



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA  
DE MÉXICO**

---

---

**FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES CUAUTITLÁN**

**EL DIAGRAMA DE FLUJO COMO SEMÁFORO DE SEGURIDAD  
ECOLÓGICA EN LOS EXPERIMENTOS DE LABORATORIO DE  
CINÉTICA Y CÁTALISIS.**

**T E S I S**

**QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:**

**QUÍMICA**

**P R E S E N T A:**

**ANABEL HERNÁNDEZ ESCAMILLA**

**ASESORAS: DRA. YOLANDA MARINA VARGAS RODRÍGUEZ**

**Q.F.B. GUADALUPE IVETH VARGAS RODRÍGUEZ**



Universidad Nacional  
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

**Biblioteca Central**



**UNAM – Dirección General de Bibliotecas**  
**Tesis Digitales**  
**Restricciones de uso**

**DERECHOS RESERVADOS ©**  
**PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.



UNIVERSIDAD NACIONAL  
AUTÓNOMA DE  
MÉXICO

**FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES CUAUTITLÁN  
UNIDAD DE ADMINISTRACIÓN ESCOLAR  
DEPARTAMENTO DE EXÁMENES PROFESIONALES**

**DRA. SUEMI RODRÍGUEZ ROMO  
DIRECTORA DE LA FES CUAUTITLÁN  
PRESENTE**

U. N. A. M.  
FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES CUAUTITLÁN  
**ASUNTO: VOTO APROBATORIO**



**ATN: L.A. ARACELI HERRERA HERNÁNDEZ  
Jefa del Departamento de Exámenes  
Profesionales de la FES Cuautitlán.**  
EXÁMENES PROFESIONALES

Con base en el Reglamento General de Exámenes, y la Dirección de la Facultad, nos permitimos a comunicar a usted que revisamos el: **Trabajo de Tesis**

**El diagrama de flujo como semáforo de seguridad ecológica en los experimentos de laboratorio de cinética y catálisis**

Que presenta la pasante: **Anabel Hernández Escamilla**  
Con número de cuenta: **407022632** para obtener el Título de: **Química**

Considerando que dicho trabajo reúne los requisitos necesarios para ser discutido en el **EXAMEN PROFESIONAL** correspondiente, otorgamos nuestro **VOTO APROBATORIO**.

**ATENTAMENTE**  
**"POR MI RAZA HABLARA EL ESPÍRITU"**  
Cuautitlán Izcalli, Méx. a 25 de abril de 2013.

**PROFESORES QUE INTEGRAN EL JURADO**

	<b>NOMBRE</b>	<b>FIRMA</b>
<b>PRESIDENTE</b>	Dr. René Miranda Ruvalcaba	
<b>VOCAL</b>	IQ. Graciela Ruth Delgadillo García	
<b>SECRETARIO</b>	Dra. Yolanda Marina Vargas Rodríguez	
<b>1er. SUPLENTE</b>	MC. Olivia Noguez Cordova	
<b>2do. SUPLENTE</b>	MC. Julio Morales Mejia	

NOTA: los sinodales suplentes están obligados a presentarse el día y hora del Examen Profesional (art. 127).

HHA/pm

## **AGRADECIMIENTOS**

Este trabajo de tesis fue realizado con fondos de la UNAM-DGAPA del Programa de Apoyo a Proyectos para la Innovación y Mejoramiento de la Enseñanza PAPIIME-PE 102111 Experimentos de Cinética Química y Catálisis (Un enfoque de la Química Verde).

Esta investigación se desarrolló en el Laboratorio 11 (Nanomateriales y Catálisis) de la Unidad de Investigación Multidisciplinaria de la Facultad de Estudios Superiores Cuautitlán de la Universidad Nacional Autónoma de México.

Se agradece a la estudiante de Diseño textil y moda Suemi Lima Vargas por el apoyo técnico para la elaboración de las cartas de color.

## **DEDICATORIA**

*Esta tesis se la dedico a Dios quién supo guiarme por el buen camino, darme fuerzas para seguir adelante y no desmayar en los problemas que se presentaban, enseñándome a encarar las adversidades sin perder nunca la dignidad ni desfallecer en el intento.*

*A mi familia quienes por ellos soy lo que soy.*

*Porque creyeron en mí y porque me sacaron adelante, dándome ejemplos dignos de superación y entrega, porque gracias a ustedes, hoy puedo ver alcanzada mi meta, ya que siempre estuvieron impulsándome en los momentos más difíciles de mi carrera y de mi vida, y porque el orgullo que sienten por mí, fue lo que me hizo llegar hasta el final.. Por ustedes, por lo que valen, porque admiro su fortaleza y por lo que han hecho de mí.*

*A mis hermanas (Viri y Norma Angélica) gracias por todo el apoyo que siempre me han brindado; por escucharme, por estar siempre presentes, acompañándome porque sin su ayuda y compañía yo no lo hubiera logrado.*

*Los amo con todo mi corazón!*

*A mis amigos*

*Mil y un gracias por permitirme compartir con ustedes gratos momentos, por sus palabras y consejos, por toda su ayuda, su cariño y por su apoyo incondicional. Gracias por su amistad, por su compañerismo. Los quiero mucho.*

*A la Dr. Marina Vargas:*

*Mi más profundo agradecimiento por su esfuerzo en hacer relucir lo mejor de nosotros mismos, por su crítica certera, por su preocupación que iba desde lo académico a lo cotidiano, por ende de lo intangible a lo concreto. Por sus comentarios, apreciaciones y críticas hicieron que esta tesis resultara ser mil veces mejor que lo que se proyectaba originalmente. Gracias por confiar en mí.*

*A todos aquellos que siempre tuvieron una palabra de aliento en los momentos difíciles. Gracias por haber fomentado en mí el deseo de superación y el anhelo de triunfo en la vida.*

ÍNDICE	I
GLOSARIO	IV
ÍNDICE DE TABLAS	VI
ÍNDICE DE FIGURAS	VII
ÍNDICE DE DIAGRAMAS	VII
INTRODUCCIÓN	X
OBJETIVOS	X
IIHIPÓTESIS	XI
1. Generalidades	
1.1. Química Verde	1
1.2. Adsorción	7
1.2.1. Características del fenómeno de adsorción	8
1.2.2. Espectrofotometría UV-Vis	9
1.2.2.1. Ecuación de Beer-Lambert	10
1.2.3. Cinética de adsorción	11
1.2.3.1. Método integral gráfico	12
1.3. Diagramas de flujo de proceso	13
1.3.1. Definición de diagrama de flujo y diagrama de proceso	13
1.3.2. Tipos de diagramas de flujo	13
1.3.3. Pictogramas y rombos de seguridad	14
1.4. Color	17
1.4.1. La naturaleza del color	17
1.4.2. Color pigmento	18
1.4.3. Color aditivo	19
1.5. Arcillas	20
1.5.1. Origen	20
1.5.2. Estructura de los filosilicatos	21
1.5.3. Clasificación de los filosilicatos	22
1.5.4. Estructura de las esmecitas	23

1.5.5. Propiedades fisicoquímicas de las montmorillonitas	25
1.5.6. Caracterización de arcillas	25
1.5.7. Determinación de las propiedades texturales de adsorbentes por la técnica de adsorción-desorción de nitrógeno	25
1.5.7.1. Método de BET	26
1.6. Bentonita	28
1.6.1. Usos de la bentonita	29
1.7. Colorantes	30
1.7.1. Origen de los colorantes	30
1.7.2. Clasificación de los colorantes	30
1.7.3. El azul de metileno	31
1.8. Flavonoides	32
1.8.1. Características físico-químicas de las antocianinas	33
1.8.2. Factores que afectan a las antocianinas	35
1.8.3. Propiedades funcionales	36
1.9. Arándano	37
1.9.1. Características	37
1.9.2. Beneficios que aporta el arándano	37
2. Elaboración de un diagrama de flujo y cartas de color	
2.1. Diagramas de flujo	39
2.1.1. Símbolos y significado para la elaboración de un diagrama de flujo	39
2.2. Cartas de color	41
2.2.1. Codificación del color en función del número de principios de la química verde	41
2.2.2. Codificación del color en función del tipo de residuos	43
2.3. Evaluación de un experimento	43
3. Desarrollo experimental	
3.1. Caracterización de la bentonita	44
3.2. Adsorción de azul de metileno sobre bentonita	45
3.2.1. Material, Reactivos, y equipo	45
3.2.2. Adsorción del azul de metileno sobre bentonita	45
3.2.3. Longitud de onda de máxima absorción ( $\lambda$ )	46
3.2.4. Curva de calibración	46
3.2.5. Cinética de adsorción del azul de metileno sobre bentonita	46



3.3. Cinética de adsorción de antocianinas del jugo de arándano-manzana sobre bentonita	48
3.3.1. Longitud de onda de máxima absorbancia	49
3.3.2. Adsorción de antocianinas sobre bentonita	49
3.4. Metodología para realizar un diagrama de flujo ecológico	49
4. Resultados y discusión	
4.1. Caracterización de la bentonita, por la técnica de adsorción-desorción de nitrógeno	51
4.2. Adsorción del azul de metileno sobre bentonita	52
4.2.1. Longitud de onda máxima de azul de metileno	52
4.2.2. Curva de calibración	53
4.2.3. Adsorción de azul de metileno	54
4.2.4. Cinética de adsorción de azul de metileno	56
4.2.5. Análisis desde el punto de vista de la química verde de la adsorción de azul de metileno sobre bentonita	61
4.3. Adsorción de antocianinas del jugo de arándano-manzana sobre bentonita	64
4.3.1. Longitud de onda máxima de antocianinas del jugo de arándano manzana	64
4.3.2. Cinética de adsorción de antocianinas del jugo de arándano-manzana sobre bentonita	67
4.3.3. Análisis desde el punto de vista de la química verde de la adsorción de antocianinas del jugo de arándano sobre bentonita	69
4.3.4. Análisis desde el punto de vista de la química verde	70
CONCLUSIONES	72
BIBLIOGRAFIA	73
ANEXOS	78

## GLOSARIO

$\text{OH}^-$	Ion hidroxilo
$R^2$	Coefficiente de correlación
%	Porcentaje
$\Delta H$	Incremento de Entalpia
$^\circ\text{C}$	Grados centígrados
A	<b>A</b> bsortividad
Å	<b>A</b> rmstrong
AM	<b>A</b> zul de <b>M</b> etileno
ANSI	<b>A</b> merican <b>N</b> ational <b>S</b> tandards <b>I</b> nstitute
$A_s$	<b>Á</b> rea <b>s</b> uperficial específica
B	Camino o paso óptico generalmente de 1 cm
BET	<b>B</b> runauer- <b>E</b> mmet- <b>T</b> eller
BJH	<b>B</b> arret- <b>J</b> oiner- <b>H</b> alenda
CMYK	<b>C</b> yan, <b>M</b> agenta, <b>Y</b> ellow, <b>K</b> ey
C	<b>C</b> oncentración de la disolución
E	<b>E</b> nergía
$E_0$	<b>E</b> nergía menor
$E_a$	<b>E</b> nergía de <b>a</b> ctivación
APA	<b>A</b> gencia de <b>P</b> rotección <b>A</b> mbiental
$E^*$	<b>E</b> stado excitado
$E_m$	Factor de eficiencia
EEUU	<b>E</b> stados <b>U</b> nidos de América
g	<b>g</b> ramos
$h$	Constante de Plank
h	<b>h</b> oras
$\text{H}_3\text{O}^+$	Ion <b>h</b> idronio
Kg	<b>K</b> ilogramos
M	Peso <b>m</b> olécular
mg	<b>m</b> iligramos
min	<b>m</b> inutos
mL	<b>m</b> ililitros
$\text{N}_2$	<b>N</b> itrógeno

$N_a$	Numero de moléculas <b>adsorbidas</b>
Nm	<b>Nanómetros</b>
ISO	<b>I</b> nternational <b>O</b> rganization for <b>S</b> tandardization
P	<b>P</b> resión
$P/P_a$	Presión relativa del gas
$P_a$	Presión de saturación del gas
pH	<b>P</b> otencial de <b>h</b> idrogeno
ppm	<b>P</b> artes <b>p</b> or <b>m</b> illón
PQVCE	<b>P</b> rincipios de la <b>Q</b> ímica <b>V</b> erde que <b>c</b> umple el <b>e</b> xperimento
R	Constante universal de los gases reales
RGB	<b>R</b> ed, <b>g</b> reen, <b>b</b> lue
T	<b>T</b> emperatura
UV-Vis	<b>U</b> ltravioleta - <b>v</b> isible
V	<b>V</b> olumen adsorbido
V	Frecuencia
$V_p$	<b>V</b> olumen de <b>p</b> oro
$\Delta G$	Incremento de la energía libre de <b>G</b> ibbs
$\lambda$	Longitud de onda
$\epsilon$	Coeficiente de absortividad
Abs	Absorbancia
$T_0$	Tiempo cero

## INDICE DE TABLAS

- Tabla 1.1. Premios presidenciales en Química Verde 2012 otorgados por la EPA.
- Tabla 1.2. Principios de la Química Verde
- Tabla 1.3. Algunos trabajos realizados a favor de la Química Verde
- Tabla 1.4. Aplicación de los principios de la química verde en la enseñanza aprendizaje experimental
- Tabla 1.5. Diferencias entre fisorción y quimisorción
- Tabla 1.6. Ecuaciones de rapidez para el método integral gráfico
- Tabla 1.7. Esquema de clasificación para filosilicatos relacionados con los minerales arcillosos
- Tabla 1.8. Propiedades del azul de metileno
- Tabla 1.9. Estructura y sustituyentes de las antocianinas
- Tabla 2.1. Símbolos y significado para la elaboración de un diagrama de flujo de un experimento de laboratorio.
- Tabla 2.2. Codificación del color en función del número de principios de la Química Verde que cumple el experimento (PQVCE)
- Tabla 2.3. Codificación del color en función del tipo de residuo
- Tabla 3.1. Material utilizado durante el desarrollo experimental (azul de metileno)
- Tabla 3.2. Material utilizado durante el desarrollo experimental (antocianinas en jugo de arándano).
- Tabla 3.3. Contenido nutricional de los diferentes jugos utilizados.
- Tabla 4.1. Área superficial específica, diámetro, volumen y distribución de tamaño de poro de la bentonita, obtenida de la adsorción de  $N_2$ .
- Tabla 4.2. Valores obtenidos de absorbancia con respecto al tiempo de las concentraciones entre 3 y 20 ppm con 4 mg de bentonita
- Tabla 4.3. Ecuaciones obtenidas por regresión polinomial para cada experimento.
- Tabla 4.4. Resumen de los coeficientes de correlación ( $R^2$ ), obtenidos para las disoluciones azul de metileno de 3 a 10 ppm.
- Tabla 4.5. Análisis desde el punto de vista de la química verde del experimento de cinética de adsorción de azul de metileno sobre bentonita
- Tabla 4.6. Se muestran las diferentes longitudes de onda máximas obtenidas para cada uno de los jugos de arándano

- Tabla 4.7. En esta tabla se muestran los valores obtenidos de absorbancia con respecto al tiempo de los 4 diferentes jugos con 15 mg de bentonita
- Tabla 4.8. Ecuaciones obtenidas por regresión polinomial de ordenación 6 para cada experimento y los valores del coeficiente de correlación ( $R^2$ ).
- Tabla 4.9. Resumen de los coeficientes de correlación ( $R^2$ ), obtenidos para los diferentes jugos de arándano-manzana
- Tabla 4.10. Análisis desde el punto de vista de la química verde del experimento de cinética de adsorción de antocianinas del jugo de arándano-manzana sobre bentonita

## ÍNDICE DE FIGURAS

- Figura 1.1. Ciclo de vida de las sustancias
- Figura 1.2. Pictogramas utilizados para identificar riesgos en un laboratorio químico y el diagrama del rombo de colores.
- Figura 1.3. Pictogramas utilizados para identificar riesgos en un laboratorio químico y el diagrama del rombo de colores.
- Figura 1.4. Diagrama de la mezcla de colores denominado color aditivo también conocido como RGB.
- Figura 1.5. Unión entre tetraedro y octaedro a través de oxígenos comunes. ● Átomo de aluminio, magnesio, hierro, etc. ○ Átomo de oxígeno y/o grupo -OH.
- Figura 1.6. Lámina TOT o 2:1. ● Átomo de aluminio, magnesio, hierro, etc. ○ Átomo de oxígeno y/o grupo -OH.
- Figura 1.7. Estructura laminar de la arcilla.
- Figura 1.8. Estructura molecular del azul de metileno.
- Figura 1.9. Estructura de las antocianinas a diferentes valores de pH.
- Figura 3.1. Disoluciones de azul de metileno (3-20 ppm)
- Figura 3.2. En las siguientes imágenes se muestra el espectrofotómetro UV-Vis spectrometer LAMBDA 25 de la marca Perkin Elmer, y la balanza analítica OHAUS 214 en la cual se peso la arcilla
- Figura 3.3. Bentonita utilizada en este trabajo.
- Figura 3.4. Imágenes de los jugos utilizados en el experimento de adsorción de antocianinas de jugo de arándano sobre bentonita.
- Figura 4.1. Distribución de tamaño de poro de la bentonita.
- Figura 4.2. Isotherma de adsorción de N<sub>2</sub> de la bentonita.
- Figura 4.3. Curva de barrido del azul de metileno (665.4 nm).
- Figura 4.4. Se muestra el gráfico de la curva de calibración del azul de metileno de 3 hasta 60 ppm.
- Figura 4.5. En esta gráfica se puede observar que obtenemos un coeficiente de correlación de 0.9984 y una pendiente igual a 0.1185.

- Figura 4.6. Absorbancia con respecto al tiempo de las disoluciones entre 3 y 20 ppm con 4 mg de bentonita. Asi mismo se muestra la regresion polinomial realizada a cada curva (línea gris).
- Figura 4.7. Gráficas, ecuaciones y coeficientes de correlación ( $R^2$ ) para orden 0, 1 y 2 de 3 ppm.
- Figura 4.8. Gráficas, ecuaciones y coeficientes de correlación ( $R^2$ ) para orden 0, 1 y 2 de de 6 ppm.
- Figura 4.9. Gráficas, ecuaciones y coeficientes de correlación ( $R^2$ ) para orden 0, 1 y 2 de de Cinética de adsorción de azul de metileno de 9 ppm.
- Figura 4.10. Gráficas, ecuaciones y coeficientes de correlación ( $R^2$ ) para orden 0, 1 y 2 de de Cinética de adsorción de azul de metileno de 10 ppm.
- Figura 4.11. Curvas de barrido de los 4 diferentes jugos de arándano-manzana.
- Figura 4.12. Absorbancia con respecto al tiempo de los 4 jugos con 4 mg de bentonita. Asi mismo se muestra la regresion polinomial realizada a cada curva.
- Figura 4.13. Gráficas, ecuaciones y coeficientes de correlación ( $R^2$ ) para el jugo de arandano-manzana de la marca Golden Hills.

## ÌNDICE DE DIAGRAMAS

- Diagrama 1. Diagrama de flujo ecológico del experimento cinética de adsorción de azul de metileno sobre bentonita
- Diagrama 2. Diagrama de flujo ecológico del experimento cinética de adsorción de antocianinas de jugo de arándano y/o manzana sobre bentonita

# INTRODUCCIÓN

Actualmente la preocupación por la contaminación del medio ambiente provocó que a principios de la década de 1990, Anastas de la Agencia de Protección Medioambiental (EPA) de los EE UU, acuñaran el concepto de QUÍMICA VERDE que se ocupa del diseño de productos o procesos químicos que reduzcan y eliminen el uso y producción de sustancias peligrosas.

Posteriormente, se publica el libro: Green Chemistry: Theory and Practice, que se considera una referencia importante de la Química Verde. En este se exponen los llamados Doce Principios de la Química Verde, criterios que ayudan a valorar cuán respetuoso es con el medio ambiente un producto químico, reacción o proceso (Anastas, 2001).

Un control cuidadoso en tiempo real de los procesos químicos es esencial para una operación segura, eficiente y con un mínimo de residuos, por esta razón, es mejor evitar el uso o la generación de sustancias que probablemente reaccionen con violencia, o de alguna forma causen incidentes no previstas en el proceso y este objetivo se ha hecho extensivo para el ámbito académico. Por lo anterior surge la necesidad de desarrollar experimentos los cuales sean utilizados para ejemplificar como realizar un diagrama de flujo como un semáforo ecológico de acuerdo con los 12 principios de química verde, dicho diagrama se define como una representación de los pasos de un proceso que determina cómo funciona el proceso para producir un resultado.

En este trabajo se realizaron dos experimentos de adsorción con azul de metileno, un colorante comercial usado en ámbitos como la medicina, y de antocianinas presentes en el jugo de arándano las cuales tienen propiedades antioxidantes, ambos se realizaron sobre bentonita comercial adquirida en Minerex, esto con el objetivo de ilustrar de manera clara la forma de realizar un diagrama de flujo como un semáforo ecológico, de igual forma se propone una gama de colores que van de rojo al verde para determinar cuántos principios de la química verde cumple un experimento y visualizar este resultado directamente en el diagrama de flujo ecológico como se observa un semáforo.



## **OBJETIVOS**

### **OBJETIVO GENERAL**

- Elaborar diagramas de flujo, mediante el análisis de un experimento para evaluar su impacto ecológico.

### **OBJETIVOS PARTICULARES**

- Describir como se realiza un diagrama ecológico con los colores y figuras propuestas por la ISO y ANSI, de acuerdo a los 12 principios de la química verde.
- Aplicar el diagrama de flujo ecológico a dos experimentos de cinética con el fin de ilustrar su uso y utilidad a favor del medio ambiente acorde a los 12 principios de la química verde; tanto durante el experimento como para la disposición de residuos.
- Caracterizar la bentonita utilizada en ambos experimentos mediante un análisis fisicoquímico elemental (área superficial).
- Determinar la cinética de adsorción del azul de metileno sobre bentonita.
- Determinar la cinética de adsorción de las antocianinas en jugo de arándano, sobre bentonita.

## **HIPÓTESIS**

Si un diagrama de flujo es una herramienta útil para comprender como funciona un proceso para producir un resultado con la finalidad de ofrecer de forma objetiva y estructurada las actividades que conforman un proceso; entonces un diagrama de flujo ecológico será un buen indicador de las operaciones a realizar durante el proceso y de igual forma ayudara a saber que tan amigable es un experimento con el medio ambiente esto de acuerdo al sistema de caracterización de colores propuesto para la realización de diagramas de flujo ecológico.

# CAPITULO 1

## GENERALIDADES

### 1.1. QUÍMICA VERDE

Actualmente los seres humanos tienen gran dependencia de la industria química, para la salud se obtienen fármacos e intermediarios; para la agricultura fertilizantes, herbicidas y pesticidas; para el transporte combustibles, para la alimentación se generan aceites, pastas, mermeladas, etcétera. Es importante notar, que los procesos industriales no son amigables con el hombre y el medio ambiente, ya que estos procesos generan gran cantidad de residuos que pueden resultar peligrosos, por que utilizan materiales corrosivos, explosivos no biodegradables y algunos presentan altos requerimientos energéticos.

Con el objetivo de reducir la cantidad de residuos peligrosos generados en los procesos industriales, en Estados Unidos, la Ley de Prevención de la Contaminación de 1990 estableció la reducción de residuos peligrosos de mayor prioridad en la solución de los problemas ambientales. La aprobación de esta Ley marcó una respuesta a las cuestiones ambientales, dirigida hacia la prevención de la contaminación como una estrategia eficaz que se centró en la prevención de residuos. Poco después de la aprobación de la Ley de Prevención de la Contaminación, se reconoció una variedad de disciplinas necesarias para participar en la reducción de fuentes contaminantes. Este reconocimiento se extendió a los químicos, los diseñadores de estructuras moleculares y a la industria de la transformación (Anastas T., Kirchoff M. & Williamson C., 2001).

A principios de la década de 1990, Anastas y Colaboradores de la Agencia de Protección Medio ambiental (EPA) de los EE UU, acuñan el concepto de química verde que se ocupa del diseño de productos o procesos químicos que reduzcan y eliminen el uso y producción de sustancias peligrosas.

En 1991, la EPA, puso en marcha la primera iniciativa de investigación del programa de química verde, dicho trabajo fue fundamental en la Química y la Ingeniería, posteriormente en 1993, el programa de la EPA adoptó oficialmente el nombre de: Programa de Química Verde de los EE.UU. (Grossarth, 2007). Desde su creación, el programa ha servido como un punto focal para las actividades principales dentro de los

Estados Unidos, tales como los Premios Presidenciales otorgados en el Certamen Presidencial sobre química verde, el cual tiene como meta el reconocimiento de logros sobresalientes en química verde a través de un programa anual de premios que expone los beneficios científicos, ambientales y económicos que ofrecen las tecnologías de química verde (Tabla 1.1).

<b>Tabla 1.1. Premios Presidenciales en Química Verde 2012 otorgados por la EPA</b>	
Professor Robert M. Waymouth	Premio en catálisis orgánica donde plasma una estrategia para utilizar la química verde en polímeros como catalizadores metálicos los cuales son necesarios para sintetizar poliésteres.
Professor Geoffrey W. Coates	Premio por su propuesta en síntesis de polímeros biodegradables a partir de dióxido de carbono y monóxido de carbono derivada de la biomasa o de otras fuentes de carbono dichos polímeros son materias primas ideales para los productos químicos.
Elevance Renewable Sciences, Inc.	Premio por su propuesta para usar catálisis metátesis para producción de alto rendimiento en catalizadores para producir productos químicos amigables con el medio ambiente.
Codexis, Inc. Professor Yi Tang, E.	Premio por proponer un proceso para la fabricación de biocatalítica de simvastatina que es fármaco líder para el tratamiento de niveles altos de colesterol que es obtenido de forma natural.
Buckman International.	Premio por el estudio sobre las enzimas que reducen la energía necesaria para la fabricación de papel de alta calidad. En fabricación de papel se requieren tratamientos costosos.
DuPont Company	Obtuvo el premio por desarrollo de una viabilidad comercial, integrada al proceso de producción de etanol. La producción tradicional de etanol a partir de almidón, tales como granos de maíz, desvía los recursos de producción de alimentos.

