



ANEXO 1

FORMATO PARA LA PRESENTACIÓN DE PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN
CON EL FINANCIAMIENTO DEL FEDU

1. Título del proyecto

DETERMINACIÓN DE LAS CONSTANTES DE PARTICIÓN, ASOCIACIÓN Y DISTRIBUCIÓN DE METALES ALCALINOS EN UN SISTEMA DE SOLVENTES AGUA-SOLVENTE ORGÁNICO

2. Área de Investigación

Área de investigación	Línea de Investigación	Disciplina OCDE

3. Duración del proyecto (meses)

12 meses

4. Tipo de proyecto

<u>Individual</u>	<input type="radio"/>
<u>Multidisciplinario</u>	<input checked="" type="radio"/>
<u>Director de tesis pregrado</u>	<input type="radio"/>

4. Datos de los integrantes del proyecto

Apellidos y Nombres	APARICIO ARAGON, WALTHER BENIGNIO
Escuela Profesional	INGENIERIA QUIMICA
Celular	930984482
Correo Electrónico	waparicio@unap.edu.pe
Apellidos y Nombres	BARREDA DEL ARROYO, VICTOR ATILIO
Escuela Profesional	INGENIERIA QUIMICA
Celular	999512122
Correo Electrónico	vbarreda@unap.edu.pe

- I. Título (El proyecto de tesis debe llevar un título que exprese en forma sintética su contenido, haciendo referencia en lo posible, al resultado final que se pretende lograr. Máx. palabras 25)

DETERMINACIÓN DE LAS CONSTANTES DE PARTICIÓN, ASOCIACIÓN Y DISTRIBUCIÓN DE METALES ALCALINOS EN UN SISTEMA DE SOLVENTES AGUA-SOLVENTE ORGÁNICO

- II. Resumen del Proyecto de Tesis (Debe ser suficientemente informativo, presentando -igual que un trabajo científico- una descripción de los principales puntos que se abordarán, objetivos, metodología y resultados que se esperan)



En la naturaleza existe en forma natural en suelos, y agua sales de metales alcalinos como sodio, potasio, litio, etc. Que en muchos casos se considera como contaminantes ambientales cuando excede de los límites máximos permisibles, una forma de remediación es mediante la técnica de extracción líquido-líquido, por lo que es imperante el conocimiento de la distribución de estas sales cuando mezclamos cuando utilizamos un solvente orgánico como agente extractor, estos resultados servirán para proponer una tecnología de extracción de estas sales para descontaminar ya sea el agua o el suelo.

III. Palabras claves (Keywords) (Colocadas en orden de importancia. Máx. palabras: cinco)

Alcalinos, extracción, partición, solvente, orgánico

IV. Justificación del proyecto (Describa el problema y su relevancia como objeto de investigación. Es importante una clara definición y delimitación del problema que abordará la investigación, ya que temas cuya definición es difusa o amplísima son difíciles de evaluar y desarrollar)

La salinización de suelos es un problema latente debido a la escasez de agua natural y por otro lado existe aguas saladas en la región como las salineras de San Juan de Salinas Azángaro que con el paso de los años aumenta la concentración de estas sales alcalinas, por lo que es imperante la necesidad de desarrollar nuevas tecnologías para mitigar este problema ambiental, por lo que es de necesidad conocer la destrucción natural de estas en un sistema de solventes agua-solvente orgánico y seleccionar el solvente adecuado para la remoción de estos contaminantes.

V. Antecedentes del proyecto (Incluya el estado actual del conocimiento en el ámbito nacional e internacional. La revisión bibliográfica debe incluir en lo posible artículos científicos actuales, para evidenciar el conocimiento existente y el aporte de la Tesis propuesta. Esto es importante para el futuro artículo que resultará como producto de este trabajo)

Weber et al. (1986) realizaron la investigación Determinación de coeficientes de partición y solubilidades acuosas por cromatografía de fase inversa-I. En la cual las solubilidades en agua y los coeficientes de partición octanol/agua se utilizan ampliamente para predecir fenómenos de partición y bioconcentración de contaminantes orgánicos hidrofóbicos en sistemas acuosos. Donde el primero artículo fue una serie de dos partes que describe la aplicación de la cromatografía líquida de fase inversa de alto rendimiento (HPRPLC) para la estimación indirecta de estos dos parámetros fisicoquímicos para facilitar las predicciones del transporte y el destino ambiental de los compuestos orgánicos. Para la primera parte, se analizaron los factores termodinámicos que controlan los procesos de partición, las solubilidades en agua y el comportamiento de retención de fase inversa, y se resumen los modelos para interrelacionar estas tres propiedades. Para segunda parte presenta los resultados de la solubilidad acuosa y las predicciones del coeficiente de partición octanol/agua para una serie de contaminantes orgánicos a partir de mediciones de su comportamiento HPRPLC, y compara las capacidades de modelado de algunas de las ecuaciones teóricas de partición/solubilidad desarrolladas en el primer artículo.

