

UNIVERSIDAD NACIONAL DE INGENIERIA

FACULTAD DE CIENCIAS



TESIS

**“Aproximación numérica para la determinación de los
parámetros en la etapa de absorción de un proceso de
adsorción iónica basado en la tecnología de deionización
capacitiva”**

Para obtener el Título profesional de Licenciado en Física

Elaborado por:

Jhonatan Eliel Martinez Ore

ORCID: 0000-0001-5589-5057

Asesor:

Dr. Juan Martin Rodríguez Rodríguez

ORCID: 0000-0002-9887-6419

2024

Citar/How to cite	Martinez [1]
Referencia/Reference	[1] J. Martinez, " <i>Aproximación numérica para la determinación de los parámetros en la etapa de absorción de un proceso de adsorción iónica basado en la tecnología de deionización capacitiva</i> " [Tesis]. Lima (Perú): Universidad Nacional de Ingeniería, 2024.
Estilo/Style: IEEE (2020)	

Citar/How to cite	(Martinez, 2024)
Referencia/Reference	Martinez, J. (2024). <i>Aproximación numérica para la determinación de los parámetros en la etapa de absorción de un proceso de adsorción iónica basado en la tecnología de deionización capacitiva</i> . [Tesis, Universidad Nacional de Ingeniería]. Repositorio institucional Cybertesis UNI.
Estilo/Style: APA (7ma ed.)	

Dedicatoria

A Dios, a mi esposa, a mis padres y hermanos
que con su apoyo incondicional me alientan en el camino de la ciencia

Agradecimientos

A mi asesor por su guía y consejo, al laboratorio Centro para el Desarrollo de Materiales Avanzados y Nanotecnología (CEMAT-UNI) por brindarme las facilidades en el desarrollo de la tesis, a la facultad de Ciencias por ayudarme en mi formación como investigador dándome las herramientas en el desarrollo de mi aprendizaje.

Resumen

Los modelos son una herramienta importante con los que se pueden contrastar los datos obtenidos en laboratorio. En el caso de las celdas de deionización capacitiva, que debido a la morfología irregular de los electrodos resulta ser complejo modelar los fenómenos que se dan en el tratamiento de soluciones iónicas, que en este proceso migran los iones de la solución hacia el interior de la masa activa, que es el material que recubre la superficie de los electrodos.

En este trabajo, teniendo como base parámetros macroscópicos como la concentración inicial, el tiempo el flujo de solución, la concentración mínima y la masa activa se propone un modelo que pueda contribuir con el cálculo de otros parámetros microscópicos, que se tienen como referencia comparativa para las celdas de deionización capacitiva como son la capacidad de absorción de sal (SAC) y la tasa de absorción de sal (ASAR), Esto se comprueba con resultados experimentales obtenidos en nuestro laboratorio.

Abstract

Mathematical models are an important tool necessary for comparing data obtained in the laboratory. In the case of capacitive deionization, it is complex to model due to the morphology of the electrode, active mass, and other kinds of phenomena that occur in water treatment, produced by polarized ions dissolved in solution, due the action of electrical field induced by electrodes, such as electro-absorption, electro-capillary, solvation, among others.

In this work, using macroscopic parameters such as initial concentration, time, solution flux rate, minimum ion concentration, and the electrode active mass, a mathematical model is proposed. The aim is to contribute to the calculation of the area under the concentration curve, a characteristic curve of the electrochemical cell performed by the capacitive deionization process. This area is utilized in the calculation of salt absorption capacity (SAC) and average salt absorption rate (ASAR), parameters used for comparison with other electrochemical devices.

Tabla de Contenido

Resumen.....	v
Abstract.....	vi
Introducción	xii
I. Parte introductoria del trabajo	1
A. Generalidades	1
B. Problemática	2
C. Objetivos	3
1) Objetivo General	3
2) Objetivos específicos	4
II. Marco teórico	5
A. Antecedentes	5
B. Fenómenos asociados a la deionización capacitiva	10
1) Transporte iónico	10
2) Doble capa de carga	12
3) Deionización capacitiva	14
4) Masa activa	16
5) Celdas electroquímicas	21
6) Parámetros de caracterización de la celda.....	22
a) Capacidad de absorción de sal (SAC).....	22
b) Tasa de absorción de sal (ASAR).....	23
c) Parámetros energéticos.....	23
7) Propósitos de la deionización capacitiva.....	24
8) Modelos aplicados.....	24
III. Materiales, métodos de adquisición de datos y modelamiento ajuste exponencial y doble exponencial.....	27

A.	Materiales.....	27
1)	Celda de deionización capacitiva.....	27
B.	Evaluación y adquisición de datos.....	28
C.	Regresión logarítmica y logística.....	29
1)	Regresión logarítmica de la primera etapa del proceso de absorción iónica.....	29
2)	Regresión logística de la segunda etapa del proceso de absorción iónica.	31
IV.	Resultados y discusiones.....	34
A.	Ajuste exponencial (primera etapa)	34
B.	Ajuste doble exponencial (segunda etapa)	37
C.	Comparativa del modelo con los resultados experimentales.....	40
V.	Conclusiones.....	42
VI.	Referencias bibliográficas	43
	Anexos.....	48

Lista de Tablas

Tabla I.	Capacitancia específica de electrodos recubiertos por una película de carbón activado de distintos espesores.	19
Tabla II.	Capacitancia específica de carbón activado decorado con distintas masas de ZnO.	19
Tabla III.	Coeficientes relacionados a los ajustes logísticos para distintos caudales en el proceso de electroabsorción de la celda (0.4 M, 1.2 V).	36
Tabla IV.	Coeficientes asociados a la ecuación lineal de la función $q(V_{ol})$	39
Tabla V.	Comparativa con los datos experimentales y teóricos, para los parámetros de SAC y ASAR (85 ml/min, 0.4 M, 1.2 V).	42

Lista de Figuras

Figura I.	Curvas características de la variación de la concentración con respecto al tiempo (0.4 M, 1.2 V).	2
Figura II.	Línea de tiempo de la evolución de la deionización capacitiva.	6
Figura III.	Graficas comparativas del modelo y los resultados experimentales a) Experimental b) Modelo (20 mM, 0.42 ml/min).	11
Figura IV.	Concentración de los iones al interior de la celda a) 20mV b) 40mV c) 60mV.	12
Figura V.	Variación de la concentración de iones en el interior de una celda.	12
Figura VI.	Representación de los modelos a) Helmholtz b) Gouy-Chapman c) Chapman-Gouy-Stern.	13
Figura VII.	Proceso de tratamiento de agua salada por medio de electrodos bajo el principio de la deionización capacitiva.	15
Figura VIII.	a) nano partículas de ZnO b) “nanorods” de ZnO c) micropelículas de ZnO d) microesferas de ZnO.	17
Figura IX.	Carbón activado decorado con “nanorods” de ZnO.	19
Figura X.	Comparativa de la sal removida por compuestos de carbón activado decorado con diferentes nano estructuras de ZnO alimentado con una diferencia de potencial 1.2 V a) Absorción de sal b) Eficiencia porcentual.	20
Figura XI.	Voltamperograma para distintos espesores de la película de la masa activa 0.5 molar tasa de barrido 0.05 V/s: (a) 300 μm , (b) 400 μm , (c) 500 μm and (d) 600 μm .	21
Figura XII.	Celda electroquímica de deionización capacitiva.	22
Figura XIII.	Modelo de la variación de la concentración con respecto al tiempo propuesta por Zhao.	25
Figura XIV.	Comparativa de los resultados obtenidos por el modelo propuesto por Nordstrand.	26
Figura XV.	Variación del espesor del recubrimiento de la masa activa después del tratamiento térmico.	27
Figura XVI.	Diseño del electrodo de grafito recubierto por la masa activa (composite de CA).	28
Figura XVII.	Esquema de operación de la celda.	29

Figura XVIII.	Curvas características de absorción iónica, Izquierda absorción de iones a distintas temperaturas, Derecha comparativa de los datos experimentales de los datos experimentales y el modelo de Freundelich.	31
Figura XIX.	Curvas características experimentales para los modelos logístico y logístico modificado para un proceso de absorción iónica.	32
Figura XX.	Variación de la concentración con respecto al tiempo para la electroabsorción – fisorción (0.4 M, 1.2V).	34
Figura XXI.	Variación de la concentración con respecto al tiempo para la electroabsorción (0.4 M, 1.2V).	35
Figura XXII.	Ajuste logarítmico de la primera etapa de la absorción, usando como parámetro la relación de la concentración inicial y la concentración para un volumen de solución tratado por la celda ($\ln(C/C_0)$ vs $\ln(V_{0l})$) (0.4 M, 1.2 V, 85 ml/min).	37
Figura XXIII.	Ajuste lineal de la ecuación logística asociada a la segunda etapa del proceso de absorción usando como parámetro la relación de la concentración inicial y la concentración para un volumen de solución tratado por la celda por fisorción (0.4 M, 1.2 V, 55 ml/min).	38
Figura XXIV.	ajuste lineal de la ecuación logística asociada a la segunda etapa de la electroabsorción (0.4M, 1.2V, 85ml/min).	39
Figura XXV.	Comparativa de las tendencias del factor q_1 para los procesos de electroabsorción y fisorción para el rango de caudales de 45 ml/min – 105 ml/min (1.2 V, 0.4 M).	40
Figura XXVI.	Comparativa del modelo propuesto y los datos colectados en un proceso de tratamiento de deionización capacitiva electroabsorciónfisorción (45 ml/min, 0.4 M, 1.2 V).	41
Figura XXVII.	Comparativa del modelo propuesto y los datos colectados en un proceso de tratamiento de deionización capacitiva electroabsorción (45 ml/min, 0.4 M, 1.2 V).	41

Introducción

El comportamiento de la celda a nivel macroscópico se puede estudiar electroquímicamente mediante parámetros medibles, siendo principalmente la conductividad de la solución que ha sido tratada por la celda, tanto en las etapas de absorción y desorción de la celda, donde se observa la variación de la concentración con respecto al tiempo.

Esta variación está asociada a la saturación de los electrodos, es decir de la acumulación de cargas, en el que se pueden establecer cuatro etapas diferenciadas por la tendencia que tiene cada una de ellas, dos para la etapa de absorción y dos de desorción. En este trabajo solo se aborda el proceso de absorción, ya que en términos generales es el proceso que tiene mayor relevancia para la deionización capacitiva, esto permite obtener los parámetros de funcionamiento asociándolo al volumen de solución que ha sido tratado, con el que se puede calcular la cantidad de iones totales absorbidos en un ciclo de tratamiento del agua.

Es necesario acotar que, en una celda puede actuar bajo dos procesos diferenciados como son la electroabsorción y la fisisorción; para el primero la celda debe estar constantemente energizada, en consecuencia, las cargas están sometidos a una variación de potencial constante (que regularmente es de 1.2 V, evitando así que de a pie la hidrólisis del agua). En un estudio previo [1] se demuestra que en este proceso permite un ciclo de deionización más corto. Mientras que la fisisorción los iones disueltos en agua son arrastrados físicamente a cada una los electrodos debido a un “impulso” inicial, como consecuencia de la polarización de los iones permite el arrastre de otros iones cercanos a su entorno hacia el interior del material poroso.

En la literatura se muestran curvas características del proceso de absorción - desorción de un proceso de deionización capacitiva. Estas curvas características de la variación de la concentración con respecto al tiempo que permiten establecer una relación macroscópica con el comportamiento microscópico de la saturación de los poros.

En este estudio se propone un modelo que permita aproximar la variación de la concentración iónica con respecto al volumen suministrado a la celda para luego ser validada por los datos adquiridos a partir de los procesos de absorción de NaCl a 0.4 M usando el principio de la deionización capacitiva. Para esto se usa una celda compuesta por 9 pares de electrodos de grafito, recubierto por una película de carbón activado que ha sido decorado con “nanorods” de óxido de zinc, del que se ha demostrado su fiabilidad y concuerda con el perfil que debe cumplir una celda basada en esta tecnología.

I. Parte introductoria del trabajo

A. Generalidades

El presente estudio de investigación tiene como finalidad establecer un modelo que explique la tendencia o comportamiento de la concentración de iones disueltos en agua que es tratada por una celda que sigue el principio de la deionización capacitiva (**Figura I.**) [1], que permita contribuir con parámetros macroscópicos como son la capacidad de absorción de sal (SAC) y la tasa de absorción de sal (ASAR), del que se tiene como referentes cuando se caracteriza una celda para ser comparada con estudios de otras celdas, estos parámetros son proporcionales a la masa activa de la celda, a la solución tratada y el tiempo necesario para alcanzar dos concentraciones características. La primera se alcanza en el punto de menor concentración (C_{min}) y la segunda es cuando la concentración de la solución colectada es igual a la concentración inicial (C_0) en el proceso de absorción que delimita el tiempo en el que los electrodos están completamente saturados.

Los parámetros como son el SAC y ASAR están en proceso de formalización matemática, ya que si bien es cierto conceptualmente son bien definidos, esto no es así matemáticamente, debido a que para calcular estos parámetros es necesario calcular la cantidad de iones retenidos por la celda, siendo el método más usual es por medio del cálculo del área bajo la curva de la gráfica usando los datos adquiridos a partir de varios ciclos de deionización capacitiva.

Por ello este estudio cobra relevancia ya que se propone un modelo que simplifique tales cálculos, donde también se pueda predecir el tiempo de acción de la celda en el tratamiento de solución, en el proceso de absorción de celda. Además, de contribuir con el estudio de la electroabsorción y la fisisorción de la celda.

Por esto es muy importante que la celda tenga la capacidad de cumplir todos los parámetros característicos basados en la deionización capacitiva, en el que se debe de asegurar el funcionamiento cíclico y continuo que conserve las propiedades iniciales para que no se vea afectado por el desgaste asociado al uso.

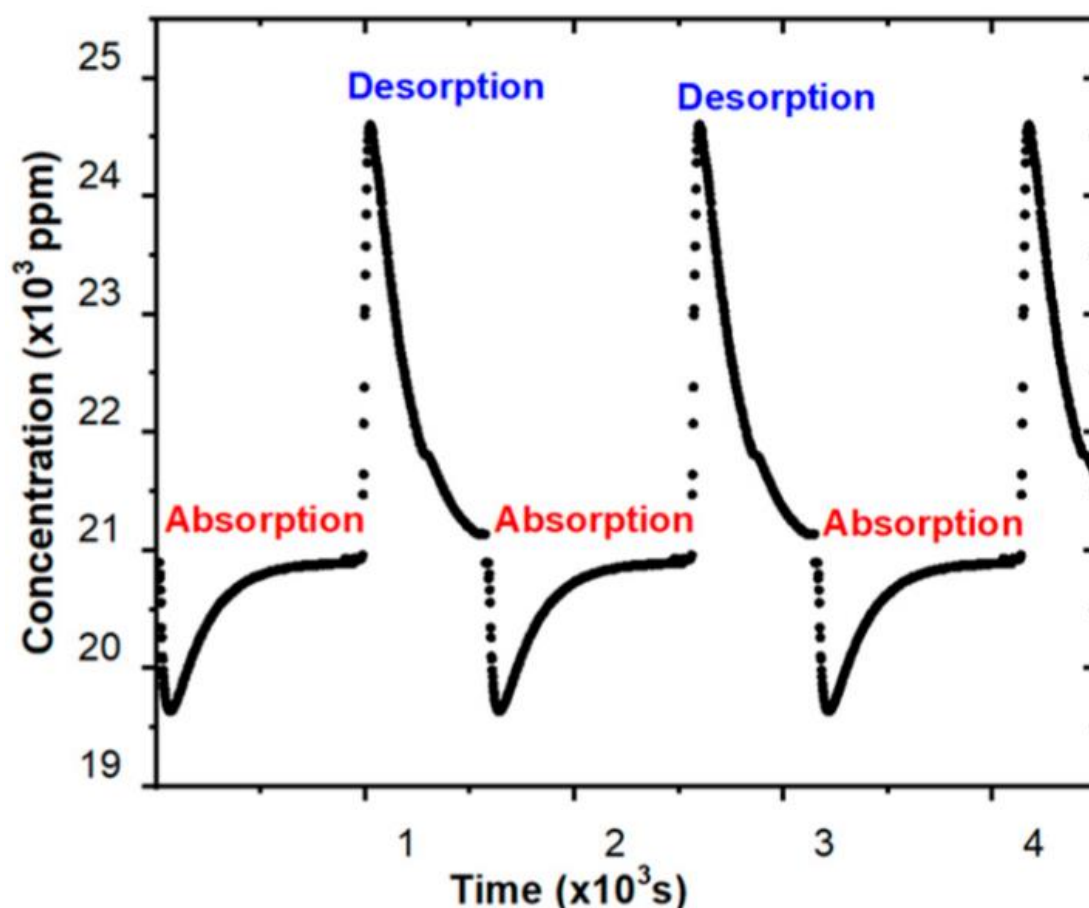


Figura I. Curvas características de la variación de la concentración con respecto al tiempo (0.4 M, 1.2 V) [1].

B. Problemática

Los parámetros macroscópicos medibles con los que se caracterizan a las celdas, como la masa activa, la concentración inicial, la concentración mínima, flujo de líquido, que son medibles, en un proceso de deionización capacitiva establecen indicadores característicos con los que se compara con otras celdas basados el mismo principio. Sin embargo, esta comparativa solo se basa en la masa activa y la cantidad de solución que ha sido tratada, por ello es necesario complementar este comportamiento con un modelo predictivo que a priori pueda ser usado como herramienta, esto permitirá comparar de forma teórica los

resultados experimentales, que como se mencionó en la sección anterior, estos parámetros están definidos conceptualmente, encontrándose diferencias en las ecuaciones matemáticas usadas, ya que en la literatura se encuentran diversos estudios y cada uno de ellos utiliza una definición matemática u otra dependiendo de que tan factible sea el cálculo del área bajo la curva característica de la gráfica de la deionización capacitiva, que se construye a partir de los datos colectados de un ciclo de absorción. El comportamiento de la celda es la que está asociada a la capacidad de absorción de sal (SAC), en el que se aproxima directamente a una función lineal [2]. Sin embargo, en estudios más recientes se utiliza el área bajo la curva para calcular el SAC asociado a la celda.

Además, que se pueda calcular de forma más precisa la cantidad de iones que han sido retenidos por la celda de directamente, siendo esto necesario para calcular otros parámetros asociados a la eficiencia y la eficiencia energética en el que también se toma en cuenta la energía suministrada en a la celda en un proceso de absorción [1].

Por otro lado, también se estudia el proceso de fisorción y electroabsorción de la celda, que muestran curvas de variación de concentración de iones con respecto al tiempo características parecidas. Sin embargo, por la fenomenología asociada a cada una de ellas, se diferencian en el tiempo de acción de la celda y la cantidad de iones que pueden retener en cada uno de ellos.

C. Objetivos

1) Objetivo General

Proponer un modelo a partir de los ajustes exponencial y doble exponencial que concuerde con los resultados experimentales para los procesos electroquímicos de fisorción y electroabsorción de la celda de la etapa de absorción del ciclo de deionización capacitiva que permita entender los procesos macroscópicos de la variación

de la concentración de iones de una solución salina, además pueda predecir el tiempo ideal de funcionamiento de la celda y la cantidad de iones absorbidos por la celda.

2) Objetivos Específicos

- Modelar el comportamiento de las dos fases de la etapa de absorción de la deionización capacitiva, siendo la primera la que comprende el inicio del proceso hasta que la concentración de iones sea la más baja ($C_{\min}$), siguiendo el ajuste exponencial.
- Para la segunda fase tiene como punto inicial la concentración más baja culminando en donde la concentración alcance valores similares a la concentración inicial (C_0), por medio del ajuste doble exponencial.
- Parametrizar las ecuaciones asociadas a cada uno de los procesos asociándolos a la cantidad de solución suministrada a la celda, al tiempo y el tipo de proceso estudiado (fisorción – electroabsorción), a fin de hallar una tendencia de absorción iónica dependiendo del caudal con el que se ha tratado la solución.

II. Marco Teórico

A. Antecedentes

Si bien es cierto la tecnología de deionización capacitiva no es reciente ya que sus primeros avances se remontan a inicios del siglo XX, no es hasta principios de este siglo que tiene una especie de resurgir, como propuesta al cambio climático, la explosión demográfica y la necesidad de encontrar nuevas fuentes de agua dulce [3-6], esta tecnología muestra ser una alternativa viable de bajo costo tanto en la fabricación y la energía necesaria para su funcionamiento, como se muestra en la **Figura II.** en el que se aprecia el desarrollo de la deionización capacitiva en tiempos recientes.

La teoría asociada a los fenómenos microscópicos y macroscópicos aún está en desarrollo, siendo la teoría de Stern-Gouy-Chapman del que se basan todos los estudios posteriores delimitando los parámetros con el fin de proponer una explicación que permita comprender la fenomenología de la doble capa de carga y la variación de la concentración, la dependencia de la corriente u otros parámetros que se desean estudiar durante un ciclo de absorción desorción de la solución a la que es tratada con la celda.

En la literatura proponen un modelo utilizando parámetros en el que aproximan el tamaño de poro, el espesor del material activo el flujo con el que se suministra solución a la celda, entre otros. Que engloba ambos procesos de absorción desorción por medio de la aplicación de un cambio en la diferencia de potencial ya que se observa en la **Figura I** la gráfica asociada a un ciclo completo de deionización tiene un

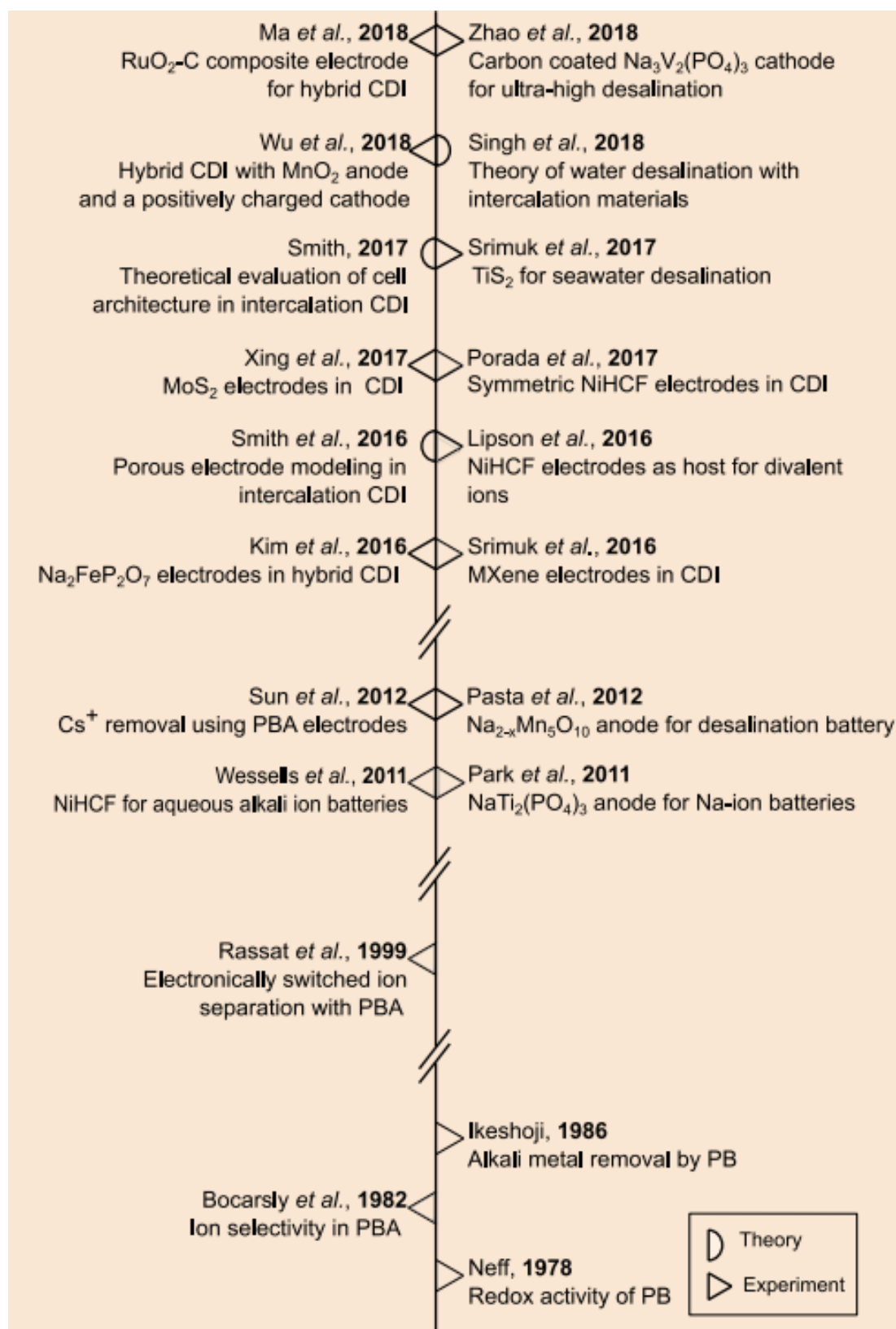


Figura II. Línea de tiempo de la evolución de la deionización capacitiva [11].

comportamiento distinto al de la desorción. Nótese que los procesos propuestos no utilizan parámetros macroscópicos que son en gran medida más viables de cuantificar, además que son para bajas concentraciones de NaCl [7-10].

En la literatura no suele asociarse los resultados computacionales con los resultados experimentales debido a las limitaciones antes mencionadas, ya que se apunta a que los dispositivos diseñados funcionen en condiciones reales. Teniendo que remarcarse que el material activo es una película de aproximadamente 300 μm que no tiene porosidad uniforme, que después del tratamiento térmico se reduce al 33% aproximadamente, además de que los iones polarizan la vecindad en el que se encuentran, dificultando la electroabsorción, además que en paralelo también sucede la electrocapilaridad que favorece la electroabsorción, que son fenómenos asociados a la deionización capacitiva que debido a su complejidad no se suelen tomar en cuenta, tanto como los parámetros macroscópicos.

Los electrodos polarizan los iones disueltos en la solución haciendo que estos se orienten de forma que los iones migren hacia los electrodos que si no tuvieran un recubrimiento (al que se denomina material activo) se quedarían en las proximidades de los electrodos, que es el principio más elemental de una celda electroquímica, que al ser recubiertos por el material activo, este tiene la capacidad de retener iones debido a la porosidad, que permite la migración hacia el interior del material activo, este es la funcionalización de una celda deionizadora, que es capaz de absorber iones en su interior, que además puede liberar los iones por dos vías la fisisorción y la electroabsorción, siendo la primera por arrastre y la segunda debido a un cambio de polaridad, que en ambos casos implica el flujo de solución en la celda. Es por esto por lo que las celdas se diseñan como “sandwichs” en serie que permiten un flujo constante y laminar en todo el proceso del tratamiento de la solución, alimentados por una fuente en paralelo, para que todos estén sometidos a la misma diferencia de potencial [12-14].

