87	15.34
	C (mg/g)	14.38	-15.37
	R^2	0.958	0.988
Elovich	α ($\text{mg}\cdot\text{g}^{-1}\cdot\text{min}^{-1}$)	19.39	9.58
	β (g/mg)	0.022	0.024
	R^2	0.916	0.918

Tabla 8

Parámetros cinéticos para la adsorción de cristal violeta (100 ppm) por A2 a 25 °C

Modelo	Parámetros	Primera Repetición	Segunda Repetición
Pseudo-primero orden	q_e teórico (mg/g)	223.81	322.47
	q_e experimental (mg/g)	204.80	298.63
	k_1 (min^{-1})	0.016	0.005
	R^2	0.969	0.952
Pseudo-segundo orden	q_e teórico (mg/g)	400.59	42.43
	q_e experimental (mg/g)	204.80	298.63
	k_2 ($\text{g}\cdot\text{mg}^{-1}\cdot\text{min}^{-1}$)	0.00002	-0.00046
	R^2	0.910	0.135
Difusión intrapartícula	k_p ($\text{mg}\cdot\text{g}^{-1}\cdot\text{min}^{-0.5}$)	18.08	13.41
	C (mg/g)	-26.59	-45.12
	R^2	0.972	0.872
Elovich	α ($\text{mg}\cdot\text{g}^{-1}\cdot\text{min}^{-1}$)	8.42	3.37
	β (g/mg)	0.018	0.021
	R^2	0.897	0.917

Tabla 9

Parámetros cinéticos para la adsorción de cristal violeta (200 ppm) por A2 a 25 °C

Modelo	Parámetros	
Pseudo-primer orden	q_e teórico (mg/g)	318.74
	q_e experimental (mg/g)	321.66
	k_1 (min^{-1})	0.003
	R^2	0.955
Pseudo-segundo orden	q_e teórico (mg/g)	402.60
	q_e experimental (mg/g)	321.66
	k_2 ($\text{g}\cdot\text{mg}^{-1}\cdot\text{min}^{-1}$)	0.000006
	R^2	0.749
Difusión intrapartícula	k_p ($\text{mg}\cdot\text{g}^{-1}\cdot\text{min}^{-0.5}$)	8.18
	C (mg/g)	-7.12
	R^2	0.965
Elovich	α ($\text{mg}\cdot\text{g}^{-1}\cdot\text{min}^{-1}$)	3.91
	β (g/mg)	0.024
	R^2	0.718

Figura 15

Modelo de pseudo-primer orden para la adsorción de cristal violeta (50 ppm) por A2 a 25 °C

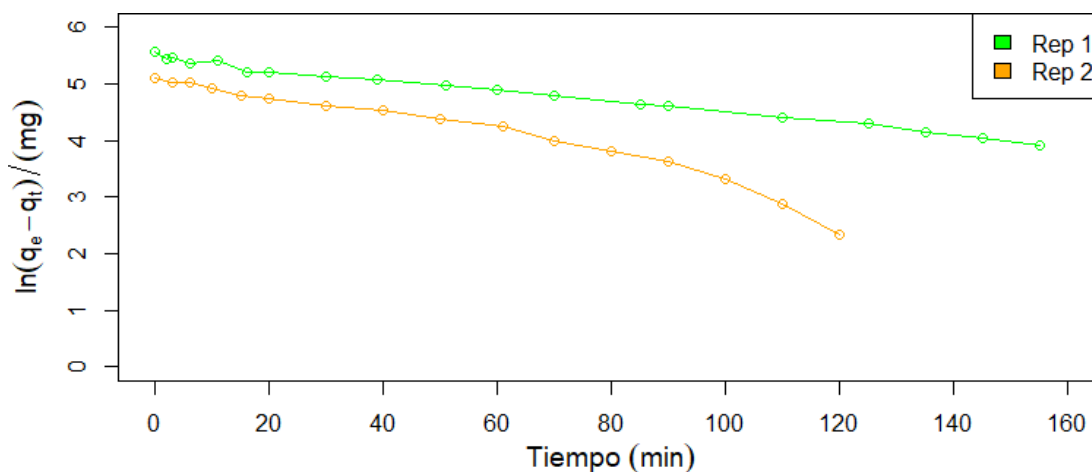


Figura 16

Modelo de pseudo-primer orden para la adsorción de cristal violeta (100 ppm) por A2 a 25 °C

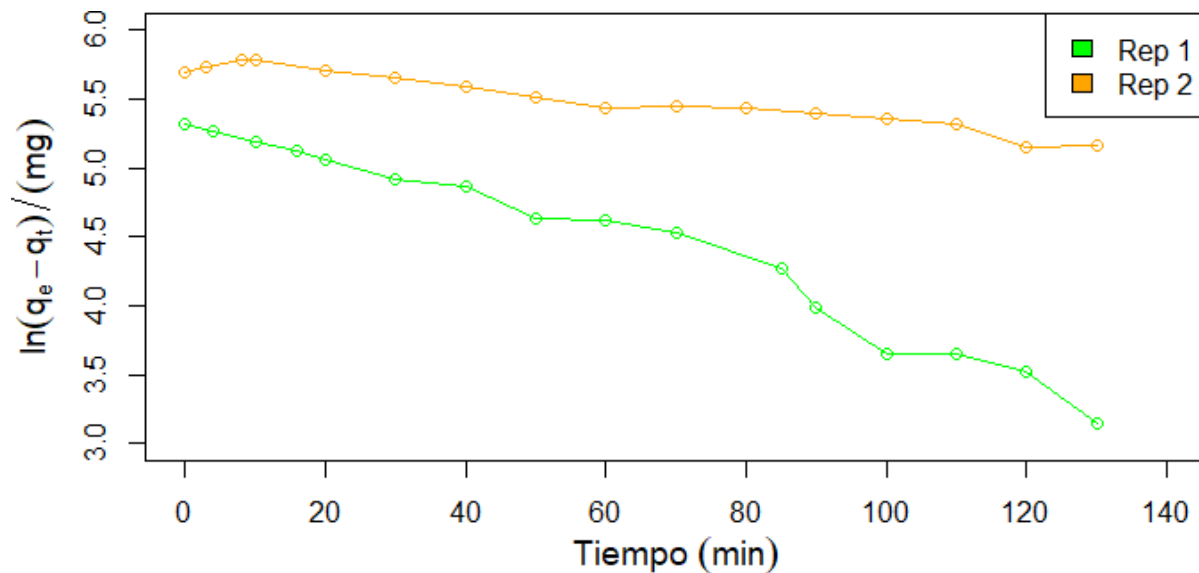


Figura 17

Modelo de pseudo-primer orden para la adsorción de cristal violeta (200 ppm) por A2 a 25 °C

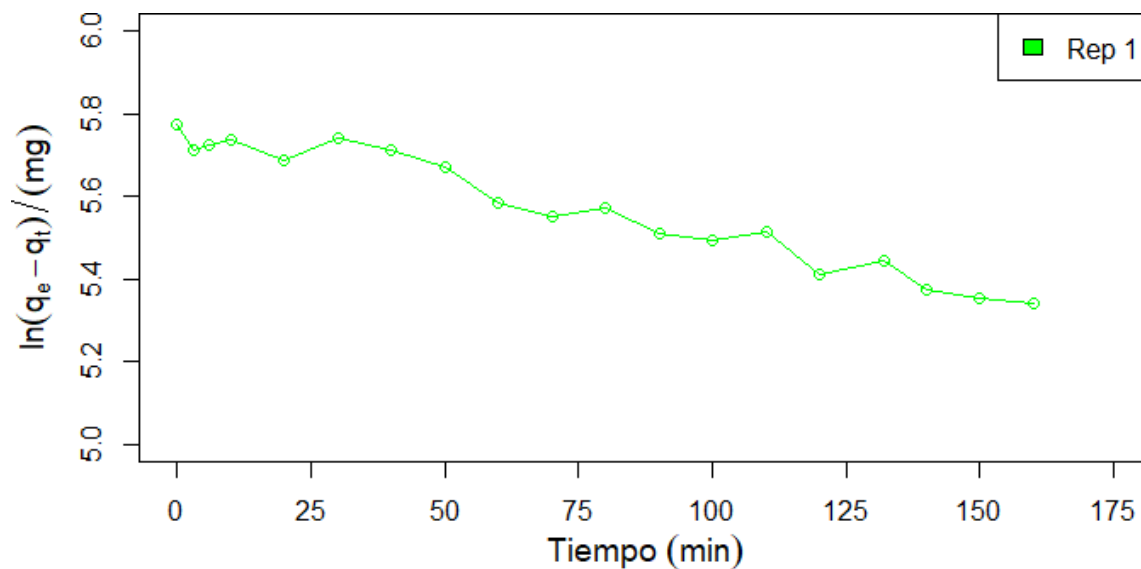


Figura 18

Modelo de pseudo-segundo orden para la adsorción de cristal violeta (50 ppm) por A2 a 25 °C

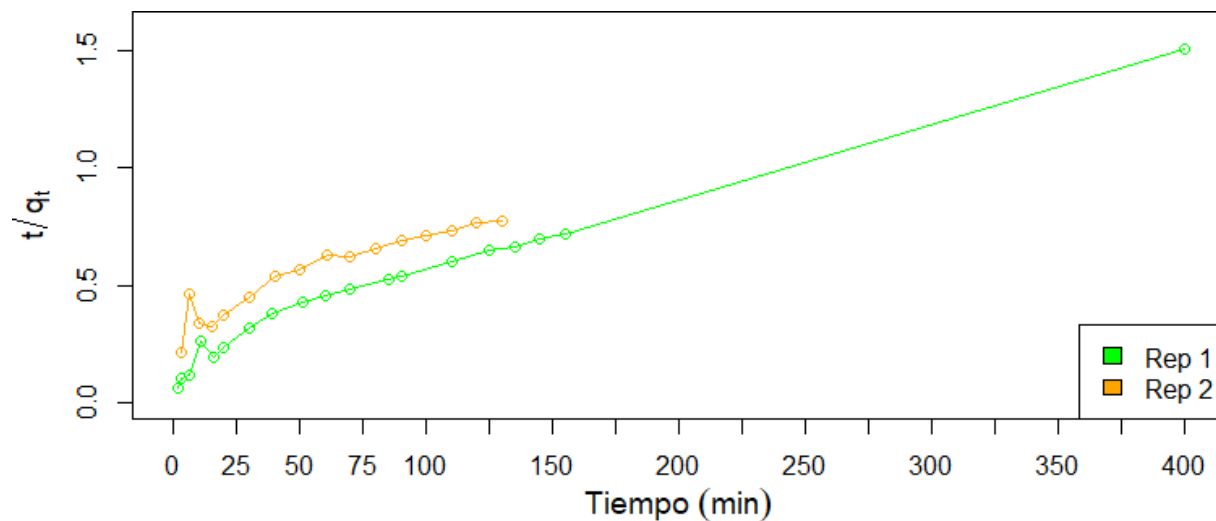


Figura 19

Modelo de pseudo-segundo orden para la adsorción de cristal violeta (100 ppm) por A2 a 25 °C

