



BENEMÉRITA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE PUEBLA

INSTITUTO DE CIENCIAS

POSGRADO EN CIENCIAS AMBIENTALES



"La Tierra no es de nosotros, nosotros somos de la Tierra"

EVALUACIÓN DE LA FOTOCATALISIS SOLAR PARA EL MEJORAMIENTO DE LA CALIDAD DEL AGUA DE LA PTAR DE ZACATLÁN, PUEBLA.

TESIS

Que para obtener el grado de:

MAESTRA EN CIENCIAS AMBIENTALES

Presenta

Claudia Adriana Pozos Escamilla

Directora de tesis:

Dra. Gabriela Pérez Osorio



Noviembre 2025



BENEMÉRITA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE PUEBLA

INSTITUTO DE CIENCIAS

POSGRADO EN CIENCIAS AMBIENTALES



"La Tierra no es de nosotros, nosotros somos de la Tierra"

EVALUACIÓN DE LA FOTOCATALISIS SOLAR PARA EL MEJORAMIENTO DE LA CALIDAD DEL AGUA DE LA PTAR DE ZACATLÁN, PUEBLA.

TESIS

Que para obtener el grado de:

MAESTRA EN CIENCIAS AMBIENTALES

Presenta

Claudia Adriana Pozos Escamilla

Comité tutorial:

Directora	Dra. Gabriela Pérez Osorio
Tutor	Dra. Edith Chávez Bravo
Integrante Comité Tutorial	Dra. Anabella Handal Silva
Integrante Comité Tutorial	Dra. Sonia Emilia Silva Gómez
Integrante Comité Tutorial	Dra. Juana Deisy Santamaría Juárez

AGRADECIMIENTOS

A la Secretaría de Ciencia, Humanidades, Tecnología e Innovación (SECIHTI) por el apoyo financiero otorgado para la realización de este trabajo de investigación con el número de CVU: 1285806.

Quiero expresar mi más profundo agradecimiento a mi directora de tesis, la Dra. Gabriela Pérez Osorio por ser una guía fundamental en mi trayectoria profesional, su apoyo, orientación y confianza fueron indispensables en cada etapa de este trabajo de investigación.

Agradezco con todo mi corazón al Dr. Guillermo Santamaría Juárez por su apoyo incondicional, tanto en lo académico como en lo personal, porque a pesar de no formar parte de mi comité académico siempre estuvo presente como si lo fuera. Gracias por abrirme las puertas de su espacio de trabajo, por su disposición y por compartir conmigo su tiempo y conocimiento.

A la Dra. Juana Deisy Santamaría Juárez, por la oportunidad de trabajar nuevamente en conjunto, por la facilidad que me brindó para poder trabajar en cuestión de reactivos, laboratorio e instrumentos analíticos, por su paciencia, comprensión y apoyo en temas tanto académicos como profesionales.

A la Dra. Anabella Handal Silva. Gracias Dra. por ser una inspiración para mí en el ámbito científico, su disciplina, orden y orientación fueron primordiales para adentrarme a explorar un mundo desconocido para mí, aprecio haber tenido la oportunidad de aprender de alguien con tanta pasión por la ciencia.

A la Dra. Edith Chávez Bravo, por su apoyo, confianza, guía y motivación depositados en mí y en este proyecto de investigación, valoro profundamente su acompañamiento.

A la Dra. Sonia Emilia Silva Gómez, por su paciencia, dedicación y enseñanza. Sus palabras de afirmación y apoyo fueron esenciales para mí en este proyecto de investigación.

A las doctoras antes mencionadas, al Dr. Miguel Ángel Ruíz Gómez y a la Dra. Laura Morales Lara por ser parte de mi jurado y por sus observaciones en la mejora de mi trabajo de investigación.

Al Ing. Alejandro Trejo Escamilla y al Biol. Roque Azcarate Estrada, por confiar en mí y brindarme la oportunidad de acudir a la PTAR de Zacatlán a realizar muestreos, análisis y contribuir en la mejora de la calidad del agua del municipio.

A los doctores Eduardo Torres Ramírez y Ángel Silveti, por siempre abrirme las puertas de sus laboratorios para poder realizar mis experimentos cuando lo necesite. Gracias Dr. Eduardo por ser una guía para mí en mi proceso de realización de la estancia de investigación.

A la Dra. María Teresa Moreira Vilar por darme la oportunidad de poder realizar la estancia de investigación en Santiago de Compostela, España, abrirme las puertas de su laboratorio y compartirme conocimientos que me sirvieron en mi proyecto de investigación. Le doy las gracias a Isabella, Poojesh, José Luis, Jorge y Sabrina por ser una guía para mí cuando estuve en el laboratorio de fotocátalisis (LAB 2.3).

A Mariel y Silvia, por siempre brindarme su apoyo en el ámbito administrativo y ser cálidas y amables conmigo en todo momento.

A mis 6 compañeros de maestría: Daniela, Roberto, Paulina, Ana y Azahel, por los consejos, las risas, aventuras y buenos momentos y porque a pesar de venir de diferentes carreras, siempre estuvimos unidos en este camino compartiendo una meta en común.

A mis mejores amigos: Luis, Joce, Matuz, Andrés, Aglae, Gabi, Liss, etc, por apoyar cada decisión que he tomado e impulsarme en seguir mis metas y sueños. Gracias infinitas, han sido un refugio y una inspiración constante.

A mi familia, porque a pesar de que estamos lejos, siempre los siento cerquita de mí, su apoyo ha sido fundamental para afrontar cada reto con determinación. Gracias Carolina por siempre creer en mí. Gracias Karime por siempre sostener mi mano con amor y nunca dejarme caer.

A mi abuelita porque a pesar de que siempre hemos estado lejos físicamente, siempre pregunta por cómo me va en la escuela, por como salieron los experimentos, y me motiva a no rendirme, al contrario, siempre seguir adelante.

Desde lo más profundo de mi corazón quiero agradecer a mi madre, por ser una inspiración constante desde que tengo memoria, por su apoyo incondicional en cada decisión que he tomado y por ser mi mayor fortaleza. Gracias mami por ser mi soporte, mi guía y mi red de apoyo en todo momento. Gracias porque desde pequeña me diste alas para volar alto e ir detrás de mis sueños con valentía, sabiendo que sin importar la distancia o los camino que tome, siempre tengo un hogar al cual regresar.

A Eduardito, mi fiel compañero de vida, mi novio, mejor amigo y cómplice, gracias por ser parte de este camino, por alentarme en ir detrás de mis sueños incluso cuando eso significa separarnos. Gracias por nunca detenerme, por apoyar cada decisión que he tomado a lo largo de nuestra vida juntos, por verme crecer en todos los aspectos y seguir amándome como el primer día que nos conocimos. Tu amor incondicional me ha enseñado que el verdadero amor no es una competencia, sino un viaje en el que aprendemos, nos impulsamos y crecemos juntos.

Y finalmente, quiero agradecer a Claudia de 14 años por nunca soltar su sueño de querer salvar al mundo, por creer que cada pequeño esfuerzo puede marcar la diferencia y por luchar por un futuro mejor. Gracias por seguir tu pasión por la ciencia, por querer mejorar la calidad de vida de las personas y sobre todo por no rendirte, incluso cuando el camino no ha sido fácil. Todo lo que hoy he logrado es gracias a esa niña que nunca dejó de soñar y de luchar por lo que amaba.

ÍNDICE

1	Introducción	11
2	Marco teórico	13
2.1	Contaminación del agua	13
2.2	Contaminantes emergentes.....	13
2.3	Productos farmacéuticos.....	14
2.3.1	Ibuprofeno	14
2.4	Planta de Tratamiento de Aguas Residuales (PTAR)	16
2.5	Procesos avanzados de oxidación.....	17
2.5.1	Fotocatálisis heterogénea	17
2.6	Toxicidad.....	19
2.7	Ciclo celular	19
2.7.1	Interfase y mitosis	19
2.8	Bioensayos.....	20
3	Marco conceptual	21
4	Planteamiento del problema	23
5	Justificación.....	26
6	Preguntas de Investigación.....	29
7	Hipótesis.....	29
8	Objetivo general:	29
8.1	Objetivos específicos:	29
9	Metodología	30
9.1	Comparación de la degradación fotocatalítica de ibuprofeno con TiO₂/SiO₂ y CLI/SiO₂.....	30
9.1.1	Síntesis de los nanomateriales TiO ₂ /SiO ₂ y CLI/SiO ₂	30
9.1.2	Caracterización de nanomateriales TiO ₂ /SiO ₂ y CLI/SiO ₂	30
9.1.3	Fotodegradación de ibuprofeno en soluciones sintéticas y agua de la PTAR	31
9.1.4	Determinación de la DQO posterior al proceso fotocatalítico con agua de la PTAR. 34	
9.1.5	Determinación de la cinética de degradación del fármaco	34
9.1.6	Pruebas fotocatalíticas con reactor solar en continuo (Ver anexo (13.6. Estancia de investigación)).....	34

9.2	Valoración del impacto de la fotocatalisis en la calidad del agua mediante el bioensayo de <i>Allium cepa</i>.	35
9.2.1	Caracterización fisicoquímica del agua de la PTAR.....	35
9.2.2	Determinación de la toxicidad mediante el bioensayo con <i>Allium Cepa</i> .	36
9.3	Validación de la viabilidad de la etapa de pulimiento con la fotocatalisis solar para la PTAR	37
9.3.1	Software Aspen Plus	37
9.3.2	Simulación de etapa de pulimiento	37
9.4	Diagnóstico del entorno de la PTAR a partir de la opinión pública.....	37
9.4.1	Descripción de la zona de estudio	37
9.4.2	Descripción de la PTAR.....	38
9.4.3	Percepción de la calidad del agua mediante a opinión pública	38
10	Resultados	40
10.1	Eficiencia de la actividad fotocatalítica con $\text{TiO}_2/\text{SiO}_2$ y CLI/SiO_2	40
10.1.1	Propiedades químicas y estructurales de los nanomateriales	40
10.1.2	Evaluación de la degradación de ibuprofeno en muestras sintéticas y reales	44
10.1.3	Disminución de la DQO posterior al proceso fotocatalítico.....	47
10.1.4	Valores cinéticos del proceso fotocatalítico de degradación de ibuprofeno	49
10.2	Impacto de la fotocatalisis en la calidad del agua de la PTAR.....	51
10.2.1	Parámetros fisicoquímicos respecto a la calidad del agua antes y después de la fotocatalisis.	51
10.2.2	Efecto del proceso fotocatalítico en el ciclo celular de <i>Allium cepa</i>	55
10.3	Simulación del pulimiento con fotocatalisis solar en la PTAR.....	63
10.4	Estudio del entorno de la PTAR desde la perspectiva de la comunidad local	69
10.4.1	Características del entorno geográfico y ambiental de la zona de estudio	69
10.4.2	Evaluación operativa y funcional de la PTAR	71
10.4.3	Percepción pública acerca de la calidad del agua y PTAR.	72
11	Conclusiones	75
12	Perspectivas.....	76
13	Bibliografía	77
14	Anexo	84
14.1	A) Fotocatalisis solar	84
14.2	B) PTAR.....	84
14.3	C) Bioensayo <i>Allium cepa</i>	84

14.4	D) Cuestionario	85
14.5	E) Tipos de isotermas	86
14.6	F) Estancia de investigación	88
14.6.1	Pruebas fotocatalíticas con reactor solar en continuo.....	88
14.6.2	Biocatálisis enzimática	92

Índice de figuras

Figura 1	Molécula de ibuprofeno (Guisado et al; 2018).....	14
Figura 2.	Grupos funcionales del ibuprofeno.....	15
Figura 3	Transiciones electrónicas de ibuprofeno.....	15
Figura 4	Tratamientos convencionales de una PTAR (Boeele et al; 2019).....	16
Figura 5	Esquema de un proceso de fotocatalisis (De Lassa et al; 2005).....	18
Figura 6.	Esquema de representación “Vías de entrada y salida de ibuprofeno en el ciclo del agua” (Pérez et al; 2015 y Singer et al; 2016).....	24
Figura 7.	Objetivos de desarrollo sustentable. AGENDA 2030.....	27
Figura 8.	Diagrama general “Metodología”	30
Figura 9.	Imágenes de Google Earth del Municipio de Zacatlán, Puebla (a), Delimitación de la zona de estudio (PTAR) Barranca de los Jilgueros (b).....	38
Figura 10	Micrografías del catalizador TiO ₂ /SiO ₂ : (a) 5000X y (b) 3000X (X= amplificación). ...	40
Figura 11	Micrografías del catalizador CLI/SiO ₂ (a) 5000X y (b) 3000X (X= amplificación).	40
Figura 12	Resultados de EED para el catalizador TiO ₂ /SiO ₂	41
Figura 13	Resultados de EED para el catalizador CLI/SiO ₂	41
Figura 14	Patrón de difracción de Rayos X de TiO ₂ /SiO ₂	42
Figura 15.	Patrón de difracción de Rayos X de CLI/SiO ₂	42
Figura 16.	Isotermas de adsorción de los nanomateriales estudiados a). TiO ₂ /SiO ₂ , b) CLI/SiO ₂ , c) TiO ₂ , d) SiO ₂ y e) CLI.....	43
Figura 17.	Espectros de absorción UV-Vis de una solución de ibuprofeno (10 ppm), utilizando TiO ₂ /SiO ₂ y CLI/SiO ₂	45
Figura 18	Espectros de absorción UV-Vis de una solución de ibuprofeno (10 ppm) + Efluente de PTAR, utilizando TiO ₂ /SiO ₂ y CLI/SiO ₂	45
Figura 19.	Área de la curva calculada respecto a la degradación de materia orgánica e ibuprofeno utilizando TiO ₂ /SiO ₂	46
Figura 20.	Área de la curva calculada respecto a la degradación de materia orgánica e ibuprofeno utilizando CLI/SiO ₂	46
Figura 21.	Mecanismo de ruptura del ibuprofeno (Oliveira Miranda et al; 2021).....	49
Figura 22	Número de raíces de A. cepa expuestas al agua del efluente sin tratar y del efluente tratado mediante tratamiento agudo	56
Figura 23.	Longitud de raíces de A. cepa expuestas al agua del efluente sin tratar y del efluente tratado mediante tratamiento agudo.	56
Figura 24.	Vista microscópica panorámica de la división celular en Allium Cepa. Tinción con Aceto-orceína. Células del efluente sin tratar (2X, microscopio óptico LEICA-CME).....	57

Figura 25. Vista microscópica en el efluente sin tratar de células en diferentes estadios de interfase (CI) y profase temprana (P). Tinción con Aceto-orceína (4X, microscopio óptico LEICA-CME)..	57
Figura 26. Células en el estadio de profase: 1 se observa que el material genético (ADN) se encuentra enrollado como "madeja" llamada cromatina, ésta se condensa y forma los cromosomas, 2 no hay membrana nuclear y 3 formación de huso mitótico. Tinción con Aceto-orceína (4X, microscopio óptico LEICA-CME).	58
Figura 27. Células en estadio de metafase: 1 El ADN se condensa en los cromosomas, 2 los cromosomas se alinean en el plano ecuatorial. Tinción con Aceto-orceína (4X, microscopio óptico LEICA-CME).	58
Figura 28. Células en estadio de anafase, las cromátidas hermanas (CH) se separan y se dirigen a los polos opuestos de la célula. Tinción con Aceto-orceína (4X, microscopio óptico LEICA-CME).	58
Figura 29. Células en diferentes estadios de la mitosis: 1 profase, 2 metafase, 3 telofase temprana: se forman 2 células hijas. Tinción con Aceto-orceína (4X, microscopio óptico LEICA.CME).	59
Figura 30 Telofase tardía: 1 se inicia el proceso de la citocinesis. Tinción con Aceto-orceína (4X, microscopio óptico LEICA CME).	59
Figura 31. Telofase tardía, 1 final del proceso de la citocinesis (formación de dos células hijas). 2 membrana citoplasmática, 3 citoplasma; 4 núcleo, 5 membrana nuclear. Tinción con Aceto-orceína (4X, microscopio óptico LEICA-CME).	60
Figura 32. Número de células totales en interfase y células en mitosis. (Profase, metafase, anafase y telofase).	61
Figura 33. Diagrama de la PTAR sin la etapa de pulimiento.	63
Figura 34. Diagrama de la PTAR con la etapa de pulimiento propuesta.	63
Figura 35. Ubicación geográfica de Zacatlán (INEGI,2021)	69
Figura 36. Proceso de operación de la PTAR	71
Figura 37 Percepción general sobre la calidad del agua	72
Figura 38. Descarga de agua	72
Figura 39. Obstáculo epistemológico.	72
Figura 40. Conocimiento acerca de la PTAR.	73
Figura 41. Zacatlán y PTAR	73
Figura 42. Conocimiento acerca de la operación de la PTAR	73
Figura 43. Calidad del efluente de la PTAR.	73
Figura 44. Conocimiento sobre desecho de fármacos	74
Figura 45. Riesgos hacia la salud.	74
Figura 46 a) Espectros UV-Vis Blanco (Ibuprofeno), b) Espectros UV-Vis Blanco (Ibuprofeno + Efluente PTAR).	84
Figura 47. Fotocatálisis solar de ibuprofeno	84
Figura 48. Comparación de agua de influente y efluente en la PTAR.	84
Figura 49. Planta de tratamiento de Aguas Residuales (PTAR) de Zacatlán, Puebla	84
Figura 50. Experimentos iniciales de ensayo de toxicidad utilizando Allium Cepa. a)Efluente sin tratar, b) Efluente tratado.	84
Figura 51. Experimentos finales de ensayo de toxicidad utilizando Allium cepa, a) Efluente sin tratar, b) Efluente tratado con fotocatálisis utilizando TiO ₂ /SiO ₂	85
Figura 52. Tipos de isothermas y ciclos de histéresis (IUPAC, 2015)	87
Figura 53. Reactor solar	88

Figura 54. Fotocatálisis solar de ibuprofeno (Prueba 2) (Reactor solar).....	90
Figura 55. Medición de radiación solar mediante piranómetro (Prueba piloto).....	90
Figura 56. Medición de radiación solar mediante piranómetro (Prueba 2).....	90
Figura 57. Fotocatálisis solar de ibuprofeno (Prueba piloto).....	90
Figura 58. Fotocatálisis solar de ibuprofeno a) Porcentaje de degradación vs Tiempo, b) C/C ₀ vs Tiempo	90
Figura 59. Porcentaje de degradación de ibuprofeno vs radiación solar (Prueba 0)	91
Figura 60. Ensayos de biocatálisis enzimática para la degradación de ibuprofeno.....	92
Figura 61. Biocatálisis enzimática de ibuprofeno (UPO)	93
Figura 62. Biocatálisis enzimática de ibuprofeno (Lacasa)	93

Índice de tablas

Tabla 1 Características de ibuprofeno (Guisado <i>et al</i> ; 2018).....	14
Tabla 2 Diseño de experimentos para pruebas fotocatalíticas en muestras sintéticas.....	32
Tabla 3 Diseño de experimentos para pruebas fotocatalíticas con soluciones sintéticas y materiales precursores	32
Tabla 4 Diseño de experimentos para pruebas fotocatalíticas con agua de la PTAR	33
Tabla 6 Ajuste y clasificación de modelos de adsorción correspondientes a los nanomateriales	44
Tabla 7 Volumen de poro y área superficial de los materiales estudiados.....	44
Tabla 8 Medición de DQO posterior a pruebas fotocatalíticas con agua de la PTAR e ibuprofeno .	47
Tabla 9 Porcentaje de degradación y DQO en materiales individuales	48
Tabla 10 Comparación en el desempeño de diferentes materiales para degradación de ibuprofeno mediante fotocatalisis.....	48
Tabla 11 Valores de de k y kads de ambos catalizadores a diferentes concentraciones	50
Tabla 12 Parámetros fisicoquímicos del agua del influente y efluente.	51
Tabla 13 Parámetros fisicoquímicos del agua del efluente sin tratar y del efluente tratado.	52
Tabla 14 Resultados de los metales pesados y cianuro obtenidos en el agua del efluente sin tratar y del efluente tratado.	53
Tabla 15 Resultados de los compuestos orgánicos volátiles (COVS) obtenidos en el agua del efluente sin tratar y del efluente tratado.	54
Tabla 16 Promedios del número de raíces y su longitud de <i>Allium cepa</i> expuestas al agua del efluente sin tratar y del efluente tratado por fotocatalisis con TiO ₂ /SiO ₂ mediante tratamiento agudo.	55
Tabla 17 Conteo del número de células meristemáticas en la raíz de <i>Allium cepa</i> expuestas al agua del efluente sin tratar y del efluente tratado por fotocatalisis con TiO ₂ /SiO ₂ mediante tratamiento agudo.	57
Tabla 18 Cambios en el índice interfásico e índice mitótico de las células meristemáticas en la raíz de <i>Allium cepa</i> expuestas al agua del efluente sin tratar y del efluente tratado por fotocatalisis con TiO ₂ /SiO ₂ mediante tratamiento agudo.....	61
Tabla 19 Componentes propuestos como presentes en el agua de la PTAR del municipio de Zacatlán, Puebla	64

Tabla 20 Componentes de materia orgánica presentes en el reactor biológico.....	66
Tabla 21 Componentes presentes en el sedimentador secundario.....	67
Tabla 22 Disminución de componentes presentes en el reactor posterior al proceso fotocatalítico.	
Tabla 23 Subcuencas en el territorio municipal de Zacatlán y ruta de descarga del efluente de la PTAR. 70	
Tabla 24 Tipos de lazos de histéresis	87
Tabla 25 Método de detección (HPLC)	89
Tabla 26 Porcentaje de degradación de ibuprofeno (Pruebas diferentes)	91
Tabla 27 Porcentajes de degradación de cada grupo experimental determinados mediante HPLC..	93

1 **Introducción**

El agua es un recurso natural, utilizado para satisfacer las necesidades básicas de la población, y empleada por los seres humanos en actividades sociales, económicas y ambientales, asegurando la integridad y sustentabilidad en el medio ambiente. Sin embargo, la mala gestión de esta al cumplir con su vida útil pone en riesgo la salud de los seres vivos.

Actualmente, se conocen diversas alternativas para tratar agua contaminada, dentro de ellas se encuentran las Plantas de Tratamiento de Aguas Residuales (PTAR), cuya función es descontaminarla mediante tratamientos convencionales como coagulación, sedimentación y floculación, sin embargo estos tratamientos no son suficientes para eliminar los llamados contaminantes emergentes (CE), puesto que se encuentran en concentraciones muy pequeñas y no existe legislación pertinente en México (a diferencia de otros países de la Unión Europea) que limite o controle su concentración en las aguas superficiales y descargas de aguas residuales. Los CE se clasifican en pesticidas, colorantes y fármacos, respecto a los últimos mencionados, al cumplir con su vida útil son desechados por los humanos mediante la orina, excreción, actividades como ganadería, desecho de efluentes de hospitales, mala gestión de desechos por medio de excusados llegando a las PTAR en donde no existen tratamientos enfocados a estos contaminantes, por lo que terminan en ríos, mares y lagos, en donde las especies marinas y terrestres sufren las consecuencias como inhibición en el crecimiento de los embriones, disrupción endocrina, cambios en la reproducción y desarrollo de las especies, bioacumulación y toxicidad.

Desde el punto de vista clínico, los fármacos están elaborados principalmente para llevar a cabo procesos fisiológicos y para resistir su inactivación antes de ejercer el efecto terapéutico para el cual fueron desarrollados. Gran parte de estas propiedades son las responsables de su baja biodegradabilidad y de los efectos tóxicos que podrían llegar a tener en ecosistemas acuáticos y terrestres, lo cual se incrementa por la continua introducción de estos en el ambiente, lo que conlleva a exposiciones a largo plazo.

El ibuprofeno se considera uno de los fármacos con mayor potencial de riesgo ambiental, ya que es un contaminante recalcitrante y de difícil degradación, con una toxicidad inhibitoria estimada entre el 30 y 60%. Esto se debe a que fue diseñado para ser metabólicamente estable en el organismo humano y cumplir con su función terapéutica, lo que también dificulta su biodegradación en el ambiente. Además, sus principales metabolitos como el 2-hidroxiibuprofeno y el 2-carboxiibuprofeno, presentan alta persistencia y resistencia a procesos de degradación en cuerpos de agua. (Kumar *et al*; 2018).

Por otro lado, es necesario que las PTAR cuenten con un tratamiento cuaternario, capaz de degradar CE, dentro de estos se conocen los procesos avanzados de oxidación, e inmerso en estos, se encuentran la oxidación, FOTO-Fenton y la fotocatalisis, la cual es una reacción de interés ambiental e industrial pues utiliza la luz solar y UV para llevar a cabo la transformación de reactivos a productos.

En esta reacción, un electrón contenido en la banda de valencia del material es excitado por la luz y "salta" a la banda de conducción generando un hueco en la banda de valencia. La presencia de un hueco en la banda de valencia genera una corriente eléctrica. La existencia de una corriente eléctrica, así como un hueco en la banda de valencia propician que la velocidad de reacción aumente. La energía necesaria para que el electrón "salte" de la banda de valencia a la banda de conducción es denominada energía de brecha prohibida o "band gap" y depende de la estructura electrónica del material, debido a esto, los materiales semiconductores son ampliamente usados como fotocatalizadores como el dióxido de titanio (TiO₂), sin embargo, su utilización por sí sólo es compleja, y por tal razón es necesario utilizar soportes para evitar el apantallamiento, y favorecer su recuperación, debido a este motivo, en el presente trabajo de investigación se usará SiO₂ como soporte y una zeolita natural llamada clinoptilolita.

De acuerdo a la información proporcionada mediante el inventario de Plantas de Tratamiento de Aguas Residuales (PTAR) de la comisión nacional del agua 2021, el municipio de Zacatlán, cuenta con una PTAR que opera mediante lodos activados con una capacidad de 60 L/s, y una etapa de desinfección (cloración) al final del tratamiento convencional, el cual no es suficiente para degradar CE. Debido a esto en el presente proyecto de investigación se propone la implementación de una etapa de pulimiento mediante fotocátalisis solar utilizando dos nanomateriales compuestos $\text{TiO}_2/\text{SiO}_2$ y CL/SiO_2 sintetizados mediante el método sol-gel y caracterizados por diferentes técnicas como Microscopia Electrónica de Barrido (MEB), Adsorción-Desorción de nitrógeno, (Ads-Des N_2) Difracción de Rayos X (DRX) y Espectroscopia de Energía Dispersada (EDS). Posterior a la caracterización de los materiales, estos serán utilizados para medir la eficiencia por fotocátalisis solar usando una solución de ibuprofeno (10 y 25 ppm), y posteriormente el análisis por fotocátalisis solar del efluente de la PTAR de Zacatlán Puebla en donde se caracterizará el agua antes y después del tratamiento, y se medirá la toxicidad con el ensayo *Allium Cepa*, se determinarán los datos de cinética de degradación del fármaco para implementar mediante el software Aspen Plus una etapa de pulimiento que permita el escalamiento a nivel real, la cual permitirá garantizar la mejoría de la calidad del agua tratada y una mejor protección hacia el medio ambiente y la salud pública.

2 Marco teórico

2.1 Contaminación del agua

El agua es el recurso más valioso de nuestro planeta porque sin ella no existiría vida en la tierra. El volumen total de esta es de 326 millones de millas cúbicas, sin embargo, el agua dulce que es apta para los seres vivos sólo corresponde al 1% del total. (Martos López *et al*; 2016).

La Organización Mundial de la Salud, define el agua contaminada como aquella cuya composición es diferente a la inicial, y ahora es inservible, lo que impide y dificulta su uso para consumo humano y actividades agrícolas. Esta situación representa un problema grave, ya que se estima que causa más de 500,000 muertes anuales a nivel global debido a las enfermedades que se transmiten como son: diarrea, cólera, fiebre tifoidea y poliomelitis.

Esta contaminación se produce cuando sustancias nocivas, tales como productos químicos o microorganismos, ingresan a cuerpos hídricos como ríos, lagos y mares, comprometiendo su calidad y generando toxicidad para los seres vivos y el medio ambiente. Este fenómeno se define como la acumulación de agentes externos que alteran la composición del agua, ocasionando desequilibrios ecológicos que afectan diversas formas de vida, incluyendo la fauna, flora y los seres humanos. (Khan *et al*; 2008).

Asimismo, existen distintos tipos de contaminantes en el agua, los cuales se pueden clasificar como microorganismos patógenos, sustancias radioactivas, sustancias químicas inorgánicas y orgánicas y contaminantes emergentes. (Chen *et al*; 2024). Los microorganismos patógenos consideran la presencia de bacterias, virus, protozoos etc, que causan enfermedades como hepatitis, cólera y tifus entre otras.

Comenzando por las sustancias radioactivas como son los isótopos solubles los cuales pueden estar presentes en el agua potable y son: radón (^{222}Rn), uranio (^{238}U , ^{234}U) y radio (^{226}Ra) etc, estos pueden acumularse en las cadenas tróficas durante largos periodos de tiempo, y acumularse en los tejidos de los organismos vivos (Moreno Ortiz *et al*; 2013).

Las sustancias químicas inorgánicas se caracterizan por ser productos dispersos y disueltos en el agua que regularmente provienen de descargas domésticas, agrícolas e industriales, los principales son: cloruros, sulfatos, nitratos y carbonatos (Moreno Ortiz *et al*; 2013).

Dentro de estas sustancias químicas inorgánicas, se encuentran también los metales pesados, como el plomo, mercurio, cadmio, arsénico etc, los cuales son altamente tóxicos y pueden perjudicar a los organismos acuáticos y a los seres humanos. Estos metales pueden ingresar fácilmente al agua a través de la escorrentía de suelos contaminados, las actividades industriales y mineras. La exposición a estos metales puede causar bioacumulación en la cadena alimentaria, de hecho, actualmente existen estudios de metales pesados encontrados en atún enlatado, especialmente el mercurio (Hg) (Gutiérrez *et al*; 2001).

Por otro lado, los COVs son sustancias químicas orgánicas que se encuentran en el agua a través de derrames, fugas de productos industriales o domésticos y contaminación antropogénica desmesurada. Son perjudiciales para la salud humana y se consideran cancerígenos (especialmente el benceno de acuerdo a la Agencia Internacional Contra el Cáncer (por sus siglas en inglés **IARC**). Además, contribuyen a la formación de smog fotoquímico, lo que agrava la contaminación en el aire.

2.2 Contaminantes emergentes

Los contaminantes emergentes (CE) de acuerdo con la EPA (Agencia de Protección Ambiental) (US EPA; 1994) son compuestos químicos que pasan desapercibidos en el medio ambiente sin legislación actual impactando negativamente en la vida.

Los CE actualmente pueden causar una toxicidad baja, sin embargo, debido a la falta de legislación, no se conocen del todo sus efectos negativos a largo plazo. Por otro lado, los efectos de la exposición a organismos acuáticos durante las primeras etapas de vida, podrían no ser observables hasta la edad adulta. (Janet Gil *et al*; 2012).

De acuerdo con la norma (Network of reference laboratories, research centres and related organisations for monitoring of emerging environmental substances) los CE se clasifican en más de 20 clases relacionadas con su origen. Dentro de estas se encuentran los productos farmacéuticos, productos de aseo personal, maquillaje, pesticidas, desinfectantes, y productos químicos. Debido a que continuamente se desarrollan nuevos químicos es difícil estandarizar este tipo de contaminantes en clases más específicas (Janet Gil *et al*; 2012). Estos productos pueden llegar a ser tóxicos hacia el medio ambiente en concentraciones elevadas.

2.3 Productos farmacéuticos

Los productos farmacéuticos según las OMS, tienen la función de prevenir, aliviar, diagnosticar, tratar y curar las enfermedades. Son obtenidos a partir de principios activos con o sin sustancias auxiliares. Están clasificados como: antiácidos, antialérgicos, antibióticos, antidiarreicos, laxantes, antiinflamatorios, antiinfecciosos, etc. (Organización Mundial de la Salud; 2015).

Dentro de esta clasificación especialmente los antiinflamatorios, existe una subclasificación que los define como antiinflamatorios no esteroideos y esteroideos, los segundos son hormonas producidas por la corteza adrenal, y se consideran mucho más potentes que los primeros. (Candelaria Tejada *et al*; 2014).

Por otro lado, los no esteroideos o AINE, son un grupo de fármacos que actúan como analgésicos y antipiréticos, por tal razón son más utilizados por la población y regularmente sin receta médica. Dentro de estos AINE, existe uno muy conocido y común, llamado: ibuprofeno. (Brenat Burel *et al*; 2016).

2.3.1 Ibuprofeno

El ibuprofeno o ácido 2-(4-(isobutilfenil) propiónico (IBU) (Figura 1), es uno de los antiinflamatorios más distribuidos a nivel mundial, es utilizado para aliviar síntomas de dolor de cabeza, dolor de cuerpo, dental, muscular, fiebre, etc, y cuadros inflamatorios, como artritis, hinchazón, dolor de garganta etc. Actualmente es vendido en concentraciones entre los 400, 600 y 800 mg, considerando su principio activo por comprimido, pastilla o cápsula (Augusti *et al*; 2005)

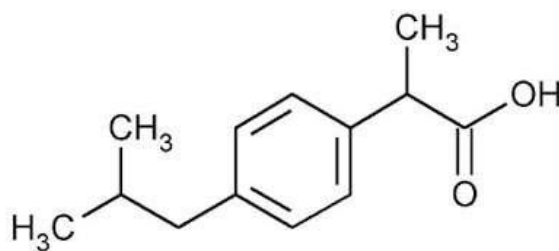


Figura 1 Molécula de ibuprofeno (Guisado *et al*; 2018)

Tabla 1 Características de ibuprofeno (Guisado *et al*; 2018)

Fórmula química	C ₁₃ H ₁₈ O ₂
Peso molecular (g/mol)	206.29
Vida media (horas)	1.8-2
Metabolismo	Hepático

ALCANO

AROMÁTICO

ÁCIDO CARBOXÍLICO

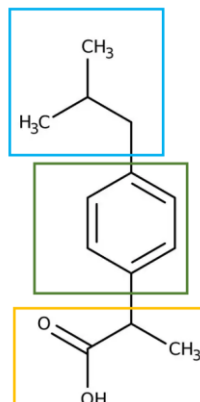


Figura 2. Grupos funcionales del ibuprofeno

Es una mezcla racémica que consiste en un enantiómero R y un enantiómero S. Se propone que el último sea el agente de acción más fuerte. Es un derivado del ácido propiónico, un ácido graso saturado de cadena corta unido al etanol. El principio activo de ibuprofeno son el grupo carboxílico y el anillo aromático (Marbán G *et al*; 2023). Existen 4 orbitales denominados s, p, d y f. Para los átomos presentes en la molécula de ibuprofeno, se tienen: carbono, hidrógeno y oxígeno, los cuales siguen la siguiente configuración electrónica:

Carbono: $1s^2 2s^2 2p^2$

Hidrógeno: $1s^1$

Oxígeno: $1s^2 2s^2 2p^4$

Carbono- hidrógeno: Unión orbital s y p = Sigma σ

Carbono - carbono: Unión orbitales p y p = Sigma σ

El ibuprofeno presenta enlaces sigma y pi, y ya que la longitud de onda es inversamente proporcional a la energía, la Figura 3 identifica las transiciones electrónicas del fármaco, en donde el grupo carboxilo presenta mayor energía y posee una transición $n \rightarrow \pi^*$, mientras que al anillo aromático al presentar doble enlace carbono-carbono se define como una transición de $\pi \rightarrow \pi^*$ y finalmente el alcano una transición de $\sigma \rightarrow \sigma^*$ (Marbán G *et al*; 2023).