Por su parte el material activo, que tiene por propósito retener iones temporalmente, muestra propiedades inertes hacia los iones, es decir que no interactúan con la solución; además de su alta capacidad superficial, asociada a la porosidad de su estructura, es muy común recurrir al carbón activado debido a esta característica que presenta [15]. Sin embargo, se puede incrementar la capacidad superficial decorándolo con otros compuestos que potencializan enormemente sus propiedades electroabsorbentes, pero que por sí solos no podrían adherirse a la superficie conductora, de los que destacan los óxidos metálicos como son el ZnO, MnO, AgO, etc. que son comúnmente usados que al igual que el carbón activado tienen una baja toxicidad para los seres vivos haciéndolos aptos para el consumo humano, que es finalmente el mayor beneficiado de estas tecnologías [16-20].

Las celdas que son diseñadas y construidas bajo el principio de la deionización capacitiva cumplen con ciertos parámetros característicos, siendo uno de los más importantes su naturaleza cíclica, es decir que puede operar un gran número de veces antes de ser descartada manteniendo sus características iniciales. Cabe recalcar que en los diseños más recientes se pueden recuperar los electrodos ya que los electrodos más comunes son de grafito, mientras que actualmente se recurre a electrodos metálicos no corrosivos que pueden ser reutilizados, alargando así la vida útil los componentes de la celda.

Por otro lado, destaca la eficiencia energética que ofrece esta tecnología, que en comparación con las celdas de membranas y el de osmosis inversa, que por los componentes que se utilizan y la energía necesaria para su funcionamiento, las celdas de deionización capacitiva son por mucho más económicas y energéticamente más eficientes. En el que también se debe tener en cuenta las condiciones de operación a las que tienen que estar sujetos sumado al permanente mantenimiento al que deben estar sujetos para su correcto funcionamiento, que, a diferencia de las tecnologías antes mencionadas, las celdas de deionización capacitiva muestran mejores resultados de operación que incluso

pueden tratar agua a diversas condiciones y distintos tipos de iones haciendo un uso de la energía eficiente.

Los parámetros que se establecen para caracterizar a la celda son relativamente recientes en el que destaca Suss et al [2] que propone como factor de característico a la capacidad de absorción de sal (SAC por sus siglas en ingles) en mg/g, esto se debe que el encargado de la retención de iones haciendo referencia al material activo, es por decirlo de alguna manera, una mezcla no homogénea de composición no uniforme, ya que el material activo recubre el electrodo mediante una técnica mecánica propuesta por Blade et al, [21] que bajo este principio se puede fabricar un gran número de electrodos en poco tiempo. Esto implica que los parámetros que se deben tener en cuenta en la caracterización tienen que ser macroscópicos, fácilmente medibles. Sin embargo, en estudios recientes a fin de tener mejores caracterizaciones se proponen alternativas matemáticas con el que se puede tener un factor más preciso y es calculando el área bajo la curva característica de la celda para la etapa de absorción, que es a priori el más relevante que permite conocer la cantidad de iones que puede electroabsorber hasta que este se sature.

Sumado a este factor, también se suele recurrir a la tasa de absorción de sal (ASAR por sus siglas en inglés) en mg/g/min [22-23] que caracteriza los iones absorbidos por la celda con respecto a la solución total que es tratada, sin embargo también es un concepto que dependiendo de la literatura, considera dos periodos diferenciados, el primero es cuando la solución alcance la concentración mínima y la otra en cuando la concentración sea igual a la concentración inicial, es decir cuando la celda este completamente saturada.

En ambos casos es necesario hallar un modelo con el que se pueda hallar la cantidad de iones totales, con parámetros macroscópicos que permitan comparar los resultados teóricos que puedan constatar el correcto tratamiento de solución por parte de la celda. En la literatura es más común comparar de manera grafica la variación de la concentración con respecto al tiempo para asegurar que la celda cumple con el principio asociado a la deionización capacitiva [7-8].

Si bien es cierto se ha propuesto modelos asociados a este fenómeno, funcionan bajo un parámetro limitante que es la concentración de iones en la solución, siendo este mucho menor a las condiciones reales que deben ser sometidas las celdas para un funcionamiento normal que es de aproximadamente 0.4 M, mientras que los modelos más comunes son de 20 mM, diseñados primeramente para electrodos de una dimensión, que se extrapolan para modelos bidimensionales.

Los parámetros asociados a la deionización capacitiva como son el SAC y ASAR dependen del tipo de operación y de la tasa de volumen que se suministra la solución a la celda, que en un estudio previo se ha analizado que para bajos caudales muestra indicadores más altos mientras que para caudales más altos [15], muestran resultados de absorción más bajos, que se debe al tiempo que tienen los iones para ser electroabsorbidos al interior de la masa activa, sin embargo en dicho estudio también se muestra que el consumo energético es mayor, por lo que obtener un SAC y un ASAR altos no implica ser energéticamente más eficientes, contrariamente a esto, los caudales más altos obtienen eficiencias energéticas más altas.

Esto cobra relevancia, debido a que los modelos antes mencionados operan a flujos bajos (0.40 ml/min) que se muestran en la comparativamente los resultados experimentales y teóricos en la **Figura III.**, mientras que la operación en condiciones reales es de (45 ml/min-105 ml/min) para el caso de la celda que ha sido utilizada para este estudio. En la siguiente sección se tratará con mayor detalle los conceptos involucrados en este estudio.

B. Fenómenos asociación a la deionización capacitiva

1) Transporte iónico

Como se mencionó previamente, los iones disueltos en la solución acuosa, independientemente del tipo de ion que se desea hacer el tratamiento, los iones polarizan la vecindad en la que se encuentran, en este caso las moléculas de agua, a este proceso se denomina solvatación, en los primeros estudios a este fenómeno ya se

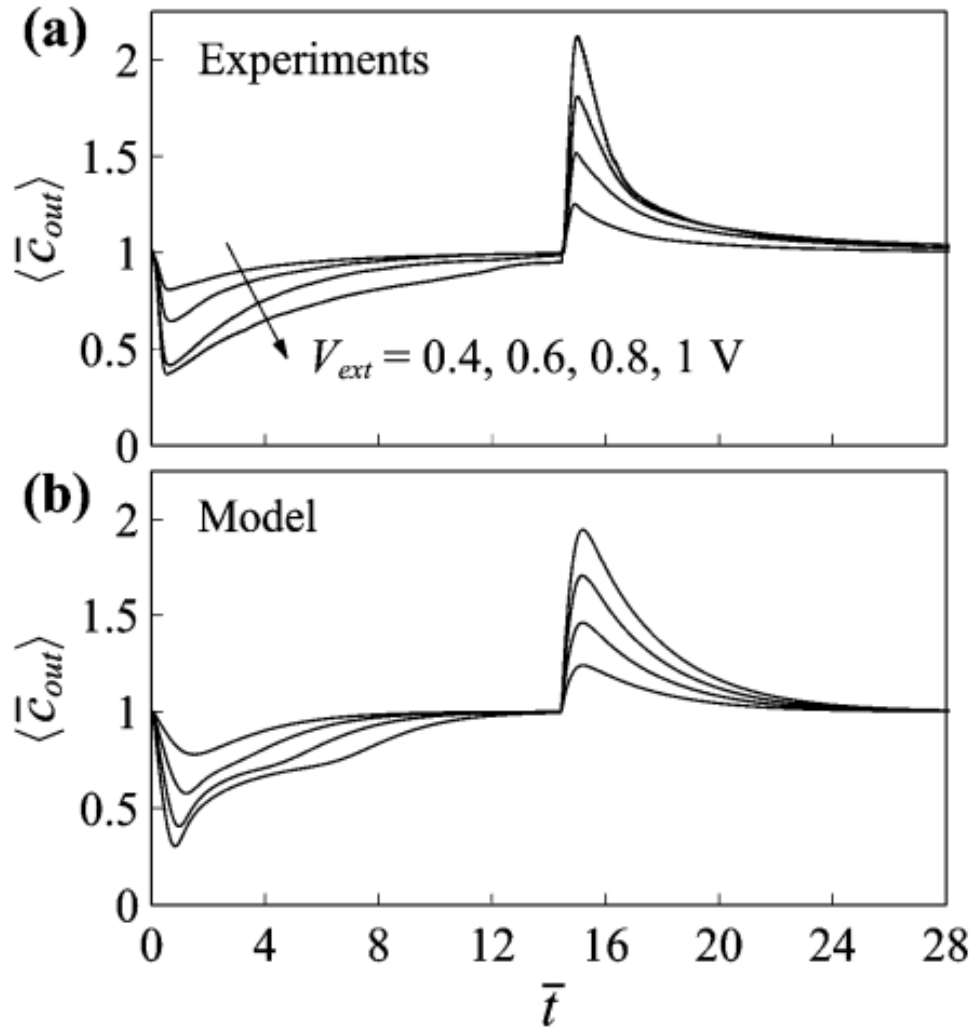


Figura III. Graficas comparativas del modelo y los resultados experimentales a) Experimental b) Modelo (20 mM, 0.42 ml/min) [24].

tomaba en cuenta este factor debido a que tiene implicancias dinámicas del proceso de migración de los iones, que en sus primeros modelos consideraban a los electrodos como superficies ordenadas, sin embargo, en modelos actuales se toma en cuenta la naturaleza amorfa del material activo en donde se muestra la electroabsorción de los iones al interior de la celda como se muestra en la **Figura IV.** [26-27].

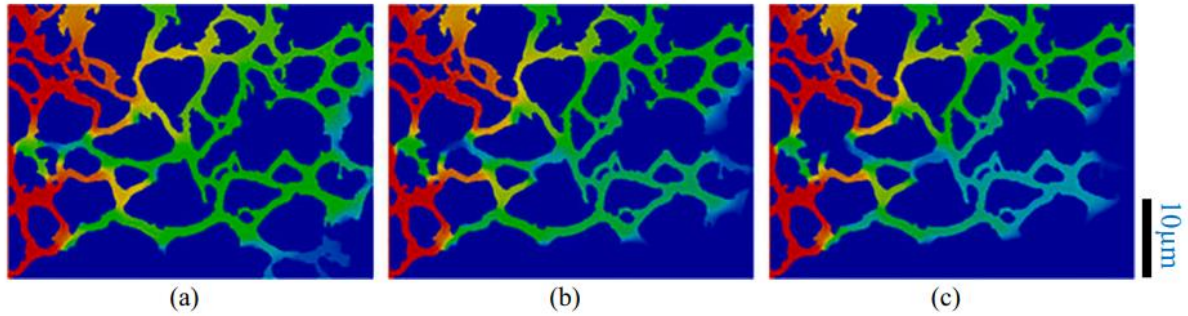


Figura IV. Concentración de los iones al interior de la celda a) 20mV b) 40mV c) 60mV [25].

Liu et al. [25] Proponen un modelo completo para este fenómeno en el que toman en cuenta la forma tridimensional del material activo, tomando como base el modelo realizado por Zhou et al. [28] de un modelo bidimensional de porosidad regular, el efecto del flujo y la cantidad de sal absorbida, como se muestra en la **Figura V**.

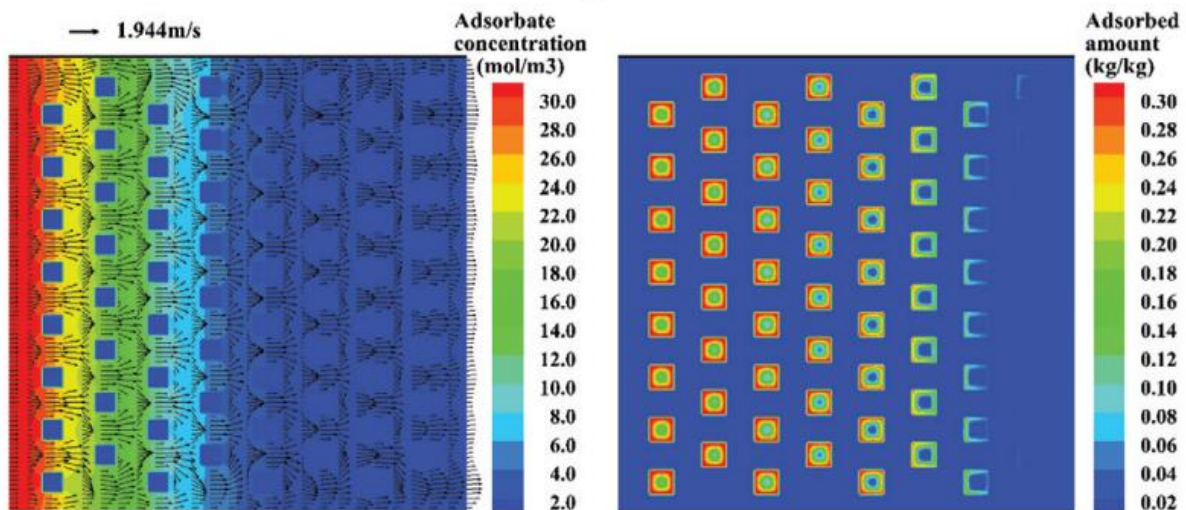


Figura V. Variación de la concentración de iones en el interior de una celda [28].

2) Doble capa de carga

La doble capa de carga es la interfaz entre el electrodo y la solución produciendo una fase de intercambio iónico, en el que los iones son polarizados son electroabsorbidos por la carga opuesta a la propia. Helmholtz [29] fue el primero en tratar de explicar este fenómeno, en el que supone que la variación de la concentración de los iones disueltos en las proximidades del electrodo es directamente proporcional a los iones transferidos hacia la doble capa, es decir que propone que el intercambio iónico es uno a uno. Con lo que es

necesario que los electrodos presenten una superficie específica elevada para maximizar los iones absorbidos.

Gouy-Chapman [30-31] proponen un modelo en el que los electrodos en el que añaden iones que cumplen los conceptos estadísticos de Boltzmann, en el que los iones se mueven conforme a la difusión producido por la variación de la concentración y las diferencias de potenciales que se dan en la doble capa, pero no considera parámetros de solvatación, que toma a las cargas como partículas puntuales disueltas en la solución.

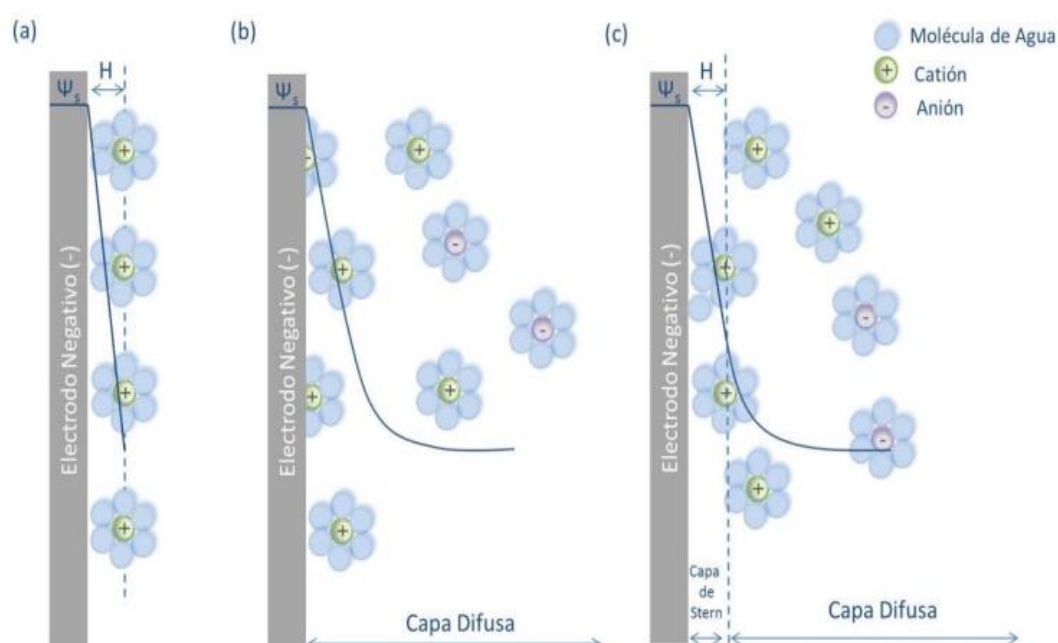


Figura VI. Representación de los modelos a) Helmholtz b) Gouy-Chapman c) Chapman-Gouy-Stern [32].

Por su parte Stern [33], combina ambas teorías en el que define la doble capa como dos regiones en las proximidades del electrodo, a la que denomina región interior de longitud H (nm), en donde los iones son solvatados y una segunda capa denominada región externa o difusa en el que considera las cargas puntuales que se mueven por difusión, como se muestra en la **Figura IV.** en el que nace el concepto de los contraiones que es la compensación de la carga superficial del intercambio iónico que provienen de la región difusa.

Lim et al. [24] incluyen nuevos parámetros a la teoría planteada por Stern en el que principalmente evoca a la variacional no lineal del potencial, además de incluir las condiciones de frontera entre ambas regiones, a su vez considera que el tamaño de los iones cercanos a los electrodos es de tamaño finito, que por lo regular se consideraba con un tamaño despreciable en comparación al electrodo.

3) Deionización capacitiva

La deionización capacitiva es una tecnología que se basa en la retención de iones en la superficie de los electrodos por electroabsorción temporalmente disueltos en solución acuosa; los electrodos son sometidos a cierta diferencia de potencial dependiendo de la solución y los iones que están disueltos en la solución, que, al ser destinado principalmente a agua, el potencial no debe exceder de 1.2 V para evitar hidrólisis del agua.

Los primeros estudios y diseños se orientaban principalmente al tratamiento de agua salada, teniendo como propósito primario el consumo humano. Sin embargo, se viene realizando este mismo tratamiento para aguas en el que la disolución contiene metales pesados, enfocado al tratamiento de aguas contaminadas producto de la contaminación industrial y del sector minero.

La disolución tratada por la celda fluye a través de los electrodos, como se muestra en la **Figura VII**, en el que se muestra las dos fases de absorción y desorción iónica.

Los dispositivos de deionización capacitiva muestran una curva característica particular producto de la concentración iónica con respecto al tiempo construida a partir de los datos macroscópicos, como se muestra en la **Figura I**, en el que se observa dos etapas marcadas la de carga (absorción) y descarga (desorción), el tratamiento de la disolución por parte de la celda se da en el proceso de carga donde se colectan parámetros como son el SAC, ASAR, estos tienen la finalidad de uniformizar la comparativa entre celdas que son diseñadas bajo el mismo principio.

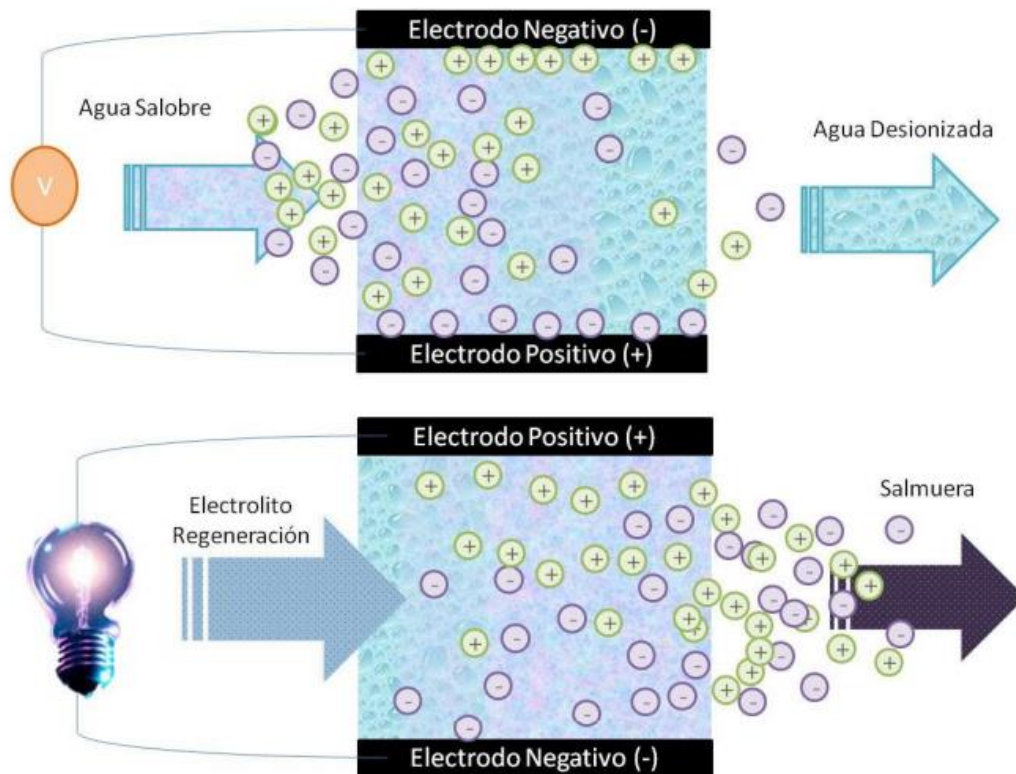


Figura VII. Proceso de tratamiento de agua salada por medio de electrodos bajo el principio de la deionización capacitiva. Proceso de absorción (arriba), Procesos de desorción (abajo) [30].

La etapa de carga a su vez tiene dos etapas marcadas en el que la concentración disminuye hasta alcanzar la concentración mínima ($C_{\min}$), punto en el que la tendencia cambia para luego evidenciar un incremento en la concentración iónica hasta llegar nuevamente a la concentración inicial (C_0) alcanzando la saturación de la celda. Es en este proceso en el que se alcanza la saturación de los electrodos, es decir que la masa activa ya no puede retener más iones en su interior.

La etapa de descarga se caracteriza por tener tendencias invertidas, esto se origina debido a que para forzar la liberación de iones se intercambia la polaridad de los electrodos evidenciándose en el incremento de la concentración hasta alcanzar un máximo que se da cuando todos los iones retenidos son liberados, el tiempo requerido para alcanzar dicha máxima concentración es corto en comparación con el resto de subetapas ya que el cambio de polaridad es instantáneo en el que se suministra energía por un breve instante.

Por último, la celda termina con su etapa de descarga en el que los iones se mueven por fisisorción.

Analizar el ciclo completo brinda información complementaria acerca de la celda por medio de los parámetros ligados a la eficiencia energética, estos parámetros son: consumo energético específico (SEC), energía específica termodinámica (TEE), en las siguientes secciones se dará más detalles acerca de cada uno de los parámetros antes mencionados [34].

4) Masa activa

La masa activa es el material que retiene los iones en su interior, esta recubre la superficie del electrodo, que como característica primordial es el área específica, que en otras palabras implica la porosidad del material activo, en consecuencia, la capacidad de retener iones de la dilución.

El área específica se caracteriza por una prueba física que caracteriza la absorción denominada BET, llamada así por sus creadores (Brunauer, Emmett y Teller) que obtuvieron la misma conclusión trabajando de manera independiente, en el que se mide la absorbancia de una película delgada del material, con el que se obtiene el área superficial de muestra, caracterizando así si la muestra tiene, microporos, mesoporos, o nanoporos, dependiendo de los datos que se obtengan de la prueba [35].

La masa activa a su vez es inerte a los electrodos y a la disolución, esto evita que se produzcan subproductos debido a reacciones químicas que se puedan dar en el proceso del tratamiento del fluido, esta superficie es de aproximadamente $100 \mu\text{m}^2$, el cual es el ideal en el que el potencial suministrado a los electrodos no sea apantallado por el material activo que es no conductor y a su vez puede maximizar la retención de iones[15].

El material activo es adherido a los electrodos mediante aglutinantes que también tienen que ser inertes a todos los compuestos involucrados. Por esto uno de los materiales más recurrentes es el carbón activado, que, por su estructura amorfa y porosa, además de su

fácil adherencia a superficies usando aglutinantes, al que se tiene que sumar que se puede decorar con otros compuestos que incrementen el área superficial del material activo, en el que son recurrentes los óxidos metálicos en distintas morfologías. En la **Figura VIII.** se muestran diferentes nano estructuras de óxido de zinc, que es uno de los materiales predilectos para este propósito por la practicidad de síntesis en sus diversas morfologías.

En la **Figura IX.** se muestra el carbón activado decorado con “nanorods” de ZnO. Nótese que los materiales usados son todos de baja toxicidad haciendo que sea apto para el consumo humano. En la **Figura X.** se muestra perfiles de desalación y regeneración de masa activa formado por carbón activado, decorado con diferentes estructuras de ZnO [36].

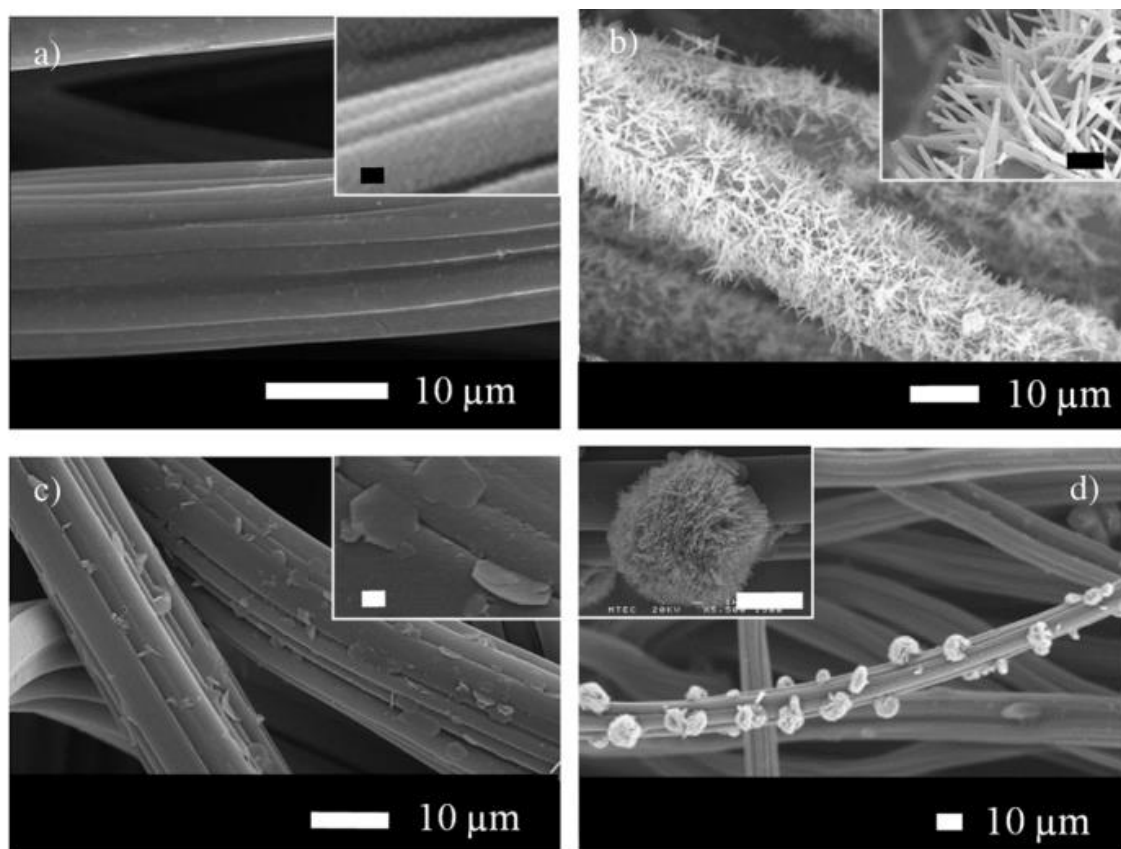


Figura VIII. a) nano partículas de ZnO b) “nanorods” de ZnO c) micropelículas de ZnO d) microesferas de ZnO [37].

