

Diseño de un sistema de extracción para la remoción de contaminantes de problemática emergente (CECs) de las aguas grises

D. Yáñez¹, V. Herrera¹, J. Romero², E. Quijada-Maldonado¹, R. Abejon¹

¹Laboratorio de Intensificación de Procesos de Separación, Departamento de Ingeniería Química, Universidad de Santiago de Chile, Santiago, Chile.

²Laboratorio de Procesos de Separación por Membranas, Departamento de Ingeniería Química, Universidad de Santiago de Chile, Santiago, Chile.
diana.yanez@usach.cl

INTRODUCCIÓN

Las aguas grises, originadas por duchas, lavabos y lavanderías, representan aproximadamente el 70% del volumen total de agua en interiores y son una fuente propicia para la reutilización no potable in situ. Aunque contienen niveles significativamente más bajos de patógenos, nutrientes y materia orgánica en comparación con las aguas negras (efluentes de inodoros) (Glover et al., 2021).

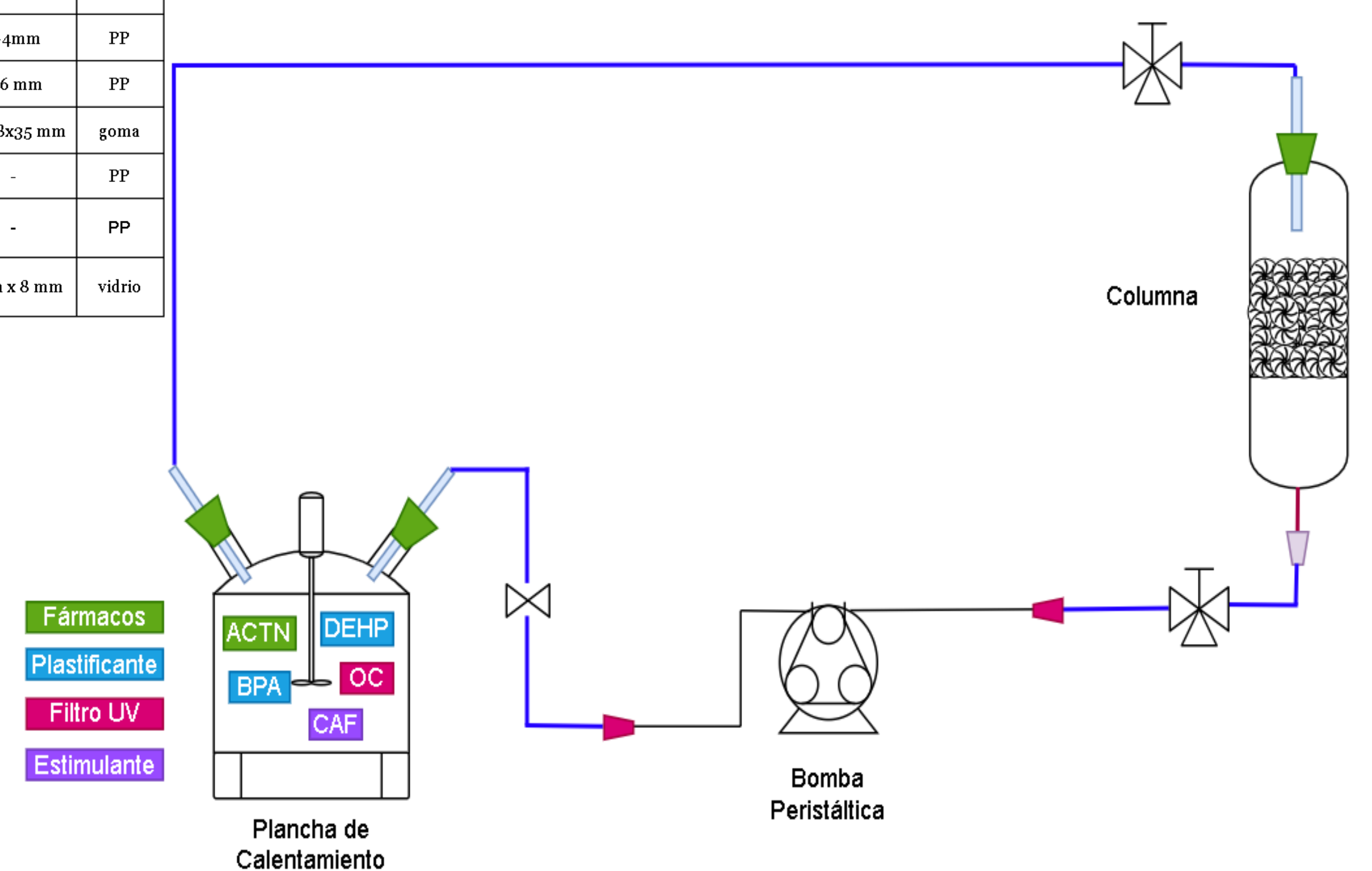
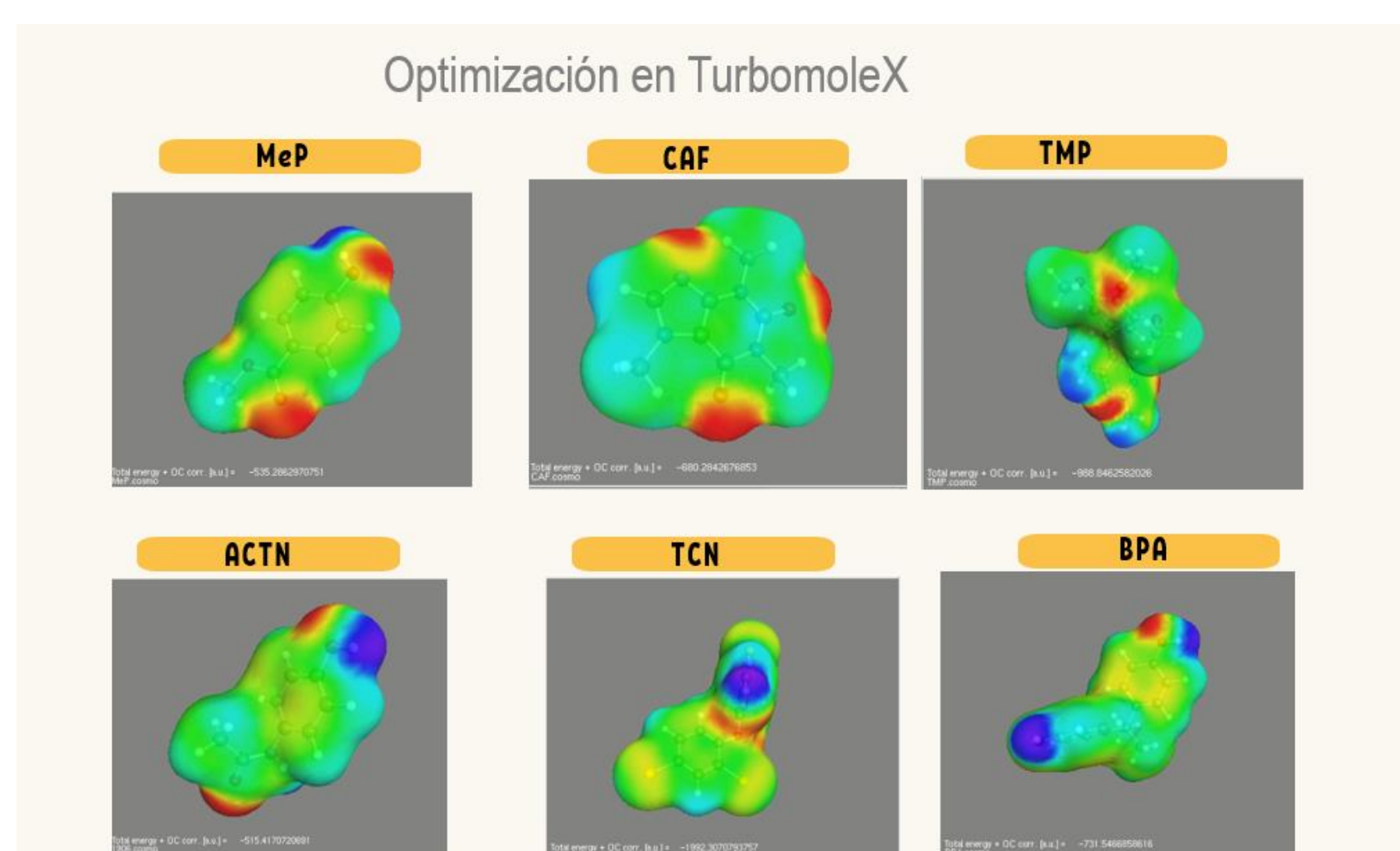
Las aguas grises presentan contaminantes de problemática emergente (CECs) en concentraciones muy bajas, a menudo medidas en partes por billón (ppb) o partes por trillón (ppt). La eliminación eficiente de estos contaminantes es crucial para la salud humana como para el medioambiente.