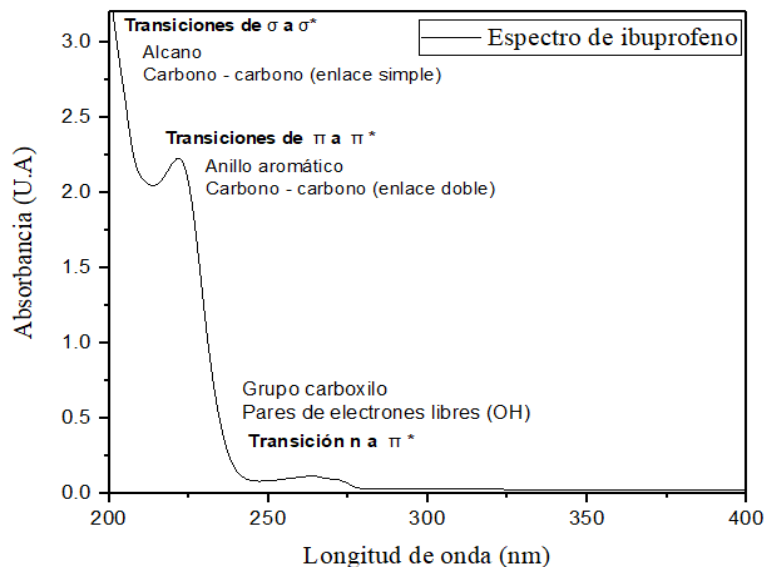


Figura 3 Transiciones electrónicas de ibuprofeno

Una de las principales preocupaciones respecto al ibuprofeno como contaminante es el uso excesivo de este, ocupando el tercer lugar del fármaco más comercializado y vendido en nuestro país. (Sus características se presentan en la Tabla 1. Este ha sido prioridad en gran cantidad de estudios en diferentes partes del planeta respecto a su contaminación en aguas (Augusti *et al.*; 2005).

El ibuprofeno al ser considerado un contaminante emergente del cual no existe una legislación y normatividad respecto a su control, se ha encontrado en aguas porque a pesar de que estas son tratadas mediante las PTAR, no son suficientes para degradarlo. Por tal motivo es necesaria la implementación de un proceso cuaternario el cual sea capaz de eliminar contaminantes y sustancias peligrosas. (Dharmappa *et al.*; 1997).

De la misma manera, diversos estudios han mostrado la eficacia de TiO_2 en la degradación de ibuprofeno bajo luz solar, alcanzando hasta un 98% de eliminación en condiciones óptimas, y evidenciando la formación de productos intermedios como el 4-isobutilacetofenona (Miranda *et al.*, 2021). Además de los nanocompuestos $\text{TiO}_2/\text{SiO}_2$, otros materiales fotocatalíticos han sido evaluados, como óxido de zinc (ZnO), óxido de cerio (CeO_2), óxidos mixtos $\text{TiO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3\text{-SiO}_2$ y TiO_2 dopado con metales nobles, todos ellos optimizando la eficiencia fotocatalítica mediante la generación de radicales y mejorando la superficie activa del catalizador (Sá *et al.*; 2021).

Asimismo, otros autores destacan el rendimiento de sistemas bimetalicos y multicomponentes: por ejemplo, (Lin *et al.*; 2019) reportaron que nanocompuestos $\text{TiO}_2\text{-BN}$ presentan una remoción de ibuprofeno del 80–85%, (Kumar *et al.*; 2018) lograron un 92% de remoción con heterojunciones $\text{g-C}_3\text{N}_4/\text{TiO}_2/\text{Fe}_3\text{O}_4@\text{SiO}_2$ bajo irradiación solar en 180 minutos, y (Matoh *et al.*; 2022) observaron una remoción aproximada del 85% utilizando recubrimientos $\text{TiO}_2/\text{P25}$ preparados por sol-gel, además de una reducción significativa del carbono orgánico total en agua.

2.4 Planta de Tratamiento de Aguas Residuales (PTAR)

Las plantas de tratamiento de aguas residuales (PTAR) están diseñadas mediante un tren de tratamientos que se clasifican en operaciones físicas, procesos químicos y biológicos (Figura 4) (Boeele *et al.*; 2019).

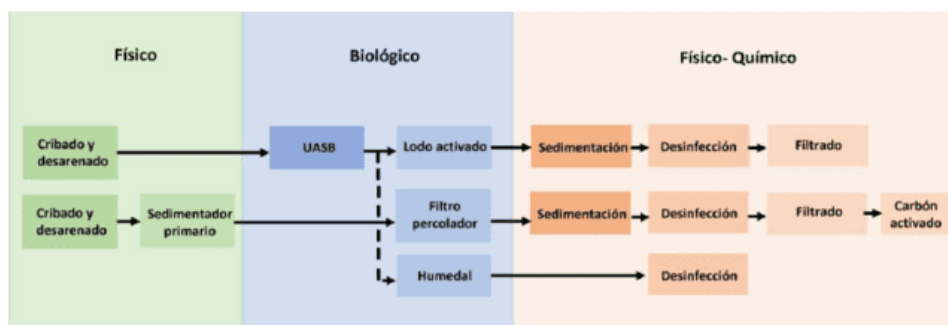


Figura 4 Tratamientos convencionales de una PTAR (Boeele *et al.*; 2019)

Los tratamientos convencionales se clasifican en diferentes etapas: Pre-tratamiento, tratamiento primario, secundario y terciario.

Pre-tratamiento: Es el primer proceso físico por el cual pasa el agua, su objetivo es la separación de sólidos voluminosos para lo cual se utilizarán desarenadores o cribas, un ejemplo de este pre tratamiento es la eliminación de componentes de gran volumen como ramas, piedras, plásticos, arenas, grasas y aceites. **(Chen et al; 2024).**

Tratamiento primario: Posterior al pre-tratamiento se encarga de preparar el agua, removiendo partículas cuyas dimensiones puedan obstruir o dificultar los procesos siguientes como son: sedimentación, flotación o neutralización **(Boelee et al; 2019)**

Tratamiento secundario: Este tratamiento tiene como propósito completar el proceso del tratamiento primario, de modo que el 90% de los contaminantes se evacuen, se encarga de reducir la materia orgánica mediante bacterias utilizando métodos biológicos que pueden ser aerobios o anaerobios **(Chen et al; 2024).**

Tratamiento terciario: No forma parte de los tratamientos convencionales, consiste en procesos físicos y químicos superiores a los tratamientos anteriores, con el objetivo de lograr una desinfección más eficaz, un ejemplo de este es la cloración **(De la Peña et al; 2013).**

Tratamiento cuaternario: Actualmente no se considera existente en ninguna PTAR del país (a excepción de un proyecto piloto en la zona de Xochimilco en convenio con el CINVESTAV (Zacatenco)), sin embargo, este tratamiento consiste en eliminar sustancias difíciles de remover con los tratamientos anteriores por su complicada detección debido al nivel de concentración tan bajo, dentro de este tratamiento se encuentran los procesos avanzados de oxidación (PAOS).

2.5 Procesos avanzados de oxidación

Los (PAOS) por sus siglas en inglés “Advanced Oxidation Process” se basan en procesos fisicoquímicos capaces de producir cambios estructurales en las moléculas de los contaminantes. Son aquellos procesos que involucran la generación y uso de especies como el radical hidroxilo ($\bullet\text{OH}$) y el ion superóxido (O_2^-) **(Muños Cruz et al; 2008).**

Estos procesos se clasifican en dos tipos: fotoquímicos y no fotoquímicos. Los procesos fotoquímicos se caracterizan porque utilizan la energía radiante (luz solar, luz de lámpara u otra fuente) para reaccionar y formar radicales libres como el ion superóxido (O_2^-) y el radical hidroxilo ($\bullet\text{OH}$). Dentro de estos se encuentra la fotocatalisis, en la cual se emplean catalizadores y materiales compuestos regularmente por semiconductores como el TiO_2 , ZnO , Al_2O_3 etc, los cuales han demostrado ser eficientes en la degradación de compuestos orgánicos y contaminantes emergentes como los fármacos. **(Brenat et al; 2016).**

En este trabajo de investigación se profundizará acerca de la catálisis heterogénea en la cual el fenómeno catalítico está relacionado con las propiedades químicas de la superficie de un sólido **(Dalai et al; 2013).**

2.5.1 Fotocatálisis heterogénea

La fotocatalisis es considerada una técnica esencial para la limpieza ambiental, porque se encarga de transformar compuestos orgánicos complejos en compuestos orgánicos más sencillos. Es una reacción fotoquímica que convierte la energía solar en energía química en la superficie de un catalizador que regularmente es un material semiconductor que acelera la velocidad de reacción. **(De Lasa et al; 2005).**

En fotocatalisis es indispensable el uso de materiales que permitan la conducción de la electricidad, en este caso los semiconductores son utilizados por cumplir esa característica. Un semiconductor se caracteriza por tener una estructura electrónica de bandas en la cual la que ocupa la menor energía es llamada Banda de Valencia (BV), y la de mayor energía Banda de Conducción (BC), ambas bandas están separadas por un valor de energía conocido como “band gap”. De esta forma cuando un fotón de energía superior a la “band gap” es absorbido por una partícula del semiconductor (Un electrón de la banda de valencia), es promovido a la BC, y se genera a la vez un hueco en esta (h^+). Derivado de esto, ambos pueden realizar dos acciones: Recombinarse o ser atrapados en la superficie del semiconductor (Figura 5) (Yan B *et al*; 2023).

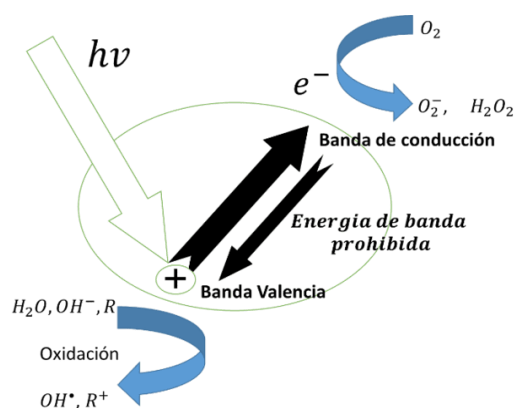


Figura 5 Esquema de un proceso de fotocatalisis (De Lassa *et al*; 2005).

Existen diferentes fotocatalizadores utilizados para este proceso, sin embargo, uno de los más utilizado es el dióxido de titanio (TiO_2) existente en tres estructuras polimorfas diferentes: *anatasa* (mejores propiedades fotocatalíticas), *rutilo* y *brookita*. Es una sustancia inorgánica, sólida, blanca, térmicamente estable, químicamente inerte, no inflamable, poco soluble y no peligrosa. Posee propiedades fotoconductoras y fotocatalíticas que lo presentan como uno de los óxidos de mayor impacto en la degradación de fármacos, oxidación de compuestos orgánicos volátiles (COVS) y degradación de compuestos orgánicos, entre otras (Yan B *et al*; 2023).

Por otro lado, el óxido de silicio (IV), dióxido de silicio o anhídrido silícico (SiO_2), llamado sílice es un compuesto de silicio y oxígeno. Está ordenado espacialmente en una red tridimensional (cristalizado), el cual forma el cuarzo y todas sus variedades. El dióxido de silicio se divide en tres categorías: cristalina, amorfa y amorfa sintética. La más común es la cristalina, que se encuentra en el cuarzo de rocas y arena. La corteza terrestre se compone por un 59% de sílice y forma el 95% de las piedras.

En fotocatalisis el SiO_2 puede inhibir eficazmente el crecimiento de partículas coloidales de TiO_2 y mejorar la estabilidad del catalizador, sin embargo, este por sí sólo no presenta actividad fotocatalítica debido a que tiene una brecha prohibida bastante grande (SiO_2 : 8.9 eV y TiO_2 : 3.2 eV (en fase anatasa)). (Ponce *et al*; 2012).

Por tal razón el combinar ambos materiales proporciona una mejor estabilidad, propicia una recuperación óptima del catalizador y evita la turbidez generada en el agua por el uso del TiO_2 solo, generando materiales nanocompositos.

Por otro lado, el estudio de la clinoptilolita (CLI) como fotocatalizador se he llevado a cabo en muy pocos estudios, de acuerdo con (Aguñaga Álvarez *et al*; 2018) indican que al activar esta zeolita se logra reducir el band gap, debido a que contiene pequeñas cantidades de hierro (1.2 % en peso Fe), que podría ser el origen de diferentes especies fotoinducidas responsables del rendimiento fotocatalítico.

El término clinoptilolita corresponde con tres minerales, por la Asociación Mineralógica Internacional como tres especies distintas (Hernández *et al*; 2010). Tiene un área superficial 10 veces mayor que la arena y el material filtrante multicapa. Lo que le permite retener partículas más pequeñas y lograr una mayor filtración de sólidos suspendidos.

Los materiales semiconductores tienen una alta aplicación en fotocatálisis debido a sus propiedades ópticas y eléctricas, mientras que las zeolitas se utilizan como soportes debido a su estructura porosa que permite una adecuada adsorción, al combinar estos compuestos se crean materiales avanzados (Aguñaga Álvarez *et al*; 2018). Las principales limitaciones en fotocatálisis son la recombinación de pares electrón hueco, la variabilidad en la intensidad de la luz y la utilización de luz solar en los días con mayor incidencia de nubes o temporada de lluvias (Muños Cruz *et al*; 2008).

En el presente trabajo de investigación se evaluará la actividad fotocatalítica de 2 nanomateriales obtenidos mediante la síntesis sol-gel: $\text{TiO}_2/\text{SiO}_2$ y CLI/SiO_2 .

2.6 Toxicidad

Por otro lado, existen pocos estudios referentes a los posibles subproductos generados posterior a la fotocatálisis y de esta manera es necesario conocer la toxicidad que estos pueden presentar. De acuerdo con la Organización Mundial de la Salud (OMS) la toxicidad se define como los cambios metabólicos o bioquímicos que experimenta un organismo posterior a la exposición de una o más dosis de una sustancia. Además, las crecientes actividades humanas han generado una mayor producción de sustancias químicas lo que ha provocado la liberación de contaminantes en el aire, agua, suelo, y otros medios capaces de inducir toxicidad y causar daños a la salud de los seres vivos (Roldan *et al*; 2016). Como se mencionó anteriormente los metales pesados, COVS, CE etc, son dañinos y tienen un efecto significativo en el ciclo celular, ya que pueden dañar el ADN mediante la generación de especies reactivas de oxígeno (ROS), lo que puede inhibir la mitosis. Además, interfieren en la actividad de proteínas clave (ciclinas) esenciales para la regulación del ciclo celular (Barak *et al*; 2011).

2.7 Ciclo celular

El ciclo celular es aquel por el cual pasa una célula durante su crecimiento y división. Esta pasa la mayor parte de su tiempo en la etapa interfase, y posterior a ello entra a la fase de la mitosis la cual se divide en: metafase, profase, anafase y telofase. Las células resultantes, llamadas células hijas, empiezan sus etapas de interfase y comienzan una nueva serie de ciclos celulares (Lagunas *et al*; 2015).

2.7.1 Interfase y mitosis

Interfase

- Fase de síntesis: (S): en esta etapa la célula duplica su material genético para pasarle una copia completa de ADN a sus células hijas.
- Fase G1 y G2 (intervalo): La célula se prepara para crecer y después para la mitosis.

- Mitosis (M): en esta parte del ciclo celular se reparte el material genético de la célula madre a las células hijas, a través de la segregación de los cromosomas. Esta fase se divide en: profase (se condensa la cromatina, formando los cromosomas constituidos por dos cromátidas hermanas), metafase (comienza el rompimiento de la membrana nuclear y los cromosomas se unen en el huso mitótico, además se forman y alinean los cromosomas en “la placa ecuatorial”, anafase (se produce la separación de las cromátidas hermanas hacia los polos opuestos y comienza la citocinesis) y telofase (las cromátidas hermanas se descondensan, se restablecen las envolturas nucleares y se observa la formación de dos células hijas, cada una con el mismo material genético que la célula madre **(Roldan et al; 2016)**).

El estudio de la citotoxicidad se especializa en la observación del ciclo celular (especialmente en la mitosis), donde ocurren cambios morfológicos en las células como consecuencia de la exposición a agentes dañinos que alteran el ciclo celular. **(Gutiérrez et al; 2001)**. El índice mitótico (IM), así como el índice interfásico (II) y de fases, es de suma importancia para identificar agentes citotóxicos en el ambiente **(López et al; 2009)**.

2.8 Bioensayos

Los bioensayos son herramientas útiles diseñadas con el objetivo de evaluar el impacto de agentes físicos y químicos sobre organismos en condiciones controladas, estos incluyen mecanismos de defensa al enfrentar agentes externos potencialmente desconocidos. Para identificar la capacidad de una sustancia en un organismo, se conocen 2 pruebas de toxicidad: agudas y crónicas, la primera incluye efectos adversos que se presentan de forma rápida (de 5 a 10 días), mientras que la segunda involucra daños progresivos presentando efectos que pueden aparecer a largo plazo **(Castillo Morales et al; 2004)**. Estas pruebas tienen como objetivo establecer una concentración que sea permisible respecto al agente tóxico y que no cause efectos adversos o significativos. De acuerdo a **(Castillo Morales et al; 2004)**, existen diversos organismos para la realización de estas pruebas como pueden ser *Daphnia magna* (crustáceo), raíces de *Allium sativum* (ajo), *Allium cepa* (cebolla), *Vibrio fischeri* (una bacteria utilizada en la prueba de Microtox) y *Danio rerio* (pez cebra), entre otros.

Sin embargo, las raíces de *Allium cepa* son muy utilizadas en las pruebas de toxicidad especialmente al realizar análisis hacia la calidad del agua, esto es porque cuando un bulbo de cebolla se hidrata sus raíces comienzan a crecer de forma progresiva como resultado de la estimulación de crecimiento y división celular, pero si este crecimiento se lleva a cabo en presencia de agentes tóxicos, el proceso de crecimiento y división puede verse afectado, lo que puede llegar a inhibir o acelerar la mitosis **(López et al; 2016)**.

Además, es un modelo biológico de suma importancia en las pruebas de toxicidad debido a sus características, entre ellas está que sus células (somáticas) crecen rápidamente al estar estimuladas con agua (en este caso) y son lo suficientemente grandes para que sean observadas con facilidad en el microscopio, lo que permite detectar alteraciones del ciclo celular. La cebolla tiene 16 cromosomas en total ($2n=16$), y se organizan en 8 pares, lo que facilita su estudio respecto a observación de alteraciones cromosómicas **(Martos et al; 2016)**. Esta prueba ha sido realizada por especialistas debido a que las raíces presentan: sensibilidad, fácil manejo y rápido crecimiento **(Gutiérrez et al; 2001)**.

3 Marco conceptual

De acuerdo con **Sampieri et al; (2008)** los métodos de investigación mixta son la integración sistemática de los métodos cuantitativo y cualitativo en un solo estudio con el fin de obtener una “fotografía” más completa del fenómeno. Por tal razón se puede concluir que el tipo de investigación que se llevará a cabo es “Mixta”, considerando variables cuantitativas como el estudio de la degradación del contaminante emergente modelo (ibuprofeno), mediante fotocátalisis solar controlando variables como la temperatura, la concentración de catalizador y de solución etc, la evaluación de parámetros fisicoquímicos de muestras sintéticas y del agua de la PTAR como DBO, DQO, SST, de acuerdo a las NOM-001-SEMARNAT-2021, NOM-003-ECOL-1997 (SEMARNAT), de la misma forma es necesario implementar variables cualitativas como la percepción que tienen las personas de acuerdo a la contaminación en el agua por contaminantes emergentes, el territorio en donde se ubica, y la educación ambiental que tiene la comunidad.

Por otro lado, el proyecto de investigación involucra sistemas complejos porque tiene diferentes interacciones multidisciplinarias como lo son: química, física, biología, ecología, sustentabilidad, etc, los cuales se relacionan entre sí y afectan el resultado global de una manera que no siempre es predecible (**Martínez Romero et al; 2021**).

En primer lugar, el proceso avanzado de oxidación (fotocátalisis) fue implementado a escala de laboratorio, donde fue necesario manejar y controlar diversas variables como la concentración del catalizador y del fármaco (ibuprofeno), el volumen de agua y la exposición a radiación solar, la cual se llevaba a cabo en horarios en los que la intensidad solar era alta. Después de determinar la mejor concentración de catalizador, se realizaron pruebas utilizando agua real, como variable de interés el efluente de la PTAR de Zacatlán, Puebla. Para evaluar el desempeño de la PTAR, fue necesario realizar una caracterización previa de los parámetros fisicoquímicos del influente y efluente, midiendo variables como DBO, DQO, pH, turbidez, SST, conductividad, entre otras. Posteriormente, se llevaron a cabo las pruebas fotocatalíticas para determinar la remoción de contaminantes, como la materia orgánica presente en el agua.

Al mismo tiempo, se evaluó la toxicidad mediante la utilización del bioensayo con *Allium cepa*, evaluando la calidad del agua antes y después del tratamiento fotocatalítico. Esto se realizó con la finalidad de conocer la posible existencia de un subproducto creado mediante el proceso de degradación que se considerará más tóxico que la molécula inicial.

Por otro lado, la inclusión del factor social vuelve un poco más complejo este análisis debido a que a través de los cuestionarios se tienen diferentes opiniones y percepciones respecto a la calidad del agua, el conocimiento respecto a la existencia de las PTAR y de los contaminantes emergentes.

Finalmente, la simulación realizada mediante Aspen, involucra variables como la cinética de degradación del fármaco y datos que se obtuvieron previamente mediante el análisis de la operación de la PTAR, y las pruebas ideales realizadas con anterioridad. Cada uno de estos elementos contribuye a la formación de una complejidad global, donde las interacciones lineales entre ellos dificultan la predicción con exactitud de los resultados (**Martínez Romero et al; 2021**).

El objeto de estudio en este proyecto de investigación es el agua contaminada por ibuprofeno.

El enfoque de este proyecto se basa principalmente en el positivismo, el cual se caracteriza por seguir el método científico, algunas características son: el empirismo (basado en la observación para deducir conclusiones válidas), y en el prediccionismo, el cual plantea hipótesis para predecir y comprobar hechos. El positivismo utiliza métodos experimentales para observar y medir fenómenos de manera objetiva y cuantitativa, como lo son la fotocátalisis en el tratamiento del efluente de la PTAR y la caracterización fisicoquímica del agua. Mediante la recolección de datos precisos y verificables, se tiene como objetivo verificar si la fotocátalisis solar es aplicable en la degradación de

ibuprofeno de manera ideal y posterior considerando la disminución de la materia orgánica presente en el agua en el efluente de la PTAR de Zacatlán, así como el impacto de los contaminantes. Aunado a esto, también se incorpora un enfoque constructivista considerando las percepciones y actitudes de la población estudiada respecto a su conocimiento sobre la calidad del agua, el uso de los CE y su impacto hacia el medio ambiente, este aspecto social permite comprender como los factores subjetivos y las experiencias individuales influyen en las respuestas de cada persona. Por tal motivo este proyecto adopta un enfoque mixto que combina el análisis cuantitativo y cualitativo proporcionando una visión integral sobre los efectos y la viabilidad de la fotocatalisis en el tratamiento de aguas. **(Fassin et al; 1997).**

4 Planteamiento del problema

Los contaminantes emergentes (CE) son sustancias químicas que se encuentran en el agua y suponen un riesgo hacia la salud humana, los seres vivos y el medio ambiente. En México, las plantas de tratamiento de aguas residuales (PTAR) no están diseñadas para eliminar este tipo de contaminantes, por lo tanto, aunque el agua pasa por diversos tratamientos los CE no se degradan completamente. A pesar de estar equipadas con un tren de tratamientos como pre-tratamiento, tratamiento primario, secundario y terciario, no existe un tratamiento cuaternario que logre erradicar en su totalidad los contaminantes emergentes, de esta forma, llegan a cuerpos de agua y contaminan de manera abrupta el medio ambiente. Existen diferentes tipos de contaminantes emergentes sin embargo los productos farmacéuticos son de gran interés debido a que su presencia modifica las funciones endocrinas, pueden provocar cambios en la resistencia bacteriana, y alteraciones de organismos acuáticos que afectan la salud de la población debido a la bioacumulación (**Salimi et al; 2017**).

Por otro lado, se han encontrado estimaciones de riesgo de cáncer en humanos como resultado de la presencia de ciclofosfamida e ifosfamida. Asimismo, se desconoce que otros daños podría causar el agua contaminada por fármacos hacia las personas, siendo un motivo de preocupación global, debido a que se ha encontrado la presencia de estos en el agua potable, subterráneas y superficiales (Figura 4) (**Bielak et al; 2015**).

Los fármacos, considerados como contaminantes emergentes (CE), representan una alerta sanitaria debido a los problemas que pueden ocasionar en las especies marinas. Esto se debe a que el agua contaminada con estos compuestos llega a cuerpos de agua como lagos, ríos y mares, donde provoca efectos adversos en las especies que habitan estos ecosistemas. Se han reportado estudios de especies de cangrejos que al estar en contacto con agua contaminada por fármacos como antidepressivos se han tornado más agresivos; la disminución de la fertilidad en peces al estar en medios que contienen diclofenaco, hormonas y esteroides provenientes de los residuos de las pastillas anticonceptivas, dando como resultado la alteración de su reproducción (**Kasonga et al; 2021**).

Estos son utilizados de forma intensiva y creciente por lo seres humanos, ya sea de manera personal o de uso veterinario, pero la sustancia activa que contienen sólo es absorbida por los seres vivos entre un 30 y 50%, esto quiere decir que el resto es eliminado mediante la orina y las heces (**Carmona Martínez et al; 2018**).

Ejemplificando los fármacos que se consideran alarmantes por su gran utilización por la población se encuentran el acetaminofén, diclofenaco, ácido acetilsalicílico e ibuprofeno. Estos tienen características específicas cuando se introducen a sistemas acuáticos como son: una alta concentración en muestras de agua residual, alta bioacumulación, y alta toxicidad (**Montes et al; 2022**).

El ibuprofeno (IBU) es un fármaco que pertenece al grupo de los AINE's (antiinflamatorio no esteroideo) comúnmente utilizado para el tratamiento de dolor, fiebre e inflamación. Sin embargo, su presencia como contaminante emergente en el agua ha generado preocupaciones en cuanto a su persistencia en los ecosistemas acuáticos y sus posibles efectos sobre organismos marinos y humanos. Este es introducido en los sistemas de agua a través de las aguas residuales humanas, lo que genera un impacto negativo debido a la ineficacia de los métodos tradicionales de tratamiento de aguas residuales para eliminar este tipo de contaminantes (**López Serna et al; 2016**).

IBU es excretado mediante la orina y las heces, pero las PTAR al no estar diseñadas para eliminar este tipo de contaminantes y esto representa un problema grave, ya que llegan a cuerpos acuáticos sin ningún control, además de esto, existen diferentes rutas de metabolización de los seres humanos, y rutas metabólicas en donde se han descubierto la existencia de los metabolitos del IBU como lo son el 2-hidroxiibuprofeno y el carboxiibuprofeno (**López Serna et al; 2016**).

Además, este fármaco, se ha identificado como un disruptor endocrino, lo que significa que tiene la capacidad de interferir en los sistemas hormonales de organismos marinos, provocando alteraciones en la reproducción, crecimiento y comportamiento de especies acuáticas, por ejemplo, de acuerdo al estudio realizado por **Gauthier et al; 2019**, se ha observado que el ibuprofeno afectó el desarrollo embrionario de los peces, disminuyendo su tasa de supervivencia y alterando los patrones de locomoción.

Otro problema actual de este fármaco es la bioacumulación que causa hacia las especies marinas en donde pueden absorberlo a él y a sus metabolitos a través del agua, los cuales posteriormente son transferidos a organismos con niveles tróficos superiores. (**Migliore et al; 2020**).

Además, aunque las concentraciones de ibuprofeno en aguas residuales no suelen ser tan altas, se observa un efecto de inhibición en el crecimiento de los embriones en concentraciones mayores a 30 mg/L y sin evidencia de supervivencia en concentraciones mayores a 70 mg/L (**Salcedo et al; 2021**), por otro lado, se han reportado concentraciones de ibuprofeno en efluentes sin tratar entre 0.1 y 10 µg/L. En efluentes tratados se han encontrado concentraciones entre el 0.001 y 1 µg/L (**Laos Barrera et al; 2019**) (Figura 6)

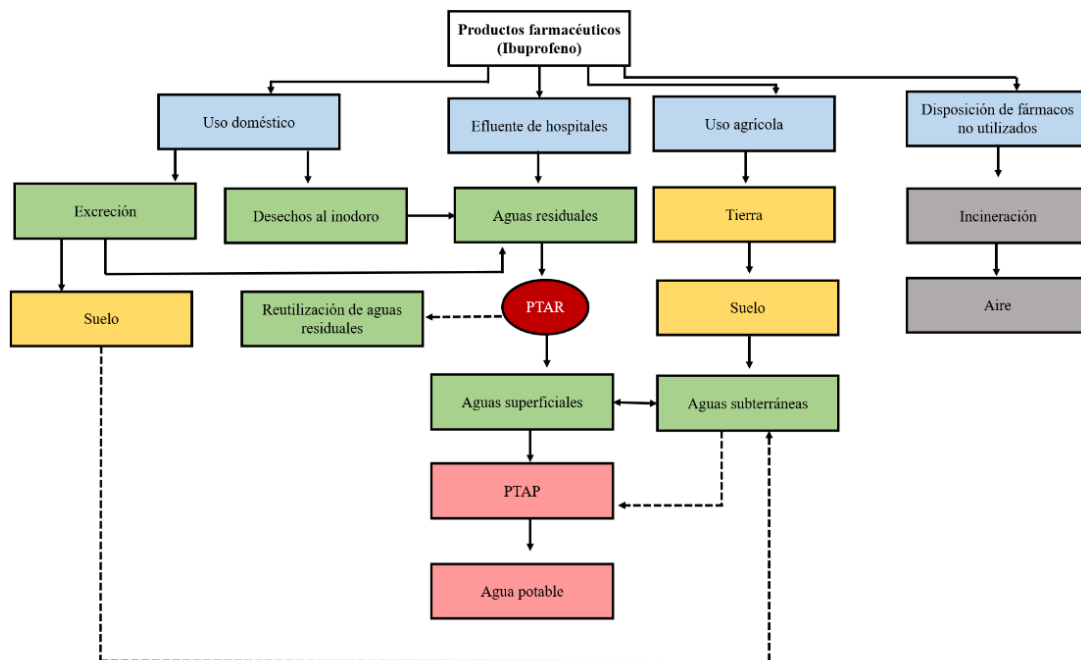


Figura 6. Esquema de representación “Vías de entrada y salida de ibuprofeno en el ciclo del agua” (Pérez et al; 2015 y Singer et al; 2016)

Un aspecto importante del ibuprofeno es que de acuerdo a **Pérez Álvarez et al; 2018** se ha encontrado en concentraciones de 620 ng/L en el efluente de la PTAR de 3 hospitales de la ciudad de Puebla, lo que indica la presencia de este fármaco en la región y localidad de este trabajo de investigación. Además, el efluente de esta PTAR posiblemente descarga a un cuerpo hídrico como el río Atoyac que actualmente es uno de los más contaminados del país.

Aunado a esto es de suma importancia mencionar que existen diferentes leyes y normas establecidas respecto a la calidad del agua que es de suma importancia que las PTAR cumplan como lo son:

Normas ambientales:

- Ley General del Equilibrio Ecológico y Protección al Ambiente: Ley que establece instrumentos de política ambiental
- Ley de Aguas Nacionales: Ley que regula el uso de las aguas
- ISO 14001: Norma internacional que establece cómo implementar un sistema de gestión ambiental

Normas en materia de agua:

- NOM-001-SEMARNAT-2021: Establece los límites máximos de contaminantes en ríos, arroyos, canales y drenes.
- NOM 002-SEMARNAT-2021: Establece los límites máximos de contaminantes a sistemas de alcantarillado.
- NOM-003-SEMARNAT-2021: Establece los límites máximos de contaminantes en aguas residuales tratadas que se reúsan en servicios al público.
- NOM-127-SSA1-2021: Establece los límites de calidad del agua para uso y consumo humano, así como los tratamientos para potabilizarla.
- NOM-179-SSA1-2020: Establece las disposiciones sanitarias para mantener la calidad del agua para uso y consumo humano.

Sin embargo, actualmente no existen normas y leyes que rijan el control de CE en el agua, dentro de estos, los fármacos (Al menos en México), pero la unión europea ha comenzado a regular contaminantes emergentes (incluidos los fármacos) mediante su directiva marco del agua “Estrategia Europea de Contaminantes Emergentes y la “Watch List”, que establece medidas para mejorar la calidad del agua en los estados miembros, aunque esto no es una ley o norma formal, es un avance en el control de CE en el agua.

Existen diferentes técnicas para degradar fármacos, sin embargo, estos tratamientos no son suficientes para erradicarlos en su totalidad, por lo cual es indispensable buscar otras alternativas, como lo es la fotocatalisis heterogénea ([Salcedo et al; 2021](#)), que ha demostrado ser eficiente en la degradación de estos contaminantes emergentes.

Por otro lado, Zacatlán es un municipio del estado de Puebla, localizado en la sierra norte de este, con coordenadas 19°55'55" N, 97°57'36" W, el clima que se presenta en esta ciudad es templado subhúmedo, con una temperatura anual promedio de 14.5 °C. Los meses más calurosos se registran entre marzo y junio, mientras que los más fríos están entre diciembre y febrero. Dentro de este municipio se cuenta con una Planta de Tratamiento de Aguas Residuales, localizada a un lado de la barranca los jilgueros, la cual está a cargo del SOSAPAZ (Sistema Operador de los Servicios de Agua Potable y Alcantarillado del Municipio de Zacatlán) la cual opera por medio de lodos activados, sin embargo, como se ha estado estudiando con anterioridad, esta PTAR no cuenta con un último tren de tratamiento capaz de degradar contaminantes emergentes como el ibuprofeno, molécula modelo estudiada en este proyecto de investigación.

5 Justificación

El agua es el recurso vital más valioso en el mundo, sin embargo, el mayor porcentaje de esta es salada y sólo el 1% es dulce y apta para los seres humanos y justo esta se encuentra en peligro. La escasez de agua dulce se debe a diversos factores, dentro de ellos se encuentran el crecimiento poblacional descontrolado. Debido a las necesidades básicas de la población se ha generado una contaminación antropogénica desmesurada la cual daña al medio ambiente, involucrando al agua, suelo y aire. Este incremento poblacional se debe en primera instancia a la desigualdad social existente tanto en el ámbito de acceso a la salud y educación, así como los altos niveles de pobreza; en cuestión de los recursos hídricos existe un aumento de generación en las aguas residuales domésticas, industriales y municipales, debido a que la capacidad de las plantas de tratamiento de aguas residuales (PTAR) no es suficiente para tratar tantos desechos como orgánicos, e inorgánicos generados por la población, así como el consumo y utilización de químicos tanto en la parte doméstica como industrial, con un mayor número de personas, se incrementa el uso de productos de limpieza, detergentes, jabones, productos de higiene personal, fármacos, etc. Los cuales llegan la mayoría de las veces a las PTAR y si no son tratados correctamente llegan a ríos y lagos, afectando la calidad del agua y causando problemas como eutrofización y problemas de salud en los seres vivos, por otro lado el desarrollo industrial genera grandes cantidades de efluentes contaminados primeramente por compuestos orgánicos volátiles (COV's), metales pesados, hidrocarburos y químicos generalmente tóxicos, además las industrias, especialmente las que requieren grandes cantidades de agua (como la textil, papelería y alimentaria), pueden agotar los recursos hídricos locales.

Por otro lado, existen 17 objetivos de desarrollo sostenible (Figura 7), los cuales se han estado trabajando durante 10 años, sin embargo aunque México ha fortalecido el marco institucional y legal federal, ha creado áreas especializadas en cambio climático (INECC) y seguridad ambiental (ASEA, Gendarmería Ambiental), entre otros, y ha sido parte de la creación de 735 mil empleos verdes y formales, aún no cumple en su totalidad con la mayoría de estos objetivos, de esta manera en el presente trabajo de investigación se logra un acercamiento hacia el cumplimiento de algunos de ellos como lo son:

Objetivo 3: Salud y Bienestar

Objetivo 6: Agua limpia y saneamiento

Objetivo 7: Energía asequible y no contaminante

Por otra parte, la mala gestión de políticas ambientales maximiza los impactos del desarrollo industrial sobre la calidad del agua, debido a regulaciones insuficientes, débil cumplimiento, y priorización del crecimiento económico sobre la sostenibilidad. Además, la falta de gestión, supervisión y planificación adecuada permite vertidos industriales contaminantes, afectando ecosistemas, salud pública y provocando desigualdad en la protección ambiental. Para evitar estos efectos, es de suma importancia actualizar normativas, promover tecnologías limpias, garantizar transparencia y participación ciudadana generando una educación ambiental en la sociedad.



Figura 7. Objetivos de desarrollo sustentable. AGENDA 2030.

