



Revista Boliviana de Química 40 años

ISSN 0250-5460 Rev. Bol. Quim. Paper edition
ISSN 2078-3949 Rev. boliv. quim. Electronic edition
Received 11 7 2022 Accepted 08 22 2023 Published 08 30 2023
Vol. 40, No.3, pp. 61-70, Jul./Ago. 2023, Revista Boliviana de Química
Vol. 40, Issue 3, 61-70, Jul./Aug. 2023, Bolivian Journal of Chemistry
DOI: <https://doi.org/10.34098/2078-3949.40.3.1>

ESTUDIO DE LA ADSORCIÓN DE ION Mg (II) EN SUELOS DE CULTIVO DEL SECTOR YUCUMO-SAN BORJA DEL DEPARTAMENTO DEL BENI, BOLIVIA

Original article

Peer-reviewed

Valerio Choque Flores^{1,*}, Heriberto Castañeta¹, Cesario Ajpi¹, Mario Blanco²

- ¹ Instituto de Investigaciones Químicas IIQ, Universidad Mayor de San Andrés UMSA, Av. Villazón N° 1995, La Paz, Bolivia, 0201-0220, iiq@umsa.bo
- ² Instituto de Investigaciones Geológicas y del Medio Ambiente IIGEMA, Universidad Mayor de San Andrés UMSA, Av. Villazón No.1995, La Paz, Bolivia, igemaumsa@gmail

Keywords: X-ray diffraction, Adsorption, Soil. **Palabras clave:** Difracción de rayos X, Adsorción, Suelo.

ABSTRACT

Study of the adsorption of Mg (II) ion in crop soils of the Yucumo-San Borja sector of the department of Beni, Bolivia. The adsorption of Mg (II) in cultivated soils from Yucumo-San Borja, Beni, Bolivia was studied by means of the different models of adsorption isotherms. Likewise, an analysis of the soil texture, the percentage of organic matter and organic carbon was carried out. The cultivation soil was characterized by X-ray diffraction (XRD), X-ray fluorescence (XRF) and surface area Brounauer Emmer Teller (BET). The results of the adsorption of Mg²⁺ at 3, 7, and 15 days obey an L-type model according to the Giles classification. These results, after linear regression were assigned to a Langmuir-type behavior with a maximum adsorption capacity between 1.1-1.41 mg Mg²⁺/g soil. A theoretical study of the interaction of Mg²⁺ with water molecules was also carried out using the Hyperchem Professional 8.0 program, using a semi-empirical ZINDO-1 method. The results indicated an octahedral environment of Mg²⁺ by solvation with water molecules allowing to predict the spontaneity of the adsorption process. In addition, the MATERIALS STUDIO 8.0 program was able to visualize the adsorption process of Mg²⁺ in a SiO₂ unit cell. *Mail to: valerioreschoqueflores@gmail.com

RESUMEN

En el presente trabajo se estudió la adsorción de ion Mg (II) (Mg²⁺) en suelos de cultivo mediante los distintos modelos de isotermas de adsorción. Asimismo, se realizó un análisis de la textura del suelo, el porcentaje de materia orgánica y carbono orgánico. El suelo de cultivo fue caracterizado mediante difracción de rayos X (DRX), fluorescencia de rayos X (FRX) y área superficial Brounauer Emmer Teller (BET). Los resultados de la adsorción de Mg²⁺ a 3, 7, y 15 días obedecen a un modelo tipo L, según la clasificación de Giles. Luego de la regresión lineal, los resultados muestran que se asemeja a un comportamiento del tipo Langmuir con una capacidad máxima de adsorción entre 1.1 y 1.41 mg Mg²⁺/g suelo. También se realizó un estudio teórico de la interacción de Mg²⁺ con moléculas de agua mediante el programa Hyperchem Professional 8.0, en un método semiempírico ZINDO-1. Los resultados indicaron un entorno octaédrico del Mg²⁺ por solvatación con moléculas de agua permitiendo predecir, la espontaneidad del proceso de adsorción. Asimismo, mediante el programa MATERIALS STUDIO 8.0 se pudo visualizar el proceso de adsorción del Mg²⁺ en una celda unitaria de SiO₂.

INTRODUCCIÓN

Los suelos son un recurso natural que proporcionan nutrientes necesarios para el crecimiento y desarrollo de las plantas y su aplicación en cultivos es fundamental. Por esta causa, la caracterización de suelos constituye una actividad esencial para lograr una completa comprensión de las relaciones existentes entre sus propiedades, su fertilidad y sus sistemas de uso. El suelo está compuesto por macronutrientes que se presentan en forma iónica, cuya presencia trae beneficios a las plantas y su deficiencia genera consecuencias negativas [1-3]. Entre ellos, llama la atención el ion Mg^{2+} , componente primario de la clorofila y fundamental para la fotosíntesis de las plantas, participa en el metabolismo del fosfato, en la respiración, y en la actividad enzimática en la descomposición de la materia orgánica en el suelo. Cuando el Mg^{2+} se encuentra en el suelo, sufre un proceso de adsorción siendo éste un fenómeno superficial. Los datos de adsorción en suelos comúnmente son representados por isothermas de adsorción, en las cuales un gráfico relaciona la cantidad de adsorbato retenida por un sólido como una función de la concentración de adsorbato en solución que está en equilibrio con ese sólido [4]. La forma de la curva de la isoterma sugiere (pero no confirma) información acerca de la interacción adsorbato-adsorbente. Con este fin, las isothermas han sido clasificadas en 4 tipos diagramados como se muestra en la figura 1.

