

**UNIVERSIDAD NACIONAL INTERCULTURAL DE LA SELVA
CENTRAL JUAN SANTOS ATAHUALPA**



**FACULTAD DE INGENIERÍA
ESCUELA PROFESIONAL DE INGENIERÍA AMBIENTAL**

Carbonos mesoporosos dopados con boro en la remoción de conservantes
en aguas contaminadas

TESIS

Para optar el título profesional de Ingeniero Ambiental

AUTOR

Lucero de Jesus Chulluncuy Julcarima

ASESOR

Dr. Alex Huamán de la Cruz

Chanchamayo, Perú

2025

AGRADECIMIENTO

A mis padres, por su amor incondicional, su esfuerzo constante y por ser el pilar fundamental en cada etapa de mi vida. Gracias por enseñarme con el ejemplo el valor del trabajo, la perseverancia y la humildad.

A mi orientadora, Patricia Prediger y a mi coorientadora, Natalia Camparotto, quienes han sido mis guías durante este desafiante camino. Les debo una gratitud infinita por su acompañamiento cercano, su apoyo inquebrantable durante estos casi dos años que gracias a ustedes parecieron menos difíciles y por darme la oportunidad de formar parte de un equipo de investigación extraordinario. En ese espacio no solo crecí profesionalmente, sino que también descubrí una genuina pasión por la ciencia.

DEDICATORIA

A mi mamita, Jesús Virtudes García Seas, quien desde el cielo guía cada uno de mis pasos y sigue siendo mi mayor fortaleza. A Frida Julcarima Manrique, Héctor Chulluncuy García, Libertad Chulluncuy Julcarima, Cristina Huaya Manrique y Daniel Ortiz Cóndor, por ser mi apoyo incondicional en cada desafío que se presentó en el camino para alcanzar este objetivo de culminar mi tesis.

Y a mí misma, por ser una mujer soñadora y fuerte, por demostrarme que siempre puedo lograr lo que me proponga cuando pongo a Dios en primer lugar.

RESUMEN

En este estudio, se sintetizó carbón mesoporoso dopado con boro (B-MPC) a partir de sacarosa como fuente natural de carbono y ácido bórico como precursor dopante. El material resultante presentó una superficie específica elevada ($>897 \text{ m}^2 \cdot \text{g}^{-1}$) y una estructura porosa definida, tal y como confirmaron los análisis de espectroscopia infrarroja por transformada de Fourier, espectroscopia fotoelectrónica de rayos X y potencial zeta. Se evaluó el rendimiento de adsorción del B-MPC utilizando metilparabeno y propilparabeno como contaminantes. Las condiciones óptimas de funcionamiento fueron pH de 6, dosis de adsorbente de $0.2 \text{ g} \cdot \text{L}^{-1}$ y tiempos de equilibrio de 90 minutos para el metilparabeno y 45 minutos para el propilparabeno. Las capacidades máximas de adsorción alcanzaron 116.4 y $134.4 \text{ mg} \cdot \text{g}^{-1}$ para el metilparabeno y propilparabeno, respectivamente. Los estudios cinéticos revelaron que el modelo de pseudo-segundo orden era el que mejor se ajustaba, lo que indica que la quimisorción es el mecanismo dominante, regido por la difusión externa e intraparticular. El modelado isotérmico mostró que las ecuaciones de Dubinin-Radushkevich y Redlich-Peterson presentaban la mejor correlación para Metilparabeno y Propilparabeno, respectivamente. Los análisis termodinámicos confirmaron que la adsorción era espontánea y exotérmica. Los cálculos complementarios basados en la teoría funcional de la densidad indicaron que los enlaces de hidrógeno, el apilamiento π - π y las interacciones ácido-base de Lewis eran las principales fuerzas impulsoras implicadas en la eliminación de los parabenos. Estos hallazgos demuestran que el B-MPC es un adsorbente altamente eficiente, que ofrece una alternativa prometedora para la eliminación de contaminantes emergentes del agua.

Palabras clave: Carbono mesoporoso, Boro, Metilparabeno, Propilparabeno, adsorción.

ABSTRACT

In this study, a boron-doped mesoporous carbon (B-MPC) was synthesized from sucrose as a natural carbon source and boric acid as a dopant precursor. The resulting material exhibited a high specific surface area ($>897 \text{ m}^2\cdot\text{g}^{-1}$) and a well-defined porous structure, as confirmed by Fourier-transform infrared spectroscopy, X-ray photoelectron spectroscopy, and zeta potential analyses. The adsorption performance of B-MPC was evaluated using methylparaben and propylparaben as model pollutants. The optimal operating conditions were pH 6, adsorbent dose of $0.2 \text{ g}\cdot\text{L}^{-1}$, and equilibrium times of 90 min methylparaben and 45 min propylparaben. Maximum adsorption capacities reached 116.4 and $134.4 \text{ mg}\cdot\text{g}^{-1}$ for methylparaben and propylparaben, respectively. Kinetic studies revealed that the pseudo-second-order model provided the best fit, indicating that chemisorption is the dominant mechanism, governed by external and intraparticle diffusion. Isothermal modeling showed that the Dubinin–Radushkevich and Redlich–Peterson equations exhibited the best correlation for methylparaben and propylparaben, respectively. Thermodynamic analyses confirmed that adsorption was spontaneous and exothermic. Complementary Density functional theory based calculations indicated that hydrogen bonding, π – π stacking, and Lewis acid–base interactions were the main driving forces involved in paraben removal. These findings demonstrate that B-MPC is a highly efficient and sustainable adsorbent, offering a promising alternative for the removal of emerging contaminants from water.

Keywords: Mesoporous carbón, Boro, Methylparaben, Propylparaben, adsorption

ÍNDICE

AGRADECIMIENTO	ii
DEDICATORIA	iii
RESUMEN	iv
ABSTRACT.....	v
ÍNDICE DE TABLAS	ix
ÍNDICE DE FIGURAS.....	x
INTRODUCCIÓN	11
CAPITULO I	15
PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA.....	15
1.1 Fundamentación del problema.....	15
1.2 Formulación del problema.....	16
1.2.1. Problema general.....	16
1.2.2. Problemas específicos.....	16
1.3 Objetivos.....	17
1.3.1. Objetivo general.....	17
1.3.2. Objetivos específicos	17
1.4. Definición y operacionalización de las variables	17
1.5. Hipótesis	18
1.5.1. Hipótesis general	18
1.6. Justificación	19
1.6.1. Ambiental.....	19
1.6.2. Social.....	19
1.6.3. Económico.....	19
CAPÍTULO II.....	21

MARCO TEÓRICO.....	21
2.1.1. Antecedentes Internacionales	21
2.2 Bases teóricas.....	23
2.2.1. Conservantes	23
2.2.2. Peligros relacionados al uso de Parabenos.....	24
2.2.3. Parabenos como contaminante emergente	25
2.2.4. Adsorción	26
2.2.5. Entalpía la adsorción	27
2.2.6. Equilibrio de la adsorción	28
2.2.7. Cinética de adsorción.....	33
2.2.8. Situación actual de la contaminación por parabenos	34
2.2.9. Adsorventes	35
CAPÍTULO III.....	36
METODOLOGÍA DE LA INVESTIGACIÓN	36
3.1 Ámbito de estudio	36
3.2 Tipo, nivel y diseño de investigación	36
3.2.1. Tipo.....	36
3.2.2. Nivel	37
3.2.3. Diseño de investigación.....	37
3.3.1. Población	39
3.3.2. Muestra	39
3.4. Procedimientos, técnicas e instrumentos de recolección de datos	39
3.4.1. Materiales	39
3.4.2. Caracterización del adsorbente	41
3.4.3. Procedimiento para los ensayos de adsorción	43

3.4.4. Estudios de adsorción	44
3.5. Análisis de datos	46
3.6. Consideraciones éticas.....	46
CAPÍTULO IV.....	48
RESULTADOS Y DISCUSIONES.....	48
4.1. Presentación de Resultados y Discusiones	48
4.1.1. Caracterización de nanomateriales.....	48
4.1.2. Ensayos de adsorción	60
4.1.3. Estudios de Adsorción	65
4.2. Prueba de Hipótesis	74
CONCLUSIONES	78
RECOMENDACIONES.....	79
REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	80
ANEXOS	90

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1 Operacionalización de variables	17
Tabla 2 Modelos cinéticos	44
Tabla 3 Modelos Isotérmicos	45
Tabla 4 Modelos cinéticos no lineares para metilparabeno y propilparabeno.....	67
Tabla 5 Parámetros de isothermas de metilparabeno y propilparabeno	71
Tabla 6 Parámetros termodinámicos del metilparabeno y propilparabeno a 25, 35 y 45 °C..	73

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1 Estructura química del metilparabeno y propilparabeno.....	24
Figura 2 Formas de isothermas cóncavas (favorables), convexas (desfavorables) y lineales..	s 29
Figura 3 Tipos de isothermas según clasificación IUPAC	29
Figura 4 Curvas de adsorción según clasificación de Giles.....	31
Figura 5 Mapa del lugar de estudio	36
Figura 6 Flujograma del procedimiento para la preparación de carbonos mesoporosos dopados con boro (B-MPC)	40
Figura 7 Morfología de los carbonos mesoporosos con SEM	48
Figura 8 Espectroscopía infrarroja por transformada de Fourier	50
Figura 9 Mediciones del potencial Zeta	52
Figura 10 Espectroscopia de fotoelectrones de rayos X para B-MPC	54
Figura 11 Espectroscopia de fotoelectrones de rayos X para B-MPC+ Metilparabeno.	56
Figura 12 Espectroscopia de fotoelectrones de rayos X para B-MPC + Propilparabeno	58
Figura 13 Variación de dosis de adsorbente	60
Figura 14 Influencia de la variación del pH en la eliminación de metilparabeno y propilparabeno	62
Figura 15 Modelos cinéticos de metilparabeno y propilparabeno	66
Figura 16 Isothermas de adsorción para Metilparabeno y propilparabeno	70
Figura 17 Gráfico Q-Q de Metilparabeno.....	75
Figura 18 Gráfico Q-Q de Propilparabeno.....	75
Figura 19 T test.....	76

INTRODUCCIÓN

La contaminación del agua representa uno de los problemas ambientales más urgentes a nivel mundial, intensificado por el crecimiento acelerado de la población y las presiones derivadas del cambio climático (Yang et al., 2022; Tang et al., 2022). Este escenario se ve agravado por la expansión urbana e industrial, que no solo incrementa la demanda de agua, sino que también genera volúmenes cada vez mayores de aguas residuales (Tkaczyk et al., 2020). Estas descargas, al ingresar a los cuerpos hídricos, transportan una amplia variedad de contaminantes. Dentro de este grupo, los denominados contaminantes emergentes han cobrado especial atención por su persistencia, difícil eliminación en tratamientos convencionales y su capacidad de bioacumulación (Grassi et al., 2012; Vale et al., 2022). Su presencia creciente en el ambiente acuático plantea serios riesgos tanto para la salud humana como para la integridad de los ecosistemas, al impactar negativamente sobre organismos a lo largo de la cadena trófica.

En diversos estudios, se ha reportado una alta presencia de conservantes de la familia de los parabenos en medios acuáticos, siendo el metilparabeno y el propilparabeno los compuestos más comúnmente detectados. Por ejemplo, en un estudio realizado en arroyos de la ciudad de La Plata, Argentina, se identificaron concentraciones de metilparabeno en agua entre 0.007 y 0.251 nanogramo por mililitro ($\text{ng}\cdot\text{ml}^{-1}$), y de propilparabeno entre 0.003 y 0.086 $\text{ng}\cdot\text{ml}^{-1}$. En sedimentos, las concentraciones oscilaron entre 2.690 y 6.880 nanogramo por gramo ($\text{ng}\cdot\text{g}^{-1}$) para metilparabeno, y entre 0.430 y 0.540 $\text{ng}\cdot\text{g}^{-1}$ para propilparabeno (Ramos, 2022). Estos hallazgos reflejan una amplia distribución de estos compuestos en cuerpos de agua naturales, lo cual sugiere una exposición continua de los organismos acuáticos a estos contaminantes. Asimismo, en Perú, específicamente en la ciudad de Arequipa, en ecosistemas alto andinos en la Reserva Nacional de Salinas y Aguada Blanca, se reportó la presencia de propilparabeno en el 49% de las muestras de cuerpos de agua y hasta 7.7 $\text{ng}\cdot\text{g}^{-1}$ en muestras de pelo de alpacas, mientras que el metilparabeno se detectó en el 100% de los cuerpos de agua analizados y alcanzó concentraciones de hasta 3.54 $\text{ng}\cdot\text{g}^{-1}$ en pelo, lo que confirma la persistencia y bioacumulación de estos compuestos en ecosistemas altoandinos (Flores, 2021).

Estos parabenos, son comúnmente utilizados en productos cosméticos,

farmacéuticos y de cuidado personal (Haman et al., 2015) se consideran contaminantes emergentes (Bratkowska et al., 2011) su presencia en las aguas residuales puede tener efectos adversos sobre la salud humana y el medio ambiente (Vale et al., 2022). Se ha encontrado la presencia de parabenos en varios tejidos y fluidos corporales, como la orina humana, el suero, la leche materna, el tejido placentario y el tejido tumoral de mama (Błędzka et al., 2014). Dada la toxicidad de estos compuestos y su aparición recurrente en los cuerpos de agua, son necesarios cambios en los tratamientos actuales del agua. Una forma de cambiar este escenario es el desarrollo de nuevas tecnologías eficientes, de bajo costo y renovables para el tratamiento del agua contaminada.

La incorporación de tecnologías avanzadas a métodos tradicionales de ingeniería representa una oportunidad para mejorar el tratamiento de aguas y residuos. Los nanomateriales, por sus propiedades superficiales únicas, resultan eficaces en la eliminación de contaminantes, aplicándose como nanomembranas (Singh et al., 2021), nanoadsorbentes (He et al., 2021; Marcos-Hernández et al., 2021), nanocatalizadores (X. Wang et al., 2020) y agentes demulsificantes (Raya et al., 2020). Diversas estrategias se investigan actualmente para mitigar la contaminación hídrica, destacando la adsorción por su eficiencia y bajo costo (Kim & Zoh, 2016). En este campo, los carbones mesoporosos han mostrado alto rendimiento en la remoción de contaminantes como fármacos (Camparotto et al., 2023), colorantes (Samarghandi et al., 2017) y parabenos (Moreno-Marengo et al., 2019) (Belhachemi, 2021; Grassi et al., 2012).

En la literatura se pueden hallar ejemplos que demuestran la capacidad adsorbente de los carbones mesoporosos (MPC). Por ejemplo, Galán et al. (2013) sintetizaron un MPC que fue empleado para adsorber negro azul naftol, negro reactivo 5 y azul brillante remazol R, alcanzando capacidades máximas de adsorción de 270 $\text{mg}\cdot\text{g}^{-1}$ para negro azul naftol, 270 $\text{mg}\cdot\text{g}^{-1}$ para negro reactivo 5 y 280 $\text{mg}\cdot\text{g}^{-1}$ para remazol bright blue R, logrando el equilibrio de adsorción en menos de 1 hora. Otro caso es el MPC sintetizado por Hubetska et al., (2020), utilizado para la adsorción del antibiótico tetraciclina, con una capacidad máxima de adsorción de 909,2 $\text{mg}\cdot\text{g}^{-1}$ y alcanzando el equilibrio de adsorción en aproximadamente 20 minutos. Además, diferentes estudios han documentado la producción de MPC a partir de recursos económicos y renovables, tales como la paja de arroz, cáscaras de cebolla, maíz, aceite de palma, cáscaras de pomelo y cáscaras de naranja (Sobrinho et al., 2019; Verma et al., 2020; Wu et al., 2019). Los azúcares, que son una fuente principal de MPC, derivan de

los carbohidratos, lo que facilita la obtención de carbono mediante un proceso sencillo de carbonización por deshidratación.

Los MPC derivados de sacarosa están libres de impurezas y su proceso de fabricación es muy económico (Subramanian & Viswanathan, 2015). La sacarosa, un disacárido no reductor formado por D-glucosa y D-fructosa unidas por un enlace glicosídico, se clasifica como un poliol con ocho grupos hidroxilo reactivos, tres primarios (6, 1' y 6') y cinco secundarios (2, 3, 4, 3' y 4') (Boscolo, 2003). Se produce ampliamente en varios países y tiene dos principales fuentes naturales de extracción: la remolacha (*Beta vulgaris* subsp. *vulgaris* var. *altissima* Döll.) y la caña de azúcar (*Saccharum officinarum* L.) (Brückner & Höfer, 2021). Para mejorar la capacidad de adsorción y las propiedades de los MPC, su superficie se suele modificar. Ejemplos de estas modificaciones incluyen la adición de ácido húmico, iones de hierro y zinc. Estas modificaciones aumentan la superficie de los MPC y facilitan interacciones entre los adsorbentes y los adsorbatos mediante enlaces de hidrógeno, fuerzas de van der Waals e interacciones electrostáticas (Zheng et al., 2020). Específicamente, la introducción de heteroátomos como oxígeno, nitrógeno y halógenos combinados con capas de átomos de carbono puede ajustar las propiedades químicas de las superficies de los carbonos mesoporosos, mejorando así su eficiencia de adsorción (Zheng et al., 2020).

Los MPC dopados con boro (B) tienen numerosos usos, como almacenamiento de energía y catálisis en reacciones de síntesis orgánica, ya que presentan excelentes propiedades físicas, químicas, mecánicas y electrónicas. Agregar B a los MPC puede mejorar su polaridad, su electrónica y su tendencia a la donación de electrones. La presencia de B al tener un tamaño atómico similar al C y al N se incorpora al MPC, reemplazando al carbono en los sitios trigonales puede actuar como aceptor de electrones, ya que B tiene solo tres electrones en la capa de valencia (D.-W. Wang et al., 2008).

La literatura científica carece de investigaciones sobre el impacto de los carbonos mesoporosos dopados con boro para la adsorción de conservantes como el metilparabeno y el propilparabeno, por lo que este artículo busca llenar esa brecha de conocimiento. En este sentido, el objetivo de este estudio fue la síntesis de carbonos mesoporosos a partir de sacarosa dopados con boro, seguido de su caracterización y la evaluación de su capacidad de adsorción para los conservantes metilparabeno y propilparabeno.

Este trabajo se encuentra alineado con los Objetivos de Desarrollo Sostenible (ODS) de la Agenda 2030, particularmente con el 6, específicamente la meta 6.3, que busca “mejorar la calidad del agua reduciendo la contaminación, eliminando el vertimiento y minimizando la emisión de productos químicos y materiales peligrosos” (ONU, 2015); el 12, en la meta 12.4, orientada a “lograr la gestión ambientalmente racional de los productos químicos y de todos los desechos a lo largo de su ciclo de vida” (ONU, 2015); y el 14, en la meta 14.1, que establece “prevenir y reducir significativamente la contaminación marina de todo tipo, en particular la producida por actividades terrestres, incluidos los desechos marinos y la contaminación por nutrientes” (ONU, 2015). En ese sentido, la presente investigación contribuye al avance científico tecnológico para la mitigación de contaminantes emergentes y la protección de los ecosistemas acuáticos.

CAPITULO I

PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

1.1 Fundamentación del problema

En la actualidad, la contaminación del agua constituye uno de los desafíos ambientales más críticos a nivel global, debido a su impacto directo sobre la salud humana, la biodiversidad y la sostenibilidad de los ecosistemas acuáticos (Yang et al., 2022). Este problema se ha intensificado como consecuencia del acelerado crecimiento poblacional y la expansión de las actividades urbanas e industriales, lo que ha incrementado significativamente la demanda de agua y, paralelamente, la generación de aguas residuales (Tang et al., 2022; Tkaczyk et al., 2020). A escala mundial, diversos estudios han evidenciado la presencia de contaminantes emergentes en cuerpos de agua superficiales; por ejemplo, una investigación realizada en 2023 por el Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC) reportó la detección de 59 microcontaminantes orgánicos, entre ellos parabenos pertenecientes a distintos grupos químicos, en aguas de 140 Áreas Importantes para la Conservación de las Aves y la Biodiversidad (IBA) en España (Dulsat et al., 2023), lo que confirma la magnitud y persistencia de esta problemática.

En América Latina, la situación resulta particularmente preocupante debido a la limitada cobertura y eficiencia de los sistemas de tratamiento de aguas residuales, sumada al crecimiento urbano desordenado y a una gestión ambiental insuficiente, lo que favorece el vertimiento de efluentes domésticos e industriales con una alta carga contaminante en ríos, lagos y zonas costeras. En estos cuerpos de agua se han detectado contaminantes emergentes en concentraciones que oscilan entre $\mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ y $\text{ng}\cdot\text{L}^{-1}$, las cuales, aun siendo bajas, representan un riesgo significativo para la biota acuática y para la salud humana a través de la bioacumulación y la transferencia a lo largo de la cadena alimentaria (Kim & Zoh, 2016; Tkaczyk et al., 2020).

A nivel nacional y local, la problemática se agrava por la persistencia de contaminantes emergentes tales como pesticidas, plastificantes, retardantes de llama, productos farmacéuticos, cosméticos, colorantes y conservantes en las fuentes hídricas utilizadas para consumo humano, riego y actividades productivas (Kumar et al., 2022; da Silva et al., 2024). Entre estos compuestos, los conservantes han despertado especial preocupación debido a su potencial como disruptores endocrinos, ya que pueden interferir con la actividad hormonal normal y generar alteraciones en los sistemas

reproductivo y metabólico (Li et al., 2017; Peinado et al., 2023). La exposición crónica a estos contaminantes, especialmente durante etapas críticas del desarrollo como la gestación, la infancia y la pubertad, se ha asociado con efectos adversos en la salud, incluyendo cáncer, infertilidad, diabetes y enfermedades autoinmunes (Di Pietro et al., 2023). Sin embargo, los sistemas convencionales de tratamiento de agua presentan limitaciones para la remoción eficaz de estos compuestos, lo que permite su liberación continua al ambiente y su acumulación en los ecosistemas acuáticos.

Frente a este escenario, se evidencia la necesidad urgente de fortalecer y optimizar los tratamientos actuales de agua mediante el desarrollo de tecnologías avanzadas, sostenibles y económicamente viables. En este contexto, la incorporación de nanomateriales en los métodos tradicionales de ingeniería ambiental se perfila como una alternativa prometedora, debido a sus propiedades fisicoquímicas únicas y su elevada eficiencia en la eliminación de contaminantes (He et al., 2021; Marcos-Hernández et al., 2021). Los nanomateriales han demostrado un alto potencial en aplicaciones como nanomembranas (Singh et al., 2021), nanoadsorbentes, nanocatalizadores (Wang et al., 2020) y agentes demulsificantes (Raya et al., 2020), destacándose particularmente la adsorción como una estrategia eficiente y de bajo costo para la remoción de contaminantes orgánicos, incluidos productos farmacéuticos, colorantes y conservantes (Kim & Zoh, 2016). En este sentido, el presente estudio se alinea con los Objetivos de Desarrollo Sostenible, especialmente con el ODS 6.3, orientado a mejorar la calidad del agua mediante la reducción de la contaminación; el ODS 12.4, enfocado en la gestión ambientalmente racional de productos químicos; y el ODS 14.1, dirigido a la disminución de la contaminación marina de origen terrestre, contribuyendo así a la protección y sostenibilidad de los recursos hídricos.

1.2 Formulación del problema

1.2.1. Problema general

¿Cuál es la efectividad de los carbonos mesoporosos dopados con boro (B-MPC) en la eliminación de conservantes del agua?

1.2.2. Problemas específicos

- ¿Cuál es la influencia de la sacarosa para sintetizar B-MPC?
- ¿Cuál es la estructura morfológica, composición química y carga superficial de los B-MPC, utilizando técnicas de microscopía electrónica de barrido (SEM), Transformación Infrarroja de Fourier (FTIR), potencial Zeta y espectroscopia

fotoelectrónica de rayos X (XPS)?

- ¿Cuál es la influencia del tiempo de contacto, pH, concentración y temperatura de contaminantes y adsorbentes en el proceso de adsorción discontinua de los B-MPC?
- ¿Cuál es la cinética de adsorción, las isothermas de adsorción y los parámetros termodinámicos relevantes en los procesos de adsorción de conservantes del agua utilizando los B-MPC?

1.3 Objetivos

1.3.1. *Objetivo general*

Evaluar la efectividad de preparar nuevos carbonos mesoporosos dopados con boro (B-MPC), caracterizarlos y aplicarlos para eliminar conservantes del agua.

1.3.2. *Objetivos específicos*

- Sintetizar B-MPC a partir de la sacarosa.
- Caracterizar el B-MPC mediante microscopía electrónica de barrido (SEM), Transformación Infrarroja de Fourier (FTIR), potencial Zeta y espectroscopia fotoelectrónica (XPS).
- Desarrollar experimentos de adsorción discontinua y optimizar el proceso de adsorción variando aspectos como: tiempo de contacto, pH, concentración y temperatura de contaminantes y adsorbentes.
- Analizar la cinética, isothermas y parámetros termodinámicos implicados en los procesos de adsorción.

1.4. Definición y operacionalización de las variables

Tabla 1

Operacionalización de variables

VARIABLES	DEFINICIÓN CONCEPTUAL	DIMENSIONES	INDICADORES	UNIDAD DE MEDIDA
Independientes:	Dosis del Carbón Mesoporoso dopado con Boro:		1mg 2mg 3mg 4mg	mg.L ⁻¹
- Dosis de los B-MPC	Cantidad de carbón empleado en las pruebas del	Dosis del adsorbente		
- pH del contaminante	espectrofotómetro para evaluar su			
- Tiempo de contacto	comportamiento			

<ul style="list-style-type: none"> - Temperatura del contaminante - Concentración del contaminante 	<p>pH: variación de pH empleado en las pruebas de adsorción.</p>	pH	<p>Concentración ácida: 2,4 Concentración neutra: 6 Concentración Básica: 8,10,12</p>	-
	<p>Tiempo de contacto: cambio en la velocidad con la que las moléculas de un adsorbato se adhieren a la superficie de un adsorbente.</p>	Tiempo de contacto	<p>Baja: 2,5,10,20,30, Media: 45,60,90, Alta: 120,150,180,210 minutos</p>	Minutos
	<p>Temperatura del contaminante: Temperatura al que es expuesto el contaminante.</p>	Temperatura del contaminante	<p>Baja:25, Media:35 Alta:45</p>	°C
	<p>Concentración del contaminante: Cantidad de adsorbato que se fija en la superficie del adsorbente según la concentración del adsorbato en la fase líquida.</p>	Concentración de contaminante	<p>Baja: 5,10,20, Media:30,40,50, Alta: 60,80,100</p>	mg.L ⁻¹
<p>Dependientes:</p> <ul style="list-style-type: none"> - Remoción de Propilparabeno - Remoción de metilparabeno 	<p>Remoción de Propilparabeno: Proceso de eliminar o reducir la presencia de propilparabeno en aguas contaminadas.</p>	-	<p>Miligramos por gramo</p>	mg g ⁻¹
	<p>Remoción de metilparabeno. Proceso de eliminar o reducir la presencia de metilparabeno en aguas contaminadas.</p>	-	<p>Miligramos por gramo</p>	mg.g ⁻¹
<p>De confusión:</p> <ul style="list-style-type: none"> - Control de temperatura - Control de Agitación 	<p>Control de Temperatura: Se utilizó una incubadora para cada proceso.</p>	-	<p>Grados Celsius</p>	°C
	<p>Control de Agitación: Se realizaron las agitaciones con un equipo estandarizado.</p>	-	<p>Revoluciones por Minuto</p>	RPM

1.5.Hipótesis

1.5.1. Hipótesis general

Los carbonos mesoporosos dopados con boro removerán significativamente conservantes de aguas contaminadas, se evidenciará diferencias significativas entre ambos conservantes.

1.6. Justificación

1.6.1. Ambiental

Los parabenos representan hoy en día un importante desafío medioambiental (Vale et al., 2022). Compuestos como el metilparabeno, propilparabeno y butilparabeno, ampliamente utilizados en productos cosméticos, farmacéuticos y de cuidado personal (Haman et al., 2015), son considerados contaminantes emergentes (Bratkowska et al., 2011). Su presencia en aguas residuales puede generar impactos negativos tanto en la salud humana como en los ecosistemas acuáticos (Vale et al., 2022). Estudios han demostrado la bioacumulación de estos compuestos en fluidos y tejidos humanos, incluyendo orina, suero, leche materna, tejido placentario y tejido tumoral de mama (Błędzka et al., 2014).

En este contexto, y en concordancia con los ODS 12.4 gestión ambientalmente racional de productos químicos y 14.1 reducción significativa de la contaminación marina de origen terrestre, surge la necesidad de implementar tecnologías innovadoras, renovables y de bajo costo que permitan remover de manera eficiente estos contaminantes del agua. Los nanomateriales, gracias a sus propiedades singulares, se han consolidado como una alternativa prometedora en aplicaciones como nanomembranas (Singh et al., 2021), nanoadsorbentes (He et al., 2021; Marcos-Hernández et al., 2021), nanocatalizadores (X. Wang et al., 2020) y agentes demulsificantes (Raya et al., 2020).

1.6.2. Social

La contaminación por parabenos en cuerpos de agua pone en riesgo la salud pública, dado que estas sustancias han sido detectadas en fluidos corporales humanos y se asocian con posibles efectos tóxicos (Błędzka et al., 2014). Por ello, el desarrollo de tecnologías sostenibles para la remoción de estos contaminantes contribuye directamente a la protección de la salud de las comunidades y a la reducción de la exposición a compuestos nocivos.

Este enfoque está alineado con el ODS 6, meta 6.3, que busca mejorar la calidad del agua mediante la reducción de la contaminación y el control de vertidos

peligrosos. Asimismo, la implementación de procesos más limpios refuerza la conciencia ambiental en la sociedad promoviendo la adopción de prácticas responsables en el consumo de productos y el manejo de recursos hídricos, fortaleciendo así la cultura de sostenibilidad a largo plazo.

1.6.3. Económico

Desde el punto de vista económico, las tecnologías basadas en adsorción destacan por ser una de las estrategias más viables y de menor costo en el tratamiento de aguas contaminadas (Kim & Zoh, 2016). Los materiales mesoporosos de carbono (MPC), especialmente aquellos dopados con boro, presentan ventajas notables debido a sus propiedades físicas, químicas y electrónicas mejoradas (D.-W. Wang et al., 2008). Estos materiales no solo son eficientes en la adsorción de compuestos orgánicos (Belhachemi, 2021), sino también aplicables en la eliminación de productos farmacéuticos (Camparotto et al., 2023), colorantes (Samarghandi et al., 2017) y parabenos (Moreno-Marengo et al., 2019).

Además, los precursores para su producción, como la caña de azúcar (*Saccharum officinarum L.*) y la remolacha (*Beta vulgaris subsp. vulgaris var. altissima Döll.*), son ampliamente cultivados, lo que facilita la disponibilidad de materia prima a bajo costo (Brückner & Höfer, 2021). De esta manera, la investigación y aplicación de MPC contribuyen al desarrollo de soluciones económicas, sostenibles y escalables en el tratamiento de aguas residuales.

CAPÍTULO II

MARCO TEÓRICO

2.1 Antecedentes

2.1.1. Antecedentes Internacionales

Moreno et al. (2019) desarrollaron la investigación titulada “Parabens Adsorption onto Activated Carbon: Relation with Chemical and Structural Properties”, cuyo objetivo general fue evaluar la capacidad de adsorción de parabenos presentes en aguas residuales mediante un compuesto reciclable de carbón activado mediante quitosano obtenido a partir de neumáticos de desecho y con propiedades magnéticas. La metodología consistió en la síntesis del adsorbente, su caracterización fisicoquímica mediante técnicas como BET y análisis estructurales, así como la evaluación del proceso de adsorción a través de estudios cinéticos e isotérmicos. Los resultados evidenciaron una superficie específica elevada de $1281 \text{ m}^2 \cdot \text{g}^{-1}$ y un tamaño de poro promedio de 4.05 nm, así como una alta afinidad por los parabenos, con capacidades máximas de adsorción de $85.9 \text{ mg} \cdot \text{g}^{-1}$ para metilparabeno y $90.0 \text{ mg} \cdot \text{g}^{-1}$ para propilparabeno, ajustándose al modelo de Langmuir y a una cinética de pseudo-segundo orden. El material mantuvo su estabilidad y eficiencia tras siete ciclos de adsorción–desorción, alcanzando hasta un 100 % de eliminación en muestras reales de aguas residuales. Se concluyó que el compuesto es un adsorbente eficiente, rentable y reutilizable para la eliminación de parabenos en medios acuosos.