Existen tecnologías empleadas en las plantas de tratamiento de aguas residuales como tratamientos primarios secundarios y terciarios, así como tratamientos cuaternarios denominados procesos avanzados de oxidación para la degradación de fármacos.

La cloración es uno de los tratamientos terciarios que se ha utilizado con frecuencia en la degradación de fármacos, esta consiste en que el ácido hipocloroso reacciona con compuestos orgánicos a través de reacciones de oxidación, reacciones de adición o enlaces instaurados. Se han encontrado pocos artículos para la degradación de fármacos mediante esta técnica, sin embargo se estudió la oxidación de amoxicilina y durante el proceso se detectó la formación de subproductos clorados que tienen mayor toxicidad que los compuestos originales, esta técnica es eficiente sin embargo debido a la formación de nuevos productos, ha sido sustituida ya que las tasas de degradación son influenciadas por el pH y la formación de especies halogenadas que son potencialmente carcinógenas (Kim *et al*; 2003).

Por otro lado, la adsorción considerada tratamiento terciario es un fenómeno fisicoquímico en el cual un líquido se adhiere a la superficie de un sólido, y es una técnica muy utilizada en la remoción de colorantes en la industria textil, asimismo también es utilizada para remover fármacos de aguas contaminadas, esta técnica tiene la ventaja de la eliminación de los analitos en lugar de crear metabolitos potencialmente peligrosos, sin embargo este proceso no permite la degradación completa de los fármacos, sólo su transferencia a una nueva fase. Asimismo, la eficiencia de la adsorción corresponde al área superficial del adsorbente porosidad y diámetro de poros (Dotto *et al*; 2020).

Por otra parte, el proceso de ozonólisis clasificada como tratamiento cuaternario requiere que los compuestos tengan enlaces carbono-carbono dobles, para que se consiga la descomposición del ozono en agua para formar radicales hidroxilos. Esto para poder realizar las reacciones necesarias para la descomposición del ozono, sin embargo, a pesar de su alta remoción hacia los fármacos (76%) el proceso requiere un costo y proceso de mantenimiento altos, así como la energía necesaria para abastecer el proceso. Otra limitación es la transferencia de masa en el proceso de oxidación. Además, el proceso de ozonólisis se ve afectado por la presencia de materia orgánica, sólidos suspendidos, pH y temperatura (Somensi *et al*; 2015).

Un método innovador es la fotocatalisis de igual manera tratamiento cuaternario, ha demostrado ser una técnica de degradación altamente eficaz, en la cual se utilizan con regularidad

materiales semiconductores que, al ser iluminados con luz, catalizan una serie de reacciones de óxido-reducción de los sustratos orgánicos e inorgánicos.

Dentro de todas estas cuestiones medioambientales este tema de investigación se considera de suma relevancia porque consiste en la descontaminación de agua mediante una técnica avanzada de oxidación llamada fotocatalisis solar, la cual con ayuda de nanomateriales compuestos logra degradar contaminantes orgánicos (fármacos, en este caso en particular) y de esta forma abrir un panorama respecto a la reutilización de aguas específicamente en el efluente de una PTAR.

Para la realización de esta técnica se requieren tres componentes: el catalizador con superficie fotosensible, una fuente de energía y un agente oxidante. Estudios recientes de acuerdo a **Ebrahimbabaie et al; 2022** han demostrado que la eficacia de esta técnica es porque el mecanismo de reacción no sólo ocurre por medio de formación de radicales hidroxilos, sino por otras especies de radicales derivadas de oxígeno como el ión superóxido (O_2^-) y el peróxido de hidrógeno H_2O_2 . (**Ebrahimbabaie et al; 2022**).

El dióxido de titanio (TiO_2) es uno de los semiconductores más empleados en fotocatalisis por su alta actividad fotocatalítica principalmente en fase anatasa, sin embargo, su área superficial suele ser menor que la del dióxido de silicio (SiO_2) con valores de 40-60 m^2/g frente a 170 m^2/g para SiO_2 (**Wu et al., 2023**). Además, el TiO_2 requiere irradiación en el rango UV para su activación, lo que implica un mayor consumo energético debido a que la luz UV representa sólo una pequeña fracción de la radiación solar. Por último, algunos métodos de síntesis de TiO_2 pueden ser costosos y generar residuos, aunque existen rutas optimizadas para reducir estos impactos.

Por ese motivo a pesar de las propiedades favorables que presenta como fotocatalizador, existen limitantes para el empleo de este por si solo, principalmente por su difícil recuperación en el agua, y el apantallamiento que esta causa. Debido a esto, en el presente trabajo se plantea el uso de este semiconductor soportado en SiO_2 para la fotodegradación de ibuprofeno y el uso de CLI/ SiO_2 debido a que anteriormente el estudio de la clinoptilolita (CLI) como fotocatalizador se he llevado a cabo de acuerdo con (**Aguñaga Álvarez et al; 2018**) los cuales indican que al activar esta zeolita se logra reducir el band gap, debido a que contiene pequeñas cantidades de hierro (1.2 % en peso de Hierro (Fe), que podría ser el origen de diferentes especies fotoinducidas responsables del rendimiento fotocatalítico.

El presente trabajo de investigación se enfoca en el estudio de la planta de tratamiento de aguas residuales (PTAR) del municipio de Zacatlán (específicamente el efluente), el cual se presenta como un tema innovador y poco explorado ya que no existe información bibliográfica al respecto, no se conoce mucho acerca de la operación, eficiencia y el impacto en los procesos de calidad del agua tratada, esta PTAR no cuenta con un tratamiento cuaternario que incluya un proceso avanzado de oxidación, por tal razón es de suma importancia estudiar acerca del conocimiento local respecto al manejo adecuado de aguas residuales que descargan en el río cercano (Río San Pedro) y su posible efecto en los ecosistemas.

6 Preguntas de Investigación

1. ¿Cuál es la capacidad de los nanomateriales $\text{TiO}_2/\text{SiO}_2$ y CLI/SiO_2 para degradar el contaminante emergente ibuprofeno en agua sintética y de la PTAR del municipio de Zacatlán?
2. ¿Cuál es la eficiencia de la fotocatalisis solar en el mejoramiento de la calidad del agua de la PTAR?
3. ¿En qué condiciones la fotocatalisis solar puede proponerse como etapa de pulimiento en la PTAR para la degradación de contaminantes emergentes?
4. ¿Cuál es la situación ambiental y técnica de la PTAR del municipio de Zacatlán?

7 Hipótesis

La fotocatalisis solar con nanomateriales como $\text{TiO}_2/\text{SiO}_2$ y CLI/SiO_2 , mejora la calidad del efluente de la Planta de Tratamiento de Aguas Residuales (PTAR) del Municipio de Zacatlán.

8 Objetivo general:

Evaluar la fotocatalisis solar para el mejoramiento de la calidad del agua de la PTAR de Zacatlán, Puebla.

8.1 Objetivos específicos:

1. Comparar la degradación fotocatalítica de ibuprofeno con $\text{TiO}_2/\text{SiO}_2$ y CLI/SiO_2 en soluciones ideales, y en el agua de la PTAR.
2. Valorar el impacto de la fotocatalisis en la calidad del agua de la PTAR, considerando parámetros fisicoquímicos y la toxicidad del efluente sin tratar y tratado utilizando el biomodelo *Allium cepa*.
3. Validar la viabilidad de la etapa de pulimiento con la fotocatalisis solar para la PTAR del municipio de Zacatlán mediante una simulación en Aspen Plus.
4. Diagnosticar la situación ambiental y técnica de la PTAR a partir de su caracterización y la opinión de la comunidad.

9 Metodología

En la Figura 8, se presenta un esquema general de la metodología desarrollada en este proyecto de investigación, destacando las áreas del trabajo de campo y trabajo de laboratorio asociadas a los objetivos específicos planteados.

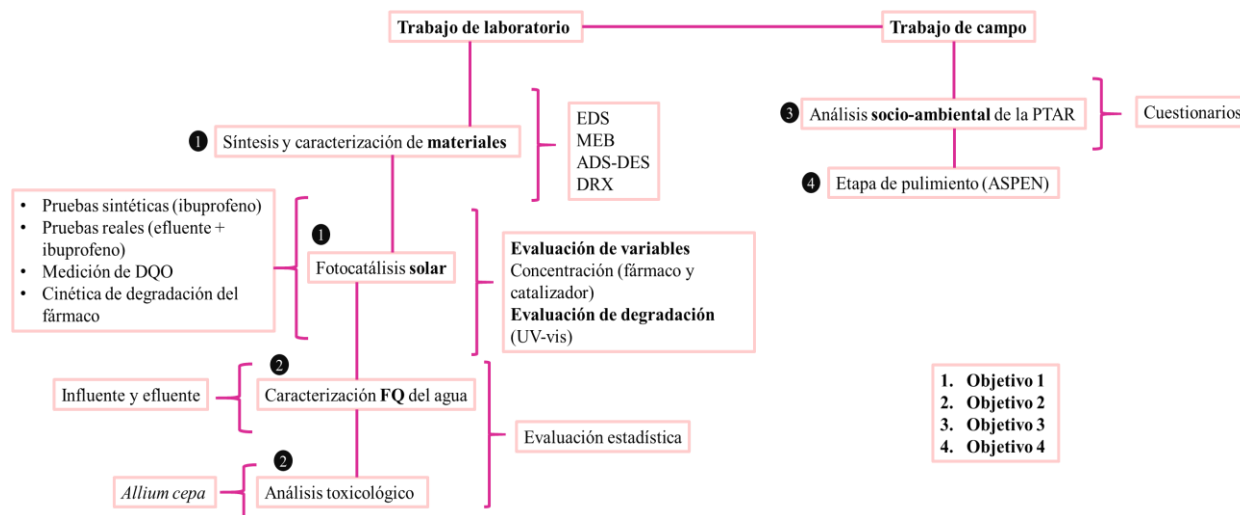


Figura 8. Diagrama general “Metodología”

9.1 Comparación de la degradación fotocatalítica de ibuprofeno con $\text{TiO}_2/\text{SiO}_2$ y CLI/SiO_2 .

9.1.1 Síntesis de los nanomateriales $\text{TiO}_2/\text{SiO}_2$ y CLI/SiO_2

Los materiales utilizados fueron: zeolita natural clinoptilolita (CLI), proporcionada por el laboratorio de investigación en zeolitas del ICUAP, TiO_2 comercial Degussa P25, SiO_2 sintetizado por el método sol gel para la obtención de los nanomateriales $\text{TiO}_2/\text{SiO}_2$ y CLI/SiO_2 . (Relación 1:3). Los nanomateriales se sintetizaron con base en el método sol-gel reportado por Masuda (Masuda *et al*; 1990) y Bedolla (Bedolla *et al*; 2005), que consiste en:

Se mezcló una solución de TEOS/agua desionizada (17.33 ml de TEOS (Tetraetilortosilicato, Sigma Aldrich 98%) / 40 ml de agua desionizada) con una solución de CLI/Etanol (2.5 g de CLI o TiO_2 /23 ml de etanol, Sigma Aldrich 99%) por 30 minutos con agitación constante. Posteriormente se agregó gota a gota 1.67 ml de ácido fluorhídrico como agente gelificante (HF, Sigma Aldrich 90%). La temperatura de la reacción se controló entre 80-90 °C con agitación constante hasta la formación del gel. Se dejó secar por evaporación a 100 °C durante 24 horas y como resultado se obtuvieron cristales pequeños. Finalmente, el polvo obtenido se calcinó a 650°C por 4 horas y se guardaron en cajas oscuras hasta su caracterización.

9.1.2 Caracterización de nanomateriales $\text{TiO}_2/\text{SiO}_2$ y CLI/SiO_2

Espectroscopia de Energía Dispersada (EDS) para determinar la composición química elemental con el microscopio electrónico de barrido JEOL modelo JSM-5610LV. Se analizaron tres zonas de la muestra para obtener un promedio de la composición.

Microscopia Electrónica de Barrido (MEB) para obtener las imágenes de la morfología de las partículas con diferentes ampliaciones con el microscopio electrónico de barrido JEOL modelo JSM-5610LV.

Difracción de Rayos X (DRX) para determinar las fases cristalinas presentes en los materiales utilizando un difractor con radiación de cobalto (1.78901 Å) a 40 kv y 35 mA con tamaño de paso de 0.0167 grados y tiempo por paso de 45s.

Fisorción de nitrógeno (Ads-Des N₂) para determinar el área específica y el volumen de poro de los nanomateriales Se realizó mediante adsorción-desorción de N₂ a -196°C aplicando la teoría desarrollada por Brunauer, Emmett y Teller (B.E.T) en la que se mide el volumen de la monocapa de moléculas de nitrógeno que cubren una superficie. Utilizando el equipo Micrometrics Asap 2020.

9.1.3 Fotodegradación de ibuprofeno en soluciones sintéticas y agua de la PTAR

Degradación fotocatalítica de ibuprofeno en muestras sintéticas

a) Pruebas fotocatalíticas con soluciones sintéticas y nanomateriales TiO₂/SiO₂ y CLI/SiO₂

Se prepararon soluciones sintéticas de ibuprofeno con concentraciones de 10 ppm y 25 ppm. El diseño de experimentos que se realizó en esta etapa es factorial, el cual consiste en tres factores diferentes:

- Concentración de ibuprofeno (Factor A) con 2 niveles = 10 y 25 ppm
- Concentración de catalizador (Factor B) con 4 niveles= 0, 15, 30 y 50 mg/L
- Nanomaterial: (Factor C) con 2 niveles= TiO₂/SiO₂ y CLI/SiO₂

Se consideró un diseño factorial completo, se probaron todas las combinaciones posibles de los niveles de estos tres factores para observar el efecto individual de cada uno (efectos principales) y las interacciones entre ellos. Dado que el primer factor (concentración de ibuprofeno) tiene 2 niveles, el segundo factor (concentración de catalizador) tiene 4 niveles, y el tercer factor (tipo de catalizador) tiene 2 niveles, el número total de combinaciones es: $2 \times 4 \times 2 = 16$ tratamientos (Tabla 2).

b) Pruebas fotocatalíticas con soluciones sintéticas y materiales precursores

El diseño de experimentos que se realizó en esta etapa también es factorial, el cual consiste en tres factores diferentes en donde las combinaciones son $1 \times 1 \times 3 = 3$ (Tabla 3):

- Concentración de ibuprofeno (Factor A) con un nivel de = 10 ppm
- Concentración de catalizador (Factor B) con un nivel = 50 mg/L
- Tipo de catalizador (Factor C) con 3 niveles= TiO₂, SiO₂ y CLI.

Tabla 2 Diseño de experimentos para pruebas fotocatalíticas en muestras sintéticas

Número de experimento	CLI/SiO ₂ (mg/L)	TiO ₂ /SiO ₂ (mg/L)	IBU (ppm)
1	0		10
2	15		10
3	30		10
4	50		10
5		0	10
6		15	10
7		30	10
8		50	10
9	0		25
10	15		25
11	30		25
12	50		25
13		0	25
14		15	25
15		30	25
16		50	25

Tabla 3 Diseño de experimentos para pruebas fotocatalíticas con soluciones sintéticas y materiales precursores

Número de experimento	Catalizador (50 mg/L)	IBU (10 ppm)
1	SiO ₂	50
2	TiO ₂	50
3	CLI	50

Se evaluó la actividad fotocatalítica de los nanomateriales mediante la fotodegradación del fármaco bajo luz solar. Para alcanzar el equilibrio de adsorción-desorción, se siguió el diseño de experimentos mostrado en las Tablas 2 y 3.

Se colocó la solución con el catalizador en 4 matraces de 500 ml, sobre una base de aluminio reflejante con una inclinación aproximada a 19° y en agitación constante con orientación norte a sur, durante 4 horas de exposición de luz solar (11 am a 3 pm, durante 2 días), con aireación únicamente el segundo día mediante un difusor de aire (O₂ 1.5L/min) para dispersar el catalizador y suministrar O₂ a las reacciones. En cada grupo de experimentos se realizó la prueba de fotólisis en la cual se considera el blanco analítico, ya que no contiene al catalizador y permite evaluar la interacción entre la radiación solar y el contaminante. El índice UV fue consultado a través de las aplicaciones Clima de iPhone y Meteored, que permiten acceder a datos meteorológicos diarios específicos de la localidad, incluyendo el valor del índice UV de la ciudad de Puebla, las pruebas realizadas se consideraban cuando este índice UV se encontraba entre 8 y 10 para obtener datos específicos de radiación solar máxima. Se evaluó el comportamiento de cada uno de los materiales compuestos e individuales para determinar cual de ellos presentaba mejor actividad fotocatalítica y conocer la eficiencia de los materiales por sí solos y cuando estos se combinan. (Tablas 2 y 3).

Para determinar el porcentaje de degradación del ibuprofeno en las muestras se tomaron alícuotas de 5 ml, cada 2 horas, y se verificó su degradación mediante espectrofotometría UV-Vis.

Esta técnica se llevó a cabo con un equipo Perkin Elmer Lambda 25 UV/VIS. La remoción de ibuprofeno se determinó mediante la ecuación 1.

Donde:
$$D\% = \frac{(C_i - C_f)}{C_i} \times 100 \quad (1)$$

C_i concentración inicial (ppm)

C_f concentración final (ppm)

Degradación fotocatalítica de ibuprofeno en muestras del efluente de la PTAR

De acuerdo con el mejor resultado evaluado con las muestras sintéticas se determinó el siguiente diseño de experimentos factorial, el cual consiste en tres factores diferentes en donde las combinaciones son $1 \times 1 \times 2 = 2$ (Tabla 4):

- Concentración de ibuprofeno (Factor A) con un nivel= 10 ppm
- Concentración de catalizador (Factor B) con 1 nivel= 50 mg/L
- Tipo de catalizador (Factor C) con 2 niveles= TiO₂/SiO₂ y CLI/SiO₂

Tabla 4 Diseño de experimentos para pruebas fotocatalíticas con agua de la PTAR

Número de experimento	Catalizador (mg/L)	IBU 10 (ppm)
1	CLI/SiO ₂	50
2	TiO ₂ /SiO ₂	50

Una vez determinado el material que demostró mejor actividad fotocatalítica en soluciones sintéticas se realizó el mismo procedimiento utilizando agua de la PTAR, que en este caso fueron ambos catalizadores considerando una solución de ibuprofeno con concentración de 10 ppm.

Para la realización de este experimento se consideró la preparación de una solución con concentración de ibuprofeno de 20 ppm, para que existiera una relación 1:1 respecto al agua del efluente de la PTAR, considerando 500 ml de agua del efluente y 500 ml de solución de ibuprofeno y la proporción de 10 ppm, siguiendo el diseño de experimentos indicado en la Tabla 4.

Previamente a la fotocatalisis se colocó la solución con ibuprofeno y el agua de la PTAR en 3 matraces de 500 ml cada uno, ambos catalizadores con una concentración de 50 mg/L, y el blanco (solución de ibuprofeno + efluente de la PTAR) para pruebas de oscuridad las cuales consisten en evaluar la interacción del nanomaterial y el contaminante sin luz solar, las cuales se llevaron a cabo de 9 a 11 am.

Posteriormente se colocaron los matraces sobre una base de aluminio reflejante con una inclinación aproximada a 19° y en agitación constante con orientación norte a sur, durante 4 horas de exposición de luz solar (11 am a 3 pm, durante dos días), con aireación mediante un difusor de aire (sólo el segundo día) (O₂ 1.5L/min) para dispersar el catalizador y suministrar O₂ a las reacciones. En cada grupo de experimentos se realizó la prueba de fotólisis en la cual se considera el blanco analítico, ya que no contiene al catalizador y permite evaluar la interacción entre la radiación solar y el contaminante.

Para determinar el porcentaje de degradación en las muestras se tomaron alícuotas de 5 ml, cada 2 horas, y se verificó su degradación mediante espectrofotometría UV-Vis. Esta técnica se llevó a cabo con un equipo Perkin Elmer Lambda 25 UV/VIS spectrometer.

La disminución de la concentración de ibuprofeno en muestras del efluente de la PTAR se evaluó calculando el área bajo la curva de los espectros UV-Vis obtenidos, mediante la ecuación 2.

$$\text{Porcentaje de degradación: } \frac{\text{Valor máximo}-\text{Valor mínimo}}{\text{Valor máximo}} \times 100 \quad (2)$$

9.1.4 Determinación de la DQO posterior al proceso fotocatalítico con agua de la PTAR.

La demanda química de oxígeno (DQO) es un parámetro de suma importancia en procesos fotocatalíticos ya que mide la cantidad de materia orgánica presente en el agua, tiene el objetivo de conocer la disminución y posible mineralización de los contaminantes presentes en ella. Para la determinación de DQO se utilizó el método fotométrico con el kit COD cell test marca Hanna instrument en un rango bajo de 150 mg/L, modelo HI83099.

9.1.5 Determinación de la cinética de degradación del fármaco

Para la realización de la cinética de reacción, partimos del modelo de Langmuir Hinshelwood (LH).

$$r = k \frac{k_{ads} C}{1 + k_{ads} C} \quad (3)$$

Donde r es la velocidad de reacción, C es la concentración, k_{ads} es la constante de adsorción y k es la constante de velocidad aparente. Tomando y resolviendo la ecuación para un reactor por lotes (batch), y linealizando la ecuación obtenida, llegamos a

$$\frac{\ln\left(\frac{C}{C_0}\right)}{C-C_0} = \frac{m k_1 t}{V(C-C_0)} + k_2 \quad (4)$$

Donde m es la masa del catalizador, y V es el volumen donde fue llevada a cabo la reacción (Inglezakis *et al*; 2006).

Nótese que la ecuación tiene la forma de la ecuación de una recta ($y = mx + b$), así, al tratar los datos que tenemos, podemos ajustar la pendiente e intersección, obteniendo el valor de la constante de adsorción y de velocidad de reacción aparente. La estimación de los parámetros se lleva con una regresión lineal, por esta razón, es necesaria una evaluación rigurosa desde el punto de vista estadístico para saber que los valores obtenidos son confiables. En este sentido, se utilizarán 2 pruebas, la prueba F y la prueba t. La prueba F evalúa la confiabilidad de la regresión y la prueba t evalúa la confiabilidad de cada parámetro (k y k_{ads}). Cada valor calculado se compara con un valor tabulado, y así, si $F_{cal} > F_{tab}$, la regresión se considera significativa, y si $t_{cal, i} > t_{tab, i}$, el parámetro i se considera significativo. Se evaluará el modelo en los datos experimentales obtenidos para diferentes materiales (TiO_2/SiO_2 y CLI/SiO_2) con 50 mg/L porque a esa concentración el material presenta mayor eficiencia. El análisis de regresión y estadístico se hará con ayuda del software R commander.

9.1.6 Pruebas fotocatalíticas con reactor solar en continuo (Ver anexo (13.6. Estancia de investigación))

9.2 Valoración del impacto de la fotocatalisis en la calidad del agua mediante el bioensayo de *Allium cepa*.

La caracterización fisicoquímica del agua se llevó a cabo para conocer la funcionalidad y desempeño de la planta, considerando si esta cumplía con los límites máximos permisibles de acuerdo con la NOM-001-SEMARNAT-2021.

9.2.1 Caracterización fisicoquímica del agua de la PTAR

Muestreo de agua

Se realizaron 2 muestreos de agua, uno en el mes de abril y otro en el mes de agosto, tomando 4 muestras simples cada 3 horas, iniciando a las 9 am, 12 pm, 3 pm y 6 pm, y se mezclaron para formar una muestra compuesta posteriormente se caracterizaron *in situ* y *ex situ* de acuerdo con la NOM-AA-003-1980 Aguas Residuales-Muestreo.

Para realizar el muestro se necesitaron:

- Recipientes de polietileno estériles con tapas de cierre hermético, para el transporte y conservación de las muestras de aguas residuales.
- Hielera
- Rotuladores y etiquetas de diferenciación
- Termómetro
- Medidores de pH

Determinaciones de campo

Cada parámetro se determinó siguiendo la norma correspondiente, para los valores medidos *in situ*, para pH: NOM-AA-008-SCFI-2016, temperatura NOM-AA-007-SCFI-2000, sólidos suspendidos totales NORMA MEXICANA NOM-AA-034-SCFI-2015 y turbidez NOM-AA-038-SCFI-2001.

Determinaciones de laboratorio

Para la determinación de DQO se utilizó el método fotométrico con el kit COD cell test marca Hanna instrument en un rango bajo de 150 mg/L, modelo HI83099. Después de la realización de las pruebas fotocatalíticas con agua de la PTAR e ibuprofeno, se midió la DQO (Demanda Química de Oxígeno) para determinar la disminución de esta posterior al tratamiento fotocatalítico.

Para la medición de la DBO₅, se siguió el procedimiento de acuerdo con la NOM-AA-28-1981 Determinación de la Demanda Bioquímica de Oxígeno. En donde primero se midió el oxígeno disuelto inicial en una muestra de agua recolectada, que debe estar libre de cloro. Luego, la muestra se incubó en un ambiente oscuro a una temperatura controlada de 20°C durante cinco días. Pasado este tiempo, se midió el oxígeno disuelto final y la diferencia entre ambos valores representa la cantidad de oxígeno consumido por los microorganismos.

Para analizar los compuestos orgánicos volátiles (COVs), se empleó el método especificado en la Norma Mexicana NOM-AA-103-SCFI-2006. La determinación de estos compuestos se realizó mediante cromatografía de gases acoplada a un espectrómetro de masas, dentro del procedimiento de Productos de Extracción de Constituyentes Tóxicos (PECT).

Por otro lado, la medición de metales pesados (MP) se llevó a cabo según lo establecido en la NOM-AA-051-SCFI-2016, que especifica los procedimientos para la determinación de metales en aguas naturales, potables, residuales y tratadas. Para este análisis, se utilizó la técnica de

espectrofotometría de absorción atómica (EAA), que permite identificar y cuantificar metales presentes en el agua mediante la medición de la absorción de luz por los átomos del metal cuando son excitados por una fuente de luz específica.

9.2.2 Determinación de la toxicidad mediante el bioensayo con *Allium Cepa*.

Pruebas de toxicidad con *Allium Cepa*

El objetivo de realizar estas pruebas fue investigar la toxicidad del efluente de la planta de tratamiento de aguas residuales (PTAR) de Zacatlán, considerando el efluente sin tratar (EST), como el efluente posterior a la fotocatalisis (Efluente tratado (ET)) utilizando TiO_2/SiO_2 . De esta manera se permite entender la forma de operación de la PTAR y que tan viable es la fotocatalisis considerando posterior a su tratamiento. De igual manera es fundamental entender si al momento de hacer la fotocatalisis los nanomateriales reaccionan causando toxicidad o no, en el agua debido a los subproductos que regularmente se generan. Con base a esta información se asegura que los métodos de tratamiento no sólo sean efectivos en la eliminación de contaminantes sino en preservar la seguridad ambiental. (Dimuthu *et al*; 2019).

Se analizó el efecto citotóxico del agua de la PTAR mediante tratamiento agudo a 6 días considerando 2 grupos problema: Efluente sin tratar (EST) y Efluente tratado (ET) con sus respectivos grupos control (agua potable) por triplicado, dando un total de 12 bulbos, los cuales fueron seleccionados de acuerdo con su tamaño y peso, asegurando uniformidad para un crecimiento consistente. Se eligieron cebollas sanas, sin manchas, hongos ni raíces formadas previamente, de la misma variedad y adquiridas en el mismo lugar, procurando la máxima homogeneidad posible. La siembra de cada uno de los experimentos se muestra en la Tabla 5 y se realizaron observaciones a partir de ese momento considerando los días posteriores a las 8 am y 4 pm para analizar el crecimiento de las raíces, además de agregar agua para obtener un crecimiento favorable.

Tabla 5 Grupos experimentales y fecha inicial de bioensayo

Efluentes de la PTAR	Día de siembra
Experimento piloto	Lunes 26 de Agosto del 2024
Sin tratar	Sábado 01 de septiembre del 2024
Tratado	Lunes 09 de septiembre del 2024

Nota: Los experimentos se realizaron por triplicado.

Conteo de raíces

El conteo y medición de raíces después del tratamiento agudo en pruebas de toxicidad se realizó por triplicado en cada una de las cebollas con la finalidad de determinar cómo los contaminantes presentes en el agua pueden interferir en el crecimiento y longitud de las raíces impactando directamente en el ciclo celular.

Determinación de los índices mitótico, interfásico y de fases

Al final de cada uno de los tratamientos en sus respectivos días, de cada raíz se cortaron 2 mm del meristemo apical y se fijaron en una solución de etanol (70%) durante 24 horas para favorecer la deshidratación y que penetrara por mayor difusión el colorante. Al día siguiente se les agregó HCl, durante 15 min, se lavaron con agua destilada y se colocó la tinción con aceto-orceína durante 30 min. Posteriormente se realizó el aplastamiento de las raíces para lo cual se colocó un cubreobjetos y se presionó ligeramente para que las células quedaran dispersas y no se encimaran unas con otras, y

de esta manera facilitar su observación al microscopio (LEICA CME y CARL ZEISS) para poder identificar y cuantificar las células y calcular los índices mitótico (IM), interfásico (II) y de fases (IP, IMe, IA, IT). Para tal efecto se siguieron las siguientes fórmulas:

$$\text{índice mitótico} = \frac{\text{No.de células en división mitótica}}{\text{No.total de células observadas}} * 100 \quad (5)$$

$$\text{índice interfásico} = \frac{\text{No.de células en interfase}}{\text{No.total de células observadas}} * 100 \quad (6)$$

$$\text{índice de fases} = \frac{\text{No.de células en determinada fase}}{\text{No.total de células en mitosis}} * 100 \quad (7)$$

Análisis estadístico

Los resultados cuantitativos obtenidos de los bioensayos se presentan como la media \pm error estándar de la media (EEM). El análisis estadístico de los datos se realizó utilizando el programa R Commander, empleando un ANOVA de una vía para comparar los grupos (EST y ET), con un nivel de significancia de $p \leq 0.05$.

9.3 Validación de la viabilidad de la etapa de pulimiento con la fotocatalisis solar para la PTAR

9.3.1 Software Aspen Plus

Se utilizó el software aspen plus debido a que es una herramienta fundamental en el diseño y optimización de proceso industriales, y el diseñar una etapa de pulimiento respecto a este proyecto de investigación ayudará a determinar la viabilidad de la fotocatalisis en la PTAR del municipio. Aspen permite la introducción de diversas variables como son la concentración de los contaminantes y el catalizador, las constantes de velocidad y reacción, etc de esta manera se logra predecir el comportamiento a escala real asegurando que esta etapa cumpla con los objetivos de eficiencia y degradación de CE en el agua.

9.3.2 Simulación de etapa de pulimiento

Se realizó una simulación de la PTAR considerando la inclusión de un reactor fotocatalítico para la remoción de CE en el agua, considerando reactores en paralelo del tipo Photo- CSTR (Photocatalytic continous stirred tank reactor), incluyendo los criterios de diseño para este reactor (volumen y cantidad de catalizador) así como las variables (k_{ads} y k_{vel}) las cuales se describen en la sección

9.4 Diagnóstico del entorno de la PTAR a partir de la opinión pública.

9.4.1 Descripción de la zona de estudio

Para comprender la zona de estudio de Zacatlán Puebla se utilizaron diversas fuentes, entre ellas INEGI para conocer la ubicación precisa de la PTAR , Google Earth para determinar las coordenadas precisas, Sistema Meteorológico Nacional para evaluar el clima y la existencia de desbordes en caso de que exista la presencia de lluvia, así como la radiación solar, CONAFOR para conocer el tipo de vegetación que existe en la zona de estudio y SEMARNAT para identificar las normas aplicables de acuerdo a la descarga de aguas residuales.

9.4.2 Descripción de la PTAR.

Para conocer detalles acerca de la PTAR se realizaron visitas constantes hacia la PTAR y se llevaron a cabo reuniones con los encargados de la PTAR, además para obtener información oficial del sitio se consultará SOSAPAZ (Sistema de Saneamiento y Alcantarillado del municipio de Zacatlán), fuentes del Gobierno Municipal y CONAGUA.

9.4.3 Percepción de la calidad del agua mediante a opinión pública

Para saber la percepción de la población respecto a la calidad del agua del municipio y a la existencia de la PTAR se realizó un cuestionario a hombres y mujeres entre 18 y 60 años que vivían cerca de la PTAR, las preguntas realizadas se encuentran en el anexo D. El cuestionario es una herramienta útil para recolectar información, conocer las diversas opiniones sobre lo que dice un grupo específico respecto a un tema, que en este caso es el funcionamiento de la PTAR, la calidad del agua y la utilización de CE.

La delimitación de la zona se muestra a continuación (Figura 9)

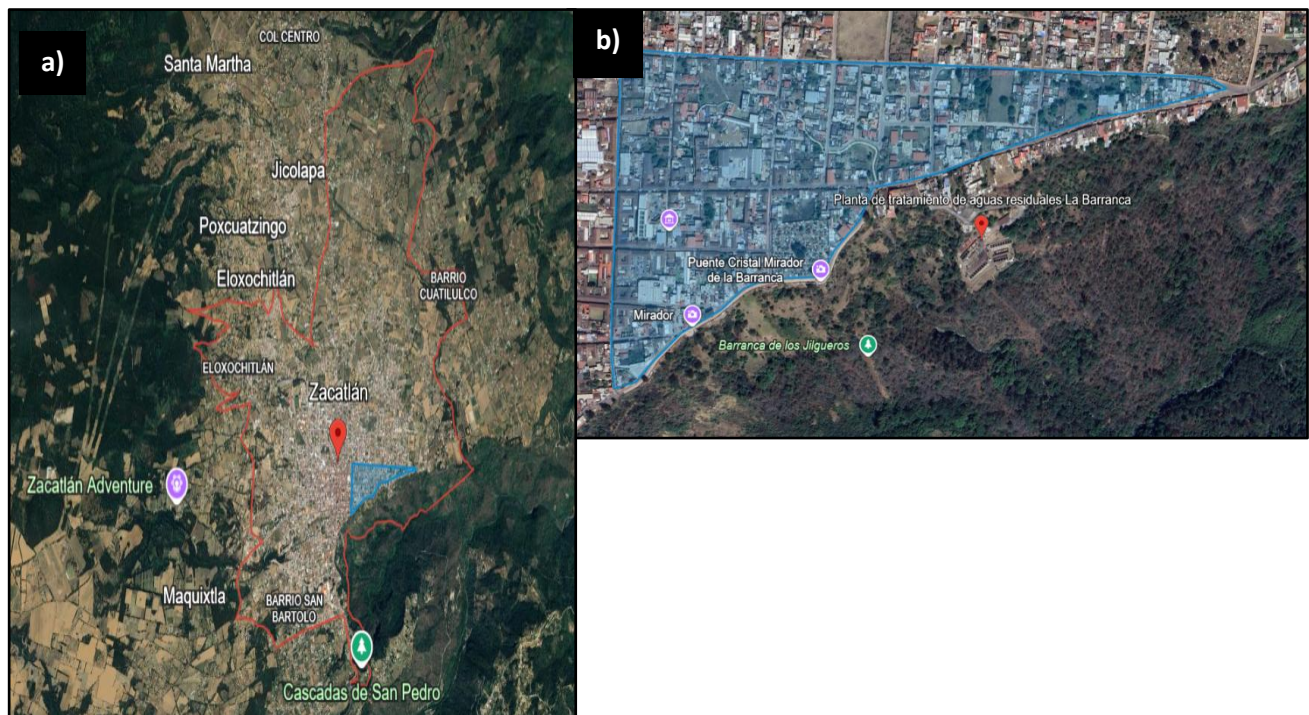


Figura 9. Imágenes de Google Earth del Municipio de Zacatlán, Puebla (a), Delimitación de la zona de estudio (PTAR) Barranca de los Jilgueros (b).

Población alrededor de la planta de tratamiento

Habitantes en Zacatlán: 87,371 habitantes, siendo 52.5% mujeres y 47.5% hombres (INEGI 2020).

El área del municipio de Zacatlán es de aproximadamente **512 km²**. Si asumimos que la zona delimitada corresponde al 15% del total (figura 7), el área sería:

$$512 \times 0.15 = 76.8 \text{ km}^2$$

Densidad poblacional: Si la población total de Zacatlán es de 87,371 habitantes, la densidad poblacional promedio sería:

$$\frac{87,371}{512} = 171 \text{ habitantes por km}^2$$

Población de la zona: Multiplicando la densidad por el área estimada

$$\text{Población estimada} = 171 \times 76.8 = 13,133 \text{ habitantes}$$

Ajustes: De acuerdo a la zona delimitada y el área se estima que hay 13,133 habitantes.