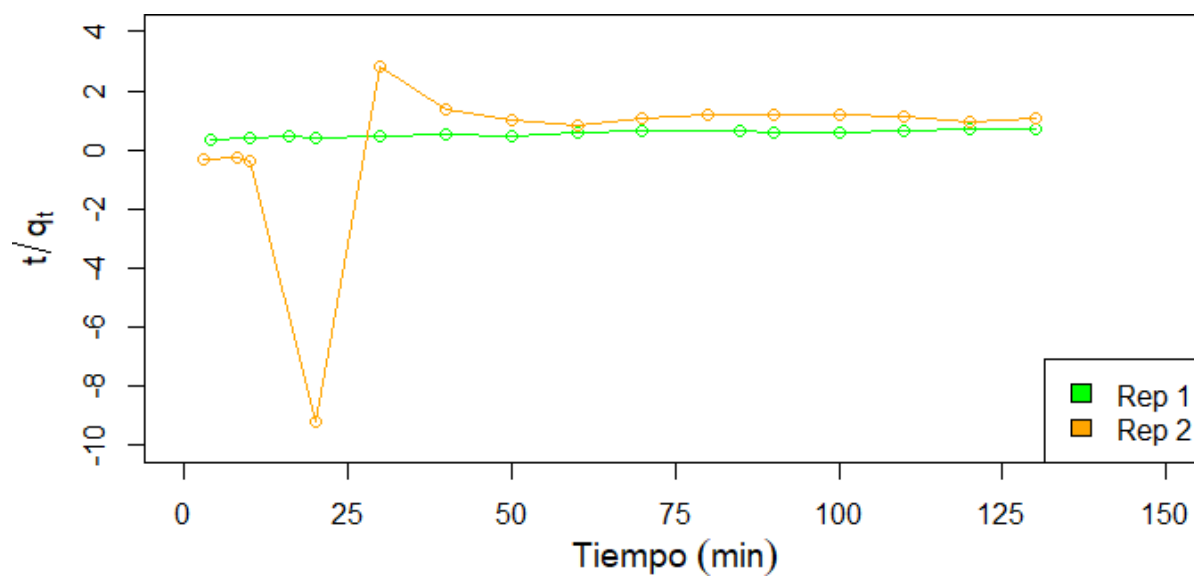


Figura 20

Modelo de pseudo-segundo orden para la adsorción de cristal violeta (200 ppm) por A2 a 25 °C

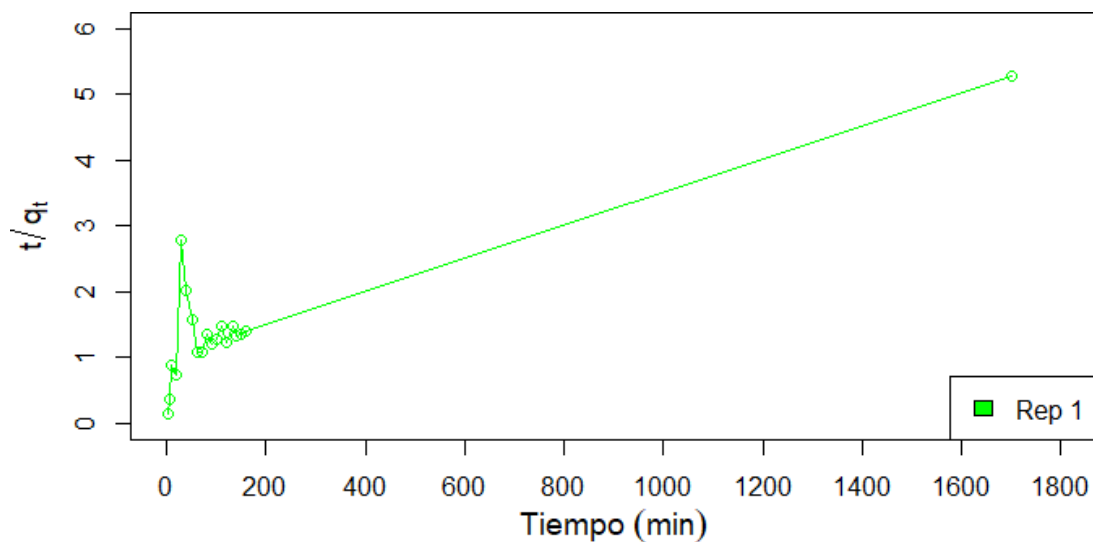


Figura 21

Modelo de difusión intrapartícula para la adsorción de cristal violeta (50 ppm) por A2 a 25 °C

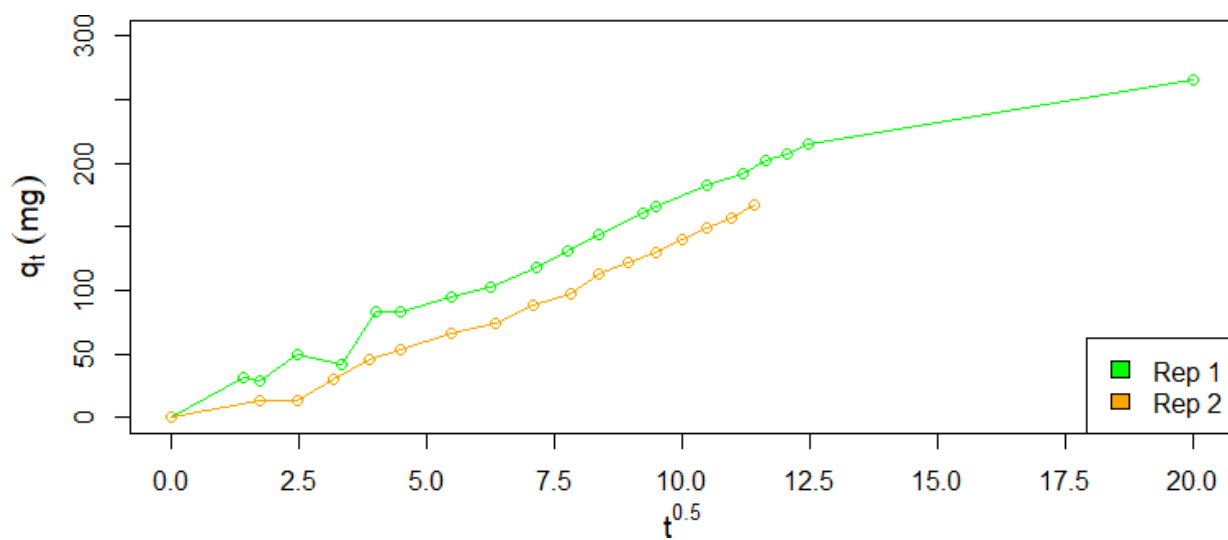


Figura 22

Modelo de difusión intrapartícula para la adsorción de cristal violeta (100 ppm) por A2 a 25 °C

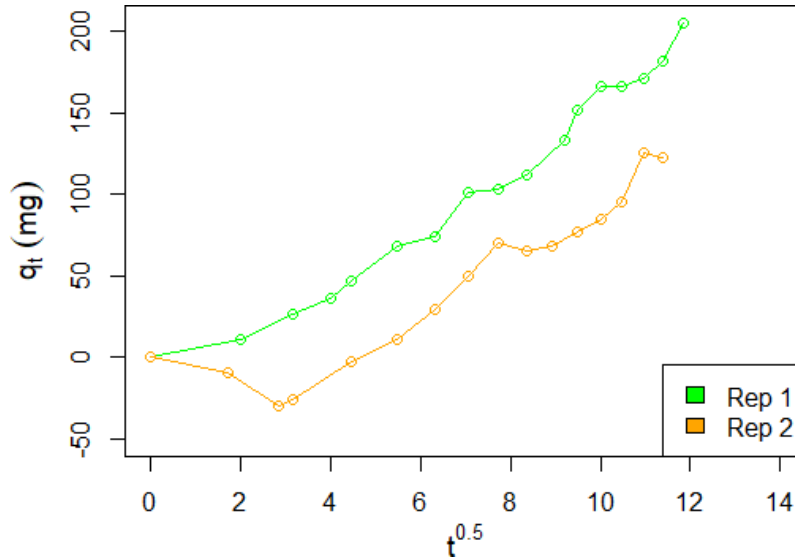


Figura 23

Modelo de difusión intrapartícula para la adsorción de cristal violeta (200 ppm) por A2 a 25 °C