Camparotto et al. (2023) realizaron el estudio titulado “Comparative effect of mesoporous carbon doping on the adsorption of pharmaceutical drugs in water: Theoretical calculations and mechanism study”, donde el objetivo general fue analizar el efecto del dopaje de carbono mesoporoso en la adsorción de fármacos presentes en agua. La metodología incluyó la síntesis de carbonos mesoporosos dopados con boro y nitrógeno a partir de sacarosa, ácido bórico y cianamida, su caracterización estructural y superficial, así como estudios cinéticos, isotérmicos y cálculos teóricos basados en DFT. Los resultados mostraron estructuras tridimensionales altamente porosas con áreas superficiales superiores a $1000 \text{ m}^2 \cdot \text{g}^{-1}$ y capacidades de adsorción de hasta $78 \text{ mg} \cdot \text{g}^{-1}$ para diclofenaco sódico y $101 \text{ mg} \cdot \text{g}^{-1}$ para paracetamol. Los análisis indicaron que el proceso de adsorción estuvo

controlado por difusión externa e intrapartícula, con formación de multicapas. Los cálculos DFT revelaron que los enlaces de hidrógeno y las interacciones ácido-base de Lewis fueron los principales mecanismos de adsorción. Se concluyó que el dopaje heteroatómico mejora significativamente el desempeño adsorbente de los carbonos mesoporosos.

Conte y Gómez (2024) desarrollaron la investigación titulada “Improving the sorption properties of mesoporous carbons for the removal of cobalt, nickel and manganese from spent lithium-ion batteries effluent”, cuyo objetivo general fue mejorar las propiedades de sorción de carbonos mesoporosos para la eliminación competitiva de metales provenientes de efluentes de baterías de ion-litio gastadas. La metodología consistió en la síntesis de carbonos mesoporosos activados mediante el método de réplica con gel de sílice, seguida de activación física con O₂ y funcionalización química con NaClO₂/H₂O₂, así como ensayos de sorción y desorción en soluciones mono y multimetálicas. Los resultados mostraron una alta capacidad de sorción para Co²⁺, Ni²⁺ y Mn²⁺, superando el 80 % de remoción en soluciones monometálicas y alcanzando 18 mg·g⁻¹ para Co²⁺ en sistemas multimetálicos, mientras que la sorción de Li⁺ fue limitada. La desorción ácida permitió recuperar eficientemente los metales y duplicar sus concentraciones iniciales. Se concluyó que la activación física y la funcionalización química potencian significativamente la eficiencia de los carbonos mesoporosos para la recuperación selectiva de metales.

Da Silva et al. (2024) presentaron el estudio titulado “Green composites based on magnetic N-doped carbons: Synergetic effect on the simultaneous adsorption of emerging contaminants from wáter”, donde el objetivo general fue evaluar la eliminación simultánea de contaminantes emergentes en agua mediante compuestos verdes basados en carbonos mesoporosos dopados con nitrógeno y nanopartículas magnéticas. La metodología incluyó la síntesis de los compuestos a partir de fuentes renovables, su caracterización y la evaluación de la adsorción de colorantes y fármacos en sistemas individuales y mixtos, así como pruebas de reutilización. Los resultados evidenciaron capacidades máximas de adsorción de 713.3 mg·g⁻¹ para verde malaquita y 606.8 mg·g⁻¹ para violeta cristal, además de un efecto sinérgico notable en la adsorción de atenolol y diclofenaco en presencia de colorantes. En muestras reales de agua de río se logró eliminar hasta el 98 % de

los colorantes, manteniendo una eficiencia superior al 70 % tras siete ciclos de reutilización. Se concluyó que las interacciones electrostáticas, π - π y los enlaces de hidrógeno gobiernan el proceso de adsorción y que los compuestos desarrollados son altamente eficaces y sostenibles.

Gong et al. (2024) desarrollaron la investigación titulada “Synthesis of Mn.Cu⁻¹ co-doping mesoporous carbon by template method for gas phase mercury removal”, cuyo objetivo general fue sintetizar y evaluar un sorbente de carbono mesoporoso codopado con Mn y Cu para la eliminación de mercurio en fase gaseosa. La metodología consistió en la síntesis del material mediante el método de plantilla dura, utilizando azul de timol como fuente de carbono y MCM-41 como plantilla, seguido de su caracterización mediante BET, SEM, FTIR, XRD y XPS, así como ensayos de eliminación de mercurio en un sistema de lecho fijo y análisis mecanísticos mediante Hg-TPD y DFT. Los resultados mostraron que el sorbente MnCu0.1^{-C} alcanzó un alto rendimiento de eliminación de mercurio a 150 °C, incrementando la eficiencia de captura del 6 % al 89 % gracias al dopaje con Mn, mientras que el dopaje con Cu mejoró significativamente la tolerancia al SO₂. Se concluyó que el material desarrollado presenta un alto potencial como adsorbente para la remoción de mercurio en gases de combustión industriales.

2.2 Bases teóricas

2.2.1. Conservantes

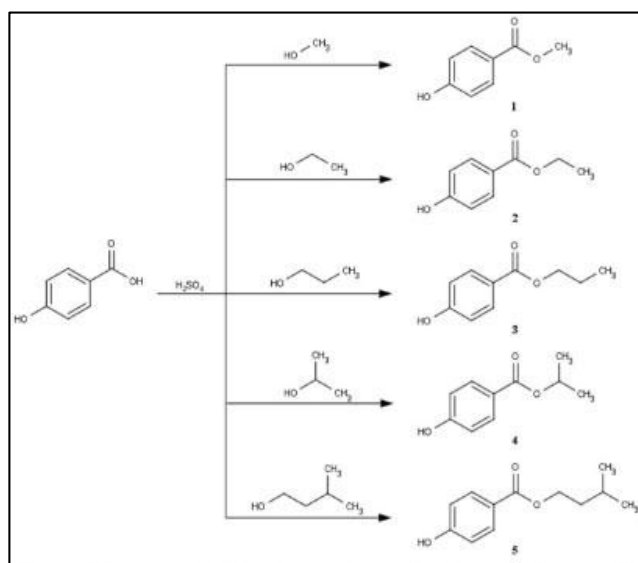
Los conservantes se utilizan en muchos productos cosméticos para extender su vida útil, evitando el crecimiento de microorganismos que pueden causar enfermedades o deteriorar la calidad visual del producto final (Gaidhani et al., 2024) Los parabenos, que son ésteres derivados del ácido 4-hidroxibenzoico, se emplean comúnmente como conservantes antimicrobianos en cosméticos, envases alimentarios y productos farmacéuticos. Además, estos compuestos se encuentran en productos como cigarrillos, barnices, pegamentos, alimentos para animales y artículos de cuidado de la salud (Pereira et al., 2023). Entre los conservantes más utilizados en los productos cotidianos están el metilparabeno y el propilparabeno (Tung et al., 2024). La exposición humana a los parabenos se ha asociado con resultados adversos para la salud, ya que el metilparabeno y el propilparabeno tienen propiedades estrogénicas (Huang et al., 2024). Eliminar el grupo éster de

una unidad de parabeno no elimina sus efectos estrogénicos. Tanto los estudios in vitro como los in vivo han demostrado que el metabolito común de los parabenos, el ácido 4-hidroxibenzoico (4-HB), es estrogénico. Además, en estudios con animales de laboratorio se ha informado de la hidroxilación de 4-HB a ácido 3,4-dihidroxibenzoico (3,4-DHB) (Pereira et al., 2023).

El metilparabeno se utiliza como conservante antimicrobiano en agua, alimentos, formulaciones cosméticas y farmacéuticas, incluidas las pastas de dientes. Aparece como un polvo cristalino prácticamente sin olor ni sabor (Gaidhani et al., 2024). En este estudio se exploró el uso de metilparabeno y propilparabeno, las soluciones se prepararon con agua destilada para ambos contaminantes (conocidos comercialmente como Nipagim® y Nipazol®). Sus estructuras químicas están representadas en la Figura 1.

Figura 1

Estructura química del metilparabeno y propilparabeno



Adaptado de: Santos (2012)

2.2.2. Peligros relacionados al uso de Parabenos

Los peligros asociados al uso de parabenos están relacionados principalmente con las características de las moléculas de estas sustancias, que se utilizan habitualmente en formulaciones cosméticas (Khan et al., 2024). Los parabenos tienen un peso molecular bajo y cuanto más larga sea la cadena de carbono que contienen, mayor será su propensión a ser liposolubles, es decir, solubles en grasa. Estas propiedades facilitan la absorción de los parabenos por la

piel (Moorchilot et al., 2024).

Una vez absorbidos, los parabenos sufren un proceso de hidrólisis, donde parte de las moléculas se conjugan y se excretan de forma natural a través de la orina (Leo-Martos et al., 2024). Sin embargo, una parte permanece libre en el organismo, lo que puede provocar una acumulación de estas sustancias con el tiempo. Esta acumulación genera preocupación sobre posibles efectos nocivos para la salud (Mao et al., 2024).

Aunque la investigación sobre los efectos de los parabenos aún está en curso, algunos estudios sugieren que la acumulación de estas sustancias en el cuerpo puede estar asociada con preocupaciones relacionadas con alteraciones hormonales y otros impactos en la salud (Tung et al., 2024). Por ello, se recomienda precaución al utilizar productos que contengan parabenos, especialmente en productos de cuidado personal que se aplican directamente sobre la piel y pueden contribuir a la absorción de estas sustancias.

En 1998, Routledge informó por primera vez de la presencia de concentraciones de parabenos en tejido mamario canceroso, lo que marcó el comienzo de una extensa investigación sobre los efectos nocivos de estas sustancias. Posteriormente, se encontró que los parabenos poseen propiedades estrogénicas, lo que implica que, al ingresar al torrente sanguíneo, pueden funcionar como desreguladores hormonales (Moorchilot et al., 2024).

2.2.3. Parabenos como contaminante emergente

Durante un período considerable, los parabenos se consideraron completamente seguros, lo que provocó la ausencia de una legislación estricta para su uso y un tratamiento avanzado limitado en aguas que contienen estos compuestos (Vale et al., 2022). Los residuos generados por las industrias cosmética, medicinal, alimentaria y otras que incorporan parabenos en sus formulaciones se gestionan sin tener en cuenta las características específicas y los desafíos asociados a la eliminación de estos componentes. Este enfoque también se extendió al tratamiento de aguas residuales que contienen estos ésteres (Kim & Zoh, 2016). La falta de atención a este tema se debe a la percepción de que los parabenos eran inofensivos durante mucho tiempo y, hasta hoy, no todas las industrias prestan la debida atención a este tema (Moorchilot et al., 2024).

Los descubrimientos recientes sobre los efectos adversos asociados con la exposición a los parabenos han estimulado la investigación sobre los impactos de estos compuestos cuando se liberan al medio ambiente. Se sabe que incluso en bajas concentraciones, los disruptores hormonales, como los parabenos, pueden causar daños a varias especies del ecosistema acuático (Pereira et al., 2023). Un ejemplo de esto se observó en un lago de Florida que estaba contaminado con varios disruptores endocrinos, incluidos los parabenos. Los caimanes que habitaban este lago presentaban anomalías en sus sistemas reproductivos. Este hallazgo resalta la creciente preocupación por los efectos ambientales de los parabenos y refuerza la necesidad de comprender y gestionar adecuadamente la presencia de estas sustancias en el medio ambiente (Khan et al., 2024) .

Los contaminantes emergentes, como los parabenos, en la mayoría de las situaciones, no se eliminan eficazmente mediante los tratamientos convencionales de aguas residuales y de agua en general. Por tanto, es necesario utilizar tecnologías específicas para eliminar estas sustancias de los efluentes. Sin embargo, un estudio realizado en 2002 por el IBGE reveló que el 82% de los efluentes que no pasaron por un tratamiento específico para eliminar los contaminantes emergentes fueron descartados en cuerpos de agua que luego serían utilizados para el abastecimiento de agua. Este descubrimiento subraya la necesidad de desarrollar e implementar métodos eficaces para abordar los contaminantes emergentes, con el fin de preservar la calidad del agua destinada al consumo humano (Tachachartvanich et al., 2024).

2.2.4. Adsorción

La adsorción es un proceso fisicoquímico que implica la transferencia de masa desde un fluido hacia un sólido, mediante la adherencia del adsorbato a la superficie del adsorbente (Pinheiro et al., 2020). Esta transferencia ocurre a través de la difusión y se da porque las interacciones entre el adsorbente y el adsorbato son más fuertes que las interacciones entre el soluto y el disolvente.

El proceso de adsorción se puede resumir en tres pasos: 1) difusión del soluto en el fluido; 2) deposición del soluto directamente sobre la superficie del adsorbente; 3) absorción de solutos (He et al., 2013).

Para que se produzca el proceso de adsorción es necesario un desequilibrio

de cargas en la superficie del material adsorbente, generándose un campo de fuerzas que atrae las moléculas de adsorbato de forma espontánea hacia la superficie del sólido durante un determinado periodo de tiempo. Cuanto mayor sea la energía de adsorción, mayor será el tiempo de adsorción.

2.2.4.1. Factores que interfieren en la adsorción

Además de las fuerzas de atracción y el tiempo de adsorción, el proceso está influenciado por factores como el área de superficie, las características del material (estructura química y presencia de poros), la temperatura del sistema, el pH y las cargas superficiales del sólido (Helfferich, 1985).

La capacidad de adsorción está directamente relacionada con la superficie del material adsorbente. A medida que la adsorción tiene lugar en la superficie del material, un incremento en el área superficial mejora la eficacia del proceso (Desta, 2013).

Las características del material adsorbente son decisivas para el proceso de adsorción, ya que la velocidad de adsorción depende del área de la superficie, la porosidad, el volumen de los poros, el tamaño de los poros y los sitios libres en la superficie. Por tanto, los materiales sólidos porosos tienen un gran potencial como materiales adsorbentes.

2.2.5. Entalpía de adsorción

Existen dos tipos de adsorción dependiendo de la entalpía del proceso, física que es por fisisorción o química que corresponde a quimisorción. En la adsorción física (adsorción no específica), la adsorción se produce en toda la superficie del adsorbente y existe la posibilidad de que se formen varias capas de moléculas adsorbidas. Las interacciones entre las moléculas contaminantes y adsorbentes son débiles, con enlaces intermoleculares del tipo Van der Waals o tipo dipolo-dipolo (Zhou et al., 2024). Este tipo de mecanismo ocurre a bajas temperaturas, tiene altas velocidades y es reversible.

A diferencia de la anterior, la adsorción química (adsorción específica) se produce únicamente mediante la creación de enlaces químicos con centros activos en la superficie del adsorbente (Brunauer et al., 1938), es decir, es localizada. La quimisorción presenta características de reacción química y enlaces mucho más

fuertes que la adsorción física. Este mecanismo ocurre a altas temperaturas y es irreversible. Las tasas de adsorción pueden ser lentas o rápidas, dependiendo de la energía de activación.

2.2.6. Equilibrio de la adsorción

La adsorción es un proceso en constante cambio, siendo dinámico por naturaleza. Conforme avanza el tiempo de interacción entre el adsorbente y el adsorbato, se observa una reducción en la velocidad de adsorción y un incremento en la velocidad de desorción, ya que la superficie del material tiende a saturarse. Por lo tanto, el equilibrio se alcanza cuando las velocidades de adsorción y desorción son equivalentes (De Araújo et al., 2018).

En el estudio del equilibrio de adsorción, las isothermas son una herramienta crucial. Estas representan gráficamente la relación entre la cantidad de soluto adsorbido y la cantidad disponible en la solución después de alcanzar el equilibrio. Esencialmente, describen cómo se equilibran las fases sólida y líquida del soluto. Las isothermas son indicativas del estado de equilibrio de la adsorción y proporcionan información clave sobre las propiedades de los adsorbentes, como el área de superficie, el volumen y la distribución de los poros, así como el calor de adsorción (Teixeira et al., 2001).

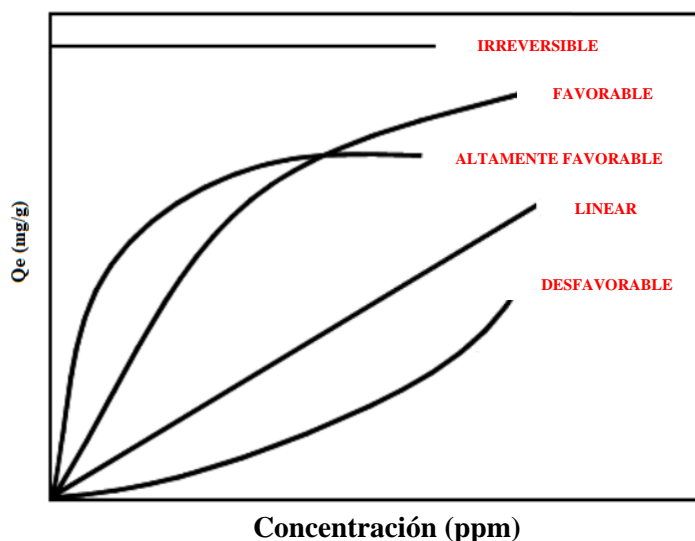
2.2.6.1. Formatos isotérmicos

La forma de las isothermas se da en detrimento del tipo de porosidad del sólido, pudiendo ser lineal, cóncava o convexa.

Las isothermas lineales muestran que la cantidad de adsorbato se incrementa en proporción a la concentración del fluido, sin proporcionar información sobre la capacidad máxima de adsorción. Por otro lado, las isothermas cóncavas indican una alta adsorción del adsorbato, incluso cuando está presente en concentraciones bajas en el fluido, y se denominan isothermas favorables. Las isothermas convexas, también llamadas isothermas desfavorables, tienen características opuestas a la anterior. Estas son curvas que indican una baja adsorción del adsorbato cuando está presente en bajas concentraciones en el fluido (Bracht et al., 2014). Las curvas de isoterma se pueden ver como se muestra en la Figura 2.

Figura 2

Formas de isothermas cóncavas (favorables), convexas (desfavorables) y lineales



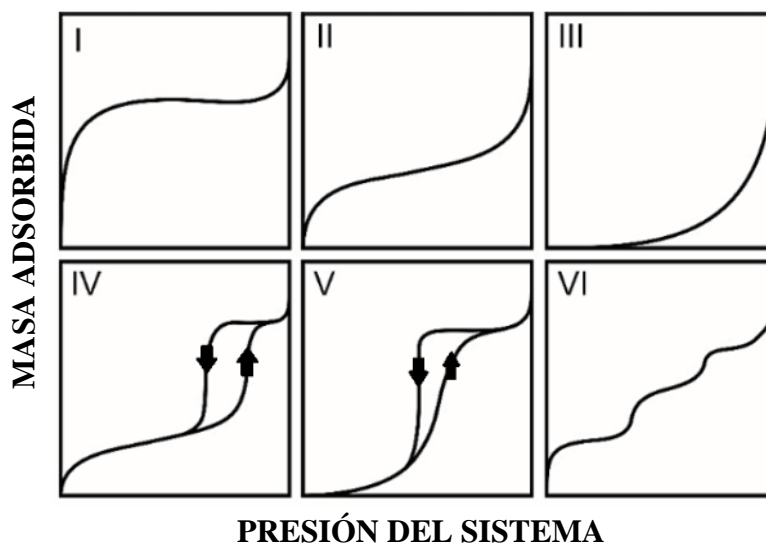
Adaptado de: Reolon (2016)

2.2.6.1.1. El modelo de Brunauer.

Brunauer et al. (1938) agruparon las diversas formas de isoterma mencionadas previamente en cinco tipos, clasificados del I al VI, según se ilustra en la Figura 3 (Giles et al., 1960).

Figura 3

Tipos de isothermas según clasificación IUPAC



Adaptado de: Araujo et al. (2018)

Las isothermas de tipo I son aquellas que ocurren en materiales adsorbentes con microporos y en monocapas (Alleoni et al., 1998). Hay

una adsorción grande y rápida en las etapas iniciales de los microporos seguida de una estabilización debido al llenado de los microporos y seguida de un ligero aumento en la adsorción debido al llenado de los poros más grandes.

Las isothermas de tipo II son aquellas que ocurren con sólidos no porosos o con mesoporos. Presenta una adsorción rápida a bajas presiones, pero una adsorción lenta cuando hay un aumento de presión. El punto de inflexión de la isoterma ocurre cuando toda la capa superficial del adsorbente está cubierta por la primera capa adsorbida. Ambas isothermas I y II tienen una curva en forma de S y también se conocen como isothermas de Langmuir (Lv et al., 2024).

Las isothermas de tipo III pueden ocurrir en materiales porosos y no porosos y representan el sistema en el que las moléculas de adsorbato tienen mayor interacción entre sí y mayor afinidad por el fluido que por el material adsorbente.

Las isothermas de tipo IV configuran el equilibrio obtenido en materiales con meso y macroporos mediante el aumento de presión en el sistema. Una isoterma tipo II puede considerarse como un sistema que conserva sus propiedades en ausencia de un estímulo que las generó (histéresis) (Ferreira et al., 2015).

Las isothermas de tipo V ocurren debido a la disminución de presión en el sistema y, al igual que las de tipo III, se esperan en materiales porosos y no porosos y son reflejos del sistema de interacciones débiles adsorbato-adsorbente en el que hay poca adhesión del adsorbato al adsorbente, su estudio no es interesante para los efectos de materiales porosos.

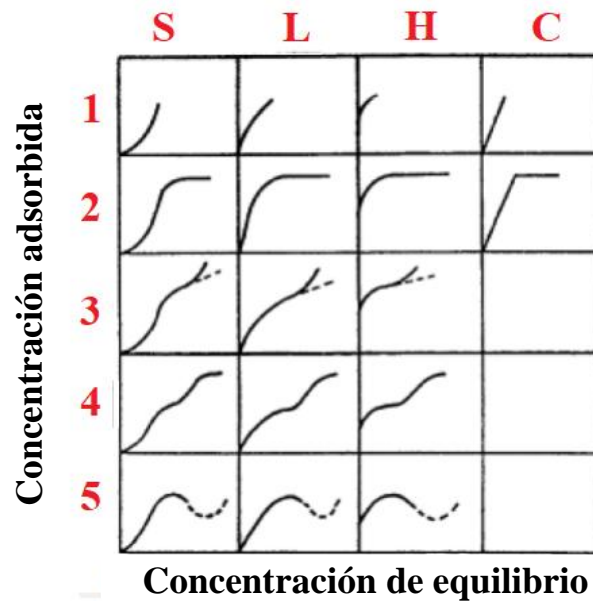
Las isothermas de tipo VI generalmente ocurren en multicapas y se obtienen por adsorción sobre un sólido no poroso con una superficie uniforme, siendo muy rara su ocurrencia.

2.2.6.1.2. El modelo de Giles.

Como una forma de optimizar la clasificación de Brunauer, Giles redujo las isothermas de adsorción en cuatro grupos según su curva gráfica en S, L, H y C presentada en la Figura 4.

Figura 4

Curvas de adsorción según clasificación de Giles



Adaptado de: Giles et al. (1960)

Las isothermas de tipo S (sigmoideas) son características de sistemas cuya adsorción inicial es lenta y aumenta con el aumento de la adsorción por parte del adsorbente, representando una adsorción cooperativa, en la que las moléculas adsorbidas ejercen influencia entre sí.

Las isothermas de tipo L (Langmuir) son las más frecuentes en los estudios de adsorción. Presentan una pendiente no lineal y una curva cóncava seguida de estabilidad, siguiendo los sitios activos libres. Así, la isoterma ocurre en monocapas y disminuye con el tiempo a medida que hay una disminución de los sitios libres hasta el momento en que el adsorbente se satura. Se dice que son favorables.

Las isothermas de tipo H, que representan una alta afinidad, señalan una fuerte atracción entre el adsorbente y el adsorbato (Guo & Wang, 2024) y pueden considerarse un caso especial de la isoterma L. Generalmente es causada por solutos muy electronegativos o muy electropositivos o por sustancias iónicas. un grupo funcional fuerte. Se trata de curvas muy favorables y generalmente se producen en medios con bajas concentraciones.

Las isothermas de tipo C (constante de partición) son lineales y ocurren cuando el número de sitios activos es constante. Así,

independientemente de la concentración, la relación adsorbente-adsorbato es constante en el tiempo. Se utiliza frecuentemente para determinar la adsorción de trazas de contaminantes, donde su concentración es muy baja.

2.2.6.2. Tipos de isothermas

Para la adsorción de soluciones se utilizan únicamente soluciones de Langmuir y Freundlich. El modelo de Langmuir se aplica a la quimisorción y utiliza tres principios: i) la superficie de adsorción es homogénea; ii) la adsorción ocurre por colisión de moléculas con sitios específicos y iii) la adsorción es máxima cuando una capa monomolecular cubre completamente la superficie del adsorbente. La ecuación de Langmuir para sistemas líquidos se presenta en la Ecuación.

$$q_e = \frac{q_m * K * C_e}{1 + (K * C_e)} \quad (1)$$

Donde: q_e es la masa de adsorbato adsorbido por unidad de masa de adsorbente (mg.g^{-1}); C_e es la concentración del soluto (mg.L^{-1}); q_m es la constante de saturación; K es una constante.

El modelo de Freundlich se utiliza a menudo para soluciones muy diluidas y sugiere que la energía de adsorción disminuye logarítmicamente a medida que la superficie queda cubierta por el soluto (Bracht et al., 2014). Por tanto, considerando la superficie como heterogénea, la energía de adsorción no es constante y disminuye a lo largo del proceso. La ecuación de Freundlich para sistemas líquidos se presenta en la Ecuación 2.

$$q_e = K'_f * C_e^{1/n} \quad (2)$$

Donde: K_f es una constante que depende de la temperatura y la superficie; n una constante en función de la temperatura; q_e el número de moles de soluto adsorbidos por unidad de masa de adsorbente (mg.g^{-1}), C y la concentración residual de soluto en equilibrio (mg.L^{-1}).

2.2.7. Cinética de adsorción

Describe la velocidad a la que el soluto se incorpora a la superficie del adsorbente y está relacionada con las fuerzas electrostáticas entre los materiales y las características del medio en el que ocurre, como la energía de activación, la temperatura del sistema, el pH, la carga superficial. de los adsorbentes, entre otros.

Cuando se trata de soluciones acuosas, el agua, por sí sola, es un disolvente reactivo presente en forma molecular (H_2O) o iónica (OH^- y H^+), cuya concentración depende del pH. En consecuencia, la adsorción de material en un medio acuoso requiere, al menos, control del pH y la temperatura.

El análisis de la velocidad de adsorción nos permite comprender el tiempo de contacto necesario para eliminar completamente el contaminante, cuánto tiempo permanece adsorbido el material y la cantidad de soluto adsorbido.

Los modelos cinéticos de adsorción se pueden presentar mediante modelos de pseudoprimer orden, pseudosegundo orden y difusión intrapartículas para la mayoría de los sistemas adsorbente-adsorbato (Silva et al., 2017).

El enfoque de pseudoprimer orden, también referido como el modelo de Lagergren, es ampliamente empleado en la descripción de procesos de adsorción en líquidos. Este modelo se fundamenta en la capacidad de adsorción del material (q_e). Se puede calcular usando la Ecuación 3 como se muestra a continuación:

$$\log(q_e - q_t) = \log(q_e) - \left(\frac{K}{2,303}\right)t \quad (3)$$

Donde: q_e la capacidad de adsorción en equilibrio, expresada en $mg.g^{-1}$; q_t la capacidad de adsorción en un tiempo determinado, expresada en $mg.g^{-1}$, K es la constante de pseudoprimer orden, expresada en min^{-1} y t el tiempo de adsorción (min).

El modelo de pseudosegundo orden, al igual que su predecesor, se fundamenta en la capacidad de adsorción del material. Este modelo describe el proceso de adsorción a lo largo de todo el período de contacto entre el adsorbente y el adsorbato. Su cálculo puede realizarse utilizando la Ecuación 4:

$$\frac{t}{q} = \frac{1}{(K_2 * q_e^2)} + \left(\frac{1}{q_e}\right)t \quad (4)$$

Donde: q_e la capacidad de adsorción en equilibrio, expresada en mg.g^{-1} ; q la capacidad de adsorción en un tiempo determinado, expresada en mg.g^{-1} , K_2 es la constante de pseudosegundo orden, expresada en $\text{g.mg}^{-1}.\text{min}^{-1}$ y t el tiempo de adsorción (min).

Los modelos de pseudoprimer y pseudosegundo orden tratan el proceso de adsorción como reacciones químicas. Así, las velocidades de las reacciones químicas se pueden transformar en ecuaciones que corresponden a la velocidad de adsorción en forma de órdenes. Estos dos modelos utilizan la quimisorción como una forma de controlar la tasa de adsorción (Pinheiro et al., 2020).

Cuando ninguno de los modelos anteriores describe el proceso de adsorción, se utiliza el modelo de difusión intrapartícula. Considerando la difusión intrapartícula como un factor determinante de la velocidad, la eliminación de adsorbato se puede describir mediante la Ecuación 5:

$$q_t = (K_{dif} * \sqrt{t}) + C \quad (5)$$

Donde: q_t la cantidad de adsorbato absorbido, expresada en mg.g^{-1} ; C es la constante de resistencia a la difusión, expresada en g.mg^{-1} , t es el tiempo de agitación (min) y K_{dif} se puede obtener mediante la intersección de la curva gráfica $q_t \times t^{0.5}$.

2.2.8. Situación actual de la contaminación por parabenos

A pesar de los estudios que confirman la toxicidad asociada al uso de parabenos, tanto para el ser humano como para el ecosistema acuático, estos compuestos siguen siendo muy utilizados como conservantes debido a su versatilidad, eficiencia y bajo coste. Esta situación, combinada con la falta de efectividad de los tratamientos convencionales para eliminar estos contaminantes del agua, hace que no sea difícil encontrarlos en diversas fuentes de agua (Silveira, 2018).

En la tesis de posgrado titulada “Determinación de contaminantes orgánicos emergentes en los Ecosistemas Altoandinos de La Reserva Nacional Salinas y

Aguada Blanca, Arequipa – Perú”, se analizaron cuatro parabenos específicos en 26 muestras de agua recolectadas en zonas húmedas de la Reserva Nacional Salinas y Aguada Blanca (RNSAB). Los resultados revelaron la presencia de metilparabeno (MePB) por encima del límite de detección (>LOD) en 8 de las 26 muestras, con una frecuencia de aparición del 31%. Las concentraciones más altas de MePB se registraron con 96.8 ng.L⁻¹ (muestra S18) y 52.2 ng.L⁻¹. La presencia de filtros UV, parabenos, biocidas y medicamentos en el agua, sedimentos y biota (pelo de alpaca y llama) de la RNSAB destaca la huella ambiental en zonas donde la presión antropogénica es más intensa, como centros urbanos y zonas cercanas a carreteras. Además, la proximidad del turismo contribuye a la contaminación de los cuerpos de agua en la RNSAB (Flores Haqquehua, 2021). En todos estos casos, la liberación de estos contaminantes se identifica como la principal vía de entrada de estas sustancias a los ecosistemas acuáticos.

2.2.9. Adsorventes

2.2.9.1. Características del adsorbente

Para que la adsorción sea efectiva, el adsorbente debe presentar características fundamentales, como una gran superficie, alta porosidad, sitios disponibles para la adsorción, estabilidad química, resistencia mecánica y la capacidad de seleccionar especies reactivas de una manera específica (Sidiqua & Priya, 2021). La naturaleza físico-química del adsorbente desempeña un papel crucial, ya que tanto su capacidad como su velocidad de adsorción se ven afectadas por factores como el área de superficie específica, la porosidad, el volumen y la distribución de poros, así como la presencia de grupos funcionales en su superficie y las características del material precursor. Los científicos han realizado modificaciones en los materiales, tales como la incorporación de grupos funcionales y la alteración de configuraciones de enlaces químicos, con el fin de mejorar la capacidad de adsorción. Además de la funcionalización, la combinación de materiales para formar compuestos también puede incrementar la eficacia en la eliminación de contaminantes mediante estos adsorbentes.