En 1995 la EPA y la American Chemical Society firman un acuerdo de colaboración para desarrollar y difundir material relacionado a la química verde, especialmente en los niveles bachillerato y licenciatura (Savely M., Carson I., & Deldos L., 2007).

Posteriormente Anastas y Warner en 1998, publican el libro química verde: Teoría y Práctica, en este se exponen criterios que ayudan a valorar q tan respetuoso es con el medio ambiente un producto químico, reacción o proceso, denominados los Doce

Principios de la Química Verde. Estos principios se enunciaron enfocados a procesos industriales, en donde el objetivo es obtener un producto comercial (Tabla 1.2).

<b>Tabla 1.2 Principios de la Química Verde</b>	
<b>1. Prevención</b>	Es preferible evitar la producción de un residuo que tratar de limpiarlo después de haberse formado.
<b>2. Economía atómica</b>	Los métodos de síntesis deberán diseñarse para maximizar la incorporación de todos los materiales usados durante el proceso en el producto final, minimizando la formación de subproductos.
<b>3. Uso de metodologías que generen productos con toxicidad reducida</b>	Siempre que sea posible, los métodos de síntesis deberán diseñarse para utilizar y generar sustancias que tengan poca o ninguna toxicidad, tanto para el hombre como para el medio ambiente.
<b>4. Generar productos eficaces pero no tóxicos</b>	Los productos químicos deberán ser diseñados de manera que mantengan la eficacia a la vez que se reduce su toxicidad.
<b>5. Reducir el uso de sustancias auxiliares</b>	Se evitará, en lo posible, el uso de sustancias que no sean imprescindibles (disolventes, reactivos para llevar a cabo separaciones, etc), y en el caso de que se utilicen que sean lo más inocuos posible.
<b>6. Disminuir el consumo energético</b>	Los requerimientos energéticos serán considerados por su impacto medioambiental y económico, reduciéndose todo lo posible. Los métodos de síntesis se intentarán llevar a cabo a temperatura y presión ambiental.
<b>7. Utilización de materias primas renovables</b>	La materia prima ha de ser preferiblemente renovable, siempre que sea técnica y económicamente viable.
<b>8. Evitar la derivatización innecesaria</b>	Se evitará en lo posible la formación de derivados (grupos de bloqueo, de protección/desprotección, modificación temporal de procesos físicos/químicos).
<b>9. Potenciación de la catálisis</b>	Se requiere emplear catalizadores con selectividad elevada, reutilizables en lo posible, en lugar de reactivos estequiométricos.
<b>10. Generar productos biodegradables</b>	Los productos químicos se diseñarán de tal manera que al finalizar su función no persistan en el medio ambiente sino que se transformen en productos de degradación inocuos.
<b>11. Desarrollar metodologías analíticas para la monitorización en tiempo real</b>	Las metodologías analíticas serán desarrolladas posteriormente para permitir una monitorización y control en tiempo real del proceso, previo a la formación de sustancias peligrosas.
<b>12. Minimizar el potencial de accidentes químicos</b>	Se elegirán las sustancias empleadas en los procesos químicos de forma que se minimice el riesgo de accidentes químicos, explosiones e incendios.

La aplicación de estos principios se ha centrado inicialmente en la industria con grandes volúmenes y bajos precios de producción como la industria farmacéutica petroquímica, donde la ciencia y tecnología de la catálisis han sido ampliamente usadas desde los años setenta. No obstante, esta metodología está menos establecida en la investigación química, la cual posee un menor volumen de producción, aunque con una mayor revalorización del producto final. Esta rama de la química inicialmente ha centrado su atención en la síntesis de nuevos productos, y sólo recientemente en el desarrollo de procesos.

El concepto de "diseño" en la definición es un elemento esencial en el que requiere el uso consciente y deliberativo de una serie de criterios, principios y metodologías en la práctica de la química verde. La frase "el uso o la generación de" implica la exigencia de ciclo de vida de las sustancias químicas (Figura 1.1). La química verde se puede utilizar en cualquier parte del ciclo de vida, desde sus orígenes como materia prima para más allá del final de su vida útil (Yarto Ramírez, Gavilán García, & Martínez Cordero, 2007).



**Figura 1.1.** Ciclo de vida de las sustancias químicas

El diseño de productos ambientalmente amigables y los procesos pueden ser guiados por los 12 principios de la química verde (Tabla 1.2). Estos principios son una clasificación de los enfoques fundamentales adoptados para alcanzar los objetivos de la química verde y se han utilizado como directrices y criterios de diseño por parte de los científicos (Cacciatore, 2008). La química verde se ha alcanzado avances en la investigación, implementación, educación y divulgación en la última década a través de páginas Web (Cann & Dickneider, 2004). Es importante mencionar, que han sido descritos en la literatura diversos materiales, libros, artículos, revistas, casos de estudios, páginas Web y conferencias de la química verde aplicada en la educación, básicamente enfocados a la química orgánica, aunque también se encuentran otros materiales dedicados a la química analítica, algunos de estos trabajos se presentan en la Tabla 1.3.

<b>Tabla 1.3.</b> Algunos trabajos realizados a favor de la Química Verde	
Artículo	Autor
Green Chemistry and Education	Hjerensen, D.L., Boese, J.M. & Schutt, D.L. (2000)
Topics in Green Chemistry	Kirchhoff, M.M. (2001)
Origins, Current Status and Future Challenges of Green Chemistry	Anastas, O. T. & Kirchhoff, M.M. (2002)
How Green Is a Chemical reaction? Application of LCA to Green Chemistry	Doménech, X. and Rieradevall, J. (2002)
Atom Utilization, <i>E</i> Factors and the Catalytic Solution	Sheldon, R. A., (2003)
Unification of Reaction Metrics for Green Chemistry: Application to Reaction Analysis	Andraos, J (2005)
Green Chemistry Education: Toward a Greener Day	Kirchhoff, M.M. (2009)
A Green Multicomponent Reaction for the Organic Chemistry Laboratory. The Aqueous Passerini Reaction	Hooper, M.M. and De Boef, B. (2009)
Green Analytical Chemistry: Application and Education	Gron, L. U. (2009)
Determination of Mercury in Milk by Cold Vapor Atomic Fluorescence: A Green Analytical Chemistry Laboratory Experiment	Armenta, S. and de la Guardia, M (2011)

En 2011, Obaya y Vargas Rodríguez, presentan algunas consideraciones a los principios de la química verde en su aplicación al diseño de experimentos de laboratorio de química (Tabla 1.4). En estos, se discute la importancia de eliminar las sustancias auxiliares para el seguimiento de reacciones o en cuantificaciones, donde se preferirá métodos fisicoquímicos (conductividad, absorbancia, etcétera.) en lugar de valoraciones químicas y en el caso de que se utilicen sean lo más inocuos posibles, además de producir residuos biodegradables, que los residuos contengan el menor número de componentes para que sea más sencillo su tratamiento o disposición, y que la toxicidad de las sustancias químicas participantes sea minimizada.

Adicionalmente, indican el valor de presentar un esquema ecológico, para facilitar la identificación y naturaleza de los residuos generados en cada experimento.

<b>Tabla 1.4.</b> Aplicación de los principios de la química verde en la enseñanza aprendizaje experimental (Obaya & Vargas-Rodriguez, 2011)		
	Principio de la química verde	Enfoque en el diseño de experimentos para la enseñanza aprendizaje
1	Prevenir y/o minimizar residuos	Se deben diseñar experimentos en los que no se generen residuos o que se obtenga la menor cantidad de ellos.
2	Economía atómica:	Los métodos en lo que procedan reacciones químicas, deben diseñarse de manera que se incorporen al máximo todos los reactivos en el producto final.
3	Diseñar experimentos que utilicen y generen sustancias con el mínimo de toxicidad.	Siempre que sea posible, utilizar materiales y generar sustancias que tengan poca o ninguna toxicidad, tanto para el hombre como para el medio ambiente.
4	Generar productos eficaces pero no tóxicos	Reducir la toxicidad de los productos o residuos, pero mantener el objetivo del experimento.
5	Reducir el uso de sustancias auxiliares.	Se debe evitar, en lo posible, el uso de sustancias como: disolventes, reactivos para llevar a cabo separaciones, etcétera. En el seguimiento de reacciones o en la cuantificación se preferirá métodos fisicoquímicos (conductividad, absorbancia, etcétera.) en lugar de valoraciones químicas y en el caso de que se utilicen que sean lo más inocuos posibles.

<b>Tabla 1.4.</b> Aplicación de los principios de la química verde en la enseñanza aprendizaje experimental (Obaya & Vargas-Rodriguez, 2011) Continuación.		
6	Disminuir el consumo energético.	Se preferirán experimentos que se lleven a cabo a temperatura y presión ambientes.
7	Utilizar materias primas renovables:	La materia prima ha de ser preferiblemente renovable en vez de agotable, siempre que sea técnica y económicamente viable.
8	Evitar derivados innecesarios.	Se debe evitar en lo posible la formación de derivados (grupos de bloqueo, de protección/desprotección, modificación temporal de procesos físicos/químicos).
9	Preferir la catálisis.	Se deben emplear catalizadores lo más selectivos posible, preferentemente reutilizables para experimentos posteriores, en lugar de reactivos estequiométricos.
10	Generar productos biodegradables	Los productos químicos se diseñarán de tal manera que al finalizar su función no persistan en el medio ambiente sino que se transformen en productos de degradación inocuos.
11	Analizar los procesos en tiempo real, para prevenir la contaminación.	Las metodologías analíticas serán desarrolladas para permitir el análisis y el control en tiempo real del proceso (índice de refracción, potencial redox, cromatografía en capa fina, cromatografía de gases, etcétera).
12	Minimizar el riesgo de accidentes químicos.	Se deben elegir sustancias en los experimentos químicos de forma que se minimice el riesgo de accidentes químicos, incluidas las emanaciones, explosiones e incendios.

## 1.2. ADSORCIÓN

En catálisis verde o heterogénea una de las etapas es la adsorción este fenómeno es muy importante ya que es resultado de la atracción entre las moléculas de la superficie del sólido (adsorbente) y las del fluido (adsorbato). La adsorción se ve influida por la temperatura, la presión y la concentración del material que va ser adsorbido sino que también hay variables difícilmente medibles tales como el área superficial real y las propiedades físicas y químicas de esta superficie (Hammed B., Din, & Ahmad, 2005).

Actualmente, la técnica de adsorción está ganando rápidamente importancia para la eliminación de micro contaminante orgánicos e inorgánicos de los efluentes acuosos. Los procesos de adsorción pueden ser clasificados como física o químicamente en función de la naturaleza de las fuerzas implicadas. Cuando la adsorción tiene lugar sin ninguna reacción química, en general se denomina como la adsorción física "fisorción", se lleva a cabo mediante fuerzas de Van der Waals. Estas fuerzas son electrostáticas en



su origen, y se denominan fuerzas de dispersión. Las fuerzas de dispersión existen en todo tipo de materia y están siempre presentes independientemente de la naturaleza de otras interacciones y, a menudo para la mayor parte del potencial adsorbato-adsorbente.

Muchos parámetros pueden afectar a la calidad de la adsorción física, que incluyen propiedades del material adsorbido (tamaño molecular, punto de ebullición, la masa molecular y polaridad) y propiedades de la superficie del adsorbente (polaridad, tamaño de poro y el espaciamiento).

### 1.2.1 Características del fenómeno de adsorción

Si el adsorbato se somete a la interacción química con el adsorbente, el fenómeno se conoce como adsorción química o "quimisorción". Se trata de un intercambio de electrones entre las moléculas de adsorbato y la superficie del adsorbente. Se limita a sólo una capa de moléculas en la superficie, aunque puede ser seguido por capas adicionales de moléculas adsorbidas físicamente (Shaw, D.J.1977).

En condiciones favorables, ambos procesos pueden ocurrir simultáneamente o alternativamente. En la Tabla 1.5 se encuentran las diferencias entre Quimisorción y Fisorción.

<b>Tabla 1.5</b> Diferencias entre Fisorción y Quimisorción. (Torres Izquierdo, 2004).		
Propiedad	Adsorción Física	Adsorción química
Adsorbente	Todos los Sólidos	Algunos Sólidos
Adsorbato	Todos los gases por debajo de la temperatura crítica	Algunos gases químicamente reactivos
Entalpía de adsorción	Baja ( $\sim\Delta H_v$ )	Elevada, del orden de una entalpía de reacción
Velocidad, energía de activación (E)	Muy rápida, E muy pequeña	Activada, E elevada No activada, E pequeña
Reversibilidad	Extremadamente reversible	A menudo irreversible

La adsorción es un proceso espontáneo ( $\Delta G < 0$ ). De la relación  $\Delta G = \Delta H - T\Delta S$ , se deduce que  $\Delta H - T\Delta S < 0$  y  $\Delta H < T\Delta S$ , es decir  $\Delta H$  es más negativa que  $T\Delta S$ . En la adsorción sin reacción sobre un adsorbente cuyas propiedades no se alteran por el proceso, se forma un sistema más ordenado con disminución en el número de grados de libertad (Torres Izquierdo, 2004). La adsorción es un fenómeno de superficie, como tal, el grado de adsorción es proporcional al área superficial específica, es decir, a la porción de la superficie total que está disponible para la adsorción (Castells, 2000).

La capacidad de adsorción de un sólido depende de:

- El área específica del material: en el caso de los adsorbentes naturales, éstos poseen áreas superficiales que varían en función del estado físico-químico del medio líquido.
- De la naturaleza de la unión adsorbato-adsorbente, es decir, de la energía libre de Gibbs entre los sitios de adsorción y la parte de la molécula que está en contacto con la superficie.
- El tiempo de contacto entre el adsorbato-adsorbente

Un método útil para evaluar el proceso del fenómeno de adsorción es la espectrofotometría, en la actualidad se han realizado diversas investigaciones para la remoción de colorantes químicos con el objetivo de hacer los procesos industriales amigables con el medio ambiente como ejemplo Tuesta, Vivas, & Gutarra en 2005 usa arcillas para la remoción de colorantes químicos usando métodos espectrofotométricos otro ejemplo es El Qada, Allen, & Walkeren 2006 realiza estudios de adsorción de azul de metileno con respecto al tiempo sobre carbon activado por el mismo método.

### **1.2.2 Espectrofotometría UV-VIS**

La espectrofotometría es el método de análisis óptico más usado en las investigaciones químicas y bioquímicas. El espectrofotómetro es un instrumento que permite comparar la radiación absorbida o transmitida por una disolución que contiene una cantidad desconocida de soluto, y una que contiene una cantidad conocida de la misma sustancia.

La espectrofotometría ultravioleta-visible utiliza haz de radiación del espectro electromagnético, el intervalo de la luz visible es de 400 a 700 nm, por lo que es de gran utilidad para caracterizar los materiales en la región ultravioleta y visible del espectro.

Las aplicaciones principales son:

- Determinar la cantidad de concentración en una solución de algún compuesto.
- Para la determinación de estructuras moleculares.
- La identificación de unidades estructurales específicas ya que estas tienen distintos tipos de absorbancia (grupos funcionales o isomerías).

### 1.2.1.1 Ecuación de Beer-Lambert

La absorción de radiación electromagnética implica el paso de una especie de su estado fundamental de mínima energía ( $E_0$ ) a un estado excitado ( $E^*$ ) de, mayor energía. Sólo cuando la energía de los fotones que incide sobre la especie coincida exactamente con la diferencia de energía existente entre su estado fundamental y alguno de los posibles estados excitados se producirá la absorción de dicha energía.



La presentación gráfica de la atenuación de la radiación incidente (absorbancia) o la radiación transmitida (transmitancia) frente a la longitud de onda, ( $\lambda$ ) frecuencia ( $\nu$ ) constituye el espectro de absorción de dicha especie, el espectro de absorción es propio de cada especie. Este tipo de fenómeno es medido mediante métodos instrumentales como los espectrofotométricos, en los cuales se obtiene la radiación absorbida por una disolución.

La ley de Beer-Lambert (Scott Fogler, 2001) es una ecuación fundamental en los métodos espectrofotométricos de análisis, ya que permite calcular la concentración de la sustancia a partir de la radiación absorbida por una disolución de la misma.

$$A = abC \quad (1.2)$$

Donde  $a$  es la absorptividad,  $b$  es la trayectoria del haz incidente (camino o paso óptico generalmente de 1 cm) y  $C$  es la concentración de la disolución. La absorptividad es

la constante que relaciona la absorbancia con la concentración de la especie absorbente y sus unidades dependerán de las unidades empleadas para la concentración. Así, si C se expresa en mol /L, la absorptividad se denomina Absorptividad molar, representada por  $\epsilon$  y tendrá unidades de L/mol . cm, si C se expresa en g/L, la absorptividad tendrá unidades de L/g .cm. y la ecuación 1.2 se transforma en:

$$A = \epsilon bC \quad (1.3)$$

Y consecuentemente relacionada con la absorptividad molar mediante

$$\epsilon = aM \quad (1.4)$$

Donde M es el peso molecular del soluto.

### 1.2.3 Cinética de adsorción

La cinética química se encarga del estudio de la rapidez de las reacciones químicas y tiene además, como objeto el estudio de los factores que influyen en la rapidez de un proceso químico, como lo son la temperatura, los cambios de concentración de los reactantes, la adición de catalizadores, modificación de pH, etc.

La rapidez de reacción se define como la cantidad de sustancia que reacciona por unidad de tiempo. La velocidad de reacción se define como la variación con el tiempo de la concentración de cualquier reactivo o producto, que intervienen en dicha reacción.

Para la reacción general:



Su rapidez viene dada por la siguiente relación:

$$r = -\frac{d[A]}{dt} = -\frac{b[B]}{dt} \quad (1.6)$$

La ley de rapidez es la expresión matemática q relaciona la rapidez de una reacción química con la concentración de reactivos en cualquier instante. Se determina experimentalmente y es de la forma:

$$k = [A]^{\alpha} [B]^{\beta} \quad (1.7)$$

Donde k se llama constante de rapidez de la reacción.

Los exponentes  $\alpha$  y  $\beta$  se llaman órdenes parciales de la reacción con respecto a los reactivos A y B, respectivamente. La suma  $\alpha + \beta$  se llama orden total de la reacción. Es importante señalar que el orden de reacción es estrictamente una magnitud experimental que depende exclusivamente de la forma en que la rapidez se relaciona con la concentración de los reactantes.

Para determinar el orden de reacción, es necesario tener datos experimentales sobre la variación de la concentración o propiedades que den una relación directa de la concentración de las sustancias reaccionantes o productos en función del tiempo. Existen varios métodos matemáticos para determinar el orden de reacción, uno de los métodos más utilizados es integral gráfico.

### **1.2.3.1 Método integral gráfico**

Es el método más utilizado, su uso es conveniente en reacciones en las que el mecanismo no se modifica durante el transcurso de la reacción, y en consecuencia el orden de reacción es constante.

El método se basa en la obtención de líneas a partir de las ecuaciones integradas en la Tabla 1.6; primero se cuantifica la concentración de los productos o reactantes en función del tiempo, se determinan los valores del eje de las Y para cada orden X,  $\ln [A_0/A_0-x]$ ,  $x/[A_0(A_0-x)]$ , etc.; posteriormente, se trazan gráficas de las funciones vs tiempo. Finalmente, se realiza una regresión lineal y el orden se define para aquel que encuentre una mejor correlación  $R^2$ .

Tabla 1.6 Ecuaciones de rapidez para el método integral gráfico			
ORDEN	REACCIÓN	LEY DE RAPIDEZ	FORMA INTEGRADA
0	A → P	$\frac{dx}{dt} = k$	$x = \frac{k}{t}$
1	A → P	$\frac{dx}{dt} = k[A]$	$\ln \left[ \frac{A_0}{(A_0 - x)} \right] = kt$
2	A → P	$\frac{dx}{dt} = k[A]^2$	$\frac{x}{A_0(A_0 - x)} = kt$

### 1.3 DIAGRAMAS DE FLUJO DE PROCESO

#### 1.3.1 Definición de diagrama de flujo y diagrama de proceso

Un diagrama de flujo es un esquema o dibujo del movimiento de productos, materiales o personas, estos diagramas ayudan a entender, analizar y comunicar, además indican la conexión de las composiciones y condiciones de operación. (Heizer & Render, 2004). Para describir un proceso se utilizan diagramas de flujo de proceso los cuales comprenden símbolos tiempo y distancia, con la finalidad de ofrecer una forma objetiva y estructurada para analizar y registrar actividades que conforman un proceso. Permiten centrar atención en las actividades que agregan valor (Palacios Santos, Tapias García, & Saldarriaga Molina, 2005).

#### 1.3.2 Tipos de diagramas de flujo

Existen diferentes tipos de diagramas de flujo, entre ellos encontramos:

- Diagrama en bloques: Es la forma más simple de presentación, en el cual cada bloque representa una etapa del proceso.
- Diagrama pictórico: Son diagramas de flujo más detallados, los cuales se utilizan para el diseño y operación de un proceso, los pasos se muestran de forma pictórica y estilizada, en ocasiones a escala.

En relación con los modelos analíticos y sistemas químicos se pueden utilizar los diagramas de bloque que es una de las representaciones gráficas más frecuentemente

utilizadas para simplificar sistemas, sirven como ayuda en las simulaciones de cálculo de proceso.

En un diagrama de bloques permanece la misma topografía que en el diagrama de flujo del proceso pero se suprimen los detalles no esenciales. Cada bloque individual se puede representar como un modelo globalizado o bien como uno distribuido, los bloques se unen entre sí como un sistema lineal de elementos globalizados (Himmelblau & Bischoff, 1976).

Los diagramas de bloques son los más utilizados en los experimentos de química, por lo que se propone usar un diagrama de flujo con las características de un diagrama de bloques con el fin de facilitar la identificación de los pasos del procedimiento y la naturaleza de los reactivos generados durante la experimentación.

Dicho diagrama debe contener el balance de materia de entrada y también el balance de materia de salida de los residuos y el posible tratamiento de los mismos, con ayuda de pictogramas.

### **1.3.3 Pictogramas y rombos de seguridad**

Un pictograma es un diagrama que utiliza imágenes o símbolos para mostrar datos para una rápida comprensión. En este se utilizan imágenes o símbolos para representar una cantidad específica y su tamaño o cantidad es proporcional a la frecuencia que representa. En la actualidad es entendido como un signo claro y esquemático que sintetiza un mensaje sobrepasando la barrera del lenguaje; con el objetivo de informar y/o señalar. En un laboratorio de química se encuentran muchas sustancias peligrosas, para lo cual es de gran importancia identificar correctamente los etiquetados y/o símbolos de riesgo que se muestran en los reactivos. Los pictogramas son de color negro y están impresos en cuadrados de color naranja. Las dimensiones mínimas de estos últimos son de 10 mm × 10 mm o al menos un 10% del total de la etiqueta (Figura 1.2).

	CLAVE	DESCRIPCIÓN		CLAVE	DESCRIPCIÓN
	A	Daño al ambiente		Xi	Irritante
	C	Corrosivo		Xn	Nocivo
	E	Explosivo		O	Oxidante
	I	Inflamable		T	Tóxico

**Figura 1.2.** Pictogramas utilizados para identificar riesgos en un laboratorio químico.

La NFPA (National Fire Protection Association), una entidad internacional voluntaria creada para promover la protección y prevención contra el fuego, es ampliamente conocida por sus estándares, a través de los cuales recomienda prácticas seguras desarrolladas por personal experto en el control de incendio. La norma NFPA 704 es el código que explica el diamante del fuego, utilizado para comunicar los peligros de los materiales peligrosos. La norma NFPA 704 a través de un rombo seccionado en cuatro partes de diferentes colores, indicar los grados de peligrosidad de la sustancia a clasificar (Figura 1.3)





**Figura 1.3.** Pictogramas utilizados para identificar riesgos en un laboratorio químico y el diagrama del rombo de colores.

Rojo: Con este color se indican los riesgos a la inflamabilidad.

Azul: Con este color se indican los riesgos a la salud.

Amarillo: Con este color se indican los riesgos por reactividad (inestabilidad).

Blanco: En esta casilla se harán las indicaciones especiales para algunos productos. Como producto oxidante, corrosivo, reactivo con agua o radiactivo. Los símbolos especiales que pueden incluirse en el recuadro blanco son:

**OXI** Agente oxidante

**COR** Agente corrosivo

 Reacción violenta con el agua

 Radioactividad

## **1.4 COLOR**

### **1.4.1 La naturaleza del color**

El color es la sensación que el ser humano percibe gracias a la existencia y naturaleza de la luz y a la disposición de nuestros órganos visuales. Desde el punto de vista físico, el color es luz blanca que se descompone al atravesar un prisma de cristal. Cuando decimos que vemos el color de un objeto nos referimos a la impresión de los rayos de luz que refleja el objeto (Castañeda M., 2005).

La naturaleza del color como una sensación proviene de diversas ondas electromagnéticas, que oscilan entre los 400 y 700 nm; compuestas por partículas de energía. Este es un pequeño rango del espectro electromagnético que es conjunto de todas las radiaciones electromagnéticas, estas radiaciones se describen como campos eléctricos y magnéticos que oscilan en direcciones mutuamente perpendiculares y se propagan en el vacío con la velocidad de la luz. La región visible se extiende desde el color rojo al violeta (Hutton-Jamieson, 1991).

Esencialmente el color es luz: refractada y luz absorbida. La luz blanca está compuesta por colores, estos colores pueden verse al hacerse pasar un rayo de luz blanca a través de un prisma y producir un arcoíris. Existen dos sistemas de color, el color pimiento o sustractivo, y el color aditivo o color luz.

La síntesis aditiva está ampliamente relacionada con la edición digital; principalmente con los sistemas de televisión y la edición asistida por computadora. La síntesis sustractiva está relacionada con el diseño editorial tradicional, los procesos de coloración industrial y la pintura artística. Los métodos pictóricos tradicionales hacen uso de la síntesis aditiva y los métodos virtuales pictóricos asistidos por computadora tienden a la síntesis aditiva.

Podemos definir dos modelos de impresión visual por medio de una síntesis aditiva y una síntesis sustractiva. Pictóricamente el modelo aditivo parte de la ausencia de luz (negro) en el espacio visual; y en él se proporciona el reflejo de la luz al aplicar el colorido. El modelo sustractivo parte del reflejo total de luz (blanco) en el espacio visual; y en él se filtra la luz al aplicar el colorido.