Margen de error para las encuestas realizadas:

$$E = Z * \sqrt{\frac{(p(1-p)) * -\frac{N-n}{N-1}}{n}} \quad (8)$$

Donde:

Z= nivel de confianza

p= 0.5 (Proporción máxima de variabilidad)

n= 50 (Tamaño de la muestra)

N= 13,000 (Tamaño de la población ajustada)

Sustituyendo en la ecuación 8 los datos, se obtiene:

$$E = Z * \sqrt{\frac{(0.5(1 - 0.5)) * -\frac{13,000 - 50}{13,000 - 1}}{50}} = \frac{12,950}{12,999} = 0.1383$$

$$\text{Porcentaje: } 0.1383 \times 100 = \mathbf{13.83\%}$$

Con base en los cálculos anteriores, se obtiene un margen de error del 13.83% considerando la aplicación del cuestionario a 50 personas, este nivel de error se considera confiable ya que permite obtener una aproximación sobre las percepciones de la población respecto a la calidad del agua, funcionamiento de la PTAR y utilización de CE.

10 Resultados

10.1 Eficiencia de la actividad fotocatalítica con $\text{TiO}_2/\text{SiO}_2$ y CLI/SiO_2

10.1.1 Propiedades químicas y estructurales de los nanomateriales

Microscopia Electrónica de Barrido (MEB)

En la Figura 10 se muestran las micrográficas de MEB del catalizador $\text{TiO}_2/\text{SiO}_2$ tomadas con ampliaciones: (a) 5000X y (b) 3000X. En estas micrográficas se pueden observar zonas oscuras de diferentes formas y tamaños que corresponden a la superficie de las partículas de mayor tamaño del SiO_2 y partículas de menor tamaño semi esféricas asociadas al TiO_2 . La proporción de síntesis de 1:3 ($\text{TiO}_2/\text{SiO}_2$) corresponde a la proporción molar de los óxidos, lo que significa que el dióxido de silicio es tres veces más abundante que el dióxido de titanio, lo cual fue confirmado por el análisis EDS, que mostró una proporción atómica Ti:Si consistente con esta proporción teórica. En la Figura 8 (b) se puede observar que las partículas de TiO_2 no se distribuyen de manera homogénea sobre la superficie del SiO_2 . Por otro lado, en el estudio de [Bellardita et al; 2010](#), se reportó que las partículas de sílice actuaron como centros de nucleación para la precipitación de TiO_2 , independientemente del tipo de sílice y además la morfología reportada sobre $\text{TiO}_2/\text{SiO}_2$ fue muy diferente respecto a la del soporte sin recubrimiento.

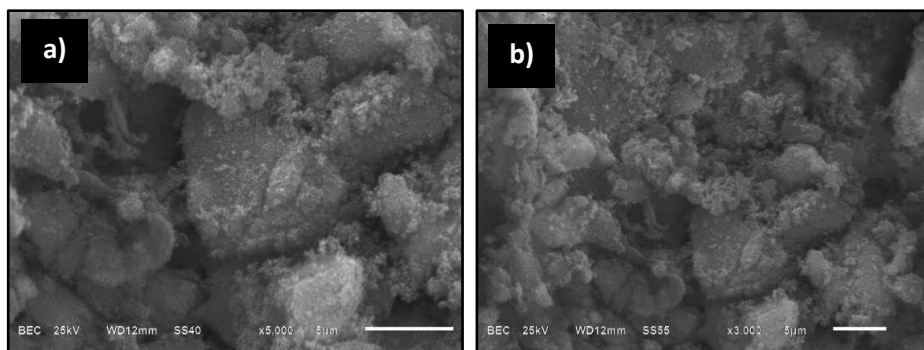


Figura 10 Micrográficas del catalizador $\text{TiO}_2/\text{SiO}_2$: (a) 5000X y (b) 3000X (X= ampliación).

En la Figura 11 se muestran las micrográficas de MEB del catalizador CLI/SiO_2 tomadas con ampliaciones: (a) 5000X y (b) 3000X. En estas micrográficas se muestra una morfología heterogénea con partículas cristalinas de formas y tamaños variados: las partículas mayores pertenecen al SiO_2 , mientras que las de menor tamaño pertenecen a la zeolita (CLI) lo que corresponden a tener un bajo grado de cristalinidad, lo que puede proveer una amplia superficie específica porosa facilitando procesos de adsorción e interacción de reactivos en los sitios activos ([Álvarez Aguiñaga et al; 2018](#)).

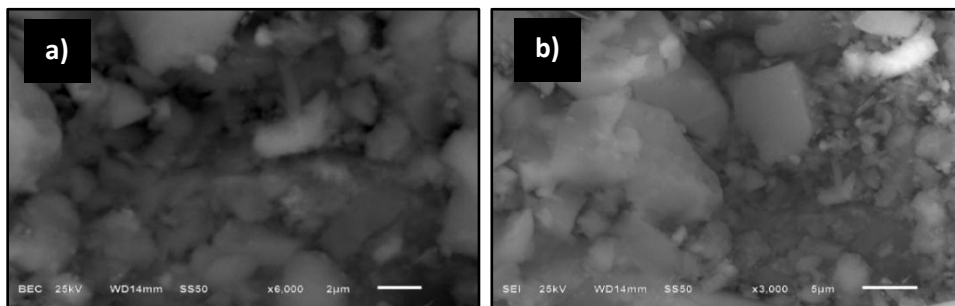


Figura 11 Micrográficas del catalizador CLI/SiO_2 (a) 5000X y (b) 3000X (X= ampliación).

Espectroscopia de energía dispersada (EED)

En la Figura 12 los resultados de EED del catalizador $\text{TiO}_2/\text{SiO}_2$ muestran que el oxígeno se encuentra en proporción de 56.84%, el silicio en 29.48% y finalmente el titanio en 13.68%, esto se debe a que el método sol gel, implica la hidrólisis de precursores de titanio y silicio, lo que puede generar grupos hidroxilo ($\text{OH}\cdot$) en la superficie del material. Estos grupos hidroxilo contribuyen a la señal de oxígeno en el análisis EED. La presencia del SiO_2 en el nanomaterial sintetizado por sol-gel puede promover una superficie porosa capaz de adsorber agua o gases del ambiente (Zou et al; 2016). Por otra parte, el silicio se encuentra en mayor proporción que el titanio, esto se debe a que actúa como soporte y la relación de síntesis se estableció en 1:3 ($\text{TiO}_2/\text{SiO}_2$), lo que implica un contenido de sílice tres veces mayor que el titanio en términos de óxidos.

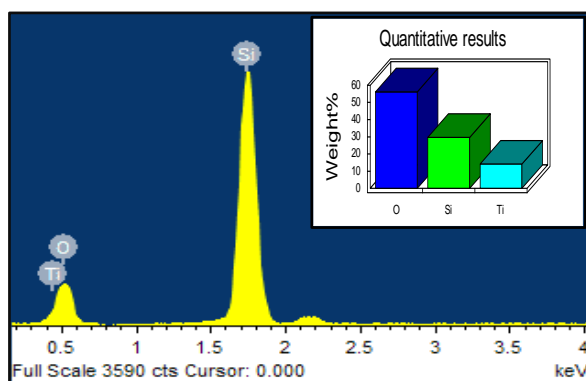


Figura 12 Resultados de EED para el catalizador $\text{TiO}_2/\text{SiO}_2$

Los resultados de EED del catalizador CLI/SiO_2 sintetizado por el método sol-gel (Figura 13) muestran una composición elemental en donde predomina el oxígeno (44.93%) y silicio (29.76%), los cuales son los elementos principales en la red de SiO_2 y forman su base estructural. La presencia del flúor se debe a la utilización de HF en el método de síntesis, el carbono deriva de residuos orgánicos, y algunos elementos en bajos porcentajes como el sodio y aluminio corresponden a la estructura natural de la zeolita CLI (Wang et al; 2019).

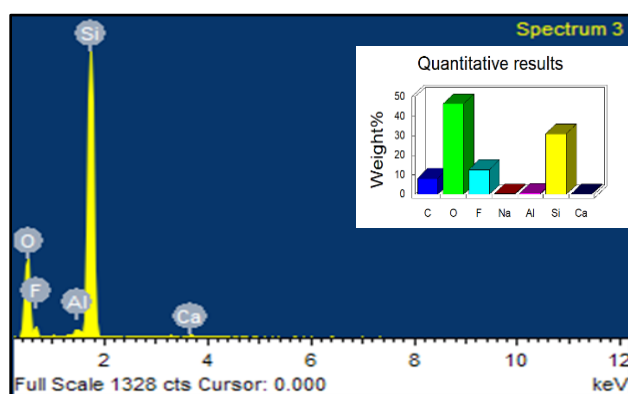


Figura 13 Resultados de EED para el catalizador CLI/SiO_2

Difracción de Rayos X (DRX)

De acuerdo con el patrón de difracción de Rayos X mostrado en la Figura 14, se puede observar la presencia del silicio amorfo por la pequeña curvatura al inicio del difractograma de 20 a 24° 2θ . Los valores característicos de 2θ determinados y los planos (hkl) para el catalizador son: 25.354° (101), 38.575° (112), 48.049° (200), 53.890° (105), 55.060° , (211), 62.688° (204), 68.760° (116), 70.309 (220), 75.029 (215) los cuales corresponden a ficha JCPD Card No.21-1272, TiO_2 en fase anatasa (Riazian *et al*; 2011). El soporte SiO_2 se caracteriza por ser amorfo, mientras que el TiO_2 tiene una clara cristalinidad. En comparación con Bellardita *et al*; 2021, ellos demostraron que el pico de anatasa se encuentra en los difractogramas de ambas muestras $\text{TiO}_2/\text{SiO}_2$.

En la Figura 15 se observa el patrón de difracción de Rayos X del catalizador CLI/SiO_2 que presenta una curvatura característica del soporte SiO_2 amorfo entre 15 y 30° , los valores característicos de 2θ determinados y los planos (hkl) para el catalizador son: 28.586° (441), 40.123 (121), 58.285° (444), 43.574° (271), correspondientes a la ficha cristalográfica JCPD Card No. 39-1383 de la zeolita natural clinoptilolita. El material es predominantemente amorfo.

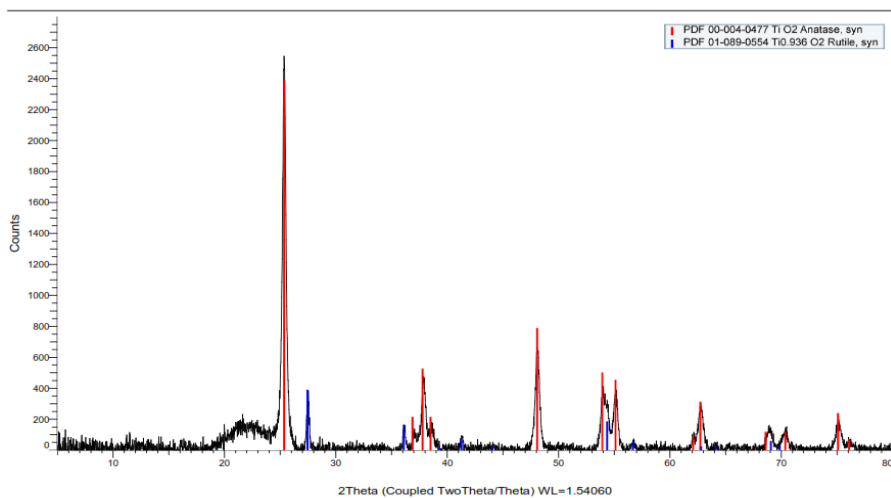


Figura 14 Patrón de difracción de Rayos X de $\text{TiO}_2/\text{SiO}_2$

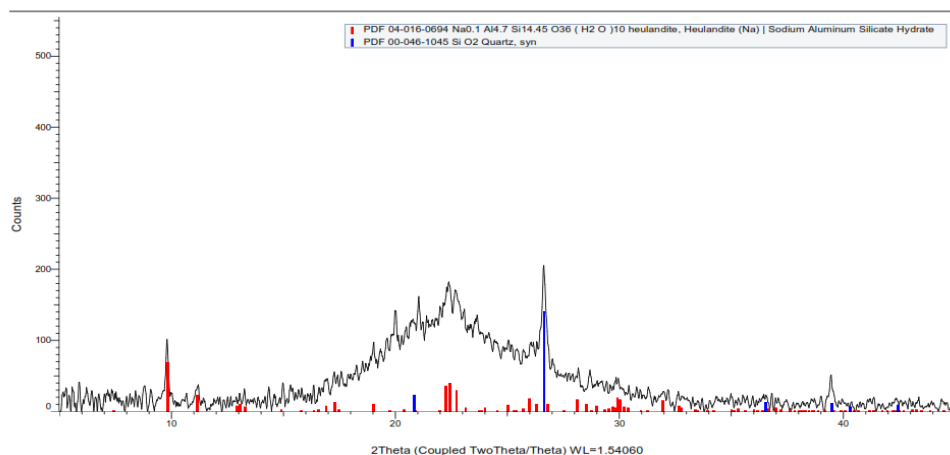


Figura 15. Patrón de difracción de Rayos X de CLI/SiO_2

Fisiorción de nitrógeno (Ads-Des N₂)

De acuerdo con la clasificación de las isothermas de adsorción de la IUPAC (ver anexo), las isothermas de adsorción calculadas para los nanomateriales TiO₂/SiO₂, CLI/SiO₂, TiO₂, SiO₂ y CLI (Figura 16 a), b), c), d) y e) corresponde al tipo IV porque presentan lazo de histéresis. Este tipo de isoterma es característico de materiales mesoporosos (con poros de tamaño entre 2 y 50 nm), (Adsorción en sólidos mesoporosos). Por otro lado, en la figura 16 a), c) y d) que corresponden a TiO₂/SiO₂, TiO₂ y SiO₂ presentan un isoterma de adsorción tipo I y un lazo de histéresis H1, mientras que en b) y e) que corresponden a CLI/SiO₂ y CLI corresponden al tipo de isoterma III y un lazo de histéresis H3 (Adsorción en sólidos mesoporosos) (Brouers *et al*; 2013).

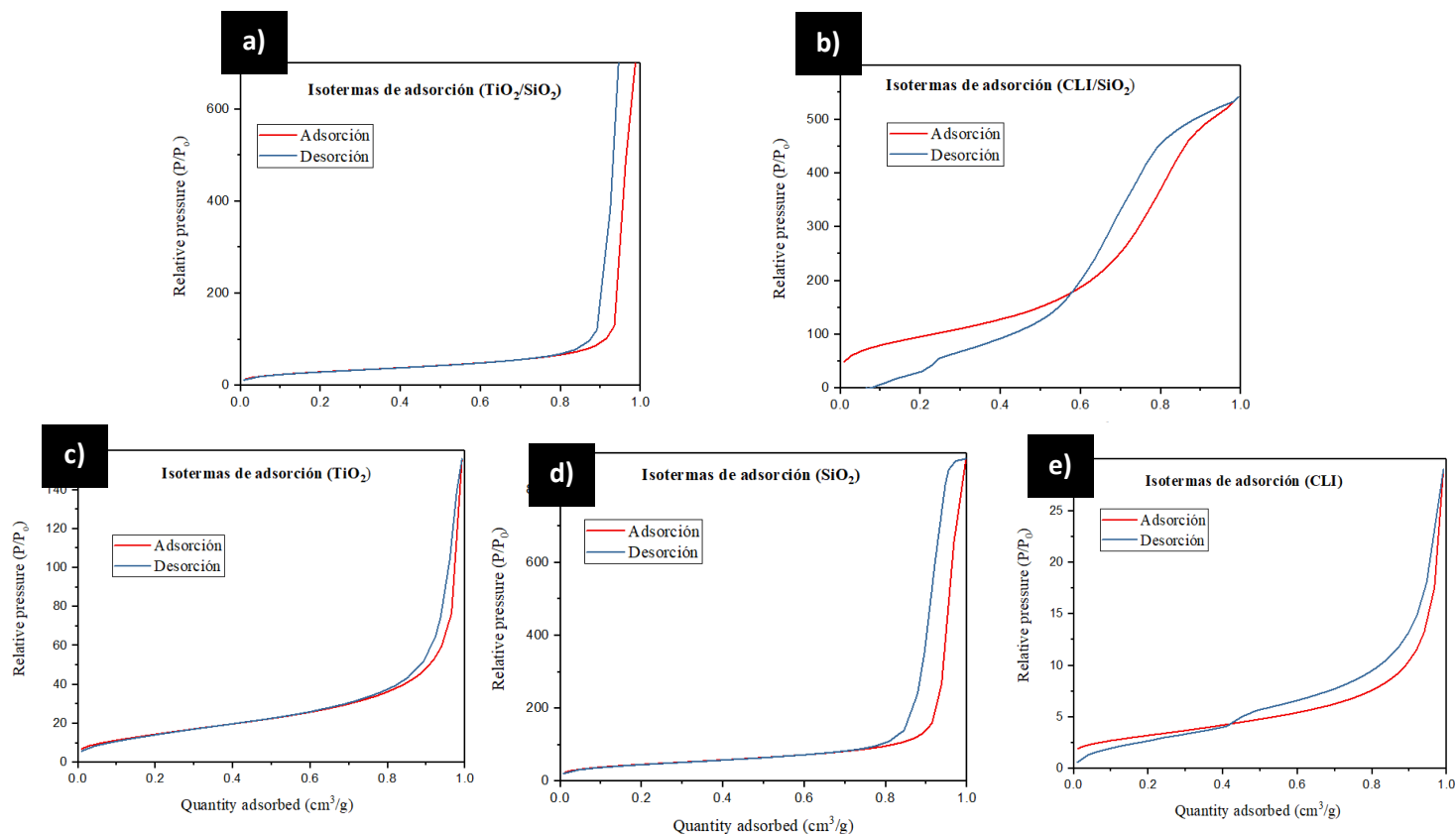


Figura 16. Isothermas de adsorción de los nanomateriales estudiados a). TiO₂/SiO₂, b) CLI/SiO₂, c) TiO₂, d) SiO₂ y e) CLI

Por otro lado, la Tabla 6 muestra la clasificación y ajuste de los modelos correspondientes a los nanomateriales estudiados en donde se observa que todos se ajustan de mejor manera al método de BET (Brunauer *et al*; 1938), esto es porque es el modelo que mejor describe la adsorción de los materiales, indicando que tienen una alta superficie específica y adsorben en múltiples capas.

Tabla 6 Ajuste y clasificación de modelos de adsorción correspondientes a los nanomateriales

	BET	Langmuir	Freundlich	Temkin
CLI	0.994	0.57	0.81	0.55
CLI/SiO ₂	0.999	0.326	0.854	0.699
SiO ₂	0.998	0.448	0.71	0.367
TiO ₂	0.998	0.563258	0.85	0.53
TiO ₂ /SiO ₂	0.999	0.4756	0.73	0.33

Finalmente, en la Tabla 7 se muestra que los materiales que presentan mayor área superficial son los que contienen SiO₂ en el siguiente orden: CLI/SiO₂ > SiO₂ > TiO₂/SiO₂, mientras que el TiO₂ presenta un valor de 68.27 m²/g y la zeolita CLI el menor valor de 11.30 m²/g, este aspecto es muy importante porque una característica de un excelente fotocatalizador es que presenta un área superficial alta para contribuir a la retención de contaminantes en los sitios activos. (Brunauer *et al*; 1938). Respecto al volumen de mesoporos, TiO₂ (0.0075 cm³/g) y CLI/SiO₂ (0.0072 cm³/g) presentan el mayor valor y contribuyen a una mejor mayor capacidad de adsorción en microporos de acuerdo a lo reportado según Kobayashi *et al*; 2005, lo que podría facilitar la retención de contaminantes emergentes como el ibuprofeno, mejorando su eliminación del agua (Langmuir, 1918; Freundlich, 1906).

Tabla 7 Volumen de poro y área superficial de los materiales estudiados

	TiO ₂ /SiO ₂	CLI/SiO ₂	TiO ₂	SiO ₂	CLI
Volumen de microporo (cm ³ /g)	0.00604	0.007278	0.007512	0.000809	0.000035
Área superficial (m ² /g)	117.6557	355.4745	68.2763	160.2691	11.3084

10.1.2 Evaluación de la degradación de ibuprofeno en muestras sintéticas y reales

Porcentaje de degradación fotocatalítica en soluciones sintéticas de ibuprofeno

En la Figura 17 se muestran los espectros UV-Vis de una solución de ibuprofeno (10 ppm) con ambos catalizadores durante 8 horas de exposición a la luz solar, en la Figura 17 (a) se observa una degradación de 85-90% utilizando como catalizador TiO₂/SiO₂. Los espectros de absorción UV-Vis muestran un decremento de la banda de máxima absorción de un anillo aromático localizada en 220 nm y un incremento de la banda de máxima de absorción del ácido carboxílico localizada en 280 nm en este estudio y en el reportado por Marban *et al*; 2023 infiriendo la formación de subproductos de reacción. Debido a que el compuesto 1-(4-acetilfenil)-2-metil-1-propanona (III) mantiene el anillo aromático en su estructura posterior a la exposición fotocatalítica, y presenta una absorción en la región cercana a los 220 nm por sus transiciones electrónicas $\pi \rightarrow \pi^*$, la disminución observada en la banda máxima del espectro (220 nm), podría indicar la formación de este subproducto durante el proceso de degradación reportado por Zeng *et al*; 2015 mientras que, la Figura 17 (b) muestra un decremento de la banda máxima (220 nm), sin formación de subproductos con una remoción del 75%,

utilizando CLI/SiO_2 y considerando que en la utilización de este catalizador están ocurriendo ambos fenómenos de manera simultánea (Adsorción y fotocatalisis) lo que contribuye a una disminución del IBU (Verrocchi *et al.*; 2019).

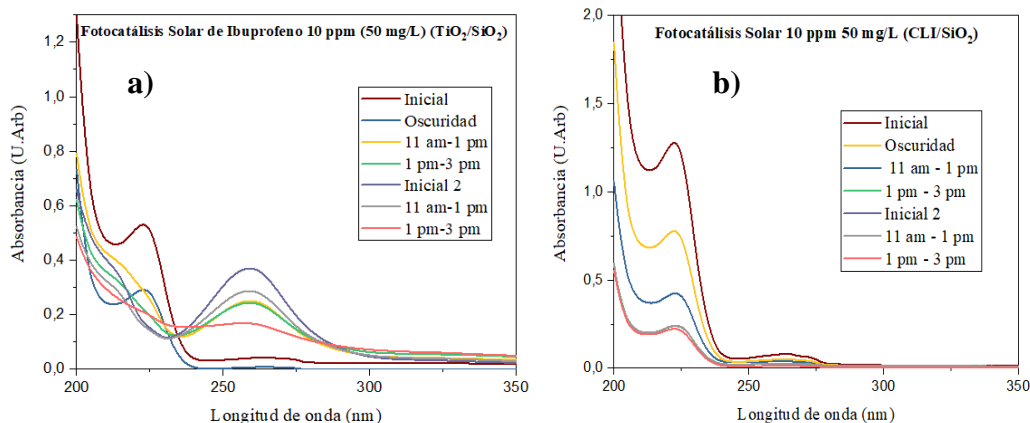


Figura 17. Espectros de absorción UV-Vis de una solución de ibuprofeno (10 ppm), utilizando $\text{TiO}_2/\text{SiO}_2$ y CLI/SiO_2 .

Porcentaje de degradación fotocatalítica en agua de la PTAR con ibuprofeno

En la Figura 18 se observa la disminución de la banda máxima de ibuprofeno y agua de la PTAR con ibuprofeno iniciando en una absorbancia de 3.25 y disminuyendo hasta 0.5 con $\text{TiO}_2/\text{SiO}_2$ Figura 19 (a) y de 3.5 hasta 0.75 con CLI/SiO_2 Figura 18 (b) esto indica una disminución significativa en la absorbancia en la región de 200-250 nm, esto refleja una degradación progresiva del ibuprofeno y de la materia orgánica presente en el efluente de la PTAR en presencia de luz solar lo cual indica una mayor eficiencia en el tratamiento aplicado. (Madkhali *et al.*; 2023).

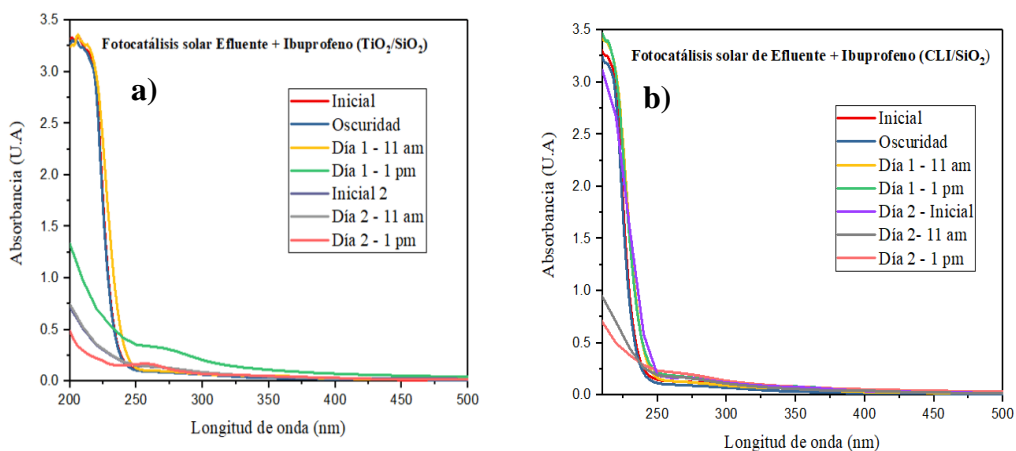


Figura 18 Espectros de absorción UV-Vis de una solución de ibuprofeno (10 ppm) + Efluente de PTAR, utilizando $\text{TiO}_2/\text{SiO}_2$ y CLI/SiO_2 .

Debido a que en estos casos no fue posible utilizar una curva de calibración para calcular el porcentaje de remoción de ibuprofeno más los contaminantes del efluente de la PTAR, se optó por calcular el área bajo la curva del espectro inicial y final de cada proceso fotocatalítico obteniendo los

siguientes resultados. De acuerdo con las Figuras 19 y 20, se observa una disminución considerable en la banda de absorción máxima del agua de la PTAR con ibuprofeno, consiguiendo una remoción alta utilizando ambos catalizadores, lo que confirma la disminución tanto del ibuprofeno como de la materia orgánica (Guevara *et al.*; 2017).

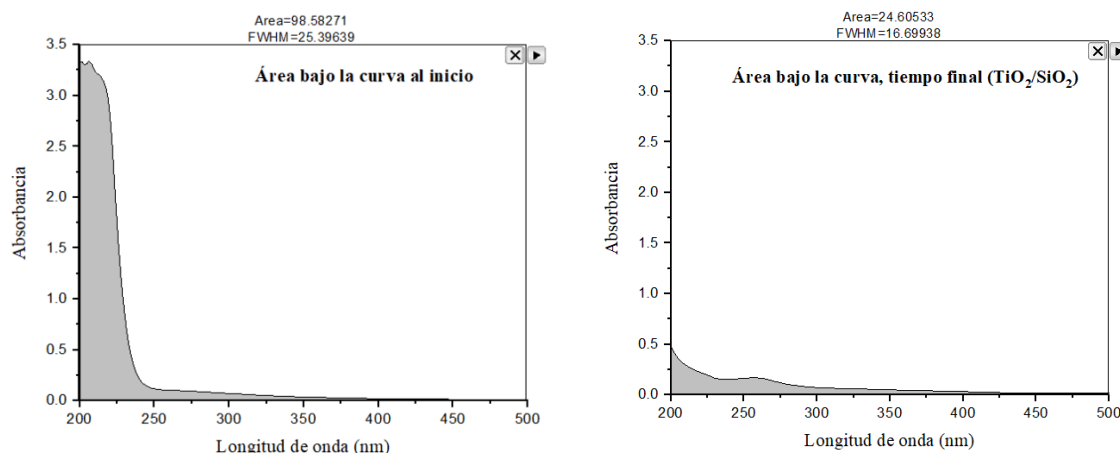


Figura 19. Área de la curva calculada respecto a la degradación de materia orgánica e ibuprofeno utilizando $\text{TiO}_2/\text{SiO}_2$

$$\text{Porcentaje de degradación: } \frac{\text{Área inicial} - \text{Área final}}{\text{Área inicial}} \times 100 = \frac{98.5827 - 24.6130}{98.5827} \times 100 = 75.033\%$$

(9)

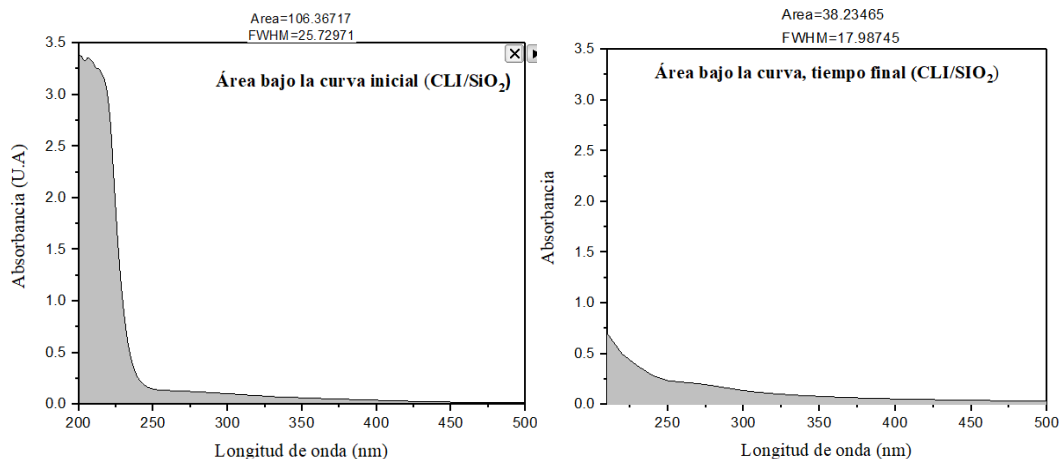


Figura 20. Área de la curva calculada respecto a la degradación de materia orgánica e ibuprofeno utilizando CLI/SiO_2 .

$$\text{Porcentaje de degradación: } \frac{\text{Área inicial} - \text{Área final}}{\text{Área inicial}} \times 100 = \frac{106.3671 - 38.23465}{106.3671} \times 100 = 64.05\%$$

(10)

10.1.3 Disminución de la DQO posterior al proceso fotocatalítico

De acuerdo con la Tabla 8, se midió la DQO posterior al proceso fotocatalítico considerando el efluente de la PTAR sin tratar y el efluente tratado por fotocatalisis en donde se observa una disminución de la materia orgánica en el agua, además de que el proceso se realizó por duplicado y se determinó su promedio y desviación estándar indicando el valor típico de los datos.

Tabla 8 Medición de DQO posterior a pruebas fotocatalíticas con agua de la PTAR e ibuprofeno

Medición de DQO posterior a pruebas fotocatalíticas (mg/L)				NOM-001-SEMARNAT
	Efluente sin tratar	Efluente tratado con TiO ₂ /SiO ₂	Efluente tratado con CLI/SiO ₂	
	89	29	46	150
Duplicado	78	32	44	
Promedio	83.5	30.5	45	
Desviación estándar	7.7	2.12	1.4	
% de disminución	---	63.4730	46.1077	

Se observa la disminución de la DQO, posterior al proceso fotocatalítico lo que evidencia su eficiencia, esto se debe a su capacidad para degradar compuestos orgánicos presentes en el agua y la eficacia de los catalizadores, principalmente a la generación de radicales hidroxilo altamente reactivos en el proceso, los cuales atacan los enlaces de los compuestos presentes en el agua promoviendo su degradación, mediante el rompimiento de enlaces, algunos factores que influyen son: los compuestos orgánicos presentes en el agua residual, la intensidad y el tiempo de exposición a la luz UV, la cantidad y el tipo de catalizador utilizado, y las condiciones operativas como el pH y la temperatura del agua (Madkhali *et al*; 2023).

Porcentaje de degradación fotocatalítica y disminución de DQO en soluciones sintéticas de ibuprofeno (materiales individuales)

De acuerdo con la Tabla 9, se puede observar que todos los valores de DQO se encuentran dentro de los límites máximos permisibles según la NOM- 001 SEMARNAT 2021, el blanco (solución de ibuprofeno sin presencia de catalizador) no muestra disminución en el porcentaje de degradación lo que indica que, sin este, el fármaco no puede degradarse solo mediante luz solar y presenta una DQO de 83 mg/L.

Se observa que el material más eficiente en cuestión de degradación del fármaco (solución de IBU a 10 ppm) y disminución de DQO es TiO₂ lo que indica su efectividad en la remoción de contaminantes orgánicos, sin embargo, a pesar de eso, al utilizarlo solo tiene algunas desventajas como el apantallamiento, la difícil recuperación en el agua y su costosa síntesis, por tal razón se opta por utilizar nanomateriales compuestos como lo son TiO₂/SiO₂ (Guevara *et al*; 2017).

Por otro lado, aunque CLI y SiO₂ tienen una capacidad de degradación menor en comparación con TiO₂, también contribuyen a la reducción de DQO en relación con el blanco, esto indica que además de la fotocatalisis pueden estar actuando como mecanismos de adsorción, lo que también favorece la remoción de materia orgánica en el agua. (Muñoz *et al*; 2019)

Finalmente, el proceso fotocatalítico ha demostrado buena eficiencia de degradación del ibuprofeno con ambos catalizadores propuestos en este trabajo.

Tabla 9 Porcentaje de degradación y DQO en materiales individuales

	% de degradación	DQO
Blanco	0±0	83±1.41
CLI	25.5±2.12	35.5±0.70
TiO₂	90.5±3.5	11±1.41
SiO₂	41.5±2.12	37±1.41
*NOM 001-SEMARNAT 2021	-	150

*NOM 001- SEMARNAT 2021 Límites máximos permisibles de contaminantes en descargas de aguas residuales a aguas y bienes nacionales.

En la Tabla 10 se observa una comparación con procesos similares reportados en la literatura sobre la degradación de ibuprofeno en agua mediante fotocatalisis, entre los aspectos más destacados de este proyecto están el uso de luz solar y una cantidad considerablemente menor de catalizador con respecto a las demás investigaciones. Aunque el tiempo de degradación es mayor, el porcentaje de degradación es más alto que el reportado en la literatura mencionada.

Tabla 10 Comparación en el desempeño de diferentes materiales para degradación de ibuprofeno mediante fotocatalisis.