Chin et al.(1986) en la investigación titulada Determinación de coeficientes de partición y solubilidades acuosas por cromatografía de fase inversa-II. La Parte I de esta serie examinó los principios químicos y termodinámicos subyacentes a las características de solubilidad y partición de compuestos orgánicos no electrolíticos en sistemas acuosos. Además, consideró aquellos conceptos que interrelacionan los fenómenos de solubilidad y partición con el comportamiento retentivo en la cromatografía líquida de fase inversa. Asimismo, desarrollaron modelos



conceptuales y predictivos que correlacionan la solubilidad, la partición octanol/agua y los tiempos de retención de fase inversa. Para la Parte II de la serie evaluó las capacidades predictivas relativas de estos modelos para una amplia gama de diferentes clases de contaminantes orgánicos. Los resultados revelaron que los modelos de cromatografía líquida de fase inversa desarrollados en la Parte I proporcionan buenas estimaciones de los coeficientes de octanol/agua y solubilidades acuosas a partir de tiempos de retención cromatográficos determinados experimentalmente. También se encontró que los modelos estructurados para predecir solubilidades acuosas a partir de los datos del coeficiente de partición octanol/agua proporcionan estimaciones razonables, pero requieren como entrada parámetros físicos y químicos que no son fácilmente accesibles.

Gavara et al. (1996) en la investigación Métodos para determinar el coeficiente de partición de Compuestos orgánico en sistemas de agua/poliestireno, se emplearon tres técnicas experimentales para determinar el coeficiente de reparto (K) de tolueno, d-limoneno y acetato de etilo entre agua y poliestireno. Para esta técnicas fueron la cromatografía de gases, la cromatografía de permeación en gel (PG) (un enfoque novedoso) y un procedimiento de desorción térmica de extracción térmica dinámica. Asimismo, se determinaron los resultados comparativos de los valores de K, el rango de aplicabilidad y las limitaciones de cada técnica. La PG era muy adecuada para sistemas que mostraban valores altos de K, mientras que la cromatografía de permeación en gel era excelente para la medición directa de compuestos adsorbidos. Se incluyeron análisis estadísticos de resultados y cinética del proceso de sorción. Los valores de K fueron 800 para tolueno, 5100 para d-limoneno y 1,9 para acetato de etilo.

Noguez Méndez et al. (2009) desarrollaron un artículo Determinación del coeficiente de partición y del pKa de la 4,4'-diaminodifenilsulfona a partir de datos de solubilidad, la quimioterapia de la lepra se basó en 4,4'-diaminodifenilsulfona, por lo que su coeficiente de partición y pKa de los datos de solubilidad son importantes. Usando el método propuesto por Zimmermann, se obtuvo un modelo de segundo orden que ajusta adecuadamente los datos experimentales con un $1/PC = 9 \times 10^{-14} c^2 + 5 \times 10^{-8} c + 0.9829$ y $r^2 = 0.9997$, el valor obtenido para el coeficiente de reparto a 37°C (1-octanol/tampón) fueron $PC = 1,0174 \text{ mg/mL}$ y $pKa_1 = 8,6916$ y $pKa_2 = 6,2551$. El método analítico desarrollado por HPLC para la cuantificación del analito fue lineal, preciso y exacto en el rango de concentración 0.5 - 10 mg/mL con una intersección 0.9848, pendiente 0.3638 y $r^2 = 0.9999$.