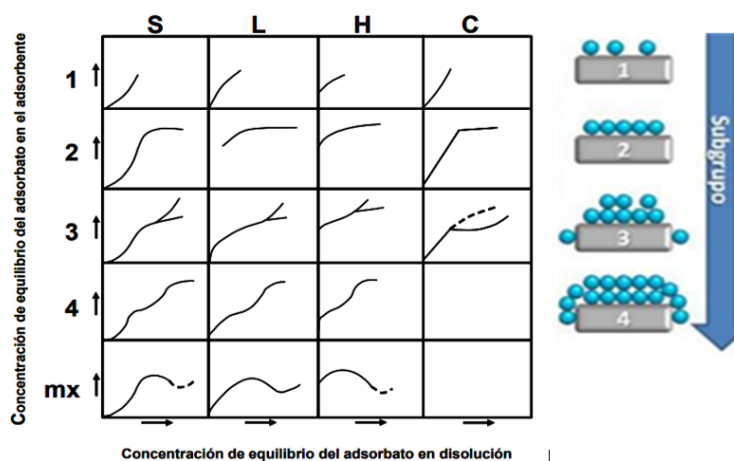


Figura 1. Clasificación de Giles de las isothermas de adsorción en disolución. (Reproducido bajo licencias de "Creative commons") [5-6]

Donde:

1. Isotherma del Tipo L (Langmuir), refleja una relativa alta afinidad entre el adsorbato y adsorbente, son cóncavas respecto al eje de abscisas, por lo que a medida que aumenta la concentración en la fase líquida, la cantidad adsorbida aumenta más lentamente. Este tipo de isothermas se presentan cuando existe fuerte atracción intermolecular entre las moléculas de adsorbato. La adsorción de muchos derivados fenólicos en disolución acuosa sobre carbón activado presenta este tipo de isothermas.
2. Isotherma tipo S, sugiere una adsorción cooperativa, son cóncavas respecto al eje de ordenadas, por lo que la adsorción se ve favorecida a medida que aumenta la concentración de la fase líquida. Este hecho es debido a asociaciones colaterales entre las moléculas adsorbidas (adsorción cooperativa). Se produce este tipo de isothermas cuando existe una moderada atracción intermolecular entre el adsorbato y el adsorbente, y se produce una fuerte competencia por los centros de adsorción con las moléculas de disolvente o de otros adsorbatos. A modo de ejemplo se puede citar la adsorción de fenoles sobre alúminas.
3. Isotherma tipo C, (Partición constante), sugiere una afinidad relativa constante de las moléculas del adsorbato por el adsorbente. Presentan una forma lineal hasta alcanzar la capacidad máxima de adsorción, donde se produce un cambio brusco a un tramo horizontal. Este tipo de adsorción indica que el adsorbato presenta mayor afinidad por el adsorbente que por el disolvente. La forma lineal de la isoterma indica que el soluto penetra en zonas inaccesibles al disolvente. Un ejemplo lo constituye la adsorción de fenoles en disolución acuosa sobre polipéptidos sintéticos.
4. Isotherma de tipo H, indica una interacción muy fuerte adsorbato-adsorbente (Quimisorción). Son un caso especial de las de tipo L; el soluto tiene tanta afinidad hacia la fase sólida que en disoluciones diluidas se encuentra totalmente adsorbido, o prácticamente no se detecta en disolución. La parte inicial de la isoterma es vertical, y se presenta en la adsorción de micelas iónicas o moléculas poliméricas, aunque a veces se trata de



iones simples que se intercambian con otros de mucha menor afinidad por el adsorbente. Un ejemplo lo constituye la retención de pigmentos sulfonados sobre alúminas [6].

La clasificación en subgrupos hace referencia al mecanismo de adsorción. Las curvas del subgrupo 1 representan sistemas en los que la monocapa no ha sido completada. En el subgrupo 2 y siguientes, se puede identificar una meseta de adsorción, que corresponde con el llenado de la monocapa. El aumento posterior representa el desarrollo de la segunda capa, la cual, se completa en el subgrupo 4. En el subgrupo mx, se alcanza un punto en el cual las interacciones tipo van der Waals adsorbato-adsorbato superan las interacciones de tipo adsorbato-adsorbente, de manera que parte del adsorbato retenido se desorbe de la superficie [6].

A menudo, no se encuentran estos tipos de isotermas para moléculas orgánicas; pocas de ellas, forman enlaces iónicos o covalentes fuertes con los coloides de los suelos [7]. Si bien la adsorción de iones del tipo Zn^{2+} , Cu^{2+} , Pb^{2+} , Cd^{2+} fueron ampliamente estudiados [8-10], hay poca información relacionada con la adsorción de Mg^{2+} en suelo. Como se mencionó en la introducción, el Mg^{2+} es un componente primario de la clorofila en la planta y participa en el metabolismo del fosfato, la respiración, y en la actividad enzimática de descomposición de la materia orgánica en el suelo. Como la planta adsorbe nutrientes del suelo, será importante asignar un modelo de adsorción del Mg^{2+} en el suelo. El objetivo del presente trabajo es el estudio del proceso de adsorción del Mg^{2+} en un suelo de cultivo del sector Yucumo-San Borja del departamento del Beni, Bolivia. Se asignarán distintos modelos de isotermas de adsorción en el suelo de cultivo, el mismo que será caracterizado mediante Difracción de rayos X (DRX), fluorescencia de rayos X (FRX), área superficial Brounauer Emmet Teller (BET) y análisis mineralógico.