Catalizador (mg)	Concentración (mg/L) - Ibuprofeno	Tiempo (horas)	Porcentaje de degradación (%)	Condiciones	Referencia	Tipo de luz
TiO ₂ (134.5)	200	4	50%	Cambios en pH (2.5, 5 y 12). T= 25°C	Jiménez-Salcedo <i>et al</i> ; 2018	UV/LED
TiO ₂ (100, 300 y 500)	20	2	46.5%	Cambios en pH (3, 7, 5 and 9). T= 25°C	Miranda <i>et al</i> ; 2021	Lámpara UV-Vis
TiO ₂ /Ag (5000)	50	4	---	Cambios en pH 3 y 7. T= 25°C	Suárez-Escobar <i>et al</i> . 2020	Lámpara visible
SSL/ CoFe ₂ O ₄ /Ti O ₂ (250 y 200)	25-50	2	42%	Cambios en pH of 4-10, T= 25°C	Gong <i>et al</i> ; 2018	Luz solar
TiO ₂ (100)	50	4	85%	pH 5.3-5.6	Chaker <i>et al</i> ;2021	Lámpara visible
TiO ₂ /SiO ₂ (50)	10	8	90%	T = 25°C	Este trabajo	Luz solar

Mecanismo de ruptura

El ibuprofeno está conformado por un anillo aromático, un ácido carboxílico y un alcano, de acuerdo con la teoría de orbitales moleculares especialmente en las transiciones electrónicas, se observa en la longitud de onda 280 nm el grupo carboxilo, mientras que en 220 nm el anillo aromático, por tal razón, el mecanismo de ruptura del fármaco se muestra en la Figura 21 según **Oliveira et al; 2021**, es el siguiente:

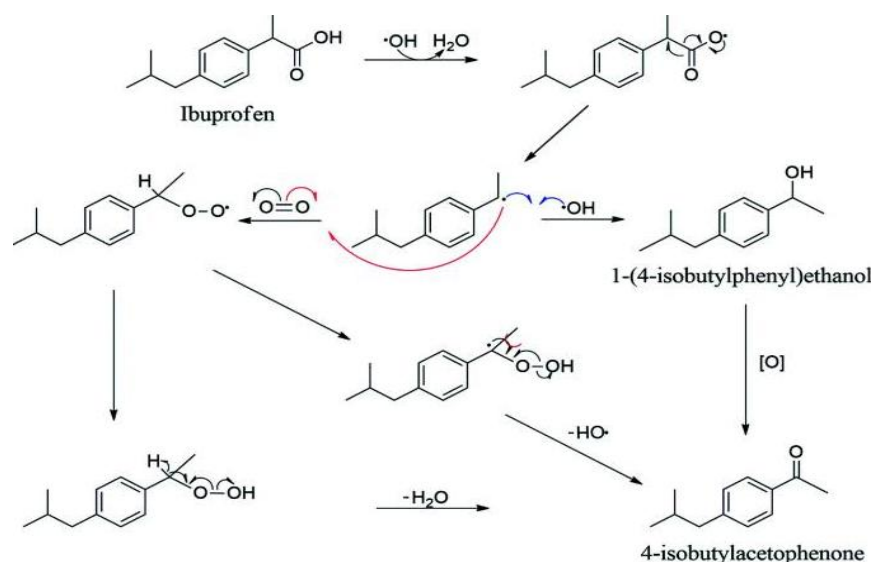


Figura 21. Mecanismo de ruptura del ibuprofeno (Oliveira Miranda et al, 2021)

De acuerdo con **Zeng et al; 2015**, existen algunos subproductos formados durante la fotocatalisis, dentro de ellos están:

- I. Ácido 2-(4-isobutilfenil)-2-hidroxiopropanoico
- II. Ácido 2-[4-(1-hidroxiisobutil) fenil]propanoico
- III. 1-(4-acetilfenil)-2-metil-1-propanona
- IV. 1-[4-(2-metilpropil) fenil]etanol
- V. 1-etil-4-(1-hidroxi) isobutilbenceno

Según **Zeng et al 2015**, una de las primeras etapas de degradación del IBU es la formación de los subproductos ácido 2-(4-isobutilfenil)-2-hidroxiopropanoico (I) y ácido 2-[4-(1-hidroxiisobutil) fenil]propanoico (II), estos sufren deshidrogenación y descarboxilación y desencadenan otros subproductos, como el 1-(4-acetilfenil)-2-metil-1-propanona (III) (Identificado en la figura 18-a)

10.1.4 Valores cinéticos del proceso fotocatalítico de degradación de ibuprofeno

Para un eficiente proceso de fotocatalisis, el primer paso es que el reactivo (ibuprofeno) se adsorba en la superficie del fotocatalizador. Posteriormente, la reacción sucede y el ibuprofeno es degradado. Es importante la caracterización de estos procesos para la comprensión del desempeño del catalizador y del proceso de degradación del ibuprofeno y entender las diferencias entre el TiO_2 y la clinoptilolita. Para esto, se calculan 2 parámetros que caracterizan dichos procesos, la constante

de adsorción (k_{ads}), y la constante de velocidad aparente (k). La velocidad de reacción para una reacción fotocatalítica heterogénea está dada por el modelo de Langmuir-Hinshelwood.

$$r = k \frac{k_{ads} C}{1+k_{ads} C} \quad (11)$$

Donde r es la velocidad de reacción, C es la concentración, y como se mencionó anteriormente, k_{ads} es la constante de adsorción y k es la constante de velocidad aparente.

La forma en cómo se llevaron a cabo las pruebas de adsorción fue utilizando un proceso por lotes, por lo que podemos utilizar la ecuación 12 para un reactor por lotes (batch).

$$\frac{dC}{dt} = r = k \frac{k_{ads} C}{1+k_{ads} C} \quad (12)$$

Integrando la ecuación 12 desde $t=0$ a un tiempo t .

$$\frac{\ln\left(\frac{C}{C_0}\right)}{C-C_0} = \frac{m k_1 t}{V(C-C_0)} + k_2 \quad (13) \quad a-b$$

Donde m es la masa del catalizador, y V es el volumen donde fue llevada a cabo la reacción. Nótese que la ecuación tiene la forma de la ecuación de una recta ($y = mx + b$), así, al tratar los datos que tenemos, podemos ajustar la pendiente e intersección, obteniendo el valor de la constante de adsorción (con la intercepción) y el valor de la constante de velocidad aparente (con la pendiente).

A partir de los datos obtenidos en la Tabla 11, se observa que el valor de la k_{ads} del TiO_2/SiO_2 con 50 mg/L es de 0.086524, mayor al valor obtenido para el CLI/SiO_2 de 0.079707, lo que indica que el ibuprofeno tiene una mayor afinidad al TiO_2 que a la clinoptilolita. Es posible que esto esté relacionado a los valores de la constante de velocidad aparente, donde de igual forma, el TiO_2 presenta un valor superior, lo que indica que este material presenta un mejor desempeño para la degradación de ibuprofeno. Otro aspecto importante es el valor de las pruebas F , en donde los sistemas que contienen TiO_2 presentan resultados más elevados, lo que sugiere que la forma en cómo se lleva a cabo la reacción en este catalizador sigue un mecanismo Langmuir-Hinshelwood, mientras que para el sistema CLI/SiO_2 presentan valores más pequeños, por lo que es posible que, en este material, el mecanismo de adsorción-reacción sea diferente. Por otra parte, los valores para las pruebas t indican que los parámetros obtenidos para todos los casos son significativos.

Tabla 11 Valores de k y k_{ads} de ambos catalizadores a diferentes concentraciones

Catalizador	Parámetro	Valor	t-value	F-value	R ²
TiO ₂ /SiO ₂ 50 mg/L	k	0.026072	9.846	96.94	0.9700
	k _{ads}	0.086524	5.62		
TiO ₂ /SiO ₂ 30 mg/L	k	0.017497	16.5	272.2	0.9891
	k _{ads}	0.104556	17.85		
CLI/SiO ₂ 50 mg/L	k	0.029509	8.055	64.89	0.9411
	k _{ads}	0.079707	4.092		
CLI/SiO ₂ 30 mg/L	k	0.008327	5.904	34.86	0.8943
	k _{ads}	0.125391	19.086		

Un aspecto interesante es el caso del catalizador CLI/SiO_2 con 30 mg/L, dado que es el que presenta el máximo valor de la constante de adsorción y el menor valor de la constante de velocidad, siendo un orden de magnitud menor al obtenido para los otros materiales. Esto indica que, a bajas cantidades de este catalizador el fenómeno predominante es la adsorción, lo que podría explicar su bajo valor F obtenido, pues, como se mencionó al inicio, el mecanismo Langmuir Hinshelwood considera la existencia de adsorción-reacción. De igual forma, parece ser que para que la zeolita sea fotocatalíticamente activa se necesitan mayores cantidades de este material, en comparación al dióxido de titanio, que presenta comportamiento similar a 30 y 50 mg/L. Esta idea es reforzada con 2 observaciones, la primera es con los valores t de los parámetros obtenidos, específicamente de la constante de adsorción, pues da un valor de 19.086, el valor t más grande que se obtuvo, lo que indica que, ese catalizador a esa concentración presenta más un comportamiento de un adsorbente que el de un fotocatalizador. La segunda es con los valores obtenidos el catalizador $\text{TiO}_2/\text{SiO}_2$ con 50 mg/L; a esta concentración, la constante de velocidad aumenta y la constante de adsorción disminuye, por lo que el fenómeno predominante comienza a ser la fotocatalisis, y esto se comprueba con un mayor valor de la prueba F .

10.2 Impacto de la fotocatalisis en la calidad del agua de la PTAR

10.2.1 Parámetros fisicoquímicos respecto a la calidad del agua antes y después de la fotocatalisis.

Caracterización fisicoquímica del agua del influente y efluente

Se llevó a cabo un primer muestreo en el mes de abril de acuerdo con la NMX-AA-003-1980 Aguas Residuales Muestreo (Tabla 12), en donde la caracterización fisicoquímica se llevó a cabo de acuerdo con las NMX de cada parámetro analizado y el análisis del cumplimiento bajo la NOM-001-SEMARNAT-2021, en este muestreo se evaluaron el influente y efluente de la PTAR para conocer y evaluar la eficiencia y capacidad de esta y asegurar el cumplimiento con la normativa.

Tabla 12 Parámetros fisicoquímicos del agua del influente y efluente.

Parámetros	Influente	Efluente	*NOM 001-SEMARNAT 2021
	Media/DS	Media/DS	
T (°C)	18.25 ± 0.5	20 ± 0	35
pH	6.85 ± 0.28	7.2 ± 0.5	6-9
Fosfatos (mg/L)	2.38±0.19	1.33±0.25	35
DQO (mg/L)	372.5±38.89	81±2.8	150
Turbidez (UNT)	-	9.73±0.63	N.E
Nitratos (mg/L)	2.73±0.32	1.33±0.085	21
SST (mg/L)	473.73±2.45	32.25±4	60

*NOM 001- SEMARNAT 2021 Límites máximos permisibles de contaminantes en descargas de aguas residuales a aguas y bienes nacionales. N.E: No especificado.

Los parámetros fisicoquímicos del efluente de la PTAR se encuentran dentro de los límites máximos permisibles de acuerdo con la NOM-001-SEMARNAT 2021, lo que confirma la eficacia y seguridad de la PTAR para descargar el agua al río San Pedro. La disminución de la DQO entre el

influyente y el efluente es considerable, pasando de 372.5 ± 38.89 a 81 ± 2.8 lo que representa una reducción de 78.26% esta reducción se debe a la actividad microbiana y los procesos biológicos que tienen lugar durante el tratamiento (Guevara *et al*; 2017), de manera similar se observa una disminución considerable en los Sólidos Suspendidos Totales (SST) de 473.73 ± 2.45 mg/L en el influente a 32.25 ± 4 mg/L en el efluente lo que indica un porcentaje de reducción del 93.19%. Los fosfatos también muestran una reducción significativa, pasando de 2.38 ± 0.19 mg/L en el influente a 1.33 ± 0.25 mg/L en el efluente con una reducción del 44.12%, mientras que los nitratos bajaron de 2.73 ± 0.32 mg/L a 1.33 ± 0.085 mg/L mostrando una reducción de 51.28%. Sin embargo, a pesar de esto, la PTAR no está diseñada para eliminar CE del agua.

Caracterización fisicoquímica del agua del efluente sin tratar y del efluente tratado mediante fotocátalisis solar

En el mes de agosto se realizó un segundo muestreo en el cual se llevó a cabo la caracterización fisicoquímica del agua, y la medición de metales pesados y compuestos orgánicos volátiles (COVs), en el efluente sin tratar y en el tratado mediante fotocátalisis solar (FS) utilizando TiO_2/SiO_2 . Los parámetros fisicoquímicos evaluados en el efluente sin tratar y el efluente tratado se encuentran dentro de los límites máximos permisibles de acuerdo con la NOM 001-SEMARNAT-2021. El valor de la DBO_5 disminuyó de 18 mg/L en el efluente sin tratar a 10 mg/L en el efluente tratado, que representa el 44.4% la cantidad de oxígeno necesario para que los microorganismos aerobios degraden la materia orgánica biodegradable. En relación con la DQO el EST presentó un valor de 71 mg/L mientras que el ET fue de 51 mg/L, lo cual implica que la cantidad total de oxígeno disminuyó en 28.16% para oxidar químicamente la materia biodegradable y no biodegradable (Tabla 13). Lo anterior demuestra que el tratamiento fotocatalítico es un método eficaz en la disminución de la materia orgánica presente en el agua, incluyendo compuestos recalcitrantes y contaminantes emergentes.

Tabla 13 Parámetros fisicoquímicos del agua del efluente sin tratar y del efluente tratado.

Parámetros	Efluente sin tratar	Efluente tratado por fotocátalisis con TiO_2/SiO_2	*NOM 001-SEMARNAT 2021	**% de reducción
	Media/DS	Media/DS		
T (°C)	24.25 ± 0.4	25.12 ± 2.68	35	-
pH	7.27 ± 0.46	7.1 ± 0.04	6-9	-
DBO_5 (mg/L)	18	10	-	44.4
DQO (mg/L)	71	51	150	28.16
Turbidez (UNT)	10.2 ± 0.92	-	-	-
Conductividad eléctrica (ms)	589 ± 0.98	-	-	-
SST (mg/L)	28.25 ± 1.70	-	60	-

*NOM 001- SEMARNAT 2021 Límites máximos permisibles de contaminantes en descargas de aguas residuales a aguas y bienes nacionales.

**Los valores se obtuvieron comparando los resultados obtenidos entre el efluente sin tratar (100%) y el efluente tratado.

En la Tabla 14, los resultados demuestran que los metales pesados se encuentran dentro de los límites máximos permisibles de acuerdo con la NOM-001- SEMARNAT. El bajo contenido de estos se debe a las actividades económicas presentes en la región como son: producción de vino, sidra, pan, relojes centenario y fabricación de armas Trejo.

Tabla 14 Resultados de los metales pesados y cianuro obtenidos en el agua del efluente sin tratar y del efluente tratado.

Metales pesados	Efluente sin tratamiento	Efluente tratado por fotocátalisis con TiO ₂ /SiO ₂	*NOM 001- SEMARNAT - 2021	**% de reducción
CN (mg/L)	0.9	0.4	2	55.55
Cu (mg/L)	6	4	5	33.33
Cr (mg/L)	0.9	0.72	1.25	20
Ni (mg/L)	3	2	3	33.3
Pb (mg/L)	0.91	0.7	0.3	23.07
Hg (mg/L)	0.07	0.03	0.015	57.14
Zn (mg/L)	10	8	15	20

*NOM 001- SEMARNAT 2021 Límites máximos permisibles de contaminantes en descargas de aguas residuales a aguas y bienes nacionales.

**Los valores se obtuvieron comparando los resultados obtenidos entre el efluente sin tratar (100%) y el efluente tratado.

En el efluente sin tratar posterior al proceso fotocatalítico, la concentración de cada uno de los metales pesados cambió, como a continuación se describe: los valores obtenidos del cobre, cromo, níquel, plomo y zinc fueron de, 6, 0.9, 3, 0.91 y 10 mg/L, y en el efluente tratado de: 4, 0.72, 2, 0.7 y 8 mg/L respectivamente, lo que representó un porcentaje de disminución de 33.33, 20, 33.3, 23 y 20%, estos valores representan menos del 50% de efectividad en el proceso fotocatalítico. En el caso del cobre, níquel y plomo, el cambio en su concentración puede deberse a una adsorción en la superficie debido a la interacción electrostática, cuando el TiO₂ tiene una carga negativa favorece la adsorción de los iones como son Cu²⁺, Ni²⁺ y Pb²⁺ en la superficie del catalizador (Zhang *et al*; 2017), respecto al cromo puede cambiar su estado de oxidación de Cr³⁺ a Cr⁶⁺, debido a su combinación con radicales libres como el radical (OH).

Sin embargo, es de destacar que el comportamiento de los metales pesados como el mercurio y otros contaminantes como el cianuro son distintas, las concentraciones en el efluente sin tratar fueron de 0.9 y 0.07 mg/L y en el efluente tratado de 0.4 y 0.03 mg/L. Estos contaminantes disminuyeron en porcentajes de: 55.55 y 57.14%, lo que representan valores superiores al 50% de efectividad en el proceso fotocatalítico aplicado. Esto se debe a la generación de radicales hidroxilos en la fotocátalisis. En el caso del cianuro, existe una transformación química de cianuro (CN⁻) a cianato, por la interacción del radical hidroxilo oxidándolo y convirtiéndolo a CO₂ o NH₃ (Tian *et al*; 2016), respecto al mercurio, puede encontrarse en forma iónica (Hg²⁺) y al interactuar con los radicales OH puede adsorberse en la superficie del TiO₂, lo que lo inmoviliza en el catalizador y reduce su concentración en el agua (Andrade *et al*; 2023).

Al respecto los resultados demostraron que el proceso fotocatalítico es un proceso selectivo, la variabilidad en el comportamiento de los metales pesados durante el tratamiento fotocatalítico puede referirse a diferencias en sus propiedades fisicoquímicas, como la solubilidad, la adsorción mediante los iones, las interacciones con el TiO₂ y las especies reactivas de oxígeno; algunos metales son más susceptibles a procesos de adsorción, mientras que otros son más propensos a cambios en su estado de oxidación y precipitación. Por tal razón es necesario entender que existen enfoques específicos de eliminación para cada metal (Bhattacharjee *et al*; 2022).

En la Tabla 15 se presentan los resultados de los compuestos orgánicos volátiles presentes en el efluente sin tratar y el efluente de tratado. Estos resultados muestran que los COVS detectados se encuentran dentro de los límites máximos permisibles de acuerdo con la NMX-AA-103-SCFI-2006.

Tabla 15 Resultados de los compuestos orgánicos volátiles (COVS) obtenidos en el agua del efluente sin tratar y del efluente tratado.

COVS	Efluente sin tratamiento	Efluente tratado por fotocátalisis con TiO ₂ /SiO ₂	*NMX-AA-103-SCFI-2006	**% de reducción
Benceno (µg/L)	0.02	0.01	0.03	50
Cloroformo (µg/L)	***ND	ND	0.04	-
Cloruro de vinilo (µg/L)	0.001	0.001	0.04	0
1,4 Diclorobenceno(µg/L)	ND	ND	0.04	-
1,2 Dicloroetano (µg/L)	ND	ND	0.02	-
1,1 Dicloroetileno(µg/L)	ND	ND	0.03	-
Hexaclorobutadieno (µg/L)	ND	ND	0.01	-
Tetracloroetileno (µg/L)	0.01	ND	0.05	-
Tetracloruro de carbono (µg/L)	0.003	0.001	0.02	66.6
Tricloroetileno (µg/L)	ND	ND	0.02	-

*Norma Mexicana de Análisis de Agua, determinación de compuestos orgánicos volátiles en aguas residuales, naturales y potables. Secretaría de Comercio y Fomento Industrial 2006.

**Los valores se obtuvieron comparando los resultados obtenidos entre el efluente sin tratar (100%) y el efluente tratado.

***ND: No detectable

Los compuestos orgánicos volátiles como el cloroformo, 1,4 Diclorobenceno, 1,2 Dicloroetano, 1,1 Dicloroetileno, Hexaclorobutadieno, tetracloroetileno y Tricloroetileno se encuentran a una concentración por debajo del límite de detección de la técnica de análisis y equipo utilizado. Por otro lado, el cloruro de vinilo no presenta cambios durante el tratamiento fotocatalítico, lo que se debe a que bajo estas condiciones de operación se mantiene resistente a la degradación muy probablemente por su estructura química con un enlace carbono-carbono lo que dificulta el rompimiento de la molécula ([Gao et al; 2019](#)). La concentración de tetracloruro de carbono y benceno en el efluente sin tratar fueron de 0.003 mg/L y 0.002 mg/L, respectivamente, mientras que en el efluente tratado disminuyó de 0.001 mg/L a 0.01 mg/L para el tetracloruro de carbono y 0.01 mg/L para el benceno, esto representa una reducción de más del 50% para el tetracloruro de carbono y un 50% de efectividad en la eliminación del benceno mediante el proceso fotocatalítico, esto sucede porque se está llevando a cabo una oxidación química ya que se puede transformar en ácido benceno carboxílico y otros productos menos perjudiciales ([López et al; 2020](#)). En el caso del tetracloruro de carbono, los radicales •OH atacan la molécula convirtiéndola en radicales tricloroformilo (CCl₃), liberando iones cloruro (Cl⁻), posteriormente reaccionando con el ion superóxido (O₂^{•-}) creado previamente en la fotocátalisis y convirtiendo los compuestos en CO₂ y HCl ([Rincón et al; 2003](#)).

Como se observó anteriormente (ver tablas 14 y 15), el proceso fotocatalítico es selectivo y la degradación de cada compuesto depende de varios factores, como las condiciones de operación, las interacciones entre el catalizador y la estabilidad química de los compuestos en su estructura (enlaces dobles o triples). Además, es importante destacar que la degradación del benceno es de suma importancia debido a que se considera tóxico y cancerígeno de acuerdo con la Agencia Internacional para la investigación sobre el cáncer (IARC).

10.2.2 Efecto del proceso fotocatalítico en el ciclo celular de *Allium cepa*

La división celular es un proceso que consta de dos etapas la interfase y la mitosis. Una célula pasa la mayor parte de su tiempo en la interfase, la cual a su vez se divide en tres etapas: G1, S y G2, durante este tiempo la célula crece, duplica sus cromosomas (ADN) y se prepara para entrar en la etapa de mitosis. La mitosis consiste en el proceso en el cual la célula madre se divide para formar dos nuevas células hijas (telofase).

La mitosis consta de cuatro etapas: (profase, metafase, anafase y telofase), es importante mencionar que el proceso de la división celular es un proceso secuencial con fases claramente definidas y con rasgos propios, en donde las células regulan su división utilizando señales químicas de proteínas especiales llamadas ciclinas.

Es importante destacar que para poder relacionar el efecto del proceso fotocatalítico asociado con los resultados de la división celular se estudiaron los índices mitóticos, interfásico y de fases (ver metodología), se identificaron y cuantificaron un total de 36,000 células, así como se evaluaron 1000 fotografías originales, con ayuda de los microscopios LEICA CME y CARL ZEISS.

En la Tabla 16 se presentan los promedios del número y longitud de raíces obtenidos en los experimentos por triplicado en el efluente sin tratar y tratado por fotocátalisis con sus respectivos controles.

Tabla 16 Promedios del número de raíces y su longitud de *Allium cepa* expuestas al agua del efluente sin tratar y del efluente tratado por fotocátalisis con $\text{TiO}_2/\text{SiO}_2$ mediante tratamiento agudo.

Efluentes de la PTAR	Grupos Exp.	N° de raíces *M±DS	Longitud de raíces (cm)	**p-valor N° de raíces	p-valor longitud de raíces
Sin tratar	Experimento	21.3±4.04	2.99±0.98	0.0038	0.66
	Control	25.7±10.1	4.9±3		
Tratados	Experimento	5.3±4	2.2±0.0	0.0038	0.66
	Control	7.33±3.05	2.5±0.4		

*M ± DS =Media y desviación estándar

**p-valor = probabilidad de la prueba ANOVA; $p < 0.05$.

Nota: La media del número de raíces y longitud se obtuvo mediante el análisis de grupos experimentales por triplicado.

El experimento del efluente sin tratar presenta un promedio de 21.3±4.04 raíces, en comparación con el experimento del efluente tratado, que muestra un promedio de 5.3±4 raíces. Esta diferencia indica que el número de raíces en el efluente sin tratar es mayor que en el efluente tratado (Figura 22).

Al realizar la prueba ANOVA, se obtuvo un p-valor de 0.0038, lo que demuestra que existe una diferencia estadísticamente significativa entre ambos grupos. Esto sugiere pensar que el tratamiento mediante fotocátalisis tiene un efecto inhibitorio sobre el proceso de la mitosis que consiste en un proceso de división celular que permite a una célula madre generar dos células hijas idénticas, lo cual implica que la célula madre replique sus cromosomas y los segregue, por consiguiente, el contenido de la célula se divide en dos partes iguales, en donde cada célula hija recibe el mismo contenido de ADN (cromosomas) que la célula madre.

Al comparar los grupos controles con sus respectivos grupos experimentales, se observó que los grupos controles, tanto del efluente sin tratar como del efluente tratado, muestran un crecimiento

de raíces superior en comparación con sus grupos experimentales, lo que refuerza los resultados obtenidos, en el sentido que la fotocátalisis inhibe el proceso de división celular (Tablas 16, 17 y 18).

En relación con la longitud de las raíces, el efluente sin tratar presentó un promedio de 2.99 ± 0.98 cm, mientras que el efluente tratado mostró una longitud promedio de 2.2 ± 0 cm. Aunque la longitud de las raíces es menor en el efluente tratado, el p-valor de 0.66 indica que no hay diferencia significativa entre ambos grupos en términos de longitud de raíces (Figura 23). No obstante, la fotocátalisis inhibió el crecimiento radicular en comparación con el efluente sin tratar.

De manera similar, al comparar los grupos controles con sus respectivos grupos experimentales, se observó que los grupos controles, del efluente sin tratar y del efluente tratado, presentan una mayor longitud de raíces en comparación con sus respectivos grupos experimentales.

Al respecto, estos resultados indican que el tratamiento fotocatalítico afecta la división celular en el tejido radicular de la cebolla lo cual implica una disminución del número de raíces, así como de su longitud, como resultado de la inhibición del ciclo celular (Figuras 22 y 23), (Correa *et al*; 2016).

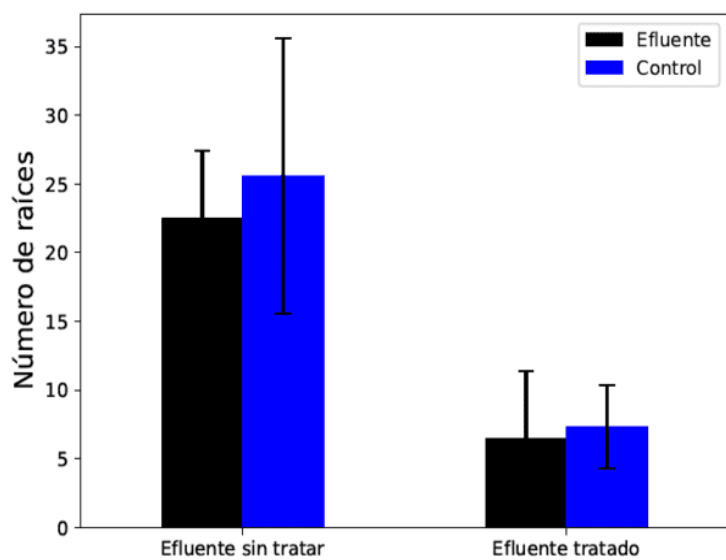


Figura 22 Número de raíces de *Allium cepa* expuestas al agua del efluente sin tratar y del efluente tratado mediante tratamiento agudo

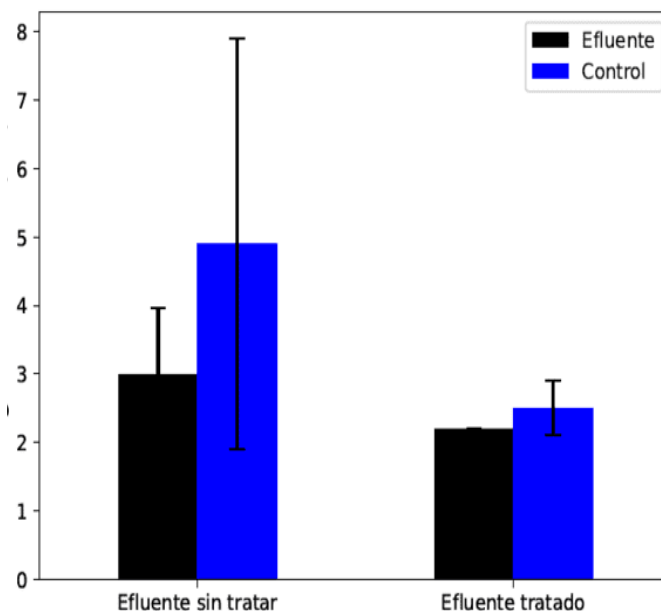


Figura 23. Longitud de raíces de *Allium cepa* expuestas al agua del efluente sin tratar y del efluente tratado mediante tratamiento agudo.

Tabla 17 Conteo del número de células meristemáticas en la raíz de *Allium cepa* expuestas al agua del efluente sin tratar y del efluente tratado por fotocatalisis con $\text{TiO}_2/\text{SiO}_2$ mediante tratamiento agudo.

Efluentes de la PTAR	Grupos Exp	Células en interfase *M±DS	Células en mitosis M±DS			
			Profase	Metafase	Anafase	Telofase
Sin tratar	Experimento	439.6±2.82	535.16±17.20	9.66±1.88	5.83±3.06	6.66±1.2
	Control	411.73±11.6	565.33±12.8	11.22±2.54	6.78±1.3	7.55±0.16
	**p-valor	0.0087	0.0035	0.0124	0.041	0.011
Tratados	Experimento	578.23±22.4	420.4±23.8	0	0	0
	Control	384±29.8	514±1.2	32.6±9.7	15.22±0.38	6.66±0.8
	**p-valor	0.0087	0.0035	0.0124	0.041	0.011

Nota: Los datos se determinaron al contabilizar un promedio de 1000 células de *Allium cepa* por triplicado en cada grupo experimental, dando un total de 36,000 células. **p-valor = probabilidad de la prueba ANOVA; $p < 0.05$.

El efluente sin tratar presentó un promedio de 439.6 ± 2.82 células en interfase y 535.16 ± 17.20 en profase mientras que el efluente tratado mostró un promedio de 578.23 ± 22.4 células en interfase y 420.4 ± 23.8 en estadio de profase, lo que indica que el número de células en el efluente tratado es mayor en comparación con el efluente sin tratar; sin embargo, el número de células en profase es mayor en el efluente sin tratar con respecto al número de células en profase en el grupo tratado.

Lo cual demuestra que, en el efluente tratado, hay mayor número de células en interfase (Figuras 24 y 25), que indica que un mayor número de células ha incrementado su tamaño, y ha duplicado su ADN (Fase G) y la célula se prepara para iniciar el proceso de división celular de la mitosis (Figura 25).

Al realizar la prueba ANOVA en cada uno de los grupos experimentales, comparando el efluente sin tratar (EST) con el efluente tratado (ET) en los distintos estadios de la mitosis, se observa una diferencia estadísticamente significativa ($p < 0.05$) en todos los casos, lo que indica que el tratamiento presenta un efecto inhibitorio notable a nivel celular, deteniendo el proceso de mitosis.

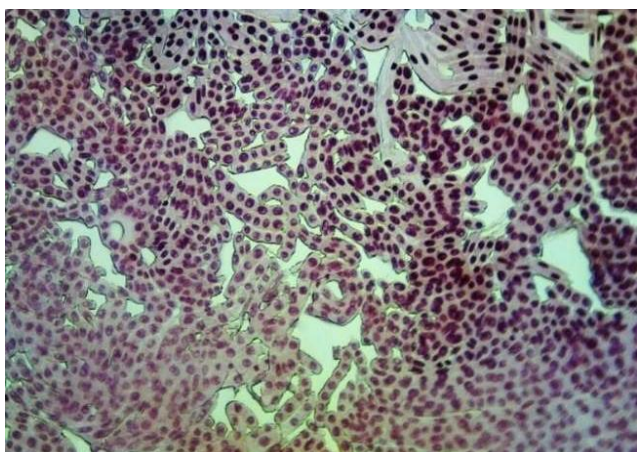


Figura 24. Vista microscópica panorámica de la división celular en *Allium Cepa*. Tinción con Aceto-orceína. Células del efluente sin tratar (2X, microscopio óptico LEICA-CME)

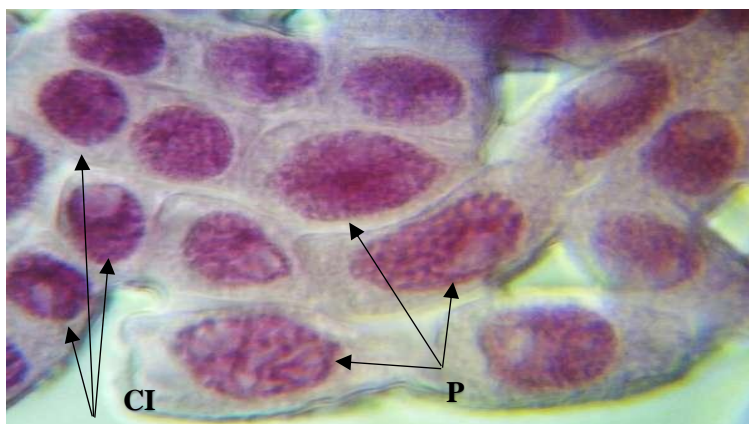


Figura 25. Vista microscópica en el efluente sin tratar de células en diferentes estadios de interfase (CI) y profase temprana (P). Tinción con Aceto-orceína (4X, microscopio óptico LEICA-CME).

Se observó que la división celular se detiene y el número de células que entran en la profase es menor en el efluente tratado en comparación con el efluente sin tratar. El estadio de la profase se caracteriza por la condensación del material genético (ADN) en forma de cromosomas, se rompe la membrana nuclear y se forman las fibras del huso mitótico (Tabla 17 y Figura 26).

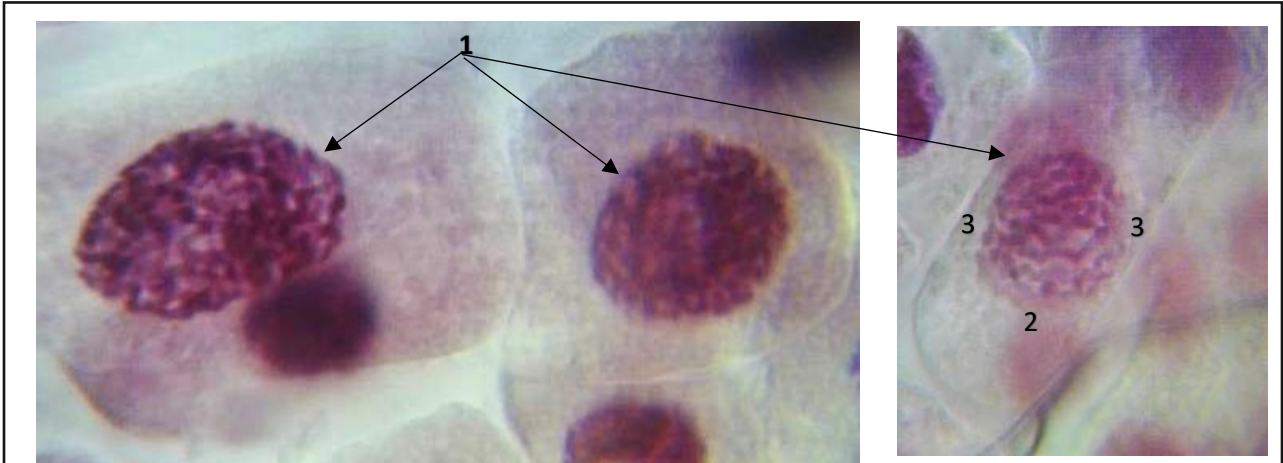


Figura 26. Células en el estadio de profase: 1 se observa que el material genético (ADN) se encuentra enrollado como "madeja" llamada cromatina, ésta se condensa y forma los cromosomas, 2 no hay membrana nuclear y 3 formación de huso mitótico. Tinción con Aceto-orceína (4X, microscopio óptico LEICA-CME).

El mayor número de células entran en la profase que es el primer estadio de la mitosis, el cual se caracteriza por lo siguiente: los cromosomas se encuentran condensados, los cuales están formados a partir de la cromatina, la membrana nuclear ya no es visible, y comienza la formación del huso mitótico (Figura 26) la cual ocurre en el efluente sin tratar en comparación con el efluente tratado donde el proceso se detuvo y no continuó la división celular en el tejido meristemático de *Allium cepa* y en el efluente tratado se inhibió por completo la progresión a las fases posteriores de la mitosis (Correa *et al*; 2016).

Este resultado evidencia que el tratamiento fotocatalítico bloquea la división celular, impidiendo que las células progresen a las fases posteriores de esta (Malinowska *et al*; 2022), mientras que el efluente sin tratar permite que las células completen el ciclo de la división celular, pasando de la profase a la metafase, anafase y telofase (Tabla 17, Figuras 26, 27, 28, 29, 30).

