



# Apuntes de Hidrogeoquímica

Luis Antonio García Villanueva

Universidad Nacional Autónoma de México  
Facultad de Ingeniería

Apuntes de  
**Hidrogeoquímica**

**Luis Antonio García Villanueva**  
Departamento de Ingeniería Sanitaria y Ambiental

División de Ingenierías Civil y Geomática

Para una correcta visualización  
del libro te sugerimos

Acrobat Reader  
Haz Click

APUNTES DE HIDROGEOQUÍMICA  
García Villanueva, Luis Antonio  
Universidad Nacional Autónoma de México  
Facultad de Ingeniería  
2023, 110 págs.

---

APUNTES DE HIDROGEOQUÍMICA

Primera edición electrónica provisional  
de un ejemplar (6 MB) en formato PDF  
Publicado en línea: enero de 2023

D.R. © 2022, UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO  
Avenida Universidad 3000, Col. Universidad Nacional Autónoma de  
México, Ciudad Universitaria, Delegación Coyoacán,  
Ciudad de México, C.P. 04510

FACULTAD DE INGENIERÍA  
<http://www.ingenieria.unam.mx/>

Esta edición y sus características son propiedad de la Universidad  
Nacional Autónoma de México. Prohibida la reproducción o  
transmisión total o parcial por cualquier medio sin la autorización  
escrita del titular de los derechos patrimoniales.

Hecho en México.

---

UNIDAD DE APOYO EDITORIAL  
Cuidado de la edición: Amelia Guadalupe Fiel Rivera  
Formación editorial : Nismet Díaz Ferro  
Foto de portada: Tawatchai07, Freepik

# Introducción

Comprender la interacción que se presenta entre el agua y el medio rocoso es fundamental, debido a que permite identificar el origen de los iones que determinan las características que adopta el agua que entra en contacto con el medio sólido.

La hidrogeoquímica es una ciencia interdisciplinaria donde intervienen los conocimientos provenientes de la hidrogeología y la geoquímica, y que tiene como propósito el estudio de las propiedades químicas del agua superficial y subterránea, así como de la geología del sitio.

Resulta de particular importancia, analizar desde la hidrogeoquímica las diferentes reacciones que se presenten en el agua con el medio rocoso y la contaminación antropogénica como factores determinantes en los cambios de la calidad del agua.

Además de lo anterior, también se pueden estudiar los procesos que dan origen a la contaminación de un cuerpo de agua, identificar y cuantificar infiltraciones, así como áreas de recarga, y determinar la velocidad y dirección de un flujo, los tipos de agua y las mezclas que pueden producirse entre dichos tipos.

Los APUNTES DE HIDROGEOQUÍMICA tienen por objetivo explicar a las y los estudiantes los conceptos básicos sobre hidrogeología y geoquímica para que desarrollen una mayor comprensión en el tema, algunos como el ori-

1

2

3

4

5

6

3

gen del suelo, tipos de suelo, minerales que conforman el suelo, equilibrio químico, equilibrio de carbonatos, reacciones ácido-base, modelación hidrogeoquímica, entre otros. Asimismo, dar a conocer la hidrogeoquímica como una herramienta de aplicación en estudios de ingeniería con la intención de evaluar diferentes escenarios para la toma de decisiones.

1

2

3

4

5

6

4

# Contenido

Introducción .....	3
<b>1. Antecedentes .....</b>	<b>8</b>
1.1. Contexto histórico: la ciencia y el agua .....	8
<b>2. Generalidades .....</b>	<b>10</b>
2.1. Disponibilidad hídrica .....	11
2.2. Fundamentos de hidrología .....	12
2.3. El ciclo hidrológico .....	13
2.4. Infiltración y permeabilidad .....	17
2.5. Tipos de aguas subterráneas .....	20
2.6. Regiones hidrogeológicas .....	22
<b>3. Principios de la química del agua .....</b>	<b>26</b>
3.1. Equilibrio y cinética .....	30
Energía de activación .....	34
La energía de las reacciones químicas .....	36
3.2. Reacciones ácido-base .....	49
Neutralización .....	50
Equilibrio iónico del agua .....	52
pH .....	53
3.2.1. Sistemas de equilibrio de los carbonatados .....	53
Constantes de equilibrio, acidez y basicidad .....	57
3.3. Minerales, meteorización y procesos superficiales .....	60

3.4. Procesos de óxido reducción.....	62
3.5. Componentes orgánicos del agua subterránea .....	64
3.5.1. Estructura y propiedades.....	64
3.6. Transformación biológica .....	65
<b>4. Medio rocoso .....</b>	<b>66</b>
4.1. Formaciones geológicas.....	68
4.1.1. Tipos de rocas y características .....	68
Rocas ígneas.....	70
Rocas sedimentarias .....	71
Rocas metamórficas.....	73
4.1.2. Composición mineralógica.....	75
4.1.3. Sistemas geológicos kársticos .....	76
Distintas clasificaciones de los sistemas kársticos.....	78
Procesos de meteorización en zona kárstica, disolución de los carbonatos.....	80
Tipos de karst .....	82
<b>5. Hidrogeoquímica .....</b>	<b>84</b>
5.1. Clasificaciones hidroquímicas .....	84
La clasificación Alekine.....	85
La clasificación de Shchoukarev.....	85
Clasificación de Kurlov.....	86
El método de clasificación Palmer .....	86
Método de clasificación de Schoeller.....	87
5.2. Representación gráfica de la composición a aguas minerales... ..	88
Diagrama de barras y circular.....	88
Diagrama de Stiff.....	89
Diagrama de Piper .....	89
5.3. Procesos hidrogeoquímicos .....	90
Precipitación.....	91

Disolución . . . . .	91
Disolución de gases. . . . .	92
Disoluciones minerales . . . . .	92
Actividad . . . . .	94
Ecuación de Deby-Hückel . . . . .	95
Fuerza iónica . . . . .	95
Intercambio iónico . . . . .	96
Índice de saturación. . . . .	96
Procedimiento de los cálculos del <i>IS</i> en el modelo. . . . .	97
<b>6. Modelación hidrogeoquímica . . . . .</b>	<b>99</b>
6.1. Antecedentes. . . . .	99
6.2. Tipos de modelos hidrogeoquímicos . . . . .	100
Modelación directa . . . . .	100
Modelación inversa . . . . .	101
Modelos de especiación y solubilidad . . . . .	103
Modelos de balance de masa . . . . .	103
Modelos de transferencia de masa . . . . .	104
Códigos de transporte de masa química . . . . .	105
<b>Referencias bibliográficas. . . . .</b>	<b>106</b>

# 1. Antecedentes

Con el propósito de comprender con profundidad los fenómenos de estudio de la hidrogeoquímica y las distintas maneras en que sus aportaciones mejoran nuestras condiciones de vida, es necesario explicar el contexto histórico en el que surge esta ciencia.

## 1.1. Contexto histórico: la ciencia y el agua

Hablar del agua, desde una perspectiva científica, ha sido un tema abordado desde tiempos muy remotos. En civilizaciones tan antiguas como la griega existieron pensadores que trataron de explicar el porqué de la lluvia y, por lo tanto, el porqué del flujo de los ríos. Fue el filósofo griego Anaxágoras quien dio una explicación al proceso intuyendo que las lluvias provenían de la evaporación del agua de mar por parte del sol y, posteriormente, Teofrasto y el romano Marco Vitruvio, basados en las ideas de Anaxágoras, fueron quienes definieron lo que hoy conocemos como *ciclo hidrológico*.

Más tarde, las civilizaciones asiáticas generaron una aproximación más de medición, para lo cual llevaron registros sistemáticos de precipitaciones, caída de nieve y viento, llegando a una teoría sobre el ciclo hidrológico tal como la conocemos hoy, alrededor del 900 a 400 A. C.; sin embargo, por su poca comunicación con occidente, sus teorías no impactaron significativamente el conocimiento del resto del mundo.

Durante la Edad Media y el Renacimiento, el concepto de hidrología no avanzó en gran medida hasta que Leonardo da Vinci realizó mediciones sistemáticas de velocidades en diferentes cauces, con lo que llegó a la conclusión de que el agua es más rápida en la superficie que en el fondo.

En la Edad Contemporánea, varios científicos aportaron sus teorías para la consolidación de lo que hoy conocemos como *hidrología*: en 1802, Dalton describió un principio para la evaporación; en 1839, Hagen y Poiseuille elaboraron una teoría para el flujo laminar; en 1856, Darcy desarrolló su ecuación para el flujo en medios porosos; en 1891, Manning presentó su ecuación para el flujo en canales abiertos; en 1914, Hazen introdujo el análisis de frecuencia para los máximos de una creciente; en 1933, Horton desarrolló una aproximación a la infiltración y en 1945 presentó su descripción de las cuencas de drenaje (índices de Horton) y, finalmente, en 1941, Gumbel propuso la ley de valor extremo para estudios hidrológicos. Todas estas teorías independientes ayudaron a consolidar la naciente ciencia de la hidrología hasta que a mediados de la década de los setenta, alcanzó un reconocimiento definitivo como disciplina. Este concepto ha seguido evolucionando y en la actualidad ha surgido un nuevo concepto de estudio científico que es la *hidrogeoquímica*.

1

2

3

4

5

6

9

## 2. Generalidades

La hidrogeoquímica es la compilación de varias ciencias, tales como la química del agua, que concierne al estudio de los procesos y reacciones químicas que afectan la distribución y circulación de especies disueltas en aguas naturales, combinada con la geología y la biología, debido a que durante el ciclo hidrológico el agua interactúa directamente con la biósfera.

A través de la aplicación de los modelos hidrogeoquímicos, podemos resolver diversas situaciones para mejorar la vida en la Tierra, tales como las que se muestran en la tabla 2.1.

**Tabla 2.1** Aplicaciones de la hidrogeoquímica en la Tierra

Riesgos por contaminación sobre los recursos hídricos
Alteraciones de la calidad del agua
Efectos de la liberación de sustancias en el sistema hidrogeológico
Fuentes, rutas y destinos de los contaminantes
Viabilidad de alternativas para tratamiento
Transformaciones químicas de las sustancias

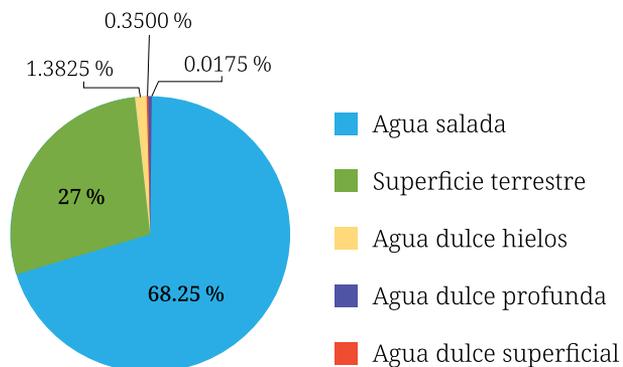
Fuente: Llopis, 1970

Entonces, ¿cuáles son los temas que abarca la hidrogeoquímica y cómo se estudian con ella las propiedades químicas del agua superficial y subterránea, y su relación con la geología regional?

## 2.1. Disponibilidad hídrica

Para entender la relación que tiene la hidrogeoquímica con el agua, es necesario comprender el impacto que esta tiene para la vida en nuestro planeta.

Primeramente, partiremos del dato de que la Tierra es un astro que la mayor parte de su superficie está cubierta por agua (para ser más exactos el 70%), y el agua a su vez es la única sustancia que se encuentra como sólida, líquida y gaseosa en la superficie terrestre. Ahora bien, toda el agua del planeta no puede usarse ni para el consumo humano, ni para la industria, ni para la agricultura, ya que el 97,5 % de dicho elemento es agua salada. El agua restante es agua dulce, pero el 75% de esta se encuentra inaccesible en forma de hielo en los casquetes polares, en Groenlandia y en el océano Antártico, por lo tanto, la minúscula proporción de agua dulce que queda es justo la que se necesita para la vida y es la que resulta verdaderamente fundamental para los procesos vitales del planeta.