METODOLOGÍA

En este estudio se seleccionó teóricamente un polímero para su aplicación en un proceso de adsorción para la eliminación de contaminantes de problemática emergente (CECs), utilizando las predicciones de COSMO-RS. Se realizó la predicción y el cálculo del coeficiente de actividad mediante COSMO-RS. Además, se optimizaron 8 CECs de mayor importancia presentes en aguas grises utilizando TMoleX para seleccionar diferentes polímeros. Los CECs se optimizaron utilizando TurboMole® con un nivel de teoría de polarización de valencia de triple zeta (TZVP) y utilizando un conjunto de bases de Becke, 3 parámetros, Lee-Yang-Parr (B3LYP).

Simbología	Definición	Dimensiones	Material
	Manguera	5x8 mm	silicona
	Manguera	2x4 mm	silicona
	Manguera	8x12 mm	silicona
	Reductor	3-4 mm	PP
	Reductor	3-6 mm	PP
	Tapón	31x38x35 mm	goma
	Valvula 2 vias	-	PP
	Valvula 3 vias	-	PP
	Tubo de vidrio	6 mm x 8 mm	vidrio



RESULTADOS

Los resultados del screening del material polimérico se presentan en la Tabla A.

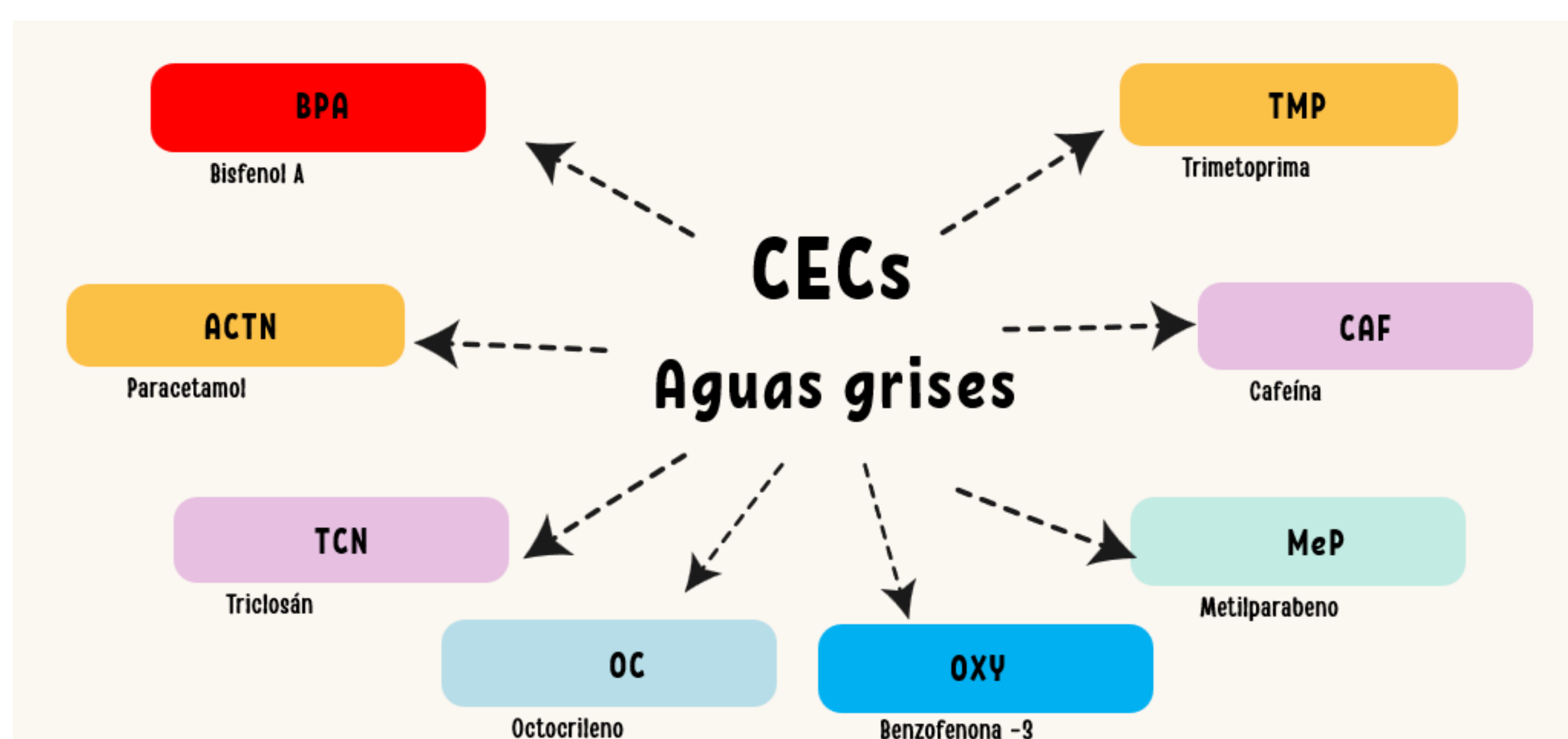
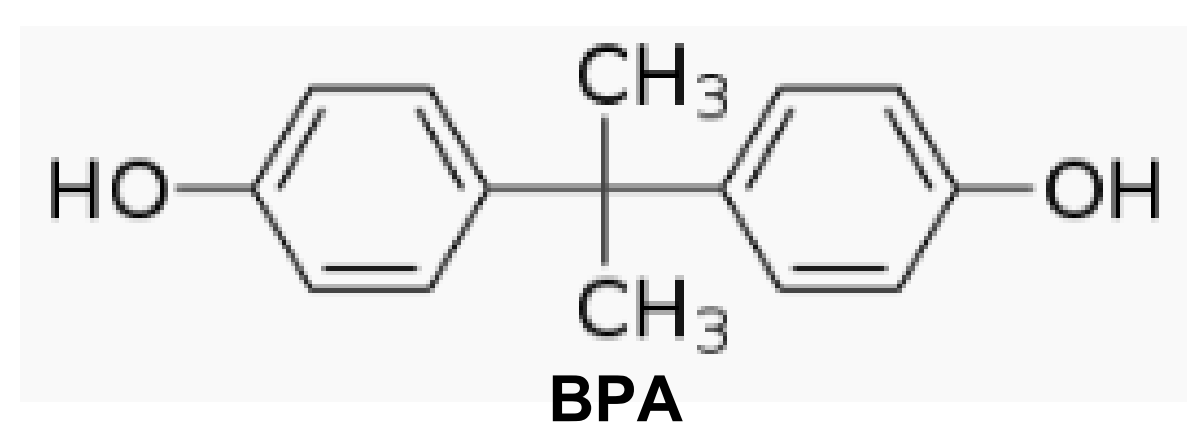