CAPÍTULO III

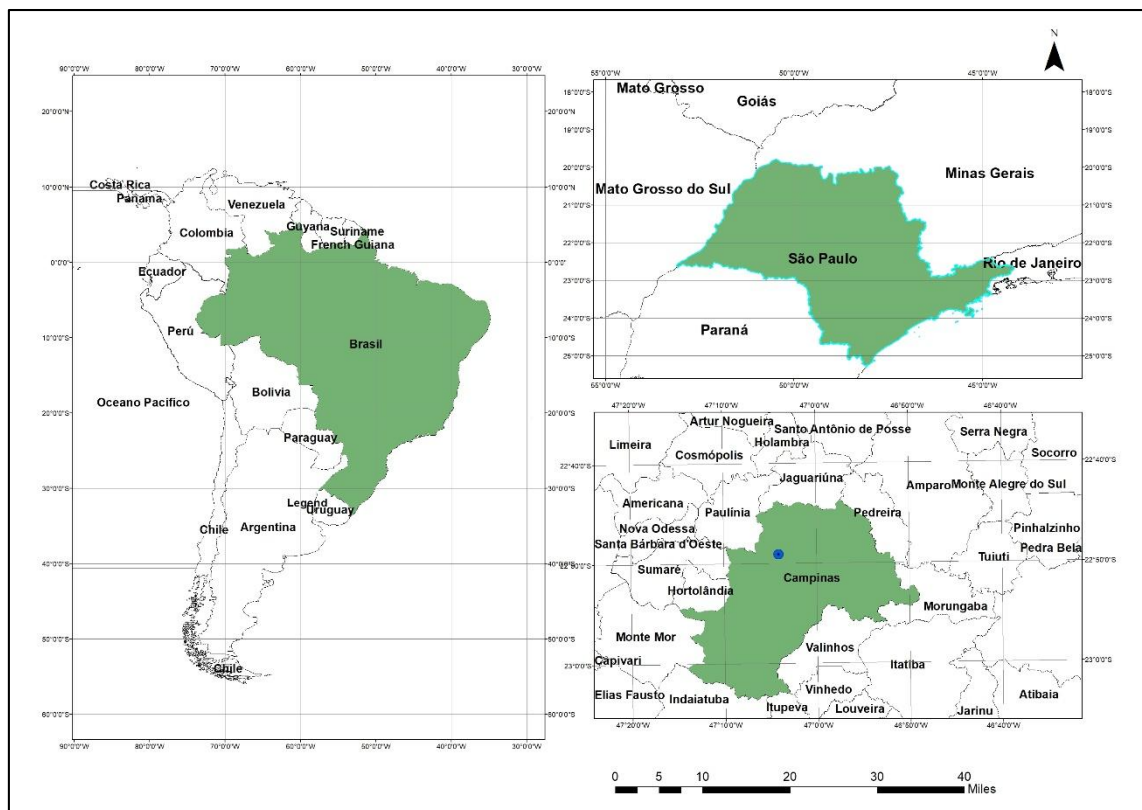
METODOLOGÍA DE LA INVESTIGACIÓN

3.1 **Ámbito de estudio**

Los estudios de la investigación se realizaron en el Laboratorio de materiales avanzados y química ambiental de la Facultad de Tecnología de la Universidad Estatal de Campinas (UNICAMP).

Figura 5

Mapa del lugar de estudio



3.2 **Tipo, nivel y diseño de investigación**

3.2.1. **Tipo**

El estudio es de enfoque Cuantitativo, porque se realizó una recolección de datos y su respectivo procesamiento con la intención de comprender ciertos fenómenos, asimismo, es de tipo descriptivo, porque se busca detallar las características de los materiales de estudio bajo condiciones de control

Según Da Silva et al. (2024) este tipo de estudio permite detallar las características o valores obtenidos, para poder explicar relaciones de causa y

efecto.

3.2.2. Nivel

El nivel de investigación es experimental, ya que se manipularon las variables en un entorno controlado para su observación y medición, además es aplicada ya que los conocimientos que se obtuvieron tienen origen de la práctica.

Según Paixão et al. (2022), este tipo de niveles de estudio se da cuando existe una manipulación intencionada de la o las variables.

3.2.3. Diseño de investigación

El estudio corresponde a un diseño cuasi-experimental unifactorial secuencial (Bolaños & Vallejo, 2024), en el cual se manipularon de manera controlada las variables independientes con el fin de evaluar su efecto sobre la remoción de los conservantes metilparabeno y propilparabeno, considerados como variables dependientes.

Los factores experimentales definidos en el presente estudio fueron la dosis del adsorbente B-MPC, con niveles de 1, 2, 3 y 4 mg; el pH en valores de 2, 4, 6, 8, 10 y 12; el tiempo de contacto considerado en 2, 5, 10, 20, 30, 45, 60, 90, 120, 150, 180 y 210 minutos; la temperatura con niveles de 25, 35 y 45 °C; y la concentración del contaminante, evaluada en 5, 10, 20, 30, 40, 50, 60, 80 y 100 ppm.

Cada proceso experimental se evaluó con tres repeticiones independientes, número mínimo aceptable desde el punto de vista científico para garantizar la reproducibilidad de los resultados (Da Silva et al., 2024).

El trabajo se organizó en dos bloques experimentales correspondientes a las variables dependientes, metilparabeno y propilparabeno. Para asegurar la validez interna del estudio, se controlaron posibles variables de confusión, como la temperatura ambiente y la homogeneidad de la agitación, mediante el uso de una incubadora shaker SP-222, que permitió mantener condiciones estandarizadas de temperatura y revoluciones por minuto durante los ensayos.

El enfoque adoptado fue unifactorial dentro de cada bloque experimental: primero se evaluó la variación de la dosis, seleccionando la condición más eficiente; posteriormente se aplicó el mismo criterio para pH, tiempo de contacto,

temperatura y concentración. Esta estrategia permitió determinar progresivamente la combinación de condiciones experimentales más eficientes para la adsorción.

Es importante señalar que no se aplicó un esquema de aleatorización en el orden de los ensayos; esta situación se reconoce como una limitación metodológica, la cual se recomienda considerar en futuras investigaciones.

Para el análisis comparativo de los datos obtenidos en la etapa de evaluación de la capacidad de adsorción de los conservantes metilparabeno y propilparabeno utilizando el material B-MPC, se aplicó la prueba t de Student para muestras independientes. Esta prueba se seleccionó porque los datos de ambos compuestos se consideran independientes, y el objetivo fue contrastar si existían diferencias significativas entre sus medias de Q_e , expresadas en $\text{mg}\cdot\text{g}^{-1}$ bajo condiciones experimentales controladas.

Es importante destacar que, a lo largo del estudio cada conjunto de ensayos fue analizado con modelos estadísticos específicos, para los tiempos de contacto se aplicaron modelos cinéticos, para las concentraciones de contaminante se ajustaron modelos isotérmicos y para las temperaturas se emplearon modelos termodinámicos. Estos modelos de correlación matemática ya permitieron interpretar el comportamiento de cada variable de forma independiente con soporte estadístico.

Con el fin de verificar los supuestos estadísticos previos a la comparación de medias, se aplicó la prueba de normalidad de Shapiro Wilk, cuya formulación general es:

$$W = \frac{(\sum_{i=1}^n a_i x_i)^2}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2} \quad (6)$$

Donde x_i representa los valores de la muestra ordenados, \bar{x} la media muestral y a_i son los coeficientes derivados de las varianzas y covarianzas de una muestra normal. Esta prueba permite determinar si los datos se ajustan a una distribución normal.

Una vez confirmada la normalidad de los datos, se procedió a la comparación

estadística de las medias obtenidas en cada ensayo de adsorción entre los dos conservantes. Para ello, se empleó la prueba t de Student, en su variante de Welch, recomendada cuando no se puede asumir igualdad de varianzas entre los grupos (Ruxton, 2006).

La formulación general de la prueba t para muestras independientes es:

$$t = \frac{\bar{X}_1 - \bar{X}_2}{\sqrt{\frac{s_1^2}{n_1} + \frac{s_2^2}{n_2}}} \quad (7)$$

Donde: \bar{X}_1 y \bar{X}_2 son las medias muestrales de capacidad de adsorción para metilparabeno y propilparabeno, respectivamente, s_1^2 y s_2^2 son las varianzas muestrales, n_1 y n_2 son los tamaños muestrales y t es el estadístico de prueba bajo la distribución t de Student.

En ese sentido, la prueba t complementa los análisis realizados con los modelos cinéticos, isotérmicos y termodinámicos, permitiendo contrastar si el material B-MPC presenta diferencias estadísticamente significativas en la adsorción de metilparabeno frente a propilparabeno.

3.3.1. Población

Está conformada por todo el cuerpo de agua con Metilparabeno y Propilparabeno.

3.3.2. Muestra

450ml de agua contaminada con Metilparabeno y 450ml de agua contaminada con Propilparabeno.

3.4. Procedimientos, técnicas e instrumentos de recolección de datos

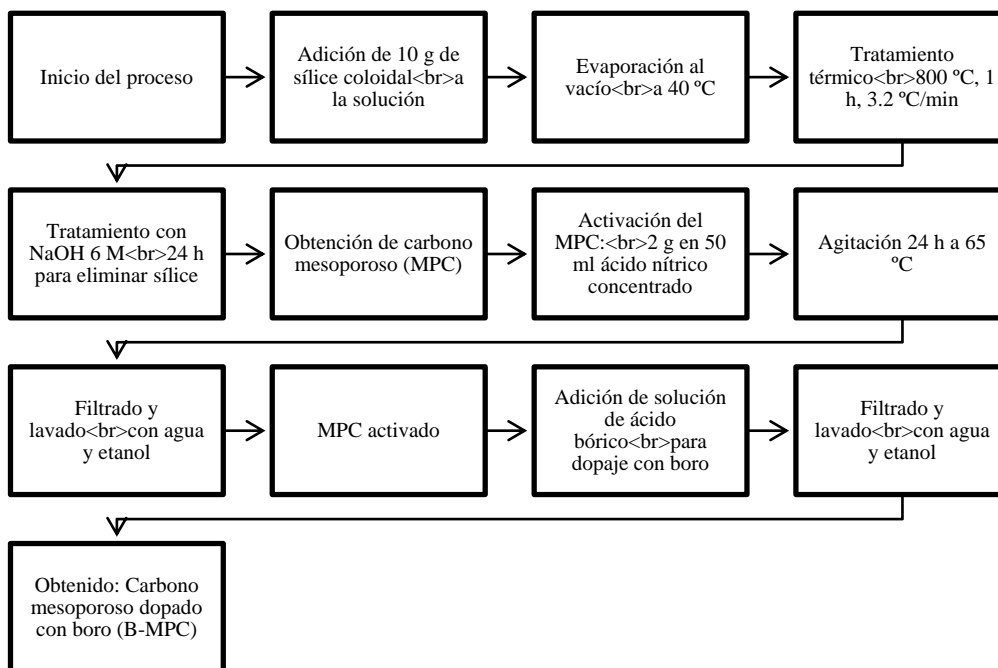
3.4.1. Materiales

La sacarosa ($\geq 99.5\%$), la sílice colidal LUDOX HS-40 (suspensión al 40% en peso en H₂O) y el ácido bórico (99.9%) se adquirieron de Sigma-Aldrich. El hidróxido de sodio (98%) se adquirió de Chempu r, el propilparabeno y el metilparabeno fueron adquiridos de Sinergia Científica. El agua utilizada se purificó utilizando el sistema de purificación Milli-Q hasta una resistividad de 18 megaohmio (M Ω).

3.4.1.1. Procedimiento para la preparación de carbonos mesoporosos a partir de sacarosa.

Figura 6

Flujograma del procedimiento para la preparación de carbonos mesoporosos dopados con boro (B-MPC)



La síntesis del carbono mesoporoso dopado con boro se realizó en el Instituto de Investigación de Estructuras y Bajas Temperaturas de Wrocław, Polonia, siguiendo la metodología descrita por Camparotto et al. (2023).

(a) En la primera etapa, se disolvieron 2 g de sacarosa en una solución 1:1 de agua y etanol, a la cual se añadieron 10 g de sílice coloidal. Los disolventes fueron eliminados al vacío a 40 °C y el sólido resultante fue sometido a tratamiento térmico durante 1 hora a 800 °C, con una velocidad de calentamiento de 3.2 °C^{min}. Posteriormente, se trató con una solución de NaOH (6 M) durante 24 horas para remover completamente la sílice coloidal.

(b) Para la activación del material, se mezclaron 2 g del carbono mesoporoso con 50 ml de ácido nítrico concentrado, manteniéndose en agitación durante 24 horas a 65 °C. Luego, la muestra fue filtrada y lavada con agua y etanol para eliminar los residuos del ácido.

(c) Finalmente, para el dopaje con heteroátomos, se incorporó una

solución de ácido bórico al material activado. La mezcla fue nuevamente filtrada y lavada con agua y etanol para obtener el producto final dopado con boro (B-MPC).

3.4.2. Caracterización del adsorbente

Los B-MPC se caracterizaron mediante, microscopía electrónica de barrido (SEM), transformada de Fourier Espectroscopia infrarroja (FTIR), potencial Zeta y espectroscopia fotoelectrónica de rayos X (XPS).

3.4.2.1 Microscopía electrónica de barrido (SEM)

Para la caracterización morfológica de los materiales, se emplearon técnicas de microscopía electrónica de alta resolución. En primer lugar, se realizaron análisis mediante Microscopía Electrónica de Barrido (SEM) utilizando el equipo Nova NanoSEM 450 FE-SEM, el cual opera en modo de inmersión sin campo para obtener imágenes de alta definición. Las micrográficas de electrones secundarios permitieron observar la topografía superficial y la distribución morfológica de las partículas. Las muestras en polvo fueron preparadas mediante su deposición directa sobre una cinta de carbón conductora, lo que aseguró una adecuada adherencia y conductividad eléctrica durante el análisis.

3.4.2.2 Espectroscopía infrarroja por transformada de Fourier (FTIR)

Para identificar los grupos funcionales presentes en la superficie de los materiales y detectar posibles modificaciones químicas tras los tratamientos realizados, se empleó la técnica de Espectroscopía Infrarroja por Transformada de Fourier (FTIR). Los espectros se obtuvieron en modo ATR (Reflectancia Total Atenuada), utilizando un espectrómetro Nicolet iS50 (Thermo Scientific), equipado con un cristal de diamante como elemento reflectante, lo que permite una óptima interacción entre la radiación infrarroja y la muestra sólida.

Las mediciones se realizaron en el rango espectral de 4000 a 400 cm^{-1} , con una resolución de 4 cm^{-1} , lo cual proporciona una adecuada definición de las bandas vibracionales características. Esta técnica permitió identificar enlaces funcionales tales como $-\text{OH}$, $\text{C}=\text{O}$, $\text{C}-\text{H}$, y otros grupos químicos relevantes que intervienen en los procesos de adsorción o

interacción superficial con los contaminantes emergentes. La interpretación de los espectros se fundamentó en estudios previos como el de Movasaghi et al. (2008), quienes documentaron ampliamente las bandas típicas de compuestos orgánicos e inorgánicos mediante FTIR (Movasaghi et al., 2008).

3.4.2.3 Potencial Zeta

El análisis del potencial zeta se empleó para evaluar la carga superficial de los materiales funcionalizados y su comportamiento electrocinético en función del pH del medio, lo cual es clave para entender las interacciones entre el adsorbente y los contaminantes emergentes. Este análisis permite determinar el punto de carga cero (pHpzc) y prever la estabilidad coloidal del sistema en suspensión acuosa.

Las mediciones se realizaron utilizando el equipo Zetasizer Nano ZS (Malvern Instruments), aplicando una serie de pruebas a seis valores distintos de pH (2, 4, 6, 8, 10 y 12), mediante ajuste con soluciones tampón. En todas las condiciones, los análisis se efectuaron en presencia de una concentración constante de micropartículas carbonáceas (MPC) de $0.001 \text{ mg}\cdot\text{L}^{-1}$, junto a los contaminantes emergentes (metilparabeno y propilparabeno). Esta evaluación permitió analizar la influencia del pH en la adsorción de contaminantes y la estabilidad superficial del material, aspectos determinantes para optimizar los procesos de remoción en soluciones acuosas contaminadas.

3.4.2.4 Espectroscopia fotoelectrónica de rayos X (XPS)

Para los análisis XPS se empleó un espectrómetro de fotoelectrones de rayos X Microlab 350 (Thermo Electron), equipado con una punta FEG (Field-Emission Electron Gun) y una fuente de ánodo dual (AlK α y MgK α). Los experimentos XPS se realizaron utilizando la fuente de rayos X anódica AlK ($h\nu = 1486.6 \text{ eV}$) que opera a 15 kV, con una intensidad de corriente de emisión de 20 mA. Los espectros de estudio y los espectros de alta resolución de la superficie total de 0.2 cm^2 se registraron a energías de paso de 100 eV y 40 eV.

Para obtener la intensidad de la señal XPS, se aplicó una sustracción

de fondo inteligente. Los picos se ajustaron utilizando una función mixta gaussiana. Lorentziana⁻¹ asimétrica, con una relación g.L⁻¹ constante igual a 0.3 (±0.05). El procesamiento de datos se realizó utilizando un software de sistema de datos basado en beneficios (versión 5.9911). Para estimar la composición química cuantitativa se utilizaron factores (Da Silva, 2020)

3.4.3. Procedimiento para los ensayos de adsorción

Se aplicó B-MPC para eliminar conservantes (metilparabeno y propilparabeno) en solución acuosa siguiendo el protocolo descrito en publicaciones recientes de nuestro grupo de investigación (Camparotto et al., 2023; P. M. M. da Silva et al., 2024b; Paixão et al., 2022). Las soluciones contaminantes se prepararon por separado disolviendo con precisión cantidades pesadas de los conservantes respectivos en agua ultrapura o en agua con el pH requerido.

Los análisis espectrofotométricos se realizaron en el espectrofotómetro Bel UV-M51 UV-VISÍVEL a absorbancias de 265 nm para propilparabeno y 265 nm para metilparabeno. Todos los experimentos de adsorción se realizaron tomando la masa pesada del B-MPC y 5 ml del volumen de soluciones acuosas de los contaminantes, los cuales posteriormente se agregaron a un vaso de precipitados de 10 ml y se colocaron en un agitador orbital estandarizado a 150 rpm hasta alcanzar el equilibrio.

La eficiencia de la eliminación se investigó bajo diversas concentraciones iniciales de contaminantes (5 - 100 PPM), valores de pH (2 a 12), tiempo de agitación (0 a 210 min) y temperaturas (25 a 45 °C). Después de un intervalo de tiempo predeterminado (a través de la cinética) o en el tiempo de equilibrio (para isotermas), se recogieron muestras de solución, se filtraron usando un filtro de jeringa de PVDF de 0.22 µm para eliminar MPC, se diluyeron y se analizaron en el espectrofotómetro. Las capacidades de adsorción de los MPCs fueron calculados a partir de la ecuación 8.

$$q_e = \frac{(C_i - C_f) * V(L)}{M(g)} \quad (8)$$

Dónde: q_e es la cantidad de conservante adsorbida por el adsorbente (mg.g⁻¹), C_i es la concentración inicial del conservante (mg.L⁻¹), C_f es la concentración del

conservante después del experimento de adsorción (mg.L^{-1}), m es la masa de MPC (g) y V es el volumen total del experimento (L).

3.4.4. Estudios de adsorción

3.4.4.1. Cinética de adsorción

La investigación sobre la velocidad de adsorción de conservantes requirió la evaluación de diversos modelos, incluyendo el pseudoprimer orden, pseudosegundo orden y difusión intrapartícula. Los modelos, tanto linealizados como no linealizados, se detallan en la Tabla 2. Para ajustar los datos experimentales a estos modelos, se empleó el software Microsoft Excel. Estas representaciones cinéticas son herramientas valiosas para comprender la evolución temporal del proceso de adsorción de conservantes y ofrecen conocimientos sobre los mecanismos involucrados.

Tabla 2

Modelos cinéticos

Modelos	Ecuaciones	Gráficos
PFO	$qt = qe (1 - e^{-k_1t})$	$\ln q_e$ vs t
PSO	$qt = \frac{k_2 qe^2 t}{1 + k_2 qe t}$	$\frac{q}{q_t}$ vs t
ID	$qt = kdif \cdot t^{1/2} + Ci$	q_t vs $t^{0.5}$

Adaptado de: Silva et al. (2017)

Dónde: q_e (mg.g^{-1}) representa la cantidad de conservante adsorbido por unidad de masa de adsorbente en equilibrio; q_t (mg.g^{-1}) es la cantidad de contaminante adsorbido en el intervalo de tiempo; K_1 (min^{-1}), K_2 ($\text{g.m}^{-1}.\text{min}^{-1}$) y $KDIF$ ($\text{mg.g}^{-1}.\text{min}^{-0.5}$) son las constantes de velocidad asociadas con los modelos cinéticos de pseudoprimer orden, pseudosegundo orden e intrapartícula. difusión, respectivamente; y t es el tiempo de adsorción (min). Estas ecuaciones son fundamentales para describir y comprender los mecanismos temporales del proceso de adsorción.

3.4.4.2. Isotermas de adsorción

El estudio del equilibrio de adsorción es crucial para obtener información en el análisis de procesos de separación por adsorción. En este

punto, se supone que el sistema ha alcanzado el estado de equilibrio y se determina la Q_e . Se utilizan varios modelos matemáticos de isothermas para ayudar a obtener Q_e , incluidos los modelos de isothermas de Langmuir, Freundlich. Los modelos mencionados se presentan en la Tabla 3.

Tabla 3

Modelos Isotérmicos

Modelos	Ecuaciones	Gráficos
Langmuir	$qe = \frac{q_L K_L C_e}{1 + K_L C_e}$	$\frac{C_e}{q_e}$ vs C_e
Freundlich	$qe = K_F C_e^{1/n}$	$\ln q_e$ vs $\ln C_e$
Redlich-Peterson	$qe = \frac{K_{RP} C_e}{1 + A_{RP} C_e^n}$	$\ln \frac{C_e}{q_e}$ vs $\ln C_e$
Temkin	$qe = \frac{RT}{B_t} \ln(K_T + C_e)$	q_e vs $\ln C_e$
Dubinin-Radushkevich	$qe = q_m \exp(-K_{DR} \varepsilon^2)$	ε^2 vs $\ln q_e$

Adaptado de: Bratch et al. (2014)

3.4.4.3 Termodinámica de adsorción

El análisis termodinámico de la adsorción es esencial para entender el proceso, determinar su espontaneidad y diferenciar entre adsorción física y química. Los parámetros termodinámicos, como el cambio en la energía libre de Gibbs (ΔG°), el cambio en la entalpía (ΔH°), el cambio en la entropía (ΔS°) y la constante de equilibrio de adsorción, son fundamentales para construir el gráfico $\ln K_{ads}$ versus T^{-1} . Este gráfico, que muestra un comportamiento lineal, permite calcular directamente los parámetros termodinámicos ΔS°_{ads} y ΔH°_{ads} mediante los coeficientes de pendiente e intercepto, respectivamente. La constante K_{ads} se calculó utilizando la intersección gráfica $\ln(q_e \cdot C_e^{-1})$ versus C_e . Posteriormente, utilizando la ecuación de van't Hoff, se creó la gráfica $\ln K_{ads}$ versus T^{-1} , proporcionando una línea recta, en la que los coeficientes angulares y lineales proporcionan los valores de ΔH°_{ads} y ΔS°_{ads} , respectivamente. Este enfoque es fundamental para una comprensión integral de las propiedades termodinámicas del proceso de adsorción.

$$\ln K = - \frac{\Delta G}{RT} = - \frac{\Delta H}{RT} + \frac{\Delta S}{R} \quad (9)$$

Donde: R es la constante universal de los gases (8.314 J K.mol⁻¹); T es la temperatura (K); ΔH (J.mol⁻¹), se refiere al cambio de entalpía; ΔS° (J.mol⁻¹), es la variación de entropía; ΔG° (J.mol⁻¹) se refiere al cambio en la energía libre de Gibbs. K es la constante de distribución obtenida a partir de la intersección de la gráfica de Ln qe.Ce⁻¹ versus qe.

3.5. Análisis de datos

Para el procesamiento y análisis de los resultados experimentales, se utilizaron diversos programas especializados. Microsoft Excel se empleó para la recopilación, organización y tratamiento preliminar de los datos, facilitando el manejo de tablas, cálculos estadísticos básicos y generación de gráficos descriptivos.

Asimismo, se utilizó R Studio como entorno estadístico complementario, el cual permitió realizar el análisis de la prueba de hipótesis bajo criterios de significancia científica.

El software Origin fue utilizado para la elaboración de gráficos científicos de alta calidad, permitiendo representar de forma clara las curvas de adsorción, ajustes de modelos cinéticos o isotérmicos, así como comparaciones estadísticas entre condiciones experimentales.

3.6. Consideraciones éticas

El desarrollo de esta investigación se realizó con estricto apego a los principios éticos de responsabilidad, integridad, honestidad y rigor académico que rigen la práctica científica. En todo momento se respetaron los derechos de autor conforme a lo establecido por el Decreto Legislativo N.º 822 sobre el Derecho de Autor, vigente en el Perú, asegurando la correcta citación y reconocimiento de todas las fuentes consultadas.

Asimismo, se garantiza que los datos obtenidos no fueron alterados, manipulados ni falsificados en ninguna etapa del estudio. El procesamiento de la información se llevó a cabo de manera transparente, utilizando software reconocido y métodos estadísticos validados.

La presente investigación también cumplió con los lineamientos normativos y

éticos establecidos por la Universidad Nacional Intercultural de la Selva Central Juan Santos Atahualpa (UNISCJSA), incluyendo lo dispuesto en sus reglamentos internos sobre elaboración de trabajos de investigación y redacción académica.

Finalmente, todas las citas, referencias y estructura del informe se adecuaron al formato del estilo APA en su 7.^a edición, en concordancia con las exigencias metodológicas institucionales y estándares internacionales de publicación científica.

CAPÍTULO IV

RESULTADOS Y DISCUSIONES

4.1. Presentación de Resultados y Discusiones

4.1.1. Caracterización de nanomateriales

4.1.1.1. Microscopía electrónica de barrido (SEM)

En la figura 7 (a-b) se observa la morfología tridimensional de los carbonos mesoporosos B-MPC obtenida mediante microscopía electrónica de barrido (SEM).

Figura 7

Morfología de los carbonos mesoporosos con SEM

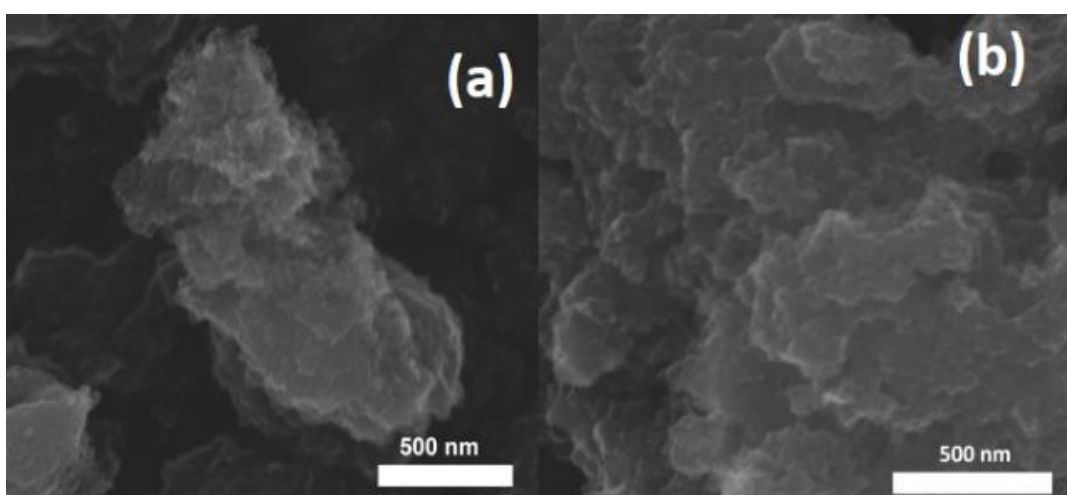


Figura 7 - (a) Imágenes SEM del B-MPC. (b) Ampliación SEM de B-MPC.

Las partículas sintetizadas presentan formas irregulares y un tamaño estimado entre 100 y 200 μm , con un área superficial específica superior a 897 $\text{m}^2.\text{g}^{-1}$. Asimismo, se evidencia una estructura mesoporosa bien desarrollada tras la eliminación de sílice, caracterizada por regiones de distinto grosor, zonas oscuras más densas y zonas claras más delgadas. Se observa también una mayor concentración de partículas en las áreas centrales, disminuyendo hacia los bordes, lo que sugiere una distribución no homogénea del material (Duarte et al., 2003).

La Figura 7, revela que el sólido exhibe una morfología aleatoria y un tamaño de partícula que varía desde algunos micrómetros hasta centenas, lo cual concuerda con lo reportado para materiales obtenidos mediante métodos de hard-template (Gibot et al., 2019). A nivel nanométrico, el material carbonoso muestra

una red de poros bastante uniforme, lo que confirma la adecuada formación de la estructura mesoporosa.

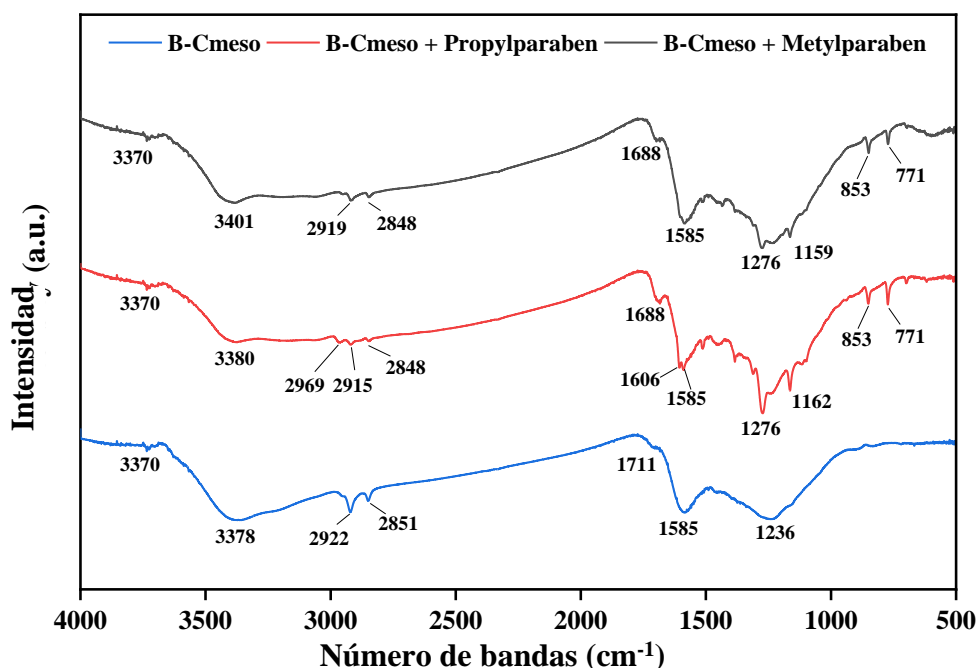
Estos resultados coinciden con lo descrito por Camparotto et al. (2023), donde al evaluar la morfología de materiales C-MPC, B-MPC y N-MPC dopados, observaron mediante SEM imágenes de partículas con tamaño y morfología aleatorios. Asimismo, en su estudio se destaca que independientemente del dopante utilizado (C, B o N), los materiales conservan la distribución mesoporosa, aunque con ligeras variaciones en la uniformidad y densidad de poros. Esta semejanza respalda la reproducibilidad de la técnica de síntesis empleada, confirmando de esta manera que la irregularidad morfológica no afecta la formación de estructuras porosas altamente desarrolladas, que son clave para la eficiencia en procesos de adsorción.