EXPERIMENTAL

Toma de muestra

Si bien, el suelo de la provincia Gral. José Ballivián del departamento del Beni es en su mayoría utilizado para crianza de ganado, hay sectores dedicados a diversos cultivos (suelos agrícolas). La muestra de suelo para el presente estudio proviene de la comunidad “Canaan”, único sector agrícola de la localidad de Yucumo que pertenece al municipio de San Borja del departamento del Beni ($14^{\circ}15'15''$ de latitud sur y $66^{\circ}30'25''$ de longitud este). Se escogieron $50m^2$ de superficie de suelo que había sido previamente deforestado mediante quema y tala de plantas para su cultivo. Se definió seis puntos de muestreo llamados M1, M2, M3, M4, M5, y M6. En cada muestra se observó la presencia de pequeñas partículas negras. Estas muestras de suelo fueron tamizadas en malla de tamaño $0.02mm$ y secadas al sol para luego realizar su caracterización.

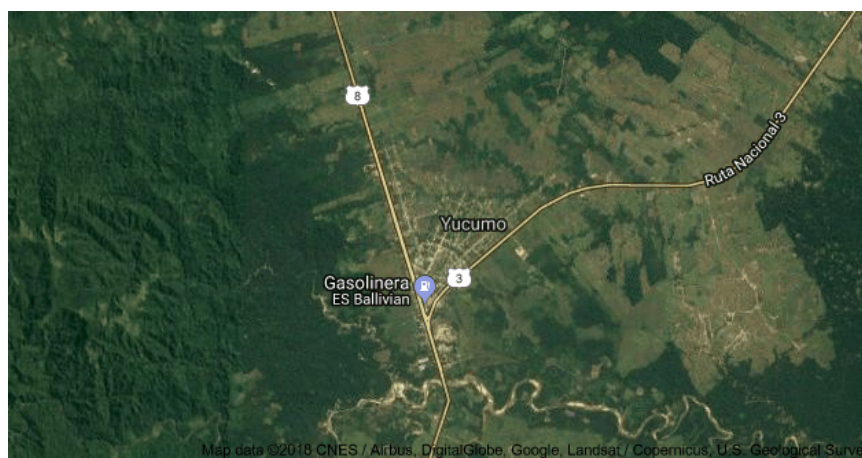


Figura 2. Imagen de la localidad de Yucumo-Beni [Google Earth]

Caracterización de suelo

La textura de suelo y el porcentaje de materia orgánica y carbono orgánico se ejecutaron en los Laboratorios de Calidad Ambiental (LCA-UMSA). Para la textura, se usó el método hidrométrico de Bouyoucos, 150 g de muestra de suelo seco pulverizada en mortero. Se realizó el tamizado en malla de 2mm a temperatura ambiente ($\sim 20^{\circ}C$). Se dejó reposar 5 minutos en 1000mL de agua destilada dentro del hidrómetro. Se agitó y se dejó la mezcla en



suspensión, y se procedió a la medición de resultados. Para el porcentaje de materia orgánica y carbono orgánico se utilizó el método propuesto por Walkley & Black (1934). Este método consiste en la oxidación húmeda de la muestra de suelo con dicromato de potasio en medio ácido, con reducción del dicromato, equivalente al contenido de C que es oxidado. El dicromato residual es luego titulado con sal ferrosa. El pH del suelo se midió con un pH-metro DENVER INSTRUMENT UB-10 UltraBASIC. El área superficial de suelo se determinó con un equipo ChemBET TPR/TPD Quantachrom Analysis equipment. 150mg de muestra de suelo se colocaron dentro del recipiente de vidrio del equipo, se procedió a hacer el vacío para luego realizar la adsorción de la muestra usando Nitrógeno como gas portador. Los resultados del proceso de fisisorción fueron ajustados al modelo BET (Brounauer, Emmet, Teller).

Análisis mineralógico de suelo

El análisis mineralógico del suelo de cultivo de fases sólidas cristalinas se realizó en un equipo de Difracción (DRX), PanAnalytical Expert Plus con tubo generador de Rayos X de Cu (cobre) y filtro de Ni, dando radiación K alfa del Cu con longitud de onda de 1.54178 Å. Las condiciones de operación fueron: Radiación a 40 Kv. y 40mA., rango de registro de 3° a 60°, detección con XCELERATOR de 125 canales y escala de detección automática. Para el análisis de Fluorescencia de Rayos X, se tomaron 4 muestras al azar del suelo de cultivo y se realizó el análisis en un equipo marca THERMO Scientific Modelo Minning, con un tiempo de medida entre 80 y 83 s.

Estudio teórico de solvatación del ion Mg^{2+} con moléculas de agua, y visualización del proceso de adsorción con una estructura del tipo SiO_2

Para el estudio teórico del proceso de interacción del Mg^{2+} con moléculas de agua, se utilizó el programa HYPERCHEM PROFESSIONAL 8.0, realizando inicialmente un cálculo de mecánica molecular MM+ para luego optimizar la geometría mediante un método semiempírico ZINDO-1. Los resultados indicaron la espontaneidad del proceso de adsorción mediante la siguiente ecuación:

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S$$

Para el estudio del proceso de adsorción se consideró como componente mayoritario del suelo al SiO_2 . Mediante el programa MATERIALS STUDIO 8.0 se pudo visualizar la adsorción del Mg^{2+} en una celda unitaria de SiO_2 construida mediante la base de datos del programa.

