

Adsorción de metales pesados usando nanocelulosa funcionalizada

Material propuesto: nanocelulosa carboxilada
(CNC-COOH) funcionalizada con hierro (FeOOH /
Fe₃O₄).



Realidad problemática: contaminación del agua por metales pesados



Fuentes de contaminación

Descargas mineras y metalúrgicas, efluentes industriales, drenaje ácido y residuos urbanos/agroindustriales.

Consecuencias

Toxicidad, bioacumulación, afectación de ecosistemas y riesgo para consumo humano, riego y ganadería.

Metales objetivo del proyecto

Al, As, Cd, Co, Cu, Fe, Mn, Pb y Zn. En agua pueden presentarse simultáneamente y competir por los sitios activos del adsorbente.

Reto tecnológico

Desarrollar un material de bajo costo, basado en un residuo celulósico, con elevada capacidad de remoción y posibilidad de regeneración.

Concepto de solución



Idea central

Aprovechar bagazo de caña para producir una red nanoestructurada con grupos -COOH y sitios férricos activos.

Resultado esperado

Agua con menor carga metálica y material reutilizable.

Fundamento científico del material propuesto

¿Por qué bagazo de caña?

Es un residuo agroindustrial abundante, económico y rico en celulosa. Su valorización reduce residuos y genera un material de interés ambiental.

¿Por qué nanocelulosa-COOH?

La nanoescala incrementa el área superficial. Los grupos -COOH/-COO^- favorecen atracción electrostática, intercambio iónico y complejación de cationes.

¿Por qué funcionalizar con Fe?

Los grupos $\equiv\text{Fe-OH}$ mejoran la afinidad por especies arsenicales y amplían el espectro de captura del adsorbente multimetálico.

Bagazo



Celulosa



CNC-COOH



CNC-COOH/Fe



Aplicación

El diseño integra dos familias de sitios activos: -COO^- para cationes y $\equiv\text{Fe-OH}$ para especies de As. La forma de uso más realista para validación inicial es el cartucho filtrante o una membrana soporte.

Antecedente 1 · Nanocelulosa carboxilada para adsorción de cationes

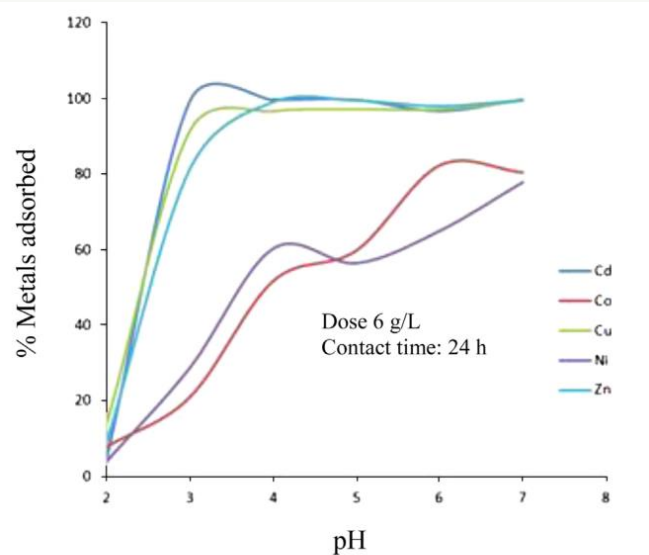


Fig. 4. Effect of pH on adsorption of metal ions by modified nanocellulose.

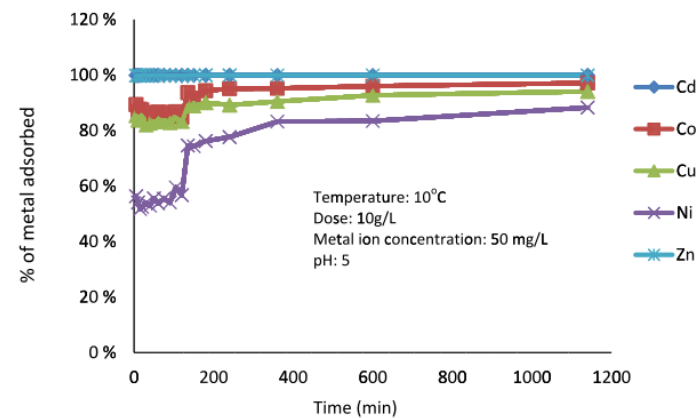


Fig. 3. Effects of contact time on adsorption of metal ions by modified nanocellulose at the room temperature and temperature of 10 °C.