El material sintetizado en este estudio presenta un área superficial ligeramente superior contrastado con la investigación de Camparotto et al. (2023), lo que podría atribuirse al efecto de la eliminación de sílice como agente formador de poros. Esto indica que la metodología empleada favorece la generación de superficies activas más extensas.

4.1.1.2 Espectroscopía infrarroja por transformada de Fourier (FTIR)

El análisis FTIR permitió identificar las principales interacciones funcionales entre el adsorbente B-MPC y los compuestos Propilparabeno y Metilparabeno, mediante la comparación de los espectros obtenidos para las tres muestras. Los espectros revelan modificaciones en las bandas de absorción, indicando la presencia de nuevas interacciones químicas tras la adsorción de los contaminantes. Los resultados se muestran en la Figura 8.

Figura 8
Espectroscopía infrarroja por transformada de Fourier



En la Figura 8 se observa que el espectro del B-MPC presenta una banda ancha a 3370 cm^{-1} , correspondiente al estiramiento O-H, además de señales a 2919 y 2848 cm^{-1} asociadas al estiramiento C-H, y una banda definida en 1711 cm^{-1} atribuida al estiramiento C=O. Asimismo, la presencia de la banda en 1583 cm^{-1} confirma vibraciones C-H en anillos aromáticos. También se registran bandas a 1236 y 1119 cm^{-1} , vinculadas con estiramientos C-O y C-O-C, respectivamente, junto con señales de menor intensidad a 867 y 791 cm^{-1} , relacionadas con flexiones fuera del plano.

Al analizar el espectro del material B-MPC tras la adsorción de propilparabeno, se aprecia un ligero desplazamiento de la banda O-H hacia 3380 cm^{-1} , lo que sugiere una interacción entre los grupos hidroxilo de la superficie y el contaminante. Adicionalmente, emergen bandas nuevas en 2969 , 2915 y 2845 cm^{-1} (C-H) y una señal en 1688 cm^{-1} atribuida al grupo éster del propilparabeno. También se observan bandas en 1162 y 853 cm^{-1} , correspondientes a estiramientos C-O y C-C, respectivamente, lo que confirma la presencia del contaminante en la superficie del material.

En el caso del B-MPC tras la adsorción de metilparabeno, la banda O-H permanece en 3370 cm^{-1} , lo que indica que no se generó una interacción

significativa en ese grupo funcional. Sin embargo, aparecen nuevas señales en 1688, 1276 y 1159 cm^{-1} , características de los grupos éster del metilparabeno, además de la señal a 853 cm^{-1} (C–C), en concordancia con lo observado para el propilparabeno. Estos resultados confirman que ambos contaminantes fueron adsorbidos en la superficie del material, aunque mediante mecanismos ligeramente distintos.

En el estudio de Camparotto et al. (2023), se observa concordancia en la identificación de grupos funcionales característicos en materiales mesoporosos dopados. En su estudio, las bandas a 1573 cm^{-1} en los espectros de C-MPC y B-MPC fueron atribuidas al estiramiento C–H en anillos aromáticos, coincidiendo con la señal registrada en 1583 cm^{-1} en este trabajo. Asimismo, Camparotto et al. describen la presencia de bandas específicas de enlaces B–C, B–O y grupos BO_3/BO_4 en el espectro del B-MPC, confirmando la incorporación del dopante boro en la estructura carbonosa (Madhu & Srinatha, 2020). En este estudio, si bien las señales observadas corresponden mayormente a interacciones con los contaminantes, la similitud en la región de los aromáticos y carbonilos respalda la estabilidad estructural del material tras la adsorción.

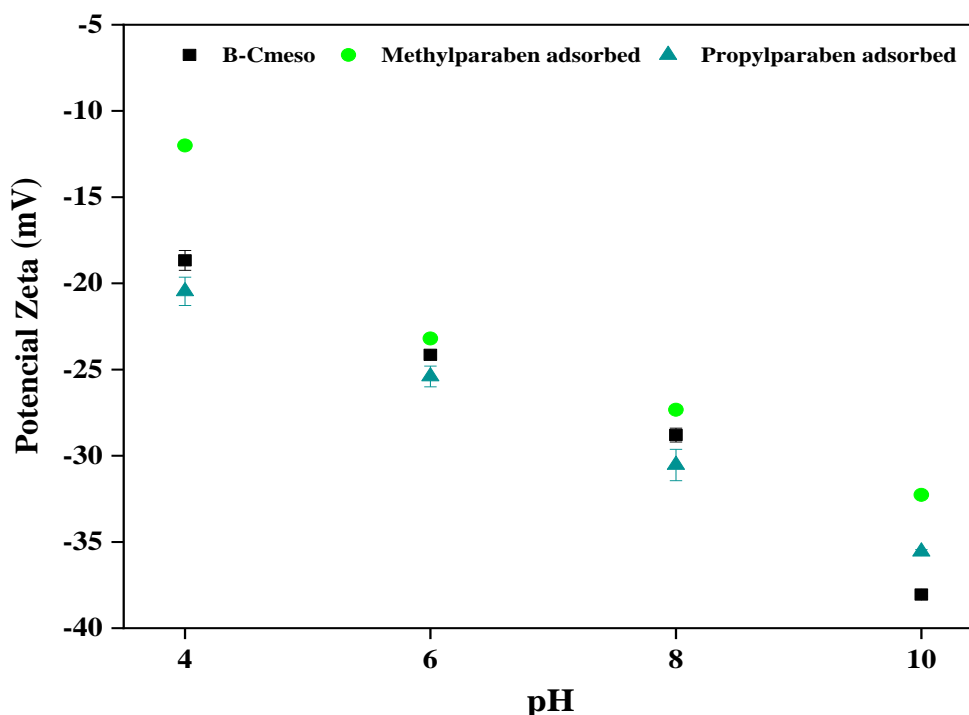
El análisis FTIR demuestra que la adsorción de metilparabeno y propilparabeno se manifiesta principalmente en la aparición y desplazamiento de bandas asociadas a grupos éster y a vibraciones C–O/C–C, lo cual, en línea con lo descrito por Camparotto et al. (2023), evidencia que la funcionalización superficial de los MPC dopados juega un papel determinante en los mecanismos de adsorción de compuestos orgánicos en agua.

4.1.1.3 Potencial zeta

El potencial zeta del B-MPC fue evaluado antes y después de la adsorción de metilparabeno y propilparabeno en cuatro niveles de pH (4, 6, 8 y 10), con el fin de analizar la influencia del pH sobre la carga superficial del adsorbente. Los resultados evidencian una disminución progresiva del potencial zeta con el aumento del pH en todas las muestras, siendo más acentuada en el B-MPC prístino. Tras la adsorción de ambos contaminantes, los valores de potencial zeta se reducen en comparación con el material original, indicando una modificación de la superficie del adsorbente. Los resultados se presentan en la Figura 9.

Figura 9

Mediciones del Potencial Zeta



En la Figura 9 se observa que el B-MPC sin adsorción presenta una disminución progresiva del potencial zeta desde -18.67 mV a pH 4 hasta -38.05 mV a pH 10. Este comportamiento está asociado al proceso de desprotonación de los grupos carboxilo conforme el medio se torna más básico, en condiciones ácidas (pH bajo), los grupos carboxilo se encuentran protonados debido a la elevada concentración de iones H^+ , lo que genera una menor carga negativa superficial. A medida que aumenta el pH, la desprotonación conduce a la formación de grupos COO^- , incrementando la carga negativa y, en consecuencia, el valor absoluto del potencial zeta (Zheng et al., 2020).

Tras la adsorción de metilparabeno, los valores se reducen en toda la gama de pH estudiada. Por ejemplo, a pH 4, el valor desciende a -12.0 mV en comparación con -18.67 mV del B-MPC original, lo que indica que la adsorción del contaminante neutraliza parcialmente las cargas negativas de la superficie. Este fenómeno sugiere una interacción directa entre los grupos funcionales del parabeno y los sitios activos del material.

De manera similar, en el caso del propilparabeno, se observa una reducción con valores que van de -20.47 mV a pH 4 hasta -35.57 mV a pH 10. La tendencia

confirma que ambos contaminantes interactúan con la superficie del B-MPC, modificando sus propiedades electrónicas y reduciendo la densidad de carga negativa.

Estos resultados son consistentes con los hallazgos de Paixão et al. (2022), quienes reportaron que en materiales PMC la carga superficial se vuelve más negativa con el aumento del pH debido a la desprotonación de los grupos funcionales. Asimismo, observaron que, tras la adsorción de PRO (propranolol), el potencial zeta disminuye en todo el rango de pH, lo que fue atribuido a la neutralización de los sitios de adsorción cargados negativamente por la interacción con moléculas de PRO cargadas positivamente. Sin embargo, aunque el mecanismo esperado sería predominantemente electrostático en el intervalo de pH 6–8, los autores encontraron que la mayor eficiencia de adsorción se alcanzó a pH 4, lo cual demuestra que las interacciones de tipo químico, quimisorción e interacciones por enlaces de hidrógeno desempeñan un papel dominante sobre las fuerzas electrostáticas.

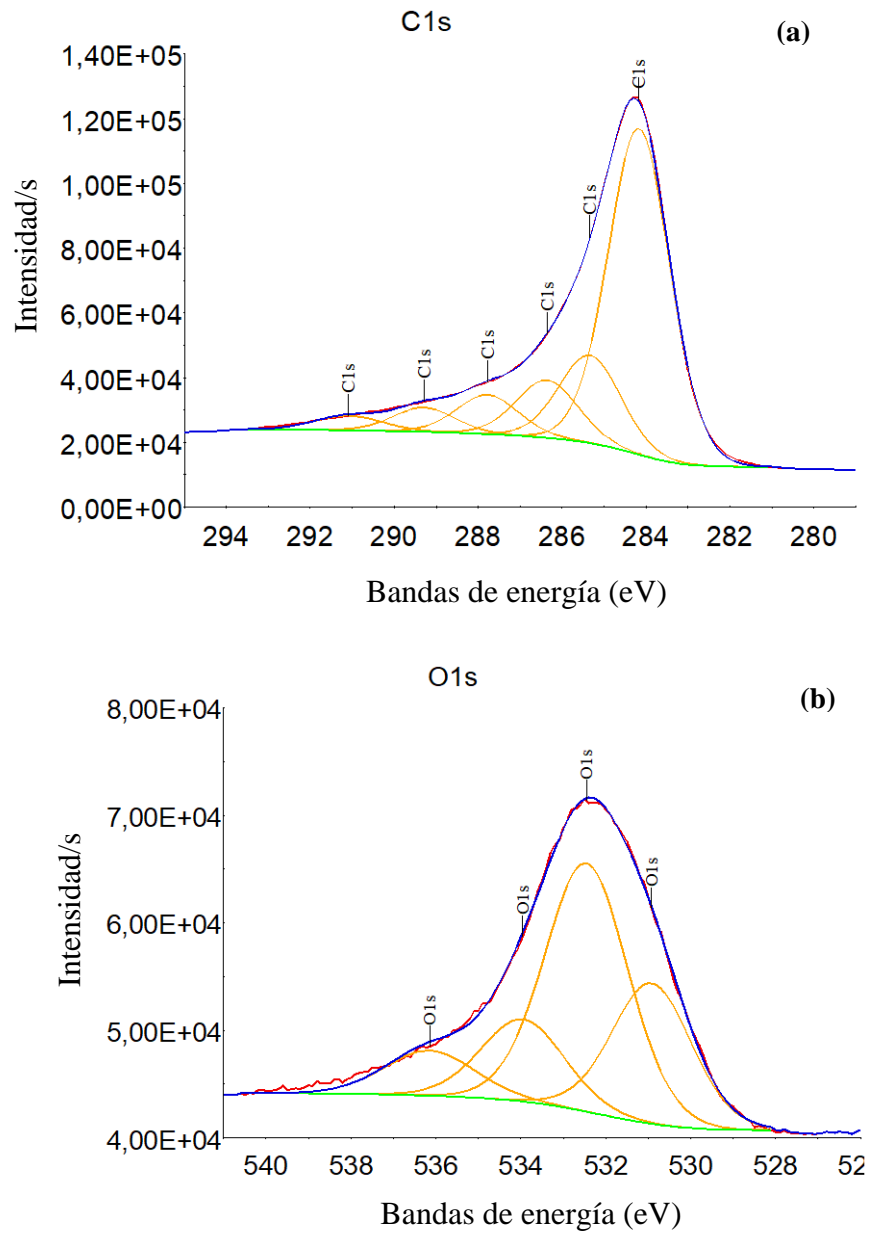
De manera equivalente, en este estudio, aunque el comportamiento del potencial zeta respalda la existencia de interacciones electrostáticas entre el B-MPC y los conservantes, la adsorción efectiva a pH 4 sugiere que mecanismos adicionales, como la formación de enlaces de hidrógeno y la interacción de grupos funcionales polares, son determinantes en el proceso de adsorción.

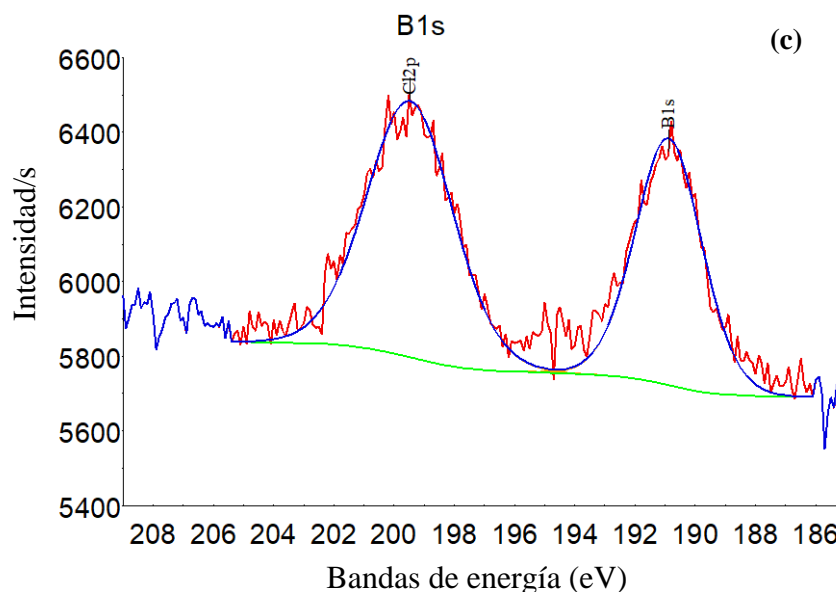
4.1.1.4. Espectroscopia de fotoelectrones de rayos X(XPS)

El análisis XPS realizado al material B-MPC permitió identificar su composición superficial y los tipos de enlaces químicos presentes. La Figura 10 muestra los espectros de alta resolución correspondientes a los elementos carbono (C1s), oxígeno (O1s) y boro (B1s). El contenido atómico predominante fue de 92.06 % de carbono, 7.1 % de oxígeno y 0.84 % de boro, lo que indica una matriz rica en carbono con funcionalización superficial.

Figura 10

Espectroscopia de fotoelectrones de rayos X para B-MPC





En la Figura 10(a) se presenta el espectro de alta resolución del carbono (C1s) para el material B-MPC. Se observan varios picos bien definidos que representan distintos grupos funcionales, Csp^2 (~284.5 eV), correspondiente a enlaces tipo grafito; Csp^3 (285.6 eV), vinculado a enlaces alifáticos; así como señales a 286.7 eV, asociadas a grupos fenólicos y éteres; a 288.1 eV, atribuidas a carbonilos (C=O); y a 289.3 eV, relacionadas con grupos carboxilo o éster (OC=O). Esta diversidad funcional sugiere una superficie rica en sitios activos, capaz de establecer interacciones del tipo π - π con compuestos aromáticos, como los parabeno.

En la Figura 10(b) se muestra el espectro O1s, en el cual se identifican componentes relacionados con grupos oxigenados presentes en la superficie del B-MPC. Estas especies incluyen enlaces tipo C-O, C=O y O-C=O, esenciales para mejorar la afinidad del material hacia contaminantes polares. La presencia de estos grupos funcionales oxigenados contribuye a mecanismos de adsorción específicos, como puentes de hidrógeno e interacciones electrostáticas con moléculas como el metilparabeno y el propilparabeno.

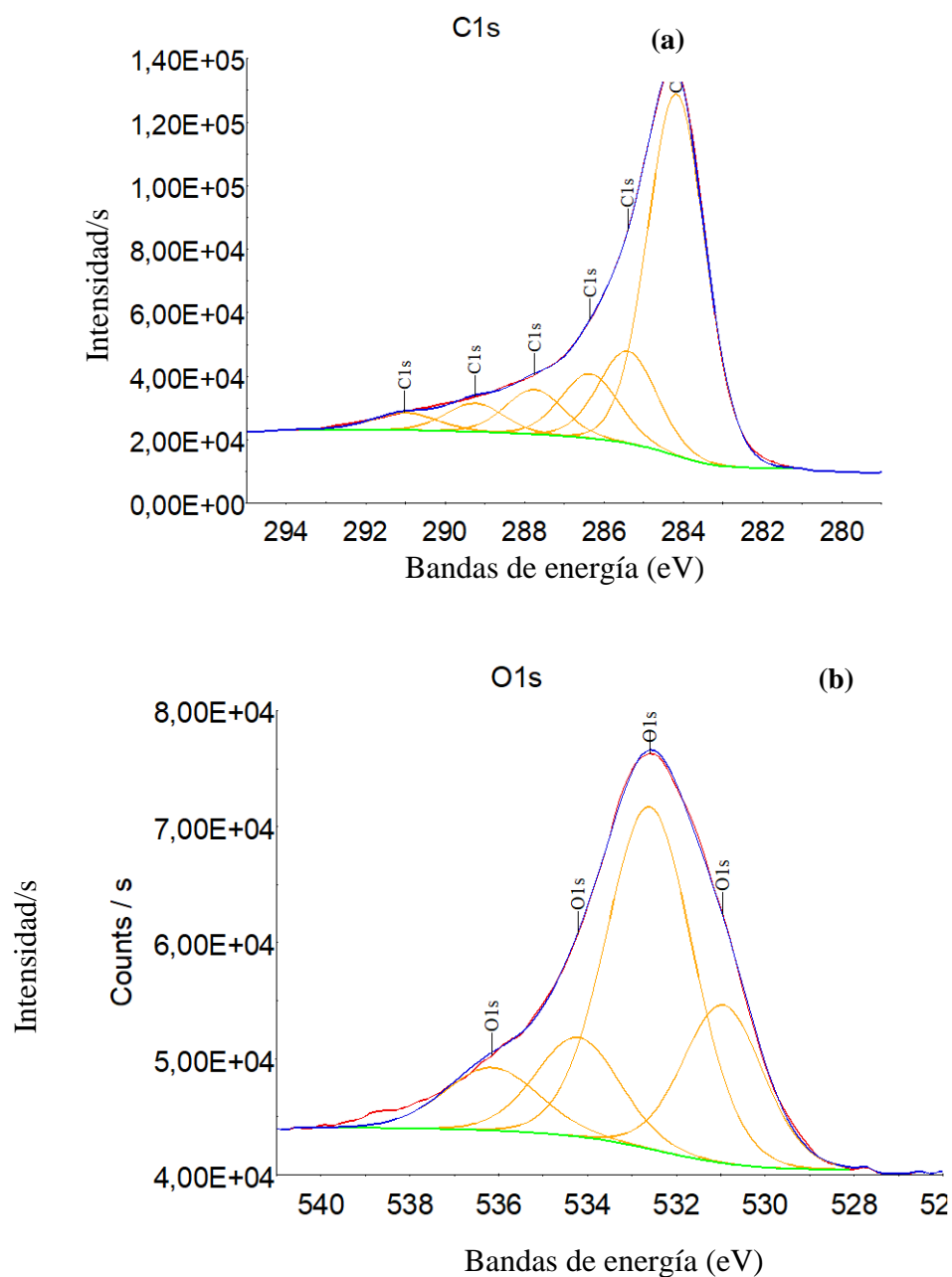
En la Figura 10(c) se analiza el espectro B1s, donde se evidencian dos picos característicos, uno a aproximadamente 198 eV, correspondiente al estado B1s, y otro cercano a 200 eV, atribuido al doblete B1s_{2p}. Esta señal confirma la incorporación de átomos de boro en la estructura del carbono mesoporoso, lo cual es consistente con el proceso de dopaje. El boro actúa modificando la electrónica superficial del material, incrementando su capacidad de adsorción al generar nuevos

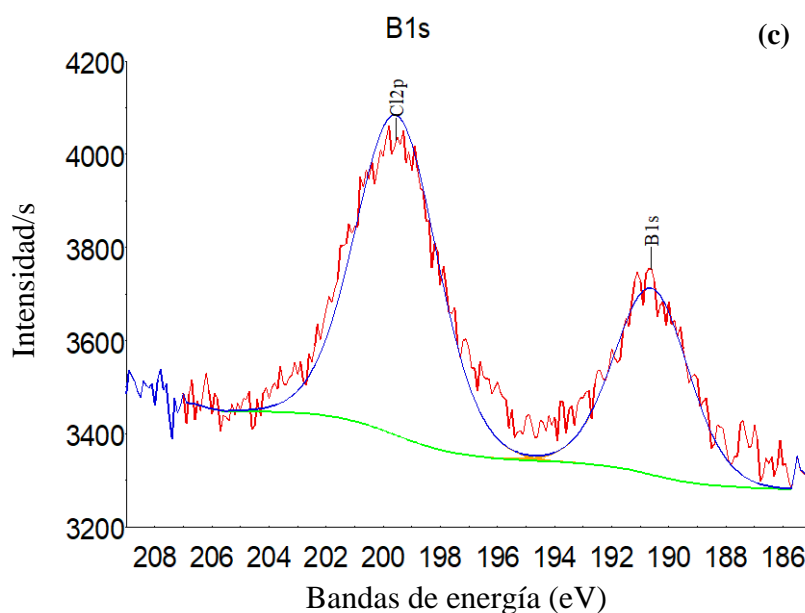
sitios activos con mayor afinidad por compuestos contaminantes.

A continuación, se presentan los resultados del análisis por espectroscopia de fotoelectrones de rayos X (XPS) para el material B-MPC tras la adsorción de metilparabeno.

Figura 11

Espectroscopia de fotoelectrones de rayos X para (a) el carbono (C1s), (b) el oxígeno (O1s) y (c) el boro (B1s) del B-MPC + Metilparabeno.





En la Figura 11(a) se presenta el espectro C1s del B-MPC tras la adsorción de metilparabeno, donde se identifican múltiples picos con energías de enlace características; 284.16 eV (Csp²), 285.34 eV (Csp³), 286.36 eV (CO en fenoles/éteres), 287.78 eV (C=O en quinonas/cetonas), 289.3 eV (OC=O en ésteres/carboxilos) y 291.09 eV (estructura π - π). Estos datos confirman la existencia de grupos funcionales que favorecen la interacción con compuestos aromáticos como el metilparabeno.

En la Figura 11(b), el espectro O1s muestra una serie de picos bien definidos a 530.92 eV, 532.46 eV, 533.95 eV y 536.15 eV, los cuales corresponden a diferentes grupos oxigenados presentes en la superficie del B-MPC, incluyendo carbonilos, éteres e hidroxilos. Estas especies funcionales están implicadas en la formación de enlaces de hidrógeno y otras interacciones no covalentes durante el proceso de adsorción.

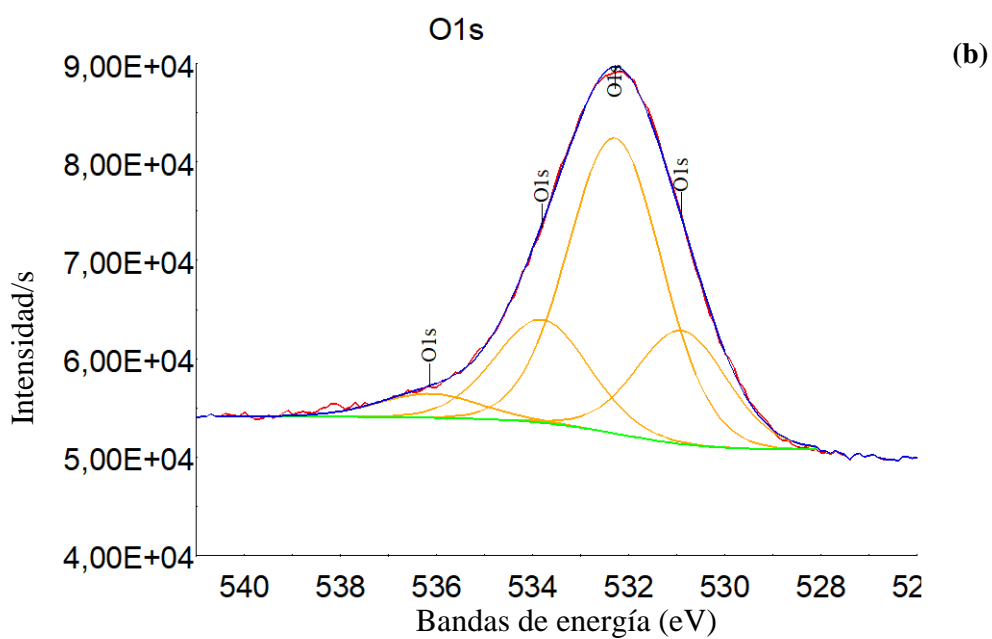
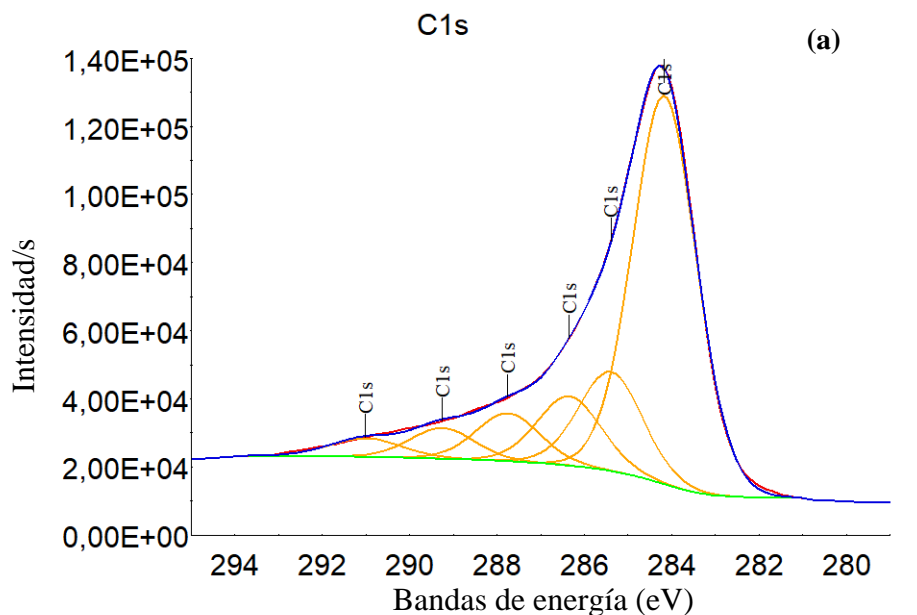
Finalmente, en la Figura 11(c), el análisis del espectro B1s evidencia dos picos correspondientes a B1s y B2p, lo que verifica la permanencia del dopaje con boro en la estructura del B-MPC aún después de la adsorción. Este dopaje puede jugar un papel clave en la modulación de la polaridad superficial, aumentando la afinidad del adsorbente por moléculas como el metilparabeno.

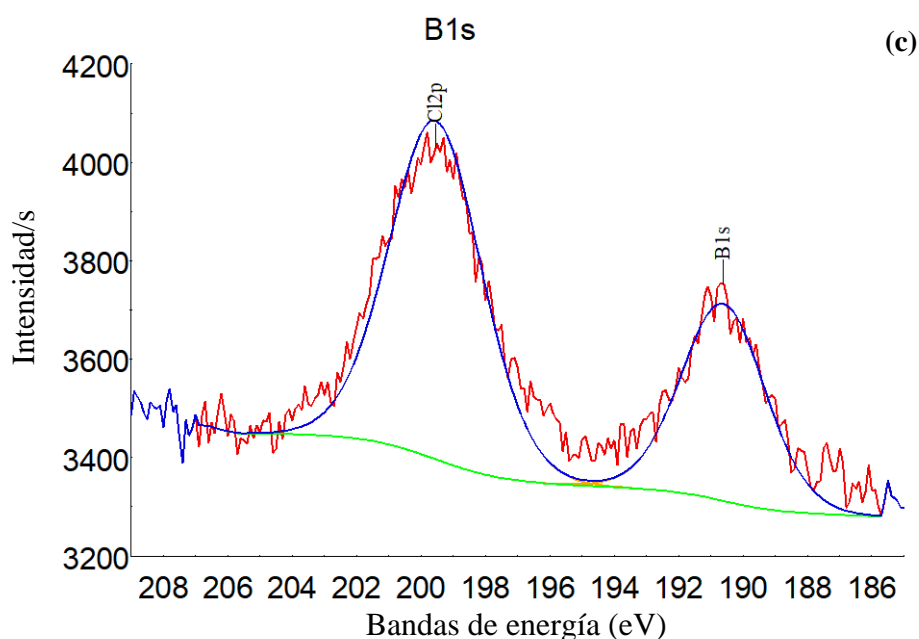
A continuación, se presentan los espectros de fotoelectrones de rayos X (XPS) obtenidos para el material B-MPC tras la adsorción de propilparabeno. Este análisis

permitió identificar los cambios en los estados de enlace del carbono (C1s), oxígeno (O1s) y boro (B1s).

Figura 12

Espectroscopia de fotoelectrones de rayos X para B-MPC + Propilparabeno





En la Figura 12(a), el espectro de alta resolución de C1s del material B-MPC tras la adsorción de propilparabeno muestra picos característicos a 284.17 eV (Csp²), 285.4 eV (Csp³), 286.35 eV (C–O), 287.75 eV (C=O) y 289.26 eV (O–C=O), lo que evidencia la presencia de enlaces aromáticos y funcionales en la superficie del adsorbente. Estos grupos permiten interacciones π - π y enlaces de hidrógeno con el propilparabeno, lo que favorece su adsorción eficiente.

En la Figura 12(b), el espectro O1s presenta señales en 530.95 eV (C=O), 532.6 eV (C–O), 534.21 eV (O–C=O) y 536.15 eV (H₂O), lo cual confirma la existencia de diferentes grupos oxigenados en la superficie del B-MPC. Estos grupos funcionales son claves para la interacción química con el propilparabeno, particularmente a través de enlaces de hidrógeno que refuerzan la retención del contaminante en el material.

En la Figura 12(c), el espectro B1s exhibe un pico prominente a 190.61 eV, asociado al boro en forma de nitruro de boro (BN), lo que indica que el dopaje con boro se mantiene estable tras la adsorción. Esta estabilidad contribuye a la polaridad superficial del material y mejora su afinidad por compuestos aromáticos, como el propilparabeno, facilitando una adsorción eficaz.

Los resultados obtenidos en este estudio coinciden con lo reportado por Camparotto et al. (2023), quienes observaron en los espectros C1s de materiales B-

MPC picos característicos en 284.5 eV (Csp²), 285.6 eV (Csp³), 286.7 eV (C–O), 288.1 eV (C=O) y 289.3 eV (O–C=O), tanto en el material puro como tras la adsorción de contaminantes farmacéuticos. Al igual que en su estudio, en nuestro caso se identificaron desplazamientos en las energías de enlace de los picos Csp² y Csp³, lo cual se asocia con la presencia de interacciones π - π entre los anillos aromáticos de los parabenos y la superficie carbonosa (Zhang et al., 2023).