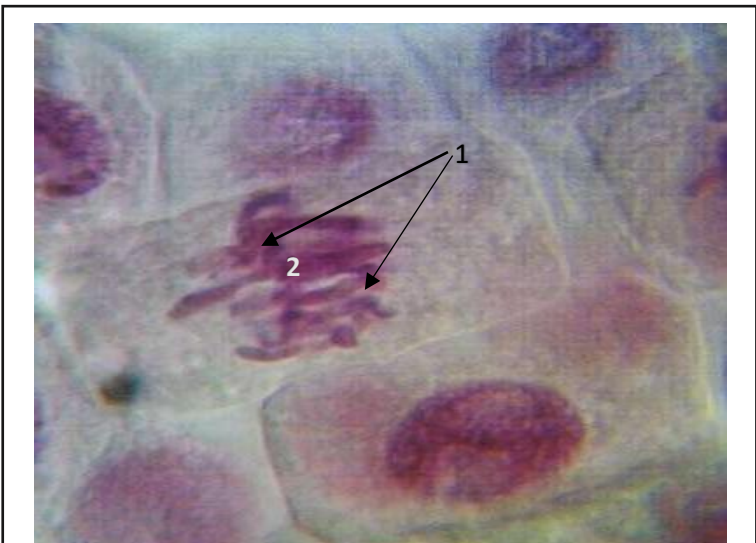


Figura 27. Células en estadio de metafase: 1 El ADN se condensa en los cromosomas, 2 los cromosomas se alinean en el plano ecuatorial. Tinción con Aceto-orceína (4X, microscopio óptico LEICA-CME).

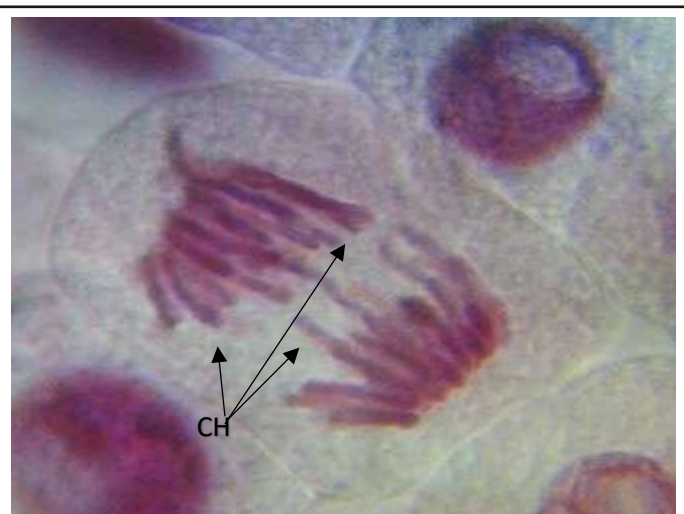


Figura 28. Células en estadio de anafase, las cromátidas hermanas (CH) se separan y se dirigen a los polos opuestos de la célula. Tinción con Aceto-orceína (4X, microscopio óptico LEICA-CME).

En la Figura 27 se observa el estadio de metafase, caracterizado por la condensación del ADN en los cromosomas, los cuales se alinean en el centro de la célula, formando la “placa ecuatorial”. En este punto del ciclo celular, los centrosomas se desplazan hacia los polos opuestos de la célula, desde donde se extienden los microtúbulos que forman el huso mitótico. Además, la membrana nuclear no se encuentra, y esto hace que los microtúbulos interactúen con los cromosomas para facilitar su correcta alineación y posterior separación.

El estadio de anafase se caracteriza por la separación de las cromátidas hermanas, las cuales se dirigen hacia los polos opuestos de cada célula asegurando la correcta distribución igualitaria del material genético (ADN) (Figura 28).

El último estadio de la mitosis es la telofase, que se caracteriza por la descondensación de las cromátidas hermanas. En esta fase, se comienza a formar nuevamente la membrana nuclear alrededor de cada conjunto de cromosomas, lo que indica la formación de dos núcleos celulares en cada polo de la célula (Figuras 29, 30 y 31).

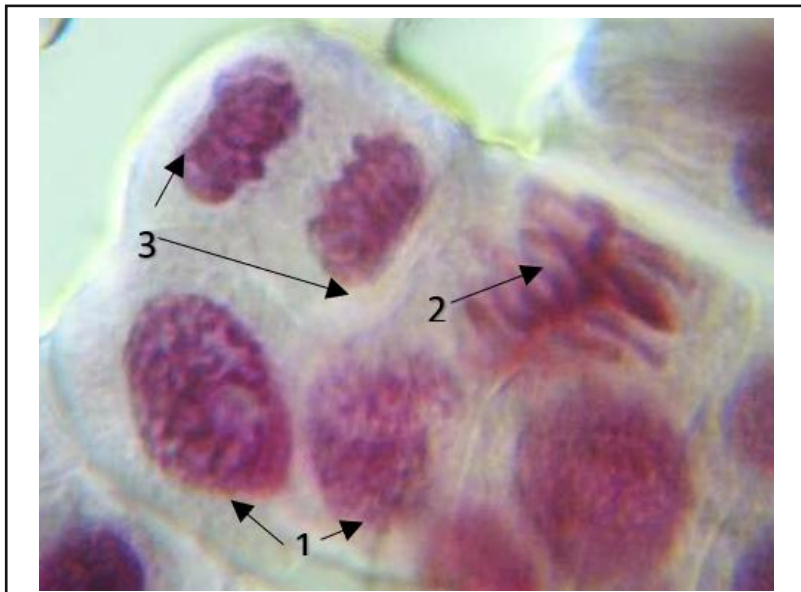


Figura 29. Células en diferentes estadios de la mitosis: 1 profase, 2 metafase, 3 telofase temprana: se forman 2 células hijas. Tinción con Aceto-orceína (4X, microscopio óptico LEICA.CME).

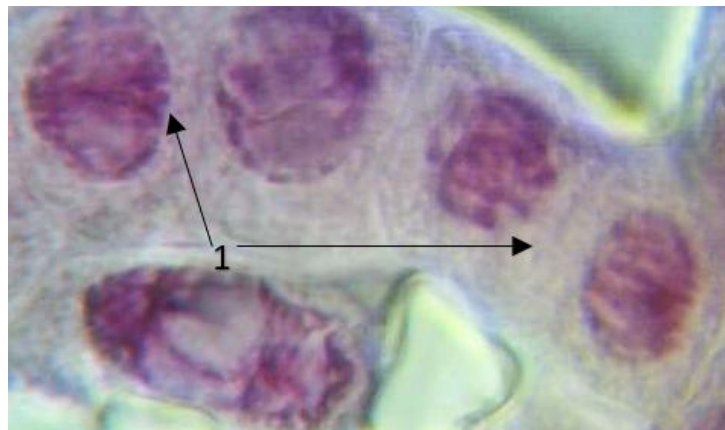


Figura 30 Telofase tardía: 1 se inicia el proceso de la citocinesis. Tinción con Aceto-orceína (4X, microscopio óptico LEICA CME).

Además, es importante señalar que durante la telofase se inicia el proceso de la citocinesis, el cual consiste que el citoplasma se comienza a dividir en su parte media de tal manera que cada célula hija contenga igual cantidad de citoplasma, así como igual número de cromátidas hermanas que para el caso concreto de la cebolla (18 cromátidas hermanas), asegurando que cada célula hija contenga igual cantidad de material genético que la célula madre (Figuras 30 y 31).

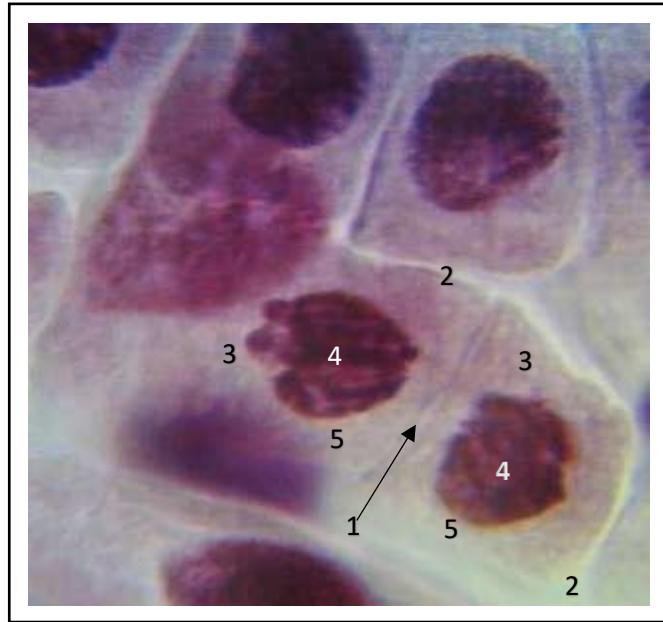


Figura 31. Telofase tardía, 1 final del proceso de la citocinesis (formación de dos células hijas). 2 membrana citoplasmática, 3 citoplasma; 4 núcleo, 5 membrana nuclear. Tinción con Aceto-orceína (4X, microscopio óptico LEICA-CME).

En relación con los grupos control, ambos muestran una proliferación celular normal, donde se observó que las células pasan por todas las fases del ciclo celular, lo que indica un crecimiento favorable y un funcionamiento adecuado del ciclo y sin impedimentos en su capacidad para dividirse (Figura 32).

Los resultados indicaron que el efecto inhibitorio en efluente tratado se debe principalmente a las reacciones de óxido reducción, creadas mediante fotocatalisis, las cuales generan radicales libres (como el $\bullet\text{OH}$) impidiendo la proliferación celular. (Malinowska *et al*; 2022). Por otro lado, el efluente sin tratar, aunque puede contener contaminantes, no inhibe el ciclo (Godawat *et al*; 2016).

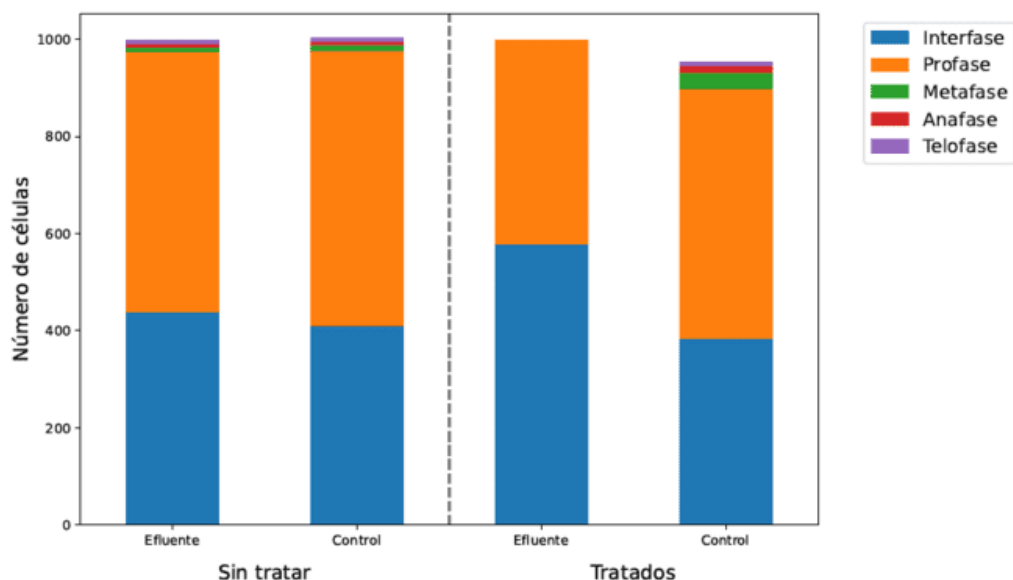


Figura 32. Número de células totales en interfase y células en mitosis. (Profase, metafase, anafase y telofase).

En la Tabla 18, se presentan los cambios en el índice interfásico, índice mitótico e índice de fase de las células meristemáticas en la raíz de *Allium cepa* expuestas al agua del efluente sin tratar y el efluente tratado mediante tratamiento agudo comparando cada grupo con su respectivo control.

Tabla 18 Cambios en el índice interfásico e índice mitótico de las células meristemáticas en la raíz de *Allium cepa* expuestas al agua del efluente sin tratar y del efluente tratado por fotocatalisis con TiO_2/SiO_2 mediante tratamiento agudo.

Efluentes de la PTAR	Grupos Exp	índice de fase (%) \pm DS					
		II \pm DS*	IM \pm DS*	Profase	Metafase	Anafase	Telofase
Sin tratar	Experimento	43.96 \pm 0.28	56.05 \pm 0.34	95.79 \pm 2.1	1.67 \pm 0.24	0.96 \pm 0.02	1.65 \pm 1.4
	Control	41.17 \pm 1.14	59.52 \pm 0.92	95.58 \pm 1.15	1.89 \pm 0.42	1 \pm 0.14	1.89 \pm 0.002
Tratados	Experimento	57.83 \pm 2.36	42.83 \pm 2.3	100	0	0	0
	Control	38.7 \pm 2.98	60.23 \pm 2.97	91.4 \pm 1.66	4.86 \pm 1.6	2.5 \pm 0.1	1.09 \pm 0.12

*M \pm DS =Media y desviación estándar.

Notas: Los índices se determinaron al contabilizar un promedio de 1000 células de *Allium cepa* por triplicado en cada grupo experimental. II: Índice interfásico. IM: Índice mitótico e índice de fases (IP=índice profásico; IMe=índice metafásico; IA=índice anafásico; IT= índice telofásico *EST2 Y ET2: No se presentó crecimiento radicular.

Al comparar el efluente sin tratar con el efluente tratado, se observó una diferencia importante en el comportamiento celular, el efluente sin tratar presenta un índice interfásico de 43.96 \pm 0.28, mientras que el efluente tratado muestra un índice mayor de: 57.83 \pm 2.36%. Esto significa que en el efluente tratado hay una mayor cantidad de células en interfase, y es de suponer que habría un mayor número de células en profase, sin embargo, el número de células que entran a la profase es menor en comparación al efluente sin tratar lo que indica que la fotocatalisis interrumpe el paso de la profase a la metafase como ya se indicó en los párrafos anteriores.

En cuanto al índice mitótico, el efluente sin tratar tiene un valor de 56.05 \pm 0.34%, mientras que el efluente tratado presenta un índice menor de 42.83 \pm 2.3%. Lo que indica, en el efluente tratado, el mayor número de las células en mitosis se encuentran en el estadio de profase, lo que implica que no se presentan células en las fases de metafase, anafase y telofase. Estos resultados demuestran que la fotocatalisis bloquea la división del ciclo celular en el efluente tratado, este comportamiento

probablemente se deba a la generación de radicales libres que inhibe la división celular a partir de la profase (**Malinowska et al; 2022**).

En cuanto a los grupos control de ambos experimentos (efluente sin tratar y tratado), presentan un comportamiento celular normal, lo que indica que no hay factores externos que afecten el ciclo celular bajo estas condiciones.

Es de destacar que, en presencia de sustancias tóxicas, comúnmente llamadas mutágenos como es el caso de los metales pesados y compuestos orgánicos volátiles (COVS), estos pueden causar aberraciones cromosómicas al dañar el ADN, y provocar mutaciones. Estas pueden ocurrir cuando falte o se dividan incorrectamente cromosomas (metafase, anafase). Sin embargo, durante el proceso de la fotocatalisis en el efluente tratado y en el efluente no tratado en ambos grupos experimentales, no se observaron ningún tipo de aberraciones cromosómicas, esos resultados podrían deberse a que, en ambos grupos experimentales, tanto los metales pesados como los compuestos orgánicos volátiles se encuentran dentro de los límites máximos permisibles establecidos por la NOM 001-SEMARNAT 2021 y la NMX-AA-103-SCFI-2006 (Tablas 14 y 15).

De acuerdo con **Kassa et al; 2021**, el daño oxidativo provocado por especies reactivas de oxígeno (ERO) podría ser el responsable de las alteraciones en el ADN y las proteínas involucradas en la división celular, lo que genera una detención del ciclo en fases antes mencionadas.

Al comparar los resultados de las Tablas 16,17 y 18, se observa una diferencia significativa en cuanto al crecimiento, longitud de las raíces y división celular en el experimento del efluente tratado en donde se detecta un número promedio menor en raíces, una menor longitud, y un detenimiento en el ciclo celular. Esto se evidencia al no observar células en los diferentes estadios de la mitosis, ni la presencia de los índices como IM (índice mitótico), IA (índice anafásico) e IT (índice telofásico). Esta inhibición puede atribuirse a las reacciones de óxido-reducción generadas durante el proceso de fotocatalisis, las cuales producen especies reactivas de oxígeno (ERO), tales como el ion superóxido (O_2^-) y el radical hidroxilo ($\bullet OH$) (**Malinowska et al; 2022**).

Estas ERO son indispensables para los materiales semiconductores utilizados en fotocatalisis, como TiO_2/SiO_2 , ya que permiten excitar electrones desde la banda de valencia hacia la banda de conducción. Este proceso es fundamental para la degradación de contaminantes emergentes.

Sin embargo, durante la fotocatalisis, la luz que incide sobre el catalizador provoca la excitación de electrones, generando ERO que participan en la oxidación de compuestos tóxicos (**Malinowska et al; 2022**). Aunque este proceso es efectivo para eliminar contaminantes en agua, la acumulación excesiva de ERO puede inducir un estrés oxidativo en organismos vivos, inhibiendo completamente la mitosis celular (**Stadtman et al; 2003**).

En el presente trabajo de investigación, los efectos observados del efluente tratado por fotocatalisis podrían atribuirse a la acción combinada de los radicales hidroxilos ($\bullet OH$), la formación de H_2O_2 en el proceso (Se muestran pruebas de biocatalisis enzimática añadiendo H_2O_2 (Ver anexo 13.7)) y la reducción de nutrientes esenciales. Esto indica que la fotocatalisis se presenta como un proceso de oxidación avanzada eficaz y prometedor para la degradación de contaminantes emergentes en el agua. Por consiguiente, es importante tomar en cuenta en la fotocatalisis solar del ibuprofeno en el efluente de la PTAR, los efectos que podrían ocurrir durante el proceso de la división celular en las raíces de *Allium cepa*.

Adicionalmente, es importante garantizar una adecuada recuperación del catalizador para evitar que las reacciones fotocatalíticas continúen en presencia de luz solar, lo que podría afectar el ciclo celular de manera prolongada (Godawat *et al*; 2016).

10.3 Simulación del pulimiento con fotocátalisis solar en la PTAR.

La etapa de pulimiento se realizó con el fin de conocer el costo beneficio del catalizador implementado a escala real en la PTAR de Zacatlán Puebla, considerando los flujos, especificaciones y variables con las que opera la planta. Como se ha mencionado con anterioridad esta PTAR cuenta con tratamientos convencionales para lograr la reutilización del agua, sin embargo, no posee tratamientos avanzados de oxidación que logren eliminar los contaminantes emergentes como los fármacos, por esta razón, es de suma importancia la implementación de un reactor fotocatalítico tomando los resultados obtenidos a partir de la cinética de reacción (k , k_{ads}) de los catalizadores TiO_2/SiO_2 .

Para la simulación se consideraron los equipos que posee la PTAR, comenzando por un sedimentador primario, después un reactor biológico, seguido de un sedimentador secundario (Tabla 19) y finalmente el reactor fotocatalítico.

La Figura 33 muestra el esquema original de la PTAR, en donde se recibe la descarga de aguas residuales en la corriente “Influente”, esta llega a un sedimentador en donde los sólidos suspendidos son separados mediante acción de la gravedad, los sólidos depositados están en la corriente “Lodos”. El agua residual sin sólidos está en la corriente “Reactor” y se dirige a un reactor biológico en donde la materia orgánica es oxidada. La corriente resultante se dirige a un sedimentador secundario cuya finalidad es la separación de los sólidos restantes en la corriente “Licor”, estos solidos son recirculados al reactor biológico. La corriente resultante del sedimentador secundario corresponde a “Agua clarificada”

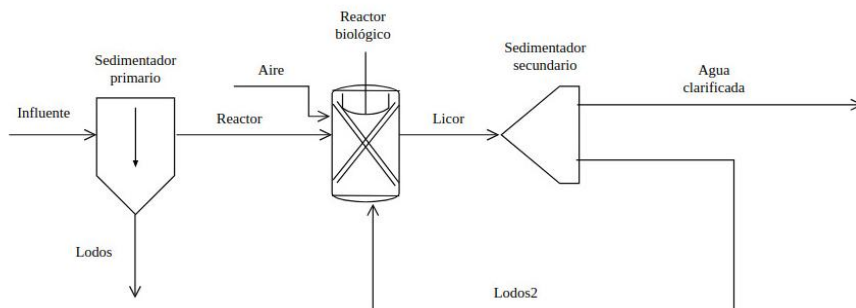


Figura 33. Diagrama de la PTAR sin la etapa de pulimiento

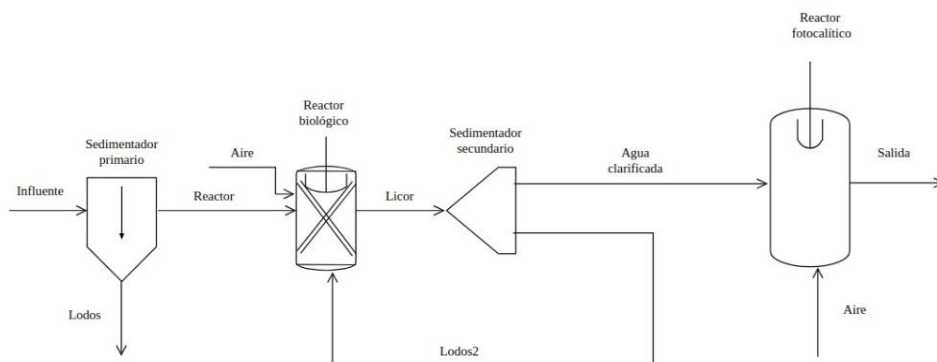


Figura 34. Diagrama de la PTAR con la etapa de pulimiento propuesta.

El reactor fotocatalítico se propone como una etapa de pulimiento para la corriente de agua clarificada, puesto que los tratamientos previos no eliminan contaminantes emergentes, como el ibuprofeno. La figura 34 muestra el diagrama de la PTAR con esta propuesta. La corriente de agua clarificada se dirige al reactor en donde el ibuprofeno se oxida mediante la fotocatalisis, dando como resultado la corriente Efluente, la cual tiene una concentración menor de ibuprofeno.

Para lograr una simulación real de la PTAR se optó por incluir componentes como dextrosa, urea, glicina, ácido palmítico etc, los cuales son representativos de la materia orgánica, que de acuerdo con (Candelaria *et al*; 2014) son parte de los desechos que llegan a la PTAR en donde se tratan y eliminan del agua, asimismo, se agregó el objeto de estudio (Ibuprofeno) como uno de los principales fármacos utilizados por la sociedad y de esta forma su presencia en las PTAR (Tabla 19).

Tabla 19 Componentes propuestos como presentes en el agua de la PTAR del municipio de Zacatlán, Puebla

Corrientes	Flujo másico (kg/min)								
	Influente	Reactor	Lodos	Oxígeno	Licor	Lodos 2	Oxígeno 2	Agua clarificada	Salida
Agua	78.0424	70.2382	7.8042	0	78.8067	7.8806	0	70.9260	70.9266
Oxígeno	0	0	0	4.1327	2.3108	0.2310	41.3270	2.0797	43.4039
CO₂	0	0	0	0	7.0039	0.7004	0	6.3035	6.3096
Dextrosa	14.9422	13.4479	1.4942	0	2.7444	0.2744	0	2.4700	2.4700
Glicina	0.4623	0.4160	0.0462	0	0.4623	0.0462	0	0.4160	0.4160
Ácido palmítico	28.3932	25.5539	2.8393	0	28.3932	2.8393	0	25.5539	25.5539
Ibuprofeno	0.00928	0.00835	0.000928	0	0.0092	0.00092	0	0.00835	0.000092
Amoniaco	0	0	0	0	5.6477	0.5647	0	5.0829	5.0829
Urea	1.112	1.0009	0.1112	0	0.2042	0.0204	0	0.1838	0.1838
Total	122.9616	110.6654	12.2961	4.1327	125.5828	12.5583	41.3270	113.02455	154.3471

Consideraciones

Simulador: ASPEN PLUS V8.8

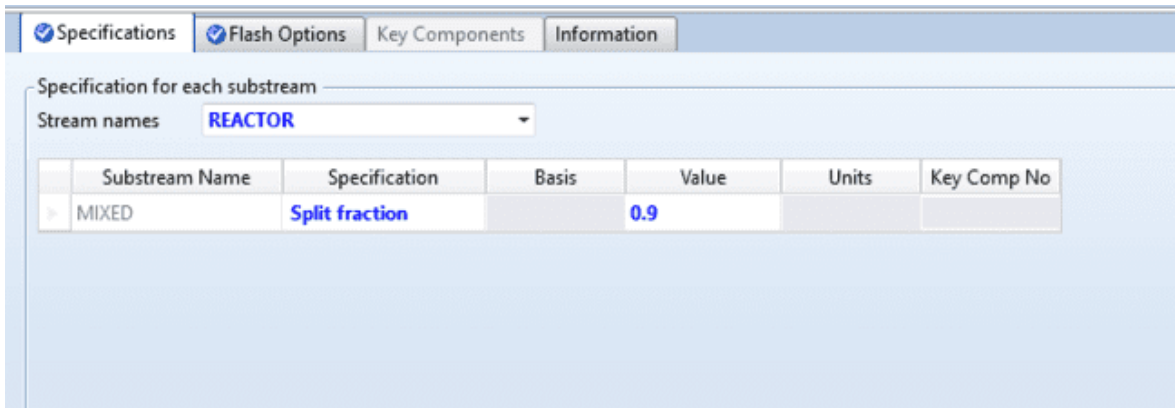
Para el modelado el influente de la PTAR contiene ibuprofeno y materia orgánica. La concentración de ibuprofeno es de 620 ng/L (0.0092 kg/min de acuerdo a la Tabla 19) porque es la concentración de este fármaco en las PTAR, de acuerdo con (Pérez-Álvarez *et al.*, 2018) Se establece un flujo de trabajo de 80 L/s, que es la capacidad real con la que opera la PTAR.

Modelo termodinámico: Electrolyte NRTL (e-NRTL) (Boelee *et al*; 2019)

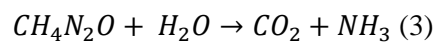
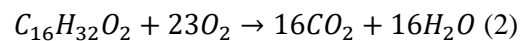
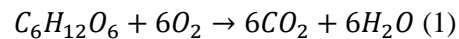
Tipo de Reactor: CSTR

Se requiere el conocimiento de datos como velocidad de reacción, constante de reacción, constante de adsorción, las ecuaciones de diseño del reactor y la estequiometría de las reacciones. Para el sedimentador primario es necesario lograr una separación entre los sólidos suspendidos y el agua con la finalidad de que al pasar a las etapas posteriores exista una disminución de la materia

orgánica. Se simuló utilizando un Split, con una separación de 0.9 de los componentes de la materia orgánica (Boelee *et al*; 2019).



La corriente resultante del Split se dirige hacia el reactor biológico, el cual tiene como propósito remover la materia orgánica presente en el agua que llega a la PTAR (Barakat *et al*; 2011), en esta etapa existen microorganismos que descomponen la materia orgánica convirtiéndolo en compuestos más simples como dióxido de carbono y agua, este proceso es conocido como biodegradación (Boelee *et al*; 2019). A continuación, se muestran las siguientes reacciones consideradas para simular la materia orgánica. La primera y segunda reacción corresponde a la oxidación total de glucosa y ácido palmítico, respectivamente, mientras que la tercera reacción se refiere a la hidrólisis de urea.



Se consideró un reactor estequiométrico con una conversión del 80% de acuerdo con Barakat *et al*; 2011

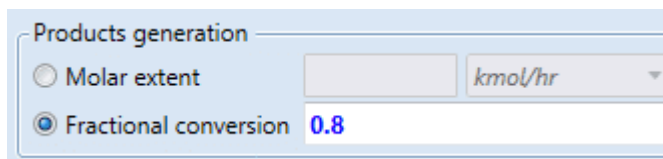


Tabla 20 Componentes de materia orgánica presentes en el reactor biológico

Corrientes	REACTOR (kg/min)	LICOR (kg/min)
Agua	70.2382	78.8067
Oxígeno	0	2.3108
CO ₂	0	7.0039
Dextrosa	13.4479	2.7444
Glicina	0.4160	0.4623
Acido palmítico	25.5539	28.3932
Ibuprofeno	0.0083	0.0092
Amoniaco	0	5.6477
Urea	1.1121	0.2042
Total	110.6654	125.5828

De acuerdo con la Tabla 20, se observa la disminución de la materia orgánica (Dextrosa, Acido palmítico, Urea) debido a las reacciones de oxidación total. En este análisis se observa una eficiente conversión de la materia orgánica y su transformación a compuestos más simples entre los que destacan el dióxido de carbono (CO₂) y el amoniaco (NH₃). Además, se produce más agua por reacciones de hidrólisis y otros procesos biológicos que la generan como subproducto (Laos *et al*; 2019). Además, la presencia de oxígeno en la salida del reactor confirma que el proceso que se lleva a cabo es aeróbico y que el oxígeno es un factor limitante en esta etapa.

Posteriormente de acuerdo con el funcionamiento de la PTAR, es necesario la implementación de un sedimentador secundario, el cual se simuló utilizando un Split y una separación de 0.9 (Boelee *et al*; 2019). De acuerdo con la Tabla 21 se observa una disminución significativa en los sólidos suspendidos totales y la materia orgánica, se concluye que el sedimentador secundario está operando correctamente.

Stream	Specification	Basis	Value
LODOS2			
AGUAC	Split fraction		0.9

Finalmente como se ha comentado con anterioridad la PTAR de Zacatlán de Puebla, no cuenta con tratamientos avanzados de oxidación para eliminar los contaminantes emergentes, por tal razón es de suma importancia incluir un reactor fotocatalítico (Salcedo *et al*; 2020) para poder realizar fotocátalisis solar en días donde el clima del municipio lo permita de acuerdo al índice UV, e implementar una lámpara UV los días que este no favorezca, por tal razón se diseñó un reactor considerando las variables de operación como temperatura, presión, k_{ads} y k de reacción para la cinética de degradación de los contaminantes emergentes, priorizando los fármacos como el ibuprofeno.

Tabla 21 Componentes presentes en el sedimentador secundario.

Corrientes	LICOR (kg/min)	AGUA CLARIFICADA (kg/min)
Agua	78.8067	70.9260
Oxígeno	2.3108	2.0797
CO ₂	7.0039	6.3035
Dextrosa	2.7444	2.4700
Glicina	0.4623	0.4160
Acido palmítico	28.3932	25.5539
Ibuprofeno	0.0092	0.0083
Amoniaco	5.6477	5.0829
Urea	0.2042	0.1838
Total	125.5828	113.0245

Condiciones de operación:

Operating conditions

Pressure: 1 bar

Temperature: 25 C

Duty: cal/sec

Vapor fraction:

Holdup

Valid phases: Vapor-Liquid (2nd Liquid)

Specification type: Reactor volume

Reactor

Volume: 10000 l

Resi. time: 24 hr

Phase

Phase:

Volume: l

Volume frac:

Residence time: hr

Specifications

Catalyst loading: 5 kg

Bed voidage: 0.3

Para la simulación del reactor fotocatalítico, se consideró un reactor continuo de tanque agitado (CSTR) a condiciones ambientales, un volumen de 1 metro cúbico (1000 L) y un tiempo de residencia de 24 h. Es importante mencionar que Aspen no tiene la opción de un reactor fotocatalítico, por lo que el efecto de la luz solar y UV sobre los materiales está contenido en las constantes de velocidad (k) y de adsorción (k_{ads}) (López *et al*; 2016). Puesto que las pruebas a nivel laboratorio fueron realizadas con una cantidad de catalizador de 50 mg/L, se manejó una cantidad de 5 kg de catalizador para conservar la relación masa/volumen. Como primera instancia, la reacción simulada consistió en la oxidación total de ibuprofeno a dióxido de carbono y agua.

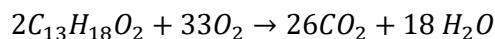


Tabla 22 Disminución de componentes presentes en el reactor posterior al proceso fotocatalítico.

	AGUA CLARIFICADA (kg/min)	SALIDA (kg/min)
Agua	70.9260	70.9266
Oxígeno	2.0797	43.4039
CO₂	6.3035	6.3096
Dextrosa	2.4700	2.4700
Glicina	0.4160	0.4160
Ácido palmítico	25.5539	25.5539
Ibuprofeno	0.0083	0.000092
Amoniaco	5.0829	5.0829
Urea	0.1838	0.1838
Total	113.0245	154.3471

Los resultados del análisis del reactor fotocatalítico muestran cambios importantes respecto a la salida de este y los componentes que vienen del agua clarificada.

En primera instancia se observa un aumento ligero en el agua lo que indica su producción en las reacciones químicas. La cantidad de oxígeno muestra un aumento considerable lo que es esperado debido a la generación del mismo a través de la fotocatalisis.

Por otro lado, por las reacciones generadas en fotocatalisis el CO₂ aumenta y el ibuprofeno muestra una disminución considerable, reduciéndose de 0.0083 a 0.000092, lo que indica la eficacia del proceso en la remoción del fármaco (**Chhonkar et al; 2000**). La eliminación de este compuesto es considerable ya que si este perdura en el efluente de las PTAR puede ser perjudicial para el medio ambiente y la vida humana, además el proceso también logra eliminar componentes como el ácido palmítico, la dextrosa, y la urea, derivados de la materia orgánica presente en las plantas de tratamiento, lo que contribuye significativamente a un aumento en la calidad del agua por la disminución de la DBO y DQO (**Castro et al; 2020**).

El porcentaje de remoción de acuerdo con la ecuación 16 es el siguiente:

$$\frac{C_0 - C_f}{C_0} \times 100 = \frac{0.0083 - 0.0000924}{0.0000924} \times 100 = \mathbf{88.84\%} \quad (16)$$

Eficiencia:

Considerando la síntesis del catalizador TiO₂/SiO₂ por el método sol gel, el costo de reactivos por lote (17.33 mL de TEOS, 40 mL de agua desionizada, 2.5 g de TiO₂, 23 mL de etanol y 1.67 mL de HF), se estimó en \$44.35, desglosado así: TEOS \$34.66 (a \$2000/L), agua desionizada \$0.40 (a \$10/L), TiO₂ \$5.00 (a \$2000/kg), etanol \$3.45 (a \$150/L) y HF \$0.84 (a \$500/L). El consumo de energía se calculó como: reacción a 80-90°C (0.5 kW x 0.5 h = 0.25 kWh), secado a 100°C por 24 h (1 kW x 24 h) = 24kWh y calcinación a 650°C por 4 h (2 kW x 4h = 8kWh), total= 32.23 kWh, que equivalen a \$161.25, el costo de reactivos y energía es de \$205.60 con un rendimiento de 7g, el costo unitario es de \$29.37/g por lo que 50 mg que es la cantidad usada en las pruebas fotocatalíticas es de

\$1.47. Escalando a 5 kg, el costo del catalizador es de \$146,850. Para un reactor fotocatalítico de 1000 L el costo aproximado es de \$403,200. El costo por volumen depende del uso, considerando 1 prueba por día (1000 L/día, 300 días/año, 10 años) = 30 millones de litros, resulta \$0.139/L (\$13.9 por 100 L de agua libre de contaminantes).

10.4 Estudio del entorno de la PTAR desde la perspectiva de la comunidad local

10.4.1 Características del entorno geográfico y ambiental de la zona de estudio

Este trabajo tiene como lugar de estudio el municipio de Zacatlán Puebla, conocido como Zacatlán de las manzanas, el cual está localizado en la sierra norte del estado de Puebla y cuenta con una temperatura anual promedio de 14.5 °C. Los meses más calurosos se registran entre marzo y junio, mientras que los más fríos están entre diciembre y febrero. La vegetación predominante incluye bosques de pino y encino, y su fauna comprende especies como venados, armadillos y colibríes. El relieve es montañoso y accidentado, característico de la Sierra Madre Oriental, y cuenta con una rica red hidrográfica, destacando el río San Pedro y numerosos arroyos y manantiales (**OFICIO No.3s.6 GOB**).

Ubicación geográfica

Este municipio se localiza entre los paralelos 19° 50' y 20° 06' de latitud norte, y los meridianos 97° 51' y 98° 11' de longitud oeste, con una altitud que varía entre 900 y 2,900 metros sobre el nivel del mar (Figura 35). Colinda al norte con Huauchinatepec, Huauchinango, Chiconcuautla y Ahuacatlán; al este con Ahuacatlán, Tepetzintla y Tetela de Ocampo; al sur con Tetela de Ocampo, Aquixtla y Chignahuapan; y al oeste con Chignahuapan, el Estado de Hidalgo. Este territorio ocupa el 1.42% de la superficie estatal, cuenta con 104 localidades y tiene una población total de 87,371 habitantes (**INEGI, 2021**).