La capacidad de retener iones por parte de la masa activa se caracteriza por medio de la capacitancia específica (C_s) medido en F/g [38], por medio de voltamperometría cíclica utilizando la siguiente expresión matemática:

$$C_s = \frac{1}{2 \cdot \Delta E \cdot m_{ac}} \int i(E) dE \quad (2.1)$$

Donde i es la corriente (A) que depende de la velocidad de potencial de barrido E (V/s), ΔE es la variación de voltaje aplicado (V), y m_{ac} es la masa activa del electrodo (g), estas pruebas se realizan a fin de encontrar el material o muestra de masa activa con la capacitancia específica más alta, asegurando así sus propiedades electroabsorbentes, sin que este apantalle el campo eléctrico cercano al electrodo.

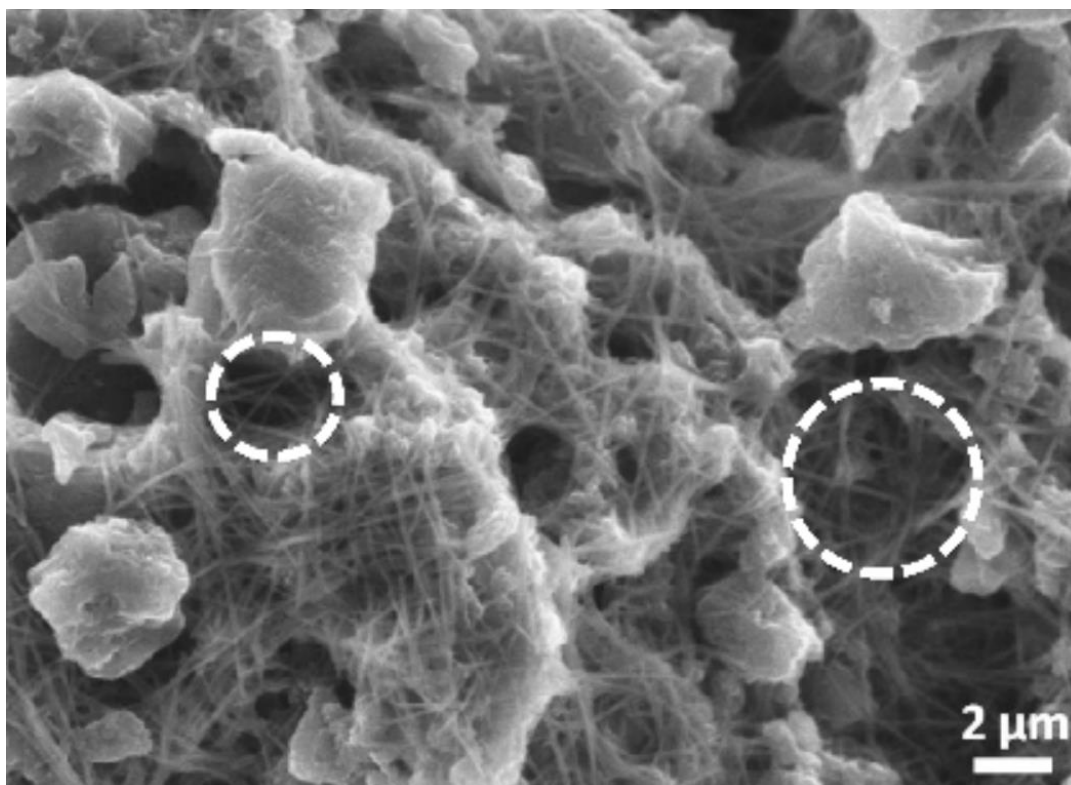


Figura IX. Carbón activado decorado con “nanorods” de ZnO [1]

Esta prueba se suele realizar a condiciones lo más parecidas al de operación a la que va a estar sometido el electrodo, es decir próximas a 0.5 M de NaCl y el barrido de los potenciales suele comenzar a 0.0 V hasta los 1.2 V.

Con esta prueba se descarta que la masa activa apantalle a los electrodos, es decir disminuya el potencial en las proximidades del electrodo que se encuentra en la sumergido en la solución. En la **Figura XI.** se muestra un Voltamperograma característico de esta prueba electroquímica.

Tabla I. Capacitancia especifica de electrodos recubiertos por una película de carbón activado de distintos espesores [15].

	Espesor inicial (μm)	Espesor medido (μm)	Masa (mg)	Capacitancia especifica (F/g)
S1	100	67	8	6.7
S2	200	87	10	54.9
S3	300	102	12	69.4
S4	400	150	18	52.5
S5	500	231	28	32.8
S6	600	350	43	26.7

Tabla II. Capacitancia especifica de carbón activado decorado con distintas masas de ZnO [1].

	Espesor medido (μm)	Masa (mg)	Capacitancia especifica (F/g)
S1	104	3	67.6
S2	102	5	109.4
S3	101	7	124.7
S4	99	9	135.7

En la **Tabla I.** se muestra la capacitancia específica para distintos espesores aplicados sobre un electrodo de grafito recubierta con carbón activado, antes y después del proceso

de secado y en la **Tabla II.** se muestra los valores de capacitancia específica para distintas masas añadidas de nanorods de ZnO a la mezcla de carbón activado.

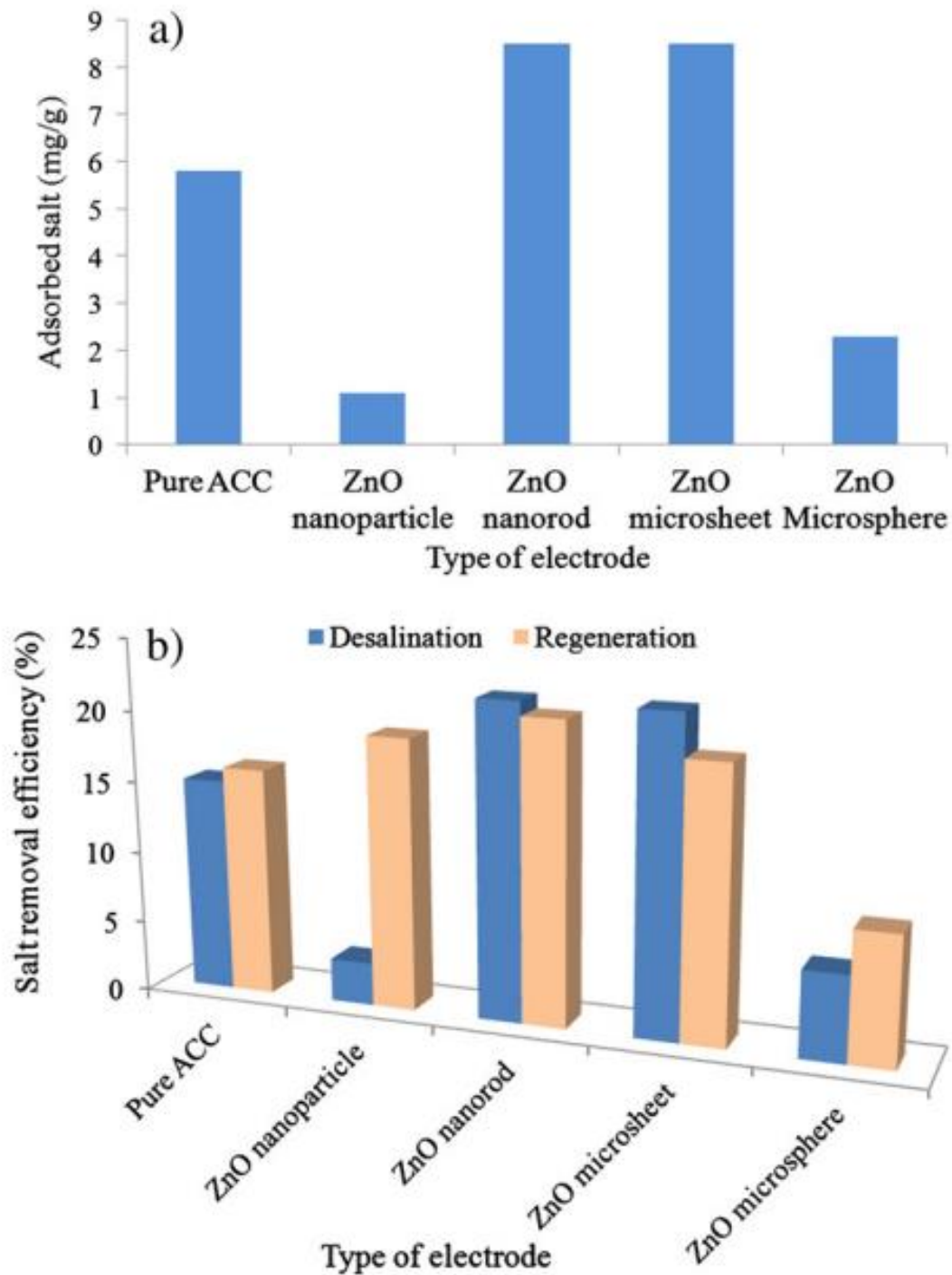


Figura X. Comparativa de la sal removida por compuestos de carbón activado decorado con diferentes nano estructuras de ZnO alimentado con una diferencia de potencial 1.2 V a) Absorción de sal b) Eficiencia porcentual [37].

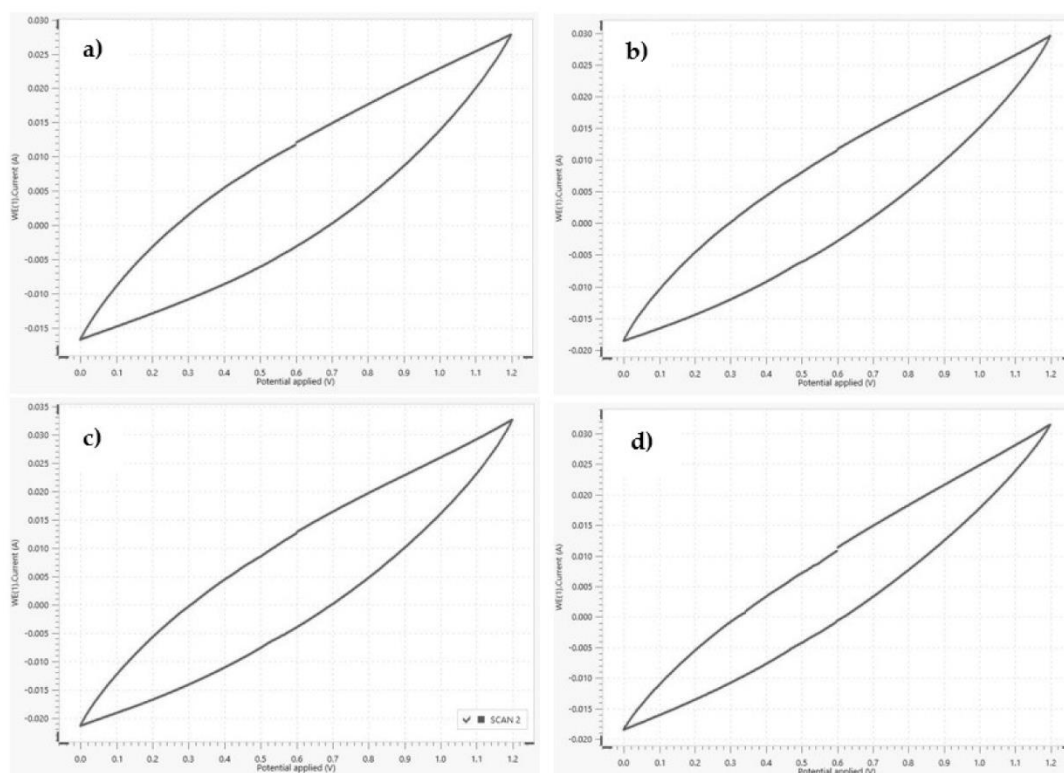


Figura XI. Voltamperograma para distintos espesores de la película de la masa activa 0.5 molar tasa de barrido 0.05 V/s: (a) 300 μm , (b) 400 μm , (c) 500 μm and (d) 600 μm . [15].

5) Celdas electroquímicas

Las celdas diseñadas para este propósito son una composición de electrodos alimentadas por una fuente de potencial constante, suministrada por una bomba peristáltica, asegurando así que el flujo sea constante y controlado, evitándose así que el material sufra corrientes turbulentas o corrientes laminares altas que produzcan fisuras en el material activo, el cual se puede evidenciar material activo disuelto en el fluido que ha sido tratada por la celda, acortando la vida útil de la celda. En la **Figura XII.** se muestra una celda típica que cumple las condiciones para el tratamiento de la disolución.

El espacio entre los electrodos es de aproximadamente 1 mm, espacio que permite la polarización de los iones debido a que el campo eléctrico no decaiga dramáticamente y que contribuye al libre tránsito de los iones.

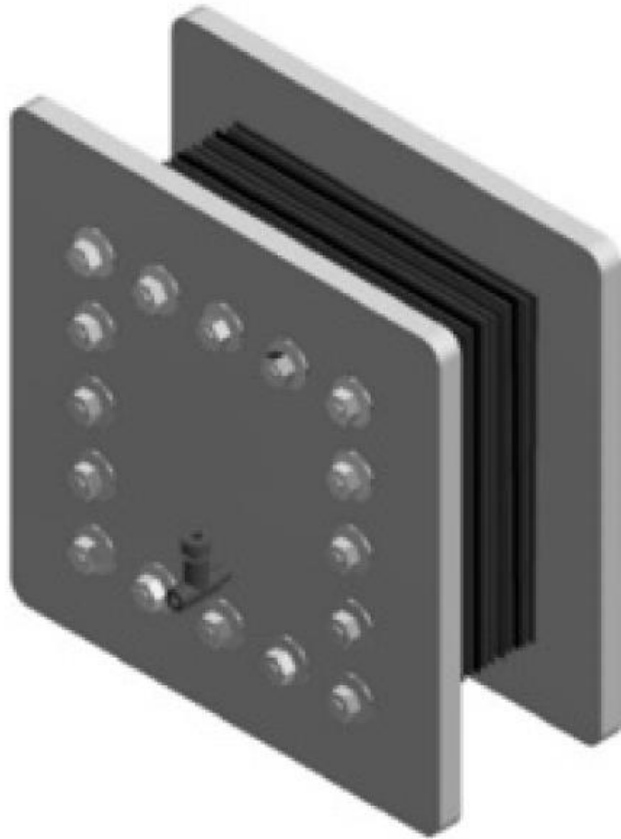


Figura XII. Celda electroquímica de deionización capacitiva [15]

6) Parámetros de caracterización de la celda

a) Capacidad de absorción de sal

Las celdas electroquímicas que tratan las disoluciones bajo este principio se pueden caracterizar bajo parámetro estandarizados que comparten todos los electrodos, siendo el primero la capacidad de absorción de sal (SAC) en mg/g, es una medida que indica la cantidad de iones (sal) que un sistema de deionización capacitiva puede adsorber en un ciclo de operación antes de que los electrodos se saturen, relacionando así la masa absorbida de iones, la masa activa y el volumen de líquido que fluye a través del electrodo antes de que este se sature. La ecuación matemática ha tenido una evolución importante, en el que los primeros trabajos que utilizaban este parámetro se calculaban de la siguiente manera:[2]

$$SAC = \frac{M.(C_0 - C_{min})}{m_{ac}} \cdot V_{ol} \quad (2.2)$$

Donde C_0 es la concentración inicial (M), M es la masa molar de sal (g.mol^{-1}), $C_{\min}$ es la concentración mínima de la solución que circula por la celda (M), m_{ac} es la masa activa (g) y V_{ol} es el volumen total del agua que se ha utilizado (L). Sin embargo, Sighn et al. [39] proponen una nueva forma de calcular este parámetro usando la siguiente expresión matemática:

$$\text{SAC} = \frac{Q.M}{m_{\text{ac}}} \int (C_0 - C) dt \quad (2.3)$$

Donde Q es el caudal (m^3/s), t es el tiempo (s) y C es la concentración del agua desionizada producto del tratamiento (M).

Esta última expresión se apega más a la realidad, ya que, en la etapa de absorción, la tendencia de la curva no es uniforme, que como se mencionó anteriormente, tiene dos subetapas claramente diferenciadas y la forma de calcular el total de iones absorbidos se utiliza el área bajo la curva que es una forma más precisa para hallar este parámetro.

b) Tasa de absorción de sal

Este es un parámetro ligado al tiempo que tarda el proceso de absorción de sal (mg/g/s), que se expresa matemáticamente como: [39]

$$\text{ASAR} = \text{SAC}/t \quad (2.4)$$

Sin embargo, en la literatura también se pueden encontrar ciertas diferencias entre el tiempo medido, ya que algunos consideran el tiempo total del ciclo mientras que otros consideran el tiempo solo de la etapa de absorción [39-40].

En ambos casos, la tendencia de la variación de este parámetro con respecto al flujo es la misma.

c) Parámetros energéticos

Sumado a los dos anteriores, también se puede establecer una relación del agua tratada con respecto a la energía utilizada, estos parámetros es el consumo específico de

energía (SEC) y la eficiencia energética termodinámica (TEE), el primero relaciona la energía consumida en el proceso de deionización con respecto al volumen total que ha circulado por el interior de la celda. Por su parte el TEE es la energía consumida exclusivamente en el proceso de absorción de iones, que mediante datos macroscópicos se puede obtener la energía involucrada para dicho proceso, siendo esta un parámetro microscópico asociado a la energía libre Gibbs.

Para ambos parámetros se tiene que obtener datos de todo un ciclo completo de tratamiento, ya que está involucrado el volumen total de agua y la concentración máxima medida que tiene lugar en la etapa de desorción o descarga [1, 34].

7) Propósito de la deionización capacitiva

Como se mencionó anteriormente, la deionización capacitiva está enfocado en la remoción de iones disueltos en solución, que de forma primaria es enfocado en la remoción de iones de NaCl disueltos en agua, teniendo como propósito la obtención de agua apta para el consumo humano de fuentes con alto contenido de sal (agua de mar), que en los primeros diseños se consideraban caudales bajos (alrededor de 10 ml/min) y concentraciones bajas (menores a 50 mM) que con el paso de los avances tecnológicos tanto en materiales como en el diseño de las celdas actualmente se proponen nuevos diseños que son sometidos a caudales mucho mayores (alrededor de 100 ml/min) que representa un avance significativo en el proceso de tratamiento, como también a concentraciones salinas comparables a la concentración que muestra el agua de mar (0.4 M) , con lo que demuestra la viabilidad de esta tecnología aun en desarrollo [2] . En recientes estudios también se ha diseñado celdas para la deionización de metales pesados en baja concentración, mostrando propiedades que pueden ser utilizadas para este propósito [16,19,41].

8) Modelos aplicados

Zhao et al. [42] propone un modelo para bajas concentraciones como se muestra en la **Figura XIII.** en el que se muestra la gran aproximación entre los datos experimentales y

los obtenidos por el modelo propuesto, sin embargo, para potenciales altos (1 V) los datos experimentales no muestran resultados favorables para concentraciones iniciales altas, Zhao utiliza la siguiente aproximación:

$$\sigma = 4 \cdot \lambda_D \cdot I \cdot \text{Senh}((\Delta\phi_d)/2) \quad (2.5)$$

donde σ es la densidad superficial de carga λ_D es la longitud de Debye, $\lambda_D = (8\pi \cdot I \cdot Na \cdot \lambda_B)^{-1/2}$, λ_B es la longitud de Bjerrum ($\lambda_B = 0.72$ nm del agua a temperatura ambiente), Na es el número de Avogadro (mol^{-1}), $\Delta\phi_d$ es el potencial de la capa difusa y I es la fuerza ionica (mM)

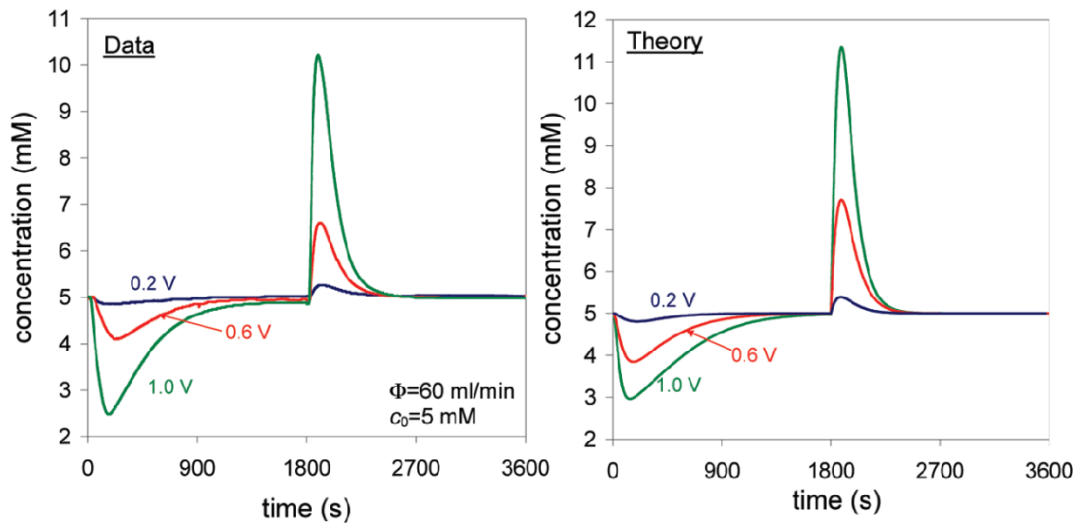


Figura XIII. Modelo de la variación de la concentración con respecto al tiempo propuesta por Zhao [40]

Nordstrand et al. [8] utilizan una expresión parecida a la de Zhou [43] con ciertas diferencias, definiendo que la carga total almacenada en coulombs (Q_e) depende de la constante de Faraday (F), la microporosidad (p_m), la carga del ion (z_i), el volumen de solución entre un par de electrodos (V_e) y la concentración inicial de iones en la solución (C_{0i}) y el potencial en el microporo (E_μ), expresado en la siguiente ecuación:

$$Q_e = \sum 2 \cdot F \cdot z_i \cdot C_{0i} \cdot \exp(E_\mu) \cdot \text{Senh}(z_i \cdot \Delta\phi_D) \cdot p_m \cdot V_e \quad (2.6)$$

En la **Figura XIV.** se muestran los resultados que se obtiene del modelo propuesto

Como se evidencia en ambos casos, se hace uso de datos microscópicos, que cumplen con la tendencia sin embargo en los valores extremos es donde la desviación estadística es más evidente.

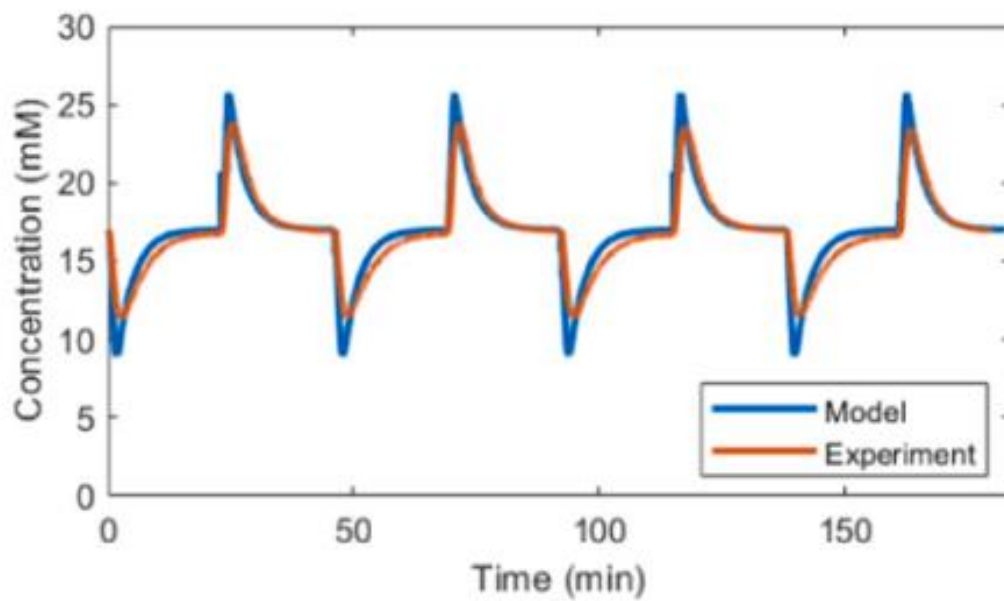


Figura XIV. Comparativa de los resultados obtenidos por el modelo propuesto por Nordstrand [8].

III. Materiales, métodos de adquisición de datos y modelamiento por ajuste exponencial y doble exponencial

A. Materiales

1) Celda de deionización capacitiva

Para la obtención de los datos se utiliza de una celda compuesta por nueve pares de electrodos de grafito, en cuya superficie se ha cubierto con una película de 300 μm de espesor del material activo, que después del tratamiento térmico se reduce a un espesor de 100 μm en promedio como se muestra en la **Figura XV** , El material activo está compuesta por una mezcla de carbón activado que ha sido decorado con “nanorods” de ZnO, que recubre un área aproximada de 100 cm^2 como se muestra en la **Figura XVI**, siendo esta la superficie que está en contacto con la solución que fluye a través de la celda, siguiendo el diseño de la **Figura XII**.

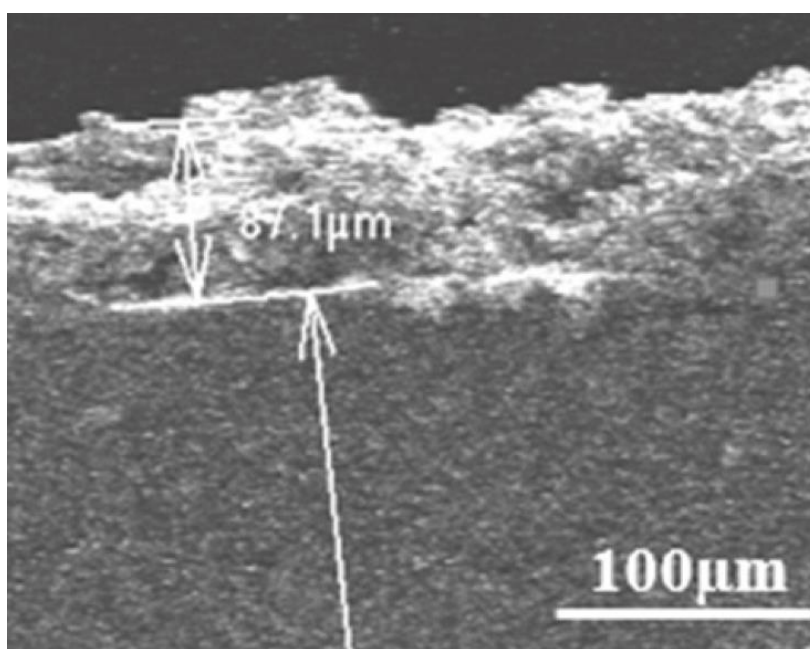


Figura XV. Variación del espesor del recubrimiento de la masa activa después del tratamiento térmico [15].