Medición de la adsorción de metales en el suelo

El estudio de la evaluación de los procesos de adsorción fue de la siguiente manera: se pesaron 2.0 g de suelo en distintos recipientes y se añadió 20 ml de soluciones preparadas de Mg^{2+} a partir de sulfato de Magnesio (99.9%SIGMA) a distintas concentraciones, como se muestra en la tabla 1:

Tabla 1. Concentraciones distintas para el estudio de la adsorción

Muestra	1	2	3	4	5	6	7	8	9
[Mg^{2+}]/ppm Teórico	50	100	200	300	400	500	600	700	1000
[Mg^{2+}]/ppm Real	60	90	220	310	399	505	602	690	990
Relación mg Mg^{2+} /g suelo	0.6	0.9	2.2	3.1	3.99	5.05	6.02	6.9	9.9

Estas muestras se dejaron interaccionar durante 3, 7 y 15 días. Luego, se retiraron las soluciones, se realizaron las diluciones respectivas y se caracterizó mediante un equipo de adsorción atómica tipo PERKIN ELMER, usando una lámpara de Mg^{2+} a 285 nm. Con los resultados obtenidos se construyeron graficas de capacidad de adsorción esto es: masa de Mg^{2+} adsorbido/masa de adsorbente (q_e) versus Concentración de Mg^{2+} (ppm) en equilibrio ($C_e = C_{inicial} - C_{final}$) de acuerdo a los modelos de Freundlich, Langmuir y Temkim, respectivamente. Usando el programa SIGMAPLOT 12.0 se realizó el análisis estadístico de regresión lineal para indicar el tipo de comportamiento de adsorción.

RESULTADOS Y DISCUSIONES

Los resultados de caracterización del suelo de cultivo se presentan en la tabla 2:



Tabla 2. Resumen de los resultados de caracterización del suelo de cultivo

Muestra	Técnica	Valor	Desviación estándar	
Suelo	Textura Clasificación del suelo (%)	Arena	85.00	5.65
		Limo	7.00	3.00
		Arcilla	9.00	0.02
		Clase textural	Arenoso	
	Materia orgánica y carbono orgánico (%)	1.37	0.01	
	pH	7.5	0.1	
	Area superficial (m ² /g)	7.17	0.12	

De acuerdo a la tabla 2, la textura del suelo es del tipo arenoso, la cual, se relaciona con la presencia de cuarzo. Por otro lado, hay presencia de materia orgánica en un 1.37% con un pH de suelo en un valor cercano al neutro. Por otro lado, un material arenoso posee tamaños de partícula entre 2.0-0.125mm y una arcilla posee entre 0.004-0.0005mm [11]. De acuerdo a los valores del tamaño de partícula de suelo, la textura del mismo resultaría del tipo arenoso como se muestra en la Tabla 2. Sin embargo, a pesar de su carácter arenoso, el suelo tiene un valor de área superficial pequeña (7.17 m²/g). Este valor de área superficial se relaciona con la presencia de material arcilloso de acuerdo al análisis de textura, que indicaría un incremento del área superficial a un menor tamaño de partícula [12].

Los resultados de Difracción de Rayos X de las muestras de cultivo se muestran en la Figura 3.

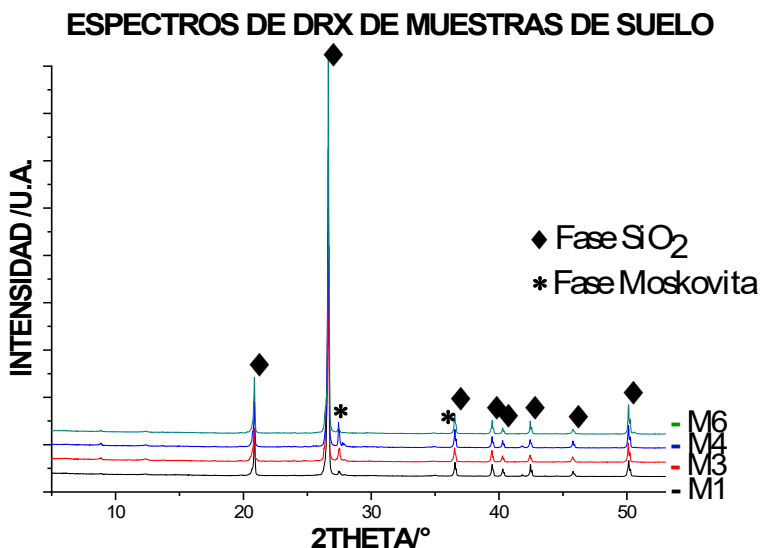


Figura 3. Espectros de Difracción de Rayos X de las muestras de cultivo

En los difractogramas de la figura 3, de acuerdo a las fichas de la base de datos de referencia del HighScore Plus, el pico máximo a 26.7° es asignado al dióxido de silicio cristalino; número de código 01-085-0797. Éste representa un 95% de la composición del suelo. Asimismo, aparece un pico pequeño a 27.5°, el cual, se asigna a la fase del tipo moskovita. Esta fase es un tipo de arcilla que obedece a la siguiente fórmula $KAl_2(AlSi_3O_{10})(OH)$, y representa un 5% (número de código 01-082-2450) [13].

En la tabla 3 se muestran los resultados del análisis mediante fluorescencia de rayos X realizados en la muestra de suelo.

La caracterización mediante FRX del suelo de cultivo que se muestra en la tabla 3 indica la presencia mayoritaria de Si (39.9%) el cual representa un 85.5% en el SiO₂. Por otro lado, se encontraron contenidos de Al de alrededor del 5.3% como metal minoritario los cuales se relacionan a la presencia de la moskovita de acuerdo a los resultados de DRX. La presencia mayoritaria de Si indica una contextura tipo arenosa en el suelo de estudio.

En la figura 4 se muestra los resultados del cálculo teórico de optimización geométrica de interacción del ion Mg²⁺, rodeado con moléculas de agua a partir del programa Hyperchem Professional 8.0, en un método semiempírico ZINDO-1.