**Figura 2.1** Porcentajes de agua en la tierra. Fuente: USGS, 2020

## 2.2. Fundamentos de hidrología

La *hidrología*, cuya etimología proviene del griego *hidro*, “agua”, y *logos*, “ciencia”, tiene como objeto de estudio todo lo relacionado directamente con el agua en la Tierra, por lo tanto, se define como la ciencia que trata de las características, distribución y comportamiento del agua en la naturaleza.

Asimismo, la hidrología está íntimamente relacionada con otras ciencias que abarcan parte de su campo de estudio, o que tratan el tema desde otros ángulos, como lo son la oceanografía, meteorología, geología, entre otras.

Es importante definir algunos términos básicos de esta ciencia para así poder comprender mejor la interacción del ser humano con lo que se explicará más adelante acerca del ciclo hidrológico:

- \* *Precipitación*: el agua que desciende de la atmósfera a la superficie de la Tierra y se mide en milímetros de altura.
- \* *Intensidad de precipitación*: se estima como la cantidad de agua caída en la unidad de tiempo.
- \* *Escurrimiento o escorrentía*: la corriente de agua que se vierte al rebasar su depósito o cauce natural o artificial. En hidrología, la escorrentía hace referencia a la lámina de agua que circula sobre la superficie en una cuenca de drenaje, como se observa en la figura 2.2.
- \* *Coefficiente de escurrimiento*: la relación entre la lámina de agua precipitada sobre una superficie y la lámina de agua que escurre superficialmente.
- \* *Evaporación*: el aumento de energía cinética que experimentan las moléculas de agua cercanas a la superficie de un suelo húmedo o una masa de agua producido por la radiación, el viento y las diferencias en presión de vapor (Aparicio, 1989).

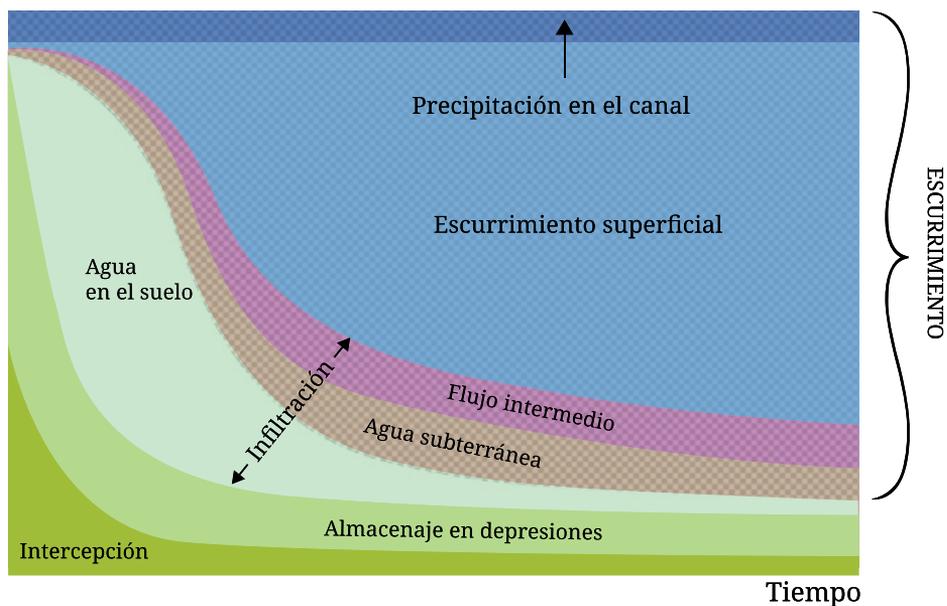
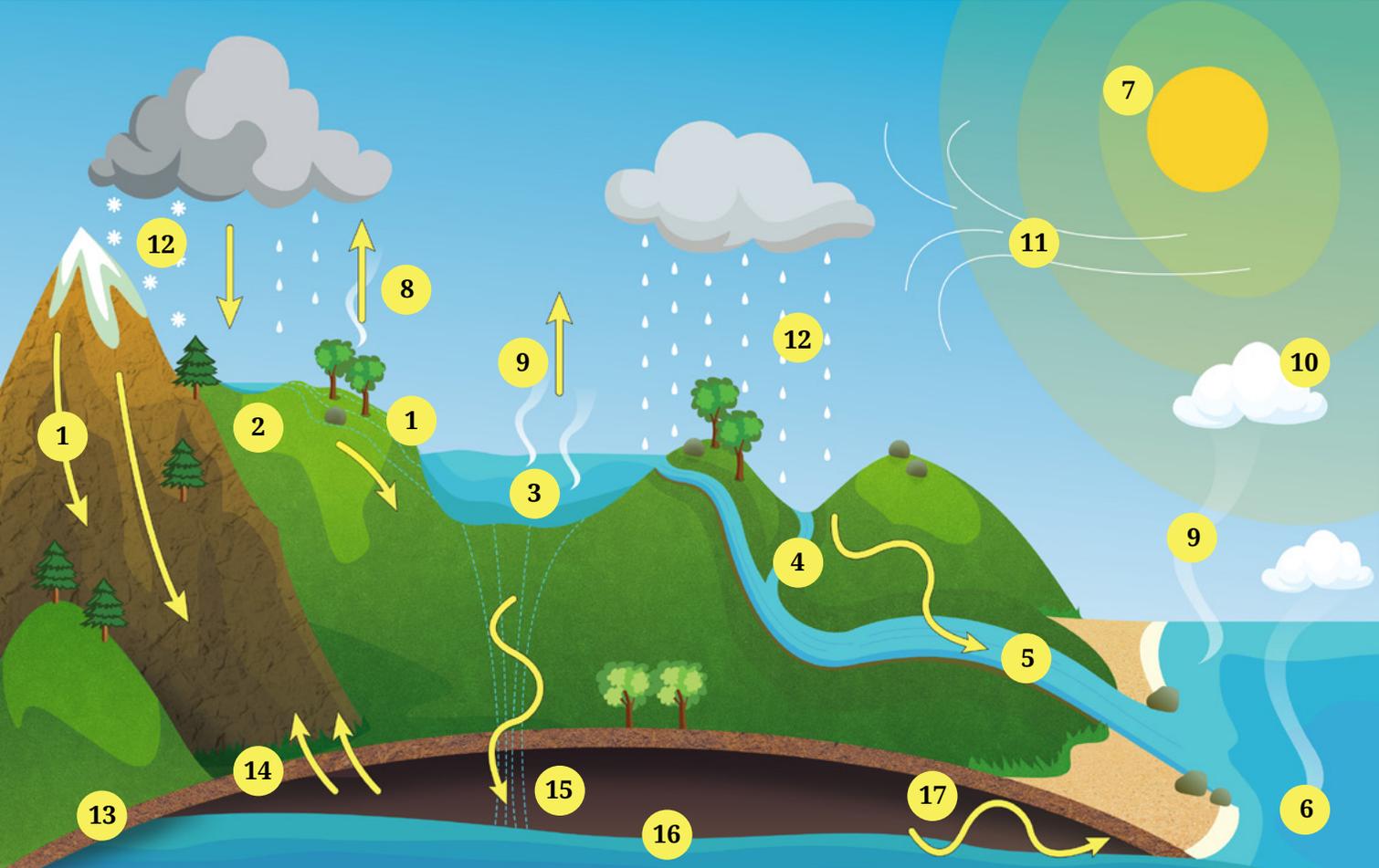


Figura 2.2 Gráfica de escurrimiento.

Fuente: Rivas, 2014

### 2.3. El ciclo hidrológico

Explicar el ciclo hidrológico pareciera una tarea fácil, ya que es algo con lo que vivimos todos los días. De cierto modo, resulta sencillo abordar el tema de una forma muy básica como el proceso de circulación del agua entre los distintos compartimentos de la hidrósfera. Sin embargo, la mayoría de las veces no pensamos en el ciclo hidrológico desde un punto de vista más profundo en el que consideramos que la calidad del agua que se encuentra en la naturaleza es muy variable, y que depende estrechamente de las condiciones geográficas y climáticas, así como de la oportunidad que tenga para disolver gases, sustancias minerales y orgánicas, o para mantenerlos en suspensión o en estado coloidal de su temperatura, volumen, flora microbiana y de la contaminación producida por las actividades propias de la especie humana.



- |                                |                                       |
|--------------------------------|---------------------------------------|
| 1. Flujo superficial           | 10. Condensación                      |
| 2. Retención superficial       | 11. Viento                            |
| 3. Lago                        | 12. Precipitación                     |
| 4. Escurrimiento en corrientes | 13. N.A.F. (Nivel de Aguas Freáticas) |
| 5. Río                         | 14. Capilaridad                       |
| 6. Mar                         | 15. Infiltración                      |
| 7. Radiación solar             | 16. Percolación profunda              |
| 8. Transpiración               | 17. Agua subterránea                  |
| 9. Evaporación                 | 18. Flujo subterráneo                 |

Figura 2.3 Ciclo hidrológico

1

2

3

4

5

6

14

Entonces, ¿a qué le llamamos ciclo hidrológico y qué tiene que ver con el agua con la que interactuamos?

El concepto del ciclo hidrológico, de acuerdo con López Alegna (1994), engloba la circulación del agua en la naturaleza: desde el mar, masas o cursos de agua a la atmósfera de la Tierra y de la tierra al mar, a través de escurrimientos superficiales o subterráneos. Por lo tanto, encontramos que existen diversas variantes secundarias, las cuales se ilustran en la figura 2.3 en la cual se representan los principales estados del agua en la naturaleza y en el sentido de los desplazamientos.

Los principales procesos implicados en el ciclo del agua son los siguientes:

- \* *Evaporación:* lo que sucede en esta etapa es que el agua se evapora en la superficie oceánica, sobre la superficie terrestre y también por los organismos, en el fenómeno de la transpiración en plantas y sudoración en animales. Los seres vivos, especialmente las plantas, contribuyen con un 10% al agua que se incorpora a la atmósfera.
- \* *Condensación:* el agua en forma de vapor sube y se condensa formando las nubes, constituidas por agua en pequeñas gotas.
- \* *Precipitación:* se produce cuando las gotas de agua que forman las nubes se enfrían acelerándose la condensación y uniéndose las gotitas de agua para formar gotas mayores que terminan por precipitarse a la superficie terrestre en razón a su mayor peso. La precipitación puede ser sólida (nieve o granizo) o líquida (lluvia).
- \* *Infiltración:* ocurre cuando el agua que alcanza el suelo penetra a través de sus poros y pasa a ser subterránea. La proporción de agua que se infiltra y la que circula en superficie (escorrentía) depende de la permeabilidad del sustrato, de la pendiente y de la cobertura vegetal. Parte del agua infiltrada vuelve a la atmósfera por evaporación o, más aún, por la transpiración de las plantas, que la extraen

con raíces más o menos extensas y profundas. Otra parte se incorpora a los acuíferos, niveles que contienen agua estancada o circulante. Parte del agua subterránea alcanza la superficie allí donde los acuíferos, por las circunstancias topográficas, intersecan (es decir, cortan) la superficie del terreno.