Ocampo Barrero et al. (2016) en el artículo titulado Coeficientes de partición de mercurio en lixiviados del relleno sanitario la esmeralda. Tuvo como objetivo la determinación del coeficiente de partición (K_d) de mercurio (Hg) en cinco muestras de lixiviado provenientes del relleno sanitario La Esmeralda, de la ciudad de Manizales (Caldas – Colombia). La concentración de mercurio se cuantificó empleando espectroscopia de absorción atómica de vapor frío. Dada la elevada cantidad de materia orgánica presente en los lixiviados y las interferencias por efectos de la matriz, se empleó el método de adición de estándares para validar la metodología usada en la cuantificación de mercurio. El coeficiente de partición de mercurio en los lixiviados entre 222.4 y 3460.2 L/kg confirma la composición variable de los mismos, dado el amplio intervalo encontrado en la concentración de Hg total (71.4 – 1336.8 $\mu\text{g/L}$) y sólidos suspendidos (442 – 1310 mg/L). Valores de $\log K_d$ entre 2.35 y 2.84 se asocian a muestras de lixiviado en las cuales el Hg tiende a estar disuelto, en tanto que valores de $\log K_d$ entre 3.41 y 3.54 indican mayor afinidad del Hg a adsorberse sobre los sólidos suspendidos. Cuando el pH del lixiviado disminuye a 6, se modifica la distribución de las especies de mercurio en las dos fases, aumentando la concentración de mercurio disuelto (K_d disminuye). A pH superior a 8, la relación de la concentración de Hg adsorbido y disuelto permanece constante (K_d no varía).

Mascioli et al. (Mascioli et al., 2015) en la investigación titulado Determinación del coeficiente de partición de Zn en sedimentos loessicos y su utilización en la simulación de transporte reactivo, el coeficiente de partición (K_d) de un elemento expresa la relación existente entre la concentración del mismo adsorbida en la superficie sólida y la concentración que permanece en solución. El coeficiente de partición K_d aparece entonces como un factor de suma importancia en el transporte reactivo, representando el término fuente-sumidero y explicando la diferencia de velocidad en el desplazamiento de los elementos con valores de $K_d > 0$ (no conservativos) con respecto a la velocidad del agua. En esta investigación se determinó el valor de K_d para el elemento Zn en sedimentos limo-loessoides que constituyen el acuífero



pampeano. La metodología fue la realización de ensayos tipo batch. Los resultados obtenidos se ajustaron a la isoterma de Freundlich, con un valor de $K_F=300,95 \text{ ml.g}^{-1}$ y un exponente b de 2,489. Este valor fue utilizado para la simulación el transporte reactivo en la zona de ubicación de rellenos sanitarios en la ciudad de Mar del lata, utilizando el programa Visual Modflow. Se ha obtenido una pluma de concentración de Zn a partir de la fuente puntual, que muestra la muy baja movilidad del Zn en las condiciones oxidantes de estos sedimentos.

De Namor et al. (2005) en la investigación titulada Partición y transferencia de clorofenoxiácidos (herbicidas) en agua-medios no acuosos, el coeficiente de partición (K_d) de un elemento expresa la relación existente entre la concentración del mismo adsorbida en la superficie sólida y la concentración que permanece en solución, por tanto el coeficiente de partición K_d aparece entonces como un factor de suma importancia en el transporte reactivo, representando el término fuente-sumidero y explicando la diferencia de velocidad en el desplazamiento de los elementos con valores de $K_d > 0$ (no conservativos) con respecto a la velocidad del agua. Asimismo, se determinó el valor de K_d para el elemento Zn en sedimentos limo-loessoides que constituyen el acuífero pampeano y metodología empleada fue la realización de ensayos tipo batch. Los resultados obtenidos se ajustaron a la isoterma de Freundlich, con un valor de $K_F=300,95 \text{ ml.g}^{-1}$ y un exponente b de 2,489. Este valor fue utilizado para la simulación el transporte reactivo en la zona de ubicación de rellenos sanitarios en la ciudad de Mar de la lata, utilizando el programa Visual Modflow. Se ha obtenido una pluma de concentración de Zn a partir de la fuente puntual, que muestra la muy baja movilidad del Zn en las condiciones oxidantes de estos sedimentos.