## 1.4.2 Color pigmento

Color pigmento también conocido como color sustractivo, se le denomina de esa manera pues el efecto que provoca es de la resta, lo que implica que a más colores superpuestos o mezclados en una superficie, está más se oscurece, el color sustractivo se emplea en gran cantidad de aspectos de la vida cotidiana, como la pintura artística, automotriz, las artes gráficas, industrial, maquillaje etc., la sustracción de color se basa en el hecho de presuponer que toda superficie sobre la que ha de ser aplicado un color es por naturaleza más luminoso que el resultado que se obtiene.

El color sustractivo tiene unos colores que son básicos llamados así por ser irreductibles, imposibles de obtener por mezcla y de los que se consiguen todos los demás; claro que es preciso anotar que los colores de la naturaleza no siempre se logran imitar con los pigmentos que se obtienen en el mercado, pues estos varían sus colorantes dificultando los intentos de copiar variaciones cromáticas del entorno natural.

De los colores primarios sustractivos se desprenden por medio de la combinación de los colores llamados secundarios, por ser el resultado de la mezcla de primarios así: amarillo + azul = verde; amarillo + rojo = naranja; azul + rojo = violeta. La mezcla de estos colores (en teoría) nos permite ver el negro, y su ausencia el blanco (Figura 1.4).



**Figura 1.4** Diagrama de la mezcla de sustancias del color que absorben la luz de denominado color sustractivo o CMYK (Hutton-Jamieson, 1991).

Sistema de color CMYK (por su siglas en inglés: cyan, magenta, yellow, black or Key) ofrece una imagen cuatricrómica compuesta de los cuatro colores primarios para la impresión: cian, magenta, yellow, negro.

Este modelo de color CMYK es sustractivo: la adición de todos los colores primarios, producen el negro. Este modo solo es operativo en sistemas de operación industrial y en las publicaciones de alta calidad, ya que el resto de los digitalizadores comerciales trabajan en modo RGB (Castañeda M., 2005).

### **1.4.3 Color aditivo**

La técnica de la síntesis aditiva de colores se le atribuye a James Clerk Maxwell (1831-1879, físico escocés), quien mandó a fotografiar un estampado escocés tres veces, cada vez con un filtro de color diferente sobre el lente. Luego las imágenes fueron proyectadas en una pantalla con tres proyectores diferentes que, al unirse en la pantalla, formaron la imagen original en colores, demostrando así los principios de la síntesis de color.

El color aditivo, es otra de las manifestaciones del color; desde la que éste se revela a la mirada de los observadores. Como el mismo nombre lo indica, es un fenómeno en el que al adicionar colores se obtiene más luz, de manera totalmente inversa a la del color sustractivo. Usualmente al color aditivo se le suele llamar color luz, los soportes en los que el color aditivo se reproduce artificialmente, son en sí muy contemporáneos, más el fenómeno de la luz es un fenómeno color luz.

La pantalla de las computadoras, el televisor, las pantallas de cristal líquido, son los soportes más comunes para tal fenómeno los tonos primarios del color aditivo son azul, verde, rojo, desde los que se obtiene todos los colores de la naturaleza. La combinación de los colores primarios aditivos permite llegar al blanco, su ausencia permite el negro y la suma produce las siguientes mezclas: azul + verde = cian; verde + rojo = amarillo; rojo + azul violeta = magenta (Figura 1.4).

Sistema de color RGB: ofrece una imagen tricrómica compuesta por los colores primarios de la luz: rojo, verde, azul. Es el standard de imagen de todo color que se utilice con monitores de video y pantallas de ordenador. Esto es, una imagen construida con 8 bits/pixel por canal (24 bits en total), es decir: 256 tonos por canal= 16 000 000 de colores

(2 elevado a la 24). Exactamente 16,7 millones de colores distintos, mas de los que el ojo humano es capaz de diferenciar (Castañeda M., 2005



**Figura 1.4.** Diagrama de la mezcla de colores denominado color aditivo también conocido como RGB (Hutton-Jamieson, 1991).

## 1.5 ARCILLAS

### 1.5.1 Origen

Los minerales arcillosos son materiales que ocurren en forma natural, y se componen principalmente de minerales de granos finos, los cuales con cantidades apropiadas de agua se tornan plásticos y adquieren dureza cuando se secan o calcinan. Contienen filosilicatos, pero también puede contener otros materiales que le imparten plasticidad o dureza. Las fases asociadas en las arcillas pueden incluir material orgánico y algún material que no imparta plasticidad. Estas fases pueden ser minerales como cuarzo, calcita, dolomita, feldespato, óxidos, hidróxidos, fases orgánicas o fases no cristalinas.

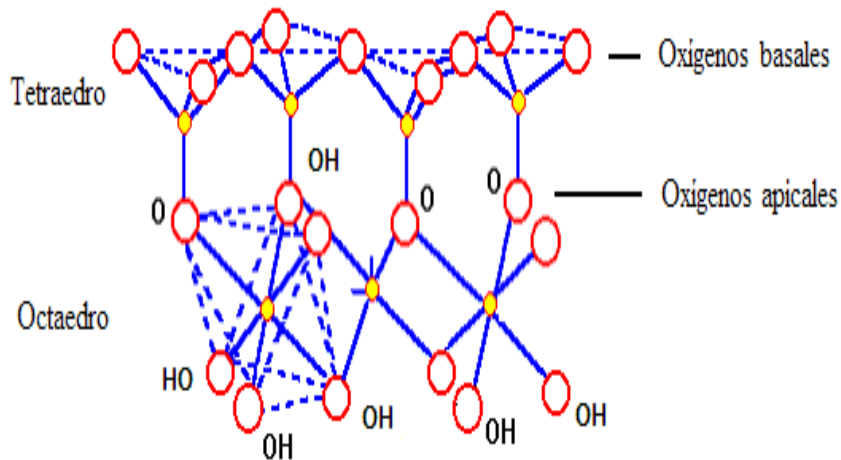
Por tal motivo las arcillas han sido objeto de considerable interés y uso por el hombre desde los tiempos remotos, ya que se trata de un material tradicionalmente ligado a la arquitectura y a la cerámica (Bensoain, 1985).

### 1.5.2 Estructura de los filosilicatos

La estructura de los filosilicatos, está determinada esencialmente por unidades tetraédricas de  $(\text{SiO})_4^{4-}$  que se unen compartiendo tres de sus cuatro oxígenos con otros vecinos formando capas de extensión infinita, en donde los átomos se entrelazan entre sí se denominan basales, los oxígenos que se encuentra en el extremo opuesto se denominan apicales (Velde, 1992).

Los oxígenos apicales de los tetraedros, al mismo tiempo forman parte de una capa octaédrica adyacente de alúmina ( $\text{AlO}_6$ ), en la que cada octaedro individual está unido lateralmente por oxígenos compartidos (Figura 1.5).

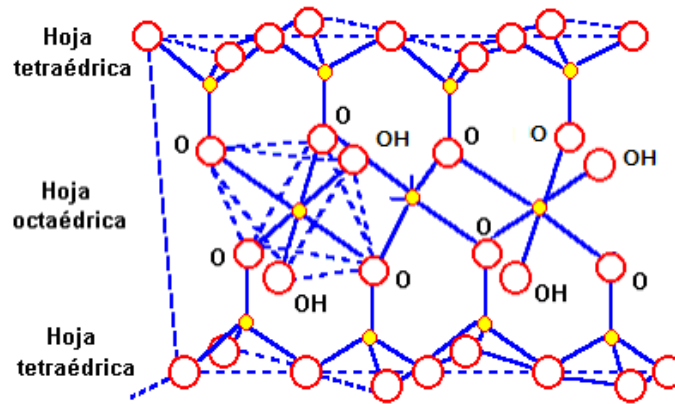
El oxígeno en ocasiones, puede ser sustituido por grupos OH. Los cationes octaédricos usualmente pueden estar representados por, Mg, Fe, pero también pueden existir en combinación con otros cationes de tamaño medio, tales como Li, Ti, V, Cr, Mn, Co, Ni, Cu y Zn (Bailey, 1980).



**Figura 1.5.** Unión entre tetraedro y octaedro a través de oxígenos comunes. ● Átomo de aluminio, magnesio, hierro, etc. ○ Átomo de oxígeno y/o grupo -OH.

Una unión similar puede ocurrir en la superficie opuesta de la capa octaédrica. Así, los filosilicatos pueden estar formados por dos capas: una tetraédrica (T) y una octaédrica (O) y se denominan 1:1, o T:O; o bien por tres capas: una octaédrica y dos tetraédricas,

denominándose 2:1 o T:O:T. A la unidad formada por la unión de una capa octaédrica más una o dos tetraédricas se la denomina lámina



**Figura 1.6.** Lámina TOT o 2:1. ● Átomo de aluminio, magnesio, hierro, etc. ○ Átomo de oxígeno y/o grupo -OH.

La unidad estructural más pequeña contiene tres octaedros. Si los tres octaedros están ocupados, es decir que tiene cationes en sus centros, la capa es clasificada como trioctaédrica; mientras que cuando dos de los octaedros están ocupados y el tercer octaédrico está vacante, la capa es clasificada como dioctaédrica (Figura 1.6).

### 1.5.3 Clasificación de los filosilicatos

Los sitios tetraédricos y octaédricos en la estructura de los filosilicatos, ocupados por Si, Al respectivamente, presentan sustituciones isomórficas por átomos de menor carga. El catión tetraédrico por Si por átomos de Al o Fe y los cationes octaédricos por Al, Mg, Fe y Fe, pero pueden ocurrir otros cationes de tamaño medio, tales como Li, Ti, V, Cr, Mn, Co, Ni, Cu y Zn, estas sustituciones generan una carga en la estructura. En la Tabla 1.7 se encuentra la clasificación de los filosilicatos, en función del tipo de lámina, (1:1 ó 2:1), en grupos en función de la carga, subgrupos en función del número de sustituciones de los octaedros y en especies, en función del tipo de catión en la sustitución isomórfica (Brindley & Brown, 1980).

<b>Tabla 1.7</b> Esquema de clasificación para filosilicatos relacionados con los minerales arcillosos.			
Tipo de lámina	Grupo ( $\underline{x}$ = carga por fórmula unitaria)	Subgrupo	Especies
1:1	Caolinita-serpentina	Caolinita	Caolinita, dickita, haloisita
	$\underline{x} \sim 0$	Serpentina	Crisotila, lizardita, amesita
2:1	Pirofilosilicato-talco	Pirofilita	Pirofilita
	$\underline{x} \sim 0$	Talco	Talco
	<i>Esmectita</i>	<i>Esmectita dioctaédrica</i>	<i>Montmorillonita, beidelita</i>
	$\underline{x} \sim 0.2-0.6$	Esmectita trioctaédrica	Saponita, hectorita, sauconita
	Vermiculita	Vermiculita dioctaédrica	Vermiculita dioctaédrica
	$\underline{x} \sim 0.6-0.9$	Vermiculita trioctaédrica	Vermiculita trioctaédrica
	Mica	Mica dioctaédrica	Muscovita, paragonita
	$\underline{x} \sim 1$	Mica trioctaédrica	Phlogopita, biotita, lepidolita

#### 1.5.4 Estructura de las esmectitas

Las esmectitas son minerales arcillosos dioctaédricos o trioctaédricos de estructura laminar 2:1 con una carga por fórmula unitaria ( $x$ )  $\sim 0.2-0.6$ . Es importante mencionar que los minerales arcillosos que predominantemente tienen esmectitas se les denomina bentonitas. La especie montmorillonita es el componente principal de muchas bentonitas (entre 80-90% en peso), el remanente consiste de una mezcla de impurezas minerales incluyendo cuarzo, cristobalita, feldspatos y otros minerales arcillosos, dependiendo de su origen geológico.

La montmorillonita (Zavala, 1994; Gonzalez, 1996) es un mineral arcilloso que esencialmente se ha formado por descomposición superficial de rocas, por la acción de agentes atmosféricos, por procesos hidrotermales a bajas temperaturas, por alteración del polvo volcánico en capas estratificadas o por la acción de las aguas circulantes de origen desconocido a lo largo de las fracturas o vetas.



La montmorillonita se encuentra sustituida isomórficamente en la capa tetraédrica por  $Al^{3+}$  y en la capa octaédrica por  $Mg^{2+}$ , esto genera exceso de cargas negativas, de manera que el balance de carga se mantiene por la presencia de cationes hidratados tales como  $Na^+$ ,  $K^+$ ,  $Ca^{2+}$ ,  $Mg^{2+}$ , etc., o de moléculas polares en el espacio interlaminar, generando la expansión de la red estructural. La fórmula general de este mineral arcilloso es  $Ca_{0.2}(Al, Mg)_2Si_4O_{10}(OH)_2 \cdot xH_2O$ .

Cuando moléculas polares son insertadas entre las capas, las láminas se abren exponiendo de esta manera su superficie interna. Otra forma de aumentar el área expuesta es modificando la polaridad de la superficie mediante un tratamiento ácido y por activación termoácida (Didi, Makhoukhi, Azzouz, & Villemin, 2009), este último permite, además, eliminar carbonatos y otros óxidos que se pueden encontrar como impurezas que en forma natural contiene la arcilla, y lo más importante, es que genera centros ácidos  $H^+$  y/o  $H_3O^+$  que la convertiría en un potencial material para ser empleado en adsorción (Tuesta, Vivas, & Gutarra, 2005). Durante el proceso de activación, los protones atacan a los grupos  $OH^-$  de las capas internas de la estructura laminar.

Esta deshidroxilación produce, a su vez, la eliminación de los cationes metálicos (aluminios) de los sitios octaédricos generando un nuevo poro, como se puede apreciar de la Figura 1.7.

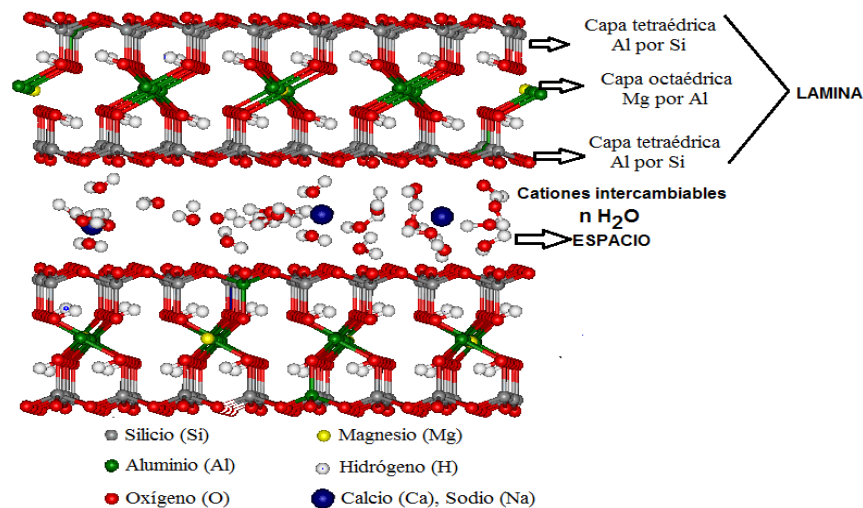


Figura 1.7. Estructura laminar de la montmorillonita (Tuesta, Vivas, & Gutarra, 2005).

### **1.5.5 Propiedades fisicoquímicas de las montmorillonitas**

Las montmorillonitas tienen gran interés industrial, esto es debido a sus aplicaciones potenciales, bajo costo y propiedades fisicoquímicas, entre las que se cuentan la expansión por absorción de agua y moléculas específicas, (Olsewka, 2006), actividad catalítica (Issaadi, Garin, & Chitour, 2006) en la formación de nuevos catalizadores estructurados, en aplicaciones biomédicas (Kannan, Salacinski, Butler, & Seifalian, 2005), etcétera.

### **1.5.6 Caracterización de arcillas**

Actualmente las arcillas industriales que se expenden como adsorbentes, son tratadas previamente con ácidos y no caracterizadas apropiadamente, por lo que se presentan variaciones en sus componentes químicos, con impurezas que modifican la reactividad. De ahí se enfatiza la importancia de una caracterización apropiada de las arcillas naturales, tanto para el uso industrial docencia e investigación.

La etapa de purificación para la remoción de impurezas insolubles y solubles es fundamental para que los resultados experimentales sean reproducibles y atribuibles a la arcilla, permitiendo su transformación en materiales más reactivos.

La finalidad principal de la caracterización consiste en correlacionar el comportamiento del adsorbente y/o catalizador con sus propiedades fisicoquímicas y con esto predecir su comportamiento catalítico en el proceso que va a ser empleado (Caballero Suárez, 2002).

### **1.5.7 Determinación de las propiedades texturales de adsorbentes por la técnica de adsorción desorción de nitrógeno**

Dentro de las características de mayor importancia en los adsorbentes y catalizadores sólidos se encuentran las propiedades texturales, tales como área superficial específica, volumen, tamaño y distribución de diámetro de poros (Bertagnolli, Kleinübing, & Carlos Da silva, 2011).

Existen diversas técnicas para la determinación de propiedades texturales, entre ellas Porosimetría de Hg, Adsorción de N<sub>2</sub> a 77 K (Leofanti, 1998). La medida del área específica de un sólido y el estudio de su estructura porosa, se realizan generalmente mediante la impregnación del sólido con una sustancia líquida o gaseosa, la cual no

reacciona con el sólido. Sin embargo, la técnica más común es la de adsorción-desorción física de nitrógeno, es un método basado en la propiedad que tienen las moléculas de un gas de ser adsorbidas por una superficie sólida.

Una vez adsorbido y desorbido el gas, los datos son manejados por diversos métodos utilizando estas mediciones. Para obtener el área superficial específica, por ejemplo, el método de Brunauer, Emmett y Teller, conocido como método de BET (Sing, Everett D., Haul, L., & Pierotti R., 1985) es uno de los empleados.

Adicionalmente, la distribución del tamaño de poros se obtiene por el método de Bjerrum-Joiner-Halenda, conocido como método BJH.

### **1.5.7.1 Método de BET**

Lo que se denomina “método de BET”, no es en realidad un método, sino una interpretación de los datos que constituyen una isoterma de adsorción, basada en un modelo propuesto por los autores antes mencionados. Los verdaderos y distintos métodos son los resultantes de las diversas técnicas experimentales que se utilizan para obtener isotermas de adsorción (Bruauner 1938).

Dichas técnicas experimentales así como su interpretación, están basadas en la propiedad que tienen las moléculas de un gas de ser adsorbidas por una superficie de cualquier sólido, eso hace que la concentración de moléculas del gas en la cercanía del sólido, sea mayor que en la fase gaseosa, formándose una interface entre el gas y el sólido. Este fenómeno universal y espontaneo ha recibido el nombre de adsorción (Caballero Suárez, 2002).

La variada intensidad con la que se adhieren a la superficie las moléculas adsorbidas, ha originado que se clasifique al fenómeno adsorbido en adsorción física y adsorción química. En el primer caso, la fuerza de adsorción es un efecto colectivo de los átomos del solido sobre la molécula adsorbida; esta fuerza, debido a su debilidad, permite eliminar la capa fisisorbida por simple calentamiento vacío.

Sin embargo, en la adsorción química la fuerza de interacción es más intensa y localizada, pudiéndose comparar a un enlace químico en que solo intervienen algunas moléculas del sólido. Las moléculas adsorbidas químicamente no puede eliminarse tan solo por vacío y por calentamiento, sino que el sólido tiene que ser sometido a altas

temperaturas y aun este procedimiento puede ser suficiente. La teoría de BET se aplica al caso de adsorción física.

Como se dijo anteriormente, el punto de partida del método es una isoterma de adsorción de un gas sobre el sólido, en condiciones de equilibrio termodinámico habrá  $N_a$  de moléculas de gas adsorbidas sobre la superficie del sólido, el número de las moléculas  $N_a$  se puede convertir a un volumen adsorbido  $V_a$  a condiciones normales de temperatura y presión mediante la ley de gases ideales:

$$PV_a = N_a RT \quad (1.6)$$

Donde P y T corresponden a la temperatura ambiente y a la presión atmosférica estándar, respectivamente. Manteniendo fija la temperatura T es posible variar la presión P del equilibrio y para cada valor específico de la presión se tendrá un nuevo valor de  $V_a$  contra P se le llama isoterma de adsorción.

Existen diversas formas para presentar una isoterma de adsorción, una de las más consistentes es graficar  $V_a/M$  contra  $P/P_a$  donde  $P_a$  es la presión de saturación del gas en presencia de la muestra. El cociente de  $P/P_a$  se conoce como presión relativa del gas.

Es posible entender la forma de las isotermas de manera cualitativa, en base a los principios físicos y a modelos del proceso adsorptivo. Como anteriormente se mencionó, la interpretación de los resultados experimentales en el trazo de la isoterma, se realiza generalmente a través del citado método de BET, en el cual se supone que la adsorción es física de muchas capas (multicapas) que las fuerzas de interacción entre las moléculas del gas son iguales a las fuerzas responsables de la condensación de vapores; basándose en estas condiciones se obtiene, a través de una derivación cinética o estadística. El área A que se obtiene de esta manera, depende del gas utilizado como adsorbato, y por esta razón existe una tendencia a usar nitrógeno como gas de referencia, expresando todos los resultados en relación con este gas.

## 1.6 BENTONITA

El término bentonita fue propuesto por primera vez por Knight en 1898 (D'Orazio & Quagliarini, 2010) y según Wright, (Early Grim & Güven, 1978) es una arcilla que está compuesta con más del 50% de minerales de montmorillonita  $Al(OH)_2/Si_8O_{16}.nH_2O$  (hidroxialuminosilicato). Se puede encontrar en una variedad de colores que varían desde el blanco o grisáceo a rojo (Zavala, 1994; Gonzalez, 1996) .El nombre de bentonita proviene de Fort Benton (Estados Unidos) este es un término pictográfico usado para designar yacimientos terrosos no consolidados que componen principalmente minerales arcillosos montmorilloníticos. Como definición de arcilla se tiene "roca sedimentaria de aspecto detrítico compuesta básicamente por silicatos de aluminio hidratado".

El conocimiento de la naturaleza de las arcillas y la sistematización de sus propiedades comenzó lentamente en el siglo XVIII, después de varios estudios se ha descubierto que los componentes de la bentonita son cristalinos, y se diferenció de la montmorillonita, antes de estos estudios se suponía que las arcillas eran materiales amorfos (Bensoain, 1985).

Con el tiempo no sólo se descubrió que la bentonita podía convertirse en un buen adsorbente para decolorar aceites, grasas y ceras si se trataba primero con ácidos minerales, sino que también podía catalizar reacciones químicas, poniendo de manifiesto su carácter ácido de Lewis y de Brønsted- Løwry. La actividad de estos sitios ácidos están profundamente influenciada por el contenido de agua, la acidez de tipo Brønsted- Løwry proviene de los iones hidronio que ocupan sitios de intercambio sobre la superficie (P. Poole Jr. & J. Owens, 2003).

Las arcillas son constituyentes esenciales de gran parte de los suelos y sedimentos debido a que son, en su mayor parte, productos finales de la meteorización de los silicatos que, formados a mayores presiones y temperaturas, en el medio exógeno se hidrolizan.

### **1.6.1 Usos de las bentonitas**

Actualmente la importancia de las bentonitas (Bensoain, 1985) se extiende a diversas actividades, por ejemplo:

1. En la industria cerámica, para la fabricación de porcelana, lozas, ladrillos y tuberías.
2. Industria del cemento.
3. Industria del papel, en los papeles transparentes que requieren el uso de bentonita cálcica.
4. Industria de los aceites, por sus propiedades adsorbentes.
5. Agricultura, en problemas de contaminación por pesticidas o insecticidas agrícolas.
6. Nutrición animal, en alimentación del ganado como vehículo de ayuda en los procesos de transformación de los alimentos, en la alimentación de aves, para estimular el desarrollo de la cascara de huevo.
7. Industria de vino como clarificante.
8. Industria del petróleo como catalizadores en el proceso de "cracking", en oxidaciones catalíticas.
9. Electrónica, en la confección de aislantes.
10. Industria farmacéutica.
11. Ingeniería de suelos, como factor determinante de muchas propiedades mecánicas.
12. Fabricación de ciertas grasas y lubricantes.
13. Industria de caucho y plásticos.

En México se cuenta con yacimientos bentoníticos en Tlaxcala, Durango y Puebla. (Vargas-Rodríguez, 2008)

## 1.7 COLORANTES

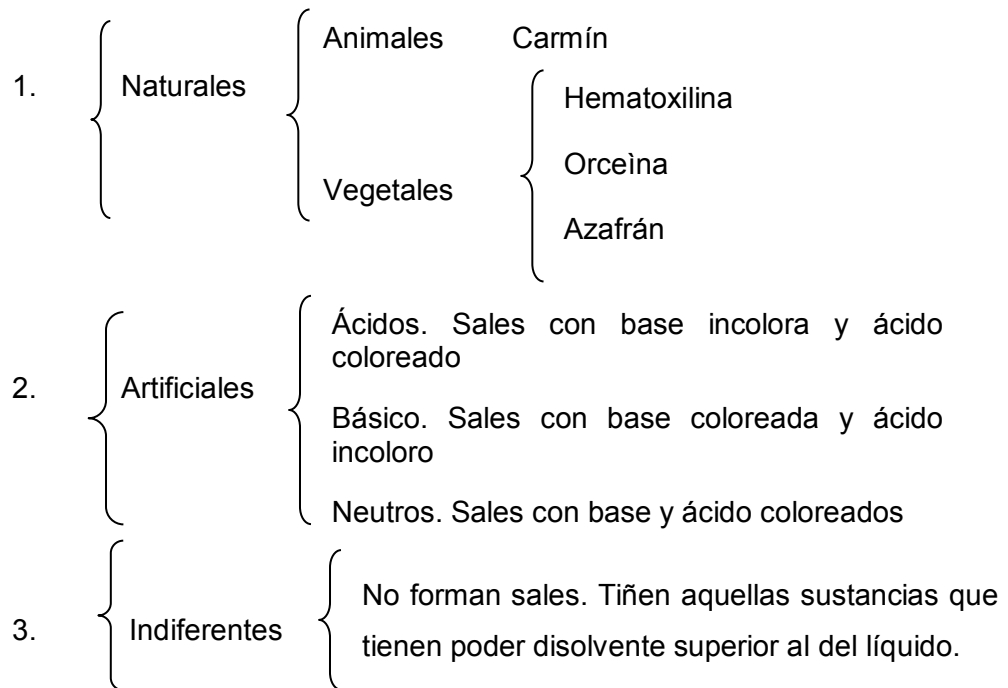
### 1.7.1 Origen de los colorantes

Desde las primeras civilizaciones el hombre usó colorantes naturales como material para realizar sus pinturas rupestres. Los pigmentos o sustancias coloreadas se extraían de plantas, animales y minerales. Estas materias eran empleadas para teñir telas, pintar las pieles y fabricar objetos religiosos y recreativos.