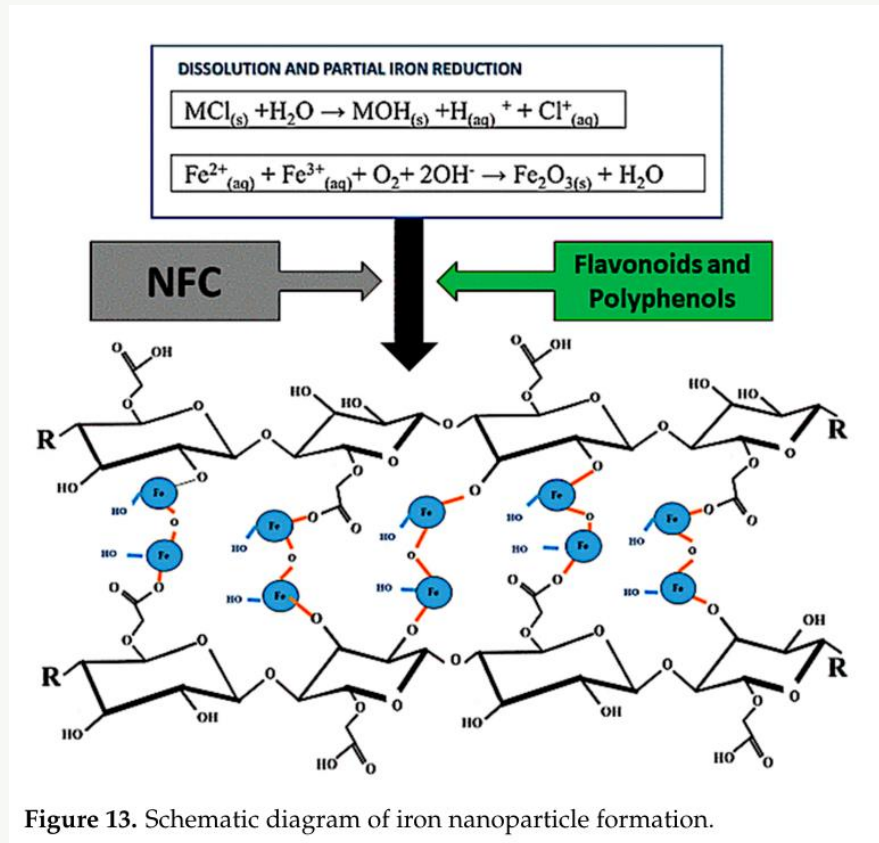
Hokkanen et al., 2013

Mostraron que la modificación carboxílica mejora notablemente la adsorción de Cd^{2+} , Cu^{2+} , Zn^{2+} , Co^{2+} y Ni^{2+} .

Antes de incorporar hierro, conviene asegurar una superficie rica en grupos $-\text{COOH}/-\text{COO}^-$ para maximizar la retención de cationes.

La adsorción aumenta con pH apropiado y se ajusta a modelos de isoterma; por eso la carboxilación es la primera modificación estructural crítica.

Antecedente 2 · Nanocelulosa + Fe para Pb y Cd



Vázquez-Guerrero et al., 2021

El soporte nanocelulósico impregnado con hierro mostró captación de Pb^{2+} y Cd^{2+} y evidenció el papel de grupos carboxilo y especies de Fe.

Mecanismos descritos: intercambio iónico, puentes de hidrógeno, interacciones electrostáticas y complejación.

La fase férrica no sustituye a los carboxilos; ambos trabajan de forma complementaria.

Aporte al proyecto

Valida la arquitectura general del proyecto: red nanocelulósica + funcionalización con hierro como adsorbente multimetálico.