Asimismo, se observaron cambios en las bandas relacionadas con grupos oxigenados (C–O y C=O), en línea con lo descrito por Camparotto et al. (2023), quienes destacaron que estas variaciones reflejan la formación de enlaces de hidrógeno en el proceso de adsorción. De hecho, en ambos estudios se confirma que el dopaje con boro se mantiene estable después de la adsorción, lo que contribuye a la modulación de la polaridad superficial y mejora la interacción con contaminantes aromáticos.

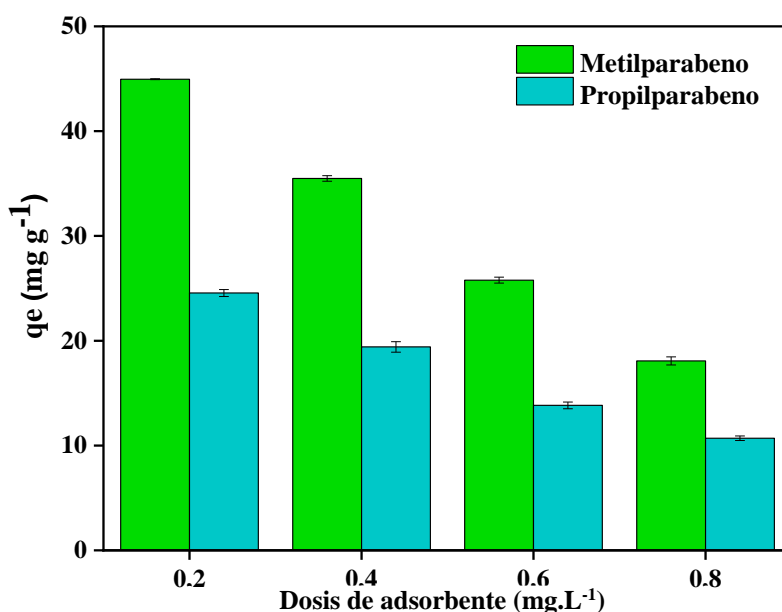
4.1.2. Ensayos de adsorción

4.1.2.1. Variación de la concentración de adsorbente

La Figura 13 presenta los resultados correspondientes a los ensayos de adsorción realizados con distintas concentraciones de B-MPC, con el objetivo de evaluar su influencia en la eficiencia de remoción de metilparabeno y propilparabeno.

Figura 13

Variación de dosis de adsorbente



La Figura 13. muestra la capacidad de adsorción (q_e) de metilparabeno y propilparabeno en función de la dosis de adsorbente de carbón mesoporoso dopado con boro. A una dosis de 0.2 mg L^{-1} , la capacidad de adsorción de metilparabeno es de aproximadamente 46 mg g^{-1} , mientras que para propilparabeno es de aproximadamente 31 mg g^{-1} . A medida que la dosis de adsorbente aumenta a 0.4 mg L^{-1} , la capacidad de adsorción disminuye a 32 mg g^{-1} para metilparabeno y a 22 mg g^{-1} para propilparabeno. Esta tendencia continúa con dosis mayores: a 0.6 mg L^{-1} , la capacidad de adsorción es de 24 mg g^{-1} para metilparabeno y 17 mg g^{-1} para propilparabeno. Finalmente, a 0.8 mg L^{-1} , la capacidad de adsorción es de 14 mg g^{-1} para metilparabeno y 9 mg g^{-1} para propilparabeno. El mismo perfil fue observado por Neves et al., (2022) al estudiar la eliminación del colorante de azul 7 (BB7) y marrón básico 4 (BB4), y el negro aniónico directo 22 (DB22), informaron una menor capacidad de adsorción del colorante BB4 por los nanoadsorbentes inmovilizados sobre membranas poliméricas en la dosis de adsorbente más baja probada (0.0005 g)

Este comportamiento es característico de los procesos de adsorción, donde una mayor cantidad de adsorbente proporciona más sitios de adsorción (Chen et al., 2024), pero la cantidad de adsorbato disponible para adsorberse por unidad de masa de adsorbente disminuye. La disminución en q_e con el aumento de la dosis de adsorbente indica que, aunque se incrementen los sitios de adsorción disponibles, la concentración de los contaminantes disminuye, resultando en una menor eficiencia por unidad de masa de adsorbente (da Silva et al., 2024).

Comparando estos resultados con estudios previos, encontramos que el carbón mesoporoso ha mostrado variaciones en la capacidad de adsorción dependiendo de las modificaciones realizadas y del tipo de contaminante. Por ejemplo, Zhang et al., (2023) informaron que el carbón mesoporoso dopado con nitrógeno y magnetizado alcanzó una capacidad de adsorción de 335 mg g^{-1} para la eliminación de Ag(I) . Este valor es significativamente mayor en comparación con los valores obtenidos para metilparabeno y propilparabeno en este estudio. Sin embargo, es importante notar que los contaminantes y las condiciones experimentales difieren, lo que puede explicar las diferencias observadas.

Un estudio por Camparotto, Paixão, et al., (2023) indicó que los carbones mesoporosos dopados con boro presentan propiedades mejoradas para aplicaciones

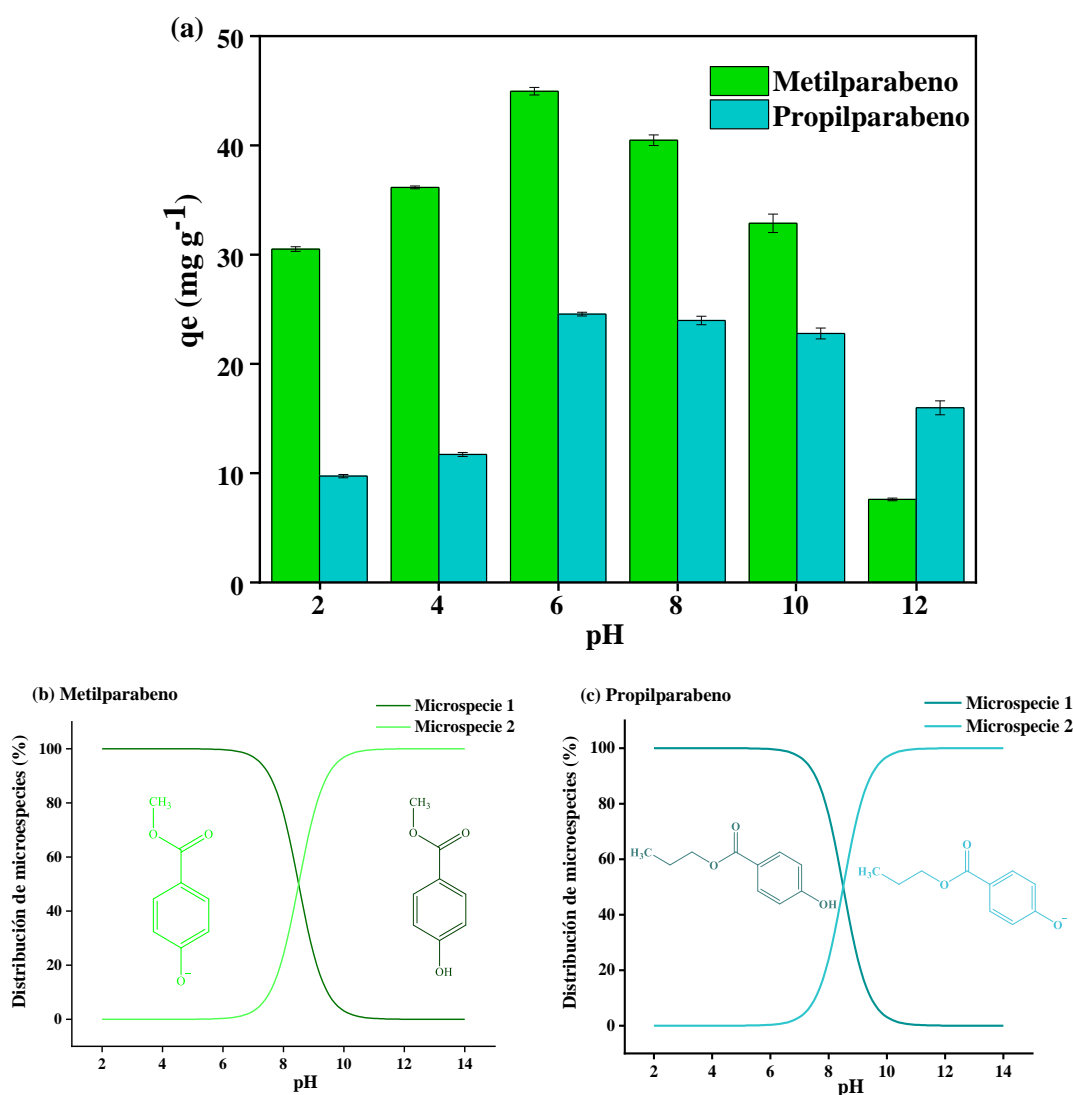
de almacenamiento de energía y catálisis, aunque su efectividad en la adsorción de contaminantes específicos como los parabenos no se discutió en detalle.

4.1.2.2. Variación de pH

El pH inicial de la solución ejerce una influencia directa en el proceso de adsorción, ya que puede provocar alteraciones en las cargas superficiales tanto de los adsorbentes como de los adsorbidos. Para investigar este efecto, se analizaron las microespecies de los contaminantes y se realizaron ensayos de adsorción con metilparabeno y propilparabeno en un intervalo de pH de 2 a 12, como se ilustra en la Figura 14a-c.

Figura 14

Influencia de la variación del pH en la eliminación de metilparabeno y propilparabeno



Se observó que la máxima capacidad de adsorción de metilparabeno y propilparabeno se alcanzó a pH 6, con q_e de $46 \text{ mg}\cdot\text{g}^{-1}$ y $24 \text{ mg}\cdot\text{g}^{-1}$, respectivamente (Figura 14a). El metilparabeno y el propilparabeno presentes en solución acuosa pueden existir en forma neutra ($\text{pH} < 8.5$) y aniónica ($\text{pH} > 8.5$) (Figura 14b y c). En condiciones ácidas ($\text{pH} 2$ y 4), los adsorbatos están en su forma neutra y el B-MPC tiene los grupos carboxilo protonados (grupos COOH), lo que hace que el adsorbente sea menos rico en electrones debido a los iones H^+ presentes en el medio. A un pH de 6, el proceso de adsorción potenció la desprotonación de las funciones carboxílicas del B-MPC (COO^-), haciendo así que la superficie del adsorbente fuera más electronegativa y capaz de interactuar con los parabenos, predominantemente como aceptor de enlaces de hidrógeno. La hipótesis es que las interacciones ácido-base de Lewis pueden servir como mecanismo de anclaje adicional, en el que los átomos de oxígeno de los parabenos (bases de Lewis) se unen a los átomos de boro (ácidos de Lewis) del B-MPC (Camparotto et al., 2023)

Por otro lado, a pH 2, los enlaces de hidrógeno entre el metilparabeno y el B-MPC disminuyen porque los átomos de nitrógeno y oxígeno están protonados (N^+ , O), lo que reduce la presencia de aceptores de enlaces de hidrógeno en el medio. Por otro lado, a pH superiores a 4 e inferiores a 12, prevalece la especie aniónica del metilparabeno, lo que podría perjudicar sus interacciones debido a la repulsión electrostática entre esta especie y los grupos B-MPC cargados negativamente, como los carboxilatos (Paixão et al., 2022).

La eliminación máxima de propilparabeno por B-MPC se alcanzó a pH 6, donde predomina la especie neutra. El propilparabeno puede existir en forma neutra a un $\text{pH} < 6$ y aniónica $\text{pH} > 8$ en solución acuosa. En un pH básico, el propilparabeno adquiere una carga negativa, al igual que el B-MPC, que también tiene una alta densidad de electrones debido a la presencia de grupos oxigenados, lo que provoca una repulsión entre las especies (Jedynak et al., 2019).

En un medio de pH ácido, el propilparabeno se encuentra en forma neutra, mientras que el B-MPC tiene una menor riqueza electrónica debido a la protonación de los grupos oxigenados del adsorbente por los iones H^+ presentes en el medio. El propilparabeno contiene grupos O y N, al igual que el B-MPC, que tienen funciones ricas en electrones, lo que les permite interactuar mediante enlaces de hidrógeno durante el proceso de adsorción. Por lo tanto, la protonación del adsorbente en

condiciones de pH ácido provoca una disminución de los sitios básicos disponibles, lo que reduce su capacidad para actuar como receptor de enlaces de hidrógeno e interactuar con el propilparabeno. Otra forma esperada de interacción es entre los átomos de N y O (bases de Lewis) del propilparabeno y los átomos de boro (ácidos de Lewis) presentes en el B-MPC, que se produce preferentemente a pH casi neutro. Esto se debe a que el pH básico impide la unión entre el adsorbente y el adsorbato debido a la repulsión electrónica mencionada anteriormente. Por ello, tanto en medios ácidos como básicos, las interacciones entre adsorbente y adsorbato no son favorables, por lo que se prefiere un pH neutro para mejorar el proceso de adsorción.

Dentro del intervalo de pH de 8 a 12, la especie predominante de parabenos está cargada negativamente, como consecuencia de la desprotonación del grupo fenol. Además, el adsorbente B-MPC posee una carga negativa en este punto concreto. Esto da lugar a un proceso de repulsión entre el adsorbente rico en electrones y el adsorbato. En consecuencia, se determinó que el pH óptimo para los ensayos subsiguientes era 6 para ambos parabenos.

Este resultado coincide con lo reportado por Camparotto et al. (2023), quienes observaron que la adsorción de diclofenaco y paracetamol sobre B-MPC fue máxima a pH 4 y 6, respectivamente. En su estudio, la mayor eficiencia a pH cercanos a la neutralidad se explicó por un equilibrio favorable entre la desprotonación de grupos funcionales en el adsorbente y la presencia de especies neutras o parcialmente aniónicas en los adsorbatos, lo que reduce la repulsión electrostática y permite que predominen las interacciones de tipo hidrógeno y ácido–base de Lewis.

En cambio, en condiciones básicas $\text{pH} > 8$, los parabenos adquieren carga negativa debido a la desprotonación del grupo fenol, mientras que el B-MPC también presenta una superficie cargada negativamente por la ionización de sus grupos oxigenados. Esta situación genera repulsión electrostática, reduciendo significativamente la capacidad de adsorción, tal como ha sido reportado para sistemas similares (Huang et al., 2024).

Por lo tanto, tanto en medios muy ácidos como básicos, las interacciones adsorbente - adsorbato resultan menos favorables. En medio ácido, la protonación excesiva reduce la capacidad del B-MPC para actuar como receptor de enlaces de

hidrógeno, mientras que en medio básico la repulsión electrostática predomina sobre otras interacciones. En consecuencia, se determinó que el pH óptimo para la adsorción de metilparabeno y propilparabeno fue 6, donde coexisten condiciones favorables para el establecimiento de enlaces de hidrógeno e interacciones ácido–base de Lewis.

4.1.3. Estudios de Adsorción

4.1.3.1. Estudios cinéticos

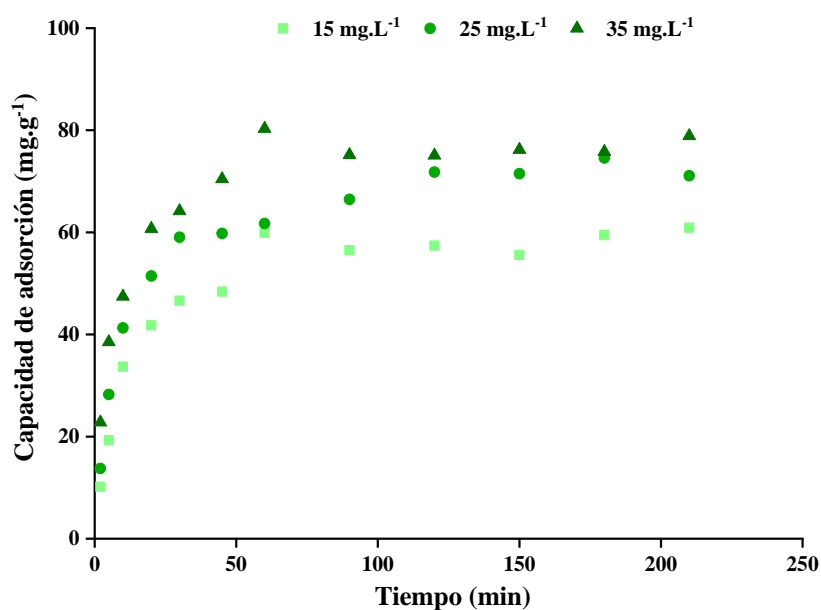
El estudio cinético de la eliminación de los contaminantes propilparabeno y metilparabeno por B-MPC se llevó a cabo a tres concentraciones diferentes: 15, 25 y 35 mg.L⁻¹. Este estudio se llevó a cabo con el objetivo de investigar la velocidad de adsorción de ambos contaminantes, con el fin de conocer los posibles mecanismos implicados en el proceso de adsorción (Muliwa et al., 2023). Como se ilustra en la Figura 15a, para el metilparabeno, la capacidad de eliminación aumentó bruscamente en los primeros 60 min y luego se estabilizó en torno a los 90 min. Las capacidades de adsorción alcanzadas para el metilparabeno a concentraciones de 15, 25 y 35 mg.L⁻¹ fueron de 60.9, 74.5 y 78.8 mg.g⁻¹, respectivamente. Se observó un aumento de la capacidad de adsorción en respuesta a un aumento de la concentración de metilparabeno, lo que indica la presencia de varios sitios activos en el B-MPC. El tiempo de contacto de 90 min se mantuvo en todos los experimentos posteriores para el metilparabeno.

En cuanto a la adsorción de propilparabeno (Figura 15b), el tiempo de equilibrio se mantuvo constante, independientemente de la concentración inicial, en 45 minutos. Las capacidades experimentales de adsorción aumentaron al aumentar la concentración de propilparabeno, alcanzando 63.7, 75.0 y 100.8 mg.g⁻¹ para concentraciones de 15, 25 y 35 mg.L⁻¹, respectivamente. En consecuencia, en todos los experimentos posteriores se empleó un tiempo de contacto constante de 45 min para el propilparabeno.

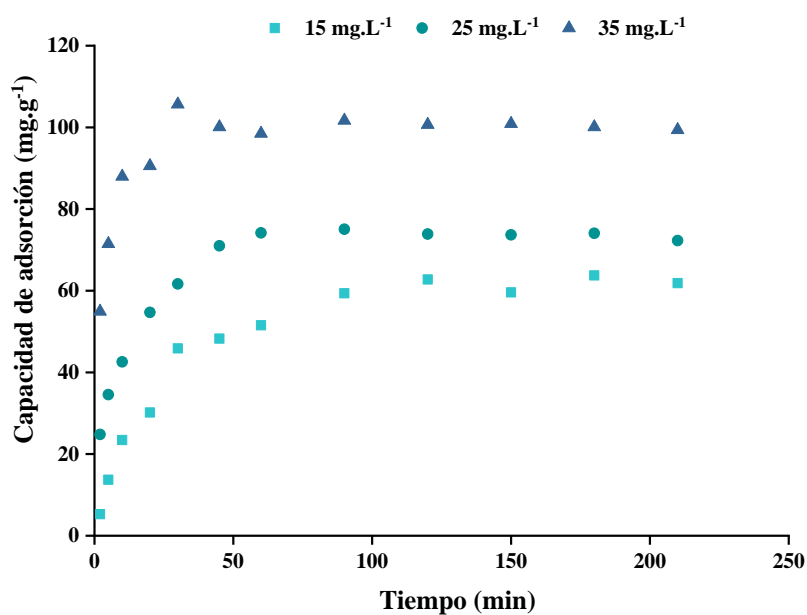
Figura 15

Modelos cinéticos de metilparabeno y propilparabeno

a) Metilparabeno



b) Propilparabeno



Los modelos cinéticos de pseudo-primer orden (PFO), pseudo-segundo orden (PSO) y difusión intrapartícula (ID) se ajustaron a los datos experimentales. La calidad de los ajustes se evaluó considerando de manera conjunta los coeficientes de correlación (R^2), el coeficiente de determinación ajustado (R^2_{adj}) y el análisis del error estadístico mediante χ^2 . Los parámetros obtenidos y los valores de ajuste correspondientes se presentan en la Tabla 4.

Tabla 4*Modelos cinéticos no lineares para metilparabeno y propilparabeno*

	Concentración (mg.L ⁻¹)					
	15		25		35	
	Metil	Propil	Metil	Propil	Metil	Propil
qe experimental (mg.g⁻¹)	60.90	63.74	74.56	75.05	78.88	100.87
PFO						
qe (mg.g ⁻¹)	57.04	61.32	68.03	72.26	74.56	98.97
k ₁ (min ⁻¹)	0.0728	0.0391	0.0843	0.0974	0.1125	0.3085
X ²	12.52	7.76	22.87	31.32	27.84	29.78
R ²	0.9595	0.9832	0.9430	0.9100	0.9245	0.8784
R ² _{adj}	0.9555	0.9816	0.9373	0.9010	0.9171	0.8674
PSO						
qe (mg.g ⁻¹)	62.65	70.42	74.67	77.41	80.02	102.77
k ₂ (g.mg ⁻¹ .min ⁻¹)	0.1018	0.0484	0.1151	0.1558	0.1712	0.5421
X ²	6.58	6.14	4.43	12.74	8.79	12.06
R ²	0.9787	0.9867	0.9889	0.9634	0.9762	0.9511
R ² _{adj}	0.9766	0.9854	0.9878	0.9597	0.9738	0.9462
ID						
C (dimensionless)	20.89	11.30	26.71	35.22	37.38	74.77
k _{dif} (mg.g ⁻¹ .min ^{-0.5})	3.2563	4.2463	3.8137	3.3750	3.4520	2.2358
X ²	27.7	19.5	82.52	98.14	108.07	127.31
R ²	0.7511	0.8514	0.7946	0.7182	0.7076	0.4847
R ² _{adj}	0.7262	0.8366	0.7741	0.6899	0.6784	0.4332

La capacidad experimental de adsorción de metilparabeno por el material B-MPC osciló entre 60.9 mg·g⁻¹ y 78.8 mg·g⁻¹, en el rango de concentración inicial de 15 a 35 mg·L⁻¹. En el caso del propilparabeno, las capacidades fueron superiores, alcanzando valores entre 63.7 mg·g⁻¹ y 100.8 mg·g⁻¹ en el mismo intervalo.

De acuerdo con los parámetros presentados en la Tabla 4, el modelo pseudo-

segundo orden (PSO) mostró el mejor ajuste global a los datos experimentales tanto para metilparabeno como para propilparabeno en todas las concentraciones evaluadas. Esto se refleja no solo en los mayores valores de R^2 (≥ 0.9878) y R^2 ajustado (≥ 0.9462), sino también en los menores valores de χ^2 frente a los modelos PFO e ID. Por ejemplo, para el metilparabeno, los valores de χ^2 oscilaron entre 6.58 y 12.74, mientras que para el propilparabeno estuvieron entre 4.14 y 17.04, confirmando que el PSO describe con mayor precisión la relación entre capacidades experimentales y teóricas.

El análisis de la constante de velocidad de adsorción del modelo PSO (k_2) muestra que el metilparabeno presentó una cinética de adsorción relativamente más rápida, con valores de k_2 entre 0.1018 y 0.1712 $\text{g}\cdot\text{mg}^{-1}\cdot\text{min}^{-1}$, en comparación con el propilparabeno, cuyos valores oscilaron entre 0.0404 y 0.5412 $\text{g}\cdot\text{mg}^{-1}\cdot\text{min}^{-1}$. A bajas concentraciones iniciales, el propilparabeno exhibió velocidades de adsorción mayores; sin embargo, este comportamiento se invirtió a concentraciones más elevadas, sugiriendo una mayor saturación de sitios activos en el caso del propilparabeno.

El modelo PSO postula que el proceso de adsorción está controlado principalmente por mecanismos de quimisorción, donde las interacciones específicas entre los grupos funcionales de los contaminantes y los sitios activos del material gobiernan la velocidad global (Paixão et al., 2022; Brião et al., 2021).

Al comparar estos resultados con el trabajo de Paixão et al. (2022), se observa una tendencia consistente: en su estudio sobre la adsorción de propranolol en un material carbonoso fosforado (PMC), el modelo PSO también fue el que mejor describió los datos, alcanzando capacidades de equilibrio entre 133.13 y 181.39 $\text{mg}\cdot\text{g}^{-1}$ y tiempos de equilibrio muy rápidos (~ 10 min). Aunque los valores de capacidad fueron mayores que los del presente estudio, ambos coinciden en que la cinética está gobernada por interacciones químicas en sitios activos, más que por procesos difusivos o físicos.

En síntesis, los resultados permiten concluir que la adsorción de metilparabeno y propilparabeno sobre B-MPC sigue un mecanismo dominado por quimisorción en sitios superficiales heterogéneos, con cinéticas influenciadas por la concentración inicial y confirmadas por los bajos valores de χ^2 en el modelo PSO. Este

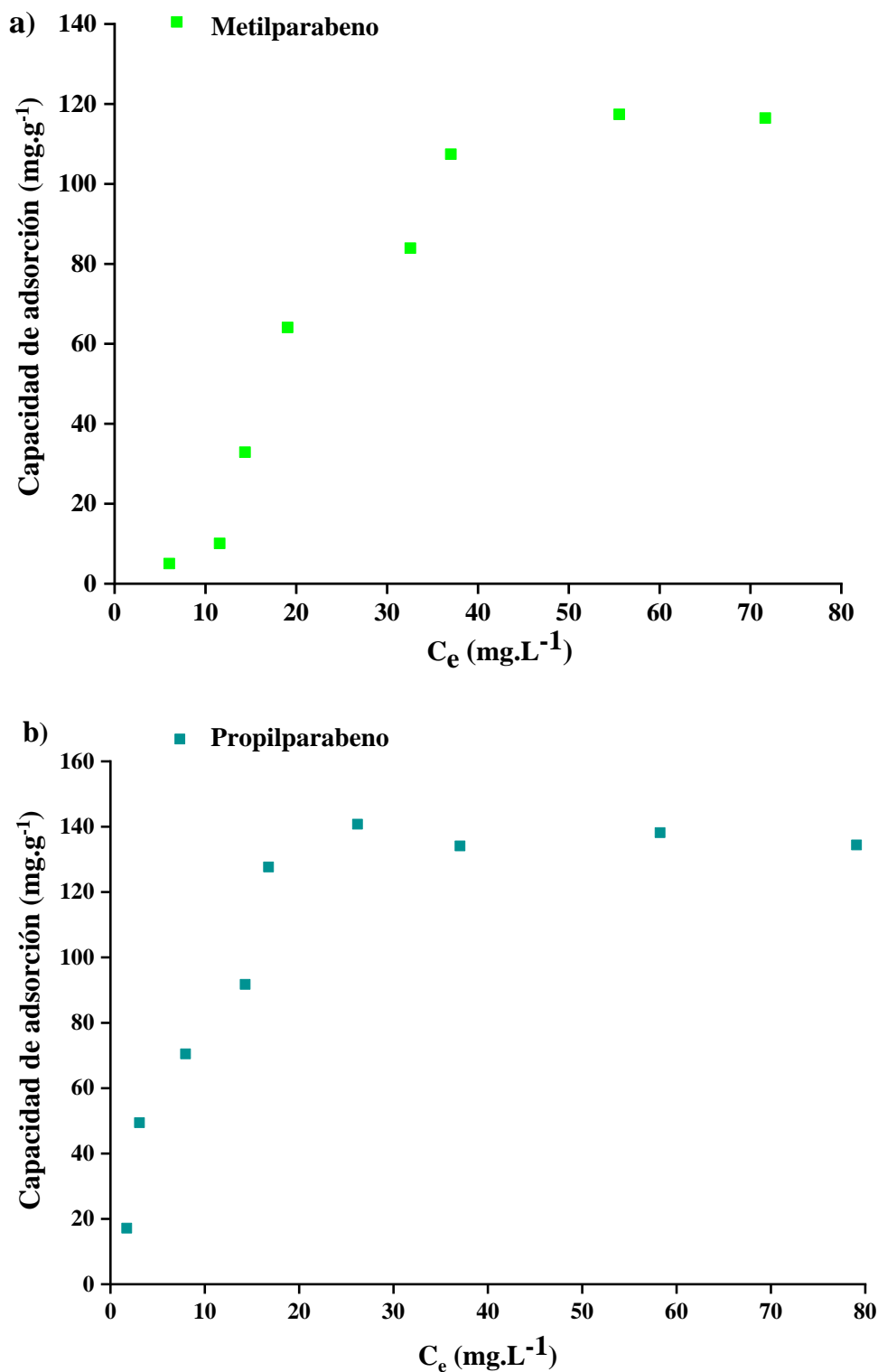
comportamiento respalda el papel del dopaje con boro en la generación de sitios activos capaces de favorecer interacciones específicas con los grupos funcionales de los parabenos, lo que coincide con lo reportado para otros contaminantes farmacéuticos en materiales mesoporosos modificados (Guo y Wang, 2020; Paixão et al., 2022).

4.1.3.2. Estudios isotérmicos

El estudio isotérmico de la eliminación de los contaminantes propilparabeno y metilparabeno por B-MPC se llevó a cabo para investigar el mecanismo de interacción entre B-MPC y los contaminantes. La isoterma del metilparabeno (Figura 16a) y del propilparabeno mostró un parecido con la isoterma de tipo L (tipo Langmuir), según la clasificación de Giles (Giles et al., 1974). Esta observación significa una alta afinidad entre los contaminantes y los materiales. La isoterma de equilibrio para el metilparabeno (Figura 16a) puede clasificarse como de tipo «L4», lo que indica un aumento de la adsorción del contaminante hasta la formación de una primera meseta, asociada a la eliminación por monocapa. A continuación, se produce un nuevo aumento de la adsorción hasta alcanzar una segunda meseta, asociada a la eliminación por multicapa (Da Silva et al., 2024). La isoterma de equilibrio para el propilparabeno puede clasificarse como del tipo «L2» (Figura 16b), lo que indica que la adsorción del contaminante aumenta progresivamente a medida que aumenta la concentración del adsorbato, hasta alcanzar un punto de saturación de la superficie (Santos et al., 2024).

Figura 16

Isotermas de adsorción para Metilparabeno y propilparabeno



Los datos experimentales obtenidos se ajustaron a los modelos isotérmicos no lineales de Langmuir, Freundlich, Redlich–Peterson y Temkin. Para evaluar la calidad del ajuste se consideraron de manera conjunta los coeficientes de

correlación R^2 y el χ^2 , lo que permitió una comparación más rigurosa entre los modelos. Los parámetros calculados y los valores de ajuste se presentan en la Tabla 5.

Tabla 5

Parámetros de isotermas de metilparabeno y propilparabeno

Modelos	Parametros	Contaminantes (mg.L ⁻¹)	
		Metilparabeno	Propilparabeno
Langmuir	q_m (mg.g ⁻¹)	271.62	160.92
	K_L (L.mg ⁻¹)	0.0127	0.1259
	X^2	27.6	16.95
	R^2	0.8907	0.9284
Freundlich	n_F	0.6821	0.3114
	K_F [(mg.g ⁻¹).(Lmg ⁻¹)) 1/ n_F]	7.3262	40.6202
	X^2	36.63	49.68
	R^2	0.9577	0.7904
Redlich-Peterson	K_{RP} (L/g)	18.1523	12.44
	α (L/mg) ^{β}	4.6955	0.0188
	β (dimensionless)	0.0898	1.3309
	X^2	18.54	12.31
	R^2	0.8958	0.9554
Dubinin-Radushkevich	K_{D-R} (L.mg ⁻¹)	0,00005	3E-5
	q_m (mg.g ⁻¹)	123.9835	128.2988
	X^2	11.43	15.52
	R^2	0.9732	0.8439
Temkin	K_T	0.1494	1.3359
	RT/b	53.5590	33.3081
	X^2	16.53	19.71
	R^2	0.9345	0.8909

Un análisis minucioso de los coeficientes de correlación y de los estadísticos de ajuste R^2 , R^2 ajustado y χ^2 , derivados de los diferentes modelos aplicados reveló que el modelo Dubinin–Radushkevich ofreció el ajuste más consistente para los datos experimentales de metilparabeno $R^2 = 0.9732$; $\chi^2 = 11.43$, mientras que el modelo Redlich–Peterson proporcionó la mejor representación del proceso de eliminación de propilparabeno $R^2 = 0.9554$; $\chi^2 = 8.02$.