Figura 35. Ubicación geográfica de Zacatlán (INEGI,2021)

Hidrología

Zacatlán se localiza en la vertiente septentrional del estado de Puebla, que está compuesta por las cuencas hidrológicas RH18 (Balsas), RH (26) y RH 27 (Tuxpan-Nautla), las cuales desembocan en el Golfo de México. Específicamente, el municipio de Zacatlán se encuentra dentro de la región hidrológica RH 27 (Tuxpan-Nautla), que incluye la cuenca del río Tecolutla (RH27B). En su territorio municipal, se pueden identificar las subcuencas de los ríos Necaxa (RH27Bb), Laxaxalpan (RH27Bc) y Tehuantepec (RH27Bd), todas las cuales drenan hacia el Golfo de México (**OFICIO No.3s.6 GOB**). Por otro lado, la ruta de la descarga de PTAR se describe en la Tabla 23.

Tabla 23 Subcuencas en el territorio municipal de Zacatlán y ruta de descarga del efluente de la PTAR.

	Región hidrológica	Cuenca	Subcuenca	Sistema hidrológico local	PTAR- Barranca los Jilgueros
Golfo de México	Tuxpán	Río Tecolutla	Río Necaxa	Río San Pedro	Efluente
			Río Laxaxalpan		
			Río Tecuantepec		

Además, la red hidrológica de Zacatlán se complementa con varios manantiales, siendo los más importantes los de las comunidades de San Pedro y, principalmente, el manantial que emerge en Santa Martha. Otros arroyos notables incluyen el arroyo Metlaxixtla y el arroyo Los Baños, que constituyen la principal fuente de abastecimiento del Sistema Operador de Agua Potable y Alcantarillado de Zacatlán **(OFICIO No.3s.6 GOB)**.

Actividades económicas

Agricultura: Zacatlán es conocido principalmente por la producción de manzana y actualmente blueberry, pero también se cultivan ciruelas, duraznos, peras, nueces, maíz, frijol, trigo, y avena, lo que constituye a la economía local y el sustento de sus habitantes **(OFICIO No.3s.6 GOB)**.

Producción de sidra: La producción de sidra es una de las actividades económicas más importantes de Zacatlán. Se producen 320,000 botellas de sidra por año, y esta es elaborada principalmente por manzanas. Esta industria no sólo genera empleo, sino turismo porque se ofrecen recorridos y degustaciones de sus productos **(OFICIO No.3s.6 GOB)**.

Turismo: Zacatlán fue reconocido como "Pueblo Mágico" en el año 2012, y desde ahí el turismo se acrecienta cada vez más, existen algunos atractivos como: El valle de piedras encimadas, Tulumán, Cascadas de Quetzalapa, museos del reloj y vino, entre otros **(OFICIO No.3s.6 GOB)**.

Fábrica de armas: La Fábrica de Armas de Zacatlán fue un importante establecimiento que operó durante el siglo XX, especialmente durante la Revolución Mexicana. Se especializaba en la producción de armas y municiones, contribuyendo al armamento de diversas fuerzas durante períodos de conflicto en el país. Aunque su actividad ha disminuido con el tiempo, la fábrica fue un pilar en la economía local y proporcionó empleo a muchos habitantes, actualmente se siguen produciendo sin embargo en menor medida y regularmente para exposiciones **(OFICIO No.3s.6 GOB)**.

Relojes Centenario: La producción de relojes en Zacatlán es una de las actividades económicas más emblemáticas de la región, consolidando a la ciudad como la "Capital del Reloj" en México. Esta industria, que se remonta al siglo XIX, se caracteriza por la fabricación de relojes mecánicos y de cuarzo, así como de relojes de pared y de sobremesa **(OFICIO No.3s.6 GOB)**.

10.4.2 Evaluación operativa y funcional de la PTAR

Planta de Tratamiento de Aguas Residuales de Zacatlán, Puebla. PTAR- SOSAPAZ

La planta de tratamiento de aguas residuales de Zacatlán, Puebla (PTAR) (Figura 36) se edificó en el año 2014, está ubicada a un costado de la barranca de los Jilgueros en la sierra norte del estado de Puebla, con coordenadas 19°55'55" N, 97°57'36" O, el clima que se presenta en esta ciudad es templado subhúmedo, con una temperatura anual promedio de 14.5 °C, tiene una capacidad de 60 L/s y es parte del Sistema Operador de los Servicios de Agua Potable y Alcantarillado del municipio de Zacatlán (SOSAPAZ). La PTAR utiliza el proceso de lodos activados para tratar aguas domésticas y de alcantarillado conforme a las normas NOM-001 SEMARNAT 2021 y NOM-002 SEMARNAT 2021.

La PTAR incluye 4 etapas de tratamiento (lodos activados):

- (1) Pre-tratamiento: Se utilizan elementos como la caja de demasías la cual controla el flujo de agua de entrada, rejillas de desbaste grueso y fino para separar sólidos grandes y pequeños, un canal de desarenador para detener arenas y un medidor ultrasónico para controlar el flujo de entrada.
- (2) Tratamiento primario: Este tratamiento incluye dos sedimentadores primarios para precipitar sólidos suspendidos.
- (3) Tratamiento secundario: Dos reactores biológicos se encargan de eliminar contaminantes disueltos, seguidos por dos sedimentadores secundarios que precipitan a los lodos suspendidos.
- (4) Tratamiento terciario: Contiene un sistema de cloración por goteo para eliminar microorganismos patógenos y no cuenta con proceso de oxidación avanzado para eliminar los contaminantes emergentes (CE).

Cabe mencionar que la PTAR incluye una planta de emergencia para generación de energía eléctrica y un cuarto de control de motor para operar los equipos del proceso, además de un sistema de preparación de polímero para el tratamiento de lodos (Personal operativo de la PTAR).



Figura 36. Proceso de operación de la PTAR

10.4.3 Percepción pública acerca de la calidad del agua y PTAR.

Para conocer los aspectos administrativos y operativos de la PTAR, se realizó un análisis de actores clave que participan directamente en la gestión de la planta, dentro de estos se encuentra el encargado de la misma (Ing. Alejandro Trejo Escamilla) y el director de SOSAPAZ (Biol. Roque Ázacarate Estrada), y el ingeniero a cargo de operación y mantenimiento, a través de esta interacción en donde se realizaron reuniones constantes se obtuvo información acerca del diseño, creación y operación de la PTAR, además se formalizó la colaboración entre Universidad-PTAR mediante un oficio estableciendo una vinculación entre la investigación y la planta.

Por otro lado, se aplicó el cuestionario indicado en la sección de metodología a 50 personas que habitaran en el municipio de Zacatlán y vivieran cerca de la PTAR en casa con número par, obteniendo los resultados mostrados en las gráficas siguientes:

Sección 1:

Total de encuestados: 50 personas

Total de mujeres: 23

Total de hombres: 27

Rangos de edad:

18-28: 20

29-39: 11

40-49: 7

50-60: 12

Sección 2: Conocimiento y percepción del agua

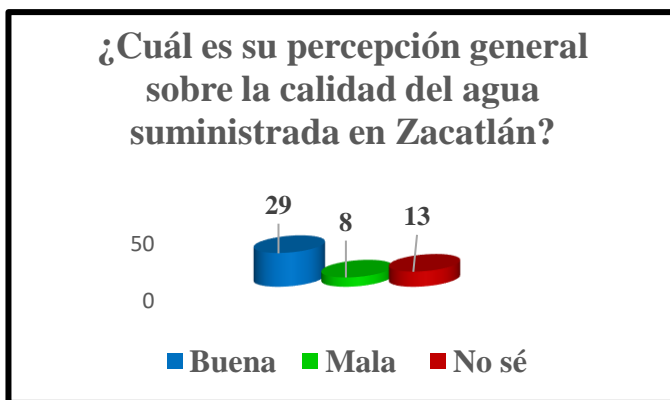


Figura 37 Percepción general sobre la calidad del agua



Figura 38. Descarga de agua

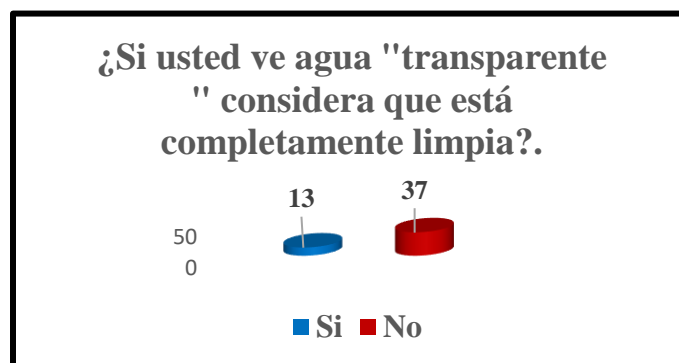


Figura 39. Obstáculo epistemológico

Como se observa en la Figura 37, 29 de las 50 personas encuestadas consideran tener una buena percepción acerca de la calidad del agua, mientras que en la Figura 38 se observa que 24 de 50 personas saben hacia donde se dirige el agua después de su uso, mientras que en la Figura 39, 37 de 50 personas consideran que el agua no está limpia a pesar de verse transparente, sin embargo 13 de ellas no lo saben, esto evidencia un obstáculo epistemológico importante en donde a pesar de que la mayoría lo sabe, el resto lo desconoce lo que involucra una falta de conocimiento sobre el tema.

Sección 3: Planta de tratamiento

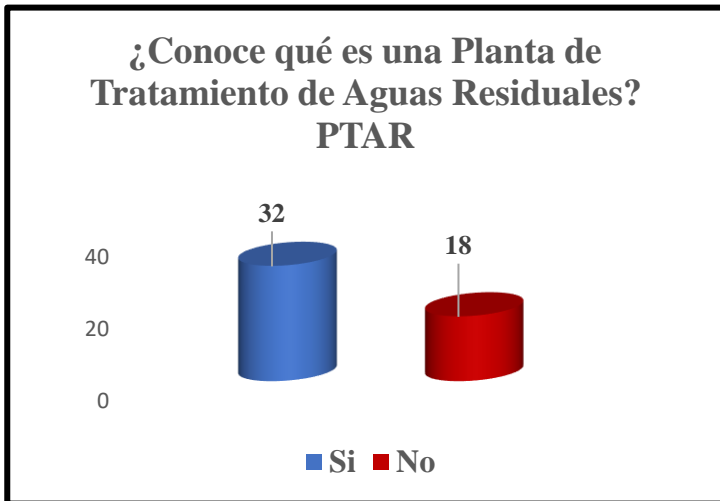


Figura 40. Conocimiento acerca de la PTAR

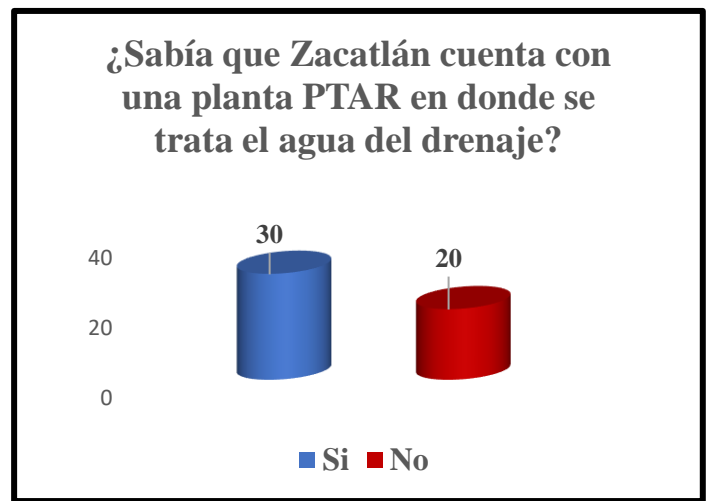


Figura 41. Zacatlán y PTAR

De acuerdo con la Figura 40 se observa que 32 de 50 personas conocen que es una PTAR y en la Figura 41 se determina que 30 de 50 personas si saben que Zacatlán cuenta con una, esto significa que a pesar de que la mayoría lo sabe, el resto presenta un desconocimiento acerca del tema, lo que infiere una falta de información o simplemente de interés al respecto.

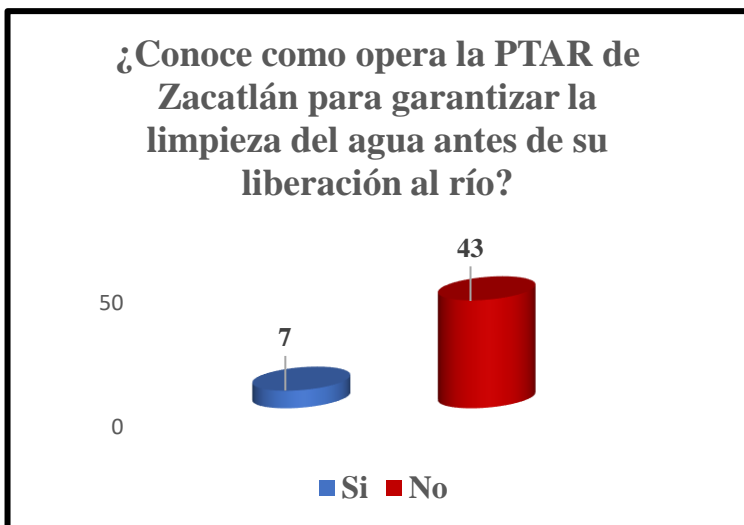


Figura 42. Conocimiento acerca de la operación de la PTAR

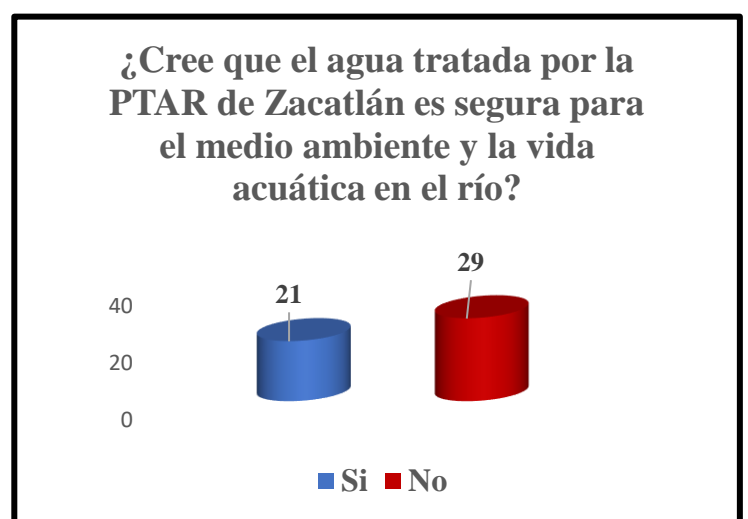


Figura 43. Calidad del efluente de la PTAR.

Por otro lado, en la Figura 42, 43 desconocen cómo opera esta planta lo que coincide con la Figura 43, ya que la mayoría de ellos no saben que Zacatlán tiene una, lo cual es interesante debido a que la mayoría de los encuestados son jóvenes.

Sección 4: Contaminantes emergentes

¿Sabía que al tomar un fármaco y desecharlo mediante las heces o la orina llega al agua de la PTAR y posterior al río (muchas veces sin degradarse)

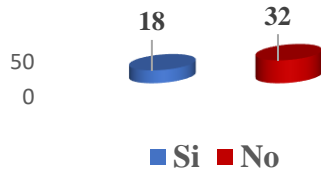


Figura 44. Conocimiento sobre desecho de fármacos

De acuerdo a la pregunta anterior ¿Conoce qué riesgos hacia la salud pudiera ocasionar?

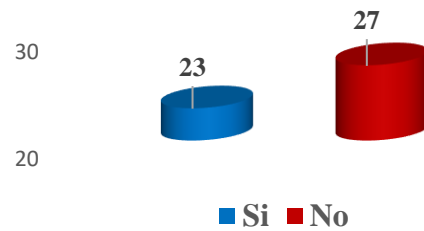


Figura 45. Riesgos hacia la salud

En la Figura 44, 32 de 50 personas desconocen acerca de la ruta que siguen los fármacos después de su utilización lo que tiene por consecuencia la falta de información de este, y por tal razón la falta de compromiso en el tema, en la Figura 45, se muestra que 27 personas desconocen sobre los riesgos de esto, sin embargo, sigue existiendo falta de información acerca de esta situación.

Estos resultados evidencian que, aunque gran parte de la población tiene una perspectiva clara sobre la calidad del agua, muchos de ellos no saben acerca de la existencia y operación de una PTAR en el municipio. La gran mayoría desconoce el destino de los fármacos después de uso, lo que refleja una falta de educación ambiental en el tema, por otro lado, persiste un obstáculo epistemológico en el que al ver agua transparente se considera limpia, este descubrimiento resalta un área de oportunidad para incrementar y fortalecer el conocimiento acerca de la calidad del agua, su tratamiento y rutas de CE en el agua.

11 Conclusiones

1. Los nanomateriales propuestos en este trabajo de investigación $\text{TiO}_2/\text{SiO}_2$ y CLI/SiO_2 mostraron un desempeño eficiente. La degradación de ibuprofeno en agua sintética alcanzó un porcentaje de reducción del 85% con $\text{TiO}_2/\text{SiO}_2$ y un 75% con CLI/SiO_2 utilizando luz solar como fuente de energía. La cinética mostró que $\text{TiO}_2/\text{SiO}_2$ tiene mayor afinidad y velocidad de degradación que CLI/SiO_2 . Lo que demuestra la eficiencia de $\text{TiO}_2/\text{SiO}_2$ al degradar los compuestos orgánicos presentes en el agua.
2. En agua real de la PTAR posterior al proceso fotocatalítico, la materia orgánica tuvo una reducción del 75% con $\text{TiO}_2/\text{SiO}_2$ y 64% con CLI/SiO_2 . La DQO disminuyó de 71 a 51 mg/L (28%) posterior a la fotocatalisis con $\text{TiO}_2/\text{SiO}_2$. Lo anterior demuestra que el proceso y los materiales son viables para una propuesta como etapa de pulimiento en una PTAR.
3. Los bioensayos con raíces de *Allium Cepa* indicaron que el efluente tratado inhibe la división celular deteniendo la mitosis después de profase y reduciendo el número y longitud de las raíces en comparación con el efluente sin tratar. Lo que indica que el proceso fotocatalítico en agua real es un sistema muy complejo en donde es necesario abordar un análisis más profundo que determine la toxicidad final.
4. La simulación de Aspen Plus considerando las condiciones reales de la PTAR y la cinética de degradación del fármaco utilizando $\text{TiO}_2/\text{SiO}_2$, evidencia una degradación a escala real del ibuprofeno del 88.80% y un análisis de la eficiencia del nanomaterial requerida para poder utilizarlo a escala industrial.
5. Los cuestionarios realizados indican una percepción positiva respecto a su conocimiento en la calidad del agua de la región estudiada, pero se desconoce el funcionamiento de la PTAR y la importancia de que existan contaminantes emergentes en el agua, especialmente fármacos, lo que indica la necesidad de promover la educación ambiental en estos temas.

12 Perspectivas

1. La fotocatalisis solar con los nanomateriales propuestos mostró desempeño sobresaliente en la degradación de contaminantes emergentes y en la reducción de la DQO en el efluente de la PTAR, sin embargo, su viabilidad a escala real depende de factores como estabilidad, costo y aplicación práctica en sistemas de tratamiento, además cabe mencionar que una limitación importante en fotocatalisis solar es la falta de control de la radiación hacia los experimentos, así como la variabilidad en las condiciones meteorológicas como los días nublados o lluviosos.

2. Las pruebas de toxicidad mostraron la ausencia de aberraciones cromosómicas, sin embargo, se mostró la inhibición del ciclo celular en el efluente tratado, lo que sugiere la realización de pruebas adicionales considerando la utilización de microorganismos diferentes.

3. Es necesario considerar las pruebas fotocatalíticas en concentraciones que se encuentran en los efluentes de las PTAR, generalmente en ug/L o ng/L, y de esta manera utilizar técnicas más sensibles para su detección como HPLC o espectroscopia de masas que logren detectar el fármaco en concentraciones reales.

4. La evaluación de la etapa de pulimiento mediante Aspen Plus, permitió conocer la eficiencia del catalizador, sin embargo, es necesario considerar el costo de la implementación de una lámpara UV en los días con menor radiación solar, el costo de la energía y el aporte de aire al reactor fotocatalítico.

5. Es necesario la realización de mayor número de ensayos a lo largo del tiempo tanto en la parte de trabajo de laboratorio como de campo, considerando muestreos en diferentes épocas del año, para obtener datos más precisos.

13 Bibliografía

- Aguiñaga Alvarez, E. A. (2018). Adsorción y fotocátalisis de cafeína por composite TiO₂/Zeolita y sus precursores. Benemérita Universidad Autónoma de Puebla.
- Andrade Quilindo, Y. A. (2023). La fotocátalisis como alternativa de remoción de mercurio en aguas contaminadas por la minera aurífera. Recuperado de: <https://repositorio.uniautonoma.edu.co/handle/123456789/827?show=full>
- Augusti, D. V., & Augusti, R. (2005). Determination of the enantiomeric composition of ibuprofen solutions via a rapid and sensitive mass spectrometry method. *Tetrahedron: Asymmetry*, 16(10), 1881–1885. <https://doi.org/10.1016/J.TETASY.2005.04.005>
- Bedolla, R., & García-Rivero, M. (2011). Immobilization of *Aspergillus Niger* sp. in sol gel and its potential for production of xylanases. *Journal of Sol-Gel Science and Technology*, 57(1), 6-11.
- Bellardita M.; Addamo M.; Di Paola A.; Marcì G.; Palmisano L.; Cassar L.; Borsa M. Photocatalytic activity of TiO₂/SiO₂ systems. *J. Hazard. Mater.* 2010, 174(1–3), 707–713. <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2009.09.108>.
- Bhattacharjee, D., & Maiti, S. (2022). Photocatalytic removal of lead ions from wastewater using TiO₂ nanoparticles: A review. *Journal of Environmental Management*, 303, 114059. <https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2021.114059>
- Bielak, H., Boergers, A., Raab, J., Tuerk, J., & Dopp, E. (2015). Efficiency of UV-oxidation in removal of pharmaceuticals from waster water samples and toxicological evaluation before and after the oxidative treatment. En *Disinfection By-products in Drinking Water* (pp. 180–188). The Royal Society of Chemistry.
- Boelee, E., Geerling, G., Van der Zaan, B., Blauw, A., & Vethaak, A. D. (2019). Water and health: From enviromental pressures to integrated responses. *Acta Tropica*, 217-226.
- Brenat Burel, G., & Ramírez Sosa, L. (2016). Ibuprofeno. *Revista Cubana de Farmacia*, 183–185.
- Brouers, F. (2013). Sorption isotherms and probability theory of complex systems. arXiv preprint arXiv:1309.5340. Recuperado de <https://arxiv.org/abs/1309.5340>
- Brunauer, S., Emmett, P. H., & Teller, E. (1938). Adsorption of gases in multimolecular layers. *Journal of the American Chemical Society*, 60(2), 309–319. <https://doi.org/10.1021/ja01269a023>
- Candelaria Tejeda, Edgar Quiñonez, & Margaret Peña. (2014). Contaminantes emergentes en aguas: Metabolitos de Fármacos. Una Revisión. *Revista Facultad de Ciencias Básicas*, 10(1), 10–23
- Carmona Martínez, E. (2018). Contaminants of emerging concern in the environment. Turia River as study case. Universidad de Valencia.
- Castillo Morales Gabriela (2004), *Ensayos toxicológicos y métodos de evaluación de calidad de aguas*. México: IMTA, 2004.
- Chaker H.; Fourmentin S.; Chérif-Aouali L. Efficient photocatalytic degradation of ibuprofen under visible light irradiation using silver and cerium co-doped mesoporous TiO₂. *ChemistrySelect* 2020, 5(38), 11787–11796. <https://doi.org/10.1002/slct.202002730>.

- Chen, K., Liang, J., Wang, Y., Tao, Y., Lu, Y., & Wang, A. (2024). A global perspective on microbial risk factors in effluents of wastewater treatment plants. *Journal of Environmental Sciences*, 138, 227–235. <https://doi.org/10.1016/J.JES.2023.04.012>
- CONAGUA. RENAMECA. Información de la calidad del agua. Recuperado de: <https://app.conagua.gob.mx/ICA/Contenido?n1=1&n2=1>
- CONAPO https://www.gob.mx/cms/uploads/attachment/file/698313/21_208_PUE_Zacatl_n.pdf
- Correa-Martins, M. N., Souza, V. V. D., & Silva-Souza, T. D. (2016). Cytotoxic, genotoxic and mutagenic effects of sewage sludge on *Allium cepa*. *Chemosphere*, 148, 481–486. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2016.01.071>
- Dalai, S., Pakrashi, S., Joyce Nirmala, M., Chaudhri, A., Chandrasekaran, N., Mandal, A. B., & Mukherjee, A. (2013). Cytotoxicity of TiO₂ nanoparticles and their detoxification in a freshwater system. *Aquatic Toxicology (Amsterdam, Netherlands)*, 138–139, 1–11. <https://doi.org/10.1016/j.aquatox.2013.04.005>
- De la Peña, M. E., Ducci, J., & Zamora, V. (2013). Tratamiento de aguas residuales en México.
- de Lasa, H., Serrano, B., & Salaices, M. (2005). Photocatalytic reaction engineering. <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:55055504>
- De Wilt, N. J., van de Sanden, M. C. M., & Rietjens, I. M. C. M. (2020). Improved biodegradation of pharmaceuticals after mild photocatalytic pretreatment. *Water and Environment Journal*, 34(2), 300–310. <https://doi.org/10.1111/wej.12634>
- Dharmappa, H. B., Hasia, A., & Hagare, P. (1997). Water treatment plant residuals management. *Water Science and Technology*, 35(8), 45–56. [https://doi.org/10.1016/S0273-1223\(97\)00150-9](https://doi.org/10.1016/S0273-1223(97)00150-9)
- Dimuthu, W.; Wadasinghe, LGYJG. (2019). Bioensayo de *Allium cepa* para evaluar la citotoxicidad del agua y los sedimentos en una corriente tropical sujeta a contaminantes de múltiples fuentes puntuales y difusas. *Revista de Toxicología*. <https://doi.org/10.1155/2019/5420124>
- Dotto, G. L., & McKay, G. (2020). Current scenario and challenges in adsorption for water treatment. *Journal of Environmental Chemical Engineering*, 8(4), 103988. <https://doi.org/10.1016/J.JECE.2020.103988>
- Ebrahimbabaie, P., Yousefi, K., & Pichtel, J. (2022). Photocatalytic and biological technologies for elimination of microplastics in water: Current status. *Science of The Total Environment*, 806, 150603. <https://doi.org/10.1016/J.SCITOTENV.2021.150603>
- Environmental Science and Pollution Research*, 29(56), 84946–84961. <https://doi.org/10.1007/s11356-022-21819-1>
- Fassin, D. (1997). L'internationalisation de la santé : entre culturalisme et universalisme, *Esprit*, février, p.83-105.
- Freundlich, H. (1906). Über die adsorption in lösungen. *Zeitschrift für Physikalische Chemie*, 57U(1), 385–470.

Gao, X., Zhang, Y., Zhang, Y., Liu, J., & Jiang, Y. (2019). Photocatalytic degradation of volatile organic compounds: A review of current progress and future perspectives. *Chemical Engineering Journal*, 370, 50-67. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2019.03.087>

García, A., López, R., & Pérez, M. (2019). Síntesis y caracterización de películas delgadas de TiO₂ y TiO₂/SiO₂ obtenidas por el método sol-gel. *Revista Mexicana de Física*, 65(3), 123-130. Recuperado de <https://www.revistamexicanadefisica.unam.mx/index.php/rmf/article/view/1234>

Gauthier, J. M., Downing, J. A., & Sappington, K. G. (2019). Effects of pharmaceuticals in the environment: Ecotoxicology and regulatory frameworks. *Environmental Toxicology and Chemistry*, 38(4), 812-821. <https://doi.org/10.1002/etc.4412>

Godawat, R., Ameta, R., & Kothari, S. (2016). A study on the effect of untreated and TiO₂ treated Orange G solution on the growth and biochemical parameters of *Allium cepa* (onion). Department of Chemistry, PAHER University. Udaipur, India.

Guevara, A. (2017) Tratamiento por fotocatalisis de aguas contaminadas para su uso en la agricultura. Barcelona. Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias Aplicadas

Guisado García E.I., Gil Alegre M.E., Camacho Sánchez. M.A., Torres S. (2018) Estudio de la solubilidad de ibuprofeno en medio acuoso: Elaboración de una formulación líquida de uso pediátrico. Trabajo de investigación. Universidad Complutense de Madrid.

He, Y., Huang, B., Chen, L., Zhang, T., & Wang, X. (2021). Impact of pharmaceutical contaminants on aquatic microbial communities. *Science of the Total Environment*, 760, 144957. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2020.144957>

Hernández, M. A., Rojas, F., & Lara, V. (2010). Estructura porosa y propiedades estructurales de modenita y clinoptilolita. *Revista Mexicana de Física*, 23, 51

INEGI https://www.inegi.org.mx/contenidos/app/mexicocifras/datos_geograficos/21/21208.pdf

Inglezakis, V. J., & Pouloupoulos, S. G. (2006). Adsorption, ion exchange and catalysis: Design of operations and environmental applications (1st ed.).

IUPAC. (2015). Terminology of porous materials and isotherm classification. *Pure and Applied Chemistry*, 87(9-10), 1051–1069. <https://doi.org/10.1515/pac-2014-1117>

Janet Gil, M., María Soto, A., Iván Usma, J., & Darío Gutierrez, O. (2012). Contaminantes emergentes en aguas, efectos y posibles tratamientos. *Producción + Limpia*, 7(22), 52–73.

Kasonga, T. K., Coetzee, M. A. A., Kamika, I., Ngole-Jeme, V. M., & Benteke Momba, M. N. (2021). Endocrine-disruptive chemicals as contaminants of emerging concern in wastewater and surface water: A review. *Journal of Environmental Management*, 277, 111485. <https://doi.org/10.1016/J.JENVMAN.2020.111485>

Khan, S., Cao, Q., Zheng, Y. M., Huang, Y. Z., & Zhu, Y. G. (2008). Health risks of heavy metals in contaminated soils and food crops irrigated with wastewater in Beijing, China. *Environmental Pollution*. <https://doi.org/10.1016/j.envpol.2007.06.056>

Kim, J., Chung, Y., Shin, D., Kim, M., Lee, Y., Lim, Y., & Lee, D. (2003). Chlorination by-products in surface water treatment process. *Desalination*, 151(1), 1–9. [https://doi.org/10.1016/S0011-9164\(02\)00967-0](https://doi.org/10.1016/S0011-9164(02)00967-0)

Kobayashi M.; Kuma R.; Masaki S.; Sugishima N. TiO₂-SiO₂ and V₂O₅/TiO₂-SiO₂ catalyst: Physico-chemical characteristics and catalytic behavior in selective catalytic reduction of NO by NH₃. *Appl. Catal. B Environ.* 2005, 60(3-4), 173-179. <https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2005.02.030>.

Kumar, A., & Pal, D. (2018). Antibiotic resistance and wastewater: Correlation, impact and critical human health challenges. *Journal of Environmental Chemical Engineering*, 6(1), 52-58. <https://doi.org/10.1016/j.jece.2017.11.059>Fuchigami, K., Taguchi, Y., & Tanaka, M. (2008).

Lagunas Cruz, M. del C., Valle Mendiola, A., & Soto Cruz, I. (2015). Ciclo celular: Mecanismos de regulación. *Vertientes. Revista Especializada En Ciencias De La Salud, Recuperado de: <https://www.revistas.unam.mx/index.php/vertientes/article/view/51694>*

Langmuir, I. (1918). The adsorption of gases on plane surfaces of glass, mica and platinum. *Journal of the American Chemical Society*, 40(9), 1361-1403. <https://doi.org/10.1021/ja02242a004>

Laos Barrera, L. M. (2019). Reducción de la concentración de ibuprofeno en una muestra de agua sintética, mediante fotocátalisis heterogénea (Trabajo de suficiencia profesional). Universidad Nacional Tecnológica de Lima Sur. Recuperado de <http://repositorio.untels.edu.pe/jspui/handle/123456789/211>

Lin, L., Zhang, Y., & Wang, H. (2019). Adsorption and photocatalytic oxidation of ibuprofen using nanocomposites of TiO₂ nanofibers combined with BN nanosheets. *Science of the Total Environment*, 650, 132-141. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2018.09.157>

López, S. A., & Castro, G. (2020). Photocatalytic degradation of benzene: A review. *Journal of Hazardous Materials*, 392, 122267. <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2020.122267>

López-Serna, R., García-Galán, M. J., Gómez, M., & Sarrà, M. (2016). Removal of emerging contaminants from water and wastewater. *Science of the Total Environment*, 542, 421-431. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2015.10.024>

Madkhali, N., Prasad, C., Malkappa, K., Choi, H. Y., Govinda, V., Bahadur, I., & Abumousa, R. A. (2023). Recent update on photocatalytic degradation of pollutants in waste water using TiO₂-based heterostructured materials. *Results in Engineering*, 17(100920), 100920. <https://doi.org/10.1016/j.rineng.2023.100920>

Malinowska, I., Kubica, P., Madajski, P., Ostrowski, A., Gómez Polo, C., Carvera, L., Bednarski, W., & Zielińska-Jurek, A. (2022). Synthesis, characterization, and application of 2D/2D TiO₂-GO-ZnFe₂O₄ obtained by the fluorine-free lyophilization method for solar light-driven photocatalytic degradation of ibuprofen.

Marbán G.; Fernández-Pérez A.; Álvarez-García S. Ultraviolet light spectroscopic characterization of ibuprofen acid aggregation in deionized water. *Heliyon* 2023, 9(11), e21260. <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2023.e21260>.

Martínez Romero, E., & Esparza Olgún, L. G. (2021). Teorías de sistemas complejos: Marco epistémico para abordar la complejidad socioambiental. *Intersticios Sociales*, (21). <https://www.scielo.org.mx/pdf/ins/n21/2007-4964-ins-21-373.pdf>

Martos López, Angel. (2016). La importancia del agua para nuestro planeta. Universidad de Jaén.

Masuda, R., Takahashi, W., & Ishii, M. (1990). Particle size distribution of spherical silica gel produced by sol-gel method. *Journal of Non-crystalline solids*, 121(1-3), 389-393.

Matoh, L., Žener, B., Kovačić, M., Kušić, H., Arčon, I., Levstek, M., & Lavrenčič Štangar, U. (2022). Photocatalytic sol-gel/P25 TiO₂ coatings for water treatment: Degradation of 7 selected pharmaceuticals. *Ceramics International*, 49(14), 24395–24406. <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2022.09.204>

Méndez-Arriaga F.; Maldonado M. I.; Giménez J.; Esplugas S.; Malato S. Abatement of ibuprofen by solar photocatalysis process: Enhancement and scale up. *Catal. Today* 2009, 144(1–2), 112–116. <https://doi.org/10.1016/j.cattod.2009.01.028>.

Migliore, L., Panzica, S., & Baldini, M. (2020). Bioaccumulation of pharmaceutical pollutants in aquatic organisms: Environmental risk assessment. *Environmental Pollution*, 264, 114720. <https://doi.org/10.1016/j.envpol.2020.114720>

Miranda, M. O., Cavalcanti, W. E. C., Barbosa, F. F., de Sousa, J. A., da Silva, F. I., Pergher, S. B. C., & Braga, T. P. (2021). Photocatalytic degradation of ibuprofen using titanium oxide: Insights into the mechanism and preferential attack of radicals. *RSC Advances*, 11(47), 27720–27733. <https://doi.org/10.1039/D1RA05068C>

Montes, R., Méndez, S., Carro, N., Cobas, J., Alves, N., Neuparth, T., Santos, M. M., Quintana, J. B., & Rodil, R. (2022). Screening of Contaminants of Emerging Concern in Surface Water and Wastewater Effluents, Assisted by the Persistency-Mobility-Toxicity Criteria. *Molecules*, 27(12). <https://doi.org/10.3390/molecules27123915>

Morales Hernández, Y., Cajamarca García, Y. N., & Calvache, J. E. A. (2019). Algoritmo de Matlab® para calcular isotermas de adsorción de Langmuir en ácidos carboxílicos con adsorbente sólido carbón activado y Amberlite IRA 67. *Educación Química*, 30(1), e10. <https://doi.org/10.22201/fq.18708404e.2019.1.64601>

Moreno Ortiz, & Victor Cesar. (2013). Los medicamentos de receta de origen sintético y su impacto en el medio ambiente. *Revista Mexicana de Ciencias Farmacéuticas*, 44(4), 17–29.