Tabla 3. Resultados de FRX de las muestras de suelo

Muestra	Elementos	%	Desviación estándar (±)	Observación
Suelo	Si	39.858	2.693	Mayoritario
	Al	5.343	0.573	Minoritario
	Fe	1.410	0.360	
	Ti	0.226	0.036	
	Ca	<0.100		Traza
Cl	<0.100			

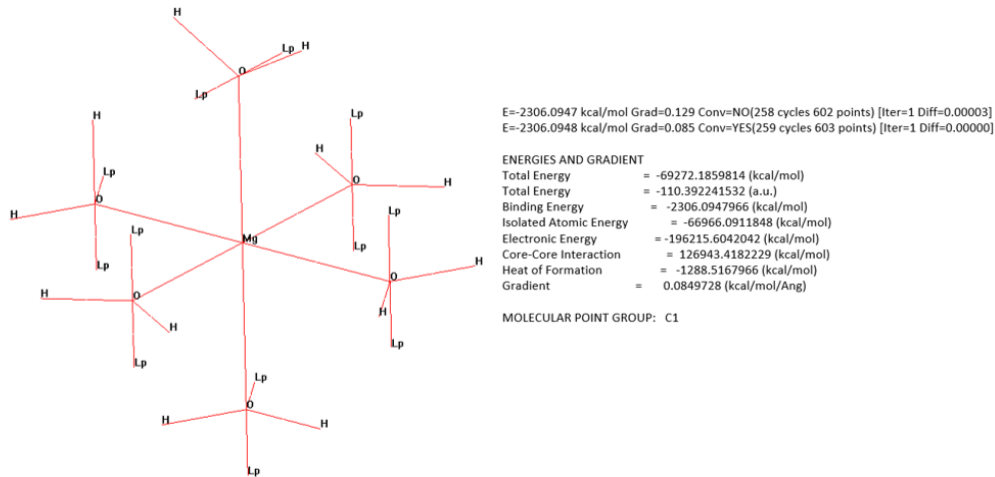


Figura 4. Resultados de la optimización geométrica de $Mg^{2+}(H_2O)_6$ en un entorno octaédrico

De acuerdo a los resultados de cálculo teórico se tiene un valor de energía de formación del complejo de $Mg^{2+}(H_2O)_6$ de -1288.5 kcal/mol. Por otro lado, de acuerdo a la ecuación:

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S$$

Si se considera que ΔS tiende a cero, la ecuación quedaría de la siguiente manera:

$$\Delta G = \Delta H$$

Por tanto $\Delta G = -1288.5$ kcal/mol indica que la formación del complejo de $Mg^{2+}(H_2O)_6$ es permitida en un entorno octaédrico como se muestra en la figura 4.

Los resultados de la adsorción de Mg^{2+} de la muestra de suelo en función del tiempo se muestra en la Figura 5.

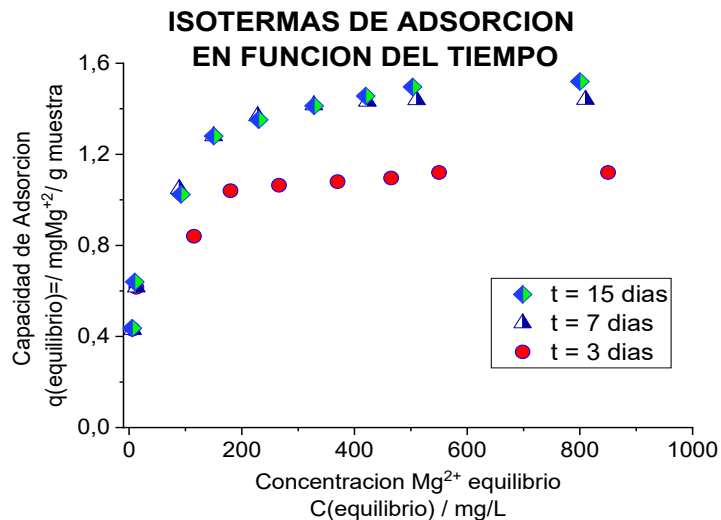


Figura 5. Isotermas de adsorción en función del tiempo, ζ 15 días: ∇ 7 días: Δ , 3 días



Se puede observar que las isothermas de la figura 5 obedecen a un modelo del tipo L, según la clasificación de Giles, que es el tipo más común de las isothermas en fase líquida [5-6, 18]. En el caso de un tiempo de 3 días, un incremento de la concentración de Mg^{2+} favorece un valor constante de capacidad de adsorción de aproximadamente 1.07 $mgMg^{2+}/g$ muestra a partir de 550 mg/L de Mg^{2+} . En comparación con tiempos de 7 y 15 días, el valor constante de la capacidad de adsorción y la concentración de Mg^{2+} resulta ser: 1.41 $mg Mg^{2+}/g$ muestra a 422 mg/L de Mg^{2+} , y 1.5 $mg Mg^{2+}/g$ muestra a 503 mg/L de Mg^{2+} , respectivamente. Estos valores indicarían un alcance del equilibrio de adsorción. De manera general, al incrementar la concentración en equilibrio de Mg^{2+} a tiempos de 7 y 15 días la adsorción aumenta lentamente hasta alcanzar un valor constante. Esto se relaciona con una fuerte atracción intermolecular entre las moléculas de adsorbato solvatados con un entorno octaédrico y la estructura del suelo, que en su mayoría, contiene la fase de SiO_2 cristalina, según los resultados de DRX.

El análisis de regresión lineal se realizó con el programa SIGMAPLOT 12.0. Los resultados se muestran en la Tabla 4.