Antecedente 3 · Hidrogel CNC-Fe₃O₄ para arsénico

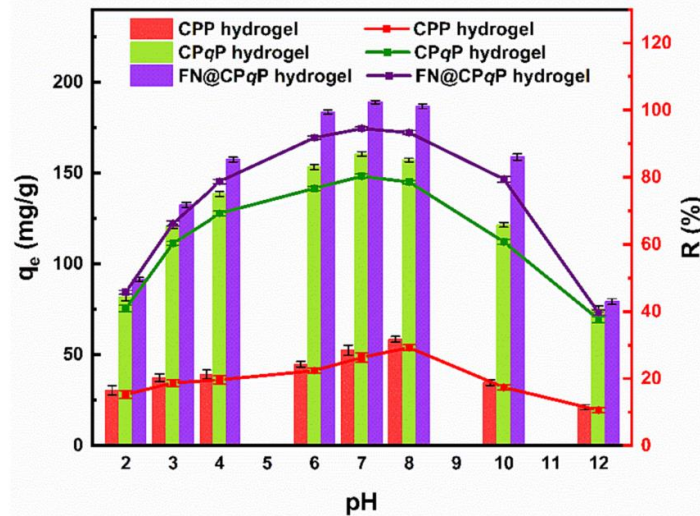


Fig. 4. Effect of pH on the adsorption of As(III) by CPP, CPqP and FN@CPqP hydrogels (initial As(III) concentration: 100 mg/L; adsorbent dosage: 0.5 g/L; T = 25 °C).

Su et al., 2024

Reportaron elevadas capacidades de adsorción de As(III), mostrando la importancia de combinar una red polimérica accesible con una fase férrica activa.

El comportamiento frente a pH y tiempo de contacto confirma que el hierro amplía la afinidad del sistema por especies arsenicales.

Aunque el hidrogel es más complejo que el material propuesto, el principio químico de usar sitios $\equiv\text{Fe}-\text{OH}$ es directamente transferible.

Ruta de obtención del adsorbente a partir de bagazo de caña

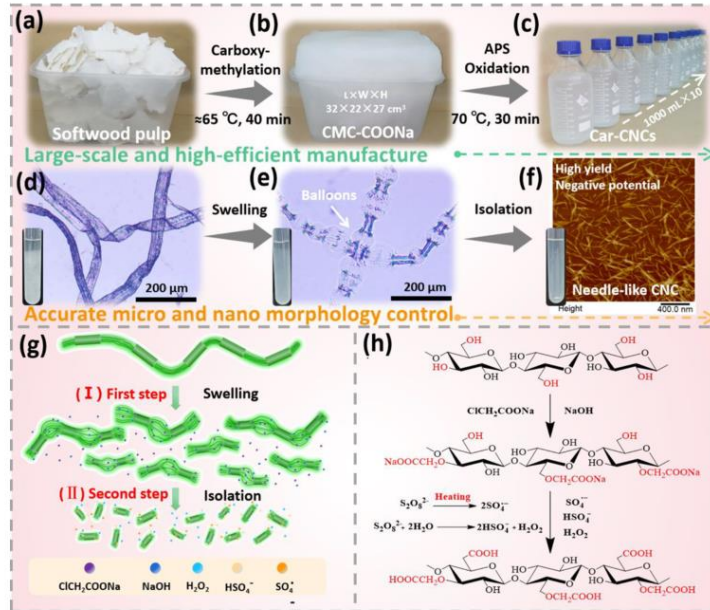


Figure 1. (a–c) Schematic illustrating the preparation of Car-CNCs through carboxymethylation and APS oxidation. (d–f) Microscopic morphologies of raw fibers (softwood pulp), carboxymethylated cellulose fibers (CMC-COONa), and Car-CNCs. (g, h) Schematic illustrating the carboxymethylation swelling pretreatment and APS oxidation mechanism on the cellulose chains.

1. Pretratamiento

Lavado, secado, molienda y eliminación parcial de hemicelulosa/lignina.

2. Extracción de celulosa

Obtención del sustrato rico en fibras celulósicas.

3. Carboxilación

Oxidación con APS para promover $\text{Cell-CH}_2\text{OH} \rightarrow \text{Cell-COOH}$.