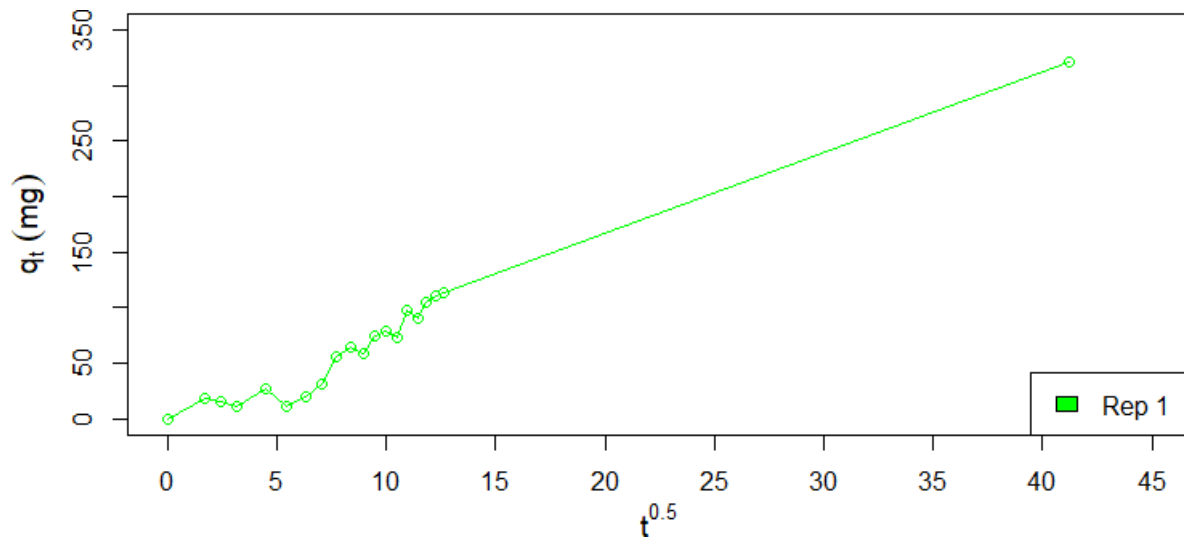


Figura 24

Modelo de Elovich para la adsorción de cristal violeta (50 ppm) por A2 a 25 °C

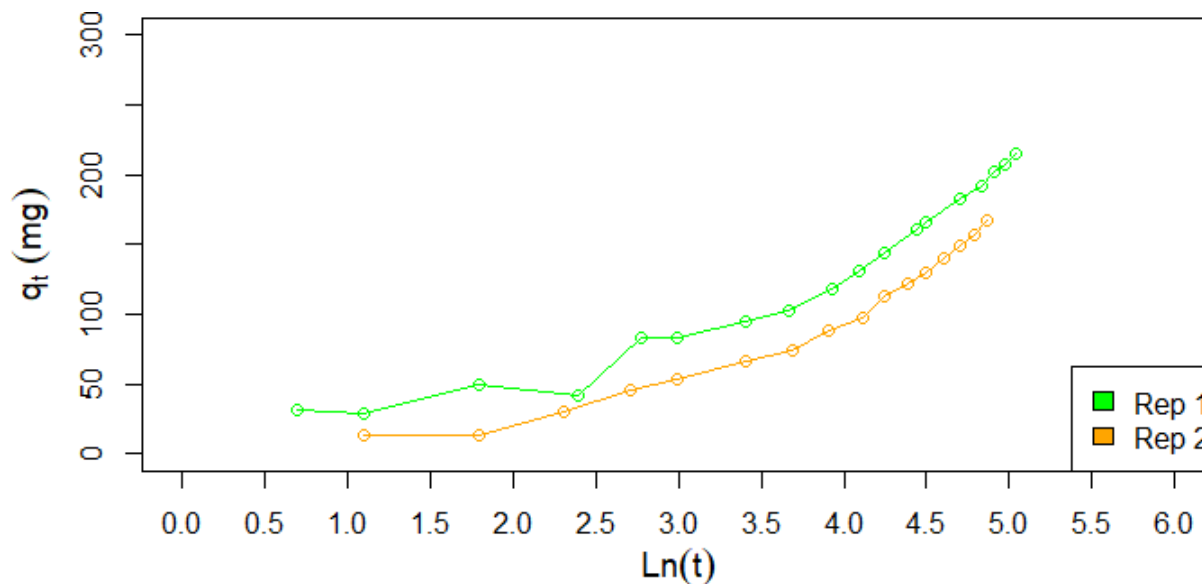


Figura 25

Modelo de Elovich para la adsorción de cristal violeta (100 ppm) por A2 a 25 °C

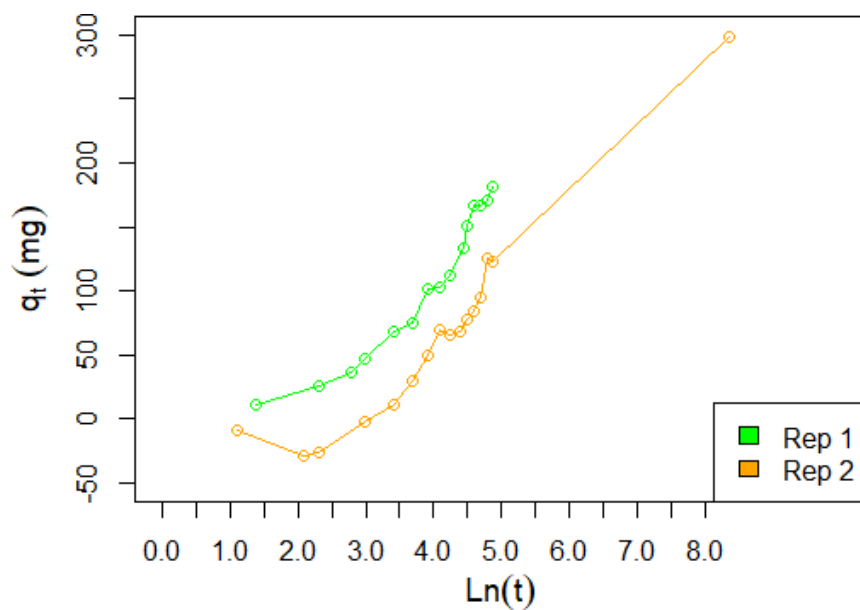


Figura 26

Modelo de Elovich para la adsorción de cristal violeta (200 ppm) por A2 a 25 °C

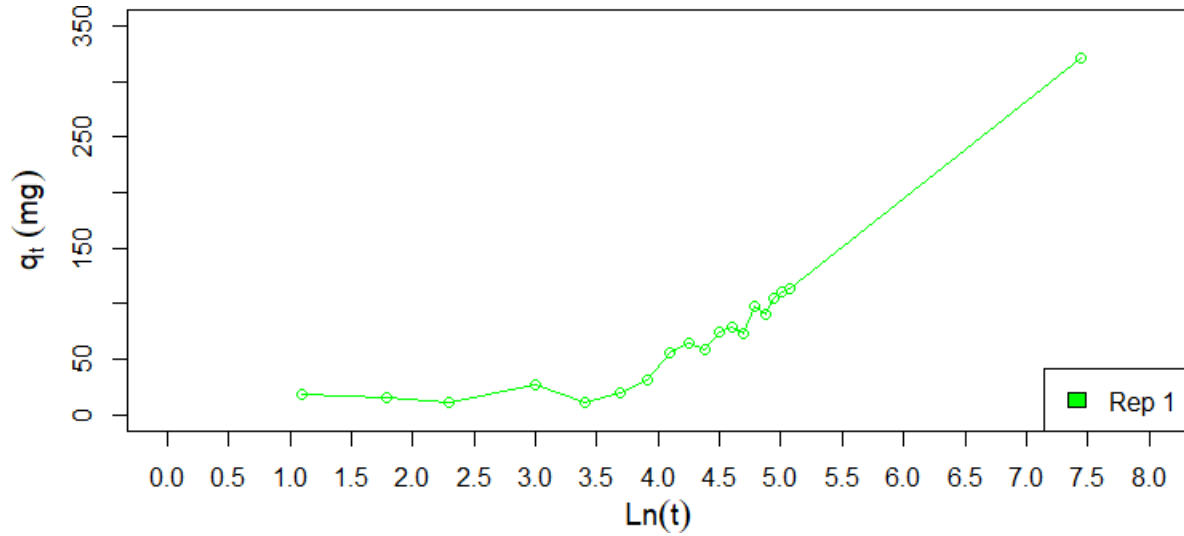


Tabla 10

Parámetros de modelos de isotermas de la adsorción de azul de metileno por A2

Modelo	Parámetros y Factores	25 °C (298.15 K)	30 °C (303.15 K)	40 °C (313.15 K)
Langmuir	$q_{máx}$ (mg/g)	2071.43	4220.12	9249.52
	K_L (L/mg)	0.0027	0.0012	0.0005
	R_L	0.483-0.882	0.805-0.943	0.832-0.995
	R^2	0.969	0.997	0.997
Freundlich	$1/n$	0.621	0.893	0.828
	K_F (L/g)	24.94	7.39	8.46
	R^2	0.873	0.994	0.955
Temkin	A_T (L/mg)	0.047	0.033	0.078
	b_T (J·g·mol ⁻¹ ·mg ⁻¹)	7.90	6.08	10.63
	R^2	0.904	0.967	0.930
Halsey	n_H	-1.61	-1.12	-1.21
	K_H (mg ² ·g ⁻¹ ·L ⁻¹)	178.00	9.39	13.16
	R^2	0.873	0.994	0.955
Jovanovich	$q_{máx}$ (mg/g)	310.43	183.85	129.70
	K_J (L/mg)	-0.003	-0.008	-0.006
	R^2	0.643	0.931	0.620

Tabla 11

Parámetros termodinámicos según el modelo de Langmuir para la adsorción de azul de metileno por A2

Temperatura	K_c	ΔG° (kJ/mol)	ΔH° (kJ/mol)	ΔS° (J·mol ⁻¹ ·K ⁻¹)	Ecuación de van't Hoff
25 °C (298.15 K)	47578.66	-26.70			
30 °C (303.15 K)	21502.48	-25.14	-84.12	-193.38	$y = 10118x - 23.258$ $R^2 = 0.978$
40 °C (313.15 K)	8959.88	-23.69			

Figura 27

Isoterma de Langmuir ajustada a los datos obtenidos de la adsorción de azul de metileno por A2

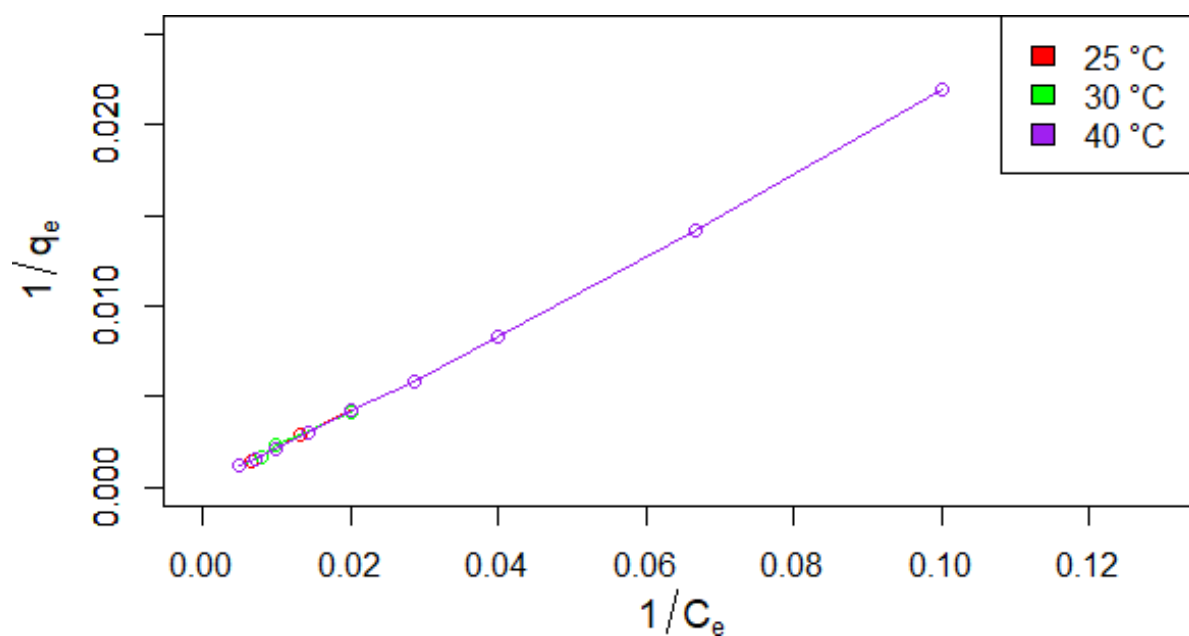


Figura 28

Isoterma de Freundlich ajustada a los datos obtenidos de la adsorción de azul de metileno por A2

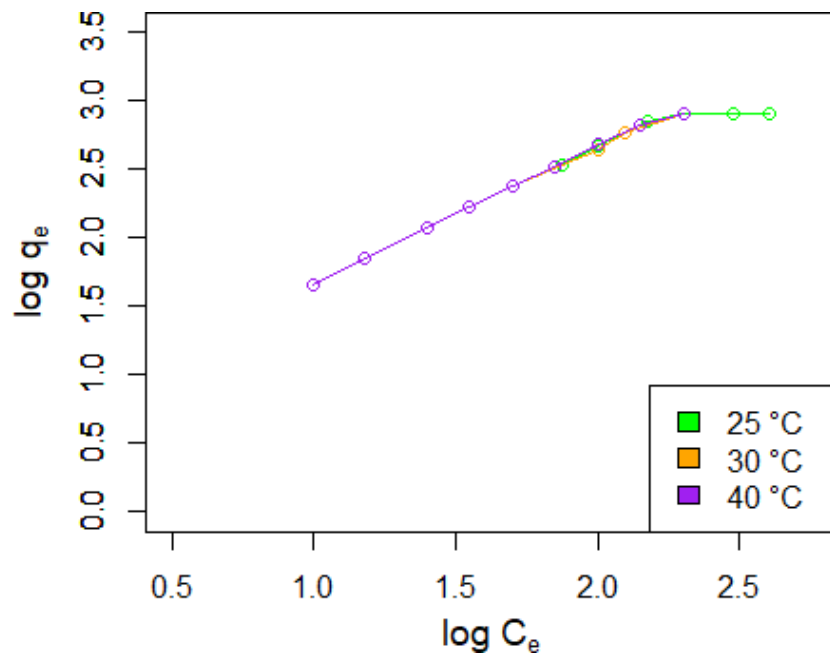


Figura 29

Isoterma de Temkin ajustada a los datos obtenidos de la adsorción de azul de metileno por A2