Tabla 4. Resultados de análisis de regresión lineal a diferentes modelos de la muestra de suelo

Muestra	Modelo	Ecuación	Ecuación linealizada $y = mx + b$	Regresión lineal
Suelo (3 días)	Freundlich	$q_e = K_F \cdot C_e^{\frac{1}{n}}$	$\log q_e = \frac{1}{n} \log C_e + \log K_F$	m = 0.1901 b = -0.4611 r = 0.9710
	Langmuir	$q_e = \frac{q_o \cdot K_F \cdot C_e}{1 + K_F \cdot C_e}$	$\frac{1}{q_e} = \frac{1}{q_o \cdot K_F} \left(\frac{1}{C_e} \right) + \frac{1}{q_o}$	m = 8.4639 b = 0.9304 r = 0.988
	Temkin	$q_e = A \cdot \ln(B \cdot C_e)$	$q_e = A \cdot \ln C_e + A \cdot \ln B$	m = 0.1439 b = 0.2147 r = -0.9814
Suelo (7 días)	Freundlich	$q_e = K_F \cdot C_e^{\frac{1}{n}}$	$\log q_e = \frac{1}{n} \log C_e + \log K_F$	m = 0.2568 b = -0.5122 r = 0.9706
	Langmuir	$q_e = \frac{q_o \cdot K_F \cdot C_e}{1 + K_F \cdot C_e}$	$\frac{1}{q_e} = \frac{1}{q_o \cdot K_F} \left(\frac{1}{C_e} \right) + \frac{1}{q_o}$	m = 10.53 b = 0.7117 r = -0.9934
	Temkin	$q_e = A \cdot \ln(B \cdot C_e)$	$q_e = A \cdot \ln C_e + A \cdot \ln B$	m = 0.2272 b = 0.0495 r = -0.9838
Suelo (15 días)	Freundlich	$q_e = K_F \cdot C_e^{\frac{1}{n}}$	$\log q_e = \frac{1}{n} \log C_e + \log K_F$	m = 0.2469 b = -0.48 r = -0.9797
	Langmuir	$q_e = \frac{q_o \cdot K_F \cdot C_e}{1 + K_F \cdot C_e}$	$\frac{1}{q_e} = \frac{1}{q_o \cdot K_F} \left(\frac{1}{C_e} \right) + \frac{1}{q_o}$	m = 8.5876 b = 0.7065 r = -0.9919
	Temkin	$q_e = A \cdot \ln(B \cdot C_e)$	$q_e = A \cdot \ln C_e + A \cdot \ln B$	m = 0.2242 b = 0.091 r = -0.9916

Donde: q_e = cantidad de Mg^{2+} adsorbido/g muestra ($mgMg^{2+}/g$ suelo)

C_e = Concentración en equilibrio / (ppm)

q_o = capacidad máxima de adsorción ($mgMg^{2+}/g$ suelo)

K_F = constante de equilibrio

De acuerdo a los resultados de la Tabla 4, el comportamiento de la adsorción de Mg^{2+} obedece a un modelo del tipo Langmuir cuyo factor de correlación se aproxima a uno. Esto es debido a que el número de centros activos disponibles en la monocapa para la adsorción de nuevas moléculas es cada vez menor. Esto se produce hasta alcanzar una meseta cuando el sólido ya no puede retener más adsorbato [14-16].

A partir de estos resultados se pudo calcular los valores de la capacidad máxima de adsorción, la constante de equilibrio, y el valor de ΔG , donde la concentración en equilibrio (mg/l) se mantiene constante, ver Tabla 5.

Los resultados de la tabla 5 indican que para un tiempo de 3 días la capacidad máxima de adsorción es de 1.1 $mgMg^{2+}/g$ muestra. Ésta se mantiene constante a partir de una concentración de equilibrio de 550 mg/L de Mg^{2+} en solución. Para tiempos de 7 y 15 días, la capacidad máxima de adsorción tiene el mismo valor de 1.41 $mgMg^{2+}/g$. Este valor se mantiene constante a partir de concentraciones de equilibrio de 422 y 503 $mgMg^{2+}/L$ de Mg^{2+} en solución, respectivamente. En el caso de un tiempo de 7 días, el valor de la capacidad de adsorción se mantiene constante, lo cual se relacionaría con la saturación de iones Mg^{2+} en la superficie. En el caso de un tiempo de 15 días, no se mantiene constante lo que se asocia con la instauración de los iones Mg^{2+} en superficie. El valor constante de

1.41 mgMg²⁺/g muestra, que a un tiempo de 7 días podría bien aplicarse en un futuro a plantaciones agrícolas donde la relación indica la cantidad de iones Mg²⁺ que necesitaría el suelo en una determinada masa de suelo de cultivo.

Tabla 5. Valores de q_o, K_F y ΔG a distintos tiempos

Muestra	Ecuacion linealizada y = mx + b	q _o / (mgMg ²⁺ /g suelo)	Concentración (mg/l) donde se hace constante	K _F	ΔG adsorción KJ/mol
Suelo (3 días)	$\frac{1}{q_e} = 8.464 \left(\frac{1}{C_e}\right) + 0.9304$	1.075	550	0.11	5.43
Suelo (7 días)	$\frac{1}{q_e} = 10.53 \left(\frac{1}{C_e}\right) + 0.711$	1.41	422	0.0674	6.68
Suelo (15 días)	$\frac{1}{q_e} = 8.5876 \left(\frac{1}{C_e}\right) + 0.7075$	1.41	503	0.0826	6.18

Los resultados del valor de ΔG de adsorción tienen valores positivos lo cual indicaría un proceso no espontaneo. Sin embargo, el hecho de que los iones Mg²⁺ sufren un proceso de solvatación en un entorno octaédrico de acuerdo a los resultados de cálculo teórico de la figura 4, indicaría la espontaneidad del proceso de adsorción.