4. Funcionalización con Fe

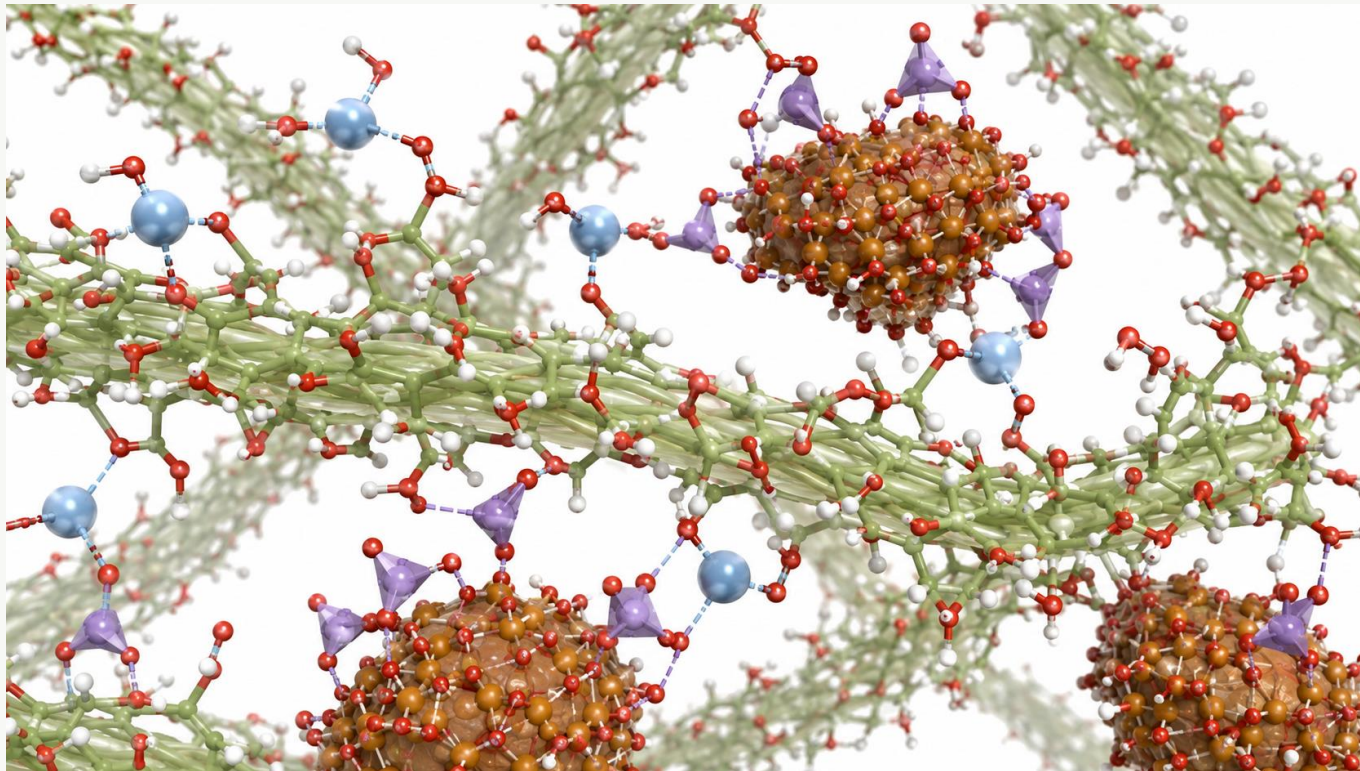
Incorporación de FeOOH o Fe_3O_4 sobre la red carboxilada.

5. Formado

Uso como membrana, cartucho o relleno filtrante.

Transformación química clave: $\text{Cell-CH}_2\text{OH} \rightarrow \text{Cell-COOH} \rightleftharpoons \text{Cell-COO}^-$

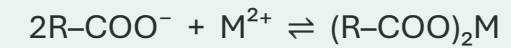
Mecanismo de adsorción de cationes metálicos



Interacciones dominantes

Atracción electrostática, intercambio iónico y complejación/ coordinación con grupos -COO^- y -OH cercanos.