Los estudios electroquímicos del material activo muestran que la capacitancia específica es de 135.7 F/g y el área superficial es de 182 m^2/g presentando microporos y nanoporos, que a diferencia del carbón activado mejora considerablemente estos indicadores

(capacitancia específica 69.4 F/g y área específica de 33 m²/g) que a diferencia de la mezcla que contiene “nanorods” de ZnO, este no presenta nanoporos, lo que implica que tendrá una menor absorbancia de iones.

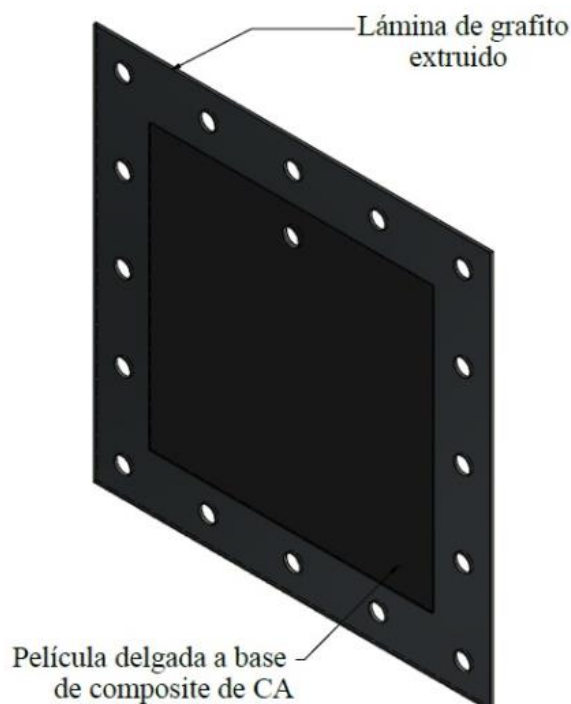


Figura XVI. Diseño del electrodo de grafito recubierto por la masa activa (composite de CA) [44].

La masa total de la mezcla del material activo depositada en la superficie del electrodo es de 13.6 g, mostrando que el SAC de la celda es de 123.66 mg/g para un flujo de 95 ml/min, además que el ASAR de la celda es de 9.89 mg/g/min para el ciclo completo, mientras que el ASAR para la etapa de absorción es de 5.06 mg/g/min. Haciendo que con estas características se compruebe la funcionalidad de la celda, todos estos resultados se han obtenido en un trabajo previo llevado en el Centro para el Desarrollo de Materiales Avanzados y Nanotecnología (CEMAT-UNI), en que se ha estudiado electroquímicamente a la celda [1].

B. Evaluación y adquisición de datos

Para la operación de la celda se suministra solución a la celda por medio de una bomba peristáltica modelo MasterFlex L/S Digital Dispensing Pump Drives, con el que se variara

el flujo de caudal en el rango de 45 ml/min hasta 105 ml/min, rango en el que la celda puede operar de manera controlada sin que el material sufra fractura alguna, la fuente de voltaje es el modelo Pelltron 3005D, bajo una diferencia de potencial de 1.2 V, que es el potencial máximo que se puede someter la celda sin que de pie a la hidrólisis del agua.

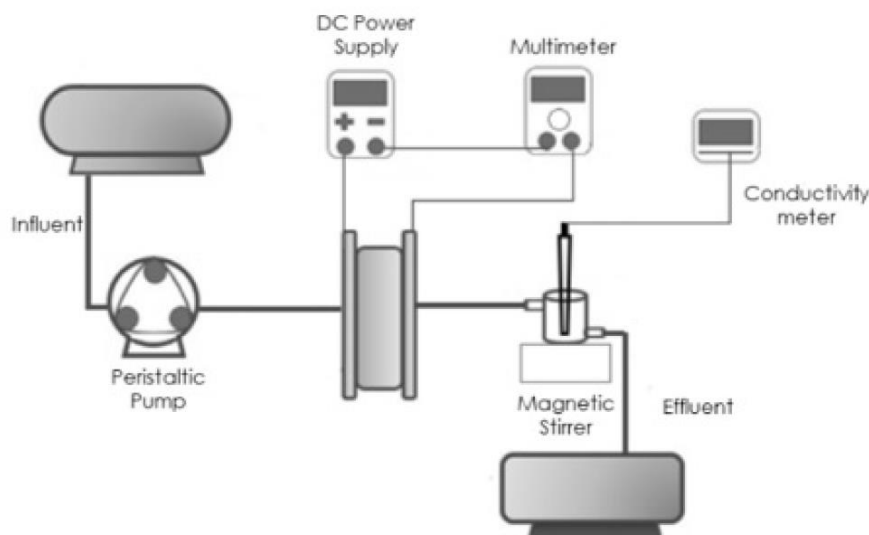


Figura XVII. Esquema de operación de la celda [15].

Finalmente, la colección de datos se obtiene de las medidas de por medio del phmetro modelo Hanna HI 5522, que mide la conductividad del agua tratada, que por medio de un factor de conversión se puede obtener la concentración de la celda.

En la **Figura XVII.** se muestra el esquema con de operación con el que se obtienen los datos.

C. Regresión logarítmica y logística

1) Regresión logarítmica de la primera etapa del proceso de absorción iónica

A partir de los datos recopilados experimentalmente se utilizará el método de regresión estadística para encontrar una expresión matemática para ambas etapas que permita obtener la variación de la concentración con respecto al tiempo.

Para la aproximación numérica se divide la etapa de absorción en dos subetapas, tomando como puntos referenciales la concentración inicial (C_0) y la concentración

mínima ($C_{\min}$), debido a que la C_0 evidencia el término de la etapa de absorción mientras que la $C_{\min}$ es el punto más bajo de la concentración de la solución tratada en el que se evidencia un cambio en el comportamiento de la variación de la concentración con respecto al tiempo.

Para la deionización capacitiva se puede distinguir dos fases claramente, como se puede observar en la **Figura I**. La primera etapa se estudia el decrecimiento de la concentración mediante el ajuste exponencial, en la **Figura XVIII**. se muestra procesos isotérmicos en la fase de carga de electrodos en un proceso de electroabsorción de NaCl que a partir de la ecuación de Freundelich [44] en el que se relaciona a la concentración iónica del producto del tratamiento de la disolución de un proceso de desionización. Se define a K_F y n como constantes propias del sistema es decir características de cada dispositivo, que dependen del tipo electrodo y masa activa.

$$q_e = K_F \cdot C^{1/n} \quad (3.1)$$

Donde q_e es la cantidad de iones absorbidos por gramo de masa activa (mg/g) definido como $q_e = m_t/m_{ac}$ [41], donde m_t es la masa de iones absorbidos, C es la concentración de iones en la solución que matemáticamente se expresa como $C = m_t/(M \cdot V_{ol})$. De las expresiones anteriores se puede redefinir la ecuación (3.1) de la siguiente manera:

$$q_e = K_c \cdot V_{ol}^r \quad (3.2)$$

con $K_c = (K_F^n \cdot m_{ac} \cdot M)^{n-1}$ y $r = (1-n)^{-1}$. Finalmente se obtiene la ecuación que se utiliza para el ajuste lineal de la primera parte de la etapa de absorción, a partir de la ecuación (3.2) y (3.3):

$$s(V_{ol}) = \ln(C) = s_1 \cdot \ln(V_{ol}) + s_2 \quad (3.3)$$

con $s_1 = r \cdot n$ y $s_2 = n \cdot \ln[K_c/K_F]$ definidos como constantes del Sistema.

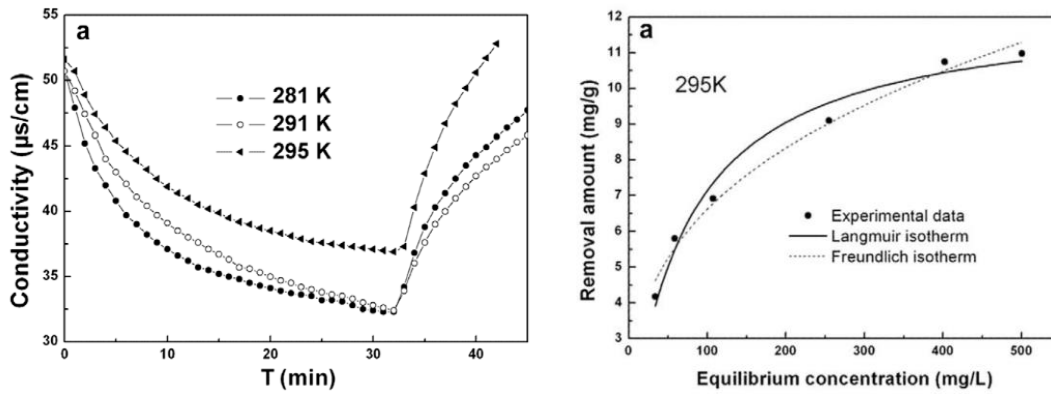


Figura XVIII. Curvas características de absorción iónica, Izquierda absorción de iones a distintas temperaturas, Derecha comparativa de los datos experimentales y el modelo de Freundelich [45].

2) Regresión logística de la segunda etapa del proceso de absorción iónica

Por otro lado, la segunda fase que comprende desde que la solución la concentración mínima de sal ($C_{\min}$) alcanzado después de la primera etapa y se evidencia un incremento de la concentración, finalizando cuando la concentración de la solución tratada es igual a la concentración inicial (C_0). Mostrando la saturación de la celda, es decir que ya no puede absorber más iones de la solución.

Esta etapa se relaciona con las funciones logísticas que se puede deducir de las curvas características de la variación de la concentración vs el tiempo. Seif et al. [46] hace una correlación entre los fenómenos termodinámicos cuyas curvas características en donde el proceso alcance la saturación. Sin embargo, el modelo que se utiliza para este trabajo entra dentro del modelo tipo doble exponencial como lo detalla Hu et al. [47], de la forma, que una función logística modificada. A continuación, se muestran las ecuaciones logísticas y sus variantes:

$$y(x) = [1 + \exp(-kx + x_0)]^{-1} \quad (3.4)$$

$$y(x) = a [1 + b \cdot \tanh(-kx + x_0)] \quad (3.5)$$

$$y(x) = a \exp[-b \cdot \exp(-kx + x_0)] \quad (3.6)$$

donde x es la variable, $y(x)$ es una función que depende de x y a , b , x_0 , k son constantes propias del sistema, según sea el caso. La ecuación (3.4) es la función exponencial

propriadmente dicha, mientras que las funciones (3.5) y (3.6) son funciones logísticas modificadas

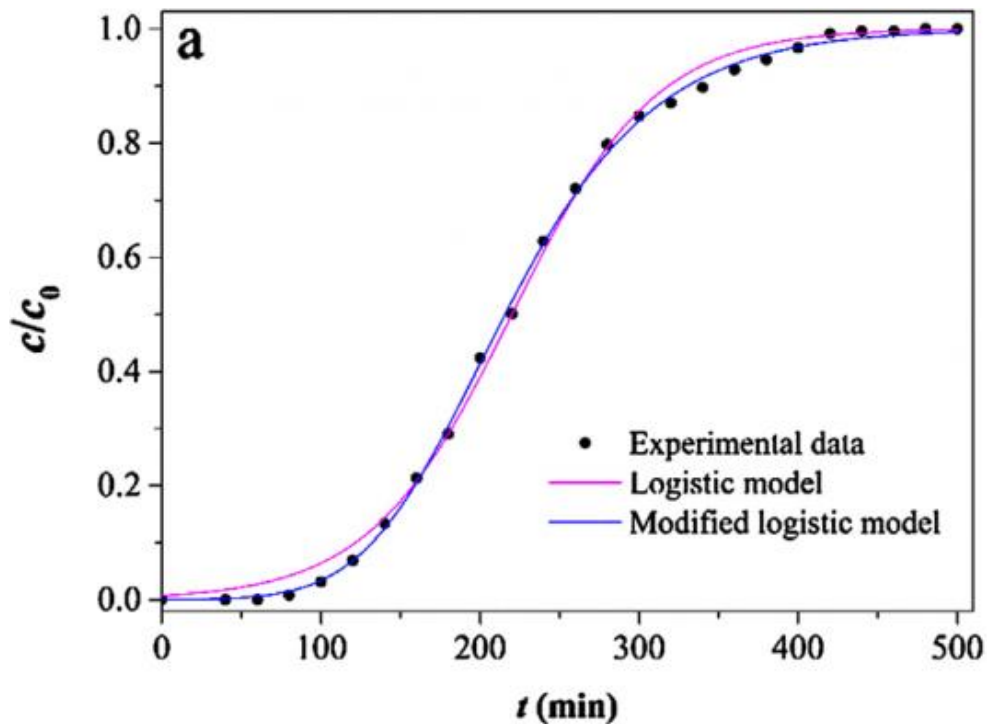


Figura XIX. Curvas características experimentales para los modelos logístico y logístico modificado para un proceso de absorción iónica [47].

En la **Figura XIX.** se muestra la comparativa de los datos experimentales con los resultados modelados usando la ecuación logística y la ecuación logística modificada.

Que para el caso de la concentración se utiliza:

$$\frac{C}{C_0} = \frac{1}{a \cdot e^{b \cdot e^{k \cdot (-x) + x_0}}} \quad (3.7)$$

donde a , b , k y x_0 son constantes propias del sistema.

Se propone utilizar parámetros macroscópicos medibles como son la concentración mínima, la concentración inicial, tiempo y caudal.

En este estudio se utiliza la ecuación logística modificada para la segunda etapa siguiendo los parámetros del ajuste doble exponencial mediante la ecuación (3.6)

$$C(V_{ol}) = \frac{C_0}{1 + e^{p \cdot (C_{min}) \cdot e^{q(V_{ol})}}} \quad (3.8)$$

Con

$$p(C_{min}) = \ln\left(\frac{C_0}{C_{min}} - 1\right) \quad (3.9)$$

Donde C_{min} es la concentración mínima del ciclo de absorción (M), haciendo que p sea una constante del sistema medible a partir de los datos macroscópicos como son la concentración mínima (C_{min}) y la concentración inicial (C_0), mientras que la función lineal $q(V_{ol})$, se expresa como:

$$q(v) = q_1 \cdot V_{ol} + q_2 \quad (3.10)$$

donde, al igual que las anteriores funciones las constantes q_1 y q_2 se obtienen del ajuste de las curvas correspondientes a la celda. La ecuación (3.10) se utiliza para linealizar los resultados y encontrar las correspondientes constantes que cumplan con las condiciones de la ecuación (3.8).

IV. Resultados y discusiones

A. Ajuste exponencial (primera etapa)

De los datos del tratamiento de solución de la celda se construyen la gráfica de un proceso de electroabsorción-fisisorción que se muestra en la **Figura XX.**, por su parte la gráfica del proceso de electroabsorción se muestra en la **Figura XXI.** para los dos casos se toma los datos del tratamiento para un rango de caudales que comprende desde los 45 ml/min hasta 105 ml/min, rango en el que se ha demostrado la fiabilidad de la celda.

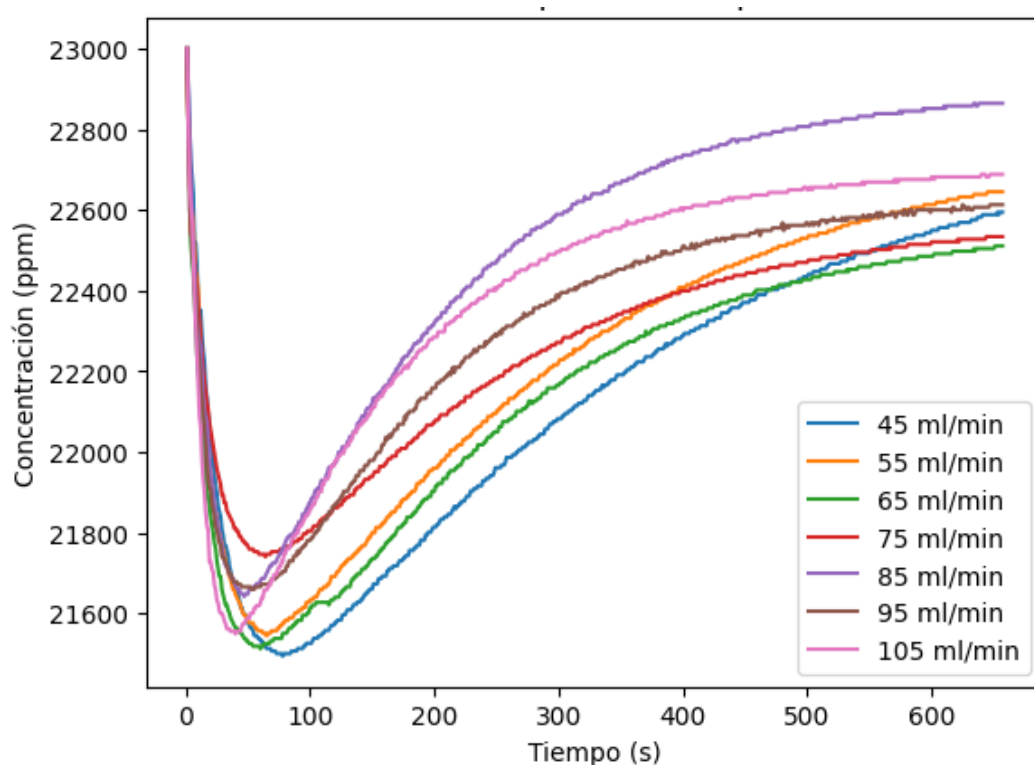


Figura XX. Variación de la concentración con respecto al tiempo para la electroabsorción – fisisorción (0.4 M, 1.2V).

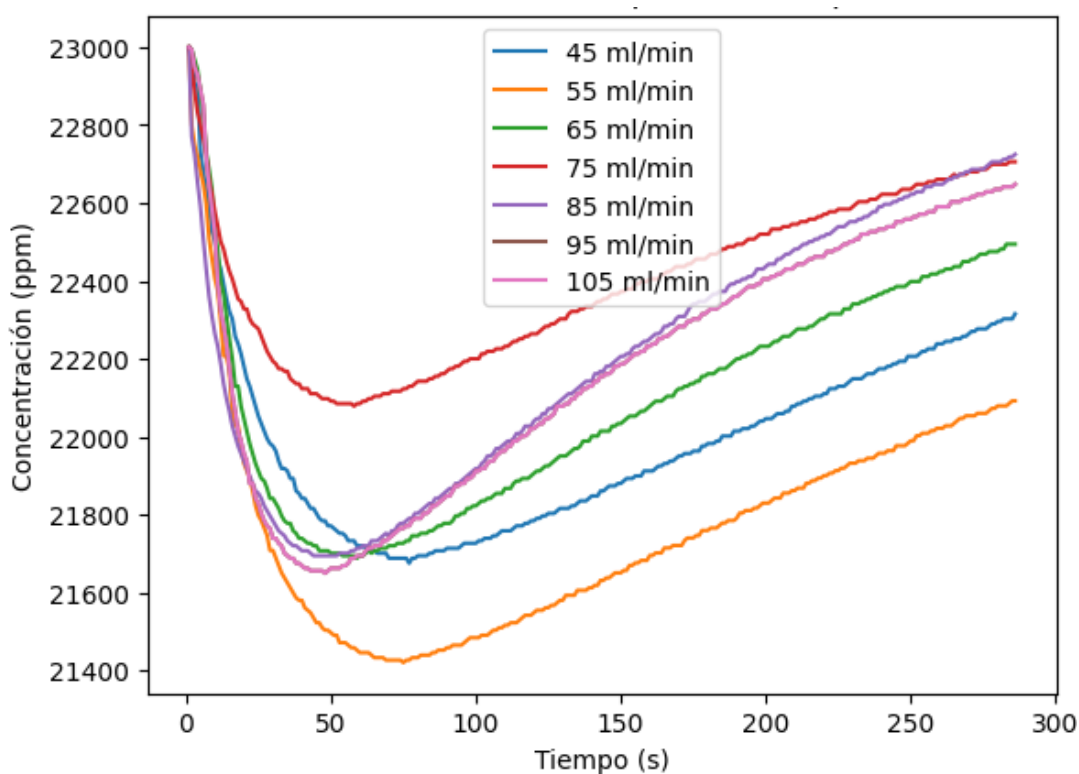


Figura XXI. Variación de la concentración con respecto al tiempo para la electroabsorción (0.4 M, 1.2V).

Nótese que el tiempo que tarda en completar la etapa de absorción para un tratamiento en el que se mantiene alimentado por una diferencia de potencial es menor con respecto en el que se liberan los iones físicamente (fisisorción).

En la **Figura XXII.**, (en el **Anexo 1** se encuentran todos los resultados obtenidos para las curvas correspondientes para el resto de los caudales) por medio de las ecuaciones (3.2) y (3.3)

En la **Tabla III.** se muestra los ajustes logarítmicos para esta subetapa en el que se incluye el factor R^2 que indica la variación de los datos reales con respecto al ajuste seguido.

Tabla III. Coeficientes relacionados a los ajustes logísticos para distintos caudales en el proceso de electroabsorción de la celda (0.4 M, 1.2 V).

Q (ml/min)	S ₁	R ²
45	-0.021	0.9637
55	-0.021	0.9652
65	-0.021	0.9427
75	-0.021	0.9706
85	-0.021	0.9809
95	-0.021	0.9332
105	-0.021	0.9736

En tanto el factor R^2 promedio para este ajuste es 0.961414, lo que implica un error de aproximadamente el 3.86%. Además, Es notable que el factor s_1 correspondiente a la función $s(V_{ol})$ es -0.021 es una constante independientemente del caudal con el que se suministra la disolución a la celda, como se muestra en la **Tabla III**. Por lo que la absorción para esta etapa solo depende del tiempo que tarda en llegar a la concentración mínima, lo que implica que está vinculado al caudal con el que se suministra solución a la celda, considerándose parámetro de la celda.

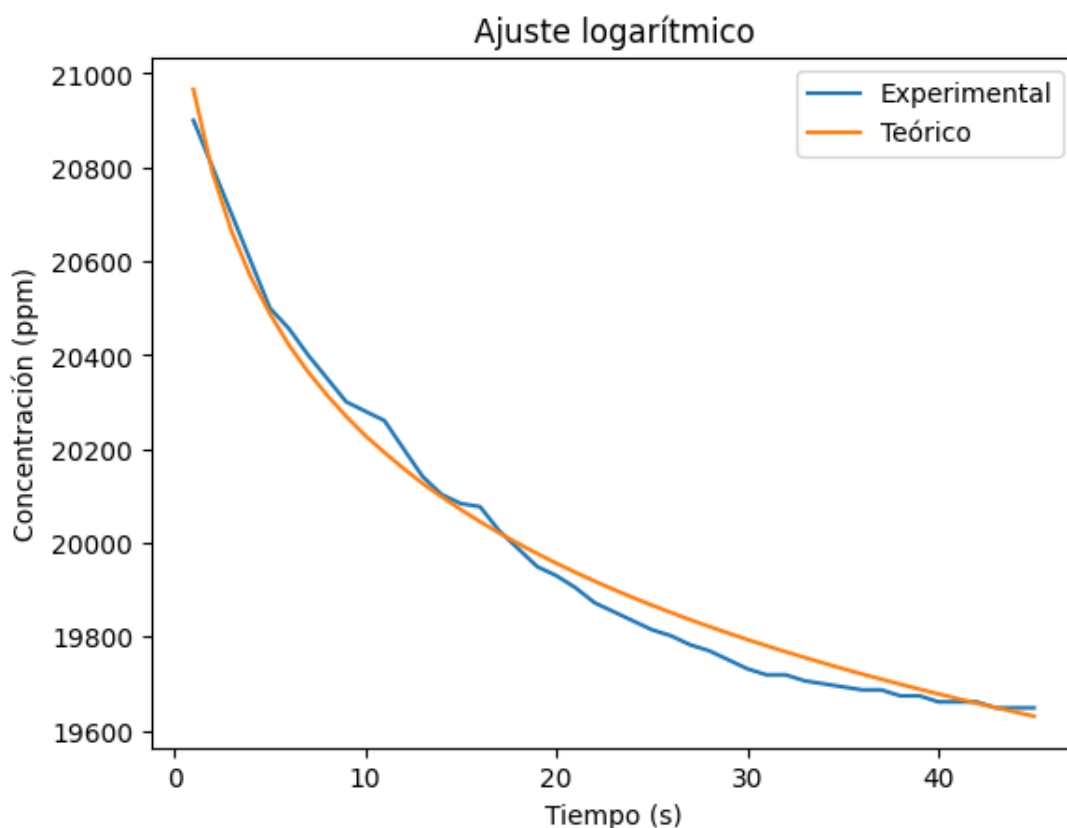


Figura XXII. Ajuste logarítmico de la primera etapa de la absorción, usando como parámetro la relación de la concentración inicial y la concentración para un volumen de solución tratado por la celda ($\ln(C/C_0)$ vs $\ln(V_{ol})$) (0.4 M, 1.2 V, 85 ml/min).

B. Ajuste doble exponencial (segunda etapa)

Para calcular el ajuste correspondiente al ajuste estadístico para la segunda subetapa de la absorción se realiza mediante las gráficas obtenidas mediante la linealización de la ecuación (3.10), que, a diferencia del ajuste para la primera etapa, esta lleva a cabo de forma diferenciada para los procesos electroabsorción y para la fisorción, en la **Figura XXIII**. se muestra el resultado del ajuste lineal para la fisorción. (El resto de los ajustes lineales correspondientes a la función logística se detallan en el **Anexo 2**)

A fin de evaluar y comprender los procesos de fisorción y electroabsorción que se da en la celda se hacen dos procesos diferenciados en el que para estudiar la fisorción se deja de suministrar energía a la celda una vez que haya llegado a la concentración mínima,

mientras que para la electroabsorción no se deja de suministrar energía durante todo el proceso de absorción, en el que se seguirá reteniendo iones hasta la saturación de la celda, el que culminara cuando la celda llegue a la misma concentración inicial; del que se obtienen los siguientes ajustes para distintos caudales, obteniéndose así los coeficientes q_1 , por medio de las ecuaciones (3.9) y (3.10).