- \* *Escorrentía*: este término se refiere a los diversos medios por los que el agua líquida se desliza cuesta abajo por la superficie del terreno. En los climas no excepcionalmente secos, incluidos la mayoría de los llamados desérticos, la escorrentía es el principal agente geológico de erosión y de transporte de sedimentos.
- \* *Circulación subterránea*: se produce a favor de la gravedad, como la escorrentía superficial, de la que se puede considerar una versión. Se presenta en dos modalidades, la que se da en la zona vadosa, especialmente en rocas karstificadas, como son a menudo las calizas, es una circulación siempre pendiente abajo y la que ocurre en los acuíferos en forma de agua intersticial que llena los poros de una roca permeable, de la cual puede incluso remontar por fenómenos en los que intervienen la presión y la capilaridad.
- \* *Fusión*: este cambio de estado se produce cuando la nieve pasa a estado líquido al producirse el deshielo.
- \* *Solidificación*: al disminuir la temperatura en el interior de una nube por debajo de 0° C, el vapor de agua o el agua misma se congelan, precipitándose en forma de nieve o granizo, siendo la principal diferencia entre los dos conceptos que en el caso de la nieve se trata de una solidificación del agua de la nube que se presenta, por lo general, a baja altura. Al irse congelando la humedad y las pequeñas gotas de agua de la nube, se forman copos de nieve, cristales de hielo polimórficos (es decir, que adoptan numerosas formas visibles al microscopio), mientras que en el caso del granizo, es el ascenso rápido de las gotas de agua que conforman una nube, lo cual da origen a la formación de hielo que va generando el granizo y aumen-

1

2

3

4

5

6

tando de tamaño con ese ascenso. Además, cuando sobre la superficie del mar surge una manga de agua (especie de tornado que se produce sobre la superficie del mar cuando está muy caldeada por el sol) este hielo se origina en el ascenso de agua por adherencia del vapor y agua al núcleo congelado de las grandes gotas de agua. El proceso se repite desde el inicio consecutivamente, por lo que nunca se termina ni se agota el agua.

Después de haber analizado de manera general el ciclo hidrológico y para poder continuar explicando la hidrogeoquímica adecuadamente, es necesario ahondar en dos términos ya antes mencionados: *infiltración y permeabilidad*.

## 2.4. Infiltración y permeabilidad

Como se tiene entendido, el suelo es sustrato básico de la vida terrestre que está formado por una mezcla de interacciones dinámicas que en conjunto forman un importante campo de estudio, es decir, es un sistema que se conforma de componentes sólidos, como minerales y materia orgánica que se encuentran irregularmente mezclados en distintos estratos.

Según Aguilera (1976), en el estudio físico del suelo interesan los siguientes aspectos: textura, estructura, porosidad, profundidad efectiva, drenaje interno y permeabilidad.

Por su parte, Motta *et al.* (1990) destacan que entre las principales características físicas del suelo se tienen las siguientes: color, textura, estructura, consistencia, temperatura, porosidad, capacidad de aire y de agua, compactación y profundidad efectiva radical.

Si se habla de permeabilidad, por definición, nos referimos a la capacidad o facilidad que tiene el suelo para dejarse penetrar por los fluidos, lo cual se asocia con la porosidad que presenta dicho suelo. De acuerdo con Jiménez (2008), no solo los valores absolutos de porosidad bastan para estimar la permeabilidad del suelo, sino algunos otros factores como la geometría del sistema poroso. Así, una estructura laminar deja una gran porosidad, pero dificulta notablemente la circulación del agua, al igual que sucede cuando no existe una buena interconexión entre los componentes de la macroporosidad.

La permeabilidad depende de la porosidad total del suelo, del contenido de humedad y de la distribución del tamaño de poros. Cuando el suelo está saturado, todos los poros están llenos de agua y actúan como conductores.

En esta condición, la permeabilidad es máxima y tanto mayor si predominan poros grandes, como ocurre en suelos arenosos o bien granulados y estables. En condiciones insaturadas, los poros vacíos no conducen agua y disminuye, entonces, el área efectiva para la transferencia de esta. La permeabilidad está en función del contenido de humedad. Cuando los suelos presentan estructuras estables, la permeabilidad no cambia; sin embargo, si la estructura es inestable, el suelo se degrada por expansión al mojarse y la permeabilidad cambia totalmente.

**Tabla 2.2** Clasificación de la conductividad hidráulica

Conductividad (cm/h)	Interpretación
<0.1	Muy lenta
0.1 - 0.5	Lenta
0.5 - 1.6	Moderadamente Lenta

Conductividad (cm/h)	Interpretación
1.6 - 5.0	Moderada
5.0 - 12.0	Moderadamente Rápida
12.0 - 18.0	Rápida
>18.0	Muy rápida

Fuente: Montenegro y Malagón, 1990

Con respecto a la infiltración, Martínez (1981) explica que la infiltración es la cantidad de agua que se infiltra por unidad de tiempo y bajo condiciones de campo, disminuye conforme la cantidad de agua que haya entrado. Esta es máxima al comenzar la aplicación del agua al suelo.

El método más conocido para medir la infiltración es el de los llamados “cilindros infiltrómetros” y su interpretación se hace según la tabla 2.3.

Cabe mencionar que entre los factores más relevantes que afectan la infiltración tenemos los siguientes:

- \* Capacidad de entrada del agua en la superficie.
- \* Transmisión a través del suelo.
- \* Capacidad de almacenamiento disponible en el suelo.
- \* Características del suelo y agua.

**Tabla 2.3** clasificación de la velocidad de infiltración

Infiltración (cm/h)	Interpretación
<0.1	Muy lenta
0.1 - 0.5	Lenta
0.5 - 2.0	Moderadamente Lenta

Infiltración (cm/h)	Interpretación
2.00 - 6.3	Moderada
6.3 - 12.7	Moderadamente Rápida
12.7 - 25.4	Rápida
>25.4	Muy Rápida

Fuente: Montenegro y Malagón, 1990

## 2.5. Tipos de aguas subterráneas

Cuando llueve, parte del agua discurre por la superficie, parte se evapora y el resto se infiltra en el terreno. Esta última vía es la fuente primaria de prácticamente toda el agua subterránea, según Tarbuck (2012), la cantidad de agua que sigue cada uno de esos caminos, sin embargo, varía mucho en función del tiempo y del espacio. Los factores que influyen en esta variación son lo fuerte de la pendiente, la naturaleza del material, la intensidad de la lluvia, y el tipo y cantidad de vegetación.

Densas lluvias que caen sobre pendientes abruptas donde las capas suprayacentes están compuestas de materiales impermeables provocarán obviamente un elevado porcentaje de agua de escorrentía. A la inversa si la lluvia cae de manera suave y uniforme sobre pendientes más graduales compuestas por materiales que son fácilmente penetrados por el agua, un porcentaje mucho mayor del agua se infiltra en el suelo, algo del agua que se infiltra no viaja muy lejos, porque es retenida por atracción molecular como una capa superficial sobre las partículas sólidas. Esa zona cercana a la superficie se denomina cinturón de humedad del suelo. Esta surcada por raíces, los vacíos que quedaron en el lugar de las raíces desintegradas y las madrigueras y los túneles de las

lombrices, que aumentan la infiltración del agua de lluvia en el suelo. Las plantas utilizan el agua del suelo en las funciones vitales y la transpiración. Una parte de agua también se evapora directamente y regresa a la atmósfera.

Todo cuerpo de agua situado por debajo de la superficie del suelo es considerado como agua subterránea, sin embargo, el agua subterránea puede conocerse de distintas formas según como sea clasificada. Existen aguas al interior de cuerpos rocosos o un depósito no consolidado; estos se denominan acuíferos; los cuales producen una gran cantidad de agua apta para el consumo humano.

Por otro lado, la profundidad a la que los espacios de los poros del suelo o las fracturas y los vacíos en la roca a ser completamente saturados de agua se llama capa freática. El agua subterránea se recarga constantemente del agua de lluvia que la alimenta a través de la misma porosidad de la superficie terrestre, y en ocasiones el agua subterránea puede fluir hacia superficie desembocando en ríos, arroyos y océanos.

Durante muchos años, los acuíferos no fueron empleados por la humanidad que desconocía su existencia; sin embargo, en los últimos tiempos, el hombre ha pretendido usarlos como fuente de agua para su uso, lo que ha degenerado en una sobre explotación que afecta el equilibrio ecológico del planeta. A continuación, en la figura 2.10 se ilustra cómo funciona todo lo anteriormente mencionado:

1

2

3

4

5

6

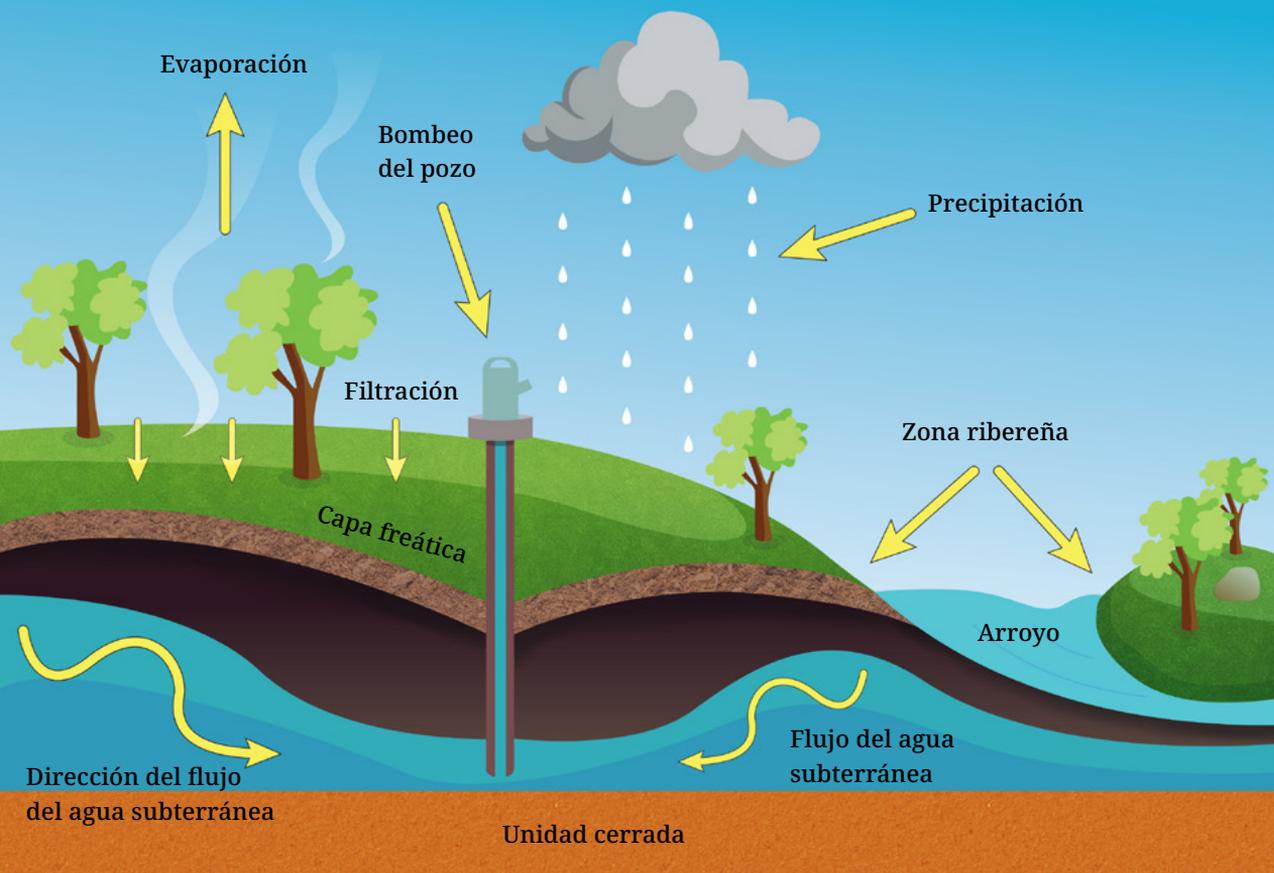


Figura 2.10 Medios de extracción del agua

## 2.6. Regiones hidrogeológicas

Se denominan *regiones hidrogeológicas* a todas aquellas que presenten características o comportamientos distintivos en relación con sus aguas subterráneas. El término “distintivo” implica alguna característica peculiar y, por lo tanto, no siempre involucra un comportamiento homogéneo.