Ecuación representativa



Metales favorecidos

Cd^{2+} , Cu^{2+} , Zn^{2+} , Co^{2+} , Pb^{2+} y Mn^{2+} ; la afinidad depende de pH, competencia iónica y densidad de carboxilos.

Cuanto más grupos -COO^- accesibles tenga la red, mayor será la capacidad de fijar cationes multivalentes.

Mecanismo de captura de arsénico y rol del hierro

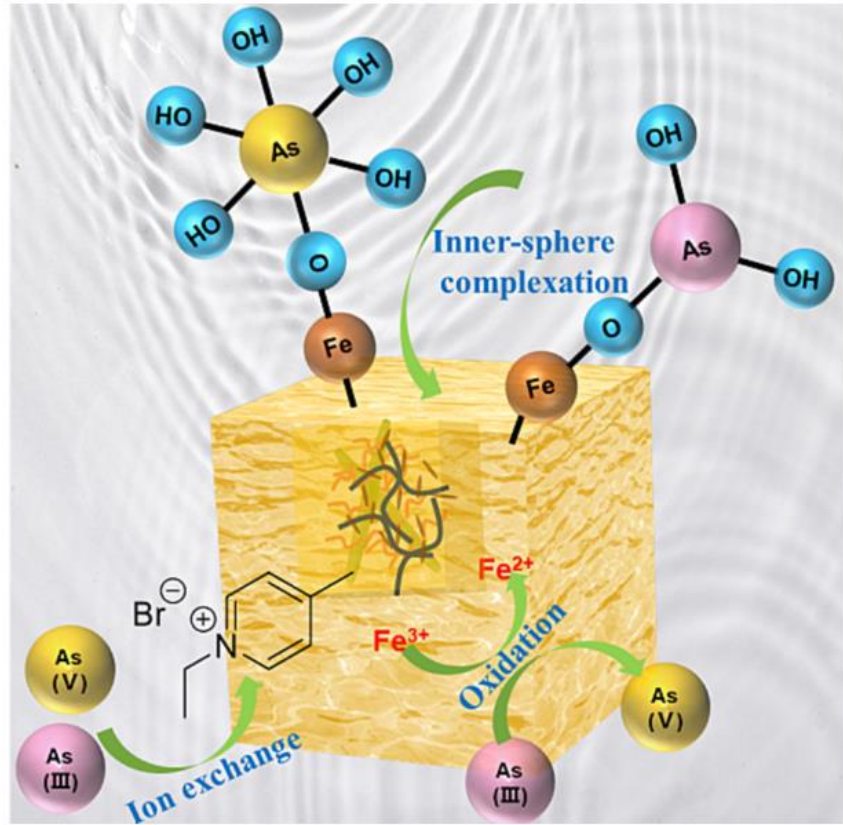
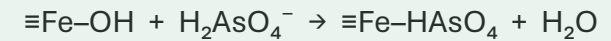


Fig. 11. Schematic illustration of the proposed arsenic adsorption mechanism by FN@CPqP hydrogel.

Sitios activos férricos

Los grupos $\equiv\text{Fe}-\text{OH}$ sobre $\text{FeOOH}/\text{Fe}_3\text{O}_4$ pueden interactuar con especies arsenicales y favorecer complejos de esfera interna.

Ecuación simplificada



Sinergia del material

El hierro amplía la afinidad por As, mientras la red CNC-COOH aporta soporte, accesibilidad y estabilidad del adsorbente.

Formatos de aplicación del adsorbente

Membrana

Ventaja: flujo superficial continuo y fácil integración a sistemas de filtración.

Beads / hidrogel

Ventaja: alta accesibilidad al agua y regeneración relativamente simple.

Uso sugerido

Muy útil para ensayos de laboratorio y validación inicial en celdas de filtración.

Uso sugerido

Conveniente para pruebas batch y estudio de cinética/isotermas.



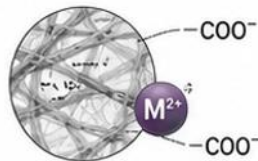
Recomendación del proyecto

Priorizar el formato cartucho filtrante: es visualmente potente, operativamente simple y fácil de demostrar en exposición.