Tabla A. Resultados del screening del polímero en COSMO-RS

Screening del polímero								
Predicción [log P]	Analito	COSMO-RS					Datos toxicidad	Gráfico ln [Y]
		PDMS	PP	PET-G	PVC	PLA		
2,65207	BPA [1,2 ppb]	-8,363	-3,243	-1,065	4,743	-1,598	irrita vias respiratorias perjudicial a la fertilidad	
-0,5739	ACTN [1,130 ppb]	1,775	3,688	3,447	7,828	121,308		
4,37142	TCN [36 ppb]	-8,29	-4,909	-3,112	0,952	-3,6682	peligros organismos acuáticos	
0,96666	TMP [0,06 ppb]	4,104	1,608	-0,241	2,471	-1,028	cancerígeno	
-0,60738	CAF [450 ppb]	3,62	2,016	-0,022	0,912	-0,9001	toxicidad aguda	
1,20049	MeP [120 ppb]	-3,423	-0,397	0,461	4,182	-0,2728	tóxicos para organismos acuáticos	
2,03736	OXY [85 ppb]	-2,2503	0,4986	0,3697	4,182	-0,1972		
6,1999	OC [85 ppb]	1,1227	0,384	0,4642	0,1885	-0,052	nocivo para organismos acuáticos	

CONCLUSIONES

El screening mostró que el PET-G, PLA y PDMS presentaron los coeficientes de actividad más bajos para la mayoría de los compuestos CECs presentes en el agua gris. Finalmente, el análisis teórico de las estructuras en COSMO-RS reveló que el polímero que presenta mayor afinidad para aplicar el proceso de adsorción es el PDMS para el caso específico del BPA.

REFERENCIAS

Ahmed, M. J., & Hameed, B. H. (2018). Removal of emerging pharmaceutical contaminants by adsorption in a fixed-bed column: A review. *Ecotoxicology and Environmental Safety*, 149(October 2017)

Glover, C. M., Liu, Y., & Liu, J. (2021). Assessing the risk from trace organic contaminants released via greywater irrigation to the aquatic environment. *Water Research*, b (December 2020)

AGRADECIMIENTOS

Agradecimientos a la ANID (Agencia Nacional de Investigación y Desarrollo) por otorgar el financiamiento al Proyecto Anillo ATE220024.