Se da este nombre a sustancias coloreadas, las cuales son capaces de teñir las fibras vegetales y animales. Para que un colorante sea útil, debe ser capaz de unirse fuertemente a la fibra, y por lavado no debe perder su color debe ser químicamente estable y soportar la acción de la luz.

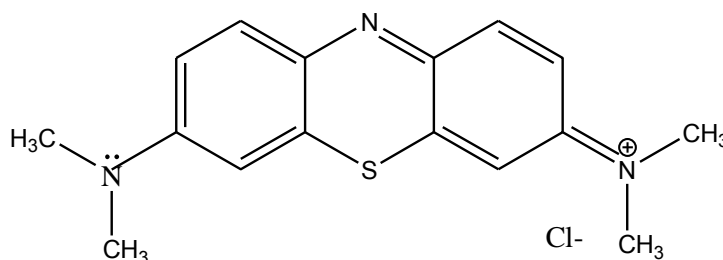
Las primeras civilizaciones usaban colorantes naturales extraídos de plantas, animales y minerales. Estas materias eran empleadas para teñir ropa, pintar las pieles y fabricar objetos religiosos y recreativos. Las sustancias vegetales más empleadas eran: palo de Campeche, cúrcuma, índigo natural y la cochinilla.

### 1.7.2 Clasificación de los colorantes



### 1.7.3 El azul de metileno

Este colorante fue descubierto por Caro en 1878 (El Qada, Allen, & Walker, 2006), tiene forma de cristales o polvo cristalino, cuya fórmula molecular es  $C_{16}H_{18}ClN_3S \cdot 2H_2O$  (Hammed B., Din, & Ahmad, 2005) Figura 1.8, presenta un color verde oscuro, con brillo bronceado. Es inodoro y estable al aire, sus disoluciones en agua son de color azul profundo. Por definición es un colorante básico con propiedades catiónicas procedentes del nitrógeno cargado positivamente y los átomos de azufre, la carga es generalmente deslocalizada en los átomos de Nitrógeno.



**Figura 1.8.** Estructura molecular del azul de metileno

El azul de metileno puede acusar lesiones a personas y animales con síntomas que incluyen quemaduras en los ojos, respiración rápida o difícil por inhalación, así como náuseas vómitos, confusión mental entre otros si se ingiere (Franca, Oliveira, & Ferreira, 2009). Este colorante fue importante para la coloración de la seda y del algodón. Además, presenta una sorprendente afinidad para diferentes bacterias a las que colorean selectivamente en los tejidos normales. Por ello se utiliza para reconocer las infecciones bacterianas. Aunque su auge en la industria textil es importante, provoca muchos inconvenientes ya que provoca daños en los sistemas acuáticos, debido a este hecho y a las normas ambientales que son cada vez más rigurosas en el sentido de la calidad del agua, y de los desechos industriales, un método que ha servido de gran ayuda es la adsorción, que es un proceso de separación, ayuda a clarificar y descontaminar el agua (Rauf, Qadri, Ashraf, & Al-Mansoori, 2008). En la Tabla 1.8 se resumen algunas de las propiedades de este colorante.



<b>Tabla 1.8</b> Propiedades del azul de metileno	
Nombre químico	Cloruro de tetrametilitionina 3,7-bis (dimetilamino)- Cloruro de fenazationio.
Fórmula	C <sub>16</sub> H <sub>18</sub> N <sub>3</sub> ClS
Masa molecular	373.9 g/mol
Punto de fusión	100°C
Punto de ebullición	Se descompone

## 1.8 FLAVONOIDES

Flavo proviene del latín flavus que significa de color entre amarillo y rojo y flavonoide se refiere a un grupo aromático, estos compuestos fueron descubiertos por el premio Nobel Szent-György en 1930. Los flavonoides son compuestos de bajo peso molecular que comparten un esqueleto común de difenilpiranos, compuesto por dos anillos de fenilos ligados a través de un anillo de pirano, estos compuestos se encuentran en frutas, verduras y semillas, así como en la cereza, vino, té verde, té negro y soja, los cuales son consumidos de forma habitual en la dieta humana, los flavonoides también se encuentran en extractos de plantas como arándano, ginkgo biloba y cardo, dichos compuestos desempeñan un papel importante en la biología vegetal.

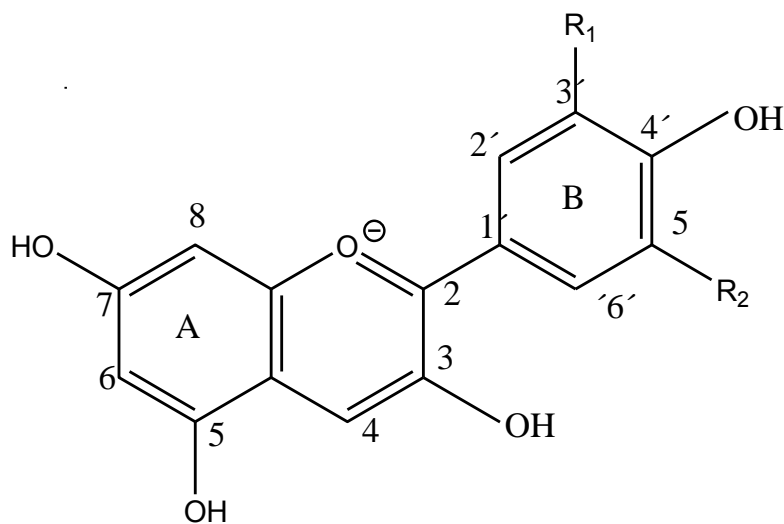
Los flavonoides se sintetizan en las plantas y participan en la fase independiente de la luz de la fotosíntesis durante la cual se catalizan el transporte de electrones, su formación tiene lugar a partir de los aminoácidos aromáticos fenilalanina y la tirosina y también de unidades de acetato. La fenilalanina y la tirosina dan lugar al ácido cinámico y al ácido parahidroxicinámico, que al condensarse con unidades de acetato, originan la estructura cinamol de los flavonoides. Posteriormente se forman los derivados glicosilados o sulfatados.

Los flavonoides al ser parte fundamental de la biología vegetal responden a la luz controlando los niveles de las auxinas (hormonas vegetales) reguladoras del crecimiento; intervienen en la diferenciación de las plantas y potencian la polinización al conferir coloración. Por lo tanto lo podemos encontrar en los siguientes grupos:

1. Ácido elálgico: se encuentra en frutas como la uva y las verduras.
2. Antocianidinas: pigmentos responsables de los colores rojo-azulado y rojo de las cerezas.
3. Catequina: se encuentra en el té negro y verde.
4. Citrofalvoniodes: como la quercetina, limoneno, rutina, naranjina.
5. Isoflavonoides: tales como la genisteína y la daidzeína, presentes en los alimentos, proteína vegetal.
6. Kaemferol: encontrándose en brócolis endibias y rábanos.
7. Proantocianidinas: que aparecen en las semillas de las uvas, en el extracto de corteza de pino marino y en el vino tinto.

### 1.8.1 Características y propiedades físico-químicas de las antocianinas

Las antocianinas pertenecen a una subclase de los flavonoides estos compuestos son glúcidos de antocianidinas hidrosolubles, pertenecientes a la familia de los flavonoides, (Pastrana Bonilla & Gutiérrez Guzmán, 2009) compuestos por dos anillos aromáticos A y B unidos por una cadena de 3 carbonos (C) Figura 1.9. En la Tabla 1.9 se muestran las diferentes variaciones estructurales de las antocianinas la cuales dependen de los sustituyentes dichas estructuras ya tienen un nombre conocido.



**Figura 1.8.** Estructura base de las antocianinas

<b>Tabla 1.9.</b> Estructura y sustituyentes de las Antocianinas (Durst & Wrolstad, 2011)			
Aglicona	Substitución		$\Lambda_{\text{máx}}(\text{nm})$
	R1	R2	Espectro Visible
Pelargonidina	H	H	494 (Naranja)
Cianidina	OH	H	506 (Naranja-Rojo)
Delfinidina	OH	OH	508 (Azul-Rojo)
Peonidina	OCH <sub>3</sub>	H	506 (Naranja-Rojo)
Petunidina	OCH <sub>3</sub>	OH	508 (Azul-Rojo)
Malvidina	OCH <sub>3</sub>	OCH <sub>3</sub>	510 (Azul-Rojo)

Dichas antocianinas están presentes en la naturaleza en forma de pigmentos, en flores, frutos, bayas y hojas con grandes variedades de estructuras químicas, concentraciones y siendo característica de cada material y atributo específico para la caracterización del mismo. También se considera que son metabolitos secundarios de las plantas con actividad biológica. Están presentes en diferentes órganos de las plantas, (Vargas Simón, Soto Hernández, & Rodríguez González, 2002) tales como frutas, flores, tallos, hojas y raíces, (Castañeda-Ovado, Pacheco-Hernández, Páez-Hernández, Rodríguez, & Galán-Vidal, 2009).

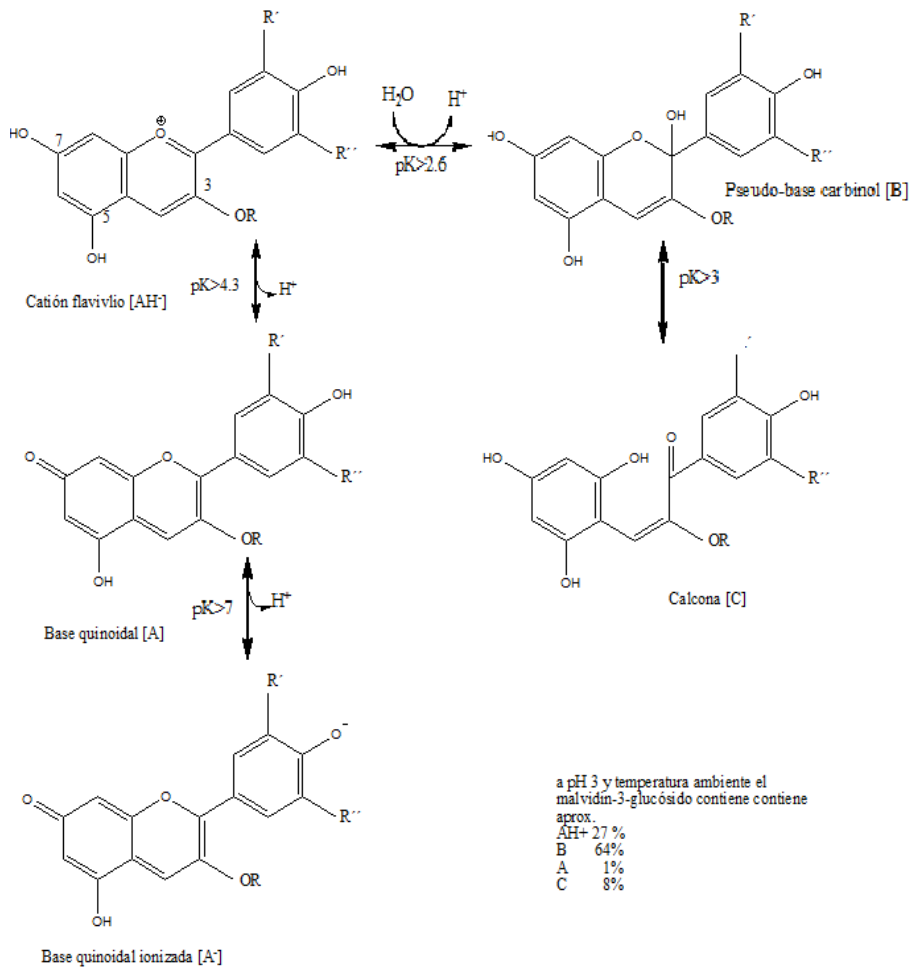
Estos pigmentos son normalmente encontrados disueltos uniformemente en la disolución vacuolar de células epidérmicas. Sin embargo, en ciertas especies, las antocianinas son localizadas en regiones discretas de la vacuola celular, llamadas antocianoplastos. La principal fuente de antocianinas (Edionwe, Villareal, & Smith K., 2011) son frutas rojas, principalmente bayas y uvas rojas, cereales, principalmente maíz morado, vegetales y vino rojo; entre los frutos rojos podemos mencionar los arándanos que se encuentran en dos diferentes colores de acuerdo a su etapa de maduración, y contiene distintos tipos de antocianinas.

El color de las antocianinas depende de varios factores intrínsecos, (Garzón, 2008) como son los sustituyentes químicos que contenga y la posición de los mismos en el grupo favilio; por ejemplo, si se aumentan los hidroxilos del anillo fenólico se intensifica el color azul, mientras que la introducción de metoxilos provoca la formación del color rojo, un ejemplo son las antocianinas presentes en el arándano rojo

## 1.8.2 Factores que afectan a las antocianinas

A pesar de las ventajas que las antocianinas ofrecen posibles sustitutos de los colorantes artificiales, su incorporación a matrices alimenticias o productos farmacéuticos y cosméticos son limitadas debido a su baja estabilidad durante el procesamiento y almacenamiento. Factores como su misma estructura química, pH, concentración, temperatura, presencia de oxígeno, ácido ascórbico, determinan la estabilidad del pigmento (Garzón, 2008).

a) El efecto de pH: El pH tiene un efecto en la estructura y la estabilidad de las antocianinas Figura 1.9. La acidez tiene un efecto protector sobre la molécula. En soluciones acuosas a valores de pH inferiores a 2, básicamente 100% del pigmento se encuentra en su forma más estable o de ion oxonio o catión flavilio ( $AH^+$ ) de color rojo intenso.



**Figura 1.9.** Estructura de las antocianinas a diferentes valores de pH.

b) Efecto de la temperatura: Incrementos de la temperatura resultan en pérdida de azúcar glicosilante en la posición 3 de la molécula y apertura del anillo con la consecuente producción de chalconas incoloras (Garzón, 2008).

c) Efecto del oxígeno y del ácido ascórbico: el efecto degradativo del oxígeno y del ácido ascórbico sobre la estabilidad de las antocianinas está relacionado. El efecto del ácido ascórbico sobre la estabilidad de las antocianinas ha sido explicado como una posible reacción de condensación entre el ácido y los pigmentos.

d) La concentración del pigmento y la actividad del agua afectan la estabilidad del color. Cuando la concentración de antocianinas alcanza valores altos, se presentan fenómenos de autoasociación entre los dos cationes flavilo, dos formas hemiacetal, dos bases quinoidales, e inclusive entre la base quinoidal y un catión flavilo y protegiendo la molécula de antocianina. Por otro lado, incrementos en la actividad del agua del medio causan degradación de las antocianinas probablemente debido a una mayor interacción entre el agua y el catión flavilo para formar una pseudobase inestable (Aguilera-Ortíz, Alanis-Guzmán, García-Díaz, & Hernández-Brenes, 2009).

### **1.8.3 Propiedades funcionales**

El interés en los pigmentos antociánicos se ha intensificado recientemente debido a sus propiedades farmacológicas y terapéuticas. Durante el paso del tracto digestivo al torrente sanguíneo de los mamíferos, las antocianinas permanecen intactas y ejercen efectos terapéuticos conocidos que incluyen la reducción de la enfermedad coronaria, efectos anticancerígenos, antitumorales, antiinflamatorios y antidiabéticos; además del mejoramiento de la agudeza visual y del comportamiento cognitivo. Los efectos terapéuticos de las antocianinas están relacionados con su actividad antioxidante. Estudios con fracciones de antocianinas provenientes del vino han demostrado que estas son efectivas en atrapar especies reactivas del oxígeno, además de inhibir la oxidación de lipoproteínas y la agregación de plaquetas (Aguilera Ortiz, Reza Vargas, Chew Madinaveitia, & Meza Velázquez, 2011).

## **1.9 ARÁNDANO**

El arándano alto (*Vaccinium corymbosum L.*) es una planta nativa del hemisferio norte la cual ha sido cultivada para su comercialización por años en el este de Canadá y en los Estados Unidos. Los frutos y hojas de las especies de *Vaccinium* han sido usados históricamente con fines medicinales por nativos norteamericanos para combatir infecciones urinarias, cálculos del riñón, inflamaciones, como diurético y como astringente (Vuarant, 2010).

### **1.9.1 Características**

En cuanto a la morfología de los arándanos, es posible mencionar que se trata de arbustos rectos siempre verdes, con hojas alternas, enteras o cerradas, las flores axilares o terminales, en racimo y el fruto tiene forma de una baya esférica de color rojo (Kim, Yu, Kim, & Lee, 2011).

El fruto del arándano requiere de 2 a 3 meses para madurar, dependiendo del tiempo, tipo de madera dejada en la poda y el cultivar. Si los frutos son cosechados con coloración rosada, el proceso de maduración es más largo (Buczacki, 1994). Los tipos de arándanos que existen son tres: el arándano “alto”, *Vaccinium corymbosum L.*; el arándano “ojo de conejo”, *V. ashei R.*; y el arándano “bajo”, *V. angustifolium* (Vuarant, 2010).

El arándano se cultiva en todos los continentes, siendo su centro de producción los Estados Unidos y Canadá. El 60% de la producción se destina a la industria, en la elaboración de dulces, pasteles, helados y yogures; sin embargo año tras año se descubren nuevos usos (Barrios Núñez, Sánchez, Ruíz Vega, & Scott D., 2008). En particular se ha puesto especial atención a los estudios sobre arándanos y su comportamiento durante el almacenamiento que muestran una relación positiva entre la capacidad antioxidante y el contenido de antocianinas (Barrat, 2005).

### **1.9.2 Beneficios que aporta el arándano**

El fruto del arándano tiene la capacidad de proteger y fortalecer las paredes de los pequeños vasos sanguíneos conocidos como capilares. Esto lo hace útil en el tratamiento y la prevención de venas varicosas, flebitis y hemorroides, al igual que en la prevención de problemas de la visión causados por la ruptura de pequeños vasos sanguíneos en los

ojos. El arándano contiene además unas sustancias conocidas como antocianidinas que ayudan a fortalecer el colágeno.

El arándano es una fuente rica en antocianinas (Lohachoopol, Mulholland, Srzednicki, & Craske, 2008) y antioxidantes para la dieta, existiendo muchos cultivares y especies nativas de estos berries con altos niveles, estos niveles de antocianinas varían según la estación y la localización de la planta. Las antocianinas y polifenoles (Ramos Escudero, Muñoz, Alvarado-Ortíz Ureta, & Yáñez A., 2010) son componentes importantes en la calidad de los alimentos por su contribución en la apariencia, en el sabor y sobre todo porque son beneficiosos contra enfermedades.

Otros beneficios que aportan los arándanos, ya sean estos silvestres o cultivados, es que ayudan a reducir desórdenes en el tracto urinario (Neri Ruz, y otros, 2009) y su actividad anticancerígena.

México, posee ventajas para la producción de arándanos con relación a sus competidores: Los estados más representativos por su producción son Michoacán (600 Ha.) y Jalisco (400 Ha). Prácticamente la totalidad de la producción nacional de arándano se destina al mercado de exportación.

Los principales estados productores en México son:

Michoacán, Jalisco, Nayarit, Hidalgo, Baja California, Veracruz, Puebla, Chihuahua.

## CAPITULO 2

### ELABORACIÓN DE UN DIAGRAMA DE FLUJO Y CARTAS DE COLOR

En este capítulo, se presentan reglas para elaborar un diagrama de flujo ecológico, también se muestran una carta que contiene una serie de matices que van desde el rojo hasta el verde, los cuales serán utilizados como fondo de cada uno de los símbolos del diagrama de flujo, indicando según el color, el número de principios de la química verde que cumple el experimento de laboratorio, así como los códigos de los modelos en los sistemas RGB y MCYK.

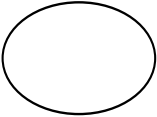
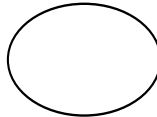



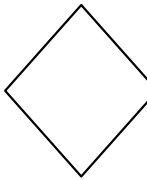
Finalmente se presenta otra carta de colores para indicar el tipo de residuos (agua/ disoluciones acuosas con solutos biodegradables, residuos reutilizable y residuos que requieren tratamiento).

#### 2.1 DIAGRAMAS DE FLUJO

##### 2.1.1 Símbolos y significado para la elaboración de un diagrama de flujo

En el presente trabajo, se propone usar diagramas de flujo en bloques para el caso de los experimentos de laboratorio de cinética química y catálisis. Los símbolos a utilizar, son los propuestos por la Organización Internacional para la Estandarización (ISO, por sus siglas en inglés) y por el Instituto Nacional Americano de Estandarización (ANSI, por sus siglas en inglés) NORMAS ANSI / ISA S 5.1- 1984 (R1992). Estos símbolos serán adecuados al proceso de laboratorio, de acuerdo a la Tabla 2.1.






<b>Tabla 2.1.</b> Símbolos y significado para la elaboración de un diagrama de flujo de un experimento de laboratorio.		
Símbolo	Significado	Aplicación en los experimentos de laboratorio
	Inicio del proceso	Se utiliza para indicar el inicio de un diagrama; de la cual sólo puede salir una línea de flujo. Lleva el título general y/o de cada etapa del experimento.
	Final del proceso	Se aplica para indicar el final del experimento, contiene la palabra residuos.
	Entrada General	Se emplea para indicar los reactivos que entran al proceso, el volumen, el peso y la concentración.
	Salida General	Se utiliza para indicar los productos o residuos que salen en cualquier etapa del proceso o al final del mismo se indicará el volumen o peso de ellos, los componentes y sus composiciones respectivas y pueden salir uno o varios procesos para indicar la disposición o tratamiento de los residuos.
	Acción/Proceso General	Se destina para dar una instrucción general que debe realizar el alumno para el desarrollo del experimento. Si es posible se debe indicar la transformación de los reactantes y concentraciones correspondientes
	Decisión	Se aplica para la comparación de los datos y dependiendo del resultado (falso o verdadero) se toma la decisión de seguir un camino del diagrama u otro.











## 2.2 CARTAS DE COLOR

Para la realización de las cartas de color (Artigas M., Capilla, & Pijol, 2002) se seleccionaron 13 colores, desde rojo hasta el verde pasando por matices de colores intermedios. Para facilitar la identificación adecuada del color al utilizar en la computadora, se presentan los códigos en el modelo de color RGB y para no tener confusiones del color impreso, se muestran los códigos de acuerdo al modelo CMYK (Tabla 2.2).

### 2.2.1 Codificación del color en función del número de principios de la química verde

Cada color indica el Número de Principios de la Química Verde que Cumple el Experimento (PQVCE) o esa etapa del proceso. Por ejemplo el color rojo (RGB: 226, 6, 20), indica que se cumplen cero principios de la química verde y el color amarillo (RGB: 255, 237,0) muestra que el experimento cumple 6 principios (Tabla 2.2)




<b>Tabla 2.2.</b> Codificación del color en función del número de principios de la Química Verde que cumple el Experimento (PQVCE).			
No. PQVCE*	Color observado	Modelo de color RGB	Modelo de color CMYK
0		226, 6, 20	0.00, 1.00, 1.00, 0.00
1		231,69,16	0.00, 0.23, 0.93, 0.09
2		237,110,5	0.00, 0.54, 0.98, 0.07

<b>Tabla 2.2.</b> Codificación del color en función del número de principios de la Química Verde que cumple el Experimento (PQVCE) (Continuación).			
3		243,146,0	0.00, 0.40, 1.00, 0.05
4		249,179,0	0.00, 0.28, 1.00, 0.02
5		255,210,0	0.00, 0.18, 1.00, 0.00
6		255,237,0	0.00, 0.07, 1.00, 0.00
7		239,227,0	0.00, 0.05, 1.00, 0.06
8		214,217,0	0.01, 0.00, 1.00, 0.15
9		187,207,0	0.10, 0.00, 1.00, 0.19
10		157,196,26	0.20, 0.00, 0.87, 0.23
11		122,185,41	0.34, 0.00, 0.78, 0.27
12		79,174,50	0.55, 0.00, 0.71, 0.32

También se propone la clasificación de los residuos con base a su disposición como: residuos que requieren tratamiento, reutilizables y disolventes acuosos con solutos biodegradables, de acuerdo a los colores en la Tabla 2.3. Así mismo se plasma los códigos de los modelos BGB y MCYK.

## 2.2.2 Codificación del color en función del tipo de residuos

En la siguiente tabla se plasman los colores con los cuales se clasifica a los residuos según su tipo de tratamiento, así como codificación de color.

<b>Tabla 2.3.</b> Codificación del color en función del tipo de residuo.			
Tipo de residuo*	Color observado	Modelo de color RGB	Modelo de color CMYK
Residuos que requieren tratamiento		255,237,0	0.00, 0.07, 1.00, 0.00
Residuos reutilizables		187,207,0	0.10, 0.00, 1.00, 0.19
Disolventes acuosos, solutos biodegradables		79,174,50	0.55, 0.00, 0.71, 0.32

## 2.3 EVALUACIÓN DE UN EXPERIMENTO

En cinética química y catálisis, el producto no es el objetivo del experimento, sino la rapidez de la reacción, la cual se desarrolla en porcentajes variables durante la experimentación, pero a cierto tiempo se llevan a cabo a su máximo rendimiento, entonces será adecuado dejar que la reacción termine, para evaluar la Economía Atómica. Para determinar el número de PQVCE, se sugiere hacer un análisis del proceso global con base en los principios de la química verde. Es importante mencionar que durante el análisis de un experimento aislado, en ocasiones es difícil definir qué tan respetuoso es un experimento con el medio ambiente, para ello se debe hacer siempre que se pueda, un análisis comparativo desde el punto de vista de la química verde, de un experimento con el antecesor.