Formatos de aplicación del adsorbente

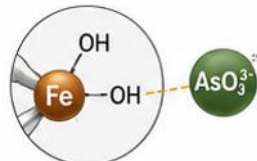


MECANISMO DE REMOCIÓN



Adsorción de cationes por grupos -COO^-

Los grupos carboxilato atraen y retienen iones metálicos (Pb^{2+} , Cd^{2+} , Cu^{2+} , Zn^{2+}).



Captura de As por sitios $\equiv\text{Fe-OH}$

Los grupos hidroxilo de Fe adsorben arsénico ($\text{AsO}_3^{3-}/\text{AsO}_4^{3-}$) por interacción superficial.



Sistema de lecho fijo / flujo continuo

El agua atraviesa el cartucho adsorbente de manera continua, asegurando alta eficiencia y operación estable.



Aplicable a aguas de río contaminadas

Diseñado para remover múltiples metales pesados y As presentes en aguas superficiales.

BENEFICIOS CLAVE



Alta afinidad y selectividad por metales pesados y As



Material renovable, sostenible y de bajo costo



Protección del adsorbente mediante prefiltración



Regenerable y reutilizable (uso prolongado)



Mejora la calidad del agua y protege los ecosistemas

Propuesta de metodología de trabajo y evaluación

1

Preparación del bagazo

Lavado, secado y molienda.

2

Extracción de celulosa

Tratamiento químico para obtener fibra celulósica.

3

Carboxilación con APS

Introducir grupos –COOH/–COO⁻.

4

Funcionalización con Fe

Anclar FeOOH / Fe₃O₄.

5

Ensayos de adsorción

Batch o flujo para Al, As, Cd, Co, Cu, Fe, Mn, Pb y Zn.

6

Regeneración y reuso

Evaluar estabilidad y pérdida de capacidad.

Caracterización mínima

FTIR (grupos funcionales), SEM o microscopía (morfología), pH de punto de carga cero y, si es posible, contenido de Fe y estabilidad del material.

Parámetros de adsorción

pH, tiempo de contacto, dosis, concentración inicial, competencia iónica, cinética, isothermas y capacidad de regeneración.

Indicadores de desempeño

Porcentaje de remoción (%R), capacidad de adsorción (q_e), selectividad multimetálica y permanencia del rendimiento tras varios ciclos.

Impacto técnico

Obtención de un adsorbente multimetálico de base celulósica, con diseño racional de sitios activos y posibilidad de escalamiento en formato filtro.

Impacto ambiental

Valorización de un residuo agroindustrial y reducción potencial de la carga de metales pesados en agua contaminada.

Impacto social

Propuesta con alto potencial demostrativo para agua segura, sostenibilidad y responsabilidad universitaria.

Conclusión integradora

La estrategia más sólida para el proyecto es: bagazo de caña → extracción de celulosa → carboxilación con APS → funcionalización con hierro → aplicación como cartucho o membrana adsorbente. La literatura respalda que la carboxilación incrementa la captura de cationes y que el hierro es decisivo para ampliar la afinidad por arsénico.

- ✓ Hokkanen, S.; Repo, E.; Sillanpää, M. Removal of heavy metals from aqueous solutions by succinic anhydride modified mercerized nanocellulose. Chemical Engineering Journal 223 (2013) 40–47.
- ✓ Vázquez-Guerrero, C.; et al. Cd(II) and Pb(II) adsorption using a composite obtained from Moringa oleifera cellulose nanofibrils impregnated with iron nanoparticles. Water 13(1), 89 (2021).
- ✓ Su, T.; et al. Cellulose nanocrystal-based polymer hydrogel embedded with iron oxide nanorods for efficient arsenic removal. Carbohydrate Polymers 331 (2024) 121855.
- ✓ Leung, A.C.W.; et al. Production of cellulose nanocrystals by APS oxidation / related literature used to justify carboxylation pathways.
Materiales adjuntos del proyecto y esquemas visuales elaborados para la presente sustentación.