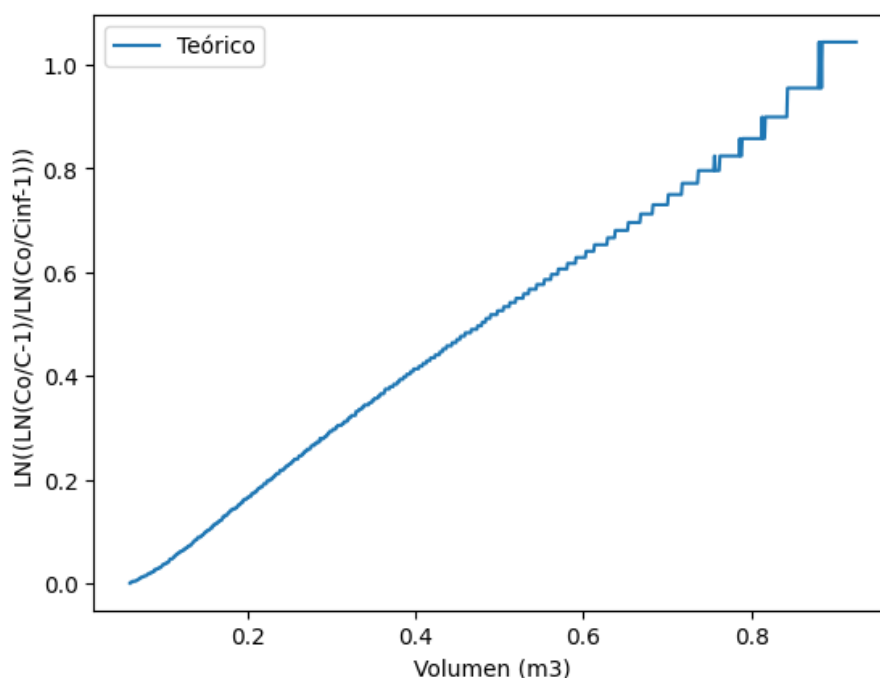


Figura XXIII. ajuste lineal de la ecuación logística asociada a la segunda etapa del proceso de absorción usando como parámetro la relación de la concentración inicial y la concentración para un volumen de solución tratado por la celda por fisorción (0.4 M, 1.2 V, 55 ml/min).

En la **Figura XXIV.** se muestra el ajuste para el tratamiento de solución para la electroabsorción, en el **Anexo 3**, se muestran el resto de los ajustes bajo los parámetros mencionados. Los ajustes y el factor R^2 se muestran en la **Tabla IV.**

En el que se obtiene un R^2 promedio de 0.9938 para el proceso de fisorción, lo que indica un error inferior al 0.7%. Para el proceso de electroabsorción, el error es menor al 0.3%, lo que confirma que los resultados del ajuste estadístico para la segunda etapa concuerdan con los datos experimentales.

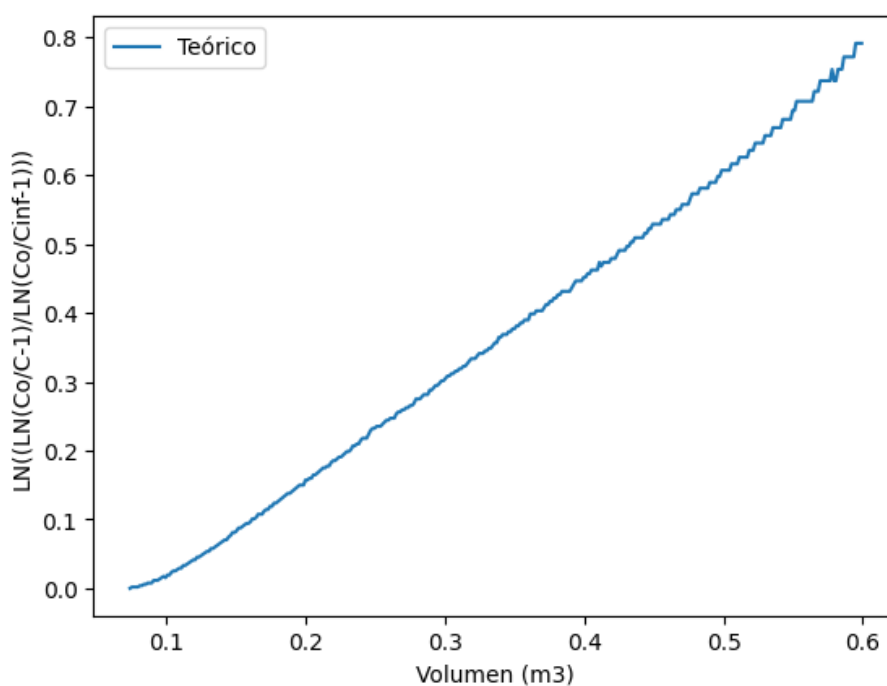


Figura XXIV. ajuste lineal de la ecuación logística asociada a la segunda etapa de la electroabsorción (0.4 M, 1.2 V, 85 ml/min).

En este ajuste se aprecia claramente la linealidad de la función $q(V_{ol})$. Cabe destacar que, a diferencia de la tendencia del factor s_1 , el factor q_1 no es constante, sino que es inversamente proporcional al volumen suministrado, como se observa en la gráfica correspondiente

Tabla IV. Coeficientes asociados a la ecuación lineal de la función $q(V_{ol})$.

Q	q_{1f}	q_{1e}	R^2_f	R^2_e
ml/min				
45	1.2651	1.6551	0.9947	0.9974
55	1.1833	1.4702	0.9972	0.998
65	0.994	1.235	0.993	0.9964
75	0.9751	1.1482	0.9951	0.9991
85	0.9336	1.0501	0.9896	0.9982
95	0.9099	1.015	0.9948	0.9933
105	0.9041	1.0425	0.9931	0.9985

En la **Figura XXV.** se muestra una clara tendencia descendente conforme el caudal aumenta para ambos procesos, además que en el proceso de electroabsorción se obtiene una mayor absorción con respecto a la fisorción.

C. Comparativa del modelo con los resultados experimentales

En la **Figura XXVI.** de ambas ecuaciones se muestran las gráficas características del proceso de absorción utilizando los valores correspondientes al modelo propuesto comparándolos con los datos colectados para el proceso de electroabsorción-fisorción, suministrado por un caudal de 45 ml/min. En la **Figura XXVII.** se muestra la comparativa en un proceso de electroabsorción a las mismas condiciones que el anterior (el resto de las curvas características a diferentes caudales y procesos se muestran en el **Anexo 4** para el tratamiento electroabsorción fisorción y en el **Anexo 5** para el tratamiento electroabsorción)

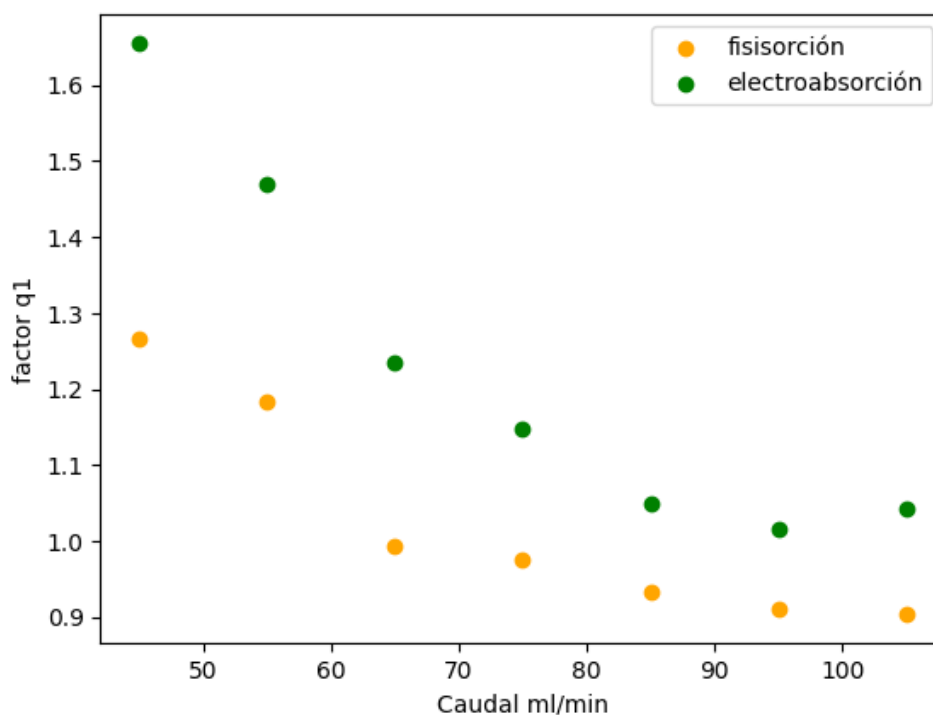


Figura XXV. Comparativa de las tendencias del factor q_1 para los procesos de electroabsorción y fisorción para el rango de caudales de 45 ml/min – 105 ml/min (1.2 V, 0.4 M).

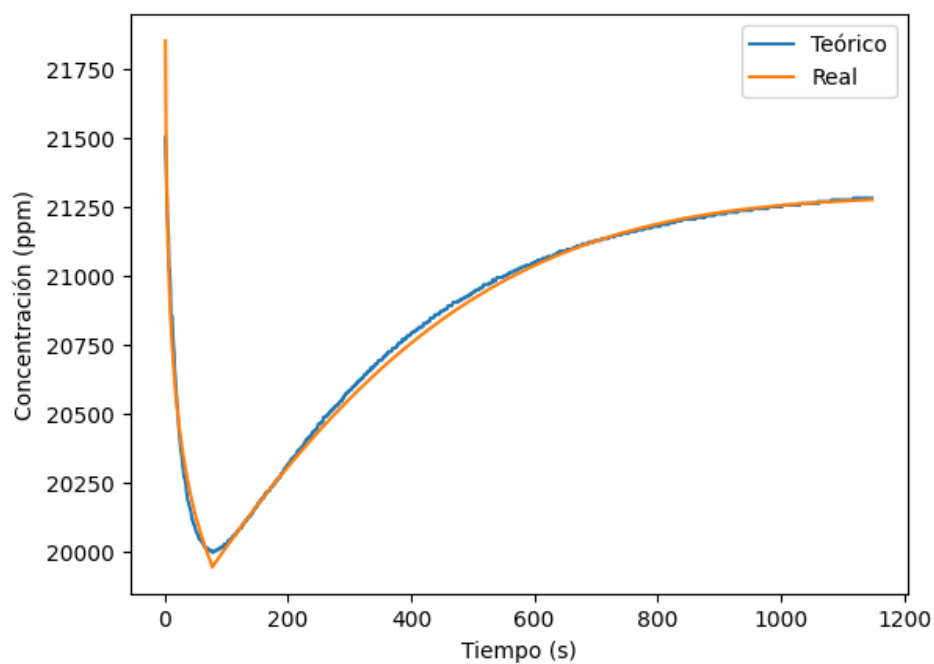


Figura XXVI. Comparativa del modelo propuesto y los datos colectados en un proceso de tratamiento de deionización capacitiva electroabsorción - fisisorción (45 ml/min, 0.4 M, 1.2 V).

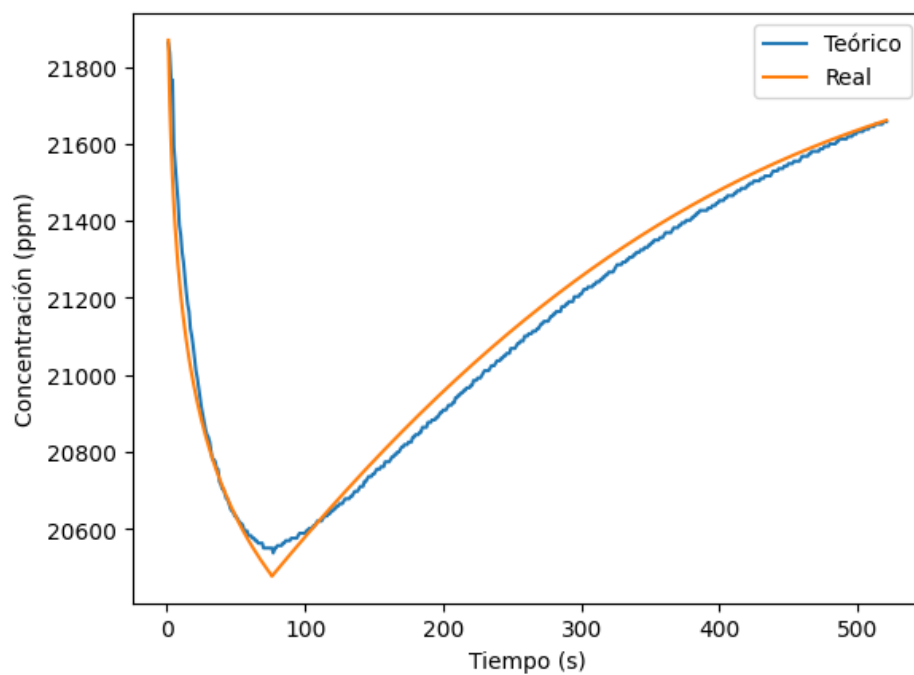


Figura XXVII. Comparativa del modelo propuesto y los datos colectados en un proceso de tratamiento de deionización capacitiva electroabsorción (45 ml/min, 0.4 M, 1.2 V).

Los resultados responden satisfactoriamente a las curvas características en condiciones reales reduciendo la diferencia estadística de forma notable los modelos propuestos en la literatura. Además, se puede notar el menor tiempo que necesita el segundo proceso para llegar a la carga máxima.

Por último, se muestra la **Tabla V.** comparativa de SAC y ASAR para la celda electroquímica cuyo funcionamiento ideal, es decir que la celda realiza el tratamiento de aguas optimizando los parámetros de caudal, diferencial de potencial y eficiencia energética, el cual es de 85 ml/min, 1.2 V, en condiciones comparables al agua de mar (0.4 M), que responden a un trabajo previo [1]. a fin de comparar y predecir la fiabilidad del modelo planteado, esta comparativa es relevante, que como se mencionó anteriormente, son parámetros estandarizados comparativos entre los dispositivos que se basan en la deionización capacitiva. En el que se observa valores muy próximos para dichos parámetros, siendo el error para el SAC de 0.4268 %, mientras que para el ASAR es de 0.425 %, demostrando así la certeza del modelo comparado con los datos experimentales.

Tabla V. Comparativa con los datos experimentales y teóricos, para los parámetros de SAC y ASAR (85 ml/min, 0.4 M, 1.2 V)

	Experimental	Teórico	Error (%)
SAC (mg/g)	111.7493	112.2263	-0.4268
ASAR (mg/g/min)	15.96419	16.03233	-0.42499

V. Conclusiones

1. Los resultados muestran que el modelo propuesto mediante el ajuste exponencial y doble exponencial se aproxima en gran medida a las curvas características propias de una celda que sigue las propiedades de la deionización capacitiva en un rango amplio de caudales.
2. Se demuestra que para la primera subetapa se puede considerar que el factor s_1 es una propiedad de la celda, es decir está relacionada a la masa activa y a la concentración inicial de la solución que es tratada por la celda independientemente del caudal al que es suministrado la solución a la celda.
3. Por su parte el factor q_1 para la segunda subetapa si es afectado por el caudal al que se suministra la solución a la celda, en el que se destaca la linealidad de la función $q(V_{ol})$, mostrando una gran aproximación, el cual está relacionado a la rapidez del incremento de la concentración de la solución producto del tratamiento producto de la deionización capacitiva.
4. Probablemente la contribución más notable de este trabajo es encontrar el modelo que explica el proceso de la variación de la carga con respecto al volumen de solución con el que se puede hallar parámetros estandarizados comparativos propios de la celda como son la capacidad de absorción de sal (SAC) y la tasa de absorción de sal (ASAR), el cual permite obtener estos parámetros de forma teórica para ser comparado con resultados experimentales, en el que se comprueba la fiabilidad del modelo teniendo ambos errores menores al 0.5% bajo estándares ideales de funcionamiento de la celda.

VI. Referencias bibliográficas

- [1] J. Martinez et al., "Fabrication of Activated Carbon Decorated with ZnO Nanorod-Based Electrodes for Desalination of Brackish Water Using Capacitive Deionization Technology," *Int J Mol Sci*, vol. 24, no. 2, Jan. 2023, doi: 10.3390/ijms24021409.
- [2] M. E. Suss, S. Porada, X. Sun, P. M. Biesheuvel, J. Yoon, and V. Presser, "Water desalination via capacitive deionization: What is it and what can we expect from it?," *Energy and Environmental Science*, vol. 8, no. 8. Royal Society of Chemistry, pp. 2296–2319, 2015. doi: 10.1039/c5ee00519a.
- [3] S. Porada, R. Zhao, A. Van Der Wal, V. Presser, and P. M. Biesheuvel, "Review on the science and technology of water desalination by capacitive deionization," *Progress in Materials Science*, vol. 58, no. 8. Elsevier Ltd, pp. 1388–1442, 2013. doi: 10.1016/j.pmatsci.2013.03.005.
- [4] T. J. Welgemoed and C. F. Schutte, "Capacitive Deionization TechnologyTM: An alternative desalination solution," *Desalination*, vol. 183, no. 1–3, pp. 327–340, Nov. 2005, doi: 10.1016/j.desal.2005.02.054.
- [5] Y. M. Volfkovich, "Capacitive Deionization of Water (A Review)," *Russian Journal of Electrochemistry*, vol. 56, no. 1, pp. 18–51, Jan. 2020, doi: 10.1134/S1023193520010097.
- [6] J. G. Gamaethiralalage et al., "Recent advances in ion selectivity with capacitive deionization," *Energy and Environmental Science*, vol. 14, no. 3. Royal Society of Chemistry, pp. 1095–1120, Mar. 01, 2021. doi: 10.1039/d0ee03145c.
- [7] A. Hemmatifar, M. Stadermann, and J. G. Santiago, "Two-Dimensional Porous Electrode Model for Capacitive Deionization," *Journal of Physical Chemistry C*, vol. 119, no. 44, pp. 24681–24694, Nov. 2015, doi: 10.1021/acs.jpcc.5b05847.
- [8] J. Nordstrand, L. Zuili, E. A. Toledo-Carrillo, and J. Dutta, "Predicting capacitive deionization processes using an electrolytic-capacitor (ELC) model: 2D dynamics, leakages, and multi-ion solutions," *Desalination*, vol. 525, Mar. 2022, doi: 10.1016/j.desal.2021.115493.
- [9] C. A. R. Perez, O. N. Demirer, R. L. Clifton, R. M. Naylor, and C. H. Hidrovo, "Macro Analysis of the Electro-Adsorption Process in Low Concentration NaCl Solutions for Water Desalination Applications," *J Electrochem Soc*, vol. 160, no. 3, pp. E13–E21, 2013, doi: 10.1149/2.025303jes.
- [10] Y. Mao, V. R. Ardham, L. Xu, P. Cui, and D. Wu, "Insight into electrosorption behavior of monovalent ions and their selectivity in capacitive deionization: An atomic level study by molecular dynamics simulation," *Chemical Engineering Journal*, vol. 415, Jul. 2021, doi: 10.1016/j.cej.2021.128920.
- [11] K. Singh, S. Porada, H. D. de Gier, P. M. Biesheuvel, and L. C. P. M. de Smet, "Timeline on the application of intercalation materials in Capacitive Deionization," *Desalination*, vol. 455. Elsevier B.V., pp. 115–134, Apr. 01, 2019. doi: 10.1016/j.desal.2018.12.015.
- [12] W. Tang et al., "Various cell architectures of capacitive deionization: Recent advances and future trends," *Water Research*, vol. 150. Elsevier Ltd, pp. 225–251, Mar. 01, 2019. doi: 10.1016/j.watres.2018.11.064.
- [13] J. Choi, P. Dorji, H. K. Shon, and S. Hong, "Applications of capacitive deionization: Desalination, softening, selective removal, and energy efficiency," *Desalination*, vol. 449. Elsevier B.V., pp. 118–130, Jan. 01, 2019. doi: 10.1016/j.desal.2018.10.013.
- [14] X. Zhao, H. Wei, H. Zhao, Y. Wang, and N. Tang, "Electrode materials for capacitive deionization: A review," *Journal of Electroanalytical Chemistry*, vol. 873. Elsevier B.V., Sep. 15, 2020. doi: 10.1016/j.jelechem.2020.114416.

- [15] J. Martinez et al., "Desalination Using the Capacitive Deionization Technology with Graphite/AC Electrodes: Effect of the Flow Rate and Electrode Thickness," *Membranes (Basel)*, vol. 12, no. 7, Jul. 2022, doi: 10.3390/membranes12070717.
- [16] M. A. Ahmed and S. Tewari, "Capacitive deionization: Processes, materials and state of the technology," *Journal of Electroanalytical Chemistry*, vol. 813. Elsevier B.V., pp. 178–192, Mar. 15, 2018. doi: 10.1016/j.jelechem.2018.02.024.
- [17] K. Tang, T. Z. X. Hong, L. You, and K. Zhou, "Carbon-metal compound composite electrodes for capacitive deionization: synthesis, development and applications," *Journal of Materials Chemistry A*, vol. 7, no. 47. Royal Society of Chemistry, pp. 26693–26743, 2019. doi: 10.1039/c9ta08663c.
- [18] A. Kalfa, B. Shapira, A. Shopin, I. Cohen, E. Avraham, and D. Aurbach, "Capacitive deionization for wastewater treatment: Opportunities and challenges," *Chemosphere*, vol. 241. Elsevier Ltd, Feb. 01, 2020. doi: 10.1016/j.chemosphere.2019.125003.
- [19] P. Liu, T. Yan, J. Zhang, L. Shi, and D. Zhang, "Separation and recovery of heavy metal ions and salt ions from wastewater by 3D graphene-based asymmetric electrodes: Via capacitive deionization," *J Mater Chem A Mater*, vol. 5, no. 28, pp. 14748–14757, 2017, doi: 10.1039/c7ta03515b.
- [20] A. S. Yasin, D. hyun Kim, and K. Lee, "One-pot synthesis of activated carbon decorated with ZnO nanoparticles for capacitive deionization application," *J Alloys Compd*, vol. 870, Jul. 2021, doi: 10.1016/j.jallcom.2021.159422.
- [21] I. Park, W. Li, and A. Manthiram, "Fabrication of catalyst-coated membrane-electrode assemblies by doctor blade method and their performance in fuel cells", *Journal of Power Sources*, vol. 195, pp. 7078-7082, May 2010, doi: 10.1016/j.jpowsour.2010.05.004
- [22] E. M. Remillard, A. N. Shocron, J. Rahill, M. E. Suss, and C. D. Vecitis, "A direct comparison of flow-by and flow-through capacitive deionization," *Desalination*, vol. 444, pp. 169–177, Oct. 2018, doi: 10.1016/j.desal.2018.01.018.
- [23] K. Salari et al., "Knowledge and Technology Used in Capacitive Deionization of Water," *Membranes*, vol. 12, no. 5. MDPI, May 01, 2022. doi: 10.3390/membranes12050459.
- [24] J. Lim, J. Whitcomb, J. Boyd, and J. Varghese, "Transient finite element analysis of electric double layer using Nernst-Planck-Poisson equations with a modified Stern layer," *J Colloid Interface Sci*, vol. 305, no. 1, pp. 159–174, Jan. 2007, doi: 10.1016/j.jcis.2006.08.049.
- [25] M. Liu, J. Waugh, S. K. Babu, J. S. Spendelow, and Q. Kang, "Numerical modeling of ion transport and adsorption in porous media: A pore-scale study for capacitive deionization desalination," *Desalination*, vol. 526, Mar. 2022, doi: 10.1016/j.desal.2021.115520.
- [26] Y. Qu et al., "Charging and Transport Dynamics of a Flow-Through Electrode Capacitive Deionization System," *Journal of Physical Chemistry B*, vol. 122, no. 1, pp. 240–249, Jan. 2018, doi: 10.1021/acs.jpcc.7b09168.
- [27] K. Sharma et al., "Transport of ions in mesoporous carbon electrodes during capacitive deionization of high-salinity solutions," *Langmuir*, vol. 31, no. 3, pp. 1038–1047, Jan. 2015, doi: 10.1021/la5043102.
- [28] L. Zhou, Z. G. Qu, L. Chen, and W. Q. Tao, "Lattice Boltzmann simulation of gas-solid adsorption processes at pore scale level," *J Comput Phys*, vol. 300, pp. 800–813, 2015, doi: 10.1016/j.jcp.2015.08.014.
- [29] "Studien über electrische Grenzsichten (Études sur les couches électriques limites)," *Helmholtz H.*, vol. 7, p. 337, 1879.