## CAPITULO 3

### DESARROLLO EXPERIMENTAL

En este capítulo, se presenta la caracterización de la bentonita utilizada, así como la metodología para la adsorción de azul de metileno y la adsorción de las antocianinas de jugo de arándano sobre la bentonita.

#### 3.1 CARACTERIZACIÓN DE LA BENTONITA

La bentonita utilizada, fue adquirida en la empresa Minerex S. A. de C. V\*, la cual fue utilizada sin tratamiento previo.

La determinación del área superficial específica, así como el tipo de poro de la bentonita utilizada, fueron obtenidos mediante la técnica de adsorción-desorción de nitrógeno a 77 K en un aparato Micromeritics modelo ASAP-205. Las muestras fueron desgasadas a vacío a 473 K durante 12 h previamente a las mediciones de la adsorción.

Las isotermas fueron obtenidas midiendo la cantidad de nitrógeno gaseoso adsorbido por la bentonita en un intervalo de presiones menor a una atmósfera. Bajo estas condiciones se adsorben varias multicapas, y mediante la aplicación de la ecuación de Brunauer-Emmet-Teller (BET), se determinó el volumen de una monocapa y con este dato, el área superficial específica ( $A_s$ ). La distribución de tamaño de poro se obtuvo utilizando el método BJH.

\*Entrada a la estación Lagrange No. 301 Local 56 Col. Laboral C.P. 66440, San Nicolás de los Garza, N.L. México.

### 3.2. ADSORCIÓN DE AZUL DE METILENO SOBRE BENTONITA

#### 3.2.1. Material, reactivos, y equipo

<b>Tabla 3.1.</b> Material utilizado durante el desarrollo experimental (Azul de metileno)		
MATERIAL	REACTIVOS	EQUIPO
1 Pipeta volumétrica de 1 mL 1 Pipeta volumétrica de 2 mL 1 Pipeta volumétrica de 5 mL 1 Pipeta volumétrica de 10 mL 1 Pipeta graduada de 5 mL 1 Matraz volumétrico de 100 mL 1 Vaso de precipitados de 100 mL 10 Frascos con tapa de 100 mL 1 Piseta 1 Espátula	Azul de metileno* de 60 ppm  Bentonita	1 Espectrofotómetro Perkin Elmer Lambda 25 con celdas de cuarzo  2 Celdas para espectrofotómetro  1 Balanza analítica OHAUS 214

\*El azul de metileno fue adquirido en Sigma Aldrich y utilizado sin purificar.

#### 3.2.2 Adsorción del azul de metileno sobre bentonita

Se preparó una disolución stock de 60 ppm de azul de metileno, a partir de la esta, se prepararon las disoluciones de 3, 6, 9, 10,12, 15, 20 30, 40, 50 ppm, utilizando agua destilada.

Para medir la absorbancia de las disoluciones, se utilizó un espectrofotómetro UV-Vis LAMBDA 25 de la marca Perkin Elmer. Todos los experimentos se realizaron a temperatura y presión ambiente.



**Figura 3.1.** Disoluciones de azul de metileno (3-20 ppm)

### **3.2.3 Longitud de onda de máxima absorción ( $\lambda$ )**

La selección de la longitud de onda a la cual trabajar, se realizó mediante un barrido entre 400 y 800 nm, de la disolución de azul de metileno de concentración 10 ppm, utilizando agua destilada como blanco.

### **3.2.4 Curva de calibración**

Se determinó la absorbancia de cada una de las disoluciones, a la longitud de onda de máxima absorbancia, utilizando agua destilada como blanco.

### **3.2.5 Cinética de adsorción de azul de metileno sobre bentonita**

*Experimento típico:* Se utilizó agua destilada como blanco. Se pesaron 4 mg de bentonita directamente en la celda del espectrofotómetro, teniendo cuidado que la bentonita no tocara las paredes de la celda, posteriormente se adiciono suavemente por las paredes de la celda, 4 mL de azul de metileno de concentración de 3 ppm (cuidando que las partículas de bentonita no pasaran a la disolución). En el instante que se adicionó la mitad de la disolución de azul de metileno, se tomó el tiempo como cero. Se colocó rápidamente la celda en el espectrofotómetro y se monitoreó cada 15 segundos durante 7 min., por espectrofotometría a la longitud de máxima absorción de azul de metileno (665.4 nm). Se repitió el experimento con las disoluciones de 6,9, 10,12, 15 y 20 ppm.



**Figura 3.2.** En las siguientes imágenes se muestra el espectrofotómetro UV-Vis spectrometer LAMBDA 25 de la marca Perkin Elmer, y la balanza analítica OHAUS 214 en la cual se peso la arcilla



**Figura 3.3.** Bentonita utilizada en este trabajo.



### 3.3 Cinética adsorción de antocianinas del jugo de arándano y arándano-manzana sobre bentonita.

A continuación se presenta el material equipo y reactivos utilizados para el estudio de la adsorción de de las antocianinas sobre bentonita.

<b>Tabla 3.2.</b> Material utilizado durante el desarrollo experimental (antocianinas en jugo de arándano)		
MATERIAL	REACTIVOS	EQUIPO
1 Pipeta graduada de 10 mL	Jugo de arándano-manzana comercial.*	1 Espectrofotómetro Perkin Elmer Lambda 25 con celdas de cuarzo
1 Vaso de precipitados de 100 mL	Bentonita	2 Celdas para el espectrofotómetro
4 tubos de ensaye medianos		1 Balanza analítica OHAUS 214
1 Piseta		
1 Espátula		

\*Se utilizaron jugos de arándano y de arándano-manzana de cuatro diferentes marcas comerciales (Jumex, Del Valle, Ocean Spray, Golden Hills), cuyo contenido nutricional se muestra en la Tabla 3.3.

<b>Tabla 3.3.</b> Contenido nutricional de los diferentes jugos utilizados.				
	Ocean Spray	Del Valle	Jumex	Golden Hills
Contenido energético (KJ)	120	156	145	158
Proteínas (g)	0	0	0	0
Grasas	0	0	0	0
Carbohidratos (g)	30	39	39	40
Azúcar (mg)	0	0	0	0
Sodio	35	19	25	19

Porcentaje de valor nutricional de acuerdo con la NOM-051-SCFVSSA1-201

### 3.3.1 Longitud de onda de máxima absorbancia

Para medir la absorbancia de dichos jugos, se utilizó un equipo UV-Vis spectrometer LAMBDA 25 Perkin Elmer. Se realizó un barrido entre 400 y 800 nm, a cada uno de los jugos, con el fin de conocer la longitud máxima a la cual absorbieron.

### 3.3.2 Adsorción de antocianinas sobre bentonita

*Experimento típico del jugo:* Para seguir la cinética de reacción, de los diferentes jugos de arándano y jugo de arándano-manzana (Figura 3.4): Se pesaron directamente 15 mg de bentonita en la celda del espectrofotómetro, posteriormente se añadió 4 mL de jugo arándano marca Jumex al 100% cuidando que las partículas de bentonita no pasen a la disolución y se monitoreó por espectrofotometría por 10 min, a 502 nm utilizando agua destilada como blanco. Repitiendo este último pasó con los demás jugos, a sus diferentes longitudes de onda máxima.



**Figura 3.4.** Imágenes de los jugos utilizados en el experimento de adsorción de antocianinas de jugo de arándano sobre bentonita

## 3.4 METODOLOGÍA PARA REALIZAR UN DIAGRAMA DE FLUJO ECOLÓGICO

En esta sección se presenta la metodología para realizar un diagrama de flujo ecológico de los dos estudios que se plasman en la presente tesis.

- a) Selección del estudio de adsorción.
- b) Determinación de las etapas de cada experimento.
- c) Uso de símbolos adecuados, para el diagrama de flujo de proceso.
- d) Documentación de las cantidades de reactantes que se utilizaron.

- e) Balance de materia en cada etapa del experimento.
- f) Obtención de los pictogramas de seguridad para reactantes y productos.
- g) Se colocaron los pictogramas de toxicidad, en los símbolos del diagrama.
- h) Cálculo de la cantidad de residuos en volumen o en masa, en función de factor de eficiencia.
- i) Determinó la economía atómica de cada experimento
- j) Investigación la biodegradabilidad de residuos.
- k) Evaluación del número de principios que cumple cada uno de los experimentos
- l) Indicar el tratamiento o disposición de residuos
- m) Selección de los colores de fondo en función del número de principios de la química verde que cumple el experimento (PQVCE)
- n) Se coloca en un recuadro en la misma página del diagrama de flujo, los PQVCE, con el número correspondiente.
- o) Establecer el color de fondo que deben llevar el diagrama, con base al número de PQVCE, utilizando el sistema RGB.
- p) Colocar el color de fondo de las tipografías en el diagrama de flujo.
- q) Análisis del tipo de residuos (biodegradables, reutilizables, requieren tratamiento)
- r) Selección del color de fondo en función de la disposición de los residuos.
- s) Con base a cada tipo de residuo, se selecciona y se aplica el color de fondo para los símbolos de los residuos, en el diagrama de flujo de proceso ecológico.

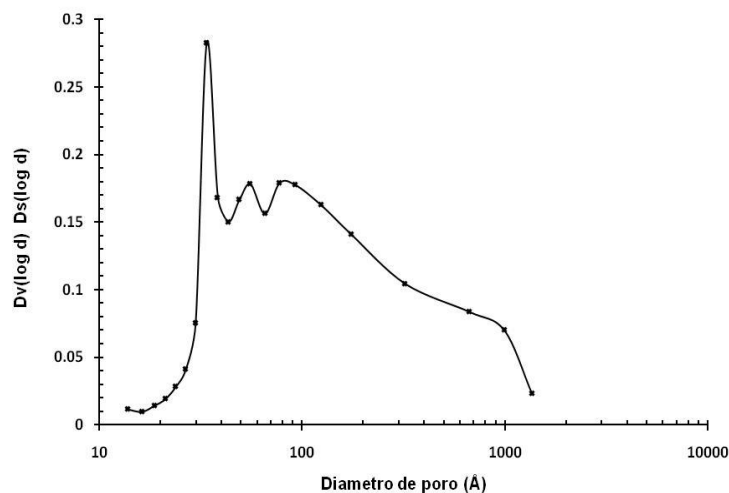
# CAPITULO 4

## RESULTADOS Y DISCUSIÓN

### 4.1 CARACTERIZACIÓN DE LA BENTONITA, POR LA TÉCNICA DE ADSORCIÓN-DESORCIÓN DE NITRÓGENO

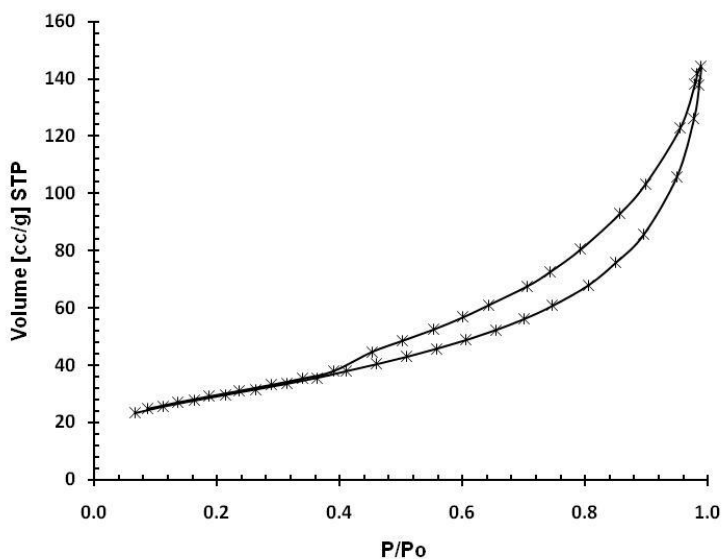
Las propiedades superficiales de la bentonita, fueron determinadas mediante la técnica de fisorción de nitrógeno. Con el método BJH se obtuvo la distribución de tamaño de poro (Figura 4.1), que es de tipo multimodal, con la presencia de micro meso y macroporos. Encontrándose tres máximos de diámetro de poro en 33.74, 55.41 y 77.07-82.07 Å respectivamente, un volumen de poro máximo de 0.2823 cc g<sup>-1</sup> y una distribución porosa entre 1.5-150 Å (Tabla 4.1), es importante mencionar que la mayor parte de la bentonita es un material mesoporoso (20 – 50 Å) Leofanti (1988). Dichas características son un criterio para utilizarla como un buen adsorbente.

<b>Tabla 4.1.</b> Área superficial específica diámetro, volumen y distribución de tamaño de poro de la bentonita, obtenida de la adsorción de N <sub>2</sub> .			
Área BET (m <sup>2</sup> g <sup>-1</sup> )	Volumen de poro (cc g <sup>-1</sup> )	Máximos Diámetro de poro (Å)	Distribución de tamaño de poro ( Å)
101.60	0.2823	33.74, 55.41, 77-82	1.5-150



**Figura 4.1.** Distribución de tamaño de poro de la Bentonita

La curva de histéresis de la bentonita representada en la Figura 4.2, es del tipo H3, asociada a aglomerados de partículas que presentan poros con forma de rendija, en donde ocurre condensación capilar. La isoterma de adsorción es de tipo IV atribuida a materiales mesoporosos.



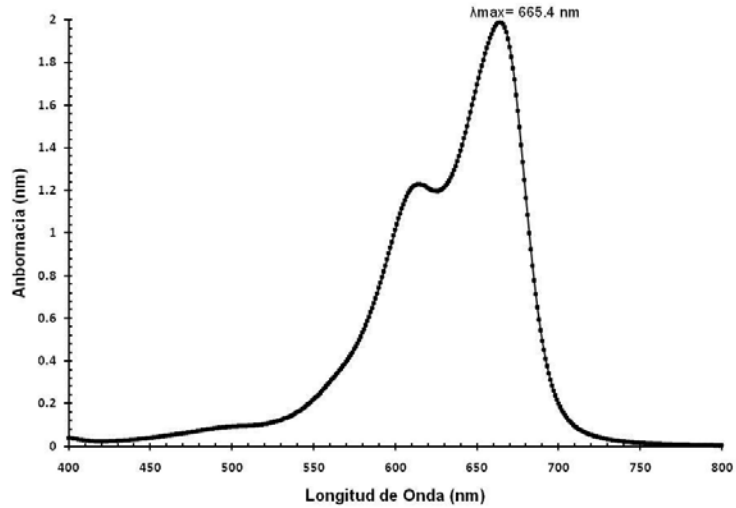
**Figura 4.2.** Isotherma de adsorción de N<sub>2</sub> de la bentonita.

Empleando el método de BET (Sing, 1985) se estableció que la bentonita tiene un área específica de 101.60 m<sup>2</sup> g<sup>-1</sup>, siendo un valor característico de bentonitas ácidas.

## 4.2 ADSORCIÓN DEL AZUL DE METILENO SOBRE BENTONITA

### 4.2.1 Longitud de onda máxima de azul de metileno

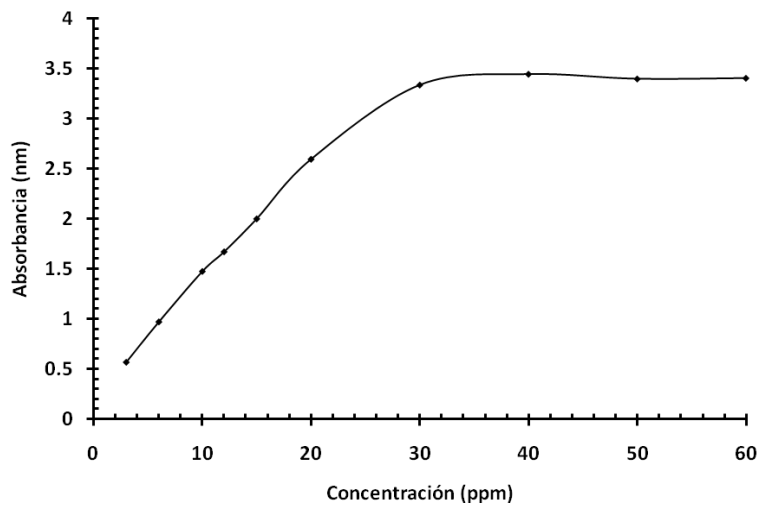
Para conocer el máximo de longitud de onda al cual absorbe el azul de metileno se realizó un barrido entre 400 y 800 nm, a la disolución de azul de metileno de concentración de 10 ppm, tomando lectura de absorbancia cada dos nanómetros. El espectro obtenido se muestra en la Figura 4.3, en este se observa un máximo a 665.4 nm, este resultado cae dentro del intervalo de longitud de onda máxima de absorción reportadas en la literatura (S. Franca, S. Oliveira, & E. Ferreira, 2009). Cabe mencionar que a 665.4 nm se realizaron los demás experimentos.



**Figura 4.3** Curva de barrido del azul de metileno (665.4 nm)

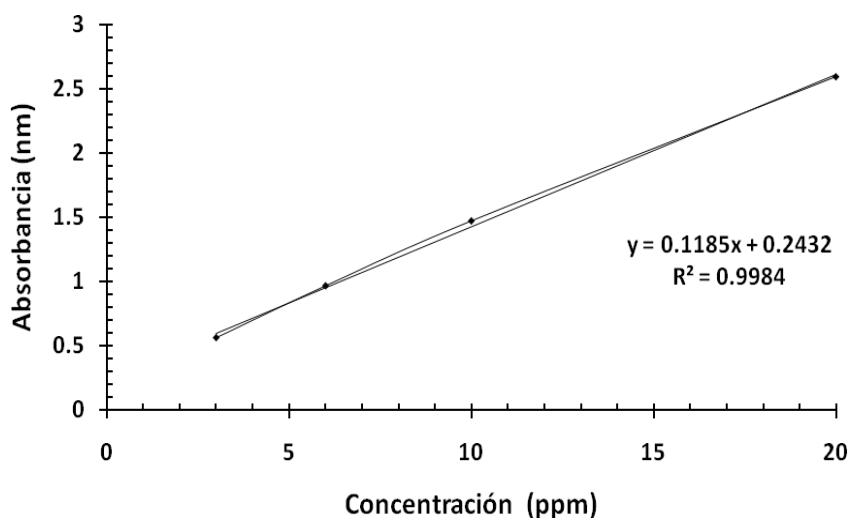
#### 4.2.2 Curva de calibración

Para conocer los intervalos de concentración más adecuados para el estudio de adsorción, se realizó una curva de calibración la cual se muestra en la Figura 4.4, en donde se puede observar dos tendencias: a concentraciones bajas, entre 3 y 20 ppm la absorbancia es directamente proporcional a la concentración y concentraciones elevadas entre 30 a 60 ppm, la absorbancia es prácticamente constante con la concentración.



**Figura 4.4.** Se muestra el gráfico de la curva de calibración del azul de metileno de 3 hasta 60 ppm.

Los resultados de absorbancia a concentraciones bajas (3 a 20 ppm) se ajustaron a una línea recta y se obtuvo un coeficiente de correlación ( $R^2$ ) de 0,9984. El alto valor del coeficiente de correlación en el ajuste de la curva de calibración del azul de metileno, indica que en este intervalo de concentraciones se cumple la ley de Beer-Lambert, con un coeficiente de absortividad en ppm de 0.1185, D. Gram (1955) (Figura 4.5). Por lo tanto las condiciones óptimas para realizar el estudio de adsorción de azul de metileno es entre 3 y 20 ppm.



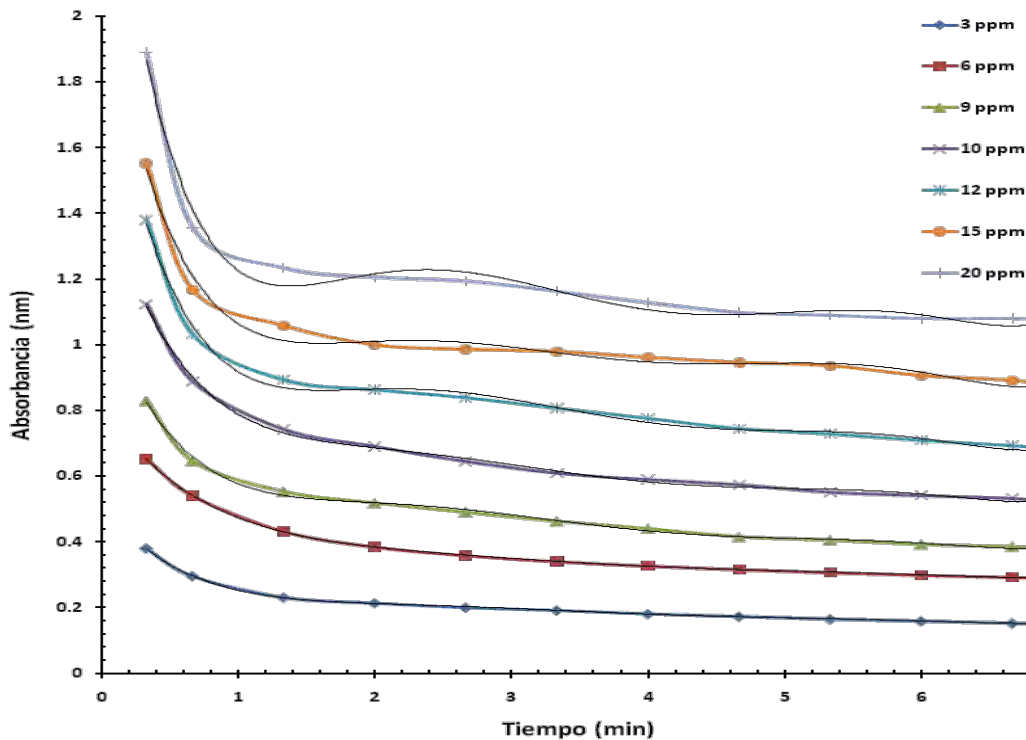
**Figura 4.5.** En esta grafica podemos observar que obtenemos un coeficiente de correlación de 0.9984 y una pendiente igual a 0.1185.

### 4.2.3 Adsorción de azul de metileno

Los estudios de adsorción de azul de metileno sobre bentonita a las concentraciones de 3, 6, 6, 10, 12, 15, 20 se reportan en la Tabla 4.2. En tanto que las isotermas de adsorción son representadas en la Figura 4.6. Para determinar la absorbancia a tiempo 0, a cada grafica se le realizó una regresión polinomial de ordenación 6, las ecuaciones obtenidas se presentan en la Tabla 4.3.

Tiempo (min)	Absorbancia (nm)						
	3ppm	6ppm	9ppm	10ppm	12ppm	15 ppm	20 ppm
0.3	0.3782	0.65164	0.82964	1.1224	1.37891	1.5523	1.8899
0.5	0.2945	0.54001	0.64601	0.888	1.03207	1.1667	1.3567
1.5	0.2305	0.43171	0.552539	0.742	0.89315	1.0577	1.2339
2.0	0.2133	0.38436	0.51857	0.69	0.86259	0.9989	1.2055
2.5	0.1998	0.35841	0.49056	0.645	0.8388	0.9856	1.1937
3.5	0.1916	0.3403	0.46276	0.609	0.80654	0.9787	1.1625
4.0	0.1809	0.32674	0.44041	0.59	0.77544	0.9605	1.1278
4.5	0.1731	0.31604	0.41568	0.574	0.74443	0.9453	1.0977
5.5	0.165	0.30679	0.40562	0.551	0.7283	0.9351	1.0894
6.0	0.1589	0.29872	0.3924	0.541	0.70859	0.9056	1.0802
6.5	0.1528	0.29216	0.38548	0.532	0.69219	0.8908	1.0798
7.0	0.1502	0.28884	0.38172	0.52	0.68371	0.8734	1.0767

**Tabla 4.2.** Valores obtenidos de absorbancia con respecto al tiempo de las concentraciones entre 3 y 20 ppm con 4 mg de bentonita.



**Figura 4.6.** Absorbancia con respecto al tiempo de las disoluciones entre 3 y 20 ppm con 4 mg de bentonita. Así mismo se muestra la regresión polinomial realizada a cada curva (línea gris).



Regresión Lineal			
AM ( ppm)	Ecuación	R2	Abs. a Tiempo 0
3 ppm	$y = 9E-05x^6 - 0.0022x^5 + 0.0222x^4 - 0.1123x^3 + 0.3074x^2 - 0.4512x + 0.4945$	0.997	0.4945
6 ppm	$y = 8E-05x^6 - 0.0021x^5 + 0.0223x^4 - 0.1207x^3 + 0.3608x^2 - 0.6008x + 0.8138$	0.9999	0.8138
9 ppm	$y = 0.0003x^6 - 0.0075x^5 + 0.0729x^4 - 0.3545x^3 + 0.8967x^2 - 1.1482x + 1.1172$	0.9974	1.1172
10 ppm	$y = 0.0003x^6 - 0.0084x^5 + 0.0822x^4 - 0.403x^3 + 1.0432x^2 - 1.4054x + 1.4797$	0.9977	1.4797
12 ppm	$y = 0.0006x^6 - 0.0155x^5 + 0.1511x^4 - 0.7319x^3 + 1.8342x^2 - 2.2577x + 1.9373$	0.9951	1.9373
15 ppm	$y = 0.0007x^6 - 0.0166x^5 + 0.1591x^4 - 0.7628x^3 + 1.9054x^2 - 2.3472x + 2.126$	0.9848	2.126
20 ppm	$y = 0.0011x^6 - 0.0263x^5 + 0.2536x^4 - 1.2116x^3 + 2.9717x^2 - 3.5x + 2.7378$	0.9841	2.7378

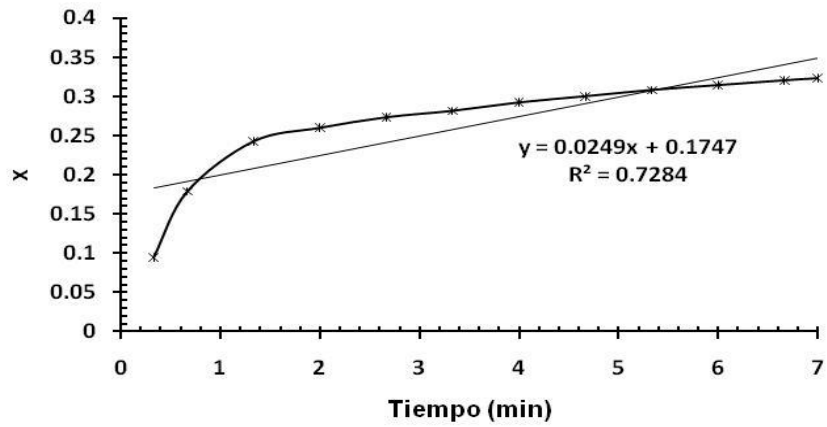
**Tabla 4.3.** Ecuaciones obtenidas por regresión polinomial para cada experimento.