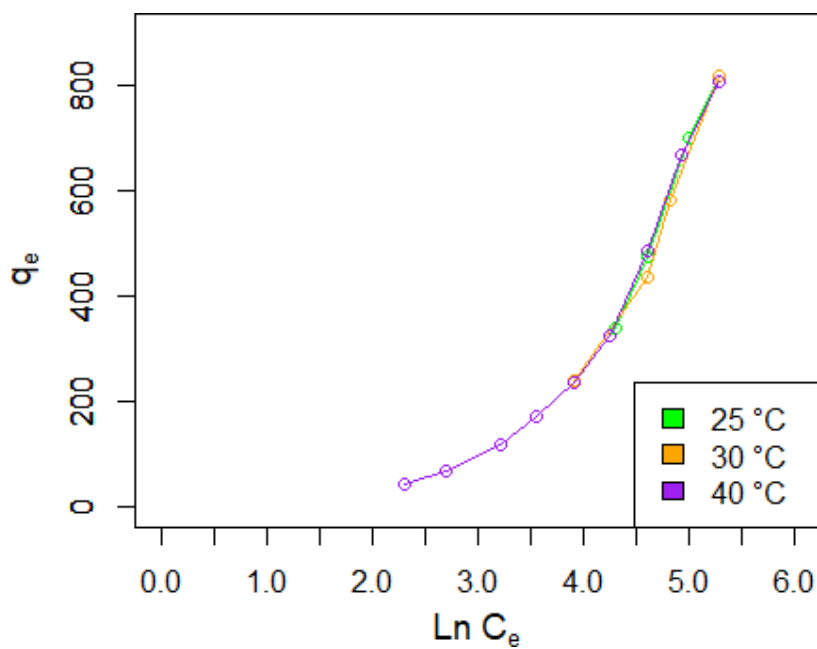


Figura 30

Isoterma de Halsey ajustada a los datos obtenidos de la adsorción de azul de metileno por A2

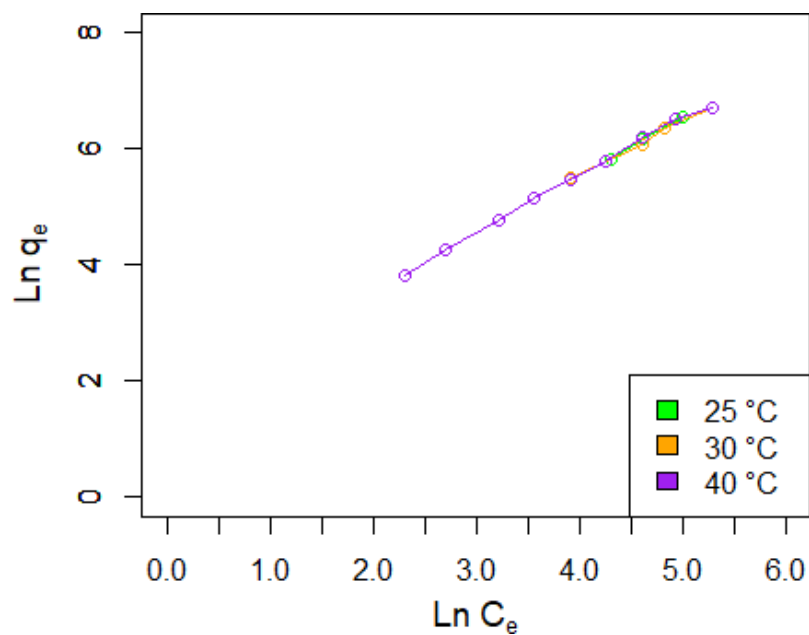


Figura 31

Isoterma de Jovanovich ajustada a los datos obtenidos de la adsorción de azul de metileno por A2

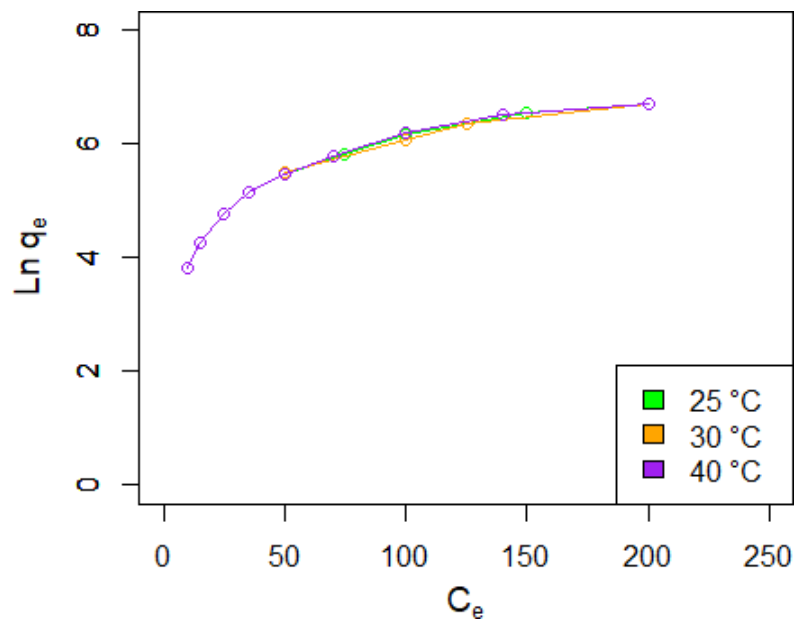


Figura 32

Análisis termogravimétrico del azopolímero sintetizado a partir de ácido 2,5-diaminobencensulfónico

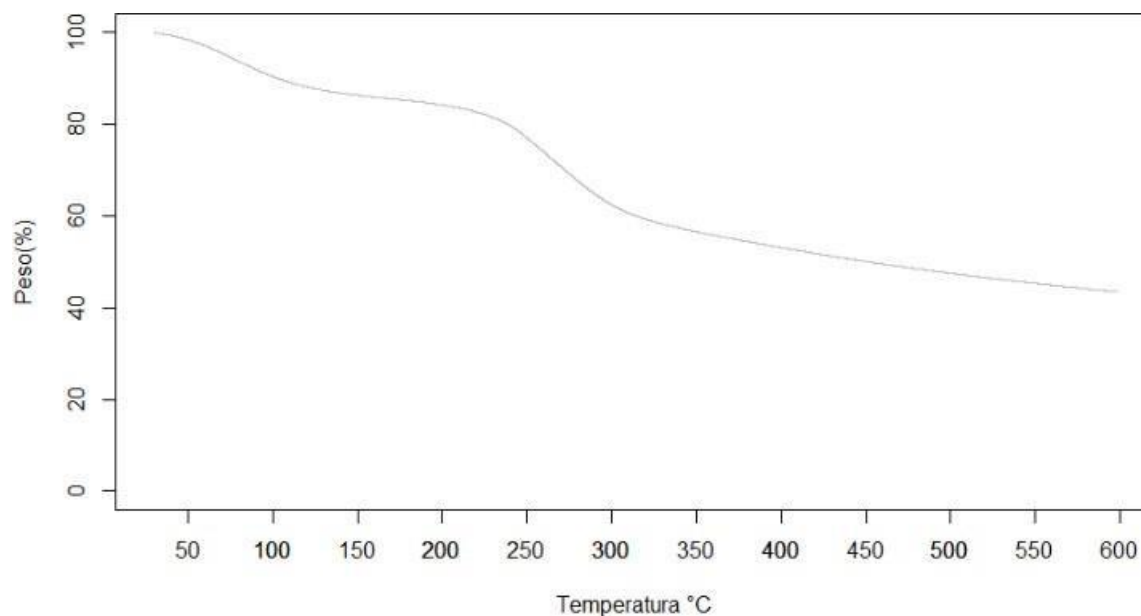


Figura 33

Análisis termogravimétrico del azopolímero sintetizado a partir de ácido 4,4'-diamino-2,2'-estilbendisulfónico

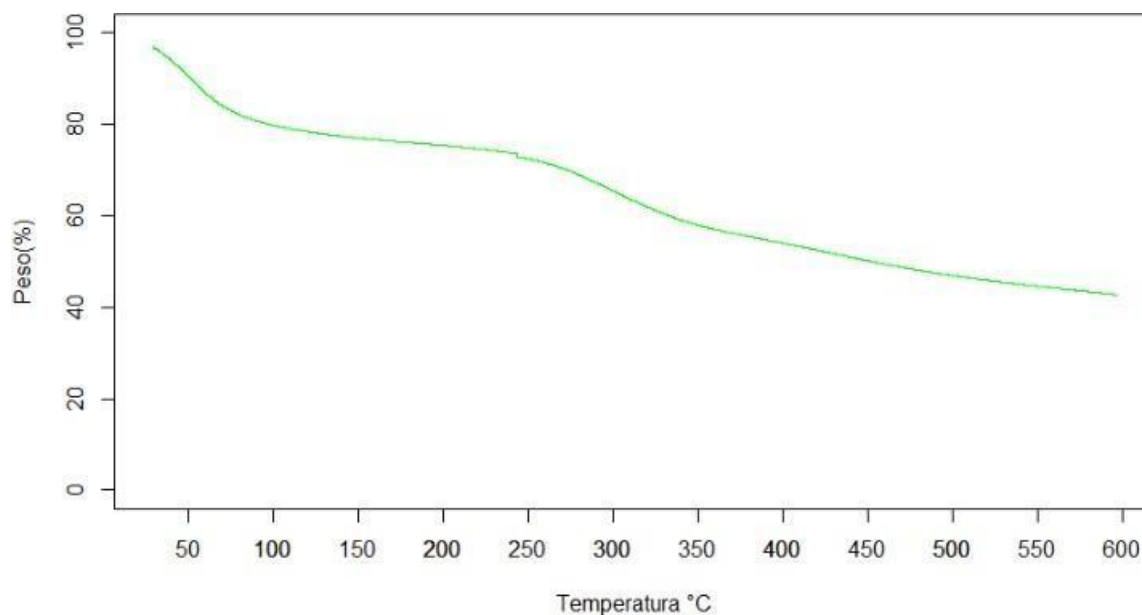


Figura 34

Comparación de espectros de infrarrojo entre el ácido 2, 5-diaminobencensulfónico y el azopolímero obtenido a partir del mismo