- [30] M. Gouy, "Sur la constitution de la charge électrique à la surface d'un électrolyte," *Journal de Physique Théorique et Appliquée*, vol. 9, no. 1, pp. 457–468, 1910, doi: 10.1051/jphystap:019100090045700.
- [31] D. L. Chapman, "LI. A contribution to the theory of electrocapillarity," *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, vol. 25, no. 148, pp. 475–481, Apr. 1913, doi: 10.1080/14786440408634187.
- [32] C. Santos Santos, E. García-Quismondo Hernáiz Jesús Palma del Val, and P. Ocón, "Memoria presentada para optar al título de Doctor por la Universidad Autónoma de Madrid por," 2017.
- [33] Stern, H.O., *Zur theorie der elektrolytischen doppelschicht*, *Zeitschrift fur elektrochemie*, 30, pp 508, 1924, doi:10.1002/bbpc.192400182.
- [34] L. Wang, J. E. Dykstra, and S. Lin, "Energy Efficiency of Capacitive Deionization," *Environ Sci Technol*, vol. 53, no. 7, pp. 3366–3378, Apr. 2019, doi: 10.1021/acs.est.8b04858.
- [35] D. Dollimore, P. Spooner, and A. Turner, "Review Paper the bet method of analysis of gas adsorption data and its relevance to the calculation of surface areas," Elsevier Sequoia S.A, 1976.
- [36] F. Liu et al., "High response and selectivity of single crystalline ZnO nanorods modified by In₂O₃ nanoparticles for n-butanol gas sensing," *Sens Actuators B Chem*, vol. 277, pp. 144–151, Dec. 2018, doi: 10.1016/j.snb.2018.08.144.
- [37] M. T. Z. Myint, S. H. Al-Harathi, and J. Dutta, "Brackish water desalination by capacitive deionization using zinc oxide micro/nanostructures grafted on activated carbon cloth electrodes," *Desalination*, vol. 344, pp. 236–242, Jul. 2014, doi: 10.1016/j.desal.2014.03.037.
- [38] H. Maddah, and M. Shihon, "Activated carbon cloth for desalination of brackish water using capacitive deionization", *Desalination and Water Treatment*. InTech, Sep. 19, 2018. doi: 10.5772/intechopen.76838.
- [39] K. Singh, L. Zhang, H. Zuilhof, and L. C. P. M. de Smet, "Water desalination with nickel hexacyanoferrate electrodes in capacitive deionization: Experiment, model and comparison with carbon," *Desalination*, vol. 496, Dec. 2020, doi: 10.1016/j.desal.2020.114647.
- [40] S. A. Hawks et al., "Quantifying the flow efficiency in constant-current capacitive deionization," *Water Res*, vol. 129, pp. 327–336, Feb. 2018, doi: 10.1016/j.watres.2017.11.025.
- [41] R. Chen, T. Sheehan, J. L. Ng, M. Brucks, and X. Su, "Capacitive deionization and electrosorption for heavy metal removal," *Environmental Science: Water Research and Technology*, vol. 6, no. 2. Royal Society of Chemistry, pp. 258–282, Feb. 01, 2020. doi: 10.1039/c9ew00945k.
- [42] R. Zhao, P. M. Biesheuvel, H. Miedema, H. Bruning, and A. van der Wal, "Charge efficiency: A functional tool to probe the double-layer structure inside of porous electrodes and application in the modeling of capacitive deionization," *Journal of Physical Chemistry Letters*, vol. 1, no. 1, pp. 205–210, Jan. 2010, doi: 10.1021/jz900154h.
- [43] J. Colan. "Fabricación y caracterización de electrodos, estructurados a base de composites de ZnO/Carbón Activado, para desalinización de agua mediante deionización capacitiva" Tesis, Universidad Nacional de Ingeniería, Lima, 2022.
- [44] D. Liu, K. Huang, L. Xie, and L. Tang, "Relation between operating parameters and desalination performance of capacitive deionization with activated carbon electrodes", *Environmental Science: water Research and technology*, Jan. 2015, vol 1, pp. 516-522, Doi: 10.1039/C5EW00102A

- [45] H. Li, et al, "Kinetics and thermodynamics study for electrosorption of NaCl nanotubes de carbon and nanofibers electrodes", Chemical Physics Letters, vol.485, pp. 161-166, Dec. 2009, Doi: 10.1016/j.cplett.2009.12.031
- [46] A. Seif, M. Hafezi, and C. Jarzynki, "Machine learning the thermodynamic arrow of time," Nature Physics, vol. 17, pp. 105–113, Jul. 2022. Doi:10.1038/s41567-020-1018-2
- [47] Q. Hu, Y. Xie, C. Feng, and Z. Zhang, "Prediction of breakthrough behaviors using logistic, hyperbolic tangent and double exponential models in the fixed-bed column", Separation and Purification Technology, vol. 212, pp. 572-579, 2019, Doi: 10.1039/C5EW00102A

Anexos

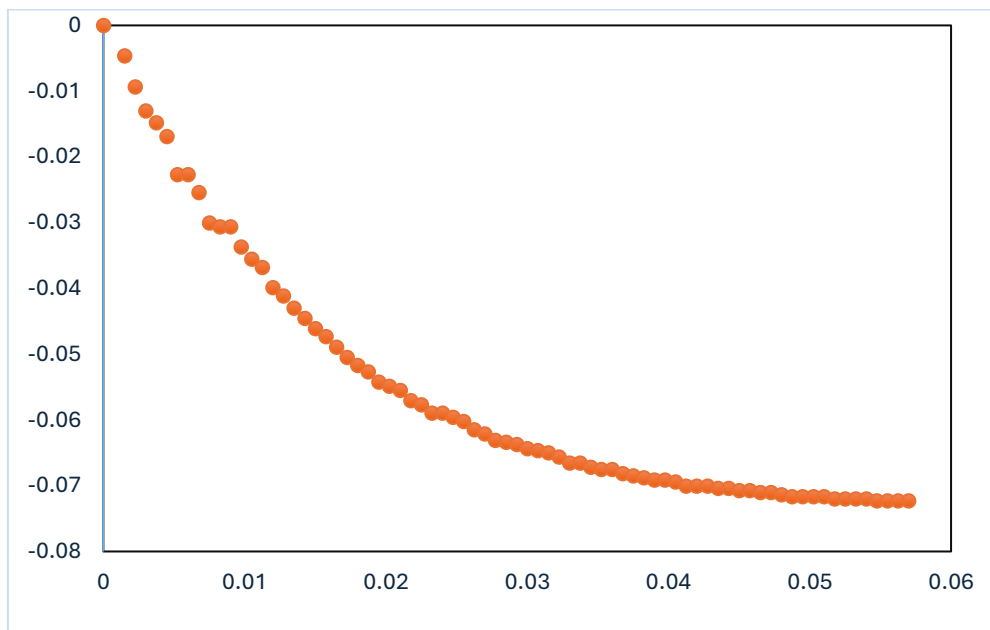
Anexo 1	Ajustes logarítmicos para la electroabsorción para la obtención de la función $s(V_{ol})$	1
Anexo 2	Ajustes logarítmicos para la fisisorción para la obtención de la función $q(V_{ol})$	5
Anexo 3	Ajustes logarítmicos para la electroabsorción para la obtención de la función $q(V_{ol})$	8
Anexo 4	Comparativa de los datos obtenidos experimentalmente con respecto a los datos calculados para el proceso de electroabsorción – fisisorción (0.4 M, 1.2 V)	13
Anexo 5	Comparativa de los datos obtenidos experimentalmente con respecto a los datos calculados para el proceso de electroabsorción – fisisorción (0.4 M, 1.2 V)	17

ANEXO 1

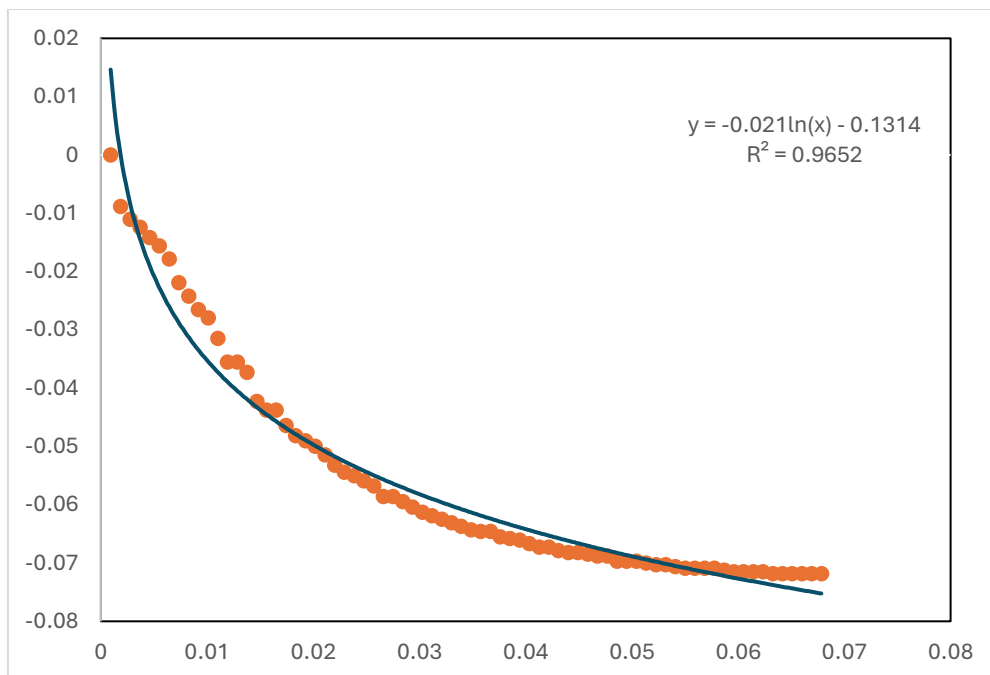
Ajustes logarítmicos para la electroabsorción para la obtención de la función $s(V_{ol})$

En el eje x volumen, en el eje y = $\ln(C/C_0)$

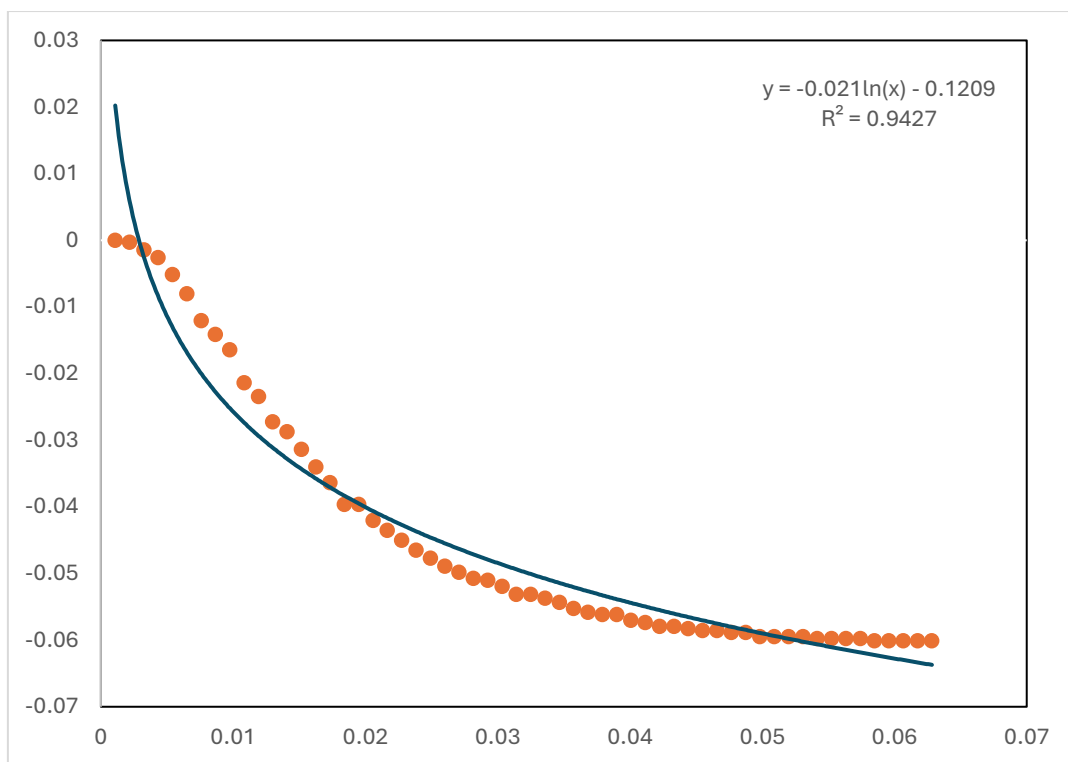
45 ml/min



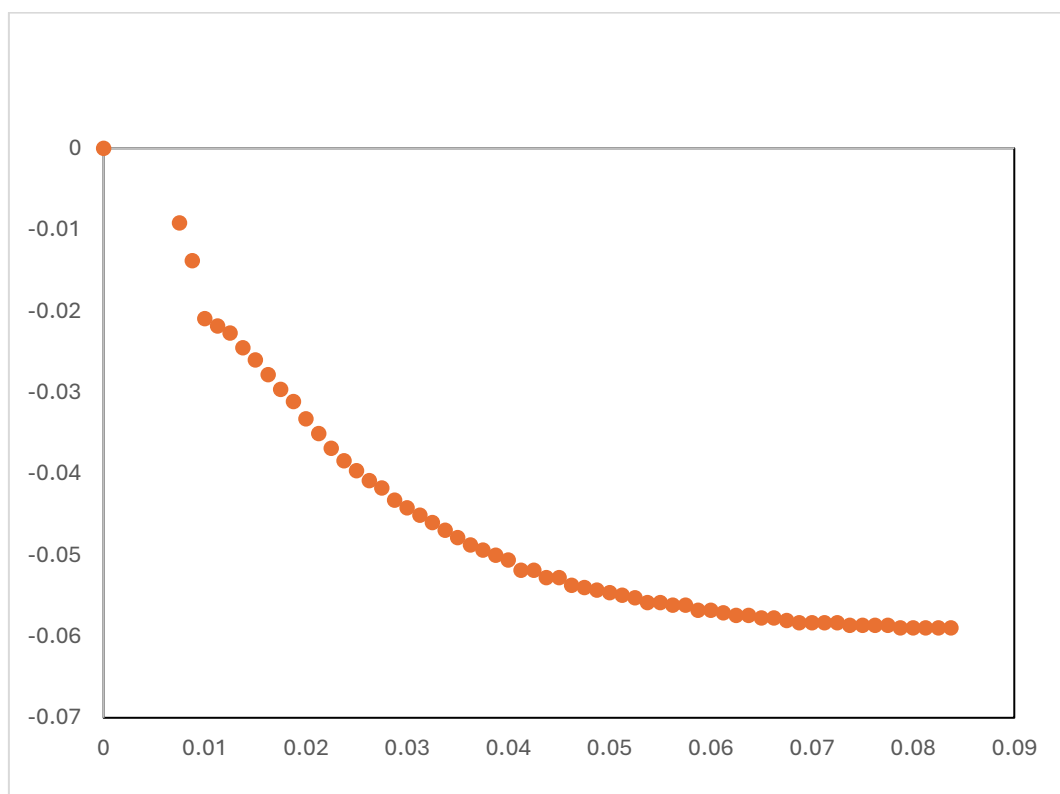
55 ml/min



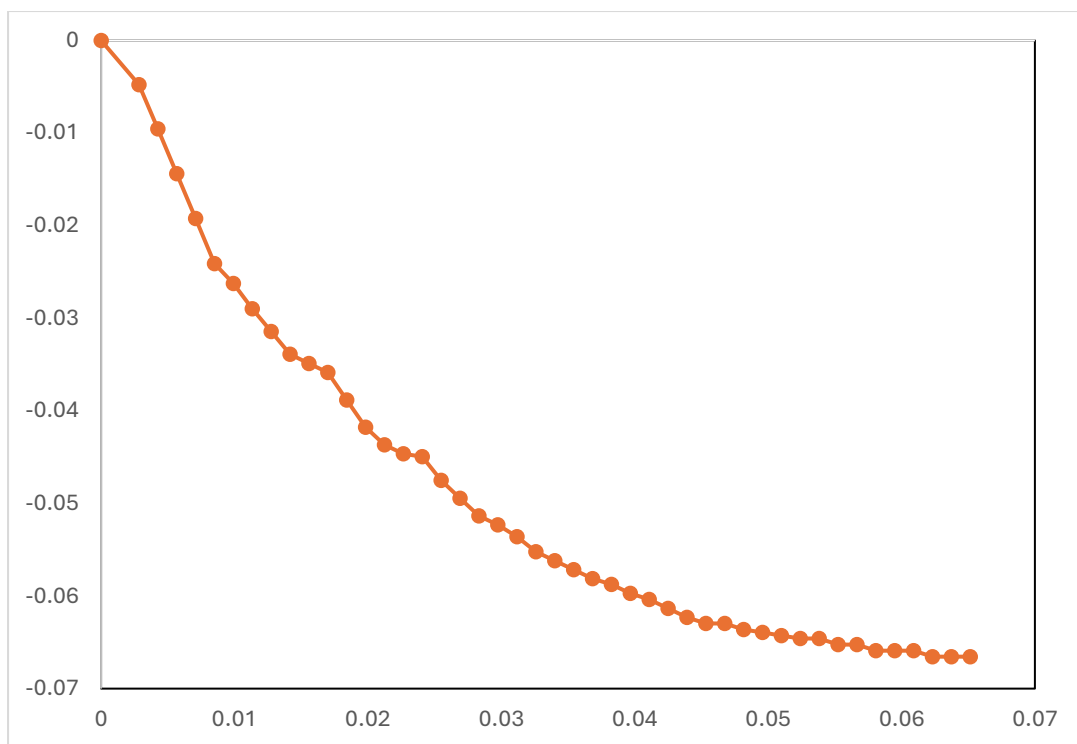
65 ml/min



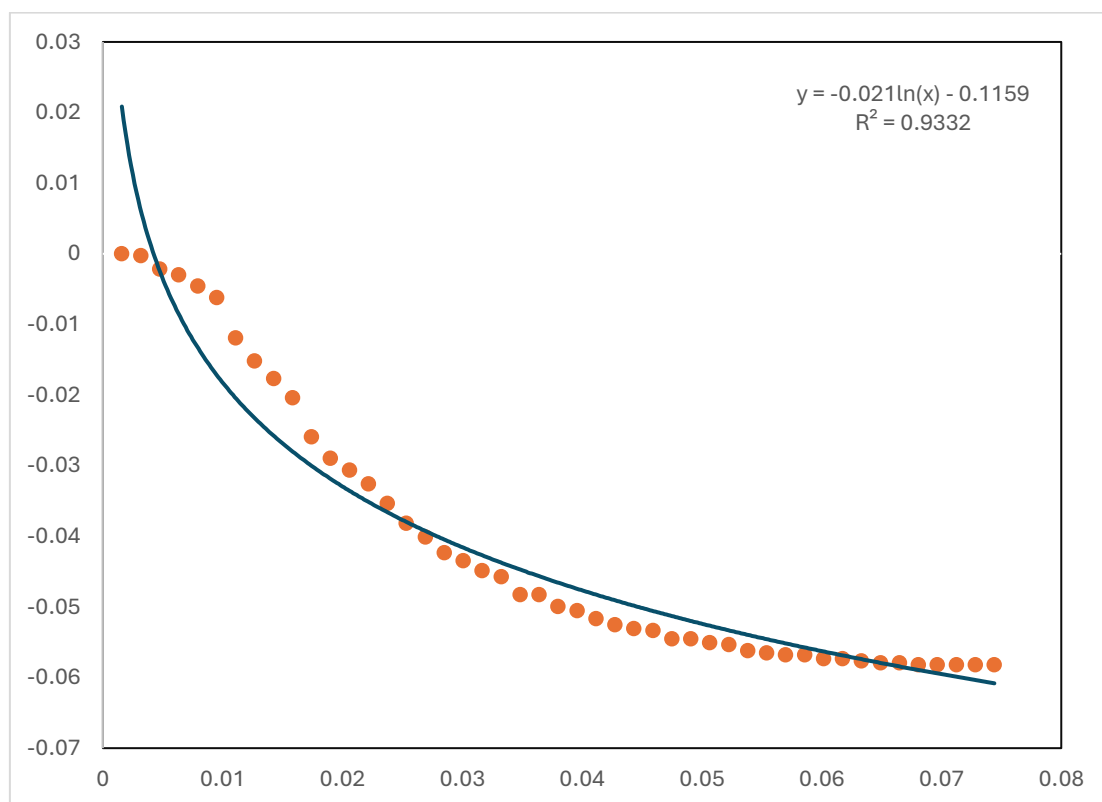
75 ml/min



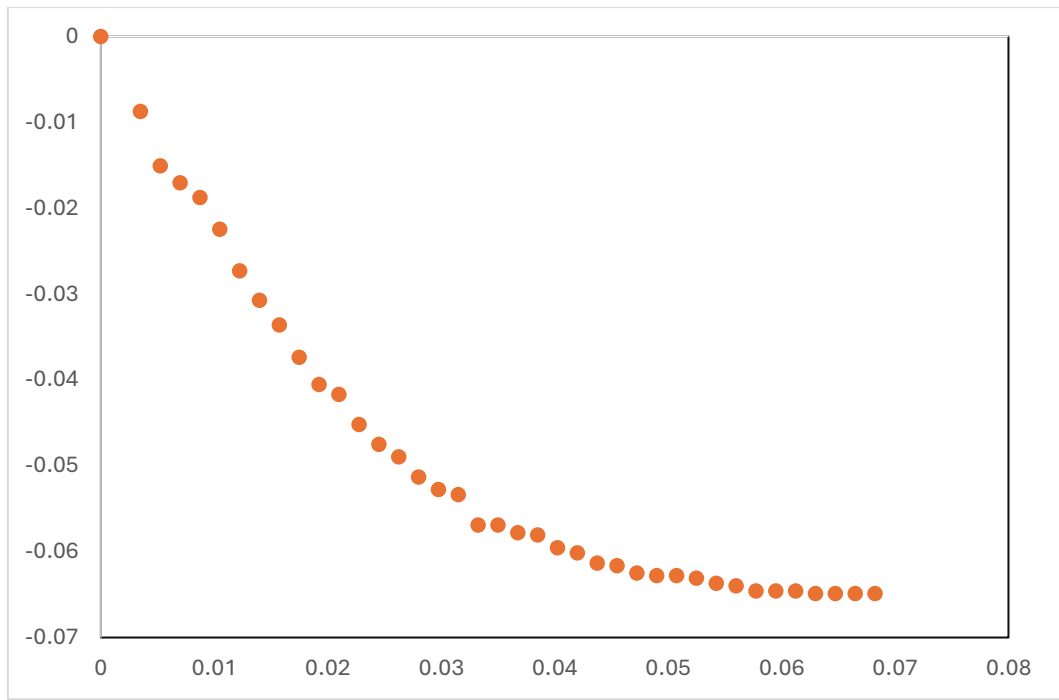
85 ml/min



95 ml/min



105 ml/min

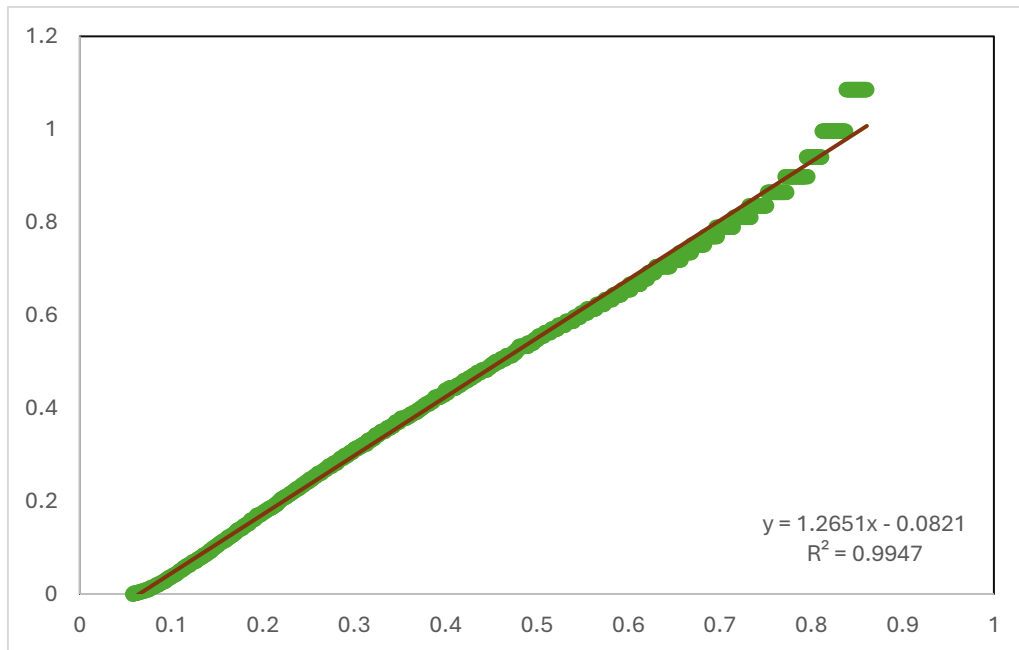


ANEXO 2

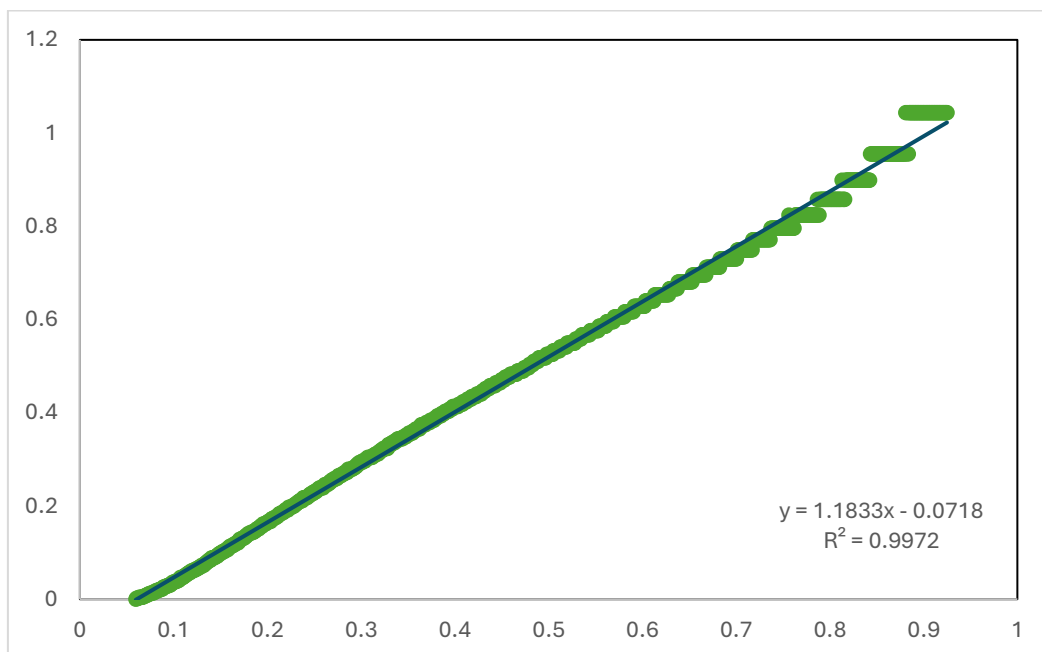
Ajustes logarítmicos para la fisisorción para la obtención de la función $q(V_{ol})$