Los factores que ejercen mayor influencia primaria en el comportamiento hidrológico subterráneo son: el geológico, el geomorfológico, el climático y el biológico.

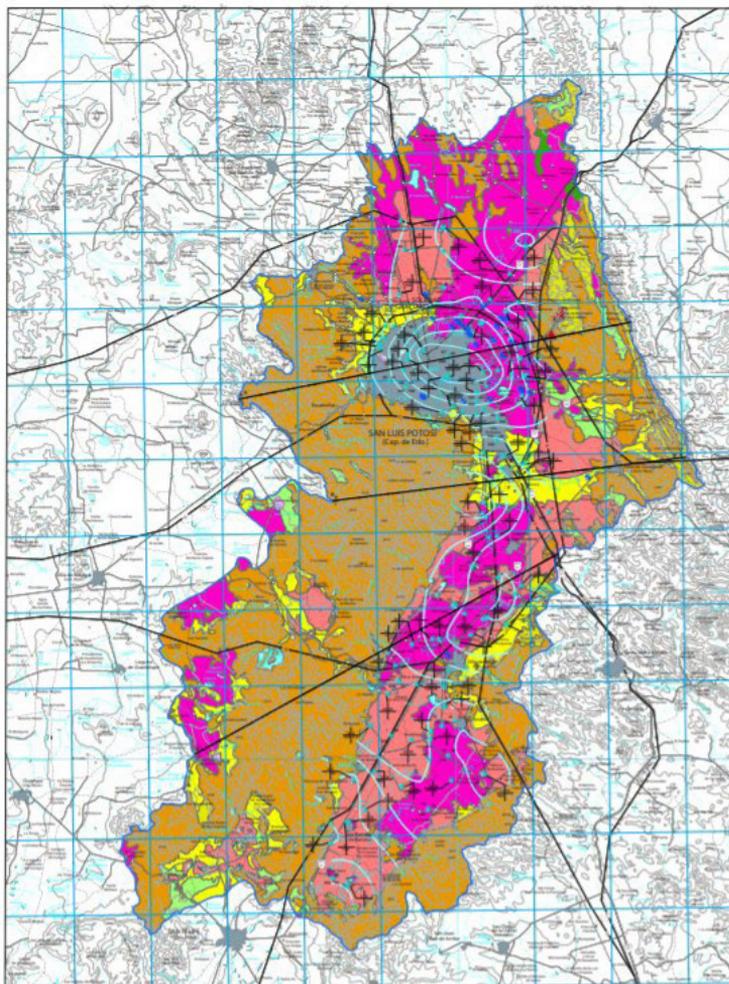
El componente geológico tiene que ver notablemente en el aspecto hidroquímico y en el hidrodinámico. El tipo mineralógico, tanto de la zona saturada como subsaturada, constituye el elemento principal del que toma su composición química inicial el agua subterránea. El grado de litificación, la textura y la estructura, también condicionan los comportamientos químicos y dinámicos. En las rocas, que conforman medios netamente discontinuos, el agua tiene poco espacio para almacenarse, se transmite a través de fisuras, o superficies de debilidad (diaclasas, fallas, estratificación, esquistosidad), con mayor velocidad y menor superficie de contacto que en los sedimentos. El resultado general es escasa reserva, flujo rápido de tipo turbulento y baja salinidad. La textura de los sedimentos controla la porosidad, la permeabilidad y la composición química. Bajo condiciones de porosidad intergranular, el medio es continuo, la capacidad de almacenamiento y la superficie de contacto aumentan y la velocidad de flujo disminuye en relación con ambientes rocosos. El tamaño de los poros, que en general está en función del tamaño de los granos, es uno de los principales condicionantes del comportamiento hidráulico, hidrodinámico e hidroquímico. La granulometría fina se caracteriza por presentar alta porosidad total y baja permeabilidad y porosidad efectiva. El volumen total de agua almacenada es elevado, pero el extraíble es escaso. Las velocidades medianas (arenas) y particularmente las gruesas (gravas) manifiestan un comportamiento opuesto al citado para las pelitas.

Sin embargo, la tendencia, especialmente en lo referente a la hidroquímica, puede variar sustancialmente bajo la influencia del clima. Así, en regiones con marcado exceso en el balance hídrico (húmedas), es común encontrar aguas de baja salinidad aun en sedimentos arcillosos, mientras que en zonas deficitarias predominan salinidades elevadas, incluso en materiales arenosos. La geomorfología de las zonas montañosas con fuertes pendientes topográficas origina acentuados gradientes hidráulicos y, por ende, da lugar a ámbitos donde predomina el flujo lateral. En los

pedemontes, las pendientes topográfica e hidráulica adoptan valores intermedios y la condición de la primera, junto con la presencia de sedimentos con permeabilidades relativas altas, favorece el incremento de la recarga. La morfología de estos ámbitos y de las llanuras vecinas es la principal responsable de la existencia de zonas de surgencia con altas presiones y caudales. En las llanuras, la escasa expresión morfológica controla la energía hidráulica subterránea, cuyo principal vector se orienta verticalmente; por ello, pese a que en estas predominan granulometrías finas, son sitios de recarga y descarga preferencial mediante flujo vertical. Otra característica típica de las llanuras es el confinamiento parcial o semiconfinamiento, que permite la recarga de unidades hidrogeológicas profundas a partir de otras sobrepuestas, incluso desde la capa freática, por el proceso de filtración vertical.

El clima es otro de los factores que inciden en las características y el comportamiento hidrológico subterráneo. En condiciones de aridez la recarga es escasa o prácticamente nula, la superficie freática se emplaza a profundidades considerables y la salinidad es elevada, debido a la concentración por evapotranspiración y a la falta de dilución. En regiones húmedas sucede lo contrario y el excedente en el balance suele manifestarse mediante una abundante red hidrográfica. En algunos casos, como ya se mencionó, la morfología limita la importancia de la red de drenaje. El componente biológico natural tiende a mantenerse en equilibrio con el ambiente y el resto de los recursos naturales (agua, aire y suelo), pero el instalado artificialmente (cultivos, plantaciones) y las prácticas y actividades desarrolladas por el hombre (arado, riego, drenaje, fertilización, fumigación, construcciones urbanas, viales e hidráulicas, basurales, industrias, efluentes, etc.) son las que generan las mayores alteraciones en el comportamiento del recurso hídrico subterráneo. En este sentido, los parámetros más afectados son la reserva, la productividad y la calidad.

El Instituto Nacional de Estadística y Geografía (INEGI) presenta las Zonas Hidrogeológicas de México, donde se describen las características físicas, hidrológicas, dinámicas y estado de los principales acuíferos granulares del país. Se trata de información digital estructurada con salida gráfica, la cual integra el estudio de las aguas subterráneas a nivel de zona hidrogeológica, entendiendo como “zona hidrogeológica” a un depósito de materiales granulares que contiene un acuífero y su área inmediata de recarga. La información cartográfica y vectorial se complementa con el documento metodológico y el Diccionario de Datos, este último define los objetos espaciales representados en el producto, sus definiciones, atributos y estructura.



**Figura 2.11** Zona hidrogeológica.  
Fuente: INEGI, 2018

### 3. Principios de la química del agua

El agua es la segunda molécula más abundante en el universo, cubre el 70% de la superficie terrestre de nuestro planeta, forma parte de nuestra vida diaria y es vital para nuestra existencia. Está formada por dos átomos de hidrógeno y uno de oxígeno ( $\text{H}_2\text{O}$ ), los cuales al unirse crean una estructura molecular de geometría particular que le otorga todas sus propiedades físicas y químicas, por las que es considerada como un compuesto extraordinario y de suma importancia.

Para llegar a entender estas propiedades, primero debemos recordar que los átomos se enlazan entre ellos con el fin de completar sus niveles de energía. Mientras un átomo de oxígeno cuenta con seis electrones de valencia, el hidrógeno solo cuenta con uno, es así que cuando estos elementos se juntan para formar una molécula de agua deciden compartir electrones (formar un enlace covalente) y, de esta forma, tanto la molécula formada como ellos individualmente se encuentran en equilibrio.

Si se sabe también que los electrones se unen en pares al formar un enlace y que estos buscan estar separados unos de otros para evitar fuerzas de repulsión entre ellos, podemos entender por qué una molécula de agua tiene forma de V (figura 3.1), ya que al tomar en cuenta el espacio tridimensional alrededor del oxígeno el acomodo más eficiente para estos pares son los vértices de un tetraedro, quedando el oxígeno en el centro de este.

1

2

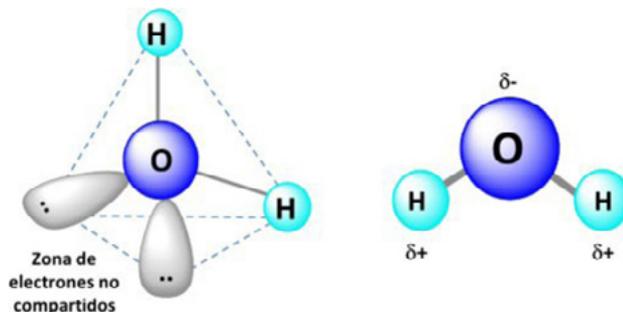
3

4

5

6

**Figura 3.1** Geometría y distribución de cargas en una molécula de agua. Fuente: Montes, 2016



Este acomodo provoca que los dos átomos de hidrógeno queden recargados de un lado de la molécula y los electrones no apareados del otro lado, que es sinónimo de decir que la parte con carga parcialmente positiva queda de un lado y la negativa del otro, lo que genera una distribución de cargas asimétricas y le otorga el nombre de compuesto polar. La polaridad de las moléculas de agua es de suma importancia, ya que les permite formar puentes de hidrógeno (de hecho, al ser muy polar se vuelve perfecta para esto).

Un puente de hidrógeno es el resultado de intensas fuerzas de atracción intermolecular que se da entre dos átomos de carga negativa que interactúan a través de un átomo de hidrógeno (carga positiva). Cuando dos moléculas de agua se juntan, el hidrógeno se encuentra enlazado covalentemente a un átomo de oxígeno y electrostáticamente al otro. Esta interacción se da entre todas las moléculas de agua que estén en contacto y van formando una especie de red que explica diferentes propiedades físicas.

La polaridad también le otorga al agua una gran capacidad como disolvente, ya que puede interactuar con muchas moléculas disociando una gran cantidad de compuestos químicos y gases.

La capacidad de las moléculas de atraerse unas a otras por fuerzas de interacción se conoce como *cohesión*; además, cuando una sustancia

atrae o se pega a otra sustancia o material se le llama *adhesión*. En el caso de las moléculas de agua, ambas fuerzas son grandes, por lo que existe una especie de balance que permite al agua tener *acción capilar*, esto es, que el agua puede desafiar a la gravedad, pero solo ocurre cuando las fuerzas de adhesión son más grandes que las de cohesión. El agua asciende en un tubo solo cuando este es lo suficientemente delgado para que gran parte del agua se pegue a las paredes, por ejemplo, el transporte de nutrientes en los árboles.

La *tensión superficial* es aquella que se produce en la interfaz de un líquido y el aire, las moléculas que están en este punto tienen menor actividad que las que se encuentran en el seno del líquido, debido a que no interactúan con el gas. Esto genera una desigualdad de fuerzas que trata de equilibrarse reduciendo las fuerzas y la superficie del líquido al mínimo (las moléculas del seno atraen con más fuerza a las de la superficie) para que las moléculas desbalanceadas también sean mínimas. La tensión superficial del agua es la mayor conocida para cualquier líquido no-metálico.

La cantidad de fuerzas intermoleculares puede cambiar en una misma sustancia en función del estado de agregación en el que se encuentre, afectando a propiedades como la densidad, la cual para el caso del agua tiene una particularidad. Por definición, esta propiedad se refiere a la cantidad de materia por unidad de volumen.