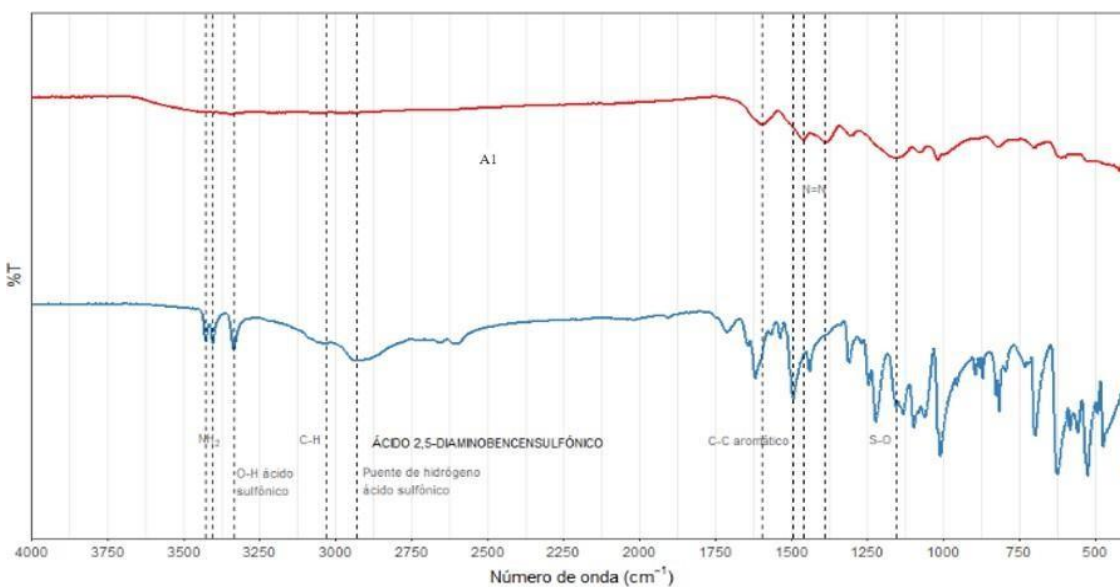


Figura 35

Espectro infrarrojo del azopolímero sintetizado a partir del ácido 4,4'-diamino-2,2'-estilbendisulfónico

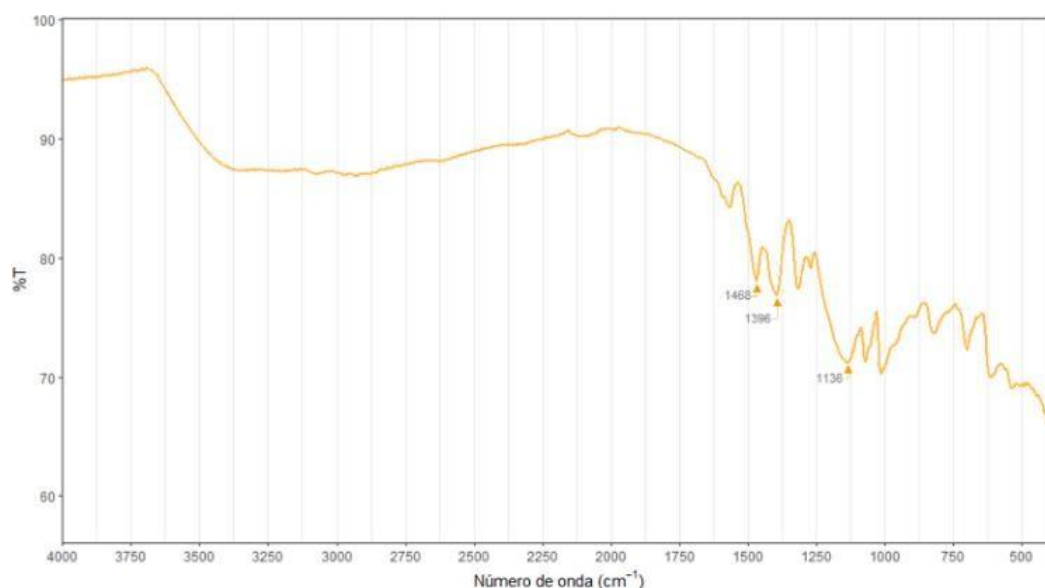


Tabla 12

Energías calculadas para los complejos con A1 y A2 (B3LYP def2-TZVP D4).

Energías en Hartrees A1			
	Complejo	Separados (100Å)	Diferencia
Azul de metileno	-5098.115231	-5097.970448	0.144783364
Cristal violeta	-4414.485621	-4414.51282	-0.02719884
Naranja de metilo	-3715.208335	-3715.278321	-0.069985753

Energías en Hartrees A2			
	Complejo	Separados (100Å)	Diferencia
Azul de metileno	-4102.28828	-4102.176689	0.1115908
Cristal violeta	-3140.77714	-3140.605437	0.17170009
Naranja de metilo	-4360.01432	-4360.080857	0.06654025

Nota: Se realizó el modelado de un poro propuesta de cada polímero en Spartan '14 (Wavefunction) y se optimizó a nivel de mecánica molecular usando el campo de fuerzas UFF. Los colorantes Azul de metileno, Cristal violeta, Naranja de metilo y el Paraquat se dibujaron en MarvinSketch 22.22 (ChemAxon) y posteriormente se trasladaron a Avogadro 1.2 (Avogadro Chemistry) para optimizarlos también a nivel de mecánica molecular con UFF.

Se realizó un docking con AutoDock Vina 1.2.3 (The Scripps Research Institute) y se seleccionó el mejor resultado para cada pareja de poro-colorante.

De cada complejo obtenido se aisló la parte interactuante del poro con el colorante y se realizó una optimización geométrica por DFT en Orca 5.0 (Frank Neese) usando un continuo de solvatación de agua con el funcional híbrido B3LYP y con el conjunto de bases DEF2-SVP y la corrección de dispersión D4. Se separaron las moléculas a una distancia de 100 Angstroms y se repitió la optimización geométrica en las mismas condiciones

Para el cálculo de energía en un solo punto de cada complejo se usó también Orca, con el funcional B3LYP y la corrección D4; pero se cambió al conjunto de bases DEF2-TZVP y se eliminó el disolvente. Se obtuvo la diferencia de energía con las moléculas juntas y separadas para estimar la energía de unión.

11.2 Discusión de resultados

La capacidad de adsorción del material A2 fue evaluada con los colorantes azul de metileno y cristal violeta en solución acuosa a diferentes concentraciones (50 ppm, 100 ppm y 200 ppm). El proceso fue monitoreado mediante espectrofotometría UV-visible y los datos obtenidos fueron ajustados en cuatro modelos de cinéticas de adsorción a fin de comprender de mejor manera el mecanismo fisicoquímico por el cual ocurre la adsorción de los colorantes mencionados por el azopolímero A2 (Figuras 4 a 27).

Según los coeficientes de correlación obtenidos (Tablas 4 a 6), la adsorción de azul de metileno por A2 a diferentes concentraciones iniciales presenta un mejor ajuste al modelo de pseudo-segundo orden, siendo la constante de velocidad de pseudo-segundo orden (K_2) más alta de $0.0006 \text{ g} \cdot \text{mg}^{-1} \cdot \text{min}^{-1}$ (Tabla 4, Segunda Repetición). El ajuste a dicho modelo sugiere que en el proceso de adsorción está involucrado más de un mecanismo de difusión interna y externa (Tan & Hameed, 2017). Para la adsorción de cristal violeta por A2, los modelos cinéticos con mejor ajuste a diferentes concentraciones iniciales fueron el de pseudo-primero orden y el de difusión intrapartícula (Tablas 7 a 9). Debido a que el valor de la constante C del modelo de difusión intrapartícula no fue cero, el mecanismo de adsorción consta de varias etapas y de más de un tipo de interacción (Tran et al., 2017).

El equilibrio en la adsorción de azul de metileno por A2 fue estudiado a varias condiciones controladas de temperatura (25 °C, 30 °C y 40 °C), y se evaluaron los datos obtenidos en cinco modelos de isothermas de adsorción (Figuras 28 a 32). Para todas las temperaturas, el mejor ajuste según los coeficientes de correlación obtenidos fue con el modelo de Langmuir (Tabla 10). Esto

sugiere la distribución homogénea de los sitios activos independientes y la formación de una monocapa de moléculas de azul de metileno sobre la superficie porosa del azopolímero (Tran et al., 2017). La capacidad máxima de adsorción fue de 2071.43 mg/g, 4220.12 mg/g y 9249.52 mg/g para los sistemas a 25 °C, 30 °C y 40 °C, respectivamente. La capacidad máxima de adsorción de azul de metileno a temperatura ambiente es mayor que la reportada para otros materiales orgánicos porosos adsorbentes (Ge & Liu, 2016; Y. Hou et al., 2016; H. Liu & Liu, 2017; C. Zhang et al., 2015). Según este modelo de adsorción se calcularon los valores del factor de separación R_L , que para todas las concentraciones iniciales y temperaturas evaluadas estuvieron en un rango de 0.483 a 0.995 (Tabla 10). Al ser valores mayores que cero y menores que uno, se considera que la adsorción fue favorable (Al-Ghouthi & Da'ana, 2020).

A partir del modelo de Langmuir también se calcularon parámetros termodinámicos (Tabla 11). Los valores de ΔG° fueron de -26.70 kJ/mol, -25.14 kJ/mol y -23.69 kJ/mol para las isothermas a 25 °C, 30 °C y 40 °C, respectivamente. Sus valores negativos indican que la reacción de quimisorción ocurre de manera espontánea, y a su vez que la espontaneidad del proceso aumenta con la disminución de temperatura. El valor de ΔH° fue negativo (-84.12 kJ/mol), por lo que la adsorción estudiada es considerada exotérmica. Finalmente, el valor negativo de ΔS° (-193.38 J·mol⁻¹·K⁻¹) refleja una disminución en la aleatoriedad del sistema (Al-Ghouthi & Da'ana, 2020).

Las características estructurales y de funcionalidad del azopolímero (Figura 3) explican su buena capacidad de adsorción hacia los colorantes evaluados. La formación de un polímero orgánico poroso mediante reacciones de diazotización brinda una estructura con una considerable área superficial y varios sitios de adsorción en los que pueden interactuar las moléculas de cristal violeta y azul de metileno, que presentan tamaños moleculares de 1.41 nm × 1.21 nm × 0.18 nm y 1.26 nm × 0.77 nm × 0.65 nm, respectivamente (Y. Zhang et al., 2021). El mayor tamaño molecular del cristal violeta pudo afectar la velocidad de adsorción, explicando por qué se requirió más tiempo para alcanzar el equilibrio con este colorante que con azul de metileno. También se observó que con ambos colorantes se necesitó un mayor período de tiempo de adsorción al aumentar la concentración inicial, como era esperado.

La presencia de grupos de ácido sulfónico en la estructura permite que, al hidrolizarse, la superficie quede cargada negativamente, lo que favorece las interacciones electrostáticas con los colorantes azul de metileno y cristal violeta, cargados positivamente. La presencia de grupos hidroxilo fenólicos permite la formación de puentes de hidrógeno con las moléculas de azul de metileno y cristal violeta, que presentan nitrógenos en sus estructuras (Figura 37). Además, los grupos polares azo conjugados con anillos aromáticos e insaturaciones pueden establecer interacciones π - π con las moléculas de ambos colorantes, que también cuentan con anillos aromáticos.

Por lo tanto, el buen desempeño de los azopolímeros sintetizados para la absorción de colorantes orgánicos catiónicos se atribuye a su estructura porosa y su funcionalidad (grupos de ácido sulfónico, grupos hidroxilo, grupos azo conjugados), que permite establecer interacciones π - π , electrostáticas y de puentes de hidrógeno con los colorantes catiónicos.