Muñoz y Palomino, S. (2019). Influencia de la concentración de TiO₂ y tiempo de tratamiento en la reducción de DQO de las aguas residuales del camal por fotocatalisis heterogénea. Huancayo: Universidad Nacional del Centro del Perú.

NOM-001-SEMARNAT-1996. Que establece los límites máximos permisibles de contaminantes en las descargas de aguas residuales en aguas y bienes nacionales.

Oliveira Miranda M.; et al. Photocatalytic degradation of ibuprofen using titanium oxide: Insights into the mechanism and preferential attack of radicals. *RSC Adv.* 2021, 11(34), 20886–20897. <https://doi.org/10.1039/D1RA04340D>.

Organización Mundial de la Salud. (2015). Copatrocinador de ONU.

Ponce Hernández, S., & Torres, A. (2012). Estudio de propiedades y compatibilidad de mezclas, Polipropileno (PP), Acido Poliláctico (PLA) y Nanopartículas de Óxido de Silicio (SiO₂), mediante extrusión y mezclado físico.

Rahimi, B., & Ebrahimi, A. (2019). Photocatalytic process for total arsenic removal using an innovative BiVO₄/TiO₂/LED system from aqueous solution: Optimization by response surface

methodology (RSM). Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers, Volume(Issue), S1876107019301919. <https://doi.org/10.1016/j.jtice.2019.04.036>

Riazian, M., Montazeri, N., & Biazar, E. (2011). Nano structural properties of TiO₂-SiO₂. Oriental Journal of Chemistry, 27(3), 1321-1330.

Rincón, A. G., & Pulgarin, C. (2003). Photocatalytic degradation of the chlorinated volatile organic compounds trichloroethylene (TCE), perchloroethylene (PCE) and chloroform (CHCl₃) in drinking water using TiO₂ under sunlight illumination. Catalysis Today, 76(2-4), 151-164.

Roldan, E. 2016. Introducción a la toxicología. Universidad Nacional Autónoma de México. Disponible en: <https://www.zaragoza.unam.mx/wp-content/Portal2015/publicaciones/libros/cbiologicas/libros/Toxico-ago18.pdf>. Consultado 28 de Octubre del 2024.

Sá, A. S., Feitosa, R. P., Honório, L., Peña-Garcia, R., Almeida, L. C., Dias, J. S., Brazuna, L. P., Tabuti, T. G., Triboni, E. R., Osajima, J. A., & da Silva-Filho, E. C. (2021). A brief photocatalytic study of ZnO containing cerium towards ibuprofen degradation. Materials, 14(19), 5891. <https://doi.org/10.3390/ma14195891>

Salcedo, M. J., tes.), M. T. T. V. de la T. (2021). Photocatalytic degradation of pharmaceuticals in water: Design of nanocatalysts and study of by-products and mechanism. <https://investigacion.unirioja.es/documentos/6184c37d2b9f274a4b5b097d>

Salimi, M., Esrafil, A., Gholami, M., Jonidi Jafari, A., Rezaei Kalantary, R., Farzadkia, M., Kermani, M., & Sobhi, H. R. (2017). Contaminants of emerging concern: a review of new approach in AOP technologies. Environmental Monitoring and Assessment,. <https://doi.org/10.1007/s10661-017-6097-x>

Sampieri Hernández Roberto (2008). Metodología de la Investigación. Editorial: Mc Graw Hill. 6ta Edición pp 48-53.

SEMARNAT. Normas Oficiales Mexicanas. Recuperado de: <https://www.gob.mx/semarnat>

SEMARNAT: NMX-AA-003-1980 AGUAS RESIDUALES.- MUESTREO

Singh, R., Verma, V., & Yadav, S. (2022). Advances in photocatalytic degradation of organic contaminants in water: Role of hydroxyl radicals. Applied Catalysis B: Environmental, 310, 121364. <https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2022.121364>

Sistema Meteorológico Nacional Recuperado de https://smn.conagua.gob.mx/es/tools/RECURSOS/Normales_Climatologicas/Mensuales/pue/mes21107.TX

Somensi, C. A., Souza, A. L. F., Simionatto, E. L., Gaspareto, P., Millet, M., & Radetski, C. M. (2015). Genetic material present in hospital wastewaters: Evaluation of the efficiency of DNA denaturation by ozonolysis and ozonolysis/sonolysis treatments. Journal Environmental Management, 162, 74–80. <https://doi.org/10.1016/J.JENVMAN.2015.07.039>

SOSAPAZ. <https://sosapaz.org.mx/>

Soto, A. M., & Sonnenschein, C. (2021). Environmental impacts of pharmaceuticals and personal care products in aquatic ecosystems. *Environmental Health Perspectives*, 129(6), 067001. <https://doi.org/10.1289/EHP7330>

Synthesis of spherical silica particles by sol-gel method and application. *Polymers for advanced Technologies*, 19, 977–983. <https://doi.org/10.1002/pat.1064-56>.

Tian, Y. Li, H. Zeng, W. Guan, Y. Wang, and X. Zhao, “Cyanide oxidation by singlet oxygen generated via reaction between H₂O₂ from cathodic reduction and OCl⁻ from anodic oxidation,” *J. Colloid Interface Sci.*, vol. 482, pp. 205–211, 2016.

Trujillo Camacho, M. E., & García Gomez, C. (2010). Evaluación de compositos TiO₂/clinoptilolita en la fotodegradación del tinte MV-2B en un reactor-concentrador solar CPC. *Revista Mexicana de Ingeniería Química*, 9(2), 49–69.

US EPA. (1994). National Wastewater Management Excellence Awards Program.

Verrocchi y Julia Medina, A. (s/f-a) (2019) Estudios preliminares de remoción de ibuprofeno de medios acuosos utilizando sílidos regionales modificados.

Walton KS, Snurr RQ (2007) Applicability of the BET method for determining surface areas of microporous metal-organic frameworks. *Journal of the American Chemical Society*.

Wu, Y., Guan, M., Chang, X., Wang, J., & Xu, S. (2023). Homogeneous double-layer TiO₂-ZrO₂-SiO₂ photocatalyst with multi-heterojunction structure for enhanced visible light-responsive photocatalytic activity. *Journal of Molecular Liquids*, 369(120959), 120959. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2022.120959>

Yan, B., Chen, G., Ma, B., Guo, Y., Zha, Y., Li, J., Wang, S., Liu, J., Zhao, B., & Xie, H. (2024). Construction of surface plasmonic Bi nanoparticles and α -Bi₂O₃ co-modified TiO₂ nanotube arrays for enhanced photocatalytic degradation of ciprofloxacin: Performance, DFT calculation and mechanism. *Separation and Purification Technology*, 330(125180), 125180. <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2023.125180>

Zeng, J., Yang, B., Wang, X., Li, Z., Zhang, X., & Lei, L. (2015). Degradation of pharmaceutical contaminant ibuprofen in aqueous solution by cylindrical wetted-wall corona discharge. *Chemical Engineering Journal (Lausanne, Switzerland: 1996)*, 267, 282–288. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2015.01.030>

Zhang, J., Liao, J., Yang, F., Xu, M., & Lin, S. (2017). Regulation of the electroanalytical performance of ultrathin titanium dioxide nanosheets toward lead ions by non-metal doping. *Nanomaterials*, 7(11), 327. <https://doi.org/10.3390/nano7110327>

Zhang, Y., Chen, X., & Wang, L. (2020). Recent advances in TiO₂-based photocatalysis for environmental remediation. *Environmental Science & Technology*, 54(6), 3455–3468. <https://doi.org/10.1021/acs.est.9b06602>

Zou, L., Ye, J., Zhang, Q., & Zhao, X. (2016). Synthesis and characterization of TiO₂/SiO₂ nanocomposites for photocatalytic degradation of organic pollutants.

14 Anexo

14.1 A) Fotocatálisis solar

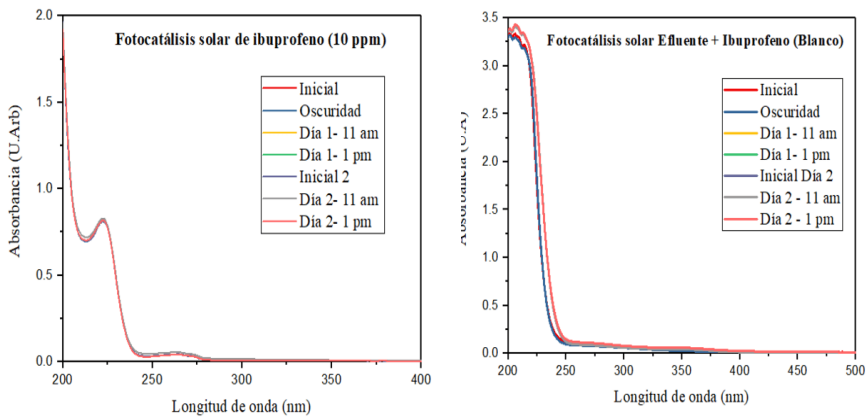


Figura 46 a) Espectros UV-Vis Blanco (Ibuprofeno), b) Espectros UV-Vis Blanco (Ibuprofeno + Efluente PTAR)



Figura 47. Fotocatálisis solar de ibuprofeno

14.2 B) PTAR



Figura 48. Comparación de agua de influente y efluente en la PTAR.

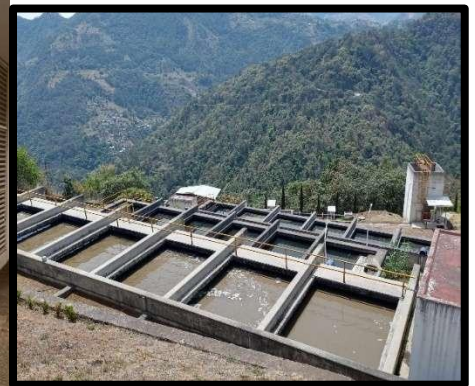


Figura 49. Planta de tratamiento de Aguas Residuales (PTAR) de Zacatlán, Puebla

14.3 C) Bioensayo *Allium cepa*



Figura 50. Experimentos iniciales de ensayo de toxicidad utilizando *Allium Cepa*. a) Efluente sin tratar, b) Efluente tratado.



Figura 51. Experimentos finales de ensayo de toxicidad utilizando *Allium cepa*, a) Efluente sin tratar, b) Efluente tratado con fotocátalisis utilizando $\text{TiO}_2/\text{SiO}_2$

14.4 D) Cuestionario

Investigación: Evaluación de la fotocátalisis solar para el mejoramiento de la calidad del agua en la PTAR de Zacatlán Puebla.

Objetivo: Conocer la percepción que tienen las personas acerca de la calidad del agua tratada mediante la PTAR y su eficiencia frente a contaminantes emergentes como los fármacos.

Población: Habitantes de Zacatlán.

Muestra: Hombres y mujeres entre 18 y 60 años que vivan cerca de la PTAR.

1. Perfil del encuestado

1.1 Sexo

H_____ M_____ Otro_____

1.2 ¿Qué edad tiene?

18-28 _____

29-39 _____

40-49 _____

50-60_____

2. Conocimiento y percepción del agua

2.1. ¿Cuál es su percepción general sobre la calidad del agua suministrada en Zacatlán?

Buena_____ Mala_____ No lo sé_____

2.2 ¿Sabe hacia dónde va el agua que ya utilizó en su casa?

Sí_____ No_____ Desconozco_____

2.3. ¿Si usted ve agua “transparente” considera que está completamente limpia?

Sí_____ No_____

3. *Planta de tratamiento*

3.1. ¿Conoce qué es una Planta de Tratamiento de Aguas Residuales? (PTAR)

Sí____ No____

3.2. ¿Sabía que Zacatlán cuenta con una PTAR en donde se trata el agua del drenaje antes de verterla al río?

Sí____ No____ Desconozco____

3.3. ¿Conoce cómo opera la PTAR de Zacatlán para garantizar la limpieza del agua antes de su liberación al río?

Sí____ No____ Desconozco____

3.4. ¿Cree que el agua tratada por la PTAR de Zacatlán es segura para el medio ambiente y la vida acuática en el río?

Sí____ No____ Desconozco____

3.5. ¿Sabía que al tomar un fármaco y desecharlo mediante las heces o la orina llega al agua de la PTAR y posterior al río (muchas veces sin degradarse)?

Sí____ No____ Desconozco____

3.6. De acuerdo a la pregunta anterior ¿Conoce qué riesgos hacia la salud pudiera ocasionar?

Sí____ No____ Desconozco____

14.5 E) Tipos de isothermas

Tipo I (Langmuir): Ideal para materiales microporosos. La curva muestra como los poros pequeños se llenan rápidamente, limitando la adsorción adicional.

Tipo II: Representa la adsorción multicapa en sólidos no porosos o macroporosos. El punto de inflexión indica la formación de la primera capa de adsorbato.

Tipo III: Las interacciones adsorbato-adsorbente son más débiles que adsorbato-adsorbato, lo que genera una curva sin punto de saturación.

Tipo IV: Característica de materiales mesoporosos, con un bucle de histéresis debido a la condensación capilar en los poros.

Tipo V: Similar al Tipo III, pero con histéresis. Aparece en materiales con interacciones débiles y poros mesoporosos.

Tipo VI: Curva escalonada, que refleja la adsorción en capas uniformes y homogéneas.

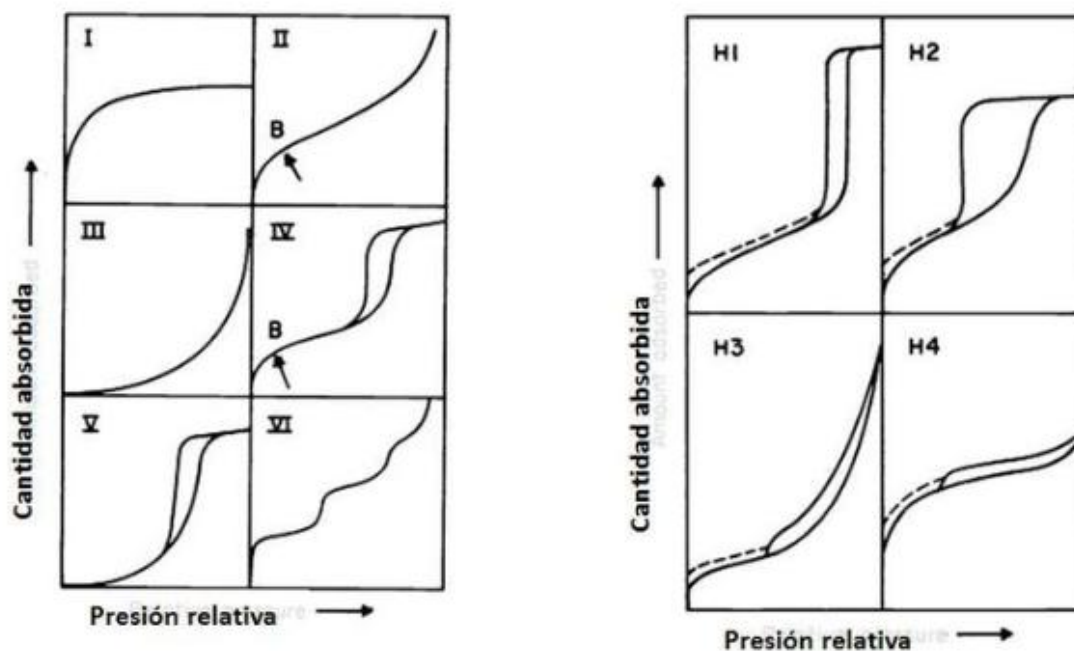


Figura 52. Tipos de isothermas y ciclos de histéresis (IUPAC, 2015)

Tabla 24 Tipos de lazos de histéresis

Tipo de histéresis	Descripción
H1	Poros cilíndricos uniformes y bien definidos. Curva casi vertical en desorción.
H2	Poros con cuello angosto y cuerpo ancho (tipo botella). Estructura compleja.
H3	Poros en forma de lámina o placas. No hay saturación completa.
H4	Mezcla de microporos y mesoporos. Alta adsorción a bajas presiones.

14.6 F) Estancia de investigación

14.6.1 Pruebas fotocatalíticas con reactor solar en continuo



Figura 53. Reactor solar

Adicionalmente se utilizó un reactor solar (Figura 53) con un volumen operativo de 250 mL, y un tiempo de residencia de 15 min. Este reactor está conformado por tubos de borosilicato con un diámetro interno de 3 mm, doblados en ángulos de 180° y dispuestos repetidamente 25 veces sobre una superficie inclinada 45° respecto a la horizontal. El diseño permite maximizar la captación de la radiación solar aprovechando la alta transmitancia del borosilicato en el espectro visible. En este sistema se utilizó una concentración de 200 mg/L de $\text{TiO}_2/\text{SiO}_2$ y de ibuprofeno de 10 ppm. En algunas pruebas fotocatalíticas se añadió peróxido de hidrógeno (H_2O_2) como agente oxidante en una proporción molar 5:1 respecto al ibuprofeno, con el fin de favorecer la generación de radicales hidroxilo. Considerando una concentración inicial de ibuprofeno de 10 ppm en 2 litros de solución, utilizando H_2O_2 al 30% p/p, se calculó un volumen aproximado de 0.055 mL, necesario para alcanzar la relación deseada.

La irradiancia UV se midió utilizando el medidor de luz UV34 de PCE Group (St. Martin im Innkreis, Austria), y el espectro solar se registró mediante el piranómetro SR05-A1 de Hukseflux Thermal Sensors BV (Delft, Países Bajos), equipando con la unidad de registro L19. El índice UV fue consultado a través de las aplicaciones Clima de iPhone y Meteored, que permiten acceder a datos meteorológicos diarios específicos de la localidad, incluyendo el valor del índice UV en Santiago de Compostela, A Coruña, España. Para este estudio se registraron los valores máximos diarios de este con el fin de estimar de manera referencial la intensidad de radiación solar a la que estuvieron expuestos los experimentos. Previamente se realizaron pruebas de oscuridad y fotólisis con el fin de verificar que tanto el catalizador como la radiación actúan de forma independiente en cada sistema.

Evaluación de la degradación del fármaco

Para evaluar la degradación de ibuprofeno se empleó un espectrofotómetro UV-VIS Perkin Elmer Lambda 25. (Santiago de Compostela, A Coruña, España). La cuantificación más precisa se realizó mediante cromatografía líquida de alta resolución (HPLC), utilizando un sistema Jasco XCL (Ishikawa, Japón), equipado con dos detectores conectados en serie: Un detector de arreglo de diodos (DAD-2110 MD) Y un detector de fluorescencia (FP-4025).

El sistema cuenta con dos bombas independientes para el suministro de fases móviles, un mezclador y una columna de fase reversa Gemini® C18 (3 µm, 110 Å, 150 x 4.6 mm) de la marca Phenomenex (California, Estados Unidos). Asimismo, dispone de un automuestreador modelo X-LC 3159AS. Para el análisis de los compuestos de interés, se inyectaron alícuotas de 100 µL, y los resultados fueron procesados mediante el software ChromNav®.

Se aplicó el método de cuantificación descrito en la Tabla 25.

Tabla 25 Método de detección (HPLC)

Compuesto	Tiempo de retención (min)	Excitación de longitud de onda (nm)	Emisión de longitud de onda (nm)
	Fluorescencia (Canal 1)		
Ibuprofeno	6,8	260	370
	Detector de diodos (Canal 5) - Picos de absorbancia		
Ibuprofeno	12,71	195	225

En las Figuras 55 y 57 se observan los espectros UV-Vis de ibuprofeno mediante fotocátalisis solar. Al inicio (línea roja), el ibuprofeno muestra un pico de absorbancia alrededor de los 220 nm, que es característico de su estructura aromática.

Conforme avanza el tiempo (20, 40, 60 y 80 minutos), este pico varía, lo que indica que el ibuprofeno se transforma posiblemente en productos intermedios durante el proceso (Suárez Escobar *et al*; 2021), probablemente derivados del ibuprofeno que aún tienen cierta actividad en el UV.

REACTOR SOLAR

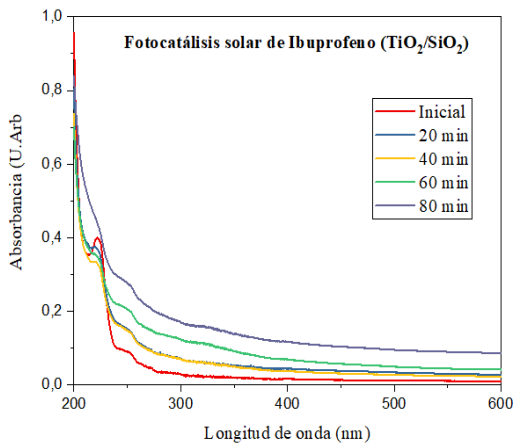


Figura 54. Fotocatálisis solar de ibuprofeno (Prueba piloto)

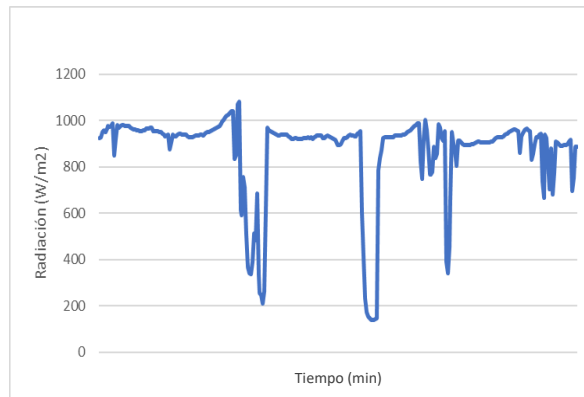


Figura 55. Medición de radiación solar mediante piranómetro (Prueba piloto)

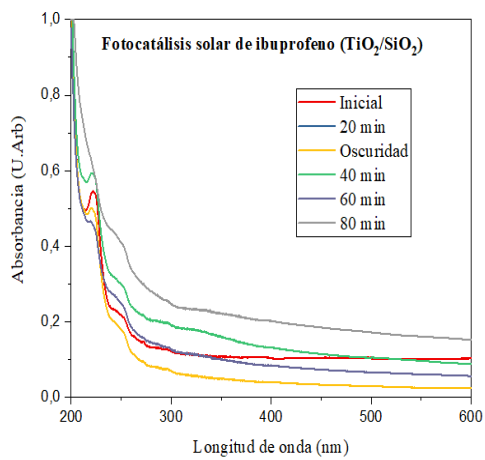


Figura 56. Fotocatálisis solar de ibuprofeno (Prueba 2) (Reactor solar)

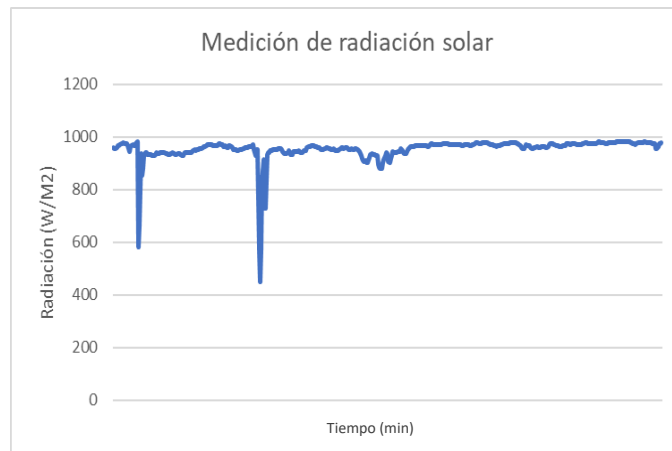


Figura 57. Medición de radiación solar mediante piranómetro (Prueba 2)

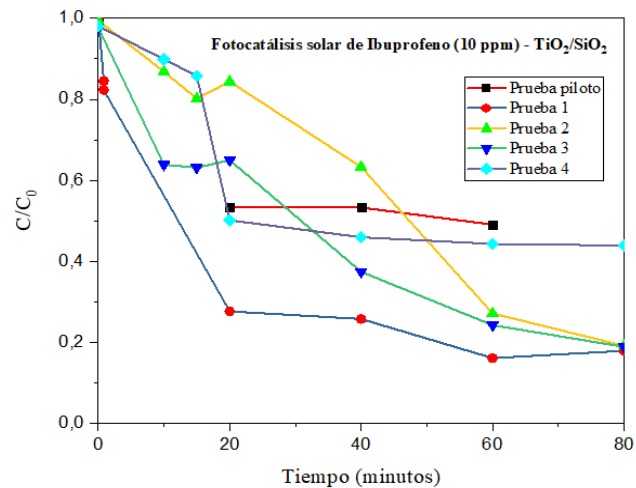
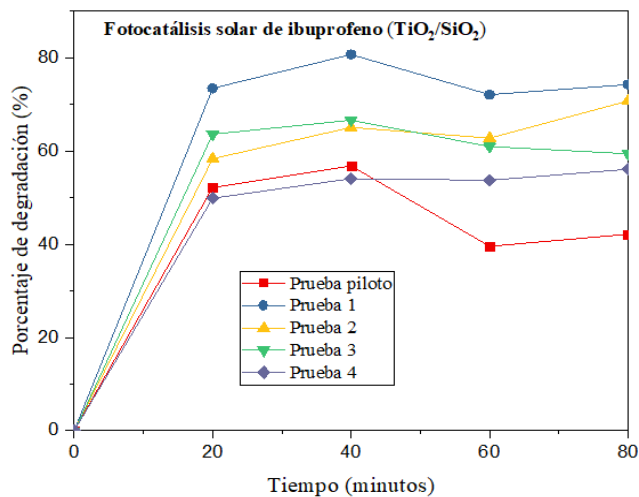


Figura 58. Fotocatálisis solar de ibuprofeno a) Porcentaje de degradación vs Tiempo, b) C/C_0 vs Tiempo

Tabla 26 Porcentaje de degradación de ibuprofeno (Pruebas diferentes)

	Tiempo de residencia (min)	Degradación de ibuprofeno (%)	Radiación máxima promedio (W/m ²)	Índice UV	*H ₂ O ₂
Prueba 0	15	47.66±8.15	584.74±12.16	4	
Prueba 1	15	75.11±3.81	988.75±2.14	8	
Prueba 2	15	74.22±5.14	957.68±10.52	8	x
Prueba 3	15	62.62±3.16	931.11±5.16	7	
Prueba 4	15	59.78±2.59	941.23±4.56	7	x

Al asociar las Figuras 54 y 56 con la Tabla 26 se puede observar el porcentaje de degradación de ibuprofeno a lo largo del tiempo bajo diferentes condiciones de operación. Estas diferencias están relacionadas con la radiación solar máxima registrada durante cada experimento. En la prueba 2 y la prueba 4 se añadió peróxido de hidrógeno (H₂O₂) como agente oxidante (Suárez Escobar *et al*; 2021).

Por ejemplo, en la prueba 0 se observa un menor porcentaje de degradación en comparación con las demás pruebas, debido a que como muestra la figura 55, ese día se registró una radiación solar intermitente debido a la presencia de nubes, lo que afecta directamente la eficiencia del proceso fotocatalítico (Salcedo M *et al*; 2021). Sin embargo, a pesar de ello, la degradación alcanzó valores entre el 40% y el 56%.

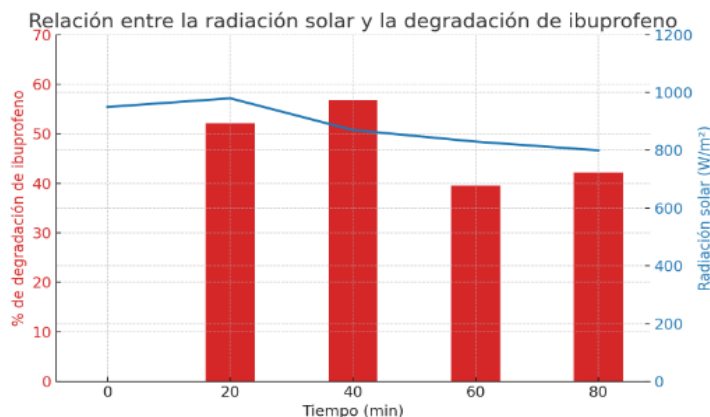


Figura 59. Porcentaje de degradación de ibuprofeno vs radiación solar (Prueba 0)

En contraste, en las demás pruebas, donde hubo menor presencia de nubosidad, se obtuvo porcentajes de degradación mayores (Tabla 26) y Figura 59.

Cabe señalar que el proceso se llevó a cabo de forma continua, por lo que se esperaría un comportamiento similar entre los experimentos.

14.6.2 Biocatálisis enzimática

Para evaluar la transformación de los productos generados tras el tratamiento fotocatalítico solar, se realizó una etapa de degradación enzimática utilizando *p-difenol:oxígeno oxidoreductasa (lacasa)* y *peroxidasa de tipo UPO*. Se acondicionaron seis vasos de reacción bajo condiciones controladas (Figura 60) con los siguientes tratamientos: (1) Ibuprofeno puro con lacasa, (2) Efluente tratado por fotocatalisis solar con lacasa, (3) Efluente tratado sin enzimas (grupo control), (4) Ibuprofeno puro con UPO, (5) Efluente tratado con UPO, y (6) Efluente tratado sin enzimas (Figura 60). La concentración enzimática fue de 1000 U/L para lacasa y 500 U/L para UPO; en este último caso, se añadió peróxido de hidrógeno (H_2O_2) de forma manual, ajustando la tasa de dosificación con base en la concentración inicial del contaminante.

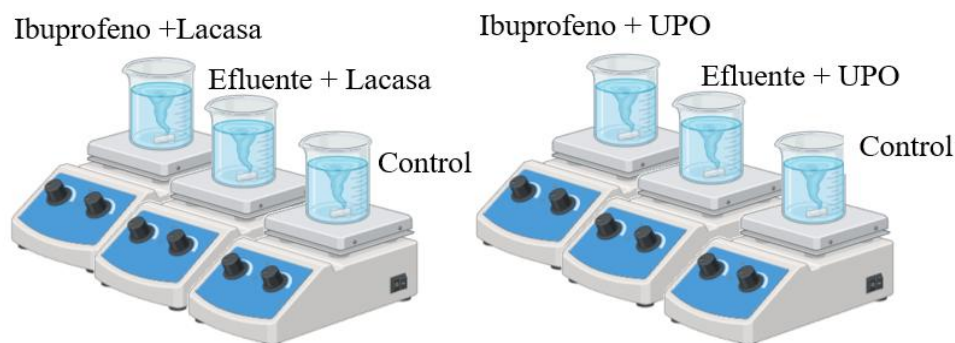


Figura 60. Ensayos de biocatálisis enzimática para la degradación de ibuprofeno

La actividad de la lacasa se determinó mediante la oxidación del sustrato ABTS (2,2'-azino-bis(3-etilbenzotiazolina-6-sulfónico)) en tampón McIlvaine (pH 3). El tampón se preparó disolviendo 1.67 g de ácido cítrico y 0.58 g de Na_2HPO_4 en 160 mL de agua destilada, ajustando el pH y aforando a 200 mL. La solución de ABTS (0.267 mM) se preparó disolviendo 18.3 mg en 25 mL del tampón. Para la medición de la actividad enzimática, se diluyó una muestra del medio de reacción 1:10, se colocaron 50 μ L en una placa de 96 pocillos, se añadió la solución ABTS y se inició la lectura de inmediato en un lector de microplacas. Los datos obtenidos fueron procesados en Excel para el cálculo de la actividad relativa.

La aplicación de biocatálisis enzimática posterior al proceso fotocatalítico es de gran importancia para lograr una degradación más completa y específica de contaminantes orgánicas. En particular, el uso de enzimas como las peroxigenasas (UPO) y lacasas permite atacar subproductos intermedios generados durante la fotocatalisis, muchos de los cuales pueden mantener actividad tóxica o ser recalcitrantes [9]. Estas enzimas actúan en condiciones suaves (Temperatura y pH controlados), son altamente selectivas y contribuyen a una mayor mineralización del contaminante, mejorando así la eficiencia global del tratamiento y reduciendo el impacto ambiental del efluente final (Wang *et al*, 2019).

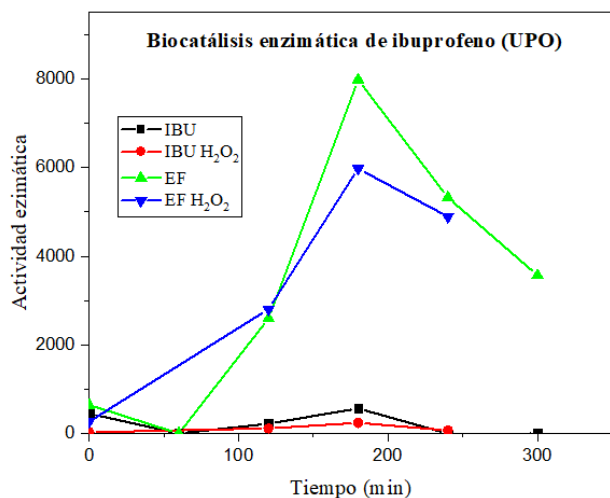


Figura 61. Biocatálisis enzimática de ibuprofeno (UPO)

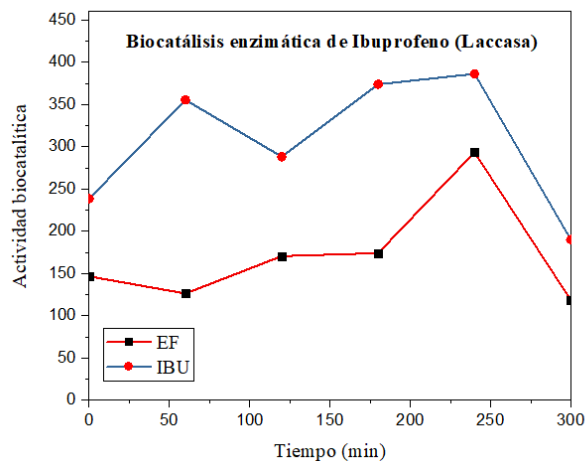


Figura 62. Biocatálisis enzimática de ibuprofeno (Lacasa)

En la figura 61 se observa que la enzima UPO presenta una baja actividad enzimática frente al ibuprofeno puro en comparación con a actividad registrada en el efluente tratado mediante fotocatalísis. Esta diferencia puede atribuirse a la presencia de peróxido de hidrógeno (H₂O₂) generado durante el proceso fotocatalítico (De Wilt *et al*; 2020).

Por otro lado, la Figura 62 muestra un comportamiento distinto para la enzima lacasa: en este caso, el ibuprofeno puro presenta mayor actividad enzimática que el efluente tratado por fotocatalísis. Esto puede explicarse porque la lacasa actúa preferentemente sobre grupos fenólicos y estructuras aromáticas presentes en el ibuprofeno original (Zhang *et al*; 2020).

Tabla 27 Porcentajes de degradación de cada grupo experimental determinados mediante HPLC

	Lacasa		UPO		
	Ibuprofeno	Efluente	Ibuprofeno	Efluente	Control
INICIAL	0	0	0	0	0
FINAL	22.15	45.34	98.33	67.54	10.14±0.76

En la Tabla 27 y Figura 62 se observa que la enzima UPO logra un porcentaje de degradación del 98 % en el ibuprofeno puro, mientras que en el efluente tratado por fotocatalísis la degradación es del 67 %. De acuerdo a (Hess *et al* 2022) esto podría explicarse porque el ibuprofeno original presenta una estructura más reconocible y susceptible a la acción de la UPO, facilitando su transformación completa. En cambio, el efluente tratado podría contener subproductos generados por la fotocatalísis Aunque estos subproductos no pudieron detectarse con el método de espectrofotometría UV-Vis, posiblemente porque no absorben luz en el mismo rango que el ibuprofeno, su presencia se puede intuir al observar la disminución en el carbono orgánico total.

Por otro lado, la lacasa muestra un comportamiento distinto, con un 45.34% de degradación en el efluente tratado y 22.15% en el ibuprofeno puro, Este resultado indica que esta enzima actúa sobre intermediarios oxidados o compuestos fenólicos presentes entre los subproductos de la fotocatálisis, los cuales son más adecuados en su mecanismo de oxidación (**Singh *et al*;2022**).

Estos resultados muestran la importancia de combinar tratamientos fotocatalíticos y biocatalíticos, con el fin de entender la composición del contaminante y como este puede ser modificado cuando se añaden enzimas, afectando su eficacia posterior a los tratamientos aplicados.