Por otro lado, se realizó un cálculo teórico de la adsorción de Mg²⁺ en suelos de cultivo usando el programa MATERIALS STUDIO 8.0 para poder visualizar el proceso de adsorción. La figura 5, muestra la adsorción del Mg²⁺ en una celda unitaria de SiO₂.

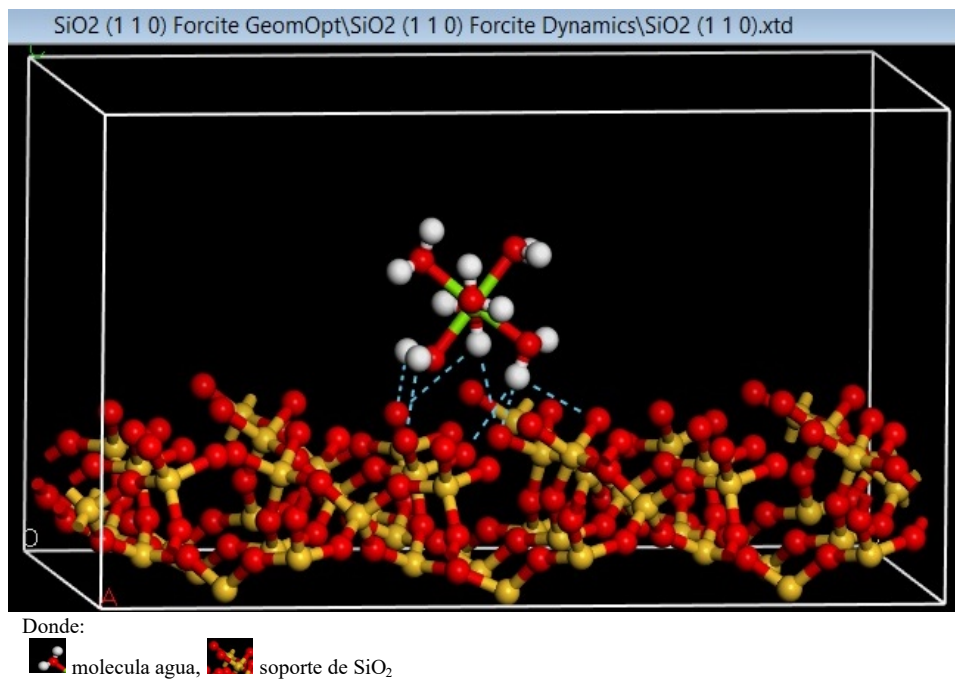


Figura 5. Simulación de la adsorción de Mg²⁺ en la cara (110) del SiO₂

En la figura 5 se observa que el ion Mg²⁺, representado con un color verde claro, se encuentra solvatado con moléculas de agua representadas con un color rojo para el oxígeno y blanco para el hidrógeno. La solvatación del Mg²⁺ se encuentra en un entorno octaédrico, donde los puntos a rayas de color blanco indican un proceso de adsorción de Mg²⁺ que se asocia a una interacción del tipo London [17,18]. Existe una fuerte atracción intermolecular débil



entre el Mg^{2+} y el oxígeno del agua debido a la densidad de carga positiva del hidrogeno del agua generada por la electronegatividad de los oxígenos en la cara de la celda unitaria 110 del SiO_2 .

CONCLUSIONES

- De acuerdo a los resultados estadísticos obtenidos mediante el programa SIGMAPLOT, el modelo de Langmuir es el que se ajusta mejor en la adsorción de Mg^{2+} y obedece a una isoterma del tipo L A tiempos de 3, 7, y 15 días se obtuvieron valores de capacidad máxima de adsorción de 1.1, 1.41 y 1.41 $mgMg^{2+}/g$ muestra, respectivamente. Por otro lado, a un tiempo de 7 días, el valor de la capacidad máxima de adsorción se mantiene constante a partir de una concentración de equilibrio de 422 mg/L , eso se relaciona con la saturación de iones Mg^{2+} en la superficie.
- La caracterización del suelo de cultivo mediante DRX presentan como fase mayoritaria al SiO_2 cristalino en un 95%. Los resultados de FRX indican presencia mayoritaria de Si en un 39.9%, y una presencia minoritaria de Al en un 5.3% que se relaciona con la presencia de la moskovita $[KAl_2(AlSi_3O_{10})(OH)]$ identificada mediante DRX.
- Los resultados del cálculo teórico de la interacción del agua con el Mg^{2+} indican una solvatación en un entorno octaédrico con un valor de $\Delta G = -1288,5 kcal/mol$, lo cual indica que el proceso de formación del complejo de $Mg^{2+}(H_2O)_6$ es factible.
- El cálculo teórico del Mg^{2+} solvatado en un entorno octaédrico con el soporte de SiO_2 indica una adsorción en la cara de la celda unitaria 110 del SiO_2 con una fuerte atracción intermolecular débil debido a la interacción del hidrogeno del agua con los oxígenos en la cara de la celda unitaria del SiO_2 .
- El valor constante de 1.41 $mgMg^{2+}/g$ muestra a un tiempo de 7 días podría bien aplicarse en un futuro a plantaciones agrícolas donde la relación indica la cantidad de iones Mg^{2+} que necesitaría el suelo en una determinada masa de suelo de cultivo.

RECONOCIMIENTOS

Los autores expresan su agradecimiento al Instituto de Investigaciones Químicas (IIQ) de la Carrera de Ciencias Químicas, UMSA y al Instituto de Investigaciones Geológicas y del Medio Ambiente (IIGEMA), Laboratorio de DRX, de la Carrera de Ingeniería Geológica y del medio ambiente, UMSA, por su cobertura institucional y el financiamiento para el presente trabajo de investigación.