Las sustancias cambian de estado debido a variaciones en la temperatura. Normalmente, cuando una sustancia cualquiera se encuentra en estado sólido (volumen constante y forma fija), las moléculas se acomodan de forma regular y tienen gran interacción entre ellas, por lo que su densidad es mayor en este punto que en cualquier otro estado. Conforme aumenta la temperatura las moléculas tienen más energía, se mueven de una forma más desordenada y siguen interactuando entre

1

2

3

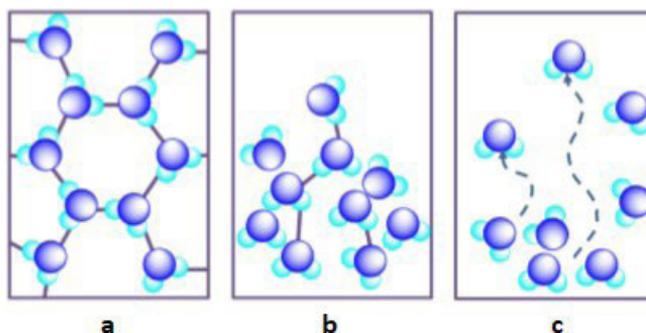
4

5

6

ellas, pero en menor magnitud reduciendo su densidad; es así que la sustancia pasa al estado líquido (volumen constante, forma no fija) y, finalmente, al estado gaseoso (sin forma ni volumen fijo) donde deciden ocupar todo el espacio disponible e interactuar aún menos, teniendo una densidad aún menor.

Para el agua, la lógica antes mencionada no aplica del todo, debido a que el agua interactúa a través de los puentes de hidrógeno. En estado sólido, las moléculas participan en mayor número de puentes (4) y por la orientación de los vértices forman un arreglo hexagonal tridimensional que deja muchos espacios vacíos (figura 3.2a), convirtiéndose en un sólido de baja densidad. Cuando el agua pasa al estado líquido, un porcentaje de los puentes se destruye al igual que el arreglo geométrico, disminuyendo el número de espacios vacíos (figura 3.2b) y teniendo así un agua líquida más densa que el sólido (hielo). Finalmente, para el caso del estado gaseoso, el comportamiento es el que se espera para cualquier otra sustancia, ya que los puentes se destruyen por completo y las moléculas se encuentran muy dispersas (figura 3.2c).



**Figura 3.2** Interacciones entre moléculas de agua en sus tres estados de agregación. a) agua sólida, b) agua líquida y c) agua gaseosa. Fuente: Montes, 2016

Existen otras características que, si bien reflejan la cantidad de fuerzas intermoleculares y puentes de hidrógeno, se dice que son observaciones indirectas de la magnitud de estas fuerzas, debido a que también dependen de otros factores, es el caso del punto de fusión, el punto de ebullición y la capacidad calorífica (cantidad de energía necesaria para aumentar un grado centígrado la temperatura de un compuesto). Todos ellos tienen valores altos para las moléculas de agua, ya que un cambio de estado o una variación en la temperatura requiere grandes cantidades de energía para romper o formar puentes de hidrógeno.

### 3.1. Equilibrio y cinética

Como seres humanos parte de nuestra evolución se debe al razonamiento lógico, el cual ha permitido grandes avances en conocimiento y tecnología a partir de preguntarnos el porqué y el cómo surgen todo tipo de cosas. Vivimos dentro de un sistema dinámico Tierra, el cual a través de su composición interna y la interacción con todos los sistemas y seres vivos que pueden desarrollarse en él trata de mantenerse en equilibrio y lo hace mediante procesos físicos y químicos.

Todos los procesos químicos evolucionan desde los reactivos hasta la formación de productos, llevando una velocidad determinada.

La *cinética química* o *cinética de reacciones* es una rama de la fisicoquímica que estudia la velocidad de las reacciones químicas, sus mecanismos y la optimización de las condiciones del proceso (catalizadores). Adicionalmente, otro uso práctico de la cinética es la determinación y control de la estabilidad de los productos.

La *velocidad de una reacción química* está relacionada directamente a la concentración de sus reactivos y puede ser afectada por diversos factores, como la naturaleza de los reactivos (los compuestos iónicos reaccionan más rápido) y su estado físico, la temperatura (aumenta la energía cinética y así la frecuencia de las colisiones), la presión, la presencia de catalizadores (modifican la energía de activación, pero no afectan el equilibrio final), entre otros.

Para entender como tal la definición de velocidad de reacción y las variaciones que pueden ocasionar sobre ella diferentes factores, primero debe entenderse que existen diferentes tipos de reacciones y que toda reacción química tiene un orden de reacción.

Desde el punto de vista de la cinética química, las reacciones se pueden dividir en dos:

- \* *Homogéneas*: las que ocurren en una sola fase, ya sea líquida o gaseosa.
- \* *Heterogéneas*: las que se producen en más de una fase.

Otra catalogación es de acuerdo con el número de etapas en las que se llevan a cabo, donde reciben el nombre de *elementales*, cuando se desarrollan en un solo paso, y *complejas* cuando se llevan a cabo en varias etapas a nivel molecular. De tal forma que una reacción compleja puede descomponerse en varias elementales.

Existen muchas otras clasificaciones para las reacciones químicas, como pueden ser las que se basan en los cambios energéticos que experimentan (endotérmicas y exotérmicas, el comportamiento químico que tienen (óxido-reducción, ácido-base, precipitación), etcétera. Algunas otras clasificaciones serán detalladas más adelante.

Ahora bien, retomando que es la *velocidad de una reacción química* ( $V_r$ ), esta se define como el cambio de concentración de los reactivos en función de tiempo:

$$V_R = \frac{\Delta [\text{Reactivo}]^\alpha}{t}$$

donde  $\alpha$  es el número de su coeficiente estequiométrico (*en reacciones elementales “únicamente”*).

Por ejemplo, en una reacción  $A \rightarrow B + C$ , la velocidad de reacción depende solo de la concentración de  $A$  y esto puede expresarse como  $V_r \propto [A]$ ; para que esta proporción se vuelva una igualdad se le agrega una constante  $k$ , entonces  $V_r = k[A]$ , donde  $k$  se conoce como constante de velocidad y su valor es específico para cada reacción química.

Generalmente en las reacciones en solución las unidades de la rapidez son moles por litro por segundo, y moles por centímetros cúbico por segundo para los procesos en fase gaseosa.

**Nota:** En las reacciones heterogéneas, la rapidez depende del área de la superficie expuesta a la mezcla de reacción (puede ser la pared interna de donde se está llevando a cabo la reacción o la de un catalizador sólido).

Una vez definido el concepto de velocidad de reacción, es posible observar con mayor claridad el orden de una reacción química. Todos los procesos químicos tienen un orden de reacción, de hecho, en una reacción química cualquiera existe un orden de reacción para cada sustancia o especie. Este se define por el número del exponente al que debe elevarse la concentración de esta en una reacción determinada. Lo que se pretende describir es que la rapidez de una reacción es proporcional a las concentraciones de los reactivos elevadas a una potencia. Esto es:

En una reacción dada:  $aA + bB \leftrightarrow cC + dD$

Con una velocidad de reacción:  $V_R = K[A]^\alpha [B]^\beta$

Los exponentes de las concentraciones de cada especie ( $\alpha$ ,  $\beta$ ) en la ecuación de velocidad son el orden de reacción de cada sustancia, respectivamente. Entonces, la reacción es de orden  $\alpha$  respecto a la especie A, de orden  $\beta$  respecto a B y así sucesivamente. Finalmente, el orden total de la reacción es la suma de los órdenes de cada especie de reactivos que aparece en la ecuación de velocidad y pueden ser números fraccionarios o negativos.

Las reacciones elementales se pueden describir por su molecularidad, que especifica el número de reactivos que están involucrados en el paso de la reacción. Con base en esto, es posible decir que una reacción elemental es aquella en que la molecularidad y el orden global de la reacción son iguales. En cualquier otro caso, como en las reacciones complejas, los órdenes de reacción deben ser calculados.

En general, los órdenes de reacción más comúnmente encontrados son cero, uno, dos y tres; sin embargo, existen reacciones hasta de orden n.

- \* *Reacciones de orden cero:* en ellas la velocidad de reacción es constante e independiente de la concentración de la sustancia reactiva.
- \* *Reacciones de primer orden:* es aquella en la que la velocidad de reacción depende únicamente de un reactivo.
- \* *Reacciones de segundo orden:* para este orden existen dos casos, en el primero, la velocidad de reacción es proporcional al cuadrado de la concentración de una sola especie, mientras que, en el segundo caso, la velocidad de reacción es proporcional al producto de las concentraciones de dos especies diferentes.

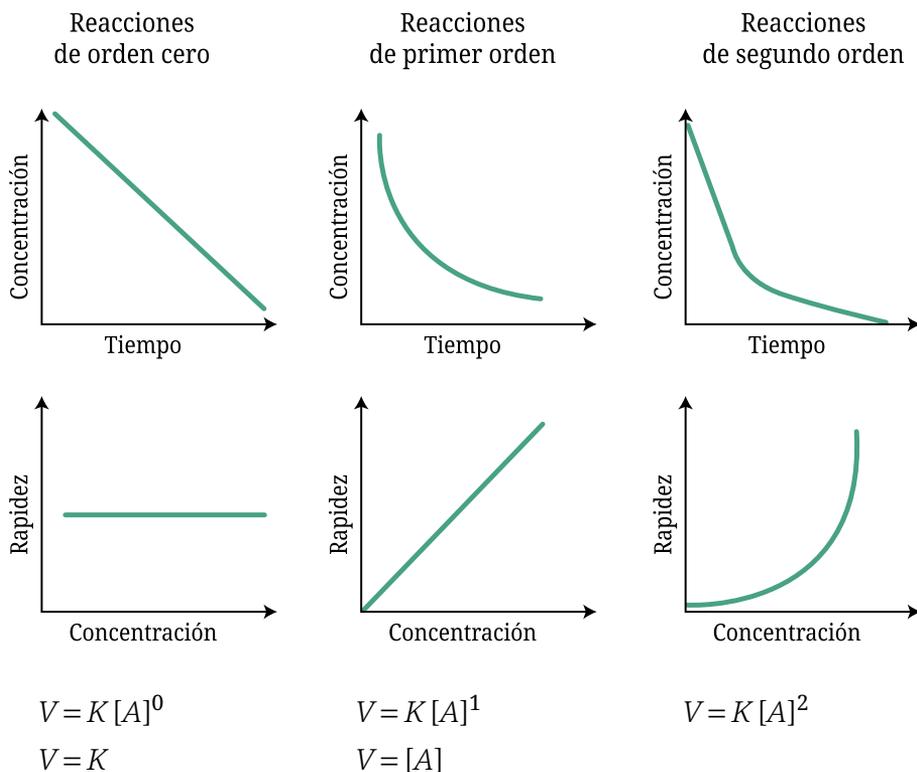


Figura 3.3. Órdenes de reacción más comunes.

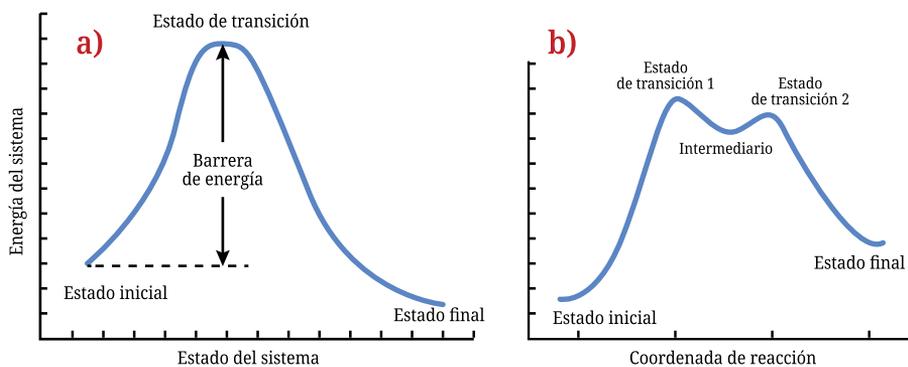
Fuente: Castillo, 2017

## Energía de activación

En las reacciones químicas, los reactivos muchas veces no se transforman inmediatamente en productos, se dice que presentan una cierta estabilidad. Esta resistencia se debe a que existe una cantidad de energía necesaria para pasar de reactivos a productos conocida como barrera de energía, cuando la barrera es superada se llega a un punto de máxima energía en el sistema (punto de transición/complejo activado) a partir del cual puede llevarse a cabo la reacción.