El modelo Dubinin–Radushkevich se emplea principalmente para identificar el mecanismo de adsorción predominante, diferenciando entre fisisorción y quimisorción en función del potencial de Polanyi (\mathcal{E}). Se ha demostrado que valores de \mathcal{E} inferiores a 8 kJ·mol⁻¹ indican que el proceso ocurre principalmente

mediante interacciones físicas de baja intensidad (Da Silva et al., 2024; Mpupa et al., 2020). En cambio, valores superiores a este umbral son indicativos de interacciones químicas más fuertes y específicas. En este caso, el valor calculado de ϵ fue de $31.62 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$, lo que confirma que el proceso dominante para el metilparabeno es la quimisorción. Estos hallazgos concuerdan con el estudio cinético, que también señaló la quimisorción como mecanismo operativo predominante.

Por su parte, el modelo Redlich–Peterson es considerado una isoterma híbrida al combinar elementos de los modelos Freundlich y Langmuir. El parámetro β , que varía entre 0 y 1, indica el grado de semejanza con uno u otro modelo. Valores de β cercanos a 1 reflejan un comportamiento similar al modelo de Langmuir (adsorción en monocapa sobre superficie homogénea), mientras que valores cercanos a 0 sugieren un ajuste más afín al modelo de Freundlich (superficie heterogénea) (Neves et al., 2024; Amézquita-Marroquín et al., 2020). En el caso del propilparabeno, el valor β fue cercano a 1, lo que indica que la interacción con el material adsorbente B-MPC ocurre sobre una superficie relativamente homogénea, con predominio de adsorción monocapa de carácter químico.

En contraste con el trabajo de Paixão et al. (2022), donde la adsorción de propranolol en carbón mesoporoso fosforado (PMC) se ajustó mejor al modelo Brunauer-Emmett-Teller debido a la formación de multicapas, los resultados del presente estudio muestran que, aunque el B-MPC posee una alta capacidad de adsorción, los parabenos no evidenciaron comportamiento multicapa. Más bien, el metilparabeno mostró un carácter heterogéneo gobernado por procesos de quimisorción de alta energía (modelo D–R), mientras que el propilparabeno se ajustó mejor a un mecanismo de monocapa homogénea (modelo R–P, $\beta \approx 1$).

En síntesis, la comparación de los estadísticos de ajuste demuestra que, para metilparabeno el modelo Dubinin–Radushkevich presentó simultáneamente el mayor valor de R^2 0.9732 y un χ^2 relativamente bajo 11.43, confirmando su capacidad para describir con mayor precisión el proceso de adsorción. En contraste, para propilparabeno, el mejor ajuste se obtuvo con el modelo Redlich–Peterson, que además de alcanzar un R^2 elevado 0.9554, presentó el menor χ^2 8.02, evidenciando que este modelo híbrido captura de manera más fiel las

interacciones entre el adsorbente B-MPC y el contaminante. En conjunto, estos resultados reflejan la diferencia en los mecanismos de adsorción, el metilparabeno se ajusta mejor a un proceso de quimisorción heterogénea de alta energía, mientras que el propilparabeno responde a un mecanismo de adsorción monocapa homogénea.

4.1.3.3. Estudios termodinámicos

El presente estudio evaluó la influencia de la temperatura en el proceso de adsorción de metilparabeno y propilparabeno por B-MPC. Además, se calcularon parámetros termodinámicos como la entalpía (ΔH°), la entropía (ΔS°) y la energía libre de Gibbs (ΔG°), que se presentan en la Tabla 6.

Tabla 6

Parámetros termodinámicos del metilparabeno y del propilparabeno a 25, 35 y 45 °C.

Contaminante (mg.L ⁻¹)	ΔG°			ΔH° (kJ.mol ⁻¹)	ΔS° (kJ.mol ⁻¹)
	(kJ.mol ⁻¹)				
	25 °C	35 °C	45 °C		
Metilparabeno	-2.7054	-2.2365	-2.0244	-4.4133	-0.0650
Propilparabeno	-2.0250	-2.0125	-2.0028	-5.4473	-0.1050

Para la adsorción de metilparabeno, los valores de ΔG° fueron negativos a todas las temperaturas evaluadas, oscilando entre -2.7054 kJ.mol⁻¹ a la temperatura más baja 25°C y -2.0244 kJ.mol⁻¹ a la temperatura más alta 45°C, lo que indica que la adsorción de metilparabeno por B-MPC es un proceso espontáneo. El valor de ΔH° fue -4.4133 kJ.mol⁻¹, lo que caracteriza una naturaleza exotérmica del proceso de adsorción y sugiere que las temperaturas más bajas favorecen la capacidad de adsorción. El valor de ΔS° fue -0.0650 kJ.mol⁻¹, que indica la ordenación de las moléculas en la superficie del adsorbente (Ayisha & Priya, 2021). El propilparabeno demostró un perfil termodinámico coherente con el del metilparabeno, presentando valores ΔG° negativos a todas las temperaturas examinadas. Los resultados sugieren que la adsorción de propilparabeno por B-MPC se produce espontáneamente. La entalpía de adsorción (ΔH°) se determinó en -5.4413 kJ.mol⁻¹, lo que indica la

naturaleza exotérmica del proceso. Por el contrario, el valor negativo de ΔS° ($-0.1050 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$), indica una reducción del desorden del sistema durante el proceso de adsorción (Jin et al., 2022; De Farias et al., 2022).

Al comparar estos resultados con el estudio de Santos et al. (2024), se observan claras diferencias en el carácter del proceso. Dichos autores reportaron para la adsorción de azul de metileno (MB) en CDW valores negativos de ΔG° , pero acompañados de una entalpía positiva, lo que caracterizó el proceso como endotérmico y principalmente físico, sustentado por la magnitud de ΔH° ($< 20 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$) y por un ΔS° positivo que indica un aumento en el desorden del sistema. En contraste, la adsorción de metilparabeno y propilparabeno sobre B-MPC se caracterizó por valores de ΔH° negativos (exotermicidad) y ΔS° negativos, lo que revela un proceso espontáneo pero acompañado de una disminución en la entropía del sistema, propio de mecanismos de interacción química más fuerte y específica.

En conjunto, estos resultados permiten establecer que, a diferencia de procesos endotérmicos y físicos como los descritos por Santos et al. (2024), la adsorción de parabenos en B-MPC responde a un proceso exotérmico, espontáneo de carácter químico, donde las interacciones predominantes limitan la movilidad molecular y favorecen la organización de los contaminantes sobre la superficie activa del material.

4.2. Prueba de Hipótesis

Con el objetivo de determinar si existían diferencias estadísticamente significativas en la Q_e entre los contaminantes metilparabeno y propilparabeno, se realizó una prueba t según se evidencia en la Figura 19, para muestras independientes (Welch Two Sample t-test).

Figura 17

Gráfico Q-Q de Metilparabeno

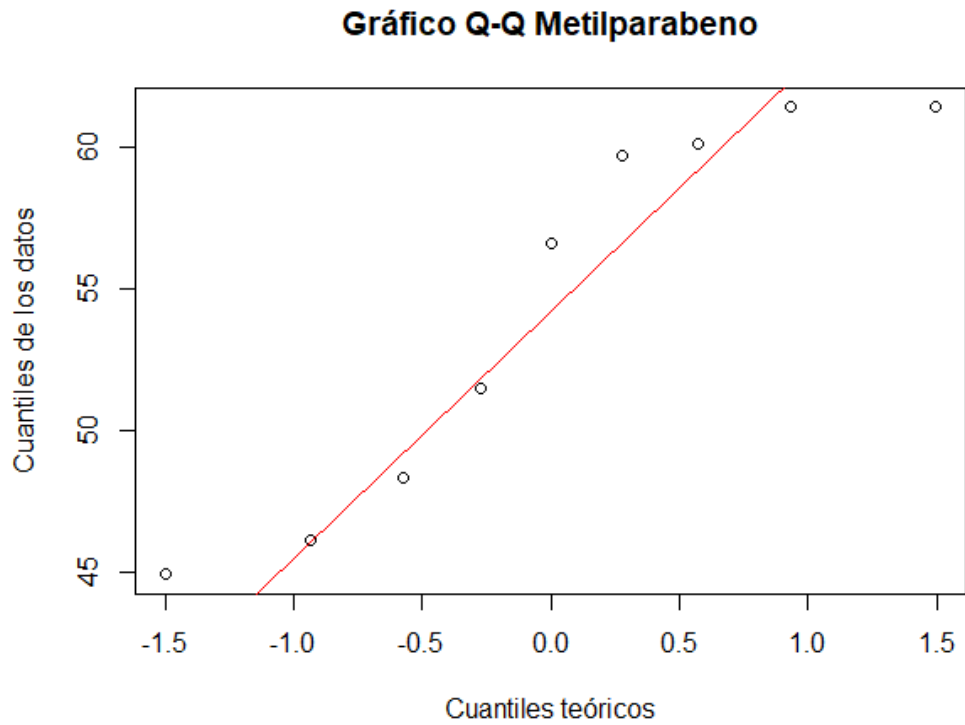
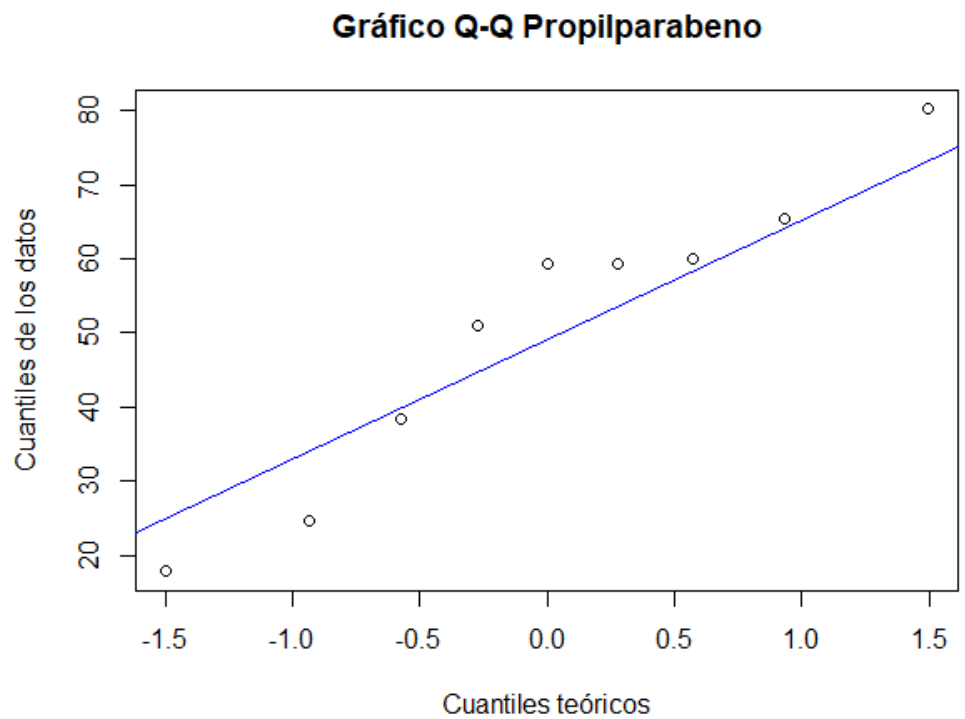


Figura 18

Gráfico Q-Q de Propilparabeno

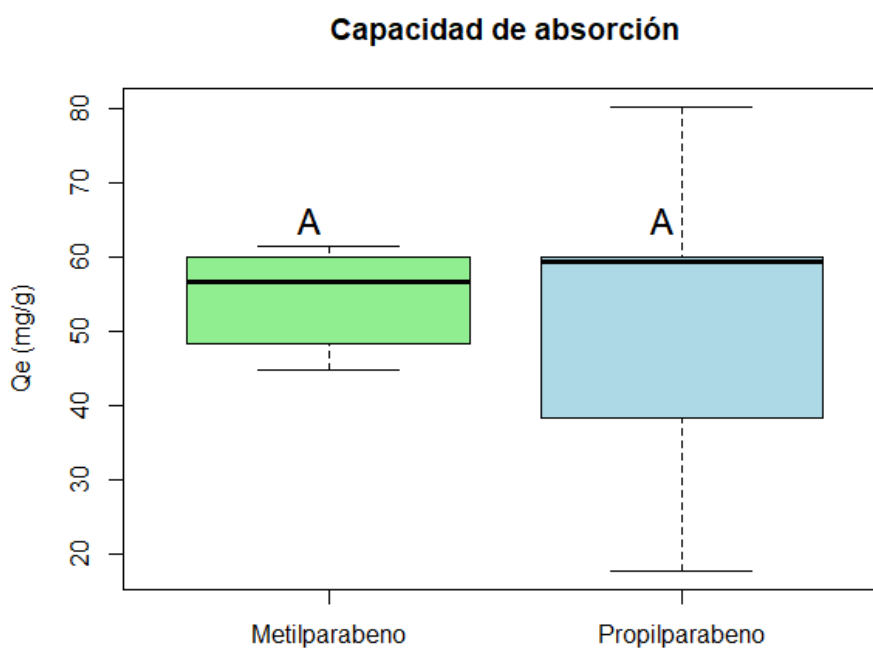


Previo a la aplicación, se verificó el supuesto de normalidad de los datos mediante la prueba de Shapiro Wilk, cuyos resultados evidenciaron que las distribuciones no se alejaban significativamente de una curva normal. El Metilparabeno consiguió $W = 0.8599$, $p = 0.0956$, y el Propilparabeno alcanzó $W = 0.9356$, $p = 0.5366$). En ambos casos, al obtenerse valores de p superiores a 0.05 , no se rechazó la hipótesis nula de normalidad.

Esta condición se corroboró visualmente a través de los gráficos Q-Q Figuras 17 y 18, donde los puntos de ambas variables se alinean de forma consistente con la diagonal teórica, confirmando así la validez del supuesto de normalidad y la pertinencia de aplicar la prueba t de Welch para comparar las medias de capacidad de adsorción entre ambos compuestos.

Figura 19

Prueba T-test



La Q_e del material B-MPC frente a los conservantes metilparabeno y propilparabeno se evaluó bajo condiciones experimentales controladas. Como se observa en la Figura 19, los valores medios de Q_e fueron de $54.44 \text{ mg}\cdot\text{g}^{-1}$ para el metilparabeno y $50.66 \text{ mg}\cdot\text{g}^{-1}$ para el propilparabeno. Aunque el metilparabeno presentó un valor medio ligeramente superior, esta diferencia no fue estadísticamente significativa.

La comparación se realizó mediante la prueba t de Student para muestras

independientes con la variante de Welch, ya que los datos de cada conservante se consideran grupos independientes. La prueba arrojó un estadístico $t = 0.5337$, con 9.80 grados de libertad y un valor de $p = 0.6054$. Al ser $p > 0.05$, no se encontraron diferencias significativas entre ambos compuestos. El intervalo de confianza del 95 % para la diferencia de medias fue de $[-12.04; 19.59]$, lo que confirma la ausencia de diferencias.

Esta falta de diferencias significativas puede explicarse por varias razones. En primer lugar, ambos compuestos son parabenos con estructuras moleculares muy similares, diferenciándose únicamente en la longitud de la cadena alquilo. Esta similitud estructural favorece mecanismos de interacción semejantes con los sitios activos del material dopado con boro, lo que se reflejó en parámetros cinéticos e isotérmicos estadísticamente comparables. En segundo lugar, la capacidad de adsorción del B-MPC está fuertemente gobernada por interacciones de tipo quimisorción en sitios específicos, tal como lo demostraron los valores de energía libre, ΔG° negativos y el potencial de Polanyi $\epsilon > 8 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$, que no discriminaron significativamente entre ambos parabenos. Finalmente, la variabilidad experimental asociada a un estudio pionero basado en prueba y error, junto con el uso del número mínimo aceptado de repeticiones ($n=3$), pudo haber reducido la potencia estadística para detectar diferencias pequeñas entre los contaminantes.

En la Figura 19, los diagramas de caja incluyen letras iguales (“A”) sobre cada grupo, lo que representa gráficamente la ausencia de diferencias significativas. Estos resultados demuestran que el material B-MPC presenta una eficiencia comparable en la remoción de metilparabeno y propilparabeno, lo que respalda la hipótesis nula (H_0) de igualdad en la capacidad de adsorción para ambos conservantes bajo las condiciones evaluadas.

CONCLUSIONES

- Se logró sintetizar exitosamente carbonos mesoporosos dopados con boro (B-MPC) a partir de sacarosa, una fuente natural y accesible. El procedimiento permitió obtener un material con propiedades estructurales adecuadas para su aplicación en procesos de adsorción de contaminantes emergentes.
- El B-MPC fue caracterizado mediante SEM, FTIR, potencial Zeta y XPS, confirmando su morfología porosa y la presencia de grupos funcionales ricos en heteroátomos, especialmente oxígeno y boro. Estas características son claves para su capacidad de interacción con moléculas como los parabenos.
- En los ensayos de adsorción, se determinó que las condiciones óptimas de remoción fueron a pH 6, con una dosis de adsorbente de $0.2 \text{ g}\cdot\text{L}^{-1}$. El tiempo de equilibrio varió según el parabeno, 90 minutos para metilparabeno y 45 minutos para propilparabeno. Estas condiciones favorecen la eficiencia del proceso de adsorción en sistemas discontinuos.
- El análisis cinético demostró que el modelo de pseudo segundo orden fue el que mejor se ajustó a los datos experimentales, indicando que la adsorción está controlada por interacciones químicas. En cuanto a los modelos isotérmicos, el modelo Dubinin-Radushkevich fue más adecuado para metilparabeno, mientras que el modelo Redlich-Peterson resultó idóneo para propilparabeno. Ambos sugieren un mecanismo predominante de quimisorción. El estudio termodinámico reveló que los procesos fueron espontáneos y exotérmicos. Las técnicas de caracterización post-adsorción, junto con estudios teóricos, indicaron que las interacciones predominantes fueron enlaces de hidrógeno y fuerzas π - π . Estos hallazgos respaldan el uso del B-MPC como un adsorbente eficiente y prometedor para la remoción de parabenos en aguas contaminadas.
- Se determinaron capacidades máximas de adsorción de $116.4 \text{ mg}\cdot\text{g}^{-1}$ para metilparabeno y $134.4 \text{ mg}\cdot\text{g}^{-1}$ para propilparabeno.

RECOMENDACIONES

- Considerando la exitosa síntesis del B-MPC a partir de sacarosa, se recomienda explorar otras fuentes naturales o residuos agroindustriales como materia prima alternativa para la obtención de carbonos mesoporosos, lo que permitiría optimizar costos y fomentar una producción más sostenible.
- A partir de los resultados obtenidos en la caracterización fisicoquímica del B-MPC, se sugiere complementar futuros estudios con técnicas analíticas cuantitativas, como la Fluorescencia de Rayos X (XRF) o Espectrometría de Masas con Plasma Acoplado Inductivamente (ICP-MS), para evaluar con mayor precisión la estabilidad elemental del material y sus implicancias en procesos de reciclaje o disposición ambiental segura.
- Dado que la adsorción fue evaluada en un sistema discontinuo, se recomienda implementar ensayos en un sistema continuo, como columnas de lecho fijo, simulando condiciones reales de tratamiento. Asimismo, se propone integrar esta etapa con procesos avanzados, como cavitación hidrodinámica o fotocátalisis, para potenciar la eficiencia del tratamiento de aguas contaminadas con parabenos.
- En vista del predominio de un mecanismo de adsorción de tipo químico según los modelos cinéticos e isotérmicos aplicados, se recomienda desarrollar estudios mecanísticos más profundos, como simulaciones moleculares o cálculos de energías de interacción, que permitan comprender con mayor detalle los modos de adsorción específicos entre el B-MPC y los parabenos.
- En el Perú no existen Límites Máximos Permisibles (LMP) para el uso de parabenos en ninguna industria. Por lo tanto, se recomienda considerar como referencia normativa el Reglamento (CE) N.º 1223/2009 de la Unión Europea, que establece concentraciones máximas permitidas para el uso de parabenos en productos cosméticos.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Amézquita-Marroquín, C. P., Torres-Lozada, P., Giraldo, L., Húmpola, P. D., Rivero, E., Poon, P. S., Matos, J., & Moreno-Piraján, J. C. (2020). Sustainable production of nanoporous carbons: Kinetics and equilibrium studies in the removal of atrazine. *Journal of Colloid and Interface Science*, *562*, 252–267. <https://doi.org/10.1016/j.jcis.2019.12.026>
- Alleoni, L. R. F., Camargo, O. A., & Casagrande, J. C. (1998). Isotermas de langmuir e de freundlich na descrição da adsorção de boro em solos altamente intemperizados. *Scientia Agricola*, *55*(3), 379–387. <https://doi.org/10.1590/S0103-90161998000300005>
- Ayisha Siddiqua, M., & Priya, V. S. (2021). Removal of yellow dye using composite binded adsorbent developed using natural clay and activated carbon from sapindus seed. *Biocatalysis and Agricultural Biotechnology*, *33*, 101965. <https://doi.org/10.1016/j.bcab.2021.101965>
- Belhachemi, M. (2021). Adsorption of organic compounds on activated carbons. In *Sorbents Materials for Controlling Environmental Pollution* (pp. 355–385). Elsevier. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-820042-1.00006-7>
- Bracht, C. K., Menezes, M. L., Ambrosio-Ugri, M. C., & Pereira, N. C. (2014). Determinação das isotermas de equilíbrio das sementes de uva das variedades cabernet sauvignon e bordô. *Engevista*, *17*(1), 44. <https://doi.org/10.22409/engevista.v17i1.558>
- Bratkowska, R.M. Marcé, P.A.G. Cormack, F. Borrull, N. Fontanals. (2011). Development and application of a polar coating for stir bar sorptive extraction of emerging pollutants from environmental water samples, *Anal. Chim. Acta*. *706* 135–142. <https://doi.org/10.1016/J.ACA.2011.08.028>.
- Błedzka, J. Gromadzińska, W. Wasowicz, Parabens. *From environmental studies to human health*, *Environ. Int.* *67* (2014) 27–42. <https://doi.org/10.1016/J.ENVINT.2014.02.007>
- Bolaños & Vallejo. (2024). Vista de Número de réplicas en un diseño experimental Unifactorial y Multifactorial. *Revista Sigma*. Recuperado de <https://revistas.udenar.edu.co/index.php/rsigma/article/view/9229/10272>
- Boscolo, M. (2003). Sucroquímica: síntese e potencialidades de aplicações de alguns derivados químicos de sacarose. *Química Nova*, *26*(6), 906–912.

<https://doi.org/10.1590/S0100-40422003000600021>

- Brião, G. de V., da Silva, MG, y Vieira, MGA (2021). Vermiculita expandida como adsorbente alternativo para la recuperación de disprosio. *Revista del Instituto de Ingenieros Químicos de Taiwán*, 127, 228–235. <https://doi.org/10.1016/j.jtice.2021.08.022>
- Brückner, H., & Höfer, S. (2021). Dispersion analysis of sucrose C₁₂H₂₂O₁₁ single crystal. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 255, 119654. <https://doi.org/10.1016/j.saa.2021.119654>
- Brunauer, S., Emmett, P. H., & Teller, E. (1938). Adsorption of Gases in Multimolecular Layers. *Journal of the American Chemical Society*, 60(2), 309–319. <https://doi.org/10.1021/ja01269a023>
- Camparotto, N. G., Paixão, G. R., Brião, G. de V., Oliveira, R. L., Prediger, P., & Vieira, M. G. A. (2023). Comparative effect of mesoporous carbon doping on the adsorption of pharmaceutical drugs in water: Theoretical calculations and mechanism study. *Environmental Toxicology and Pharmacology*, 99. <https://doi.org/10.1016/j.etap.2023.104105>
- Conte, N., & Gómez, J. M. (2024). Improving the sorption properties of mesoporous carbons for the removal of cobalt, nickel and manganese from spent lithium-ion batteries effluent. *Separation and Purification Technology*, 328. <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2023.125095>
- Da Silva, P. M. M., Camparotto, N. G., Neves, T. de F., Carrara, A. S., Mastelaro, V. R., Oliveira, R. L., & Prediger, P. (2024b). Green composites based on magnetic N-doped carbons: Synergetic effect on the simultaneous adsorption of emerging contaminants from water. *Journal of Water Process Engineering*, 58, 104832. <https://doi.org/10.1016/j.jwpe.2024.104832>
- De Araújo, P. C. C., Gonçalves Júnior, D. R., Cardozo Filho, L., Santos, E. de J., & Marques, J. J. (2018). Uso de carvão ativado na remoção de CO₂. *Scientia Plena*, 14(5). <https://doi.org/10.14808/sci.plena.2018.054201>
- De Farias, M. B., Prediger, P., & Vieira, M. G. A. (2022). Conventional and green-synthesized nanomaterials applied for the adsorption and/or degradation of phenol: A recent overview. *Journal of Cleaner Production*, 367(132980), 132980. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2022.132980>
- Desta, M. B. (2013). Batch Sorption Experiments: Langmuir and Freundlich Isotherm Studies for the Adsorption of Textile Metal Ions onto Teff Straw (*Eragrostis tef*)

- Agricultural Waste. *Journal of Thermodynamics*, 2013, 1–6.
<https://doi.org/10.1155/2013/375830>
- Duarte, L. D. C., Juchem, P. L., Pulz, G. M., De Brum, T. M. M., Chodur, N., Liccardo, A., Fischer, A. C., & Acauan, R. B. (2003). Aplicações de Microscopia Eletrônica de Varredura (MEV) e Sistema de Energia Dispersiva (EDS) no Estudo de Gemas: exemplos brasileiros. *Pesquisas Em Geociências*, 30(2), 3.
<https://doi.org/10.22456/1807-9806.19585>
- Dulsat-Masvidal, M., Ciudad, C., Infante, O., Mateo, R., & Lacorte, S. (2023). Water pollution threats in important bird and biodiversity areas from Spain. *Journal of Hazardous Materials*, 448(130938), 130938.
<https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2023.130938>
- Ferreira, R. C., Oliveira, T. F. V. De, Couto Junior, O. M., Barros, M. A. S. D. De, & Carvalho, K. Q. De. (2015). Mecanismo de adsorção de paracetamol em carvões de origem nacional. *Anais Do XX Congresso Brasileiro de Engenharia Química*, 15469–15476. <https://doi.org/10.5151/chemeng-cobeq2014-1099-20993-166466>
- Flores Haqquehua, F. de M. (2021). Determinación de contaminantes orgánicos emergentes en ecosistemas alto andinos en la Reserva Nacional de Salinas y Aguada Blanca, Arequipa - Perú. Universidad Nacional de San Agustín de Arequipa. Recuperado de: <https://dialnet.unirioja.es/servlet/tesis?codigo=346462>
- Galán, J., Rodríguez, A., Gómez, J. M., Allen, S. J., & Walker, G. M. (2013). Reactive dye adsorption onto a novel mesoporous carbon. *Chemical Engineering Journal*, 219, 62–68. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2012.12.073>
- Gaidhani, P. M., Chakraborty, S., Ramesh, K., Velayudhaperumal Chellam, P., & van Hullebusch, E. D. (2024). Molecular interactions of paraben family of pollutants with embryonic neuronal proteins of Danio rerio: A step ahead in computational toxicity towards adverse outcome pathway. *Chemosphere*, 351, 141155.
<https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2024.141155>
- Gibot, P., Schnell, F., Schaefer, M., & Spitzer, D. (2019). Nanostructuring of carbon materials by means of a calcium phosphate template. *Journal of Porous Materials*, 26(3), 747–754. <https://doi.org/10.1007/s10934-018-0672-6>
- Giles, C. H., MacEwan, T. H., Nakhwa, S. N., & Smith, D. (1960). Studies in adsorption. Part XI. A system of classification of solution adsorption isotherms, and its use in diagnosis of adsorption mechanisms and in measurement of specific surface areas of solids. *Journal of the Chemical Society (Resumed)*, 3973.

<https://doi.org/10.1039/jr9600003973>

- Giles, CH, D'Silva, AP, y Easton, IA (1974). Tratamiento general y clasificación de la isoterma de adsorción de solutos, parte II. Interpretación experimental. *Journal of Colloid and Interface Science*, 47 (3), 766–778. [https://doi.org/10.1016/0021-9797\(74\)90253-7](https://doi.org/10.1016/0021-9797(74)90253-7)
- Grassi, M., Kaykioglu, G., Belgiorno, V., & Lofrano, G. (2012). Removal of Emerging Contaminants. *Water and Wastewater by Adsorption Process* (pp. 15–37). https://doi.org/10.1007/978-94-007-3916-1_2
- Gong, R., Chen, H., Rao, X., Chi, J., Zhang, Z., Xu, G., Chen, D., Zhou, Q., & Lu, P. (2024). Synthesis of Mn/Cu co-doping mesoporous carbon by template method for gas phase mercury removal. *Fuel*, 364, 131127. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2024.131127>
- Guo, X., & Wang, J. (2024). A novel monolayer adsorption kinetic model based on adsorbates “infect” adsorbents inspired by epidemiological model. *Water Research*, 253, 121313. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2024.121313>
- C. Haman, X. Dauchy, C. Rosin, J.F. Munoz, Occurrence, fate and behavior of parabens in aquatic environments. *Water Res.* 68 (2015) 1–11. <https://doi.org/10.1016/J.WATRES.2014.09.030>.
- He, G., Zhang, J., Zhang, Y., Chen, H., & Wang, X. (2013). Fast and Efficient Removal of Cationic Dye Using Graphite Oxide, Adsorption, and Kinetics Studies. *Journal of Dispersion Science and Technology*, 34(9), 1223–1229. <https://doi.org/10.1080/01932691.2012.739946>
- Helfferich, F. G. (1985). Principles of adsorption & adsorption processes, by D. M. Ruthven, John Wiley & Sons, 1984, xxiv + 433 pp. *AIChE Journal*, 31(3), 523–524. <https://doi.org/10.1002/aic.690310335>
- Huang, S., Qi, Z., Liu, H., Long, C., Fang, L., Tan, L., & Yu, Y. (2024). A large-scale survey of urinary parabens and triclocarban in the Chinese population as well as the influencing factors and health risks. *Science of The Total Environment*, 926, 171799. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2024.171799>
- Hubetska, T., Kobylinska, N., & García, J. R. (2020). Efficient adsorption of pharmaceutical drugs from aqueous solution using a mesoporous activated carbon. *Adsorption*, 26(2), 251–266. <https://doi.org/10.1007/s10450-019-00143-0>
- Jedynak, K., Szczepanik, B., Rędzia, N., Słomkiewicz, P., Kolbus, A., & Rogala, P. (2019). Ordered Mesoporous Carbons for Adsorption of Paracetamol and Non-

- Steroidal Anti-Inflammatory Drugs: Ibuprofen and Naproxen from Aqueous Solutions. *Water*, *11*(5), 1099. <https://doi.org/10.3390/w11051099>
- Jin, Y., Du, Q., Li, Y., Zhang, Y., Chen, B., Wang, M., Chen, K., Sun, Y., Zhao, S., & Jing, Z. (2022). Removal of methylene blue by crosslinked egg white protein/graphene oxide bionanocomposite aerogels. *Nanomaterials (Basel, Switzerland)*, *12*(15), 2659. <https://doi.org/10.3390/nano12152659>
- Khan, S. A., Jain, M., Pant, K. K., Ziora, Z. M., & Blaskovich, M. A. T. (2024). Photocatalytic degradation of parabens: A comprehensive meta-analysis investigating the environmental remediation potential of emerging pollutant. *Science of The Total Environment*, *920*, 171020. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2024.171020>
- Kim, M., & Zoh, K. (2016). Occurrence and removals of micropollutants in water environment. *Environmental Engineering Research*, *21*(4), 319–332. <https://doi.org/10.4491/eer.2016.115>
- Kumar, R., Vuppaladadiyam, A. K., Antunes, E., Whelan, A., Fearon, R., Sheehan, M., & Reeves, L. (2022). Emerging contaminants in biosolids: Presence, fate and analytical techniques. *Emerging Contaminants*, *8*, 162–194. <https://doi.org/10.1016/j.emcon.2022.03.004>
- Leo-Martos, E., Aranda-Merino, N., Sanchez-Ruiz, R., María Moreno, I., Fernández-Torres, R., & Ramos-Payán, M. (2024). Electro-assisted liquid phase microextraction for the determination of parabens and their main metabolites in maternal urine and amniotic fluid samples. *Microchemical Journal*, *200*, 110321. <https://doi.org/10.1016/j.microc.2024.110321>
- Lv, Y., Cheng, K., Gao, J., Sun, W., Luo, Q., Li, Y., Deng, Z., Lai, R., Wu, W., Dai, Z., & Ma, F. (2024). Corrosion resistance of Nb and NbTi alloy predicted by hydrogen evolution reaction models modified with Langmuir isotherm adsorption theory. *Materials Chemistry and Physics*, *319*, 129386. <https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2024.129386>
- Madhu, A., & Srinatha, N. (2020). Structural and spectroscopic studies on the concentration dependent erbium doped lithium bismuth boro tellurite glasses for optical fiber applications. *Infrared Physics & Technology*, *107*(103300), 103300. <https://doi.org/10.1016/j.infrared.2020.103300>
- Mao, W., Jin, H., Guo, R., Chen, P., Zhong, S., & Wu, X. (2024). Distribution of parabens and 4-HB in human blood. *Science of The Total Environment*, *914*, 169874.