Parte del estudio de los azopolímeros sintetizados se basó en la caracterización fisicoquímica de los mismos. Como se observa en las Figuras 33 y 34, los análisis termogravimétricos (TGA por sus siglas en inglés) respectivos para cada material obtenido mostraron una pérdida significativa de peso antes de los 100 °C, lo cual se debe principalmente a la eliminación de moléculas de agua y otros compuestos volátiles que podían encontrarse adheridos por interacciones físicas a la superficie del material. Por otro lado, aproximadamente entre 250 °C y 300 °C se observa otra disminución importante del peso de los azopolímeros; esto se atribuye frecuentemente a la pérdida del agua y componentes volátiles quimisorbidos en la superficie de los materiales. Por último, en cuanto a las curvas de TGA, se nota que luego de los 300 °C el decrecimiento es casi constante pero no tan pronunciado, algo característico y esperado en muchos materiales de este tipo ya que inician a descomponerse, por lo que en general se puede ver una buena estabilidad térmica para ambos compuestos sintetizados.

En cuanto a los espectros infrarrojo de los azopolímeros (Figura 35 y 36), se observa claramente la desaparición de las señales características del estiramiento del grupo amino (aproximadamente en 3400 cm^{-1}) en los polímeros obtenidos y al mismo tiempo la aparición de las señales del grupo azo por el estiramiento del mismo (entre 1460 y 1380 cm^{-1}). Del mismo modo, las señales características del estiramiento S-O de los grupos sulfónicos son visibles en el material de partida y en los productos

obtenidos (entre 1135 y 1160 cm^{-1}). También, como era de esperar, se encuentran presentes las señales del estiramiento C-C de los carbonos de los anillos aromáticos (1596 cm^{-1}).

En la tabla 13 se observan los resultados de modelado molecular de A1 y A2, de acuerdo a las diferencias energéticas A1 presenta solo afinidad positiva con azul de metileno, sin embargo experimentalmente no fue posible confirmar alguno de los resultados de este material debido a que A1 es totalmente soluble en agua a la mayoría de pH's y con respecto a A2, la mayor afinidad es por azul de metileno, luego cristal violeta (cómo es de esperar por su naturaleza catiónica) y naranja de metilo presenta una afinidad muy cercana a cero, lo cuál se corrobora experimentalmente al no haber alguna adsorción sobre A2.

12 Referencias

- Ahsan, Md. A., Katla, S. K., Islam, Md. T., Hernandez-Viezcas, J. A., Martinez, L. M., Díaz-Moreno, C. A., Lopez, J., Singamaneni, S. R., Banuelos, J., Gardea-Torresdey, J., & Noveron, J. C. (2018). Adsorptive removal of methylene blue, tetracycline and Cr(VI) from water using sulfonated tea waste. *Environmental Technology & Innovation*, 11, 23–40. <https://doi.org/10.1016/j.eti.2018.04.003>
- Albert, M., Lessin, M. S., & Gilchrist, B. F. (2003). Methylene blue: Dangerous dye for neonates. *Journal of Pediatric Surgery*, 38(8), 1244–1245. [https://doi.org/10.1016/S0022-3468\(03\)00278-1](https://doi.org/10.1016/S0022-3468(03)00278-1)
- Al-Ghouti, M. A., & Da'ana, D. A. (2020). Guidelines for the use and interpretation of adsorption isotherm models: A review. *Journal of Hazardous Materials*, 393, 122383. <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2020.122383>
- Balam-Villarreal, J. A., López-Mayorga, B. J., Gallardo-Rosas, D., Toscano, R. A., Carreón-Castro, M. P., Basiuk, V. A., Cortés-Guzmán, F., López-Cortés, J. G., & Ortega-Alfaro, M. C. (2020).

- π -Extended push–pull azo-pyrrole photoswitches: Synthesis, solvatochromism and optical band gaps. *Organic & Biomolecular Chemistry*, 18(8), 1657–1670. <https://doi.org/10.1039/C9OB02410G>
- Bhanja, P., Modak, A., & Bhaumik, A. (2019). Porous Organic Polymers for CO₂ Storage and Conversion Reactions. *ChemCatChem*, 11(1), 244–257. <https://doi.org/10.1002/cctc.201801046>
- Bhanja, P., Palui, A., Chatterjee, S., Kaneti, Y. V., Na, J., Sugahara, Y., Bhaumik, A., & Yamauchi, Y. (2020). Crystalline Porous Organic Polymer Bearing –SO₃H Functionality for High Proton Conductivity. *ACS Sustainable Chemistry & Engineering*, 8(6), 2423–2432. <https://doi.org/10.1021/acssuschemeng.9b06234>
- Bildirir, H., Gregoriou, V. G., Avgeropoulos, A., Scherf, U., & Chochos, C. L. (2017). Porous organic polymers as emerging new materials for organic photovoltaic applications: Current status and future challenges. *Materials Horizons*, 4(4), 546–556. <https://doi.org/10.1039/C6MH00570E>
- Blanchard, G., Maunaye, M., & Martin, G. (1984). Removal of heavy metals from waters by means of natural zeolites. *Water Research*, 18(12), 1501–1507. [https://doi.org/10.1016/0043-1354\(84\)90124-6](https://doi.org/10.1016/0043-1354(84)90124-6)
- Chang, C.-W., Lu, Y.-C., Wang, T.-T., & Diao, E. W.-G. (2004). Photoisomerization Dynamics of Azobenzene in Solution with S₁ Excitation: A Femtosecond Fluorescence Anisotropy Study. *Journal of the American Chemical Society*, 126(32), 10109–10118. <https://doi.org/10.1021/ja049215p>

- Chang, V. Y., Fedele, C., Priimagi, A., Shishido, A., & Barrett, C. J. (2019). Photoreversible Soft Azo Dye Materials: Toward Optical Control of Bio-Interfaces. *Advanced Optical Materials*, 7(16), 1900091. <https://doi.org/10.1002/adom.201900091>
- Crespi, S., Simeth, N. A., & König, B. (2019). Heteroaryl azo dyes as molecular photoswitches. *Nature Reviews Chemistry*, 3(3), Article 3. <https://doi.org/10.1038/s41570-019-0074-6>
- Deblonde, T., Cossu-Leguille, C., & Hartemann, P. (2011). Emerging pollutants in wastewater: A review of the literature. *International Journal of Hygiene and Environmental Health*, 214(6), 442–448. <https://doi.org/10.1016/j.ijheh.2011.08.002>
- Elma, M., Yacou, C., Diniz da Costa, J. C., & Wang, D. K. (2013). Performance and Long Term Stability of Mesoporous Silica Membranes for Desalination. *Membranes*, 3(3), Article 3. <https://doi.org/10.3390/membranes3030136>
- Feriante, C., Evans, A. M., Jhulki, S., Castano, I., Strauss, M. J., Barlow, S., Dichtel, W. R., & Marder, S. R. (2020). New Mechanistic Insights into the Formation of Imine-Linked Two-Dimensional Covalent Organic Frameworks. *Journal of the American Chemical Society*, 142(43), 18637–18644. <https://doi.org/10.1021/jacs.0c08390>
- Freundlich, H. (1906). Über die Adsorption in Lösungen. *Zeitschrift Für Physikalische Chemie*, 57, 385–470.
- Furtmair, M., Timm, J., & Marschall, R. (2021). Sulfonation of porous materials and their proton conductivity. *Microporous and Mesoporous Materials*, 312, 110745. <https://doi.org/10.1016/j.micromeso.2020.110745>
- García-Amorós, J., Sánchez-Ferrer, A., Massad, W. A., Nonell, S., & Velasco, D. (2010). Kinetic study of the fast thermal cis-to-trans isomerisation of para-, ortho- and

- polyhydroxyazobenzenes. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 12(40), 13238–13242.
<https://doi.org/10.1039/C004340K>
- Ge, M., & Liu, H. (2016). A silsesquioxane-based thiophene-bridged hybrid nanoporous network as a highly efficient adsorbent for wastewater treatment. *Journal of Materials Chemistry A*, 4(42), 16714–16722. <https://doi.org/10.1039/C6TA06656A>
- Geissen, V., Mol, H., Klumpp, E., Umlauf, G., Nadal, M., van der Ploeg, M., van de Zee, S. E. A. T. M., & 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>
- Gupta, S. K., Kaleeswaran, D., Nandi, S., Vaidhyathan, R., & Murugavel, R. (2017). Bulky Isopropyl Group Loaded Tetraaryl Pyrene Based Azo-Linked Covalent Organic Polymer for Nitroaromatics Sensing and CO₂ Adsorption. *ACS Omega*, 2(7), 3572–3582.
<https://doi.org/10.1021/acsomega.7b00515>
- Hou, H., Di Vona, M. L., & Knauth, P. (2012). Building bridges: Crosslinking of sulfonated aromatic polymers—A review. *Journal of Membrane Science*, 423–424, 113–127.
<https://doi.org/10.1016/j.memsci.2012.07.038>
- Hou, Y., Sun, J., Zhang, D., Qi, D., & Jiang, J. (2016). Porphyrin-Alkaline Earth MOFs with the Highest Adsorption Capacity for Methylene Blue. *Chemistry - A European Journal*, 22(18), 6345–6352. <https://doi.org/10.1002/chem.201600162>
- Khulbe, K. C., & Matsuura, T. (2018). Removal of heavy metals and pollutants by membrane adsorption techniques. *Applied Water Science*, 8(1), 19. <https://doi.org/10.1007/s13201-018-0661-6>

- Kristensen, T. E., & Hansen, T. (2010). Polymer-Supported Chiral Organocatalysts: Synthetic Strategies for the Road Towards Affordable Polymeric Immobilization. *European Journal of Organic Chemistry*, 2010(17), 3179–3204. <https://doi.org/10.1002/ejoc.201000319>
- Lagergren, S. (1898). About the theory of so-called adsorption of soluble substances. *Kungliga Svenska Vetenskapsakademiens Handlingar*, 24(4), 1–39.
- Langmuir, I. (1918). The Adsorption of Gases on Plane Surface of Glass, Mica and Platinum. *Journal of the American Chemical Society*, 40(9), 1361–1403. <https://doi.org/10.1021/ja02242a004>
- Li, C., He, Y., Zhou, L., Xu, T., Hu, J., Peng, C., & Liu, H. (2018). Fast adsorption of methylene blue, basic fuchsin, and malachite green by a novel sulfonic-grafted triptycene-based porous organic polymer. *RSC Advances*, 8(73), 41986–41993. <https://doi.org/10.1039/C8RA09012B>
- Li, H., Li, J., Thomas, A., & Liao, Y. (2019). Ultra-High Surface Area Nitrogen-Doped Carbon Aerogels Derived From a Schiff-Base Porous Organic Polymer Aerogel for CO₂ Storage and Supercapacitors. *Advanced Functional Materials*, 29(40), 1904785. <https://doi.org/10.1002/adfm.201904785>
- Li, Z., & Yang, Y.-W. (2017). Creation and bioapplications of porous organic polymer materials. *Journal of Materials Chemistry B*, 5(47), 9278–9290. <https://doi.org/10.1039/C7TB02647A>
- Liu, H., & Liu, H. (2017). Selective dye adsorption and metal ion detection using multifunctional silsesquioxane-based tetraphenylethene-linked nanoporous polymers. *Journal of Materials Chemistry A*, 5(19), 9156–9162. <https://doi.org/10.1039/C7TA01255A>
- Liu, J., Strachan, D. M., & Thallapally, P. K. (2013). Enhanced noble gas adsorption in Ag@MOF-74Ni. *Chemical Communications*, 50(4), 466–468. <https://doi.org/10.1039/C3CC47777K>