La diferencia de energía entre el estado de transición y el estado inicial es la *energía de activación*, la cual se puede definir como la mínima energía que deben poseer las moléculas de los reactivos para que, al chocar entre ellas, puedan formarse los productos.

Una reacción de un solo paso, *reacción elemental*, tiene un solo estado de transición. Muchas de las reacciones químicas consisten en dos o más reacciones elementales, son reacciones complejas, por lo que tienen más de un estado de transición y entre cada uno de ellos existe un punto mínimo de energía, conocido como intermedio inestable, que puede considerarse como un producto de la reacción elemental anterior y un reactivo de la que está por efectuarse.



**Figura 3.4.** Diagramas de energía de activación para reacciones a) elementales y b) complejas. Fuente: Castillo, 2017

Una *reacción compleja* puede describirse y estudiarse a través de un mecanismo de reacción, que es el conjunto de todas las etapas elementales asociadas a una reacción global. Este tipo de reacciones también puede dividirse en reversibles, paralelas (un mismo reactivo produce varios productos diferentes) y consecutivas (el producto de una reacción es el reactivo de la siguiente).

Los mecanismos de reacción tienen base en la teoría de colisiones, la cual propone que para que una reacción química se lleve a cabo, ya sea entre átomos, iones o moléculas, es preciso que colisionen entre sí. También dice que la velocidad de la reacción depende de la frecuencia de los choques y realmente del número de ellos que lleven tanto la orientación adecuada como la energía necesaria para llegar a un estado de transición.

Retomando el hecho que existen diversos agentes que afectan la velocidad de una reacción química, es posible establecer una relación con la teoría de colisiones especificando que factores como la concentración, el estado de los reactivos y la temperatura influyen directamente en la frecuencia de los choques, así como la naturaleza de los reactivos en la orientación adecuada de estos y la temperatura en la cantidad de energía con la que colisionan.

### Energía de las reacciones químicas

La *termodinámica* es la rama de la física que estudia las transformaciones de la energía (calor y trabajo) y los cambios que estas producen en los estados de los sistemas.

Un sistema es definido como la parte del universo en la que se tiene un interés especial, y al resto del universo que es externo al sistema se le conoce como *alrededores*. Los sistemas pueden ser:

- \* *Abiertos*: intercambian masa y energía con los alrededores.
- \* *Cerrados*: intercambian únicamente energía con los alrededores, masa no.
- \* *Aislados*: no pueden transferir ni masa ni energía con los alrededores.

Las formas en que un sistema puede intercambiar energía con su entorno son el trabajo y el calor. Además, el sistema es capaz de acumular energía en forma de energía interna.

El *calor* ( $Q$ ) es la energía que se transfiere como resultado de una diferencia de temperaturas entre un sistema y su alrededor. Esta transferencia puede darse a presión o volumen constante.

La cantidad de energía que absorbe una sustancia depende de su *capacidad calorífica* ( $C$ ), que es el calor necesario que se debe suministrar a una cantidad específica para aumentar su temperatura un grado.

En términos de mecánica, el *trabajo* se define como la magnitud de una fuerza ejercida sobre un cuerpo por la distancia que este recorre en la misma dirección de la fuerza. En termodinámica, se efectúa trabajo si un proceso puede utilizarse para producir un cambio en la altura de un peso ubicado en algún punto de los alrededores.

Es así que el concepto de trabajo ( $W$ ) se refiere a cualquier mecanismo de transferencia de energía entre un sistema y su entorno, para el caso del calor la transferencia únicamente está en función de una diferencia de temperatura. Entonces, se dice que se efectúa un trabajo cuando un proceso produce un cambio en el sistema o en su frontera con el entorno.

La *energía interna de un sistema* ( $\Delta U$ ) es la energía total (cinética y potencial) de todas las partículas que componen al mismo. Es una propiedad extensiva que depende de su estado físico; y de la presión y temperatura que experimenta.

A partir del *principio de conservación de la energía*, “la materia no se crea ni se destruye, solo se transforma”, es posible comprender que cuando un sistema intercambia energía de una u otra forma, su energía interna

1

2

3

4

5

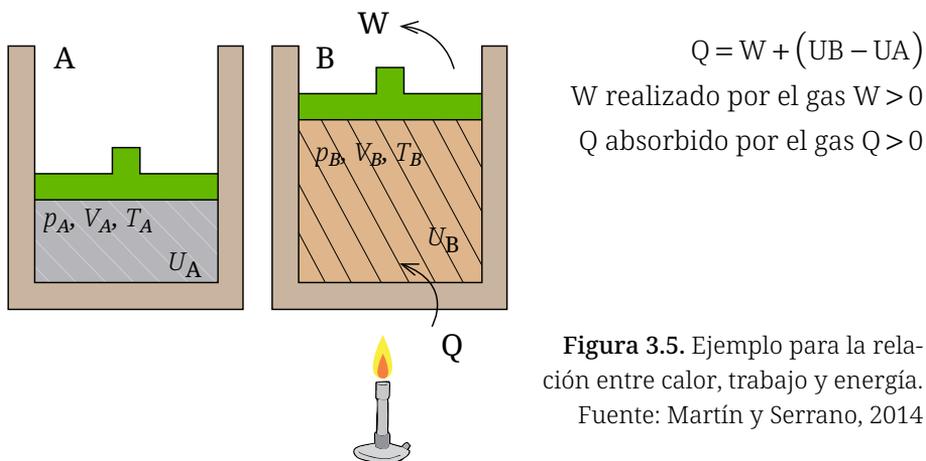
6

se modifica. Por lo que el incremento de energía interna de un sistema es igual a la suma del calor que recibe más el trabajo que realizan sobre él las fuerzas externas.

$$\Delta U = Q + W$$

Con el fin de comprender la relación entre calor, trabajo y energía, Martín y Serrano (2014) elaboraron el siguiente ejemplo:

Un recipiente con un pistón en su interior contiene un gas que se encuentra en un cierto estado A. Si el recipiente es puesto en contacto con una fuente de calor, el sistema comienza a absorber energía, suministrando así calor al gas que eleva su temperatura y también su energía interna ( $U_B > U_A$ ). Finalmente, el gas va a expandirse y a cambiar su volumen, lo cual representa la realización de un trabajo (realizado por el gas, ejercido al sistema) sobre el sistema (figura 3.5).

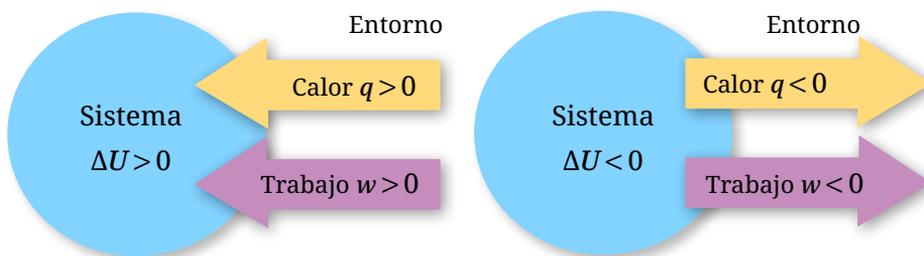


**Figura 3.5.** Ejemplo para la relación entre calor, trabajo y energía.  
Fuente: Martín y Serrano, 2014

Ahora bien, suponiendo que las paredes del recipiente son fijas, el gas no puede realizar trabajo, por lo que el calor suministrado se invierte íntegramente en aumentar la energía interna.

Se puede decir que:

- \* Cuando el sistema absorbe calor del entorno,  $Q > 0$  y  $\Delta U$  aumenta
- \* Cuando el sistema cede calor al entorno,  $Q < 0$  y  $\Delta U$  disminuye
- \* Cuando el entorno efectúa trabajo sobre el sistema,  $W > 0$  y  $\Delta U$  aumenta
- \* Cuando el sistema efectúa trabajo en el entorno,  $W < 0$  y  $\Delta U$  disminuye



**Figura 3.6.** Representación de la relación entre calor, trabajo y energía interna. Fuente: Portal Educativo, 2020

Entonces, en los procesos químicos en general existen dos casos:

1. El sistema absorbe energía en forma de calor del entorno y aumenta su energía interna, lo que significa que el entorno realiza un trabajo sobre el sistema.
2. El sistema libera energía al entorno y le cede calor, por lo tanto, el sistema ejerce trabajo sobre el entorno.

Estos procesos reciben el nombre de *endotérmicos* y *exotérmicos*, respectivamente.

En las reacciones químicas, el estudio de todos estos cambios energéticos es materia de la *termoquímica*. Aquí, la *energía interna del sistema* se puede

definir únicamente como la diferencia de sí misma entre los estados final e inicial de un proceso ( $\Delta U = U_{\text{final}} - U_{\text{inicial}}$ ). De tal forma que, en las *reacciones endotérmicas*, aquellas en que se absorbe energía del entorno, los reactivos tienen menos energía que los productos, mientras que en las *reacciones exotérmicas*, aquellas en las que el sistema libera energía al entorno, la energía de los reactivos es mayor que la de los productos.

Como se mencionó anteriormente, las transferencias de energía en forma de calor generalmente se dan a presión o a temperatura constante. Cuando se habla del primer principio de la termodinámica aplicado en las reacciones químicas no existen limitantes, no obstante, estos dos casos son factores importantes que influyen en la variación de la energía interna de un sistema.

Con base en el ejemplo previo (pistón), cuando la transferencia de calor es a volumen constante, el trabajo es nulo, por lo que el calor absorbido o desprendido en una reacción química a volumen constante ( $Q_v$ ) es igual a la variación de energía interna del sistema ( $\Delta U = QV$ ).

Para el caso de la transferencia de calor a presión constante, la mayoría de las reacciones se llevan a cabo de esta forma, al menos en los laboratorios, ya que a menudo se trabaja en recipientes abiertos a presión atmosférica. En estos procesos, lo que sufre un pequeño cambio es el volumen, produciendo así un trabajo de expansión. Esto es la introducción a un nuevo concepto llamado *entalpía* ( $H$ ), que se define como la variación de calor a presión constante. Su fórmula es muy fácil de obtener a partir del primer principio de la termodinámica:

$$\text{Si } W = P * \Delta V$$

$$\Delta U = Q_p - P\Delta V$$

$$Q_p = \Delta U + P(V_f - V_i)$$

$$H = U + P\Delta V$$

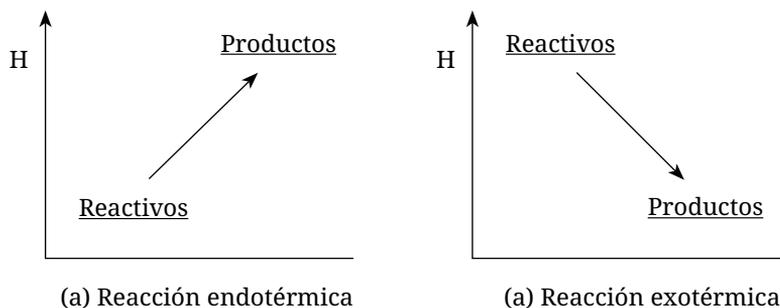
Donde  $P$  es presión,  $V$ , volumen, y  $Q_p$ , la variación de calor a presión constante que después se refiere a  $H$ , entalpía.