<https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2024.169874>

- Marcos-Hernández, M., Arrieta, R. A., Ventura, K., Hernández, J., Powell, C. D., Atkinson, A. J., Markovski, J. S., Gardea-Torresdey, J., Hristovski, K. D., Westerhoff, P., Wong, M. S., & Villagrán, D. (2021). Superparamagnetic nanoadsorbents for the removal of trace As(III) in drinking water. *Environmental Advances*, 4, 100046. <https://doi.org/10.1016/j.envadv.2021.100046>
- Moorchilot, V. S., P, A., Aravind, U. K., & Aravindakumar, C. T. (2024). Human exposure to methyl and butyl parabens and their transformation products in settled dust collected from urban, semi-urban, rural, and tribal settlements in a tropical environment. *Environmental Research*, 242, 117805. <https://doi.org/10.1016/j.envres.2023.117805>
- Moreno-Marengo, A. R., Giraldo, L., & Moreno-Piraján, J. C. (2019). Parabens Adsorption onto Activated Carbon: Relation with Chemical and Structural Properties. *Molecules*, 24(23), 4313. <https://doi.org/10.3390/molecules24234313>
- Movasaghi, Z., Rehman, S., & ur Rehman, Dr. I. (2008). Fourier Transform Infrared (FTIR) Spectroscopy of Biological Tissues. *Applied Spectroscopy Reviews*, 43(2), 134–179. <https://doi.org/10.1080/05704920701829043>
- Mpupa, A., Nqombolo, A., Mizaikoff, B. y Nomngongo, PN (2020). Eliminación adsortiva mejorada de β -estradiol de muestras acuosas y de aguas residuales mediante nanoakaganeíta magnética: Isotermas de adsorción, cinética y mecanismo. *Processes (Basilea, Suiza)*, 8 (9), 1197. <https://doi.org/10.3390/pr8091197>
- Muliwa, A. M., Oyewo, O. A., & Maity, A. (2023). Recent progress on the removal of aqueous mercury by carbon-based adsorbents: A review. *Inorganic Chemistry Communications*, 156(111207), 111207. <https://doi.org/10.1016/j.inoche.2023.111207>
- Neves, T. de F., Lopes, C. B., Mastelaro, V. R., Dantas, R. F., Silva, C. M., & Prediger, P. (2024). Toxic metals removal by new membranes based on graphene oxide and a cationic Polymer: Influence of chemical and morphological aspects. *Chemical Engineering Journal (Lausanne, Switzerland: 1996)*, 498(155496), 155496. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2024.155496>
- ONU. (2015). Objetivos y metas de desarrollo sostenible. Desarrollo Sostenible. Recuperado de: <https://www.un.org/sustainabledevelopment/es/objetivos-de-desarrollo-sostenible/>
- Paixão, G. R., Camparotto, N. G., Brião, G. de V., Oliveira, R. de L., Colmenares, J. C.,

- Prediger, P., & Vieira, M. G. A. (2022). Synthesis of mesoporous P doped carbon and its application in propranolol drug removal: Characterization, kinetics and isothermal studies. *Chemical Engineering Research and Design*, *187*, 225–239. <https://doi.org/10.1016/j.cherd.2022.09.009>
- Pereira, A. R., Simões, M., & Gomes, I. B. (2023). Parabens as environmental contaminants of aquatic systems affecting water quality and microbial dynamics. *Science of The Total Environment*, *905*, 167332. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2023.167332>
- Pinheiro, M. F., Rodrigues, G. S., Lafetá Junior, J. A. de Q., Sousa, R. de C. S., & Costa, A. R. (2020). Análise da capacidade de adsorção do carvão da palha do café arábica utilizando o corante azul de metileno. *Brazilian Journal of Development*, *6(1)*, 2861–2868. <https://doi.org/10.34117/bjdv6n1-205>
- Ramos, M. (2022). Estudio de la dinámica ambiental y efectos ecotoxicológicos de parabenos. Encuentro de Becarías de Posgrado de la UNLP. Recuperado de: <https://sedici.unlp.edu.ar/handle/10915/145713>
- Raya, S. A., Mohd Saaid, I., Abbas Ahmed, A., & Abubakar Umar, A. (2020). A critical review of development and demulsification mechanisms of crude oil emulsion in the petroleum industry. *Journal of Petroleum Exploration and Production Technology*, *10(4)*, 1711–1728. <https://doi.org/10.1007/s13202-020-00830-7>
- Samarghandi, M. R., Poormohammadi, A., Shanesaz, S., & Godini, K. (2017). Comparison Between the Performance of Activated Carbon and Graphene in Removal of Reactive Red 198. Avicenna. *Journal of Environmental Health Engineering*, *4(1)*, 6021–6021. <https://doi.org/10.5812/ajehe.6021>
- Santos, D. H. S., Queiroz, L. F., Silva Neto, L. D., Santos, K. E., das Neves, D. D. C. S., Silva, A. F., Fonseca, E. J. S., Fernandes, D. P., & Meili, L. (2024). Construction and demolition waste as a low-cost adsorbent for water treatment: kinetics, isotherm, thermodynamics, and Fenton regeneration. *Environmental Science and Pollution Research International*, *31(54)*, 62889–62907. <https://doi.org/10.1007/s11356-024-35393-1>
- Silva, R. F. da. (2020). A Difração de Raios X: uma Técnica de Investigação da Estrutura Cristalina de Materiais. *Revista Processos Químicos*, *14(27)*, 73–82. <https://doi.org/10.19142/rpq.v14i27.577>
- Silva, R. R. M. da, Oliveira, T. T. F. De, & Franca, A. B. (2017). Estudo de equilíbrio e modelagem cinética da adsorção do corante cristal violeta sobre carvão de campim-

- elefante. *Blucher Chemical Engineering Proceedings*, 2011–2016. <https://doi.org/10.5151/chemeng-cobeqic2017-353>
- Singh, E., Osmani, R. A. M., & Banerjee, R. (2021). Nanomembranes for ultrapurification and water treatment. *In Membrane-Based Hybrid Processes for Wastewater Treatment (pp. 657–691)*. Elsevier Inc. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-823804-2.00007-0>
- Stevens, S. A., Krebs, G. L., Scrivener, C. J., Noble, G. K., Blake, B. L., Dods, K. C., May, C. D., Tai, Z. X., Clayton, E. H., Lynch, E. E., & Johnson, K. N. (2022). Nutrient digestibility, rumen parameters, and residues in sheep fed a pelleted diet containing green hemp (*Cannabis sativa L.*) biomass. *Translational Animal Science*, 6(4). <https://doi.org/10.1093/tas/txac141>
- Subramanian, N., & Viswanathan, B. (2015). Nitrogen- and oxygen-containing activated carbons from sucrose for electrochemical supercapacitor applications. *RSC Advances*, 5(77), 63000–63011. <https://doi.org/10.1039/C5RA06661A>
- Tachachartvanich, P., Sangsuwan, R., Navasumrit, P., & Ruchirawat, M. (2024). Assessment of immunomodulatory effects of five commonly used parabens on human THP-1 derived macrophages: Implications for ecological and human health impacts. *Science of The Total Environment*, 173823. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2024.173823>
- Tang, M., Xu, W., Zhang, C., Shao, D., Zhou, H., & Li, Y. (2022). Risk assessment of sectional water quality based on deterioration rate of water quality indicators: A case study of the main canal of the Middle Route of South-to-North Water Diversion Project. *Ecological Indicators*, 135, 108592. <https://doi.org/10.1016/j.ecolind.2022.108592>
- Teixeira, V. G., Coutinho, F. M. B., & Gomes, A. S. (2001). Principais métodos de caracterização da porosidade de resinas à base de divinilbenzeno. *Química Nova*, 24(6). <https://doi.org/10.1590/S0100-40422001000600019>
- Tkaczyk, A., Mitrowska, K., & Posyniak, A. (2020). Synthetic organic dyes as contaminants of the aquatic environment and their implications for ecosystems: A review. *Science of The Total Environment*, 717, 137222. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2020.137222>
- Tung, C.-J., Chen, M.-H., Lin, C.-C., & Chen, P.-C. (2024). Association between parabens exposure and neurodevelopment in children. *Environment International*, 188, 108671. <https://doi.org/10.1016/j.envint.2024.108671>

- Vale, F., Sousa, C. A., Sousa, H., Santos, L., & Simões, M. (2022). Parabens as emerging contaminants: Environmental persistence, current practices and treatment processes. *In Journal of Cleaner Production (Vol. 347)*. Elsevier Ltd. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2022.131244>
- Verma, R., Singhbabu, Y. N., Didwal, P. N., Nguyen, A., Kim, J., & Park, C. (2020). Biowaste Orange Peel-Derived Mesoporous Carbon as a Cost-Effective Anode Material with Ultra-Stable Cyclability for Potassium-Ion Batteries. *Batteries & Supercaps*, 3(10), 1099–1111. <https://doi.org/10.1002/batt.202000068>
- Wang, D.-W., Li, F., Chen, Z.-G., Lu, G. Q., & Cheng, H.-M. (2008). Synthesis and Electrochemical Property of Boron-Doped Mesoporous Carbon in Supercapacitor. *Chemistry of Materials*, 20(22), 7195–7200. <https://doi.org/10.1021/cm801729y>
- Wang, X., Li, Y., Yu, H., Yang, F., Tang, C. Y., Quan, X., & Dong, Y. (2020). High-flux robust ceramic membranes functionally decorated with nano-catalyst for emerging micro-pollutant removal from water. *Journal of Membrane Science*, 611, 118281. <https://doi.org/10.1016/j.memsci.2020.118281>
- Wu, M. C., Zhang, R. H., Liu, K., Sun, J., Chan, K. Y., & Zhao, T. S. (2019). Mesoporous carbon derived from pomelo peel as a high-performance electrode material for zinc-bromine flow batteries. *Journal of Power Sources*, 442, 227255. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2019.227255>
- Yang, P., Zhang, S., Xia, J., Chen, Y., Zhang, Y., Cai, W., Wang, W., Wang, H., Luo, X., & Chen, X. (2022). Risk assessment of water resource shortages in the Aksu River basin of northwest China under climate change. *Journal of Environmental Management*, 305, 114394. <https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2021.114394>
- Yi, M., Sheng, Q., Sui, Q., & Lu, H. (2020). β -blockers in the environment: Distribution, transformation, and ecotoxicity. *Environmental Pollution*, 266(115269), 115269. <https://doi.org/10.1016/j.envpol.2020.115269>
- Zhang, W., Ran, M., Wang, Y., Feng, Q., Zhang, B., Wu, X., Shen, Y., & Du, X. (2023). One-pot synthesis of magnetic N-doped mesoporous carbons as an efficient adsorbent for Ag(I) removal. *Materials Chemistry and Physics*, 305, 127846. <https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2023.127846>
- Zheng, X., Zhou, Y., Liu, X., Fu, X., Peng, H., & Lv, S. (2020). Enhanced adsorption capacity of MgO/N-doped active carbon derived from sugarcane bagasse. *Bioresource Technology*, 297, 122413. <https://doi.org/10.1016/j.biortech.2019.122413>

Zhou, R., Tong, H., Xu, Q., Zhang, R., & Hao, G. (2024). Electronic and optical properties of Zr₂CO₂/WS₂ van der Waals heterostructures: First-principles study. *Micro and Nanostructures*, 192, 207880. <https://doi.org/10.1016/j.micrna.2024.207880>

ANEXOS

Anexo 1. Matriz de consistencia

PROBLEMA GENERAL	OBJETIVO GENERAL	HIPÓTESIS GENERAL	VARIABLES	METODOLOGÍA
<p>¿Cuál es la efectividad de los carbonos mesoporosos dopados con boro (B-MPC) en la eliminación de conservantes del agua?</p> <p>Problemas Específicos</p> <p>¿Cuál es la influencia de la sacarosa para sintetizar B.MPC?</p> <p>¿Cuál es la estructura morfológica, composición química y carga superficial de los B-MPC, utilizando técnicas de microscopía electrónica de barrido (SEM), Transformación Infrarroja de Fourier (FTIR), potencial Zeta y espectroscopia fotoelectrónica de rayos X (XPS)?</p> <p>¿Cuál es la influencia del tiempo de contacto, pH, concentración y temperatura de contaminantes y adsorbentes en el proceso de adsorción discontinua de los B-</p>	<p>Evaluar los carbonos mesoporosos dopados con Boro (B-MPC) para la remoción de conservantes en aguas contaminadas.</p> <p>Objetivos Específicos</p> <p>Sintetizar B-MPC a partir de la sacarosa.</p> <p>Caracterizar el B-MPC mediante microscopía electrónica de barrido (SEM), Transformación Infrarroja de Fourier (FTIR), potencial Zeta y espectroscopia fotoelectrónica (XPS).</p> <p>Realizar ensayos de adsorción variando: tiempo de contacto, pH, concentración y temperatura de contaminantes y adsorbentes.</p>	<p>Los carbonos mesoporosos dopados con boro removerán significativamente conservantes del agua.</p>	<p>a) Variables independientes:</p> <ul style="list-style-type: none"> - Dosis de los B-MPC - pH del contaminante - Tiempo de contacto - Temperatura del contaminante - Concentración de contaminante <p>Dimensiones:</p> <ul style="list-style-type: none"> - Dosis de adsorbente - Concentración de pH - Tiempo de contacto - Temperatura del contaminante - Concentración de contaminante <p>Indicadores</p> <p>1 mg 2 mg 3 mg 4 mg</p> <p>pH: 2,4,6,8,10,12</p> <p>2,5,10,20,30,45,60,90,120,150,</p>	<p>a) Tipo, nivel y diseño de investigación</p> <p>Tipo</p> <p>Experimental -Aplicada de investigación</p> <p>Nivel de investigación</p> <p>Cuantitativo – descriptivo</p> <p>Diseño de investigación</p> <p>Diseño experimental unifactorial</p> <p>b) Población y muestra</p> <p>Población</p> <p>Agua contaminada con conservantes Propilparabeno y metilparabeno.</p> <p>Muestra</p> <p>450ml de agua contaminada con Metilparabeno.</p> <p>450ml de agua contaminada con Propilparabeno.</p> <p>c) Técnicas e instrumentos de recolección de datos.</p> <p>Microscopía electrónica de barrido (SEM):</p> <p>Permite observar la morfología y la estructura superficial</p> <p>Transformación Infrarroja de Fourier (FTIR):</p> <p>Estudiar la estructura molecular y composición de las muestras.</p> <p>Potencial Zeta: caracteriza la estabilidad de las dispersiones coloidales y la interacción entre partículas en suspensión</p> <p>Espectroscopia fotoelectrónica (XPS):</p>

<p>MPC?</p> <p>¿Cuál es la cinética de adsorción, las isothermas de adsorción y los parámetros termodinámicos relevantes en los procesos de adsorción de conservantes del agua utilizando los B-MPC?</p> <p>¿Cuál es la efectividad de B-MPC en la remoción de conservantes en aguas contaminadas?</p>	<p>Estudiar la cinética, isothermas y parámetros termodinámicos implicados en los procesos de adsorción</p> <p>Evaluar la efectividad de B-MPC en la remoción de conservantes en aguas contaminadas.</p>		<p>180,210 minutos</p> <p>25,35 y 45°C</p> <p>5,10,20,30,40,50,60,80,100 mg.L⁻¹</p> <p>b) Variables dependientes</p> <ul style="list-style-type: none"> - remoción de Propilparabeno - remoción de metilparabeno. <p>Dimensiones: Miligramos por gramo de remoción</p> <p>Indicadores mg g⁻¹</p>	<p>Caracteriza la composición elemental y la estructura química superficial de muestras sólidas.</p> <p>Espectrofotometría UV-visible</p> <p>d) Análisis de datos</p> <p>Excel: Recopilación y análisis de datos.</p> <p>R-studio: Análisis de datos</p> <p>Origin: Programa para hacer gráficos estadísticos. Brinda un análisis estadístico avanzado de datos.</p> <p>Avogadro: Editor y visualizador de moléculas avanzado diseñado para uso multiplataforma en química computacional.</p> <p>Gaussian: Calcula propiedades de sistemas moleculares y periódicos que ejecutan una variedad de cálculos de estructura electrónica. Es decir, estudia la teoría del funcional de la densidad (DFT).</p>
--	--	--	---	---

Anexo 2: Datos experimentales de los ensayos de adsorción de metilparabeno y propilparabeno

PP	
Abs	0.0665
[] (25x)	10.70294

PP Filtrado	
Abs	0.0397
[] (25x)	5.381255

1 mg
2 mg
3 mg
4 mg

B-MPC						
Abs	Dil	Massa (g)	[]	Qe	% de remoção	
0.0150	25	0.00100	0.46995	24.5565	91.2669	
0.0006	25	0.00200	-2.38284	19.4102	144.2804	
-0.0021	25	0.00300	-2.91898	13.8337	154.2435	
-0.0034	25	0.00400	-3.17712	10.6980	159.0406	
0.00	25	0.00250	-2.00	17.12	137.21	

2.573140058

MP	
Abs	0.0787
[] (25x)	11.68858

MP filtrado	
Abs	0.0768
[] (25x)	11.29827

1 mg
2 mg
3 mg
4 mg

B-MPC						
Abs	Dil	Massa (g)	[]	Qe	% de remoção	
0.034933	25	0.00100	2.697891	44.9534	76.9186	
0.0096	25	0.00200	-2.50616	35.4869	121.4411	
0.0034	25	0.00300	-3.77979	25.7806	132.3374	
0.0083	25	0.00400	-2.77321	18.0772	123.7258	
0.01	25	0.00250	-1.59	31.07	113.61	

10.11247

B-MPC						
Abs	Dil	Massa (g)	[]	Qe	% de remoção	
0.034933	25	0.00100	2.697891	44.9534	76.9186	
0.0082	25	0.00200	-2.79376	72.4117	123.9016	
-0.0015	25	0.00300	-4.78636	82.3747	140.9490	
0.0045	25	0.00400	-3.55382	76.2120	130.4042	
0.01	25	0.00250	-2.11	68.99	118.04	

14.32455

PP			Propil					
Abs			Abs	Dil	Massa (g)	[]	Qe	% de remoção
0.1302		pH 2	0.0616	25	0.00100	9.72994	9.7299	16.6667
[] (25x) 11.6759		pH 4	0.0589	25	0.00100	9.1938	11.7156	20.3098
		pH 6	0.0500	25	0.00100	7.42653	17.8217	32.4300
		pH 8	0.0445	25	0.00100	6.33439	23.9774	43.0865
		pH 10	0.0489	25	0.00100	7.2081	22.7859	38.7342
		pH 12	0.0541	25	0.00100	8.24067	15.9849	27.9514
PP Filtrado								
Abs	0.0397							
[] (25x)	5.38125							
PP pH4								
Abs	0.1288							
[] (25x)	11.5369							
PP pH6								
Abs	0.1233							
[] (25x)	10.9909							
PP pH8								
Abs	0.1247							
[] (25x)	11.1299							
PP pH10								
Abs	0.1311							
[] (25x)	11.7653							
MP -pH2			Metil					
Abs			Abs	Dil	Massa (g)	[]	Qe	% de remoção
0.0782		pH 2	0.043	25	0.00100	4.35497	36.1545	62.4113
[] (25x) 11.5859		pH 4	0.0478	25	0.00100	5.341	30.5053	53.3214
		pH 6	0.0258	25	0.00100	0.82169	51.5612	92.6199
		pH 8	0.0322	25	0.00100	2.1364	40.4684	79.1165
		pH 10	0.0347	25	0.00100	2.64996	32.8677	71.2695
		pH 12	0.0589	25	0.00100	7.6212	7.6007	16.6292
MP filtrado								
Abs	0.0768							
[] (25x)	11.2983							
MP pH4								
Abs	0.0775							
[] (25x)	11.4421							
MP pH6								
Abs	0.076							
[] (25x)	11.1339							
MP pH8								
Abs	0.0716							
[] (25x)	10.2301							
MP pH10								
Abs	0.0667							
[] (25x)	9.2235							

PP	
Abs	0.1317
[] (25x)	23.64972

PP Filtrado	
Abs	0.0879
[] (25x)	14.95234

Propil							
Tempo	Abs	Dil	Massa (g)	[]	Qe	% de remoção	
2	0.0726	25	0.00100	11.91422	15.1906	20.3187	
5	0.0541	25	0.00100	8.240667	33.5584	44.8871	
10	0.0643	25	0.00100	10.26608	23.4313	31.3413	
20	0.0575	25	0.00100	8.915806	30.1827	40.3718	
30	0.0417	25	0.00100	5.778396	45.8697	61.3546	
45	0.0493	25	0.00100	7.28753	38.3241	51.2616	
60	0.0360	25	0.00100	4.646545	51.5290	68.9243	
90	0.0281	25	0.00100	3.07784	59.3725	79.4157	
120	0.0347	25	0.00100	4.388403	52.8197	70.6507	
150	0.0299	25	0.00100	3.435266	57.5854	77.0252	
180	0.0237	25	0.00100	2.20413	63.7411	85.2590	
210	0.0256	25	0.00100	2.581414	61.8546	82.7357	

PP	
Abs	0.1684
[] (25x)	30.93725

PP Filtrado	
Abs	0.1373
[] (25x)	24.76172

Propil							
Tempo	Abs	Dil	Massa (g)	[]	Qe	% de remoção	
2	0.1023	25	0.00100	17.81176	34.7498	28.0674	
5	0.0925	25	0.00100	15.86577	44.4797	35.9262	
10	0.0944	25	0.00100	16.24305	42.5933	34.4026	
20	0.0722	25	0.00100	11.83479	64.6346	52.2053	
30	0.0752	25	0.00100	12.4305	61.6561	49.7995	
45	0.0858	25	0.00100	14.53535	51.1319	41.2991	
60	0.0926	25	0.00100	15.88562	44.3805	35.8460	
90	0.0917	25	0.00100	15.70691	45.2740	36.5678	
120	0.0829	25	0.00100	13.95949	54.0111	43.6247	
150	0.0731	25	0.00100	12.0135	63.7411	51.4836	
180	0.0727	25	0.00100	11.93407	64.1382	51.8043	
210	0.0745	25	0.00100	12.2915	62.3511	50.3609	

PP	
Abs	0.2251
[] (25x)	42.19619

PP Filtrado	
Abs	0.1769
[] (25x)	32.6251

Propil							
Tempo	Abs	Dil	Massa (g)	[]	Qe	% de remoção	
2	0.1216	25	0.00100	21.64416	54.9047	33.6579	
5	0.1049	25	0.00100	18.32804	71.4853	43.8223	
10	0.0883	25	0.00100	15.03177	87.9666	53.9257	
20	0.1057	25	0.00100	18.48689	70.6910	43.3354	
30	0.0705	25	0.00100	11.49722	105.6394	64.7596	
45	0.0961	25	0.00100	16.58062	80.2224	49.1783	
60	0.0777	25	0.00100	12.92693	98.4909	60.3774	
90	0.0645	25	0.00100	10.3058	111.5965	68.4114	
120	0.1155	25	0.00100	20.43288	60.9611	37.3707	
150	0.0953	25	0.00100	16.42176	81.0167	49.6652	
180	0.0861	25	0.00100	14.59492	90.1509	55.2648	
210	0.0768	25	0.00100	12.74821	99.3844	60.9251	

PP 5	
Abs	0.049
[] (25x)	7.22796

PP Filtrado	
Abs	0.0386
[] (25x)	5.16283

PP 10	
Abs	0.1317
[] (25x)	23.6497

PP Filtrado	
Abs	0.0879
[] (25x)	14.9523

PP 20	
Abs	0.1684
[] (25x)	30.9373

PP Filtrado	
Abs	0.1237
[] (25x)	22.0612

PP 30	
Abs	0.2251
[] (25x)	42.1962

PP Filtrado	
Abs	0.1769
[] (25x)	32.6251

Propil 25° C						
[]	Abs	Dil	Massa (g)	[]	Qe	% de remoção
5	0.0213	25	0.00100	1.72756	17.1763	66.5385
10	0.0281	25	0.00100	3.07784	59.3725	79.4157
20	0.0917	25	0.00100	15.7069	31.7712	28.8029
30	0.0645	25	0.00100	10.3058	111.5965	68.4114

PP 5	
Abs	0.049
[] (25x)	7.22796

PP Filtrado	
Abs	0.0386
[] (25x)	5.16283

PP 10	
Abs	0.1317
[] (25x)	23.6497

PP Filtrado	
Abs	0.0879
[] (25x)	14.9523

PP 20	
Abs	0.1684
[] (25x)	30.9373

PP Filtrado	
Abs	0.1237
[] (25x)	22.0612

PP 30	
Abs	0.2251
[] (25x)	42.1962

PP Filtrado	
Abs	0.1769
[] (25x)	32.6251

Propil 35						
[]	Abs	Dil	Massa (g)	[]	Qe	% de remoção
5	0.0785	-	0.00100	0.52343	23.1970	89.8615
10	0.0274	25	0.00100	2.93884	60.0675	80.3453
20	0.0313	25	0.00100	3.71326	91.7395	83.1683
30	0.0756	25	0.00100	12.5099	#####	61.6555

PP 5	
Abs	0.049
[] (25x)	7.22796

PP Filtrado	
Abs	0.0386
[] (25x)	5.16283

PP 10	
Abs	0.1317
[] (25x)	23.6497

PP Filtrado	
Abs	0.0879
[] (25x)	14.9523

PP 20	
Abs	0.1684
[] (25x)	30.9373

PP Filtrado	
Abs	0.1237
[] (25x)	22.0612

PP 30	
Abs	0.2251
[] (25x)	42.1962

PP Filtrado	
Abs	0.1769
[] (25x)	32.6251

Propil 45						
[]	Abs	Dil	Massa (g)	[]	Qe	% de remoção
5	0.0663	-	0.00100	0.42653	23.6815	91.7385
10	0.0220	25	0.00100	1.86656	65.4289	87.5166
20	0.0485	25	0.00100	7.12867	74.6624	67.6868
30	0.0999	25	0.00100	17.3352	76.4496	46.8655

PP 5	
Abs	0.049
[] (25x)	7.22796

PP Filtrado	
Abs	0.0386
[] (25x)	5.16283

PP 10	
Abs	0.1317
[] (25x)	23.6497

PP Filtrado	
Abs	0.0879
[] (25x)	14.9523

PP 20	
Abs	0.1684
[] (25x)	30.9373

PP Filtrado	
Abs	0.1237
[] (25x)	22.0612

PP 30	
Abs	0.2251
[] (25x)	42.1962

Propil 25° C						
[]	Abs	Dil	Massa (g)	[]	Qe	% de remoção
5	0.0213	25	0.00100	1.72756	17.1763	66.5385
10	0.0281	25	0.00100	3.07784	59.3725	79.4157
20	0.0917	25	0.00100	15.7069	31.7712	28.8029
30	0.0645	25	0.00100	10.3058	111.5965	68.4114
40	0.2970	25	0.00100	56.4734	28.3956	9.1374
50	0.1845	25	0.00100	34.1342	200.3574	54.0005
60	0.2992	25	0.00100	56.9102	54.7061	16.1253
80	0.3960	25	0.00100	76.1319	58.7768	13.3755
100	0.4108	25	0.00100	79.0707	134.4321	25.3748

PP Filtrado	
Abs	0.1769
[] (25x)	32.6251

PP 40	
Abs	0.3464
[] (25x)	66.2828

PP Filtrado	
Abs	0.3256
[] (25x)	62.1525

PP 50	
Abs	0.3817
[] (25x)	73.2923

PP Filtrado	
Abs	0.3863
[] (25x)	74.2057

PP 60	
Abs	0.4341
[] (25x)	83.6974

PP Filtrado	
Abs	0.3543
[] (25x)	67.8515

PP 80	
Abs	0.5564
[] (25x)	107.983

PP Filtrado	
Abs	0.4552
[] (25x)	87.8872

PP 100	
Abs	0.7438
[] (25x)	145.195

PP Filtrado	
Abs	0.5462
[] (25x)	105.957

PP	
Abs	0.0911
[] (25x)	14.23583

10 PPM

PP Filtrado	
Abs	0.0943
[] (25x)	14.89318

Metil						
Tempo	Abs	Dil	Massa (g)	[]	Qe	% de remoção
2	0.0544	25	0.00100	6.696795	40.9819	55.0345
5	0.0755	25	0.00100	11.03122	19.3098	25.9310
10	0.0515	25	0.00100	6.101068	43.9606	59.0345
20	0.0436	25	0.00100	4.478225	52.0748	69.9310
30	0.0489	25	0.00100	5.566968	46.6311	62.6207
45	0.0472	25	0.00100	5.217749	48.3772	64.9655
60	0.0360	25	0.00100	2.917009	59.8809	80.4138
90	0.0493	25	0.00100	5.649137	46.2202	62.0690
120	0.0384	25	0.00100	3.410025	57.4158	77.1034
150	0.0402	25	0.00100	3.779786	55.5670	74.6207
180	0.0464	25	0.00100	5.05341	49.1988	66.0690
210	0.0350	25	0.00100	2.711586	60.9080	81.7931

PP		20 PPM	Metil						
Abs	[] (25x)		Tempo	Abs	Dil	Massa (g)	[]	Qe	% de remoção
0.178	32.0871		2	0.1329	25	0.00100	22.82251	3.4922	2.9694
			5	0.0988	25	0.00100	15.81758	38.5168	32.7511
			10	0.1061	25	0.00100	17.31717	31.0189	26.3755
			20	0.0862	25	0.00100	13.22925	51.4585	43.7555
			30	0.1088	25	0.00100	17.87182	28.2457	24.0175
			45	0.0781	25	0.00100	11.56532	59.7781	50.8297
			60	0.0962	25	0.00100	15.28348	41.1873	35.0218
			90	0.1016	25	0.00100	16.39277	35.6409	30.3057
			120	0.0864	25	0.00100	13.27034	51.2531	43.5808
			150	0.0967	25	0.00100	15.3862	40.6738	34.5852
			180	0.0837	25	0.00100	12.71569	54.0263	45.9389
			210	0.0971	25	0.00100	15.46836	40.2629	34.2358

PP Filtrado	
Abs	0.1363
[] (25x)	23.52095

PP		30 PPM	Metil						
Abs	[] (25x)		Tempo	Abs	Dil	Massa (g)	[]	Qe	% de remoção
0.2353	43.85785		2	0.1377	25	0.00100	23.80855	43.3443	26.6920
			5	0.1724	25	0.00100	30.93673	7.7034	4.7438
			10	0.1337	25	0.00100	22.98685	47.4528	29.2220
			20	0.1408	25	0.00100	24.44536	40.1602	24.7312
			30	0.1174	25	0.00100	19.63846	64.1947	39.5319
			45	0.1213	25	0.00100	20.43961	60.1890	37.0651
			60	0.1517	25	0.00100	26.68447	28.9647	17.8368
			90	0.1367	25	0.00100	23.60312	44.3714	27.3245
			120	0.1168	25	0.00100	19.5152	64.8110	39.9114
			150	0.1457	25	0.00100	25.45193	35.1274	21.6319
			180	0.1161	25	0.00100	19.37141	65.5300	40.3542
			210	0.1131	25	0.00100	18.75514	68.6113	42.2517