- Liu, X., Luo, X.-S., Fu, H.-X., Fan, W., Chen, S.-L., & Huang, M.-H. (2020). Irreversible tautomerization as a powerful tool to access unprecedented functional porous organic polymers with a tris(β -keto-hydrazo)cyclohexane subunit (TKH-POPs). *Chemical Communications*, 56(14), 2103–2106. <https://doi.org/10.1039/C9CC09710D>
- Mani, S., & Bharagava, R. N. (2016). Exposure to Crystal Violet, Its Toxic, Genotoxic and Carcinogenic Effects on Environment and Its Degradation and Detoxification for Environmental Safety. In W. P. de Voogt (Ed.), *Reviews of Environmental Contamination and Toxicology Volume 237* (pp. 71–104). Springer International Publishing. https://doi.org/10.1007/978-3-319-23573-8_4
- Mao, J., Won, S. W., Vijayaraghavan, K., & Yun, Y.-S. (2010). Immobilized citric acid-treated bacterial biosorbents for the removal of cationic pollutants. *Chemical Engineering Journal*, 162(2), 662–668. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2010.06.017>
- Mendonça, C. R., Balogh, D. T., Boni, L. D., Santos, D. S. dos, Zucolotto, V., & Oliveira, O. N. (2011). Optically Induced Processes in Azopolymers. In *Molecular Switches* (pp. 399–422). John Wiley & Sons, Ltd. <https://doi.org/10.1002/9783527634408.ch12>
- Nadeem, M., Yasin, G., Arif, M., Bhatti, M. H., Sayin, K., Mehmood, M., Yunus, U., Mehboob, S., Ahmed, I., & Flörke, U. (2020). Pt-Ni@PC900 Hybrid Derived from Layered-Structure Cd-MOF for Fuel Cell ORR Activity. *ACS Omega*, 5(5), 2123–2132. <https://doi.org/10.1021/acsomega.9b02741>
- Orru, H., Ebi, K. L., & Forsberg, B. (2017). The Interplay of Climate Change and Air Pollution on Health. *Current Environmental Health Reports*, 4(4), 504–513. <https://doi.org/10.1007/s40572-017-0168-6>

- Pan, M., Yuan, Q.-J., Gong, X.-L., Zhang, S., & Li, B.-J. (2016). A Tri-Stimuli-Responsive Shape-Memory Material Using Host–Guest Interactions as Molecular Switches. *Macromolecular Rapid Communications*, 37(5), 433–438. <https://doi.org/10.1002/marc.201500602>
- Pérez-Marroquín, C. (19 de octubre de 2018). Contaminación por desechos sólidos en el Lago de Amatitlán supera a la del año pasado. *Prensa Libre*. <https://www.prensalibre.com/ciudades/contaminacion-por-desechos-solidos-en-el-lago-de-amatitlan-supera-a-la-del-ao-pasado/>
- Phan, N. T. S., Le, K. K. A., & Phan, T. D. (2010). MOF-5 as an efficient heterogeneous catalyst for Friedel–Crafts alkylation reactions. *Applied Catalysis A: General*, 382(2), 246–253. <https://doi.org/10.1016/j.apcata.2010.04.053>
- Roginsky, S., & Zeldovich, Y. B. (1934). The catalytic oxidation of carbon monoxide on manganese dioxide. *Acta Physicochimica USSR*, 554(1).
- Sánchez, G. (06 de septiembre de 2016). Proceso por contaminación del río La Pasión sigue en marcha. *Prensa Libre*. <https://www.prensalibre.com/guatemala/justicia/proceso-por-contaminacion-del-rio-la-pasion-sigue-en-marcha/>
- Sengupta, M., Bag, A., Ghosh, S., Mondal, P., Bordoloi, A., & Islam, Sk. M. (2019). CuxOy@COF: An efficient heterogeneous catalyst system for CO₂ cycloadditions under ambient conditions. *Journal of CO₂ Utilization*, 34, 533–542. <https://doi.org/10.1016/j.jcou.2019.07.036>
- Shaban, M., Hassouna, M. E. M., Nasief, F. M., & AbuKhadra, M. R. (2017). Adsorption properties of kaolinite-based nanocomposites for Fe and Mn pollutants from aqueous solutions and raw ground water: Kinetics and equilibrium studies. *Environmental Science and Pollution Research*, 24(29), 22954–22966. <https://doi.org/10.1007/s11356-017-9942-0>

- Shanahan, P. V., Xu, L., Liang, C., Waje, M., Dai, S., & Yan, Y. S. (2008). Graphitic mesoporous carbon as a durable fuel cell catalyst support. *Journal of Power Sources*, *185*(1), 423–427. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2008.06.041>
- Sharghi, H., Shiri, P., & Aberi, M. (2018). An overview on recent advances in the synthesis of sulfonated organic materials, sulfonated silica materials, and sulfonated carbon materials and their catalytic applications in chemical processes. *Beilstein Journal of Organic Chemistry*, *14*(1), 2745–2770. <https://doi.org/10.3762/bjoc.14.253>
- Shen, X., Ma, S., Xia, H., Shi, Z., Mu, Y., & Liu, X. (2018). Cationic porous organic polymers as an excellent platform for highly efficient removal of pollutants from water. *Journal of Materials Chemistry A*, *6*(42), 20653–20658. <https://doi.org/10.1039/C8TA09145E>
- Simeth, N. A., Crespi, S., Fagnoni, M., & König, B. (2018). Tuning the Thermal Isomerization of Phenylazaindole Photoswitches from Days to Nanoseconds. *Journal of the American Chemical Society*, *140*(8), 2940–2946. <https://doi.org/10.1021/jacs.7b12871>
- Suib, S. L. (2017). A Review of Recent Developments of Mesoporous Materials. *The Chemical Record*, *17*(12), 1169–1183. <https://doi.org/10.1002/tcr.201700025>
- Sun, L.-B., Liu, X.-Q., & Zhou, H.-C. (2015). Design and fabrication of mesoporous heterogeneous basic catalysts. *Chemical Society Reviews*, *44*(15), 5092–5147. <https://doi.org/10.1039/C5CS00090D>
- Tan, K. L., & Hameed, B. H. (2017). Insight into the adsorption kinetics models for the removal of contaminants from aqueous solutions. *Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers*, *74*, 25–48. <https://doi.org/10.1016/j.jtice.2017.01.024>

- Tehrani, N. H. M. H., Alivand, M. S., Maklavany, D. M., Rashidi, A., Samipoorgiri, M., Seif, A., & Yousefian, Z. (2019). Novel asphaltene-derived nanoporous carbon with N-S-rich micro-mesoporous structure for superior gas adsorption: Experimental and DFT study. *Chemical Engineering Journal*, 358, 1126–1138. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2018.10.115>
- Tran, H. N., You, S.-J., Hosseini-Bandegharai, A., & Chao, H.-P. (2017). Mistakes and inconsistencies regarding adsorption of contaminants from aqueous solutions: A critical review. *Water Research*, 120, 88–116. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2017.04.014>
- Trewin, A., & Cooper, A. I. (2010). Porous Organic Polymers: Distinction from Disorder? *Angewandte Chemie International Edition*, 49(9), 1533–1535. <https://doi.org/10.1002/anie.200906827>
- Vutskits, L., Briner, A., Klauser, P., Gascon, E., Dayer, A. G., Kiss, J. Z., Muller, D., Licker, M. J., & Morel, D. R. (2008). Adverse Effects of Methylene Blue on the Central Nervous System. *Anesthesiology*, 108(4), 684–692. <https://doi.org/10.1097/ALN.0b013e3181684be4>
- Wang, W., Wang, Y., Li, C., Yan, L., Jiang, M., & Ding, Y. (2017). State-of-the-Art Multifunctional Heterogeneous POP Catalyst for Cooperative Transformation of CO₂ to Cyclic Carbonates. *ACS Sustainable Chemistry & Engineering*, 5(6), 4523–4528. <https://doi.org/10.1021/acssuschemeng.7b00947>
- Wang, Z., He, M., Chen, B., & Hu, B. (2020). Azo-linked porous organic polymers/polydimethylsiloxane coated stir bar for extraction of benzotriazole ultraviolet absorbers from environmental water and soil samples followed by high performance liquid chromatography-diode array detection. *Journal of Chromatography A*, 1616, 460793. <https://doi.org/10.1016/j.chroma.2019.460793>

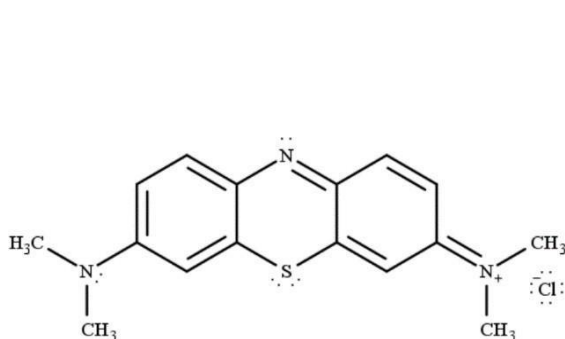
- Weber, W. J., & Morris, J. C. (1963). Kinetics of Adsorption on Carbon from Solution. *Journal of the Sanitary Engineering Division*, 89(2), 31–59. <https://doi.org/10.1061/JSEDAI.0000430>
- Xie, L.-H., & Suh, M. P. (2013). High CO₂-Capture Ability of a Porous Organic Polymer Bifunctionalized with Carboxy and Triazole Groups. *Chemistry – A European Journal*, 19(35), 11590–11597. <https://doi.org/10.1002/chem.201301822>
- Xu, X., Tan, H., Wang, Z., Wang, C., Pan, L., Kaneti, Y. V., Yang, T., & Yamauchi, Y. (2019). Extraordinary capacitive deionization performance of highly-ordered mesoporous carbon nano-polyhedra for brackish water desalination. *Environmental Science: Nano*, 6(3), 981–989. <https://doi.org/10.1039/C9EN00017H>
- Xu, Z., Hu, L., Ming, J., Cui, X., Zhang, M., Dou, J., Zhang, W., & Zhou, B. (2020). Self-gated porous organic polymer as drug delivery system for pH stimuli-responsive controlled Quercetin release. *Microporous and Mesoporous Materials*, 303, 110259. <https://doi.org/10.1016/j.micromeso.2020.110259>
- Ye, Q., Huo, M., Zeng, M., Liu, L., Peng, L., Wang, X., & Yuan, J. (2018). Photoinduced Reversible Worm-to-Vesicle Transformation of Azo-Containing Block Copolymer Assemblies Prepared by Polymerization-Induced Self-Assembly. *Macromolecules*, 51(9), 3308–3314. <https://doi.org/10.1021/acs.macromol.8b00340>
- Yeung, K. L., & Han, W. (2014). Zeolites and mesoporous materials in fuel cell applications. *Catalysis Today*, 236, 182–205. <https://doi.org/10.1016/j.cattod.2013.10.022>
- Zhang, C., Zhu, P.-C., Tan, L., Liu, J.-M., Tan, B., Yang, X.-L., & Xu, H.-B. (2015). Triptycene-Based Hyper-Cross-Linked Polymer Sponge for Gas Storage and Water Treatment. *Macromolecules*, 48(23), 8509–8514. <https://doi.org/10.1021/acs.macromol.5b02222>