Es otra forma de medir la energía de un sistema a partir de valores de energía calorífica en los estados final e inicial de un proceso (solo se puede medir su variación); como en cualquier reacción química, el estado final se refiere a los productos y el estado inicial a los reactivos.

Si  $H_p > H_r$ ,  $\Delta H > 0 \Rightarrow Q_p > 0$ , (el sistema absorbe calor) la reacción es endotérmica.

Si  $H_p < H_r$ ,  $\Delta H < 0 \Rightarrow Q_p < 0$ , (el sistema desprende calor) la reacción es exotérmica.

La variación de entalpía de una reacción se puede expresar gráficamente con ayuda de los diagramas entálpicos (figura 3.7), en los que se representa sobre una escala de energías la entalpía de reactivos y productos.



**Figura 3.7** Diagramas entálpicos de reacciones a) endotérmicas y b) exotérmicas. Fuente: Alonso, 2014

El cambio de entalpía que acompaña a una reacción se conoce como *entalpía de reacción* ( $\Delta_r H$ ). Existen tablas de valores de entalpía de reacción que se refieren a reacciones en las que tanto reactivos como productos se encuentran en condiciones estándar (presión de 1 atm, temperatura de 298 K o 25 °C y concentración de sustancias disueltas a 1 M). La *entalpía estándar* de formación ( $\Delta H_f^\circ$ ) es el incremento de la entalpía que se produce en la reacción para formar un mol de un determinado compuesto a partir de los elementos que componen la reacción en sus estados de agregación más estables y en condiciones estándar.

La entalpía es una función de estado (su valor depende del estado en el que se encuentre el sistema) extensiva (depende de la cantidad de materia), por lo que para las reacciones complejas es posible expresar el calor de reacción de la reacción global como la suma de los calores de reacción parciales de cada reacción elemental (ley de Hess).

Los *cambios de entalpía*, en ocasiones, reciben nombres especiales dependiendo del tipo de reacción que acompañan, algunos de ellos son *entalpía de combustión*, *entalpía de disolución*, *entalpía de sublimación*, *entalpía de vaporización de un líquido*, *entalpía de solvatación*, *entalpía de formación de una sustancia*, entre otros.

Ahora, retomando la clasificación de reacciones desde el punto de vista energético, se sabe que existen reacciones que desprenden calor y liberan energía al formar productos (exotérmicas), y reacciones que necesitan un aporte continuo de energía del exterior para que puedan llevarse a cabo (endotérmicas). El suministro necesario o no de energía proveniente del entorno para la realización de una reacción permite diferenciar a los procesos en dos tipos: aquellos que requieren este aporte energético para llevarse a cabo, reciben el nombre de *procesos no espontáneos*, y los que ocurren sin él, son llamados *procesos espontáneos*.

Con base en lo antes descrito, se podría pensar que solo las reacciones exotérmicas ocurren de una manera espontánea; sin embargo, en la naturaleza se conocen ejemplos de reacciones endotérmicas también espontáneas, como la fusión del hielo, la evaporación del agua, la disolución de sal en agua, etcétera, y que evidencian que el aporte externo de energía no es lo único que define la espontaneidad de las reacciones.

Para determinar la espontaneidad de una reacción química, es necesario introducir una variable termodinámica que, al igual que la entalpía, depende de la cantidad de materia y del estado del sistema: *entropía* ( $S$ ). Esta se define como la medida del desorden de un sistema a nivel microscópico, es decir, de la distribución de energía de un sistema durante una reacción química, por lo que solo su variación puede medirse. Su importancia radica en el entendimiento del aumento de desorden al que tienden los sistemas naturalmente (*máximo de entropía*), lo que explica por qué algunas reacciones endotérmicas pueden darse de forma espontánea.

$$\Delta S = S_{\text{final}} - S_{\text{inicial}}$$

$\Delta S > 0$ , aumento del desorden

$\Delta S < 0$ , disminución del desorden

El aumento de entropía en un sistema aislado y a volumen constante es lo que explica la espontaneidad de una reacción dentro de este tipo de sistema. Si ahora se observan ejemplos de cambios espontáneos exotérmicos, como la expansión de un gas en un espacio vacío, un cuerpo caliente que se enfría hasta alcanzar la temperatura de sus alrededores, etcétera, es posible detectar que estos procesos no pueden revertirse por sí solos, por lo que se deduce que un proceso espontáneo no es un proceso reversible y que para serlo necesita un aporte de energía externo.

El *segundo principio de la termodinámica* establece que los procesos espontáneos son irreversibles y que lo que ocurre dentro del sistema es una degradación de la calidad de energía (menor energía para realizar un trabajo) y un aumento de la entropía del universo. Por lo tanto, los procesos irreversibles generan entropía y los reversibles encuentran un punto de equilibrio a lo largo de su desarrollo, por lo que su entropía tiende a ser constante.

En resumen, se puede entender la variación de la entropía como la capacidad de las moléculas de un sistema para moverse: a mayor libertad, mayor entropía.

De manera semejante a las entalpías, la entropía también puede calcularse en condiciones estándar 25 °C y 1 atm de presión; sin embargo, los valores de las entropías para los elementos, a diferencia de las entalpías estándar, siempre tienen un valor positivo. Esto se debe a que *el tercer principio de la termodinámica* establece que no es posible alcanzar la temperatura del cero absoluto por ningún procedimiento que tenga un número finito de pasos, sino únicamente puede aproximarse indefinidamente, y es solo en esta temperatura donde un sistema tendría un estado de orden absoluto, es decir, una entropía igual a cero.

El concepto del *nivel de entropía en un sistema* puede relacionarse perfectamente con la variación de entalpía que se da a lo largo del proceso químico en el sistema (cuando este ocurre a presión y temperatura constantes), mediante la *energía libre de Gibbs (G)* o *entalpía libre*.

La *energía libre de Gibbs* es una función de estado extensiva que parte del *segundo principio de la termodinámica*, el cual establece que una reacción espontánea hace que la entropía del universo aumente y, de igual forma, define la entropía del universo como la suma de las entropías del sistema y de sus alrededores. Debido a la complejidad que representa el cálculo

de la entropía de los alrededores, se desarrolla una función termodinámica, energía libre de Gibbs, la cual permite calcular si una reacción es o no espontánea tomando en cuenta solo las variables del sistema. Se define como:

$$G = H - TS$$

Sus unidades son:

$$\frac{kJ}{mol - reacc}$$

Y lo que representa es:

- \*  $\Delta G < 0$ , proceso espontáneo
- \*  $\Delta G > 0$ , proceso no espontáneo

Lo que se puede medir es el cambio de la energía libre por las variaciones de entalpía y entropía dentro de la reacción química. Estos parámetros pueden contribuir o no a la espontaneidad de esta:

- \*  $\Delta H < 0$ ,  $\Delta S > 0$ , la espontaneidad se ve favorecida
- \*  $\Delta H > 0$ ,  $\Delta S < 0$ , la espontaneidad se dificulta

Recordando que no toda la energía interna de un sistema es capaz de convertirse en trabajo, se considera a la energía libre de Gibbs como la parte de la energía del sistema que puede convertirse libremente en trabajo, a temperatura y presión constante; de hecho, se entiende como la máxima cantidad de trabajo (distinto al de expansión) que puede obtenerse de una reacción química.

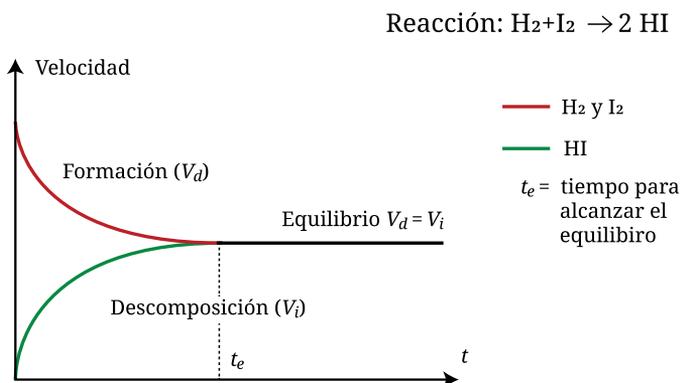
Al igual que en la entalpía y en la entropía, cuando el proceso ocurre en condiciones estándar, se puede calcular la energía libre de Gibbs, reci-

biendo ahora el nombre de *energía libre estándar de formación* y expresada como  $\Delta_f G^\circ$ ; además, del mismo modo que en las entalpías, se puede hablar de *energía libre de formación de una sustancia*, *energía libre de sublimación*, *energía libre de vaporización de un líquido*, entre otras.

Cabe destacar que existe un tercer caso en los valores que la energía libre de Gibbs puede tomar y que vuelve útil a esta función para conocer otra condición de las reacciones químicas: el *equilibrio*. Cuando  $\Delta G = 0$ , se dice que el sistema está en equilibrio.

Existen dos tipos de procesos químicos principales: *irreversibles* y *reversibles*. En el primero, la reacción se lleva a cabo hasta que los reactivos se agoten o consuman por completo; en el segundo, lo que realmente sucede es que se llega a un punto donde los productos formados comienzan a descomponerse para formar nuevamente sus reactivos.

Cuando las velocidades tanto de formación como de descomposición se igualan, es que se llega al concepto de *equilibrio químico*, que se refiere al estado donde las concentraciones de todas las especies involucradas en la reacción permanecen constantes a medida que transcurre el tiempo y la reacción sigue llevándose a cabo, aunque pareciera haber finalizado (figura 3.8).



**Figura 3.8.**  
Velocidad de formación y descomposición del HI.  
Fuente: Pozas et al., 2016

La expresión matemática que representa al equilibrio químico es la ley de acción de masas, la cual establece que en una reacción química reversible y a una temperatura fija dada:



Donde  $A$  y  $B$  son reactivos que se están uniendo para formar los productos  $C$  y  $D$ , y las letras minúsculas  $a$ ,  $b$ ,  $c$  y  $d$  son los coeficientes estequiométricos de cada sustancia, respectivamente, es decir, el número de moles que interviene en la reacción.

La relación (cociente) entre el producto de las concentraciones molares de los productos (elevadas cada una a una potencia igual a su coeficiente estequiométrico) y el producto de las concentraciones molares de los reactivos (elevadas cada una a una potencia igual a su coeficiente estequiométrico) es un número constante denominado constante de equilibrio ( $K_{eq}$  o  $K_c$ , esta última debido a que está en función de la concentración):

$$\frac{[C]^c[D]^d}{[A]^a[B]^b} = K_{eq} \text{ o } K_c$$

En un sistema en equilibrio puede haber o más reactivos o más productos; para cada caso se dice que el sistema está desplazado a la izquierda o a la derecha, respectivamente. Esto se debe a la adaptación del sistema a las condiciones energéticas más favorables definidas por la presión, temperatura y concentración relativa de reactivos y productos en el medio que se desarrolla la reacción. La respuesta del sistema a la modificación de cualquiera de estos factores se conoce como *principio de Le Châtelier* y tiene como objetivo restablecer el equilibrio.

El valor de la constante de equilibrio da una idea sobre cómo se ha producido la reacción:

- \* Si  $K_{eq} < 1$ , en el equilibrio hay más reactivos que productos.
- \* Si  $K_{eq} = 1$ , la reacción tiene 50% de reactivos y 50% de productos.
- \* Si  $K_{eq} > 1$ , en el equilibrio hay más productos que reactivos.