PP Filtrado	
Abs	0.1799
[] (25x)	32.4774

PP 5		Metil 25° C							
Abs	[] (25x)	[]	Abs	Dil	Massa (g)	[]	Qe	% de remoção	
0.0653	8.93591		5	0.0213	25	0.00100	-0.1027	35.6409	101.4620
			10	0.0281	25	0.00100	1.29417	61.4215	90.4690
			20	0.0417	25	0.00100	4.08792	84.2235	80.4711
			30	0.0645	25	0.00100	8.77157	115.4478	72.4694

PP Filtrado	
Abs	0.056
[] (25x)	7.02547

PP 10	
Abs	0.1317
[] (25x)	22.576

PP Filtrado	
Abs	0.0879
[] (25x)	13.5785

PP 20	
Abs	0.1684
[] (25x)	30.115

PP Filtrado	
Abs	0.1237
[] (25x)	20.9326

PP 30	
Abs	0.2251
[] (25x)	41.7625

PP Filtrado	
Abs	0.1769
[] (25x)	31.8611

PP 5	
Abs	0.0653
[] (25x)	8.93591

PP Filtrado	
Abs	0.056
[] (25x)	7.02547

PP 10	
Abs	0.1317
[] (25x)	22.576

PP Filtrado	
Abs	0.0879
[] (25x)	13.5785

PP 20	
Abs	0.1684
[] (25x)	30.115

PP Filtrado	
Abs	0.1237
[] (25x)	20.9326

PP 30	
Abs	0.2251
[] (25x)	41.7625

PP Filtrado	
Abs	0.1769
[] (25x)	31.8611

Metil 35						
[]	Abs	Dil	Massa (g)	[]	Qe	% de remoção
5	0.0347	25	0.00100	2.64996	21.8776	62.2807
10	0.0328	25	0.00100	2.25965	56.5941	83.3585
20	0.0737	25	0.00100	10.6615	51.3558	49.0677
30	0.1216	25	0.00100	20.5012	56.7995	35.6544

PP 5	
Abs	0.0653
[] (25x)	8.93591

PP Filtrado	
Abs	0.056
[] (25x)	7.02547

PP 10	
Abs	0.1317
[] (25x)	22.576

PP Filtrado	
Abs	0.0879
[] (25x)	13.5785

PP 20	
Abs	0.1684
[] (25x)	30.115

PP Filtrado	
Abs	0.1237
[] (25x)	20.9326

PP 30	
Abs	0.2251
[] (25x)	41.7625

PP Filtrado	
Abs	0.1769
[] (25x)	31.8611

PP 5	
Abs	0.0653
[] (25x)	8.93591

PP Filtrado	
Abs	0.056
[] (25x)	7.02547

PP 10	
Abs	0.1317
[] (25x)	22.576

PP Filtrado	
Abs	0.0879
[] (25x)	13.5785

PP 20	
Abs	0.1684
[] (25x)	30.115

Metil 45						
[]	Abs	Dil	Massa (g)	[]	Qe	% de remoção
5	0.0468	25	0.00100	5.13558	9.4495	26.9006
10	0.0430	25	0.00100	4.35497	46.1175	67.9274
20	0.1128	25	0.00100	18.6935	11.1956	10.6968
30	0.1321	25	0.00100	22.6582	46.0148	28.8846

metil 25° C						
[]	Abs	Dil	Massa (g)	[]	Qe	% de remoção
5	0.0511	25	0.00100	6.0189	5.0329	14.3275
10	0.0281	25	0.00100	1.29417	61.4215	90.4690
20	0.0917	25	0.00100	14.3591	32.8677	31.4033
30	0.0645	25	0.00100	8.77157	115.4478	72.4694
40	0.1803	25	0.00100	32.5596	83.9154	34.0133
50	0.1635	25	0.00100	29.1085	100.7601	40.9091
60	0.2120	25	0.00100	39.0715	97.1652	33.2163
100	0.3705	25	0.00100	71.6311	116.4749	24.5401

PP Filtrado	
Abs	0.1237
[] (25x)	20.9326

PP 30	
Abs	0.2251
[] (25x)	41.7625

PP Filtrado	
Abs	0.1769
[] (25x)	31.8611

PP 40	
Abs	0.3041
[] (25x)	57.991

PP Filtrado	
Abs	0.262
[] (25x)	49.3426

PP 50	
Abs	0.3715
[] (25x)	71.8365

PP Filtrado	
Abs	0.2616
[] (25x)	49.2605

PP 60	
Abs	0.4113
[] (25x)	80.0123

PP Filtrado	
Abs	0.3066
[] (25x)	58.5045

PP 80	
Abs	0.4894
[] (25x)	96.0559

PP Filtrado	
Abs	0.3766
[] (25x)	72.8841

PP 100	
Abs	0.6234
[] (25x)	123.583

PP Filtrado	
Abs	0.4839
[] (25x)	94.926

Anexo 3: Panel Fotográfico

Figura 16

Planificación previa a la experimentación

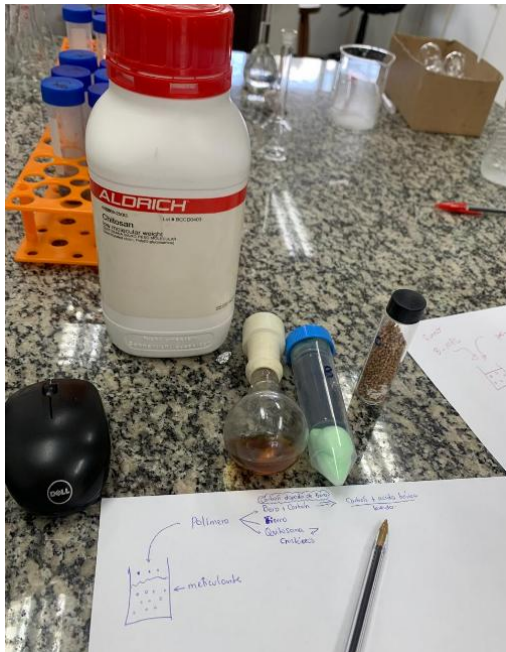


Figura 17

Carbón mesoporoso dopado con boro extraído en polvo



Figura 18

Inicio de pruebas preliminares



Figura 19

Ajuste de pH de las aguas contaminadas sintéticamente en laboratorio



Figura 20

Metilparabeno en polvo

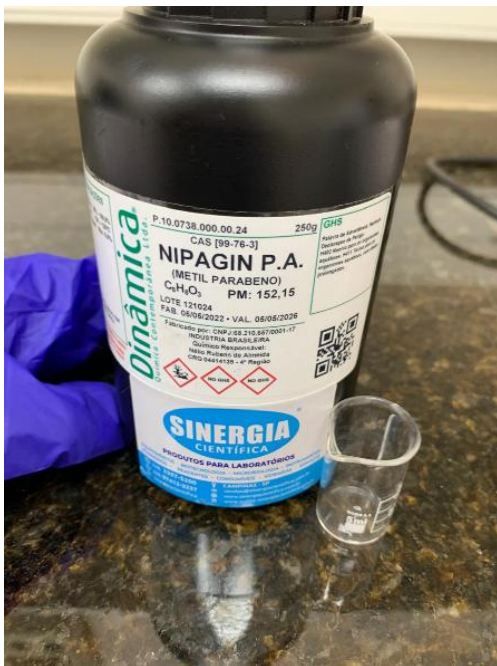


Figura 21

Metilparabeno en solución 10PPM

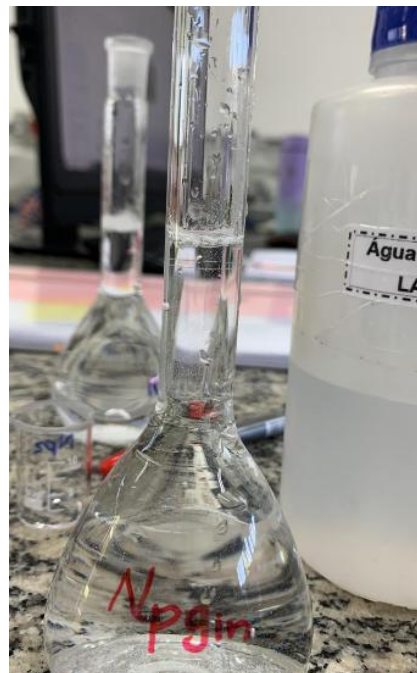


Figura 21

Preparación de muestras para las lecturas finales en el espectrofotómetro



Figura 22

Preparación de muestras para las lecturas finales en el espectrofotómetro



Figura 23

Metilparabeno a 10PPM con 0.0001g de carbón mesoporoso, pruebas en triplicata.



Figura 23

Recolección de datos finales

EXCEL						
PÁGINA INICIAL INSERIR LAYOUT DA PÁGINA FÓRMULAS DADOS REVISÃO						
Recortar		Calibri 11		Quebrar Texto		
Copiar		N I S		Mesclar e Cent		
Pincel de Formatação		Área de Transferência		Alinhamento		
Barrera de fórmulas: $=((C7-0,0126)/0,1259)*50$						
PP						
Abs	0,2297					
[] (50x)	86,21922					
PP Filtrado						
Abs	0,1326					
[] (50x)	47,65687					
MP						
Abs	0,1523					
[] (50x)	53,61545					
MP filtrado						
Abs	0,1324					
[] (50x)	45,43961					
		B-MPC				
Abs	Dil	Massa (g)	[]	Qe	% de	
50	0,00100	-5,00397	263,3042			
50	0,00100	-5,00397	263,3042			
50	0,00100	-5,00397	263,3042			
#DIV/0!	50	0,00100	-5,00	263,30		
		B-MPC				
Abs	Dil	Massa (g)	[]	Qe	% de	
50	0,00100	-8,95645	312,8595	116		
50	0,00100	-8,95645	312,8595	116		
50	0,00100	-8,95645	312,8595	116		
#DIV/0!	50	0,00100	-8,96	312,86	116	

Figura 24

Filtración de muestras con filtro de jeringa 0.2um en triplicata



Figura 25

Filtración de muestras al vacío



Figura 26

Lectura de muestras en el espectrofotómetro



Anexo 4: lista de los conservantes admitidos en los productos cosméticos según el reglamento (CE) No 1223/2009 del Parlamento Europeo y del Consejo de 30 de noviembre de 2009 sobre los productos cosméticos.

1. A los efectos de la presente lista, se entenderá por:

- sales: las sales de los cationes sodio, potasio, calcio, magnesio, amonio y etanolaminas; las sales de los aniones cloruro, bromuro, sulfato y acetato;
- ésteres: los ésteres de metilo, etilo, propilo, isopropilo, butilo, isobutilo y fenilo

2. Todos los productos acabados que contengan formaldehído o sustancias que figuran en el presente anexo y liberen formaldehído deberán consignar en la etiqueta la mención «contiene formaldehído» siempre que la concentración de formaldehído en el producto acabado supere el 0,05 %

Número de referencia	Identificación de las sustancias				Condiciones			Texto de las condiciones de empleo y advertencias
	Nombre químico / DCI	Nombre común del ingrediente recogido en el glosario	Número CAS	Número CE	Tipo de producto, partes del cuerpo	Concentración máxima en el producto preparado para el uso	Otras condiciones	
a	b	c	d	e	f	g	h	i
1	Ácido benzoico y su sal de sodio	Benzoic acid sodium benzoate	65-85-0 532-32-1	200-618-2 208-534-8	Productos que se aclaran, excepto los productos bucales Productos bucales Productos que no se aclaran	2,5 % (ácido) 1,7 % (ácido) 0,5 % (ácido)		
1a	Sales del ácido benzoico distintas de las incluidas en el número de orden 1 y ésteres del ácido benzoico	Ammonium benzoate, calcium benzoate, potassium benzoate, magnesium benzoate, MEA-benzoate, methyl benzoate, ethyl benzoate, propyl benzoate, butyl benzoate, isobutyl benzoate, isopropyl benzoate, phenyl benzoate	1863-63-4, 2090-05-3, 582-25-2, 553-70-8, 4337-66-0, 93-58-3, 93-89-0, 2315-68-6, 136-60-7, 120-50-3, 939-48-0, 93-99-2	217-468-9, 218-235-4, 209-481-3, 209-045-2, 224-387-2, 202-259-7, 202-284-3, 219-020-8, 205-252-7, 204-401-3, 213-361-6, 202-293-2		0,5 % (ácido)		

Número de referencia	Identificación de las sustancias				Condiciones			Texto de las condiciones de empleo y advertencias
	Nombre químico / DCI	Nombre común del ingrediente recogido en el glosario	Número CAS	Número CE	Tipo de producto, partes del cuerpo	Concentración máxima en el producto preparado para el uso	Otras condiciones	
a	b	c	d	e	f	g	h	i
2	Ácido propiónico y sus sales	Propionic acid, ammonium propionate, calcium propionate, magnesium propionate, potassium propionate, sodium propionate	79-09-4, 17496-08-1, 4075-81-4, 557-27-7, 327-62-8, 137-40-6	201-176-3, 241-503-7, 223-795-8, 209-166-0, 206-323-5, 205-290-4		2 % (ácido)		
3	Ácido salicílico ⁽¹⁾ y sus sales	Salicylic acid, calcium salicylate, magnesium salicylate, MEA-salicylate, sodium salicylate, potassium salicylate, TEA-salicylate	69-72-7, 824-35-1, 18917-89-0, 59866-70-5, 54-21-7, 578-36-9, 2174-16-5	200-712-3, 212-525-4, 242-669-3, 261-963-2, 200-198-0, 209-421-6, 218-531-3		0,5 % (ácido)	No utilizar en productos para niños menores de 3 años, excepto en los champús	No utilizar para niños menores de 3 años ⁽²⁾
4	Ácido 2,4-Dienoico y sus sales	Sorbic acid calcium sorbate, sodium sorbate, potassium sorbate	110-44-1, 7492-55-9, 7757-81-5, 24634-61-5	203-768-7, 231-321-6, 231-819-3, 246-376-1		0,6 % (ácido)		
5	Formaldehído y <i>p</i> -formaldehído ⁽³⁾	Formaldehyde, paraformaldehyde	50-00-0, 30525-89-4	200-001-8	Productos bucales: Otros productos:	0,1 % (de formaldehído libre) 0,2 % (de formaldehído libre)	No utilizar en aerosoles	
6	Desplazado o eliminado							
7	Bifenil-2-ol y sus sales	<i>o</i> -Phenylphenol, sodium <i>o</i> -phenylphenate, potassium <i>o</i> -phenylphenate, MEA <i>o</i> -phenylphenate	90-43-7, 132-27-4, 13707-65-8, 84145-04-0	201-993-5, 205-055-6, 237-243-9, 282-227-7		0,2 % (de fenol)		
8	Piritiona de zinc ⁽⁴⁾	Zinc pyrithione	13463-41-7	236-671-3	Productos para el pelo: Otros productos:	1,0 % 0,5 %	Solo productos que se aclaran No utilizar en productos bucales	

Número de referencia	Identificación de las sustancias				Condiciones			Texto de las condiciones de empleo y advertencias
	Nombre químico / DCI	Nombre común del ingrediente recogido en el glosario	Número CAS	Número CE	Tipo de producto, partes del cuerpo	Concentración máxima en el producto preparado para el uso	Otras condiciones	
a	b	c	d	e	f	g	h	i
9	Sulfitos y bisulfitos inorgánicos ⁽⁵⁾	Sodium sulfite, ammonium bisulfite, ammonium sulfite, potassium sulfite, potassium hydrogen sulfite, sodium bisulfite, sodium metabisulfite, potassium metabisulfite	7757-83-7, 10192-30-0, 10196-04-0, 10117-38-1, 7773-03-7, 7631-90-5, 7681-57-4, 16731-55-8	231-821-4, 233-469-7, 233-484-9, 233-321-1, 231-870-1, 231-548-0, 231-673-0, 240-795-3		0,2 % (de SO ₂ libre)		
10	Desplazado o eliminado							
11	Clorobutanol	Chlorobutanol	57-15-8	200-317-6		0,5 %	No utilizar en aerosoles	Contiene chlorobutanol
12	Ácido <i>p</i> -hidroxibenzoico, sus sales y sus ésteres	4-Hydroxybenzoic acid, methylparaben, butylparaben, potassium ethylparaben, potassium paraben, propylparaben, isobutylparaben, sodium methylparaben, sodium ethylparaben, sodium propylparaben, sodium butylparaben, sodium isobutylparaben, ethylparaben, sodium paraben, isopropylparaben, potassium methylparaben, potassium butylparaben, potassium propylparaben, sodium propylparaben, calcium paraben, phenylparaben	99-96-7, 99-76-3, 94-26-8, 36457-19-9, 16782-08-4, 94-13-3, 4247-02-3, 5026-62-0, 35285-68-8, 35285-69-9, 36457-20-2, 84930-15-4, 120-47-8, 114-63-6, 4191-73-5, 2611-07-2, 38566-94-8, 84930-17-4, 35285-69-9, 69959-44-0, 17696-62-7	202-804-9, 202-785-7, 202-318-7, 253-048-1, 240-830-2, 202-307-7, 224-208-8, 225-714-1, 252-487-6, 252-488-1, 253-049-7, 284-595-4, 204-399-4, 204-051-1, 224-069-3, 247-464-2, 254-009-1, 284-597-5, 252-488-1, 274-235-4, 241-698-9		0,4 % (de ácido) para un solo éster 0,8 % (de ácido) para las mezclas de ésteres		
13	3-Acetil-6-metil-2 <i>H</i> -pirano-2,4(3 <i>H</i>)-diona / ácido dehidroacético y sus sales	Dehydroacetic acid, sodium dehydroacetate	520-45-6, 4418-26-2, 16807-48-0	208-293-9, 224-580-1		0,6 % (de ácido)	No utilizar en aerosoles	
14	Ácido fórmico y su sal de sodio	Formic acid, sodium formate	64-18-6, 141-53-7	200-579-1, 205-488-0		0,5 % (de ácido)		

Número de referencia	Identificación de las sustancias				Condiciones			Texto de las condiciones de empleo y advertencias
	Nombre químico / DCI	Nombre común del ingrediente recogido en el glosario	Número CAS	Número CE	Tipo de producto, partes del cuerpo	Concentración máxima en el producto preparado para el uso	Otras condiciones	
a	b	c	d	e	f	g	h	i
15	3,3'-Dibromo-4,4'-hexametilendioxidibenzamidina (dibromohexamidina) y sus sales (incluido el isetonato)	Dibromohexamidine, Isethionate	93856-83-8	299-116-4		0,1 %		
16	Tiomersal	Thimerosal	54-64-8	200-210-4	Productos para los ojos	0,007 % (de Hg) Cuando se encuentre mezclado con otros compuestos mercuriales autorizados por el presente Reglamento, la concentración máxima en Hg seguirá siendo de 0,007 %		Contiene tiomersal
17	Fenilmercurio y sus sales (incluido el borato)	Phenyl mercuric acetate, phenyl mercuric benzoate	62-38-4, 94-43-9	200-532-5, 202-331-8	Productos para los ojos	0,007 % (de Hg) Cuando se encuentre mezclado con otros compuestos mercuriales autorizados por el presente Reglamento, la concentración máxima en Hg seguirá siendo de 0,007 %		Contiene componentes fenilmercurícos
18	Ácido undecilénico y sus sales	Undecylenic acid, potassium undecylenate, sodium undecylenate, calcium undecylenate, TEA-undecylenate, MEA-undecylenate	112-38-9, 6159-41-7, 3398-33-2, 1322-14-1, 84471-25-0, 56532-40-2	203-965-8, 222-264-8, 215-331-8, 282-908-9, 260-247-7		0,2 % (de ácido)		
19	1,3-Bis(2-etilhexil)hexahidro-5-metil-5-pirimidinamina / hexetidina	Hexetidine	141-94-6	205-513-5		0,1 %		

Número de referencia	Identificación de las sustancias				Condiciones			Texto de las condiciones de empleo y advertencias
	Nombre químico / DCI	Nombre común del ingrediente recogido en el glosario	Número CAS	Número CE	Tipo de producto, partes del cuerpo	Concentración máxima en el producto preparado para el uso	Otras condiciones	
a	b	c	d	e	f	g	h	i
20	5-Bromo-5-nitro-1,3-dioxano	5-Bromo-5-nitro-1,3-dioxane	30007-47-7	250-001-7	Productos que se aclaran	0,1 %	Se debe evitar la formación de nitrosaminas	
21	2-Bromo-2-nitro-1,3 propano-diol / bronopol	2-Bromo-2-nitropropane-1,3-diol	52-51-7	200-143-0		0,1 %	Se debe evitar la formación de nitrosaminas	
22	Alcohol 2,4-diclorobencílico	Dichlorobenzyl alcohol	1777-82-8	217-210-5		0,15 %		
23	1-(4-Clorofenil)-3-(3,4-diclorofenil)urea / triclocarban ^(e)	Triclocarban	101-20-2	202-924-1		0,2 %	Criterios de pureza: 3,3',4,4'-Tetracloronitro-benceno <1ppm 3,3',4,4'-Tetracloronitroxibenceno <1ppm	
24	Clorocresol	<i>p</i> -Chloro- <i>m</i> -cresol	59-50-7	200-431-6	No utilizar en los productos aplicados en las mucosas	0,2 %		
25	5-Cloro-2-(2,4-diclorofenoxi)fenol / triclosán	Triclosan	3380-34-5	222-182-2		0,3 %		
26	Cloroxilenol	Chloroxylenol	88-04-0	201-793-8		0,5 %		
27	N, N''-Meten-bis[N'-[3-(hidroximetil)-2,5-dioximidazolidin-4-il]urea]	Imidazolidinyl urea	39236-46-9	254-372-6		0,6 %		
28	Diclorhidrato de α,ω-bis[[[(aminoiminometil)amino]iminometil]amino]poli(metileno)	Polyaminopropyl biguanide	70170-61-5, 28757-47-3, 133029-32-0			0,3 %		
29	2-Fenoxietanol	Phenoxyethanol	122-99-6	204-589-7		1,0 %		
30	Metenamina	Methenamine	100-97-0	202-905-8		0,15 %		

Número de referencia	Identificación de las sustancias				Condiciones			Texto de las condiciones de empleo y advertencias
	Nombre químico / DCI	Nombre común del ingrediente recogido en el glosario	Número CAS	Número CE	Tipo de producto, partes del cuerpo	Concentración máxima en el producto preparado para el uso	Otras condiciones	
a	b	c	d	e	f	g	h	i
31	Cloruro de 3-cloroalil metenamina	Quaternium-15	4080-31-3	223-805-0		0,2 %		
32	1-(4-Clorofenoxi)-1-(1H-imidazol-1-il)-3,3-dimetil-2-butanona / climbazol	Climbazole	38083-17-9	253-775-4		0,5 %		
33	1,3-Bis(hidroxiometil)-5,5-dimetilimidazolidina-2,4-diona	DMDM Hydantoin	6440-58-0	229-222-8		0,6 %		
34	Alcohol bencílico (7)	Benzyl alcohol	100-51-6	202-859-9		1,0 %		
35	1-Hidroxi-4-metil-6 (2,4,4-trimetil-pentil)2-piridón y su sal de monoetanol amina	1-Hydroxy-4-methyl-6-(2,4,4-trimethylpentyl) 2-pyridon, piroctone olamine	50650-76-5, 68890-66-4	272-574-2	Productos que se aclaran: Otros productos:	1,0 % 0,5 %		
36	Desplazado o eliminado							
37	2,2'-Metilen-bis(6-bromo-4-clorofenol)	Bromochlorophene	15435-29-7	239-446-8		0,1 %		
38	4-Isopropil-3-cresol	o-Cymen-5-ol	3228-02-2	221-761-7		0,1 %		
39	Mezcla de 5-Cloro-2-metil-isotiazol-3(2H)-ona y 2-Metilisotiazol-3(2H)-ona con cloruro de magnesio y nitrato de magnesio	Methylchloroisothiazolinone methylisothiazolinone	26172-55-4, 2682-20-4, 55965-84-9	247-500-7, 220-239-6		0,0015 % (de una mezcla en la proporción 3:1 de 5-cloro-2-metil-3,4-isotiazolona y 2-metil-3,4-isotiazolona)		
40	2-Bencil-4-clorofenol / clorofeno	Chlorophene	120-32-1	204-385-8		0,2 %		
41	2-Cloroacetamida	Chloroacetamide	79-07-2	201-174-2		0,3 %		Contiene chloroacetamide

Número de referencia	Identificación de las sustancias				Condiciones			Texto de las condiciones de empleo y advertencias
	Nombre químico / DCI	Nombre común del ingrediente recogido en el glosario	Número CAS	Número CE	Tipo de producto, partes del cuerpo	Concentración máxima en el producto preparado para el uso	Otras condiciones	
a	b	c	d	e	f	g	h	i
42	N, N'-Bis(4-clorofenil)-3,12-diimino-2,4,11,13-tetraazatetradecanodii midamida (clorhexidina) y sus sales de diacetato, digluconato y diclorhidrato	Chlorhexidine, chlorhexidine diacetate, chlorhexidine digluconate, chlorhexidine dihydrochloride	55-56-1, 56-95-1, 18472-51-0, 3697-42-5	200-238-7, 200-302-4, 242-354-0, 223-026-6		0,3 % (de clorhexidina)		
43	1-Fenoxipropan-2-ol ⁽⁸⁾	Phenoxyisopropanol	770-35-4	212-222-7	Solo para productos que se aclaran	1,0 %		
44	Bromuro y cloruro de alquil (C ₁₂ -C ₂₂) trimetil amonio	Behentrimonium chloride, cetrimonium bromide, cetrimonium chloride, laurtrimonium bromide, laurtrimonium chloride, steartrimonium bromide, steartrimonium chloride	17301-53-0, 57-09-0, 112-02-7, 1119-94-4, 112-00-5, 1120-02-1, 112-03-8	241-327-0, 200-311-3, 203-928-6, 214-290-3, 203-927-0, 214-294-5, 203-929-1		0,1 %		
45	4,4-Dimetil-1,3-oxazolidina	Dimethyl oxazolidine	51200-87-4	257-048-2		0,1 %	pH > 6	
46	N-(Hidroximetil)-N-(1,3-dihidroximetil-2,5-dioxo-4-imidazolidinil) N' (hidroximetil) urea	Diazolidinyl urea	78491-02-8	278-928-2		0,5 %		
47	4,4'-(1,6-Hexanodiilbis(oxi))bis-bencenocarboxamidina / hexamidina y sus sales (incluido el diisetionato, el di-p-ben y el p-ben	Hexamine, hexamine diisethionate, hexamine paraben	3811-75-4, 659-40-5, 93841-83-9	211-533-5, 299-055-3		0,1 %		
48	Glutaraldehído (1,5-pentanodial) / glutaral	Glutaral	111-30-8	203-856-5		0,1 %	No utilizar en aerosoles (sprays)	Contiene glutaral ⁽⁹⁾
49	7a-Etilhidro-1H,3H,5H-oxazolo[3,4-c]oxazol	7- Ethylbicyclooxazolidine	7747-35-5	231-810-4		0,3 %	No utilizar en productos bucales ni aplicados en las mucosas	

Número de referencia	Identificación de las sustancias				Condiciones			Texto de las condiciones de empleo y advertencias
	Nombre químico / DCI	Nombre común del ingrediente recogido en el glosario	Número CAS	Número CE	Tipo de producto, partes del cuerpo	Concentración máxima en el producto preparado para el uso	Otras condiciones	
a	b	c	d	e	f	g	h	i
50	3-(p-clorofenoxi)-propan-1,2 diol / clorfenesina	Chlorphenesin	104-29-0	203-192-6		0,3 %		
51	Hidroximetilaminacetato de sodio (hidroximetilglicinato de sodio)	Sodium hydroxymethylglycinate	70161-44-3	274-357-8		0,5 %		
52	Cloruro de plata depositado sobre dióxido de titanio	Silver chloride	7783-90-6	232-033-3		0,004 % (de AgCl)	20 % AgCl (p/p) sobre TiO ₂ No utilizar en productos para niños menores de 3 años ni en productos bucales, labiales o para los ojos	
53	Cloruro de N,N-Dimetil-N-[2-[2-[4-(1,1,3,3-tetrametilbutil)fenoxi]etoxi]etil] bencenometaminio (cloruro de bencetonio)	Benzethonium chloride	121-54-0	204-479-9	a) Productos que se aclaran b) Productos que no se aclaran salvo los productos bucales	0,1 %		
54	Cloruro, bromuro y sacarinato de benzalconio ⁽¹⁹⁾	Benzalkonium chloride, benzalkonium bromide, benzalkonium saccharinate	8001-54-5, 63449-41-2, 91080-29-4, 68989-01-5, 68424-85-1, 68391-01-5, 61789-71-7, 85409-22-9	264-151-6, 293-522-5, 273-545-7, 270-325-2, 269-919-4, 263-080-8, 287-089-1		0,1 % (de cloruro de benzalconio)		Evitar el contacto con los ojos
55	(Fenilmetoxi)-metanol	Benzylhemiformal	14548-60-8	238-588-8	Productos que se aclaran	0,15 %		

Número de referencia	Identificación de las sustancias				Condiciones			Texto de las condiciones de empleo y advertencias
	Nombre químico / DCI	Nombre común del ingrediente recogido en el glosario	Número CAS	Número CE	Tipo de producto, partes del cuerpo	Concentración máxima en el producto preparado para el uso	Otras condiciones	
a	b	c	d	e	f	g	h	i
56	Butilcarbamato de 3-yodo-2-propinilo	Iodopropynyl butylcarbamate	55406-53-6	259-627-5	a) Productos que se aclaran b) Productos que no se aclaran c) Desodorantes y antitranspirantes	a) 0,02 % b) 0,01 % c) 0,0075 %	No utilizar en productos bucales ni labiales a) No utilizar en productos para niños menores de 3 años, excepto en productos de baño, gel de ducha y champú b) No utilizar en lociones y cremas corporales ⁽¹³⁾ b) y c) No utilizar en productos para niños menores de 3 años	a) No utilizar para niños menores de 3 años ⁽¹¹⁾ b) y c) No utilizar niños menores de 3 años ⁽¹²⁾
57	2-Metil-2H-isotiazol-3-ona	Methylisothiazolinone	2682-20-4	220-239-6		0,01 %		

⁽¹⁾ Con usos distintos del uso como conservante, véase el anexo III, n° 98.

⁽²⁾ Únicamente cuando se trate de productos que pudieran emplearse para los cuidados de niños menores de tres años y que permanezcan en contacto prolongado con la piel.

⁽³⁾ Con usos distintos del uso como conservante, véase el anexo III, n° 13.

⁽⁴⁾ Con usos distintos del uso como conservante, véase el anexo III, n° 101.

⁽⁵⁾ Con usos distintos del uso como conservante, véase el anexo III, n° 99.

⁽⁶⁾ Con usos distintos del uso como conservante, véase el anexo III, n° 100.

⁽⁷⁾ Con usos distintos del uso como conservante, véase el anexo III, n° 45 y 68.

⁽⁸⁾ Con usos distintos del uso como conservante, véase el anexo III, n° 54.

⁽⁹⁾ Solamente si la concentración excede del 0,05 %.

⁽¹⁰⁾ Con usos distintos del uso como conservante, véase el anexo III, n° 65.

⁽¹¹⁾ Únicamente en caso de productos (distintos de los productos de baño, gel de ducha y champú) que podrían utilizarse con niños menores de 3 años.

⁽¹²⁾ Únicamente en caso de productos que podrían utilizarse con niños menores de 3 años.

⁽¹³⁾ Se refiere a cualquier producto destinado a ser aplicado en grandes extensiones corporales.