En el eje x volumen, en el eje y $y = \ln((\ln(C_o/C-1)/\ln(C_o/C_{inf}-1)))$

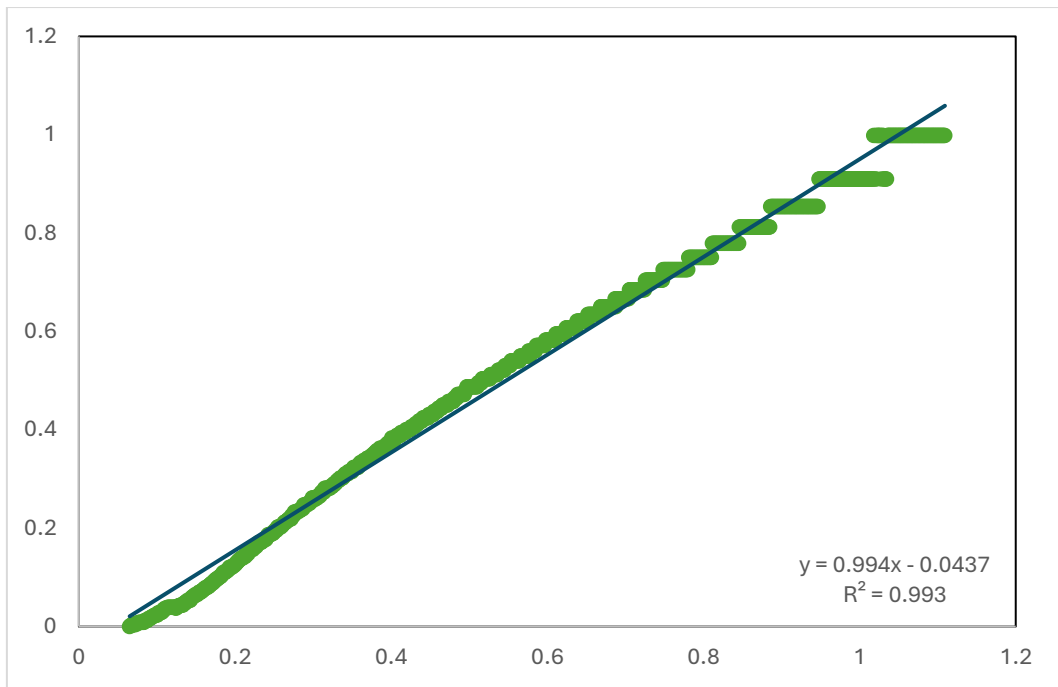
45 ml/min



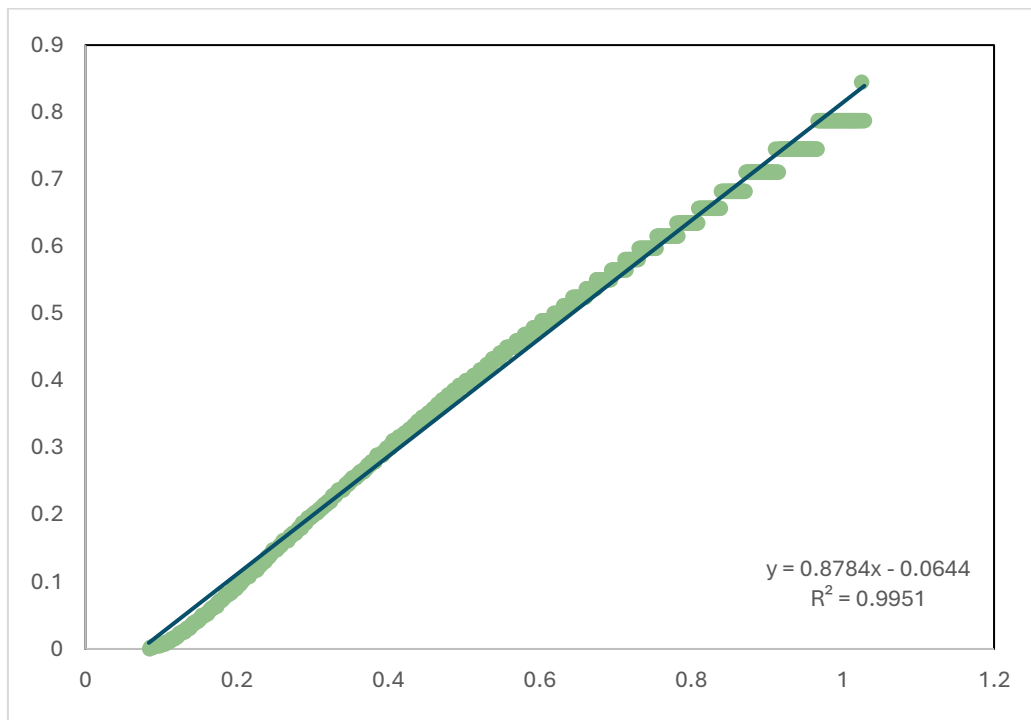
55 ml/min



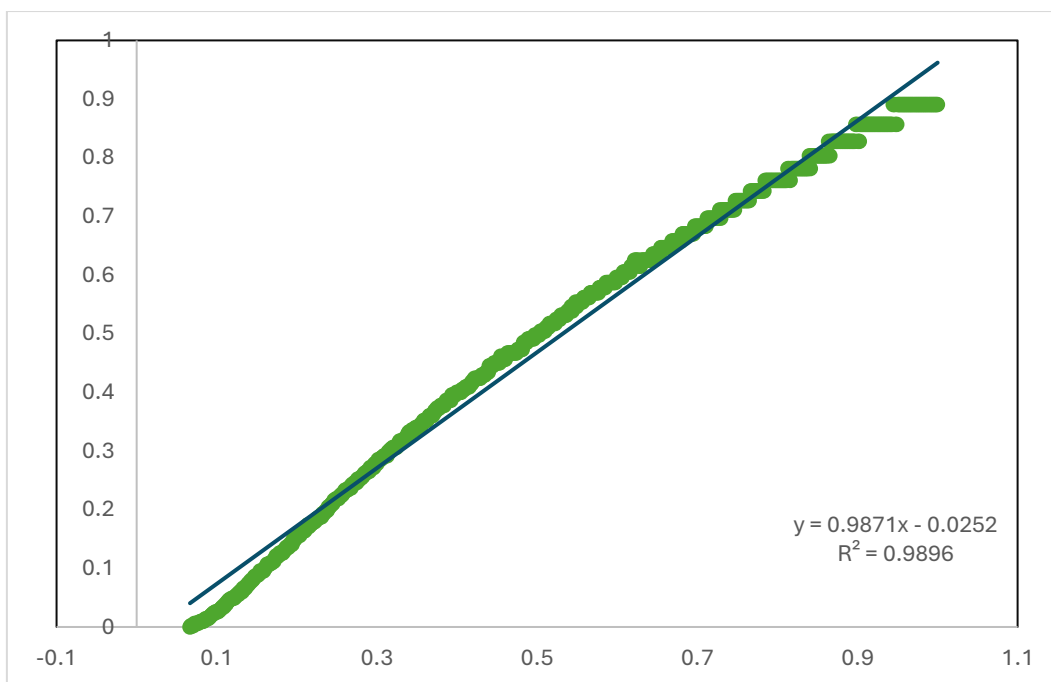
65 ml/min



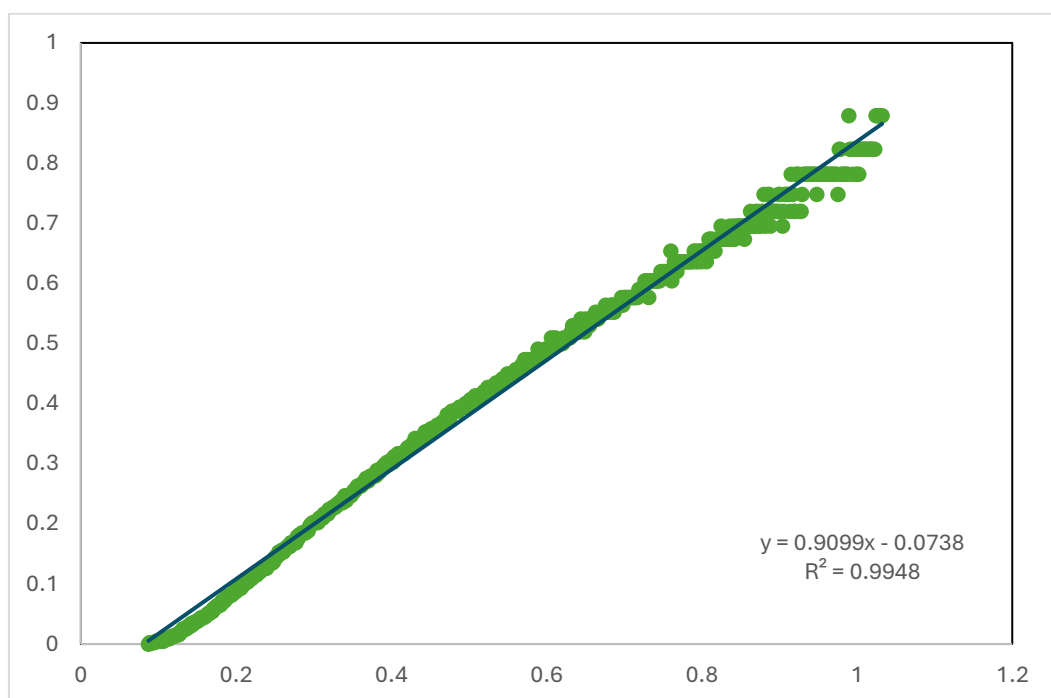
75 ml/min



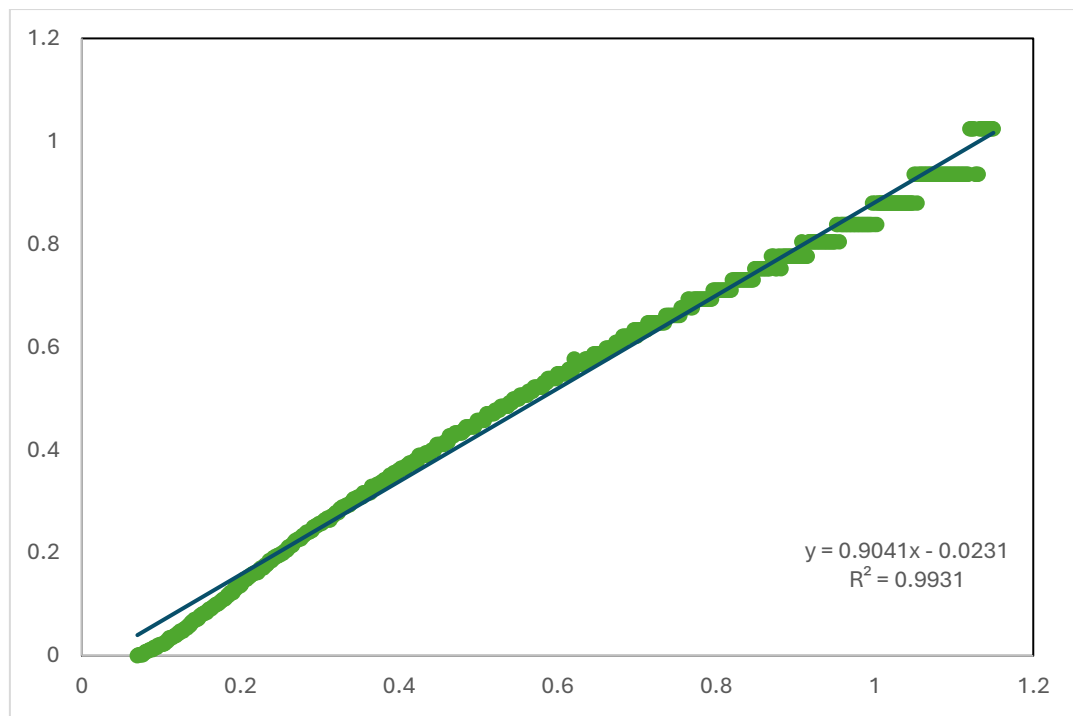
85 ml/min



95 ml/min



105 ml/min

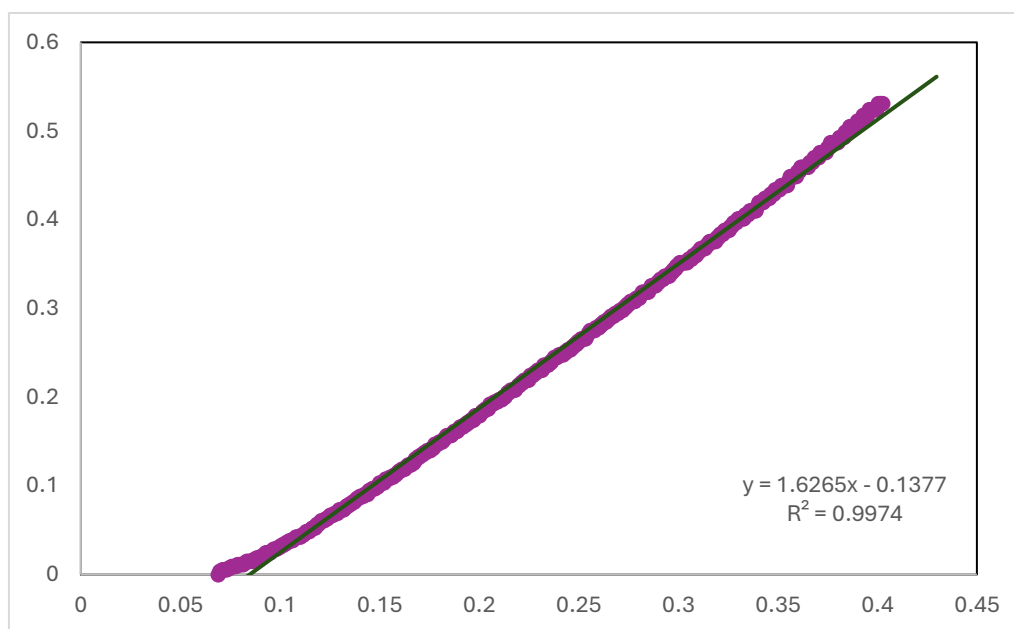


ANEXO 3

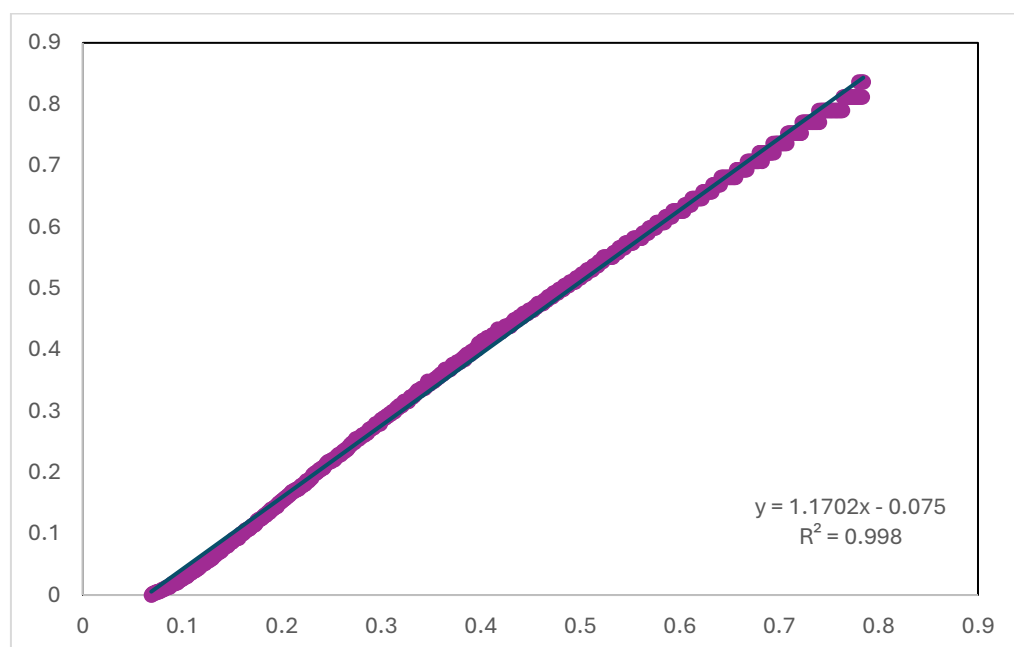
Ajustes logarítmicos para la electroabsorción para la obtención de la función $q(V_{ol})$

En el eje x volumen, en el eje y = $\ln((\ln(C_o/C-1)/\ln(C_o/C_{inf}-1)))$

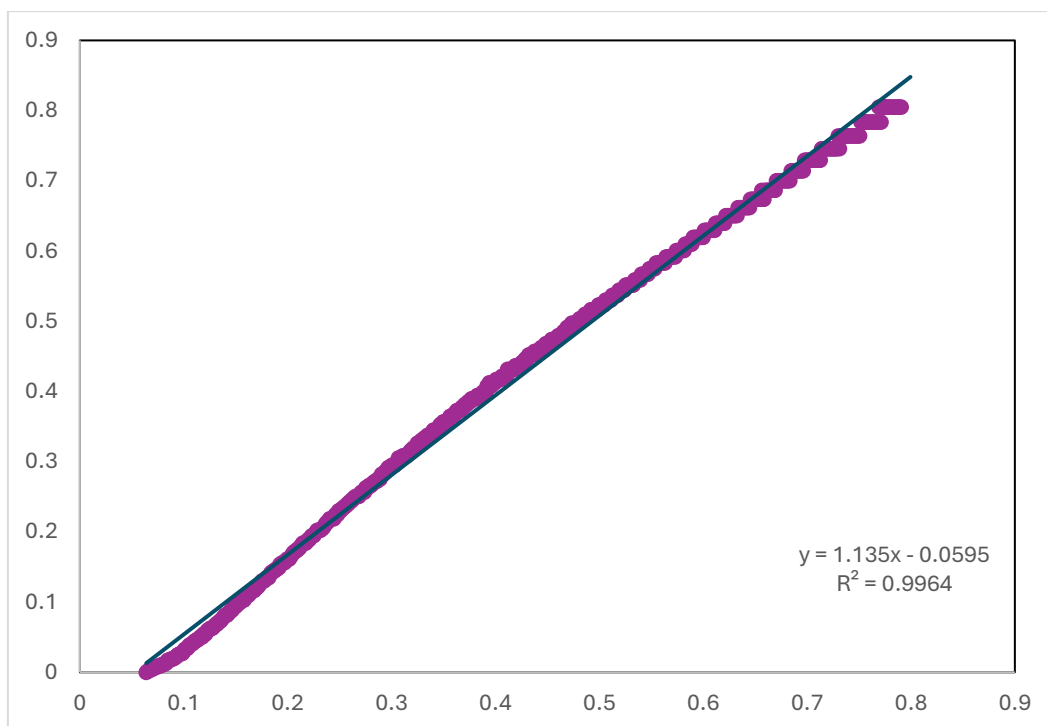
45 ml/min



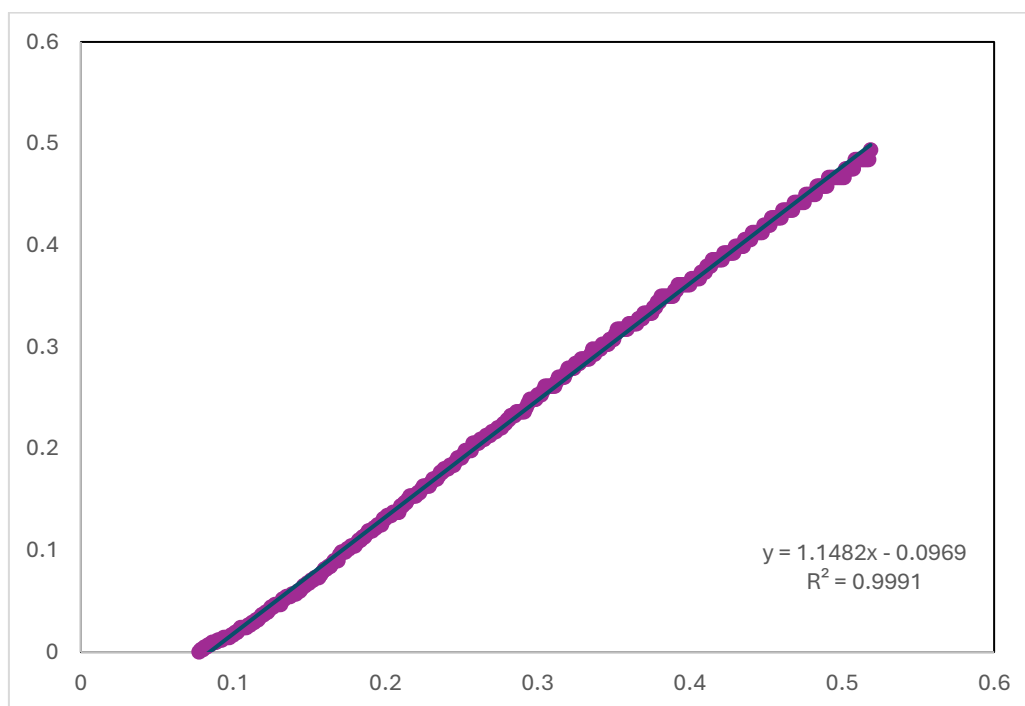
55 ml/min



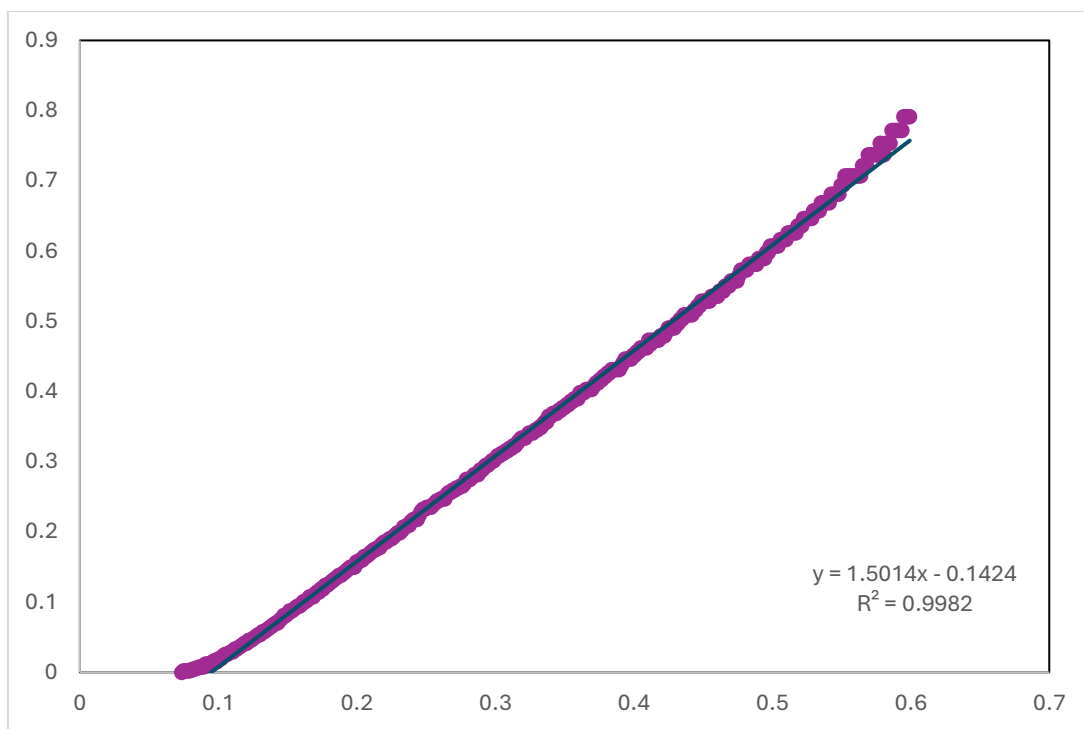
65 ml/min



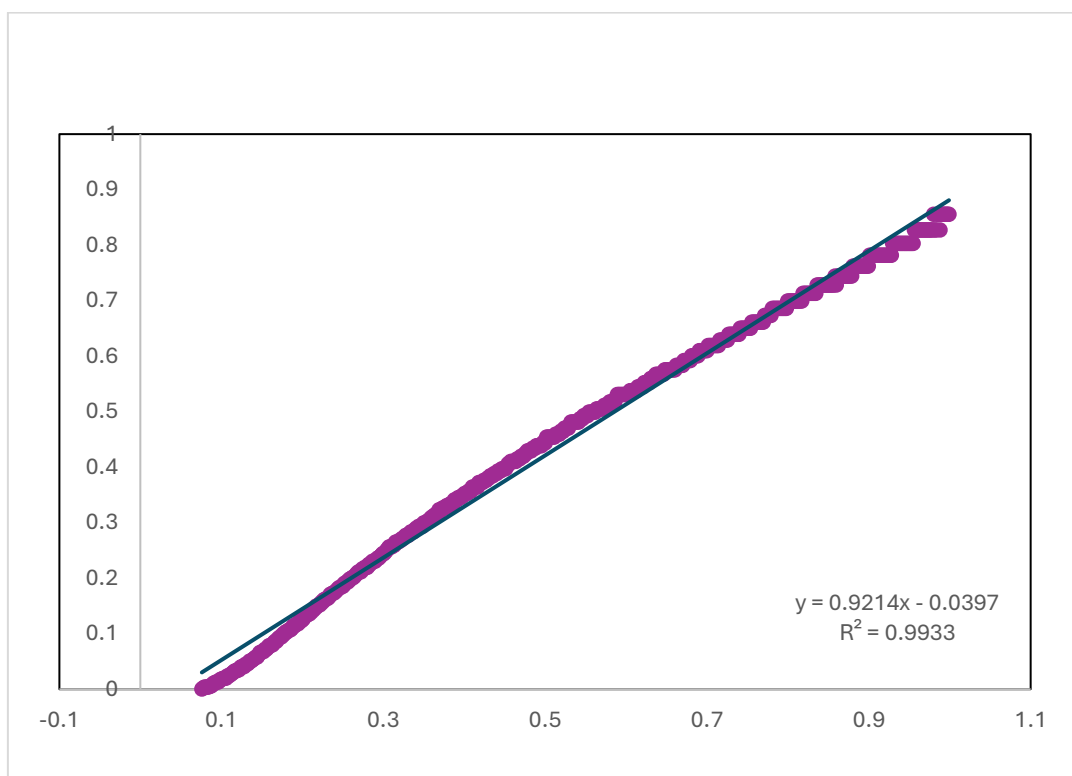
75 ml/min



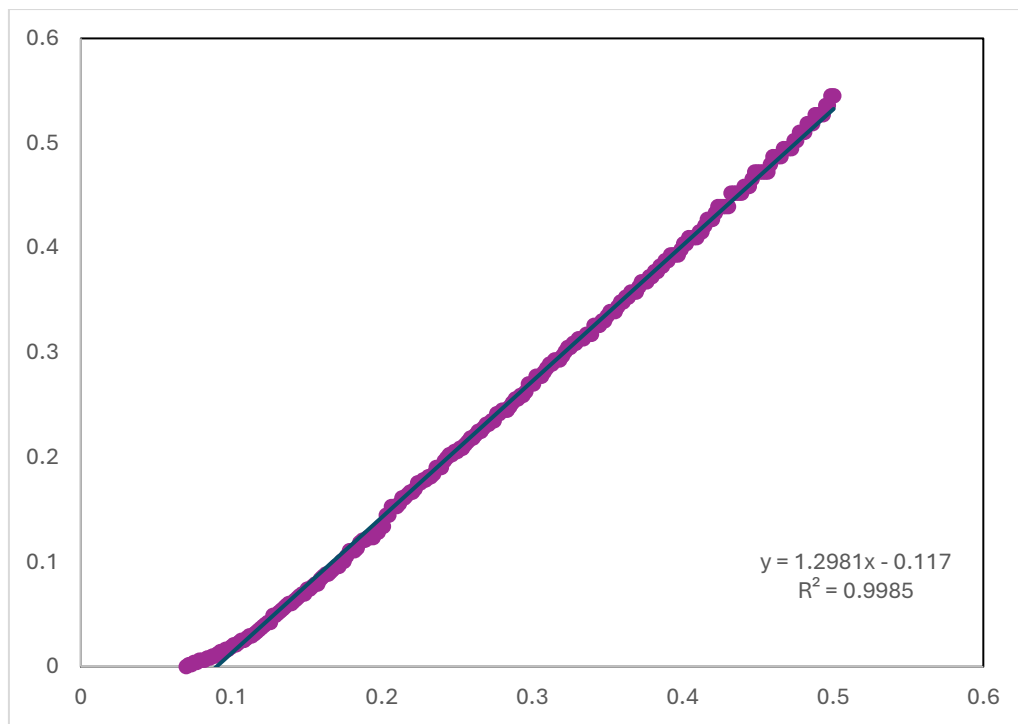
85 ml/min



95 ml/min



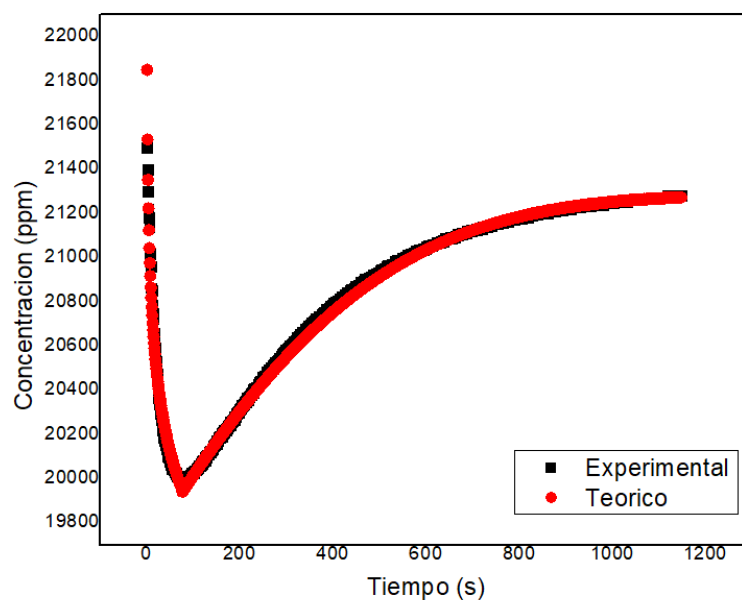
105 ml/min



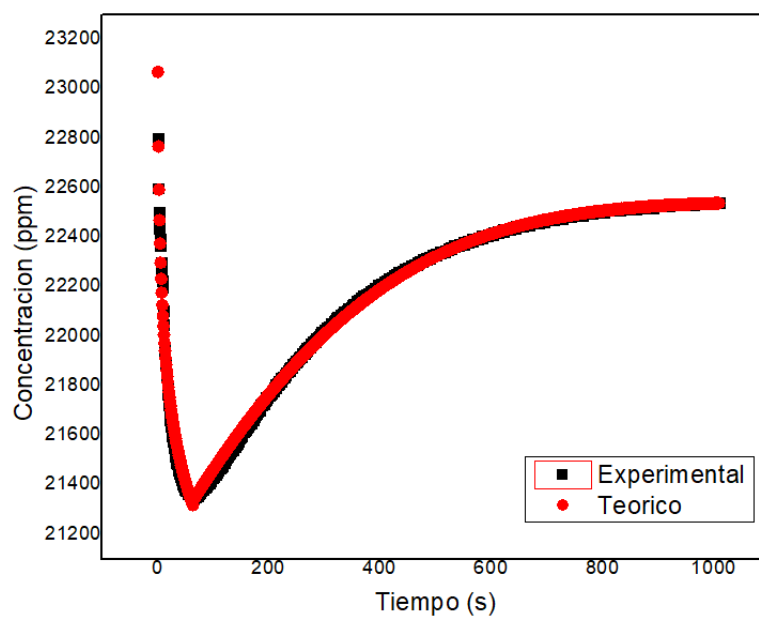
ANEXO 4

Comparativa de los datos obtenidos experimentalmente con respecto a los datos calculados para el proceso de electroabsorción – fisisorción (0.4 M, 1.2 V)