#### 4.2.4 Cinética de adsorción de azul de metileno

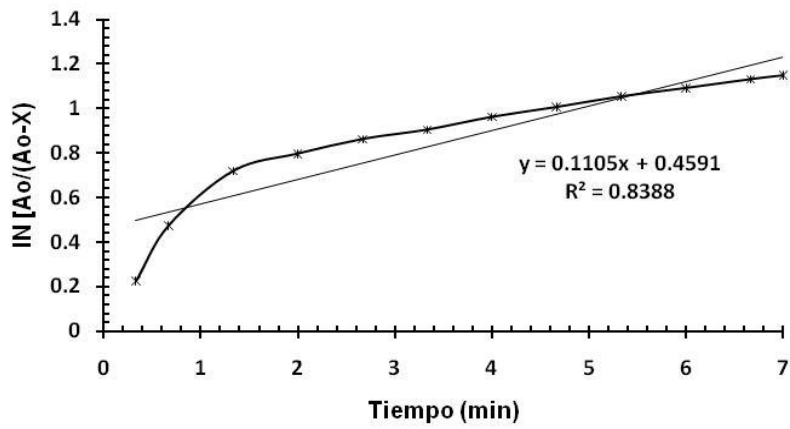
Para el estudio de la cinética de adsorción del azul de metileno se utilizó el método integral gráfico que es por excelencia, el más común para determinar el orden de reacción, este método consiste en trazar gráficos de las funciones obtenidas en la integración de las leyes de rapidez en función del tiempo, posteriormente se le realiza una regresión lineal y la función que tenga mejor un coeficiente de correlación ( $R^2$ ), corresponde directamente al orden de reacción, basándose en este se emplearon las ecuaciones de orden, 1 y 2 (Tabla 1.6).

A continuación se muestran los gráficos resultado del tratamiento matemático que se realizó a las diferentes concentraciones de azul de metileno (3, 6, 9, 10 ppm), donde se plasma los diferentes órdenes que sigue la cinética de adsorción, para saber que concentración ilustra mejor la adsorción del azul de metileno, y así poder discutir acerca del orden de reacción que sigue la cinética de adsorción.

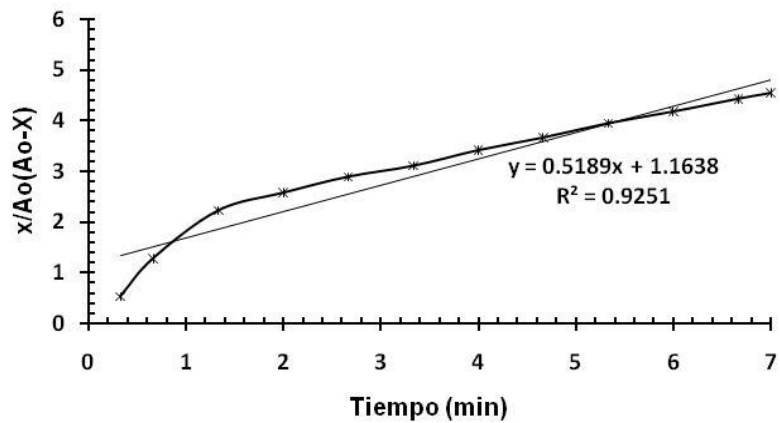
- Cinética de adsorción de azul de metileno de 3 ppm



a) Orden cero



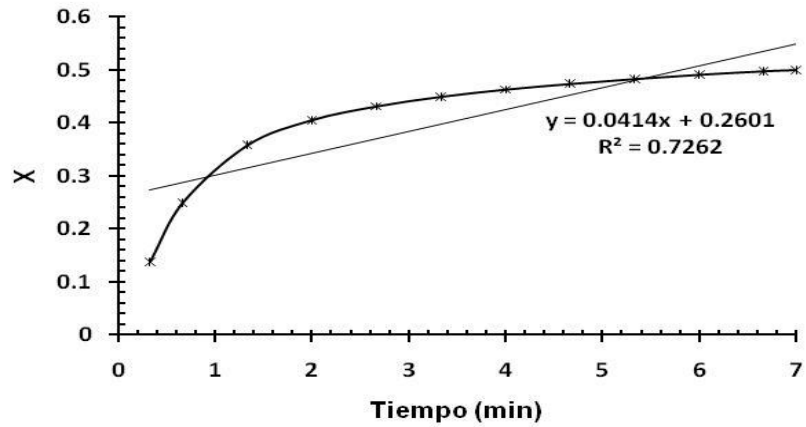
b) Primer orden



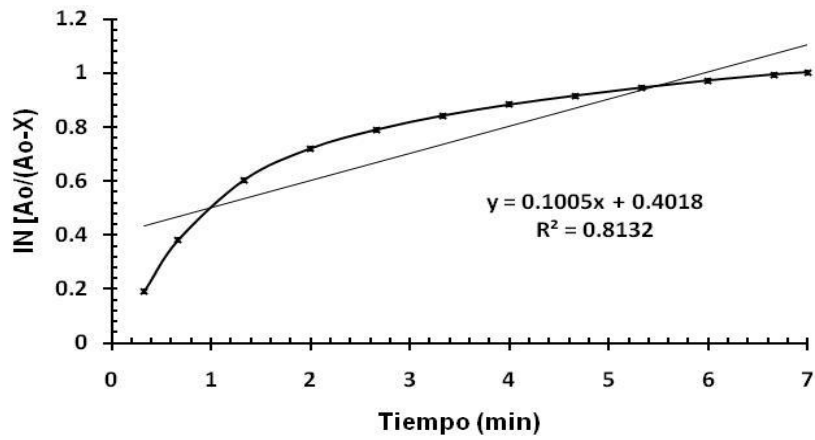
c) Segundo orden

**Figura 4.7.** Gráficas, ecuaciones y coeficientes de correlación ( $R^2$ ) para orden 0, 1 y 2 de 3 ppm.

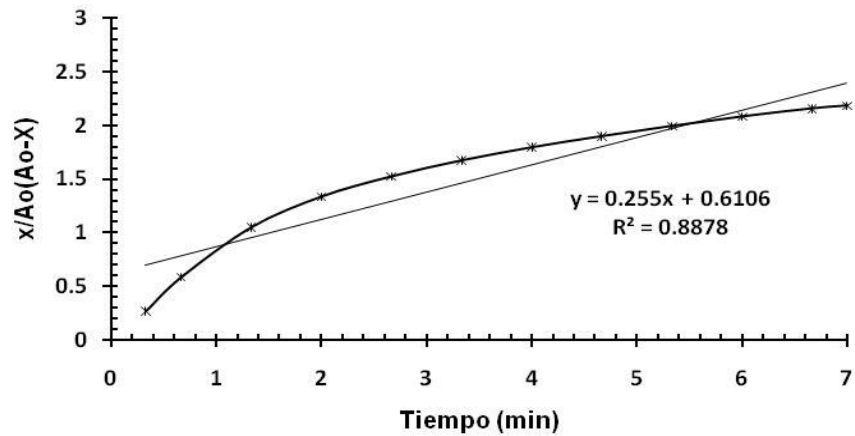
- Cinética de adsorción de azul de metileno de 6 ppm



- Orden cero



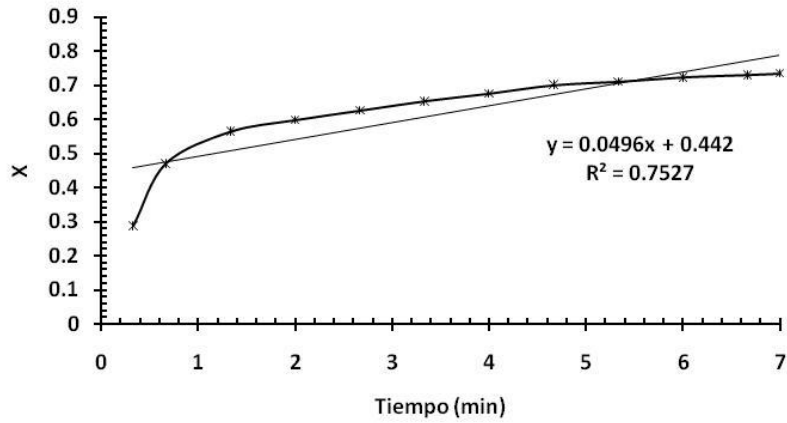
- Primer orden



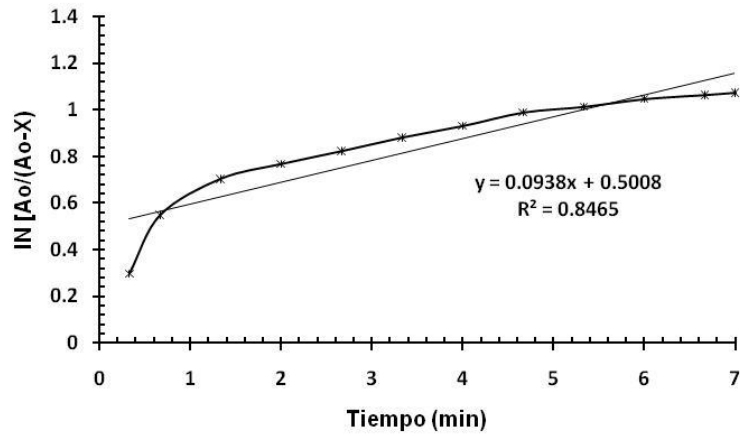
- Segundo orden

**Figura 4.8.** Gráficas, ecuaciones y coeficientes de correlación ( $R^2$ ) para orden 0, 1 y 2 de de 6 ppm.

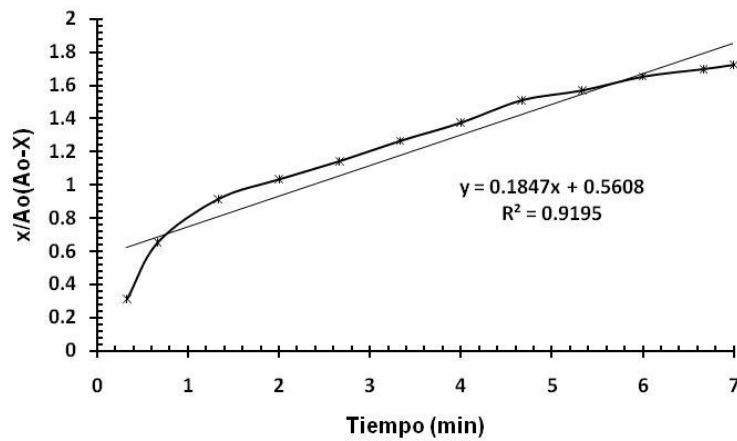
- Cinética de adsorción de azul de metileno de 9 ppm



a) Orden cero



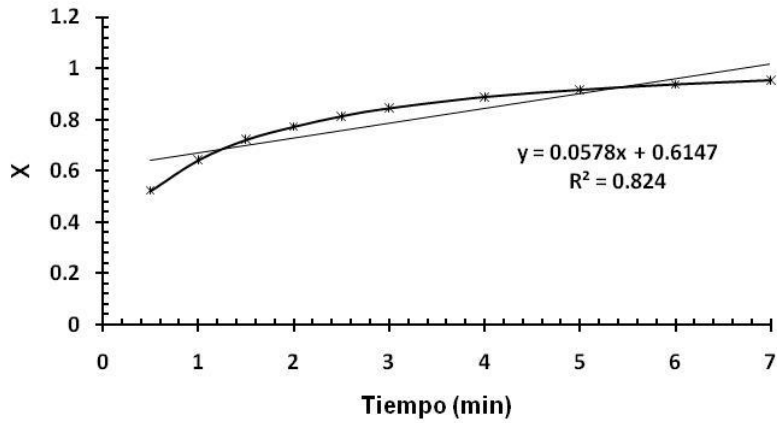
b) Primer orden



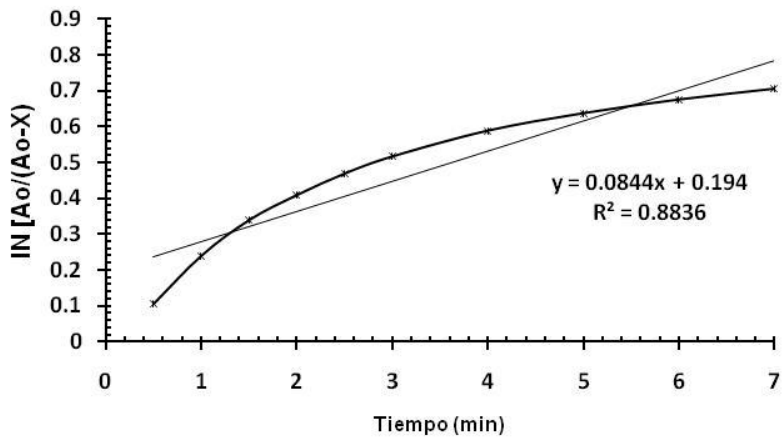
c) Segundo orden

**Figura 4.9.** Gráficas, ecuaciones y coeficientes de correlación ( $R^2$ ) para orden 0, 1 y 2 de Cinética de adsorción de azul de metileno de 9 ppm.

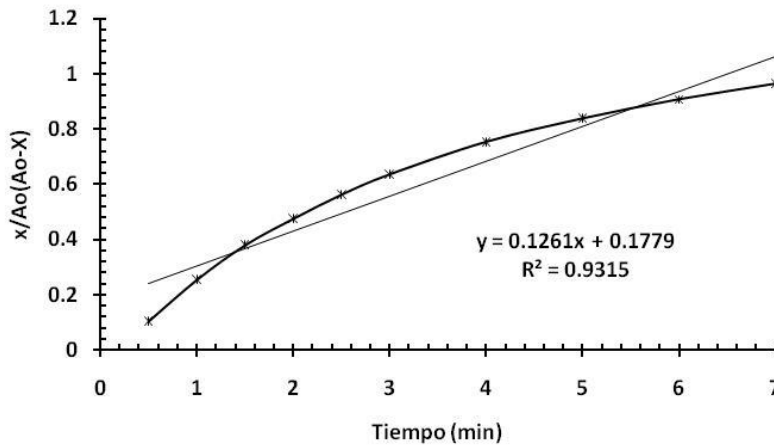
- Cinética de adsorción de azul de metileno de 10 ppm



a) Orden cero



a) Primer orden



b) Segundo orden

**Figura 4.10.** Gráficas, ecuaciones y coeficientes de correlación ( $R^2$ ) para orden 0, 1 y 2 de de Cinética de adsorción de azul de metileno de 10 ppm.

Como puede observarse en las figuras 4.7, 4.8, 4.9, y 4.10, las gráficas del tratamieto matematico de las diferentes concentraciones de azul de metileno, asi mismo se presentan los valores de los coeficientes de correlación ( $R^2$ ) en la Tabla 4.4. La regresión lineal para la ecuación de primer orden arroja valores de coeficiente de correlación ( $R^2$ ) bajo. Por otra parte, La ecuación de segundo orden arroja valores altos de  $R^2$ , por lo tanto el modelo de segundo orden se ajusta mejor y la cientica que ilustra mejor la adsorcion de azul de metileno es la de 10 ppm.

[AM]	$R^2$		
	Orden cero	Primer orden	Segundo orden
3 ppm	0.7284	0.8388	0.9251
6 ppm	0.7262	0.8132	0.8878
9 ppm	0.7527	0.8465	0.9195
10 ppm	0.824	0.8836	0.9315

**Tabla 4.4** Resumen de los coeficeintes de correlacion ( $R^2$ ) obtenidos para las disoluciones de 3 a 10 ppm.

#### 4.2.5. Análisis desde el punto de vista de la química verde de la adsorción de azul de metileno sobre bentonita

Factor de eficiencia ( $E_m$ ): Se generan 4 mL de residuos por equipo, por lo tanto en este experimento el factor de eficiencia es 0.004, además de 4 mg de arcilla.

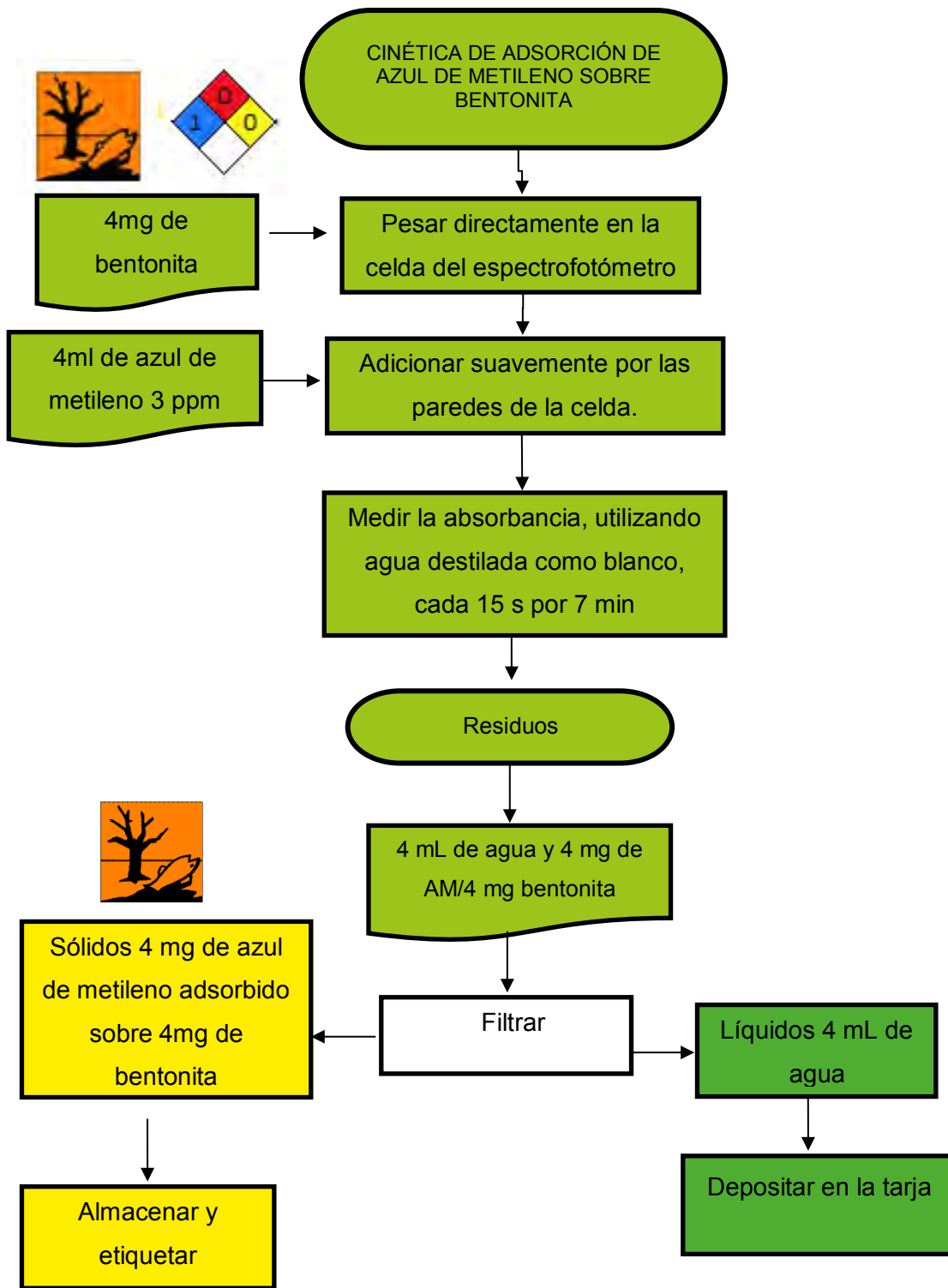
$$E_m = \frac{\text{volumen de residuos (Kg)}}{\text{práctica de laboratorio por equipo de trabajo}} = \frac{0.004004}{1} = 0.004004$$

Economía atómica (EA): La adsorción a tiempo infinito se lleva a cabo al 100%, por lo tanto la economía atómica es del 100%.

Tratamiento y disposición de los residuos: Después de realizar la filtración de los residuos, la bentonita por ser un residuo sólido el cual adsorbió el colorante azul de metileno el cual es ligeramente tóxico por lo tanto la bentonita debe almacenarse y etiquetarse, y los residuos líquidos pueden depositarse en la tarja. Los residuos requieren tratamiento posterior. 255, 237,0.

<b>Tabla 4.5.</b> Análisis desde el punto de vista de la química verde del experimento de cinética de adsorción de azul de metileno sobre bentonita.		
No.	Observación del principio en el práctica	Cumple
1	La mezcla de los reactantes sólo requiere el volumen celda del espectrofotómetro, en este caso 4 mL (semimicro), por lo que la cantidad de residuos se minimiza.	√
2	El fenómeno de adsorción a tiempo infinito (168 h), se lleva a cabo al 100%, por lo tanto el líquido es agua, y el sólido es azul de metileno/bentonita.	√
3	El experimento utiliza y generan materiales con toxicidad reducida.	√
4	Reducir la toxicidad de los productos o residuos, pero mantener el objetivo del experimento.	√
5	El avance de la reacción se realizó por métodos fisicoquímicos, eliminando el uso de sustancias auxiliares.	√
6	Todo el experimento se desarrolla a temperatura y presión ambientes, disminuyendo el consumo energético	√
7	La materia prima no es renovable	No cumple
8	No fue necesaria la formación de grupos de bloqueo. No aplica este principio	√
9	No es necesario el uso de un catalizador. No aplica este principio	√
10	La bentonita es ecoamigable, pero tiene azul de metileno, el cual no es biodegradable.	No cumple
11	El experimento se monitorea en tiempo real	√
12	Al utilizar azul de metileno en concentración de 4 ppm, se minimizó el riesgo potencial de accidentes químicos.	√

La adsorción de azul de metileno sobre bentonita cumple con diez de los doce principios de la química verde por lo tanto al diagrama de flujo ecológico le corresponde el matiz RGB: 157, 196,26. Parte de los residuos son ecoamigables residuos que requieren tratamiento y le corresponde el matiz 255, 237,0, de acuerdo a los códigos propuestos en el presente trabajo (capítulo 2).



**Diagrama 1.** Diagrama de flujo ecológico del experimento cinética de adsorción de azul de metileno sobre bentonita.



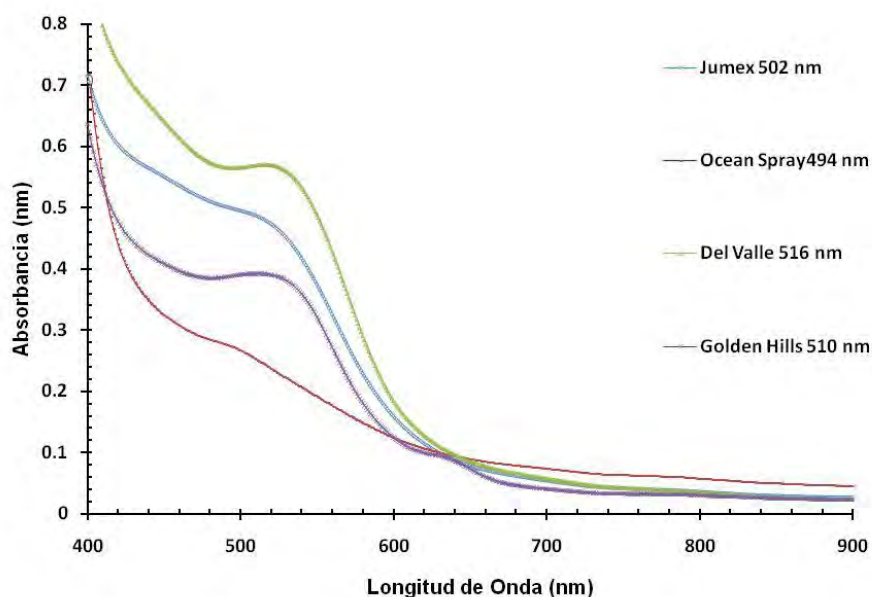
### 4.3 ADSORCIÓN DE ANTOCIANINAS DEL JUGO DE ARÁNDANO-MANZANA SOBRE BENTONITA

#### 4.3.1 Longitud de onda máxima de antocianinas del jugo de arándano-manzana

Para conocer el máximo de longitud de onda al cual absorben los diferentes jugos de arándano-manzana, se realizó un barrido entre 400 y 900 nm a cada uno de los jugos, cada dos nanómetros. Las longitudes de onda máximas obtenidas de los diferentes jugos son reportadas en la Tabla 4.6 y los resultados obtenidos en la Figura 4.11.