Oberhauser et al., (1959) En el artículo titulado II. Extracción de nitrato de uranilo por solventes y la determinación de los coeficientes de partición, se ensaya la extracción de nitrato de uranilo con diversos solventes. Realizándose las siguientes acciones como la determinación de las condiciones óptimas de extracción con éter etílico, alcohol amílico y acetato de etilo en presencia de ácido nítrico y de algunos nitratos favorecedores de extracción, indicando los respectivos coeficientes de partición. También, se establece que los nitratos favorecen en mayor grado que el ácido nítrico la extracción del nitrato de uranilo con los solventes citados y en la extracción con éter, los favorecedores de mayor acción son los nitratos de sodio y potasio. Usando como solvente al acetato de etilo, el favorecedor de mayor acción es el nitrato de aluminio. Con alcohol amílico, el nitrato más efectivo es el de potasio. Resultando, el mejor solvente extractor entre los tres que fueron ensayados, el acetato de etilo.

Manuel Padro (2014) en la investigación titulada Coeficientes de Partición entre líquidos iónicos y agua. Con aplicación a la microextracción dispersiva de compuestos antichagásicos en muestras biológicas, el objetivo fue: Obtener coeficientes de partición para analitos de diversa naturaleza química entre líquidos iónicos a temperatura ambiente y soluciones acuosas. Asimismo, se emplearon estos coeficientes en el "Modelo del Parámetro de Solvatación" con la finalidad de predecir extracciones desde matrices acuosas con altos factores de recuperación. Los resultados obtenidos en la "microextracción líquido-líquido iónico dispersiva" de compuestos antichagásicos (benznidazol y nifurtimox) presentes en plasma humano y leche materna.

VI. Hipótesis del trabajo (Es el aporte proyectado de la investigación en la solución del problema)

¿Conocido las constantes de partición, asociación y distribución de las sales de metales alcalinos en un sistema de solventes agua-solvente orgánico, es posible seleccionar un solvente orgánico que tenga mayor afinidad con estas sales?

VII. Objetivo general



Determinar de la constante de partición, asociación y distribución de metales alcalinos en un sistema solventes agua-solvente orgánico

VIII. Objetivos específicos

1. Obtener constantes de partición y asociación a 25 °C entre el agua y solvente orgánico.
2. Determinar parámetros de solvente para los líquidos iónicos estudiados a fin de interpretar los resultados.

IX. Metodología de investigación (Describir el(los) método(s) científico(s) que se empleará(n) para alcanzar los objetivos específicos, en forma coherente a la hipótesis de la investigación. Sustentar, con base bibliográfica, la pertinencia del(los) método(s) en términos de la representatividad de la muestra y de los resultados que se esperan alcanzar. Incluir los análisis estadísticos a utilizar)

Para la realización del presente trabajo de investigación, se aplicará la metodología experimental aplicada de análisis prueba error, lo cual consta de los siguientes pasos.

- (1) Reactivos Químicos, (metales alcalinos, agua destilada, solvente orgánico, ácido pícrico, EDTA, indicador ácido base).
- (2) Instrumentos de laboratorio, (mufla, agitar magnético, material volumétrico, espectroscopia UV).
- (3) Procedimiento experimental: preparar soluciones de patrón de metales alcalinos en agua, estandarizar la concentración de los metales alcalinos en agua, en partes iguales mezclar con el solvente orgánico seleccionado, dejar en reposo por 24 horas, sacar alícuotas de la muestra de agua y analizar por espectroscopia UV la concentración final.
- (4) Aplicar análisis estadístico de regresión lineal sobre el modelo matemático desarrollado y determinar las constantes involucradas.

X. Referencias (Listar las citas bibliográficas con el estilo adecuado a su especialidad)

- Chin, Y. P., Weber, W. J., & Voice, T. C. (1986). Determination of partition coefficients and aqueous solubilities by reverse phase chromatography-II. Evaluation of partitioning and solubility models. *Water Research*, 20(11), 1443-1450. [https://doi.org/10.1016/0043-1354\(86\)90144-2](https://doi.org/10.1016/0043-1354(86)90144-2)
- De Namor, A. F. D., Zvietcovich-Guerra, J. A., Grachev, V., Aparicio-Aragón, W. B., Zegarra-Fernandez, K., & Sueros-Velarde, F. J. (2005). Partition and transfer of chlorophenoxy acids (herbicides) in water-non-aqueous media. *New Journal of Chemistry*, 29(8), 1072-1076. <https://doi.org/10.1039/b504024h>
- Gavara, R., Hernandez, R. J., & Giacín, J. (1996). Methods to determine partition coefficient of organic compounds in water/polystyrene systems. *Journal of Food Science*, 61(5), 947-952. <https://doi.org/10.1111/j.1365-2621.1996.tb10908.x>
- Manuel Padro, J. (2014). *Coefficientes de Partición entre líquidos iónicos y agua. Aplicación a la microextracción dispersiva de compuestos antichagásicos en muestras biológicas*. <https://core.ac.uk/download/pdf/19939402.pdf>
- Mascioli, S., Martínez, D., & Bocanegra, E. (2015). *Determinación del coeficiente de partición de Zn en sedimentos*. *March*. https://www.researchgate.net/publication/268436469_DETERMINACION_DEL_COEFICIENTE_DE_PARTICION_DE_ZN_EN_SEDIMENTOS_LOESSICOS_Y_SU_UTILIZACION_EN_LA_SIMULACION_DE_TRANSPORTE_REACTIVO?fbclid=IWAR1