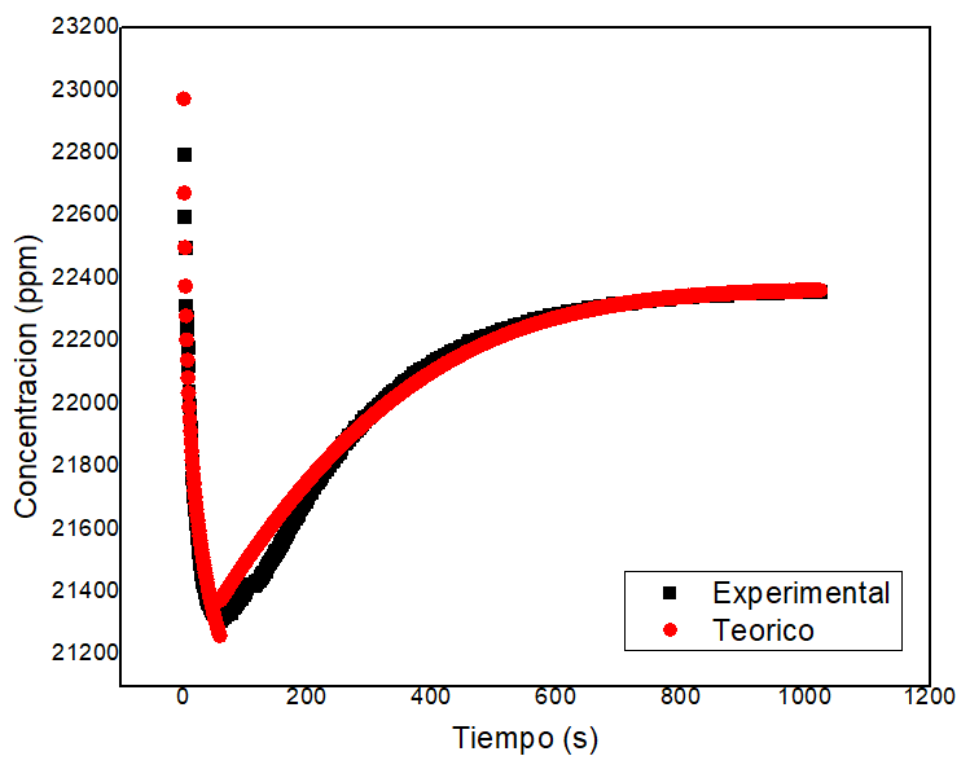
45 ml/min



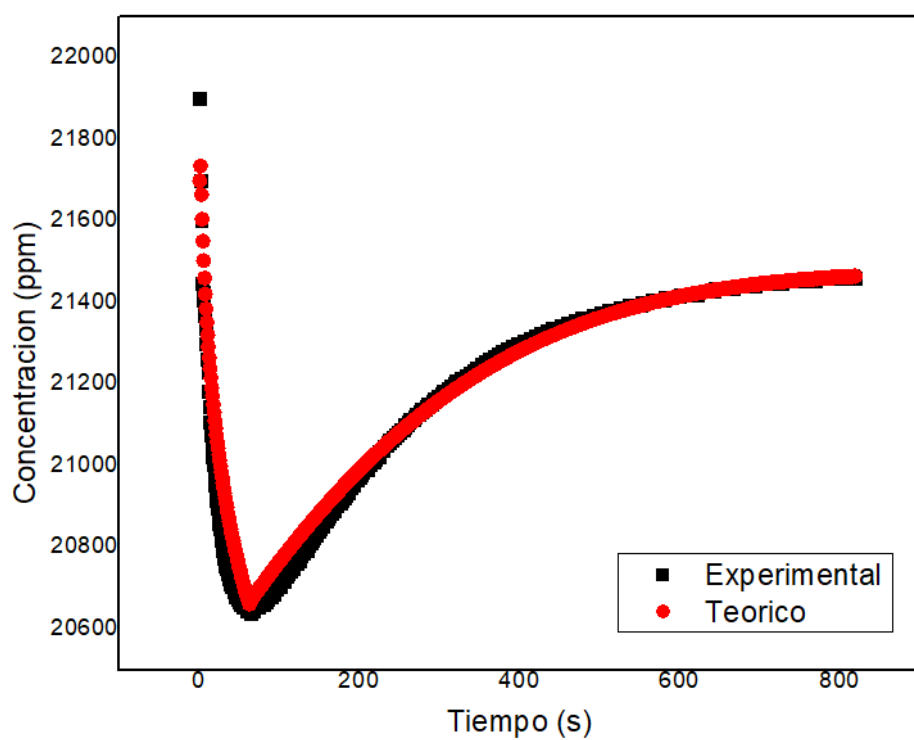
55 ml/min



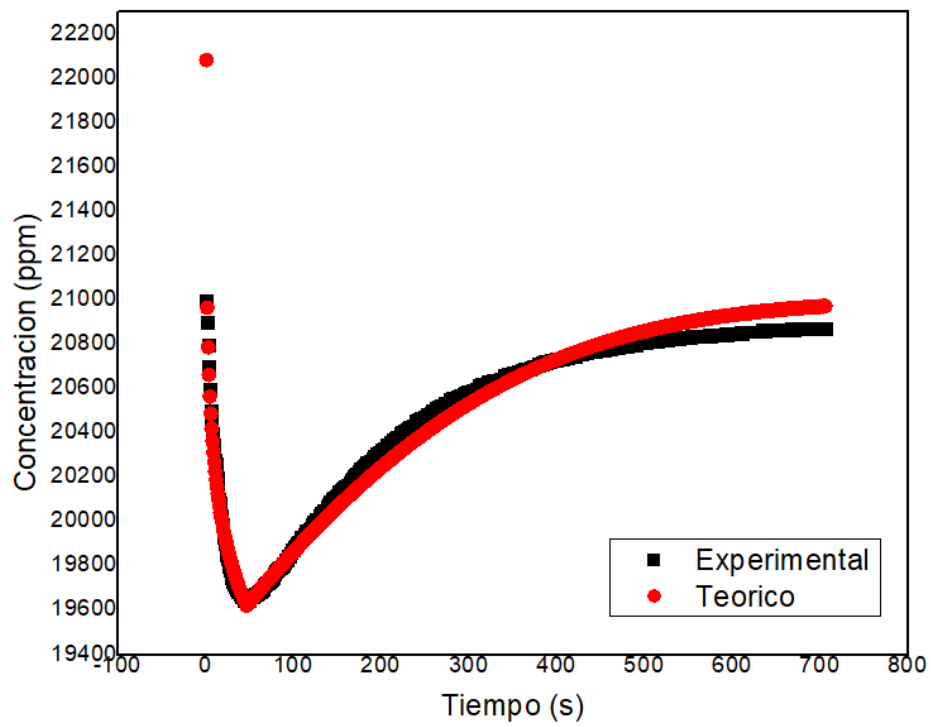
65 ml/min



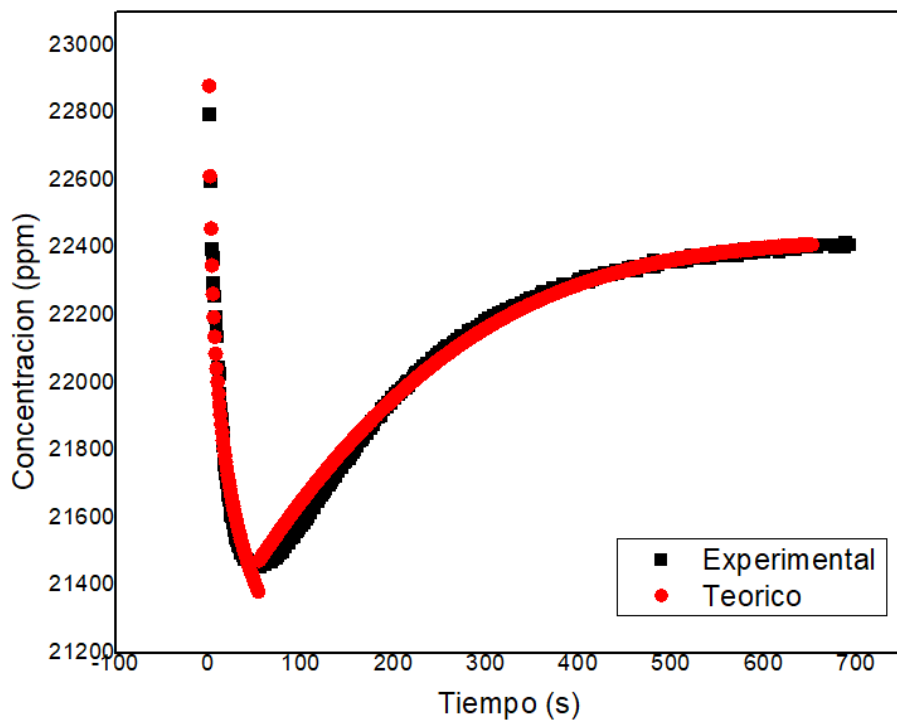
75 ml/min



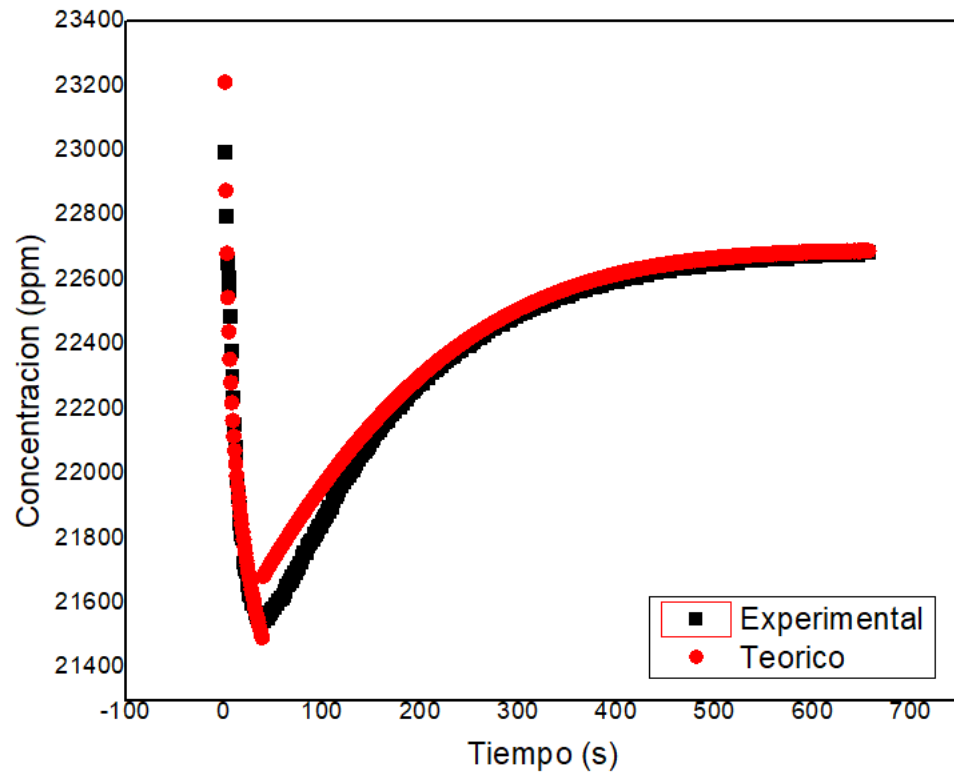
85 ml/min



95 ml/min



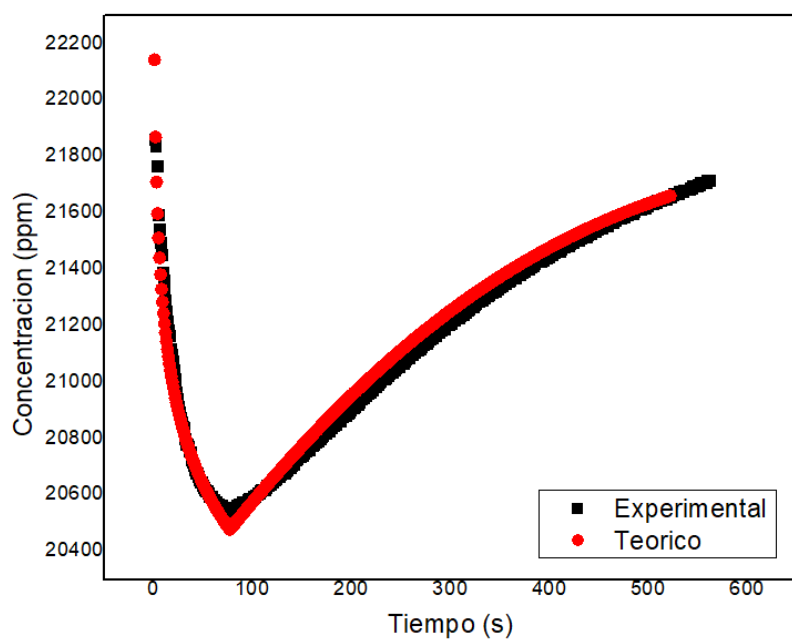
105 ml/min



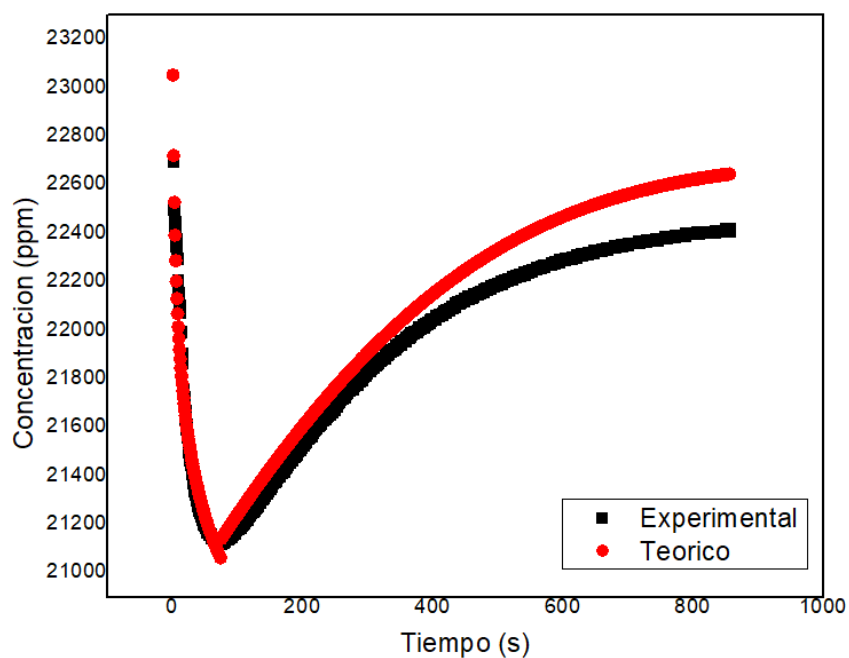
ANEXO 5

Comparativa de los datos obtenidos experimentalmente con respecto a los datos calculados para el proceso de electroabsorción – fisisorción (0.4 M, 1.2 V)

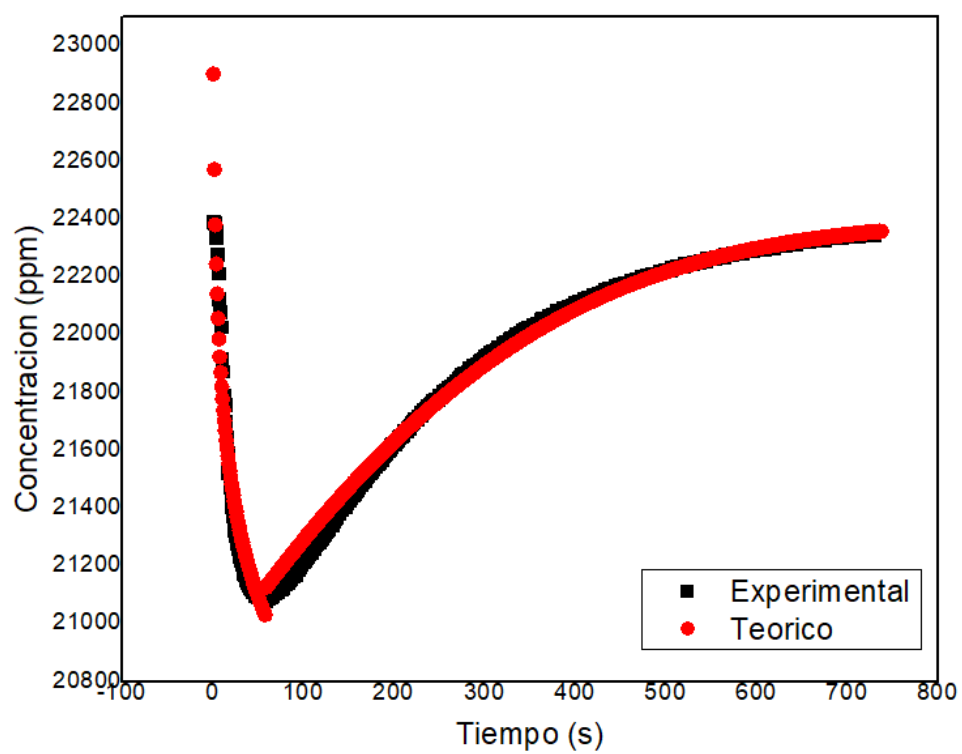
45 ml/min



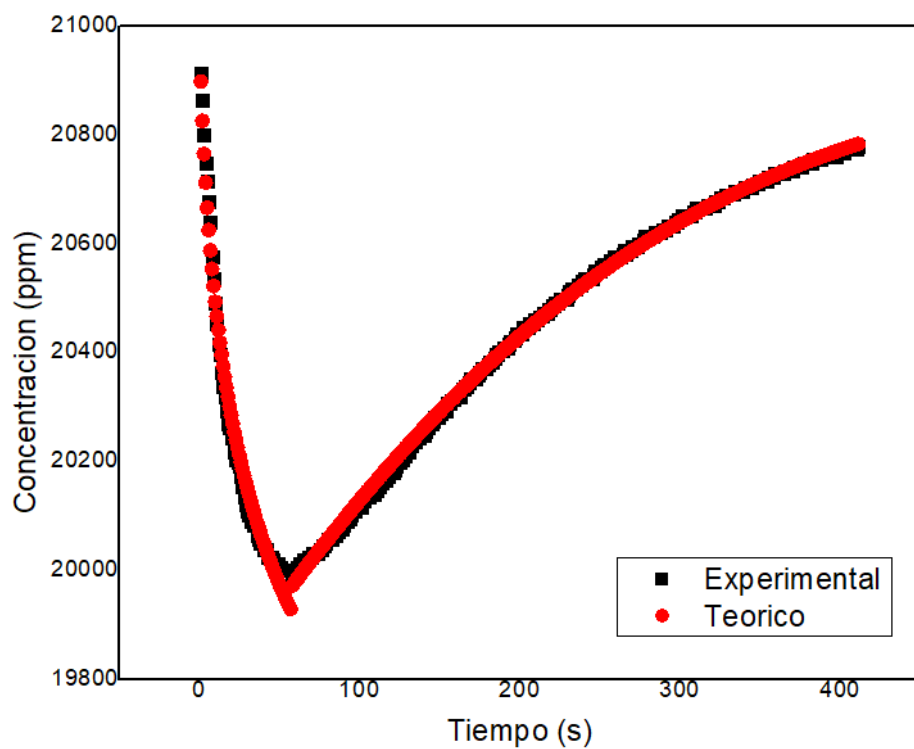
55 ml/min



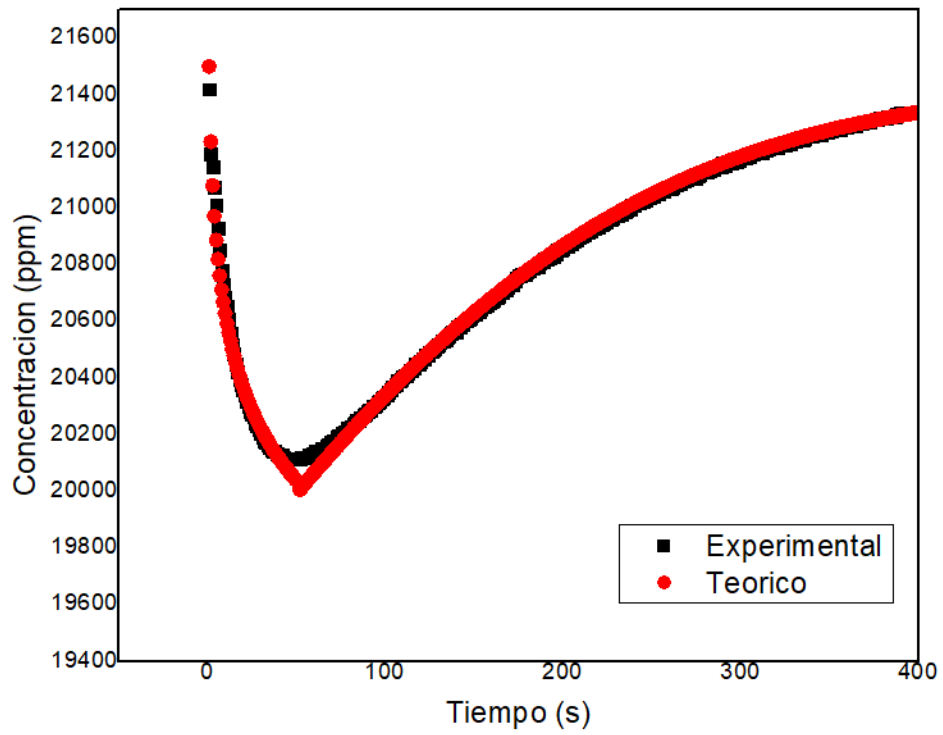
65 ml/min



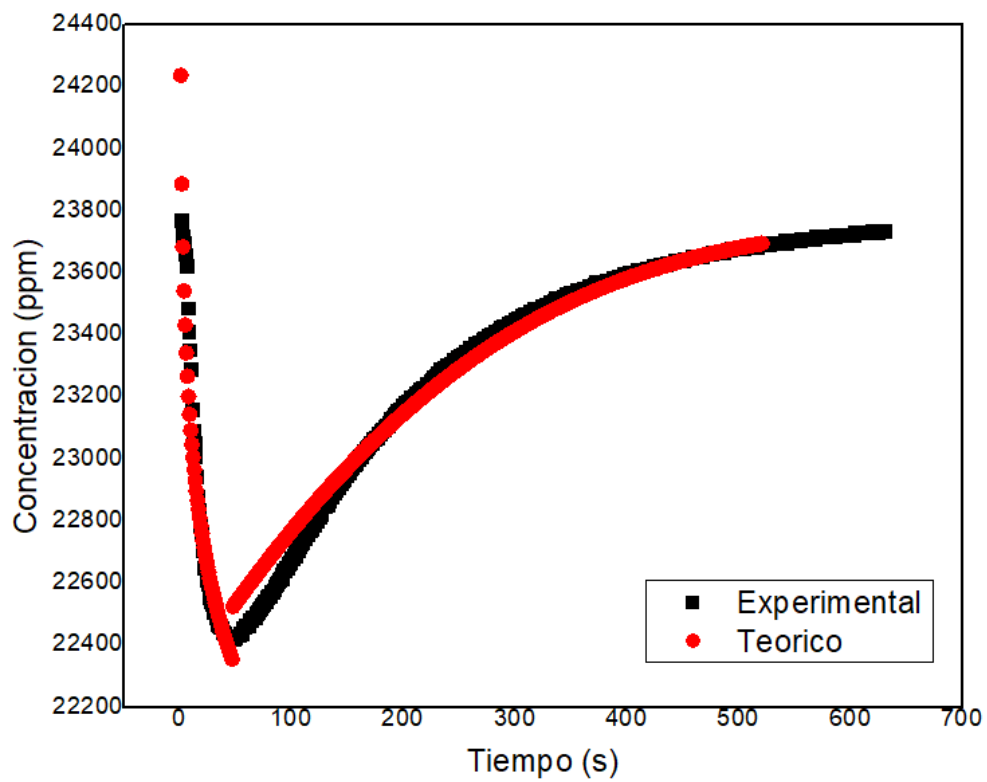
75 ml/min



85 ml/min



95 ml/min



105 ml/min