Jugo	Longitud de onda máxima ( $\lambda_{\text{máx}}$ nm)
Jumex	502
Ocean Spray	494
Del valle	516
Golden Hills	510

**Tabla 4.6.** Se muestran las diferentes longitudes de onda máximas obtenidas para cada uno de los jugos de arándano.



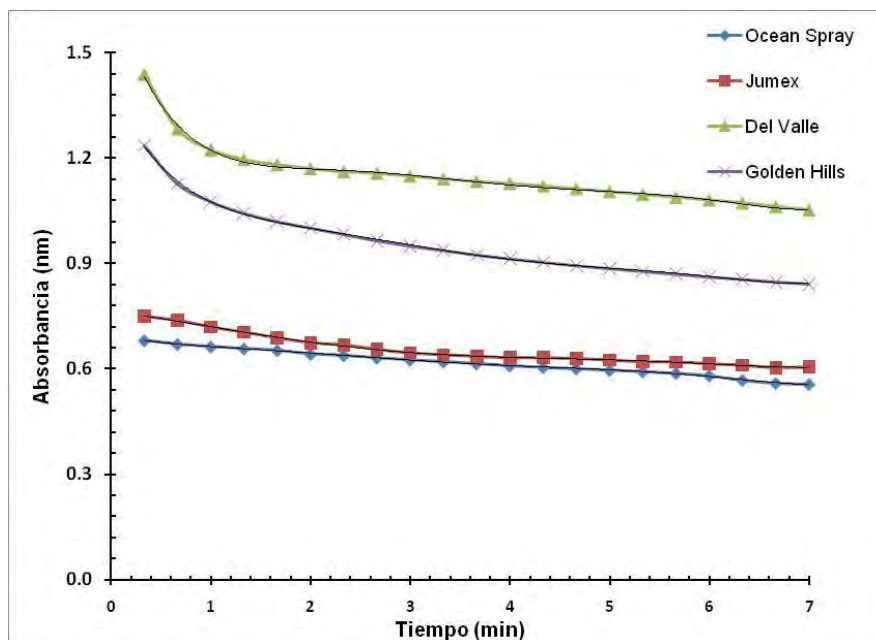
**Figura 4.11.** Curvas de barrido de los 4 diferentes jugos de arándano-manzana.

Como se puede observar los espectros correspondientes a los jugos de la marca Del valle y Golden Hills, presentan máximos mejor definidos con respecto a los espectros de los jugos de la marca Jumex y Ocean Spray.

Los estudios de adsorción de antocianinas de jugo de arándano-manzana sobre bentonita se reportan en la Tabla 4.7. En tanto que las isotermas de adsorción son representadas en la Figura 4.12.

Tiempo	Absorbancia (nm)			
	Golden	Jumex	Del Valle	Ocean Spray
0.3	0.6808	0.7491	1.4369	1.2359
0.7	0.6700	0.7377	1.2821	1.1269
1.0	0.6631	0.7187	1.2225	1.0763
1.3	0.6574	0.7041	1.1946	1.0430
1.7	0.6526	0.6882	1.1803	1.0191
2.0	0.6422	0.6743	1.1691	1.0012
2.3	0.6380	0.6678	1.1602	0.9833
2.7	0.6312	0.6552	1.1561	0.9651
3.0	0.6253	0.6452	1.1478	0.9501
3.3	0.6204	0.6400	1.1397	0.9372
3.7	0.6150	0.6355	1.1326	0.9243
4.0	0.6087	0.6314	1.1266	0.9135
4.3	0.6039	0.6315	1.1199	0.9036
4.7	0.6002	0.6292	1.1117	0.8941
5.0	0.5962	0.6251	1.1035	0.8858
5.3	0.5921	0.6201	1.0951	0.8778
5.7	0.5874	0.6195	1.0877	0.8700
6.0	0.5804	0.6146	1.0799	0.8617
6.3	0.5676	0.6102	1.0715	0.8547
6.7	0.5592	0.6034	1.0612	0.8476
7.0	0.5560	0.6051	1.0512	0.8414

**Tabla 4.7.** En esta tabla se muestran los valores obtenidos de absorbancia con respecto al tiempo de los 4 diferentes jugos con 15 mg de bentonita



**Figura 4.12.** Absorbancia con respecto al tiempo de los 4 jugos con 4 mg de bentonita. Asi mismo se muestra la regresion polinomial realizada a cada curva

Para determinar la absorbancia a tiempo 0, a cada grafica se le realizó una regresión polinomial de ordenación 6, las ecuaciones obtenidas se presentan en la Tabla 4.8.

Jugo	Ecuación	R <sup>2</sup>	Abs. a T <sub>0</sub>
Del Valle	$y = 0.0002x^6 - 0.0052x^5 + 0.0515x^4 - 0.2581x^3 + 0.6832x^2 - 0.9209x + 1.6714$	0.9975	1.6714
Jumex	$y = 5E-05x^6 - 0.001x^5 + 0.0088x^4 - 0.0366x^3 + 0.0868x^2 - 0.1487x + 0.8095$	0.9990	0.8095
Ocean Spray	$y = 0.0001x^6 - 0.0034x^5 + 0.033x^4 - 0.1616x^3 + 0.4221x^2 - 0.6099x + 1.3947$	0.9994	1.3947
Golden Hills	$y = 2E-05x^6 - 0.0005x^5 + 0.0041x^4 - 0.0166x^3 + 0.034x^2 - 0.0525x + 0.6948$	0.9994	0.6988

**Tabla 4.8.** Ecuaciones obtenidas por regresion polinomial de orden 6 para cada experimento y los valores del coeficiente de correlación (R<sup>2</sup>).

Para el estudio de la cinética de adsorción de antocianinas sobre bentonita se utilizó el método integral grafico que es por excelencia, el más común para determinar el orden de reacción, este método consiste en trazar gráficos de las funciones obtenidas en

la integración de las leyes de rapidez en función del tiempo, posteriormente se le realiza una regresión lineal y la función que tenga mejor un coeficiente de correlación ( $R^2$ ), corresponde directamente al orden de reacción, basándose en este se emplearon las ecuaciones de orden, 1 y 2 (Tabla 1.6).

Jugo	$R^2$	
	Primer Orden	Segundo Orden
Golden Hills	0.9919	0.9896
Jumex	0.9015	0.9165
Ocean Spray	0.8958	0.928
Del Valle	0.7814	0.8223

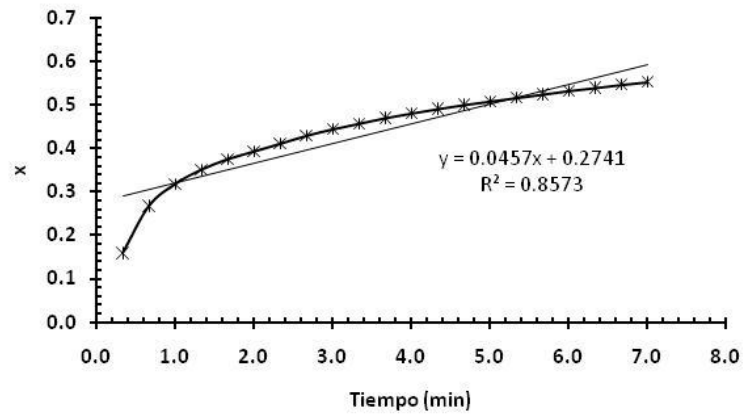
**Tabla 4.9** Resumen de los coeficientes de correlación ( $R^2$ ), obtenidos para los diferentes jugos de arándano-manzana.

De acuerdo a los resultados obtenidos de los cuatro diferentes jugos de arándano-manzana utilizados, los de las marcas Del Valle y Golden Hills, tiene isotermas de absorción bien definidos ya que el que mejor se ajusta a una ecuación polinomial es el de la marca Golden Hills ( $R^2= 0.994$ ).

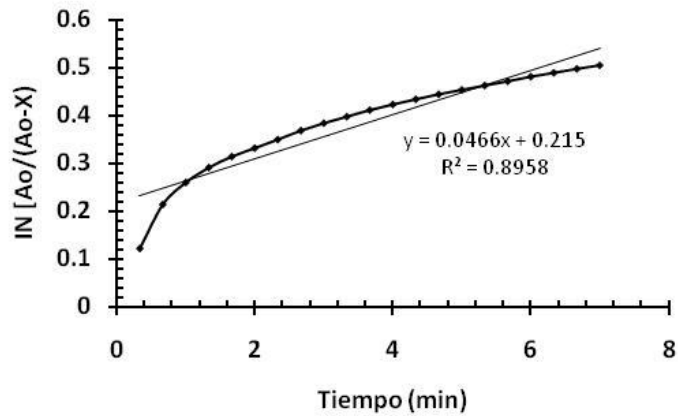
#### **4.3.2 Cinética de adsorción de antocianinas del jugo de arándano-manzana sobre bentonita**

Para el estudio de la cinética de adsorción de antocianinas del jugo de arándano-manzana (Golden Hills) ya que es el que mejor isoterma de adsorción se observa. Se utilizó el método integral gráfico para determinar el orden de reacción que es el más común para determinar el orden de reacción, este método consiste en trazar gráficos de las funciones obtenidas en la integración de las leyes de rapidez en función del tiempo, posteriormente se le realiza una regresión lineal y la función que tenga mejor un coeficiente de correlación ( $R^2$ ), corresponde directamente al orden de reacción, basándose en este se emplearon las ecuaciones de 1 y 2 (Tabla 1.6).

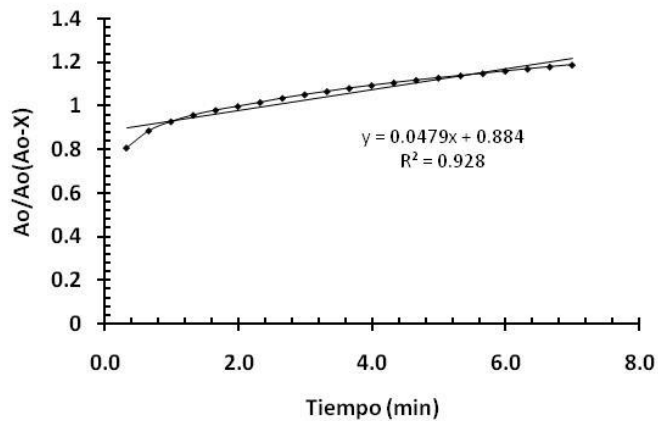
- Cinética de adsorción de antocianinas sobre bentonita (Golden Hills)



a) Orden cero



b) Primer orden



c) Segundo orden

**Figura 4.13.** Gráficas, ecuaciones y coeficientes de correlación ( $R^2$ ) para el jugo de arandano-manzana de la marca Golden Hills.

En base a los resultados obtenidos los 4 jugos tienen diferentes longitudes de onda, esto debido a que la concentración de jugo de arándano-manzana usado por las diferentes marcas comerciales es diferente, ya que la concentración del pigmento y la actividad del agua afectan la estabilidad del color.

Cuando la concentración de antocianinas alcanza valores altos, se presentan fenómenos de autoasociación entre los dos cationes flavilo, dos formas hemiacetal protegiendo la molécula de antocianina. Por otro lado, incrementos en la actividad del agua del medio causan degradación de las antocianinas probablemente debido a una mayor interacción entre el agua y el catión flavilo para formar una pseudobase inestable. Además el efecto del ácido ascórbico sobre la estabilidad de las antocianinas ha sido explicado como una posible reacción de condensación entre el ácido y los pigmentos

#### **4.3.3. Análisis desde el punto de vista de la química verde de la adsorción de antocianinas del jugo de arándano-manzana sobre bentonita**

Factor de eficiencia: Se generan 4 mL de residuos por equipo, por lo tanto en este experimento el factor de eficiencia es 0.004, además de 4 mg de arcilla.

$$E_m = \frac{\text{volumen de residuos (Kg)}}{\text{práctica de laboratorio por equipo de trabajo}} = \frac{0.004004}{1} = 0.004004$$

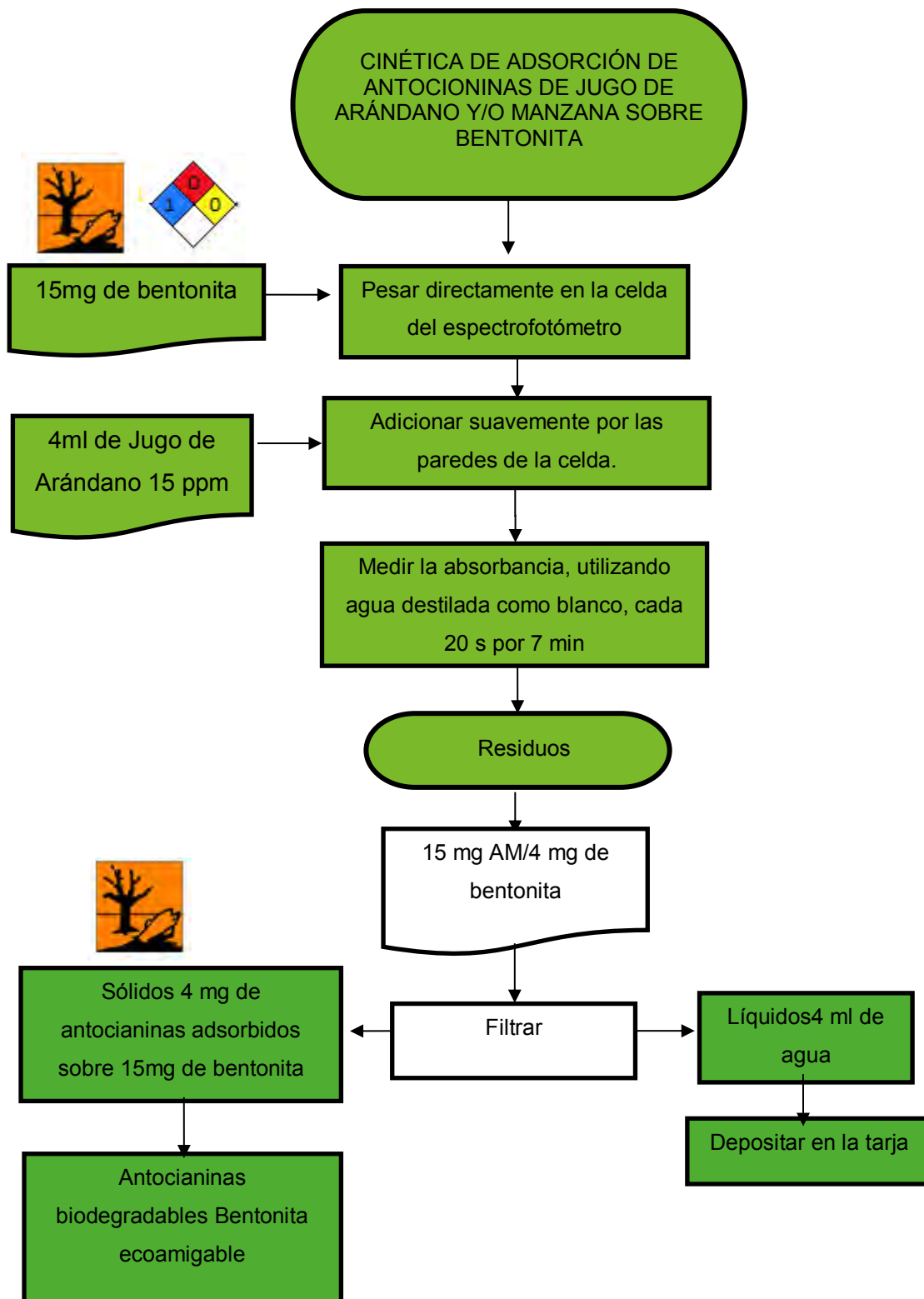
Economía atómica: La adsorción a tiempo infinito se lleva a cabo al 100%, por lo tanto la economía atómica es del 100%

Tratamiento y disposición de los residuos: Después de realizar la filtración de los residuos, la bentonita por ser un residuo sólido ecoamigable y el líquido es biodegradable por lo tanto pueden depositarse en la tarja. Parte de los residuos son ecoamigables y la otra parte biodegradable, por lo tanto utilizar el matiz RGB: 79, 174, 50.

#### 4.3.4 Análisis desde el punto de vista de la química verde

Tabla 4.10. Análisis desde el punto de vista de la química verde del experimento de cinética de adsorción de antocianinas del jugo de arándano sobre bentonita.		
No	Observación del principio en el práctica	Cumple
1	La mezcla de los reactantes sólo requiere el volumen de la celda del espectrofotómetro, en este caso 4 mL (semimicro), por lo que la cantidad de residuos se minimiza.	√
2	El fenómeno de adsorción a tiempo infinito (168 h), se lleva a cabo al 100%, por lo tanto el líquido es agua, y el sólido colorantes del jugo de arándano y manzana/bentonita.	√
3	El experimento es eficaz y la metodología seleccionada, presenta toxicidad reducida.	√
4	Reducir la toxicidad de los productos o residuos, pero mantener el objetivo del experimento.	√
5	El avance de la reacción se realizó por métodos fisicoquímicos, eliminando el uso de sustancias auxiliares.	√
6	Todo el experimento se desarrolla a temperatura y presión ambientes, disminuyendo el consumo energético	√
7	La materia prima ha de ser preferiblemente renovable en vez de agotable, siempre que sea técnica y económicamente viable.	√
8	No fue necesaria la formación de grupos de bloqueo.	√
9	No es necesaria la catálisis.	√
10	Se deben diseñar experimentos de tal manera que al finalizar los productos y/o residuos que se obtengan, se degraden después de su uso.	Cumple Parcialmente
11	El monitoreo se hace en tiempo real.	√
12	Los materiales no son tóxicos, por lo tanto se minimizó el riesgo potencial de accidentes químicos.	√

La cinética de adsorción de antocianinas de jugo de arándano y/o manzana sobre bentonita cumple once de los doce principios de la química verde, por lo tanto al diagrama de flujo ecológico le corresponde el matiz RGB: 122, 185, 41. Los residuos son biodegradables, correspondiéndole el matiz RGB: 79,174, 50, dicho diagrama se muestra a continuación.



**Diagrama 2.** Diagrama de flujo ecológico del experimento cinética de adsorción de antocianinas de jugo de arándano y/o manzana sobre bentonita.



## CONCLUSIONES

Finalmente partiendo de los resultados obtenidos de los estudios efectuados se concluye que los objetivos e hipótesis propuestos en el presente trabajo de tesis fueron cumplidos de manera satisfactoria, ya que se logró:

- Desarrollar una forma de realizar un diagrama ecológico con los colores y figuras propuestas por la ISO y ANSI, de acuerdo con los 12 principios de química verde aplicándolo en dos estudios cinéticos permitiendo observar que tan respetuoso es con la salud y con el medio ambiente, tanto durante el experimento como para la disposición de residuos.
- Se logró caracterizar la bentonita utilizada en ambos experimentos mediante un análisis fisicoquímico elemental determinando su área superficial.
- Se determinaron las condiciones óptimas para llevar a cabo la cinética de adsorción del azul de metileno y de antocianinas en jugo de arándano sobre bentonita.
- Por lo tanto la elaboración de dicho diagrama, mostro ser clave fundamental para reconocer los puntos en los que los procesos puede mejorarse y convertirse en amigable al ambiente, además de dar la aportación adecuada de información para que pueda ser utilizada para fines de docencia e incluso industrial.

## BIBLIOGRAFIA

- Aguilera-Ortíz, M., Alanis-Guzmán, M., García-Díaz, C., & Hernández-Brenes, C. (2011). *Characterization and Stability of MISSION Variety Fig Anthocyanins. Universidad y Ciencia. Trópico Húmedo* , 25 (2), 151-158.
- Anastas P, Kirchoff M, Williamson T, *Catalysis as a Foundational Pillar of Green Chemistry, Applied Catalysis A: General* 221, (2001), 3-13.
- Anastas, O. T. (2002). *Origins, Current Status and Future Challenges of Green Chemistry. Acc. Chemical*, 35 (9), 686-694.
- Anastas, P. T., & Warner, J. C. (1998). *Green Chemistry: Theory and Practice.* Oxford University, Nueva York
- Andraos, J. (2005). *Unification of Reaction Metrics for Green Chemistry: Applications to Reaction Analysis. Org. Process Res. Dev.*, 9 (2), 149-163.
- Artigas M., J., Capilla, P., & Pijol, J. (2002). *Tecnología del Color.* España: Universidad de Valencia.
- Barrat, T. (Septiembre de 2005). El Arándano, ¿Un Cultivo con Futuro? *Horticultura* , 30-36.
- Barrios Núñez, A., Sánchez, C. E., Ruíz Vega, J., & Scott D., N. (2008). *Calidad de Poscosecha en Cultivares de Arándano ( VACCINIUM SP.) Sometidos a Períodos de Prealmacenamiento y temperaturas. Agricultura Técnica en México* , 34 (4), 453-457.
- Bensoain, E. (1985). *Mineralogía de arcillas de suelos.* San Jose, Costa Rica: Intituto interamericano de cooperacion para la agricultura.
- Bertagnolli, C., Kleinübing, S. J., & Carlos Da silva, M. G. (2011). *Preparation and Characterization of a Brazilian Bentonite Clay for Removal of Copper in Porous Beds. Applied Clay Science* , 53 (1), 73-79.
- Brindley G, Brown G, *Crystal Structures of Clay Minerals and Their X-Ray Identification*, 6ed, GW Brindley & G. Brown London Mineralogical Society, Londres, (1980) 1-124.
- Buczacki, S. (1994). *Frutas de Jardín.* Madrid, España: Tursen S.A. -Hermann Blume Ediciones.
- Caballero Suárez, L. (2002). *Introducción a la Catálisis Heterogénea.* Bogotá, Colombia: Universidad Nacional de Colombia.

- Cacciatore, K. L. (2008). *Connecting Solubility, Equilibrium, and Periodicity in a Green, Inquiry Experiment for the General Chemistry Laboratory*. *Journal Chemical Education*, 85 (2), 251-279.
- Cann, M. C., & Dickneider, T. A. (2004). *Infusing the Chemistry Curriculum with Green Chemistry Using Real-World Examples, Web modules, and Atomic Economy in organic Chemistry Course*. *Journal Chemical Education*, 81 (7), 977-980.
- Castañeda M., W. (2005). *Color*. Colombia: Universidad de Caldas Artes y Humanidades.
- Castañeda-Ovado, A., Pacheco-Hernández, M. d., Páez-Hernández, M. E., Rodríguez, J. A., & Galán-Vidal, C. A. (2009). Chemical Studies of Anthocyanins: A Review. *ELSEVIER*, 113 (4), 859-871.
- Castells, X. E. (2000). *Reciclaje de Residuos Industriales*. Madrid, España: Diaz Santos S. A.
- D’Orazio, M., & Quagliarini, E. (2010). Study on some sorption properties of treated bentonites for their potential use as a moisture regulating system for the preservation of historical wooden elements. *Journal of Cultural Heritage*, 11 (2), 185-195.
- Didi, M., Makhoukhi, B., Azzouz, A., & Villemin, D. (2009). Colza oil bleaching through optimized acid activation of bentonite. A comparative study. *Applied Clay Science*, 49, 336-344.
- Durst, R., & Wrolstad, R. (2011). Separation and Characterization of Anthocyanins by HPLC. *Handbook of Food Analytical Chemistry*, 33-45.
- Early Grim, R., & Güven, N. (1978). *Bentonites: Geology, Mineralogy, Properties and Uses*. Elsevier Scientific Publishing Company.
- Edionwe, E., Villareal, J. R., & Smith K., C. (2011). How much Cranberry juice is in Cranberry-Apple Juice? A general Chemistry Spectrophotometric Experiment. *Journal Chemical Education*, 81 (7), 1410-1412.
- El Qada, E. N., Allen, S. J., & Walker, G. M. (2006). Adsorption of Methylene Blue Onto Activated Carbon Produced From Steam Activated Bituminous Coal: A Study of Equilibrium Adsorption Isotherm. *El silver* (124), 103-110.
- Franca, A. S., Oliveira, L. S., & Ferreira, M. E. (2009). Kinetics and Equilibrium Studies of Methylene Blue Adsorption by Spent Coffee Grounds. *El silver* (249), 267-272.

- Garzón, G. A. (2008). Anthocyanins as Natural Colorants and Bioactive Compounds. A Review. *Acta biol. Colomb* , 13 (3), 27-36.
- Gron, L. U. (2009). Green Analytical Chemistry: Application and Education. *Green Chemistry Educacion* (Capitulo 7), 103-116.
- H. Scott, F. Elementos de Ingeniería de las Reacciones Químicas. Pretence Hill.
- Heizer, J., & Render, B. (2004). *Principios de Administración* (Quinta ed.). México: Pearson Educación.
- Hutton-Jamieson, I. (1991). *Técnicas de dibujo con lápices de colores*. España: Hermann Blume Ediciones.
- Keremy, D. (18 de Junio de 2012). *Presidential Green Chemistry Challenge Awards*. Recuperado el 1 de Noviembre de 2012, de <http://www.epa.gov/opptintr/greenchemistry/pubs/pgcc/past.html>
- Kim, S. J., Yu, D. J., Kim, T.-C., & Lee, H. J. (2011). Growth and Photosynthetic Characteristics of Blueberry (*VACCINIUM CORYMBOSUM* CV. BLEUCROP) Under Various Shade Levels. *Scientia Horticulturae* (129), 486-402.
- Kirchhoff, M. M. (2001). Topics in Green Chemistry. *Journal Chemical Education* , 78 (12), 1577.
- Kirchhoff, M. M. (2001). Topics in Green Chemistry. *Journal Chemical Education* , 78 (12), 1577.
- Leofanti, G., Padovan, M., Tozzola, G. & Venturelli, B, Surface Area and Pore Texture of Catalysts. *Catal. Today* 41, 207 (1988)
- Lohachoompol, V., Mulholland, M., Szrednicki, G., & Craske, J. (2008). Determination of Anthocyanins in Various Cultivars of Highbush and rabbiteye Blueberries. *Food Chemistry* , 111 (1), 249-254.
- Neri Ruz, E., Celis González, C., De León Jaen, S., Gutierrez, E. P., Kunhardt Urquiza, E., Rosenfield Ovadía, L., y otros. (2009). El Jugo de Arándano y su papel en las infecciones de las Vías Urinarias. *Ginecología y Obstetricia de México* , 77 (11), 512-517.
- Obaya, A., & Vargas-Rodriguez, Y. M. (2011). La Enseñanza Experimental de la Química Verde desde una Perspectiva Interdisciplinaria y Ecológica. UNAM , 27-34.
- P. Poole Jr., C., & J. Owens, F. (2003). *Introducción a la Nanotecnología*. España: Reverté S.A.