- Zhang, Y., Hong, X., Cao, X.-M., Huang, X.-Q., Hu, B., Ding, S.-Y., & Lin, H. (2021). Functional Porous Organic Polymers with Conjugated Triaryl Triazine as the Core for Superfast Adsorption Removal of Organic Dyes. *ACS Applied Materials & Interfaces*, *13*(5), 6359–6366. <https://doi.org/10.1021/acsami.0c21374>
- Zhao, X., Ma, X., & Zheng, P. (2018). The preparation of carboxylic-functional carbon-based nanofibers for the removal of cationic pollutants. *Chemosphere*, *202*, 298–305. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2018.03.131>

13 Apéndice

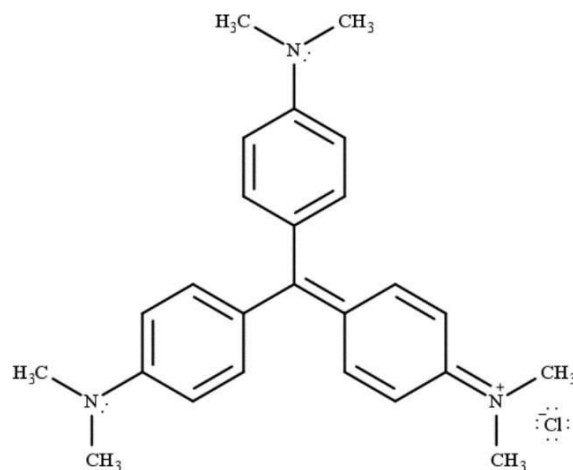
Figura 36

Colorantes orgánicos catiónicos utilizados para las pruebas de adsorción



Azul de Metileno

(1.26 nm × 0.77 nm × 0.65 nm)

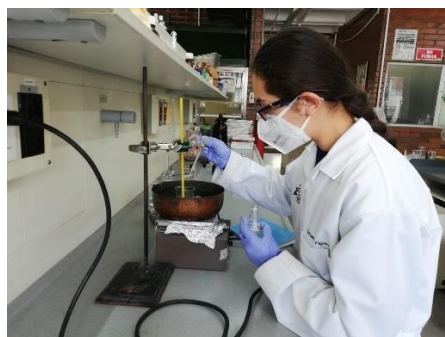


Cristal Violeta

(1.41 nm × 1.21 nm × 0.18 nm)

Figura 40

Investigador, auxiliar I y auxiliar II correspondientemente trabajando en laboratorio.





14 Aspectos éticos y legales

Debido a la naturaleza del proyecto, no se requirió ninguna licencia para el desarrollo de la presente investigación.

15 Vinculación

- Colaboración de uso de espectrofotómetro IR-ATR en el Instituto de Investigaciones Químicas, Biológicas, Médicas y Biofísicas de la Universidad Mariano Gálvez.
- Colaboración con el Laboratorio del Profesor Heriberto Pfeiffer del Instituto de Materiales de la Universidad Nacional Autónoma de México.
- Colaboración de laboratorio y cristalería por parte de la M. en C. Carolina Guzmán Quilo del Departamento de Toxicología de la Facultad de Ciencias Químicas y Farmacia de la Universidad de San Carlos de Guatemala.

16 Estrategia de difusión, divulgación y protección intelectual

----- Mensaje reenviado -----

De: latinxchem2@gmail.com

Para: "lopez byron" <lopez.byron@usac.edu.gt>

Enviados: Martes, 22 de Noviembre 2022 21:02:47

Asunto:___ #LatinXChem22 Booking Confirmation

Dear Byron,

We are delighted to notify you that your work has been accepted for participation in the third edition of the @LatinXChem Conference, which will take place on November 28, 2022.

The following information is critical for your participation:

Poster number: EnvAna052

Category: #LXChemEnvAna

1) Your work must be uploaded on Twitter on November 28 at 12:00 h UTC in any format allowed by this platform.

These three tweets may be useful in designing your poster:

<https://twitter.com/LatinXChem/status/1425507410765094919?s=20>

<https://twitter.com/LatinXChem/status/1425891565210378243?s=20>

<https://twitter.com/LatinXChem/status/1428360692747304969?s=20>

2) The Twitter account @LatinXChem, the #LatinXChem22 hashtag, the category hashtag (e.g., #LXChemPhys), and the poster number hashtag (e.g., #Phys001) should all be included in your tweet. For example:

'Hi @LatinXChem, this is my work 'Chemical Bond', #LatinXChem22 #LXChemPhys #Phys001'

Please provide this information since the judges in each category will require it to locate and evaluate your work. Posters with missing information will not be evaluated and will not be eligible for an award.

We understand that these hashtags take up space on Twitter, but we need them to find your postings easily. Also, as we did in past years, we may use this

to make #LatinXChem a trending topic.

On the day of the event, your poster should be posted as a pinned tweet (Tweet fijado) in your profile, which must be public.

3) Other relevant hashtags (e.g., #fluorescence, #DFT, #Sulfur, etc.) may be used in your contribution. Remember the character limit on Twitter (280) and that the required information (e.g., #LatinXChem, #LXChemPhys, @LatinXChem, and #PHYS001) takes up around 50 of those characters.

4) You are encouraged to tweet about your contribution and even start a thread about it, but please include the category and the LatinXChem hashtags, as well as the event's official Twitter, handle only on the first tweet, along with your poster number.

5) You may promote your poster on Mastodon, Instagram, or Facebook, encouraging people to visit it on Twitter, where the judges will assess your work.

6) Judges and other participants interested in your work will ask you questions and provide feedback; please make yourself available, tweet, and engage. We strongly recommend that you follow, like, or retweet organizers, judges, or other participants; #LatinXChem is your chance to engage with world-class scientists and colleagues worldwide.

7) We will provide a form at the end of the poster presentations for those participants who wish to receive a certificate of participation. Participants who complete the form outside the indicated time range, as instructed, may still receive a certificate of participation after payment of an out-of-time processing fee.

The prizes for each category will be awarded in the first week of December 2022.

We wish you a pleasant experience with #LatinXChem and hope you keep safe

during these times.

Best regards

Organizing Committee of @LatinXChem

Gabriel Merino

Miguel Ángel Méndez-Rojas

Joaquín Barroso

Galo Soler Illia

Luciana Gonzaga

Braulio Rodríguez-Molina

Maria A. Fernandez-Herrera

Fernanda Duarte

Aldo Zarbin

Eduardo Chamorro

Francisca J. Benítez

Poster number: EnvAna052
Category: #LXChemEnvAna

WELCOME TO
poster

2D sulfonated azo polymer: kinetic evaluation of crystal violet adsorption

Flores-Ramírez, L.¹, Vásquez-Bolaños, A.², Figueroa-Estrada, M.¹, Castillo-Arroyave, J.¹, López-Mayorga, B.^{1*}

1. ESCUELA DE QUÍMICA, FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS Y FARMACIA, UNIVERSIDAD DE SAN CARLOS DE GUATEMALA.
2. DEPARTAMENTO DE QUÍMICA, FACULTAD DE CIENCIAS Y HUMANIDADES, UNIVERSIDAD DEL VALLE DE GUATEMALA.

ESCUELA DE QUÍMICA

Acknowledgments

- To the Instituto de Investigaciones Químicas, Biológicas, Biomédicas y Biofísicas, de la Universidad Mariano Gálvez.
- To Laboratorio de Toxicología de la Escuela de Química Farmacéutica, Facultad de Ciencias Químicas y Farmacia, Universidad de San Carlos de Guatemala.
- To the Dirección General de Investigación for the awarded project AP2-2022 .
- To Profesor Heriberto Pfeiffer of Instituto de Materiales de la Universidad Nacional Autónoma de México por su apoyo con la caracterización del material.

17 Aporte de la propuesta de investigación a los ODS

Esta propuesta aportará conocimiento para cumplir con los Objetivos de Desarrollo Sostenible 3 y 6.

- *ODS3 Salud y bienestar:*

Una de las metas para 2030 es reducir sustancialmente el número de muertes y enfermedades producidas por productos químicos peligrosos y la contaminación del aire, el agua y el suelo.

- *ODS6 Agua limpia y saneamiento:*

Una de las metas para 2030 es mejorar la calidad del agua reduciendo la contaminación, eliminando el vertimiento y minimizando la emisión de productos químicos y materiales peligrosos, reduciendo a la mitad el porcentaje de aguas residuales sin tratar y aumentando considerablemente el reciclado y la reutilización del agua sin riesgos a nivel mundial. Otra meta relacionada con este objetivo es ampliar la cooperación internacional y el apoyo prestado a los países en desarrollo para la creación de capacidad en actividades y programas relativos al agua y




Informe final proyecto de investigación 2022

Dirección General de Investigación –DIGI-

el saneamiento, como los de captación de agua, desalinización, uso eficiente de los recursos hídricos, tratamiento de aguas residuales, reciclado y tecnologías de reutilización.


18 Orden de pago final

(incluir únicamente al personal con contrato vigente)

Nombres y apellidos	Categoría (investigador /auxiliar)	Registro de Personal	Procede pago de mes (Sí / No)	Firma
Allan Ronaldo Vásquez Bolaños	investigador	20120126	Sí	
Leonel Alejandro Flores Ramírez	Auxiliar II	20210469	Sí	
María Fernanda Figueroa Estrada	Auxiliar I	20220743	Sí	

19 Declaración del coordinador del proyecto de investigación

El coordinador de proyecto de investigación con base en el *Reglamento para el desarrollo de los proyectos de investigación financiados por medio del Fondo de Investigación*, artículos 13 y 20, deja constancia que el personal contratado para el proyecto de investigación que coordina ha cumplido a satisfacción con la entrega de informes individuales por lo que es procedente hacer efectivo el pago correspondiente.


Dr. Byron José López Mayorga Coordinador del Proyecto de Investigación	 Firma
Fecha: 30/01/2023	

Informe final proyecto de investigación 2022


Dirección General de Investigación –DIGI-


20 Aval de la directora del instituto de investigación

De conformidad con el artículo 13 y 19 del *Reglamento para el desarrollo de los proyectos de investigación financiados por medio del Fondo de Investigación* otorgo el aval al presente informe final de las actividades realizadas en el proyecto “Síntesis de dos nuevos azopolímeros sulfonados con capacidad de absorción de colorantes orgánicos catiónicos en agua” en mi calidad de Directora del Instituto de Investigaciones Químicas y Biológicas, mismo que ha sido revisado y cumple su ejecución de acuerdo a lo planificado.

Vo.Bo. Dra. María Eunice Enríquez Cottón Directora Instituto de Investigaciones Químicas y Biológicas	 Dra. María Eunice Enríquez Cottón Directora Firma
Fecha: 30/01/2023	

21 Visado de la Dirección General de Investigación

Vo.Bo. Inga. Liuba María Cabrera Ovalle de Villagrán Coordinadora Programa Universitario de Investigación en Desarrollo Industrial - PUIDI	 Firma
Fecha: 30/01/2023	

Vo.Bo. Ing. Agr. MARN Julio Rufino Salazar Coordinador General Programas Universitarios de Investigación	 Firma Ing. MARN Julio Rufino Salazar Pérez Coordinador General de Programas de Investigación, Digi-Usac
Fecha: 30/01/2023	