REFERENCIAS

1. Bernal-Fundora, A., Hernández-Jiménez, A., González-Cañizares, P.J., Cabrera-Rodríguez, J.A. **2019**, Caracterización de dos tipos de suelos dedicados a la producción de plantas forrajeras, *Cultivos Tropicales*, 40(3), e05
2. Ross, M. **2004**, Importancia del magnesio para altos rendimientos sostenibles en palma de aceite, *Revista Palmas*, 25(Especial), 98-104.
3. Mayne, J. **2000**, Agroecology: Ecological Processes in Sustainable Agriculture, by Stephen R. Gliessman, 1998. CRC Press, Boca Raton, FL. xxi 357 p., American Journal of Alternative Agriculture, 15(2), 95-96. DOI: <https://doi.org/10.1017/S0889189300008559>
4. Akrawi, H.S.Y., Al-Obaidi, M.A., Abdulrahman, Ch.H. **2021**, Evaluation of Langmuir and Freundlich isotherm equation for Zinc Adsorption in some calcareous soil of Erbil province north of Iraq, *Earth and Environmental Science*, 761, 012017. DOI: 10.1088/1755-1315/761/1/012017
5. Pila, N.M. **2020**, Remediación de aguas contaminadas con plaguicidas mediante adsorción sobre partículas de sílice funcionalizadas y materiales carbonosos, (PhD tesis), Departamento de química, Universidad Nacional de la Plata, La Plata, Argentina.
6. Cantor Campos, P.M. **2020**, Preparación y caracterización de carbón activado y sílice mesoestructurada tipo sba-15 magnetizados para explorar su capacidad de adsorción de fenol y 4-nitrofenol", (BSc tesis), Departamento de química, Universidad de Ciencias Aplicadas (UDCA), Bogotá, Colombia.
7. Guzmán Alcalá, M.C. **2001**, Adsorción-desorción del metal Pb (II) a modelos de partículas coloidales del suelo, Instituto de Recursos Naturales y Agrobiología de Sevilla, Sevilla, España.
8. Elzinga, E.J., Reeder, R.J. **2002**, X-ray absorption spectroscopy study of Cu^{2+} and Zn^{2+} adsorption complexes at the calcite surface: Implications for site-specific metal incorporation preferences during calcite crystal growth, *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 66(22), 3943-3954. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0016-7037\(02\)00971-7](https://doi.org/10.1016/S0016-7037(02)00971-7)
9. Elzinga, E.J., Rouff, A.A., Reeder R.J. **2006**, The long-term fate of Cu^{2+} , Zn^{2+} , and Pb^{2+} adsorption complexes at the calcite surface: An X-ray absorption spectroscopy study, *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 70(11), 2715-2725. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.gca.2006.02.026>
10. Esmacili, A., Eslami, H. **2019**, Efficient removal of Pb(II) and Zn(II) ions from aqueous solutions by adsorption onto a native natural bentonite, *Methods X*, 6, 1979-1985. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.mex.2019.09.005>
11. Bittelli, M., Campbell, G.S., Flury, M. **1999**, Characterization of Particle-Size Distribution in Soils with a Fragmentation Model, *Soil Science Society of America Journal*, 63(4), 782-788. DOI: <https://doi.org/10.2136/sssaj1999.634782x>



40 años



12. Crane, C.A., Pantoya, M.L., Weeks, B.L., Saed, M. **2014**, The effects of particle size on microwave heating of metal and metal oxide powders, *Powder Technology*, 256, 113-117. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2014.02.008>
13. Khoshdast, H., Shojai, V., Hassanzadeh, A., Niedoba, T., Surowiak, A. **2021**, A Novel Open-System Method for Synthesizing Muscovite from a Biotite-Rich Coal Tailing, *Minerals*, 11(3), 269. DOI: <https://doi.org/10.3390/min11030269>
14. Ippolito, J.A., Tarkalson, D.D., Lehrsch, G.A. **2011**, Zeolite Soil Application Method Affects Inorganic Nitrogen, Moisture, and Corn Growth, *Soil Science*, 176(3), 136-142. DOI: 10.1097/SS.0b013e31820e4063
15. Giles, C.H., MacEwan, T.H., Nakhwa, S.N., Smith, D. **1960**, 786. Studies in adsorption. Part XI. A system of classification of solution adsorption isotherms, and its use in diagnosis of adsorption mechanisms and in measurement of specific surface areas of solids, *Journal of the Chemical Society (Resumed)*, 1960(0), 3973-3993. DOI: <https://doi.org/10.1039/JR9600003973>
16. Hussain, S., Ullah, Z., Gul, S., Khattak, R., Kazmi, N., Rehman, F., Khan, S., Ahmad, K., Imad, M., Khan, A. **2016**, Adsorption Characteristics of Magnesium-Modified Bentonite Clay with Respect to Acid Blue 129 in Aqueous Media, *Polish Journal of Environment Studies*, 25(5), 1947-1953
17. Lopez Lopez, M.J. **2017**, Enlaces químicos, fuerzas intermoleculares y su relación con Ciencias de la Tierra, (BSc Tesis), Universidad Nacional Autónoma de México, Facultad de Ingeniería, México.
18. Giles, C.H., Smith, D., Huitson, A. **1974**, A general treatment and classification of the solute adsorption isotherm. I. Theoretical, *Journal of Colloid and Interface Science*, 47(3), 775-765. DOI: [doi.org/10.1016/0021-9797\(74\)90252-5](https://doi.org/10.1016/0021-9797(74)90252-5)