- Palacios Santos, L. A., Tapias Garcia, H., & Saldarriaga Molina, C. (2005). *Métodos y Algoritmos de Diseño de Ingeniería Química* (Primera ed.). Colombia: Universidad de Antioquia.
- Pastrana Bonilla, E., & Gutiérrez Guzmán, N. (2009). Identificación y Cuantificación de Antocianinas en Uvas Muscadinas por Cromatografía Líquida y Espectrometría de Masas. *Entornos. Edición Especial. Universidad Surcolombiana* (21), 9-17.
- Ramos Escudero, F., Muñoz, A. M., Alvarado-Ortiz Ureta, C., & Yáñez A., J. (2010). Antocianinas, Polifenoles, Actividad Anti-Oxidante de Sachapapa Morada (DIOSCOREA TRIFIDA) y Evaluación de Lipoperoxidación en Suero Humano. *Soc. Quím. de Perú* , 76 (1), 61-72.
- Rauf, M. A., Qadri, S. M., Ashraf, S., & Al-Mansoori, K. M. (2008). Adsorption Studies of Toluidine Blue from Aqueous Solutions Onto Gypsum. *elsevier* (130), 90-95.
- Shaw, D.J. (1977). *Introducción a la Química de superficies y coloides*. (2ª Ed). Editorial Alhambra. Madrid.
- Sing K.S.W, Everett D.H., Haul R.A.W., Moscow L., Pierotti R. A., Rouquérol J., Siemieniowska T., *Pure & Applied Chemistry*, 57, (1985) 603.
- Torres Izquierdo, J. F. (2004). *Cinética de Reacciones Químicas*. Baelona: Universidad de Barcelona.
- Tuesta, E. G., Vivas, M., & Gutarra, A. (2005). Modificación Química de Arcillas y su Aplicación en la Retención de Colorantes. *Rev. Soc. Quím. Perú* , 71 (1), 26-36.
- Vargas Simón, G., Soto Hernández, R. M., & Rodríguez González, M. T. (2002). Análisis Preliminar de Antocianinas en Fruto de Icaco (CHRYSOBALANUS ICACO L.). *Fitotecnia Mexicana* , 25 (003), 261-264.
- Vargas-Rodríguez, Y. M. (2008 a) Tesis de doctorado: Preparación y caracterización de arcillas ácidas y superácidas: algunas aplicaciones. UNAM. México
- Vargas Rodríguez, Y. M., & Obaya Valdivia, A. E. (2005). *Cálculo de parámetros de rapidez en cinética química y enzimática* . Mexico: UNAM .
- Vargas, M & Obaya, A. (2011). *Cinética Química y Catálisis Verde*. En *Experimentos de Química Verde* (pp. 189-215). México: Universidad Nacional Autónoma de México.
- Velde B, *Introduction to Clay Minerals*, Chapman & Hall, New York (1992)

- Vuarant, C. O. (2010). *Arándanos. Avances Científicos-Tecnológicos en la región de Salto Grande*. Republica de Argentina: Universidad Nacional de Entre Rios.
- Yarto Ramírez, M., Gavilán García, A., & Martínez Cordero, M. Á. (15 de Noviembre de 2007). *Instituto Nacional de Ecología*. Recuperado el 15 de Agosto de 2012, de [http://www.ine.gob.mx/dgicurg/sqre/sustancias\\_amb.html](http://www.ine.gob.mx/dgicurg/sqre/sustancias_amb.html)
- Zavala, S. (1994). Estudio de la Condensación de Alcoholes Trimetoxi-Bencíclicos con Bentonita. En *UNAM, Tesis* (pág. 68). México: UNAM.

## **ANEXOS**

## Hoja Técnica de Seguridad del Material

Versión 3.3

Fecha de revisión 09/19/2012

Fecha de impresión 05/20/2013

## 1. IDENTIFICACIÓN DEL PRODUCTO Y DE LA COMPAÑÍA

Nombre del producto	: Bentonita
Referencia	: B3378
Marca	: Sigma
Proveedor	: Sigma-Aldrich Química, S. de R.L. de C.V Parque Industrial Toluca 2000 Calle 6 Norte No. 107 50200 TOLUCA MEXICO
Teléfono	: +52 (0)1-800-007-5300
Fax	: +52 (0)1-800-712-9920
Teléfono de Urgencia (Tanto para el proveedor como para el fabricante)	:
Información suministrada por	: Sigma-Aldrich Corporation Product Safety - Americas Region 1-800-521-8956

## 2. IDENTIFICACIÓN DE LOS PELIGROS

## Revisión de la Emergencia

## Peligros OSHA

Efecto del órgano de blanco

## Órganos diana

Pulmones

No es una sustancia peligrosa según SGA.

## HMIS Classification

Health hazard:	0
Chronic Health Hazard:	*
Flammability:	0
Physical hazards:	0

## Clasificación NFPA

Peligro para la salud:	0
Fuego:	0
Peligro de Reactividad:	0

## Efectos potenciales para la Salud

Inhalación	Puede ser nocivo si se inhala. Puede provocar una irritación en el tracto respiratorio.
Piel	Puede ser nocivo si es absorbido por la piel. Puede provocar una irritación de la piel.
Ojos	Puede provocar una irritación en los ojos.
Ingestión	Puede ser nocivo si es tragado.

## 3. COMPOSICIÓN/INFORMACIÓN SOBRE LOS COMPONENTES

Sinónimos	: Montmorillonite
Formula	: H <sub>2</sub> Al <sub>2</sub> O <sub>6</sub> Si
Peso molecular	: 180.1 g/mol



Componente	Concentración
<b>Bentonite a colloidal clay, consist primarily of montmorillonite</b>	
No. CAS	1302-78-9
No. CE	215-108-5
	-

#### 4. PRIMEROS AUXILIOS

##### Recomendaciones generales

Retire a la persona de la zona peligrosa.

##### Si es inhalado

Si aspiró, mueva la persona al aire fresco. Si ha parado de respirar, hacer la respiración artificial.

##### En caso de contacto con la piel

Eliminar lavando con jabón y mucha agua.

##### En caso de contacto con los ojos

Lavarse abundantemente los ojos con agua como medida de precaución.

##### Si es tragado

Nunca debe administrarse nada por la boca a una persona inconsciente. Enjuague la boca con agua.

#### 5. MEDIDAS DE LUCHA CONTRA INCENDIOS

##### Medios de extinción apropiados

Usar agua pulverizada, espuma resistente al alcohol, polvo seco o dióxido de carbono.

##### Equipo de protección especial para el personal de lucha contra incendios

Si es necesario, usar equipo de respiración autónomo para la lucha contra el fuego.

##### Productos de combustión peligrosos

Productos de descomposición peligrosos formados en condiciones de incendio. - Óxido de aluminio, óxidos de silicio

#### 6. MEDIDAS EN CASO DE VERTIDO ACCIDENTAL

##### Precauciones personales

Evite la formación de polvo. Evitar respirar los vapores, la neblina o el gas.

##### Precauciones relativas al medio ambiente

No dejar que el producto entre en el sistema de alcantarillado.

##### Métodos y material de contención y de limpieza

Limpiar y traspalar. Guardar en contenedores apropiados y cerrados para su eliminación.

#### 7. MANIPULACIÓN Y ALMACENAMIENTO

##### Precauciones para una manipulación segura

Debe disponer de extracción adecuada en aquellos lugares en los que se forma polvo. Disposiciones normales de protección preventivas de incendio.

##### Condiciones para el almacenaje seguro

Conservar el envase herméticamente cerrado en un lugar seco y bien ventilado.

#### 8. CONTROLES DE EXPOSICIÓN/ PROTECCIÓN INDIVIDUAL

No contiene sustancias con valores límites de exposición profesional.

##### Protección personal

##### Protección respiratoria

Protección respiratoria no requerida. Donde la protección sea deseada Usar respiradores y componentes testados y aprobados bajo los estándares gubernamentales apropiados como NIOSH (EEUU) o CEN (UE)

**Protección de las manos**

Manipular con guantes. Los guantes deben ser controlados antes de la utilización. Utilice la técnica correcta de quitarse los guantes (sin tocar la superficie exterior del guante) para evitar el contacto de la piel con este producto. Deseche los guantes contaminados después de su uso, de conformidad con las leyes aplicables y buenas prácticas de laboratorio. Lavar y secar las manos.

**Protección de los ojos**

Use equipo de protección para los ojos probado y aprobado según las normas gubernamentales correspondientes tales como NIOSH (EE.UU.) o EN 166 (UE).

**Protección de la piel y del cuerpo**

Elegir la protección para el cuerpo según sus características, la concentración y la cantidad de sustancias peligrosas, y el lugar específico de trabajo. El tipo de equipamiento de protección debe ser elegido según la concentración y la cantidad de sustancia peligrosa al lugar específico de trabajo.

**Medidas de higiene**

Procedimiento general de higiene industrial.

---

**9. PROPIEDADES FÍSICAS Y QUÍMICAS****Aspecto**

Forma	gránulos
Color	gris, beige

**Datos de Seguridad**

pH	6.0 - 9.0
Punto de fusión/ punto de congelación	sin datos disponibles
Punto de ebullición	sin datos disponibles
Punto de inflamación	no aplicable
Temperatura de ignición	sin datos disponibles
Temperatura de auto-inflamación	sin datos disponibles
Límites inferior de explosividad	sin datos disponibles
Límites superior de explosividad	sin datos disponibles
Presión de vapor	sin datos disponibles
Densidad	2.400 g/cm <sup>3</sup>
Solubilidad en agua	sin datos disponibles
Coefficiente de reparto n- octanol/agua	sin datos disponibles
Densidad relativa del vapor	sin datos disponibles
Olor	sin datos disponibles
Umbral olfativo	sin datos disponibles
Tasa de evaporación	sin datos disponibles

---

**10. ESTABILIDAD Y REACTIVIDAD**

**Estabilidad química**

Estable bajo las condiciones de almacenamiento recomendadas.

**Posibilidad de reacciones peligrosas**

sin datos disponibles

**Condiciones que deben evitarse**

sin datos disponibles

**Materias que deben evitarse**

Ácidos fuertes

**Productos de descomposición peligrosos**

Productos de descomposición peligrosos formados en condiciones de incendio. - Óxido de aluminio, óxidos de silicio  
Otros productos de descomposición peligrosos - sin datos disponibles

---

**11. INFORMACIÓN TOXICOLÓGICA****Toxicidad aguda****Oral DL50****Inhalación CL50**

sin datos disponibles

**Cutáneo DL50**

sin datos disponibles

**Otra información sobre toxicidad aguda**

DL50 intravenoso - rata - 35 mg/kg

Observaciones: Pulmones, torax o Respiración: Edema pulmonar agudo

**Corrosión o irritación cutáneas**

sin datos disponibles

**Lesiones o irritación ocular graves**

sin datos disponibles

**Sensibilización respiratoria o cutánea**

sin datos disponibles

**Mutagenicidad en células germinales**

sin datos disponibles

**Carcinogenicidad**

Carcinogenicidad - ratón - Oral

Tumorigeno: Tumorigeno sin pruebas concluyentes según los criterios del RTECS Hepáticos: Tumores

IARC: No component of this product present at levels greater than or equal to 0.1% is identified as probable, possible or confirmed human carcinogen by IARC.

ACGIH: No component of this product present at levels greater than or equal to 0.1% is identified as a carcinogen or potential carcinogen by ACGIH.

NTP: No component of this product present at levels greater than or equal to 0.1% is identified as a known or anticipated carcinogen by NTP.

OSHA: No component of this product present at levels greater than or equal to 0.1% is identified as a carcinogen or potential carcinogen by OSHA.

**Toxicidad para la reproducción**

sin datos disponibles

**Teratogenicidad**

sin datos disponibles

**Toxicidad específica en determinados órganos - exposición única (SGA)**

sin datos disponibles

**Toxicidad específica en determinados órganos - exposiciones repetidas (SGA)**

sin datos disponibles

**Peligro de aspiración**

sin datos disponibles

**Efectos potenciales sobre la salud**

<b>Inhalación</b>	Puede ser nocivo si se inhala. Puede provocar una irritación en el tracto respiratorio.
<b>Ingestión</b>	Puede ser nocivo si es tragado.
<b>Piel</b>	Puede ser nocivo si es absorbido por la piel. Puede provocar una irritación de la piel.
<b>Ojos</b>	Puede provocar una irritación en los ojos.

**Signos y Síntomas de la Exposición**

Iritación del pulmón, Asma

**Efectos sinérgicos**

sin datos disponibles

**Información Adicional**

RTECS: CT9450000

---

**12. INFORMACIÓN ECOLÓGICA**

**Toxicidad**

Toxicidad para los peces CL50 - *Oncorhynchus mykiss* (Trucha irisada) - 19,000 mg/l - 96 h

**Persistencia y degradabilidad**

sin datos disponibles

**Potencial de bioacumulación**

sin datos disponibles

**Movilidad en el suelo**

sin datos disponibles

**Valoración PBT y MPMB**

sin datos disponibles

**Otros efectos adversos**

sin datos disponibles

---

**13. CONSIDERACIONES RELATIVAS A LA ELIMINACIÓN**

**Producto**

Ofertar el sobrante y las soluciones no-aprovechables a una compañía de vertidos acreditada.

**Envases contaminados**

Eliminar como producto no usado.

---

**14. INFORMACIÓN RELATIVA AL TRANSPORTE**

**DOT (US)**

Not dangerous goods

**IMDG**

Not dangerous goods

**IATA**

Not dangerous goods

---

**15. INFORMACIÓN REGLAMENTARIA**

**Peligros OSHA**

Efecto del órgano de blanco

**SARA 302 Componentes**

SARA 302: Este material no contiene productos químicos sujetos a los requisitos reportados por SARA Título III, sección 302.

**SARA 313 Componentes**

SARA 313: Este material no contiene ningún componente químico con los conocidos números CAS que exceden el umbral de los niveles reportados (De Minimis) establecidos por SARA título III, sección 313.

**SARA 311/312 Peligros**

Peligro para la Salud Crónico

**Massachusetts Right To Know Componentes**

No hay componentes sujetos al Acta de Derecho a Saber de Massachusetts.

**Pennsylvania Right To Know Componentes**

Bentonite a colloidal clay, consist primarily of montmorillonite	No. CAS 1302-78-9	Fecha de revisión
------------------------------------------------------------------	----------------------	-------------------

**New Jersey Right To Know Componentes**

Bentonite a colloidal clay, consist primarily of montmorillonite	No. CAS 1302-78-9	Fecha de revisión
------------------------------------------------------------------	----------------------	-------------------

**Prop. 65 de California Componentes**

Este producto no contiene ninguna sustancia química conocida para el de Estado de California que pueden causar cáncer, defectos de nacimiento, o cualquier otro daño reproductivo. Este producto no contiene ninguna sustancia química conocida para el de Estado de California que pueden causar cáncer, defectos de nacimiento, o cualquier otro daño reproductivo.

**16. OTRA INFORMACIÓN****Otros datos**

Copyright 2012 Sigma-Aldrich Co. LLC. Se autoriza la reproducción en número ilimitado de copias para uso exclusivamente interno.

La información indicada arriba se considera correcta pero no pretende ser exhaustiva y deberá utilizarse únicamente como orientación. La información contenida en este documento esta basada en el presente estado de nuestro conocimiento y es aplicable a las precauciones de seguridad apropiadas para el producto. No representa ninguna garantía de las propiedades del producto. La Corporación Sigma-Aldrich y sus Compañías Afiliadas, no responderán por ningún daño resultante de la manipulación o contacto con el producto indicado arriba. Dirijase a [www.sigma-aldrich.com](http://www.sigma-aldrich.com) y/o a los términos y condiciones de venta en el reverso de la factura o de la nota de entrega.

## FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo el Reglamento (CE) No. 1907/2006

Versión 4.0 Fecha de revisión 27.02.2010

Fecha de impresión 04.10.2011

ENERIG EU MSDS - NO COUNTRY SPECIFIC DATA - NO OEL DATA

## 1. IDENTIFICACIÓN DE LA SUSTANCIA/MEZCLA Y DE LA COMPAÑÍA O EMPRESA

Nombre del producto	: Methylene blue
Referencia	: M9140
Marca	: Sigma-Aldrich
Compañía	: Sigma-Aldrich 3050 Spruce Street SAINT LOUIS MO 63103 USA
Teléfono	: +1 800-325-5832
Fax	: +1 800-325-5052
Teléfono de Urgencia	: (314) 776-6555

## 2. IDENTIFICACIÓN DE LOS PELIGROS

**Clasificación de la sustancia o mezcla**

De acuerdo al Reglamento (EC) No1272/2008

Toxicidad aguda, Oral (Categoría 4)

Iritación cutánea (Categoría 2)

Iritación ocular (Categoría 2)

Toxicidad específica en determinados órganos (stot) - exposición única (Categoría 3)

De acuerdo con la Directiva Europea 67/548/CEE, y sus enmiendas.

Nocivo por ingestión. Irrita los ojos, la piel y las vías respiratorias.

**Elementos de la etiqueta**

Pictograma



Palabra de advertencia

Atención

Indicación(es) de peligro

H302

H315

H319

H335

Nocivo en caso de ingestión.

Provoca irritación cutánea.

Provoca irritación ocular grave.

Puede irritar las vías respiratorias.

Declaración(es) de prudencia

P261

P305 + P351 + P338

Evitar respirar el polvo/el humo/el gas/la niebla/los vapores/el aerosol.

EN CASO DE CONTACTO CON LOS OJOS: Aclarar cuidadosamente con agua durante varios minutos. Quitar las lentes de contacto, si lleva y resulta fácil. Seguir aclarando.

Símbolo(s) de peligrosidad

Xn

Nocivo

Frase(s) - R

R22

R36/37/38

Nocivo por ingestión.

Irrita los ojos, la piel y las vías respiratorias.

Frase(s) - S

S26

En caso de contacto con los ojos, lávense inmediata y abundantemente con agua y acúdase a un médico.

Otros Peligros - ninguno(a)

**3. COMPOSICIÓN/INFORMACIÓN SOBRE LOS COMPONENTES**

Sinónimos : Tetramethylthionine chloride  
3,7-bis(Dimethylamino)phenazathionium chloride  
Basic Blue 9

Formula :  $C_{16}H_{18}ClN_3S \cdot 3H_2O$

Peso molecular : 373,9 g/mol

No. CAS	No. CE	No. Índice	Clasificación	Concentración
<b>Methylthionium chloride</b>				
7220-79-3	200-515-2	-	Acute Tox. 4; Skin Irrit. 2; Eye Irrit. 2; STOT SE 3; H302, H315, H319, H335 Xn, R22 - R36/37/38	-

Para el texto íntegro de las Declaraciones-H mencionadas en esta sección, véase la Sección 16.

**4. PRIMEROS AUXILIOS****Recomendaciones generales**

Consultar a un médico. Mostrar esta ficha de seguridad al doctor que esté de servicio.

**Si es inhalado**

Si aspiró, mueva la persona al aire fresco. Si no respira, administrar respiración artificial. Consultar a un médico.

**En caso de contacto con la piel**

Eliminar lavando con jabón y mucha agua. Consultar a un médico.

**En caso de contacto con los ojos**

Lávese a fondo con agua abundante durante 15 minutos por lo menos y consulte al médico.

**Si es tragado**

Nunca debe administrarse nada por la boca a una persona inconsciente. Enjuague la boca con agua. Consultar a un médico.

**5. MEDIDAS DE LUCHA CONTRA INCENDIOS****Medios de extinción adecuados**

Usar agua pulverizada, espuma resistente al alcohol, polvo seco o dióxido de carbono.

**Equipo de protección especial para el personal de lucha contra incendios**

Si es necesario, usar equipo de respiración autónomo para la lucha contra el fuego.

**6. MEDIDAS EN CASO DE LIBERACIÓN ACCIDENTAL****Precauciones personales**

Utilícese equipo de protección individual. Evite la formación de polvo. Evitar respirar el polvo. Asegúrese una ventilación apropiada.

**Precauciones para la protección del medio ambiente**

No dejar que el producto entre en el sistema de alcantarillado.

**Métodos y materiales para la contención y la limpieza**

Recoger y preparar la eliminación sin originar polvo. Guardar en contenedores apropiados y cerrados para su eliminación.

**7. MANIPULACIÓN Y ALMACENAMIENTO**

**Precauciones para una manipulación sin peligro**

Evitese el contacto con los ojos y la piel. Evitese la formación de polvo y aerosoles. Debe disponer de extracción adecuada en aquellos lugares en los que se forma polvo. Disposiciones normales de protección preventivas de incendio.

**Condiciones para el almacenaje seguro**

Almacenar en un lugar fresco. Conservar el envase herméticamente cerrado en un lugar seco y bien ventilado.

---

**8. CONTROLES DE LA EXPOSICIÓN/PROTECCIÓN PERSONAL****Protección personal****Protección respiratoria**

Donde el asesoramiento de riesgo muestre que los respiradores purificadores de aire son los apropiados, usar máscara de polvo tipo N95 (EEUU) o tipo P1 (EN 143) Usar respiradores y componentes testados y aprobados bajo los estándares gubernamentales apropiados como NIOSH (EEUU) o CEN (UE)

**Protección de las manos**

Los guantes de protección seleccionados deben de cumplir con las especificaciones de la Directiva de la UE 89/686/CEE y de la norma EN 374 derivado de ello.

Manipular con guantes.

**Protección de los ojos**

Gafas de seguridad con protecciones laterales conformes con la EN166

**Protección de la piel y del cuerpo**

Elegir una protección para el cuerpo según la cantidad y la concentración de la sustancia peligrosa en el lugar de trabajo.

**Medidas de higiene**

Manipular con las precauciones de higiene industrial adecuadas, y respetar las prácticas de seguridad. Lávense las manos antes de los descansos y después de terminar la jornada laboral.

---

**9. PROPIEDADES FÍSICAS Y QUÍMICAS****Aspecto**

Estado físico	polvo
Color	verde oscuro

**Datos de Seguridad**

pH	sin datos disponibles
Punto de fusión	190 °C
Punto de ebullición	sin datos disponibles
Punto de inflamación	sin datos disponibles
Temperatura de ignición	sin datos disponibles
Límite de explosión, inferior	sin datos disponibles
Límite de explosión, superior	sin datos disponibles
Solubilidad en agua	soluble

---

**10. ESTABILIDAD Y REACTIVIDAD****Estabilidad química**

Estable bajo las condiciones de almacenamiento recomendadas.

**Condiciones que deben evitarse**

sin datos disponibles



**Materias que deben evitarse**

Agentes oxidantes fuertes

**Productos de descomposición peligrosos**

Productos de descomposición peligrosos formados en condiciones de incendio. - Óxidos de carbono, óxidos de nitrógeno (NOx), Óxidos de azufre, Gas cloruro de hidrógeno

---

**11. INFORMACIÓN TOXICOLÓGICA****Toxicidad aguda**

sin datos disponibles

**Corrosión o irritación cutáneas**

sin datos disponibles

**Lesiones oculares graves/ irritación ocular**

sin datos disponibles

**Sensibilización de la piel o respiratoria**

sin datos disponibles

**Mutagenicidad en células germinales**

sin datos disponibles

**Carcinogenicidad**

IARC: No se identifica ningún componente de este producto, que presente niveles mayores que o igual a 0,1% como agente carcinógeno humano probable, posible o confirmado por la (IARC) Agencia Internacional de Investigaciones sobre Carcinógenos.

**Toxicidad para la reproducción**

sin datos disponibles

**Toxicidad específica en determinados órganos (stot) - exposición única**

Inhalación - Puede irritar las vías respiratorias.

**Toxicidad específica en determinados órganos (stot) - exposiciones repetidas**

sin datos disponibles

**Peligro por aspiración**

sin datos disponibles

**Efectos potenciales sobre la salud**

<b>Inhalación</b>	Puede ser nocivo si se inhala. Provoca una irritación del tracto respiratorio.
<b>Ingestión</b>	Nocivo por ingestión.
<b>Piel</b>	Puede ser nocivo si es absorbido por la piel. Provoca irritaciones de la piel.
<b>Ojos</b>	Provoca una irritación en los ojos.

**Signos y Síntomas de la Exposición**

En caso de absorción por el cuerpo, da lugar a la formación de metahemoglobina que, en concentración suficiente, provoca cianosis. El ataque puede tardar de 2 a 4 horas, o más, en manifestarse., Vómitos, Diarreas  
Según nuestras informaciones, creemos que no se han investigado adecuadamente las propiedades químicas, físicas y toxicológicas.

**Información Adicional**

RTECS: SP5740000

---

**12. INFORMACIÓN ECOLÓGICA****Toxicidad**

sin datos disponibles

**Persistencia y degradabilidad**

sin datos disponibles

**Potencial de bioacumulación**

sin datos disponibles

**Movilidad en suelo**  
sin datos disponibles

**Valoración PBT y MPMB**  
sin datos disponibles

**Otros efectos nocivos**  
sin datos disponibles

---

### 13. CONSIDERACIONES RELATIVAS A LA ELIMINACIÓN

**Producto**

Observar todos los reglamentos estatales y locales sobre la protección del medio ambiente. Para la eliminación de este producto, dirigirse a un servicio profesional autorizado. Disolver o mezclar el producto con un solvente combustible y quemarlo en un incinerador apto para productos químicos provisto de postquemador y lavador.

**Envases contaminados**

Eliminar como producto no usado.

---

### 14. INFORMACIÓN RELATIVA AL TRANSPORTE

**ADR/RID**

Mercancía no peligrosa

**IMDG**

Mercancía no peligrosa

**IATA**

Mercancía no peligrosa

---

### 15. INFORMACIÓN REGLAMENTARIA

La hoja técnica de seguridad cumple con los requisitos de la Reglamento (CE) No. 1907/2006.

---

### 16. OTRA INFORMACIÓN

**Texto de códigos H y frases R mencionadas en la sección 3**

Acute Tox.	Toxicidad aguda
Eye Irrit.	Irritación ocular
H302	Nocivo en caso de ingestión.
H315	Provoca irritación cutánea.
H319	Provoca irritación ocular grave.
H335	Puede irritar las vías respiratorias.
Skin Irrit.	Irritación cutáneas
Xn	Nocivo
R22	Nocivo por ingestión.
R36/37/38	Irrita los ojos, la piel y las vías respiratorias.

**Otros datos**

Copyright 2010 Sigma-Aldrich. Se autoriza la reproducción en número ilimitado de copias para uso exclusivamente interno.

La información indicada arriba se considera correcta pero no pretende ser exhaustiva y deberá utilizarse únicamente como orientación. Sigma-Aldrich, no responderá por ningún daño resultante de la manipulación o contacto con el producto indicado arriba. Ver otros términos y condiciones de venta en el reverso de la factura o de la nota de entrega.