- 2UedcWr_fKYyBZ1EFTj7XRr-3Y3p_ELa9lpVpkoUso1cbAx_Hh52diAM
- Noguez Méndez, N. A., Rubio M, A., Rojas O, I., & Chávez C, Á. E. (2009). Determinación del coeficiente de partición y del pKa de la 4,4'-diaminodifenilsulfona a partir de datos de solubilidad. *Revista Mexicana de Ciencias Farmaceuticas*, 40(1), 12-18.
- Oberhauser, F., Peirano, P., & Báez, H. (1959). II. Extracción de nitrato de uranilo por solventes y la determinación de los coeficientes de partición. En *Anales de la Universidad de Chile* (Vol. 0, Número 114, p. Pág. 32-34-34). <https://doi.org/10.5354/anuc.v0i114.18794>
- Ocampo Barrero, M. F., Londoño Carvajal, A., Giraldo Gómez, G. I., & Sanabria González, N. R. (2016). Coeficientes de partición de mercurio en lixiviados del relleno sanitario La Esmeralda. *Revista Facultad de Ciencias Básicas*, 12(1), 56-65. <https://doi.org/10.18359/rfcb.1854>
- Weber, W. J., Chin, Y. P., & Rice, C. P. (1986). Determination of partition coefficients and aqueous solubilities by reverse phase chromatography-I. Theory and background. *Water Research*, 20(11), 1433-1442. [https://doi.org/10.1016/0043-1354\(86\)90143-0](https://doi.org/10.1016/0043-1354(86)90143-0)

XI. Uso de los resultados y contribuciones del proyecto (Señalar el posible uso de los resultados y la contribución de los mismos)

Publicación de un artículo científica en una revista de impacto

XII. Impactos esperados

i. Impactos en Ciencia y Tecnología

Determinar de la constante de partición, asociación y distribución de metales alcalinos en un sistema solventes agua-solvente orgánico

ii. Impactos económicos

La posibilidad de desarrollar una patente.

iii. Impactos sociales

Seleccionar un solvente orgánico que tenga mayor afinidad con estas sales

iv. Impactos ambientales

Utilidad de los solventes orgánicos

XIII. Recursos necesarios (Infraestructura, equipos y principales tecnologías en uso relacionadas con la temática del proyecto, señale medios y recursos para realizar el proyecto)

(1) Laboratorios de la Facultad de Ingeniería Química.



- (2) Equipos de espectroscopia con que cuenta la facultad de Ingeniería Química
- (3) Recursos humanos capacitado
- (4) Aportes del FEDU

XIV. Localización del proyecto (indicar donde se llevará a cabo el proyecto)

Universidad Nacional del Altiplano-Puno.
Facultad de Ingeniería Química
Escuela Profesional de Ingeniería Química
Laboratorio de Control de calidad

XV. Cronograma de actividades

Actividad	Trimestres											
	E	F	M	A	M	J	J	A	S	O	N	D
Recopilación de Información	X	X	X									
Pruebas experimentales				X	X	X	X	X	X			
Interpretación de resultados							X	X	X	X	X	
Redacción y presentación del informe final												X

XVI. Presupuesto

Descripción	Unidad de medida	Costo Unitario (S/.)	Cantidad	Costo total (S/.)
Papel bond 80 g	Millar	30.00	4	120.00
Material de escritorio	unidad	varios	100	500.00
Reactivos	volumen	-----	-----	4000.00
Costo de análisis	unidad	120.00	50	6000.00
imprevistos	-----	-----	-----	2000.00

TOTAL : S/ 12620.00