Cuando las reacciones son entre gases, la constante es frecuentemente expresada en función de las presiones parciales de cada gas en el equilibrio ( $K_p$ ). Para establecer una relación entre  $K_c$  y  $K_p$ , y poder pasar de otra, primero se tiene que considerar un comportamiento ideal de los gases que intervienen en la reacción. De tal forma que en una reacción dada (Castaños, 2015):



$$P_A = \frac{n_A}{V} \cdot RT = [A] \cdot RT \quad P_C = \frac{n_C}{V} \cdot RT = [C] \cdot RT$$

$$P_B = \frac{n_B}{V} \cdot RT = [B] \cdot RT \quad P_D = \frac{n_D}{V} \cdot RT = [D] \cdot RT$$

$$K_p = \frac{P_C^c \cdot P_D^d}{P_A^a \cdot P_B^b} = \frac{([C] \cdot RT)^c ([D] \cdot RT)^d}{([A] \cdot RT)^a ([B] \cdot RT)^b} = \frac{[C]^c [D]^d}{[A]^a [B]^b} \cdot RT^{(c+d)-(a+b)}$$

$$K_p = K_c \cdot RT^{\Delta n}$$

Donde  $\Delta n$  es la variación del número de moles gaseosos de la reacción,  $T$  es la temperatura absoluta de la reacción y  $R$  es la constante de los gases (8314 kJ/mol K).

Para el equilibrio de reacciones en las que interactúan diferentes especies en distintos estados de agregación, la  $K_p$  se calcula tomando en cuenta únicamente las especies en estado gaseoso.

Es importante señalar, que existe otra relación que puede llegar a confundirse con la constante de equilibrio, debido a que se expresa de manera

muy similar, la cual se conoce como *cociente de reacción* ( $Q$ ) y proporciona información sobre el desarrollo de la reacción a cada momento. En este cociente, las concentraciones que se emplean de reactivos y productos son instantáneas.

$$Q = \frac{[C]^c [D]^d}{[A]^a [B]^b}$$

- \* Si  $Q = K_c$  el sistema se encuentra en equilibrio.
- \* Si  $Q < K_c$  se favorecerá la reacción hacia la derecha formando productos.
- \* Si  $Q \geq K_c$  se favorecerá la reacción de descomposición de los productos.

### 3.2. Reacciones ácido-base

Como se mencionó anteriormente, el agua es una sustancia con gran potencial para ser utilizada como disolvente dada su capacidad para interaccionar con muchas moléculas. Respecto a este tema, para finales de 1800 el científico sueco Svante Arrhenius propuso que al disolver los compuestos en agua, estos podían separarse en sus iones individuales (disociación) y, con base en este pensamiento, fue capaz de definir formalmente las características de las sustancias que hoy en día se conocen como *ácidos* y *bases*.

Según la teoría de Arrhenius, un ácido es una sustancia que en disolución acuosa libera (disocia) iones hidronio  $H^+$  (elevando su concentración dentro la misma), mientras que las *bases* son compuestos que al disolverse en agua dan lugar a iones hidróxido  $OH^-$ . Ambos son buenos conductores de corriente eléctrica.

Posteriormente, la *teoría de Brønsted-Lowry* diferencia ácidos y bases en función de su capacidad para ceder o no protones a otras sustancias, identificando así que los ácidos tienden a ceder protones y las bases tienden más a aceptarlos.

Por último, en la *teoría de Lewis*, que no se contrapone a la de Brønsted-Lowry, se aclara que también existen otras sustancias que no contienen hidrógeno y que al disociarse no pueden ceder protones, pero, aun así, presentan ciertas características de los ácidos, tal es el caso del  $\text{CO}_2$  y el  $\text{SO}_3$ . Esta teoría define “ácido” como una sustancia que puede aceptar o compartir un par de electrones, y “base” como una sustancia que puede ceder o compartir electrones. Al combinarse los dos tipos de sustancias, forman *enlaces covalentes coordinados*.

Existen otras características de los ácidos y de las bases que se conocían con anterioridad, como las siguientes:

- \* Los ácidos tienen un sabor agrio o ácido, corroen los metales y cambian el litmus tornasol (extraído de los líquenes) a color rojo.
- \* Las bases tienen un sabor cáustico, son resbaladizas, jabonosas al tacto y cambian el litmus a color azul.

## Neutralización

Se refiere a que cuando se agrega una base a una disolución acuosa ácida, esta última disminuye su acidez, debido a que las bases pueden debilitar a los ácidos, y viceversa.

Cuando las sustancias de carácter ácido reaccionan con las de carácter básico (reacciones ácido-base), siempre ocurre una reacción neutrali-

zante que va a producir agua y sal, tal como se muestra en la tabla 3.1. En ambos ejemplos, es bastante claro que la molécula de agua se forma por la combinación del ion hidrógeno con ion hidróxido.

**Tabla 3.1** Reacción neutralizante de un ácido con una base

Ácido		Base		Agua		Sal
HCl	+	NaOH	→	H <sub>2</sub> O	+	NaCl
HBr	+	KOH	→	H <sub>2</sub> O	+	KBr

Fuente: Carpi, 2003

Ahora bien, en un caso donde ya sea que el ácido o la base no contengan los iones H<sup>+</sup> e OH<sup>-</sup>, respectivamente, la formación de H<sub>2</sub>O puede que no sea tan obvia. Por ejemplo: la levadura común (NaHCO<sub>3</sub>) se trata de una sustancia que actúa como base, ya que a pesar de no contener iones OH es capaz de aceptar un ion de hidrógeno de un ácido, tal como se muestra en la reacción de la tabla 3.2. En esta reacción, el ácido carbónico (H<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>) formado pasa por descomposición rápida a agua y dióxido de carbono gaseoso.

**Tabla 3.2** Reacción neutralizante de una base que no contiene iones OH

Ácido		Base		Agua		Sal
HCl	+	NaHCO <sub>3</sub>	→	H <sub>2</sub> CO <sub>3</sub>	+	NaCl

Fuente: Carpi, 2003

## Equilibrio iónico del agua

El agua pura ( $\text{H}_2\text{O}$ ) es un electrolito débil (baja a nula conductividad eléctrica) que se encuentra disociado en baja proporción (una pequeña fracción de sus moléculas están ionizadas) en iones hidronio ( $\text{H}^+$  o  $\text{H}_3\text{O}^+$ ) e hidróxido ( $\text{OH}^-$ ), por lo que en el equilibrio se puede expresar:



Al producto de la concentración de iones hidróxido con la concentración de iones hidronio se le conoce como *producto iónico del agua* ( $K_{\text{W}}$ ) y a 25 °C su valor es igual a  $1.10^{-14}$ . Las concentraciones de los iones  $\text{H}^+$  y  $\text{OH}^-$  se expresan en moles / litro (molaridad).

$$K_{\text{W}} = [\text{H}^+][\text{OH}^-] = 10^{-14}$$

$$\frac{10^{-7} \text{ moles}}{\text{litro}} = [\text{H}^+] = [\text{OH}^-]$$

Ya que  $K_{\text{W}}$  es una modificación de una constante de equilibrio, su valor puede variar con la temperatura, pero aun si las concentraciones de iones hidronio o de iones hidróxido se modifican, su valor permanece constante, por lo que se deduce que la relación de las concentraciones de estos dos iones es inversamente proporcional. A partir de esto, son posibles las siguientes relaciones:

- \* Disolución ácida:  $[\text{H}^+] > [\text{OH}^-]$
- \* Disolución neutra:  $[\text{H}^+] = [\text{OH}^-]$
- \* Disolución básica:  $[\text{H}^+] < [\text{OH}^-]$

## pH

Es una medida de la acidez o alcalinidad de una solución que indica cual es la concentración de iones hidronio ( $H^+$ ) presentes en una determinada sustancia. Sus siglas significan “potencial hidrógeno” y para emplearlo está definido como el logaritmo negativo de base 10 de la concentración (actividad) de los iones hidrógeno, es decir que los valores que puede tomar el pH han sido determinados debido al valor que tiene el producto iónico del agua a 25 °C.

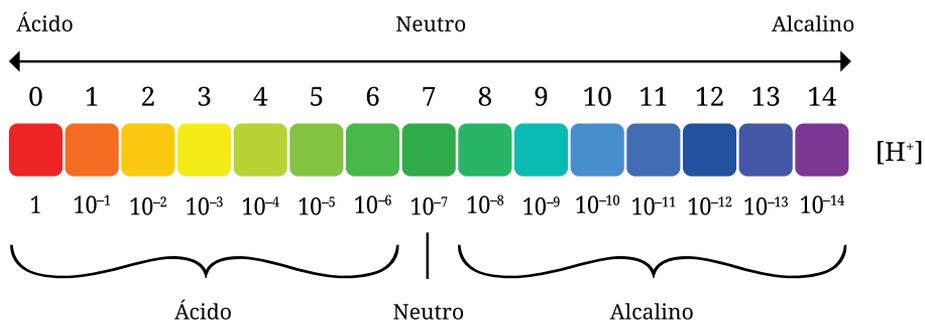


Figura 3.9 Escala de pH. Fuente: TP-Laboratorio Químico, 2020

### 3.2.1. Sistemas de equilibrio de los carbonatados

La disolución de los minerales constitutivos de las rocas carbonatadas comprende una serie de procesos físicos y químicos donde intervienen estados gaseosos, líquidos y sólidos a través de interfaces aire-agua-roca y un sistema de equilibrios químicos.

La química de los procesos ácido-base de muchos sistemas acuosos naturales, incluyendo tanto ríos como lagos, está dominada por la interacción del ion carbonato,  $CO_3^{-2}$ , que es una base moderadamente fuerte, con el ácido débil  $H_2CO_3$ , ácido carbónico.

Dentro de los sistemas ácido-base encontramos los carbonatos, los cuales conforman un sistema importante por su relevancia en el control del pH de una solución líquida.

Dicho sistema está compuesto por las siguientes especies químicas:

- \* Dióxido de carbono disuelto en agua  $\text{CO}_2$
- \* Ácido carbónico  $\text{H}_2\text{C}_3$
- \* Ion bicarbonato  $\text{HCO}_3^-$
- \* Ion carbonato  $\text{CO}_3^{-2}$

Es posible encontrar situaciones en las cuales los carbonatos contenidos en una solución líquida se encuentran en equilibrio químico. Esto puede ocurrir tanto en condiciones de sistema abierto como de sistema cerrado, respecto al  $\text{CO}_2$ .

Las condiciones de sistema abierto se refieren a cuando el agua natural que está disolviendo los minerales carbonatados tiene un suministro abundante de  $\text{CO}_2$  (pueden llegar a existir diferentes fuentes), tal que puede llegar a considerarse constante en una reacción por lo que llega a la saturación rápidamente. En cambio, cuando la disolución de los carbonatos se produce por el suministro de  $\text{CO}_2$  inicial únicamente, es decir que luego no se repone en el transcurso de la reacción, las condiciones son de sistema cerrado.

Las aguas naturales contienen cantidades significativas de  $\text{CO}_2$  disuelto, debido tanto a la disolución del dióxido de carbono atmosférico como a la descomposición anaeróbica de la materia orgánica. De tal forma que en un sistema abierto, el contenido de carbonatos en una muestra de agua está directamente relacionado con el contenido de  $\text{CO}_2$  en la atmósfera, es así que cambios en el  $\text{CO}_2$  atmosférico modifican las condiciones de equilibrio de los carbonatos, entendiendo el proceso de incorporación de  $\text{CO}_2$  al sistema y su equilibrio con el carbonato y el agua.

El  $\text{CO}_2$  atmosférico que penetra en el agua, en su mayoría se queda disuelto y rodeado de moléculas de agua; sin embargo, una menor proporción genera en primera instancia ácido carbónico  $\text{H}_2\text{CO}_3$  (1). El agua pura con el  $\text{CO}_2$  atmosférico es ligeramente ácida.



**Nota:** Cuando se habla en general de ácido carbónico también se toma en cuenta la parte del gas disuelta  $[\text{CO}_2(aq)]$ .

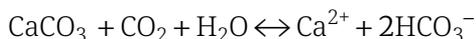
El ácido carbónico rápidamente entra a formar parte del complejo equilibrio ácido-base en el que participan las diferentes formas carbonatadas presentes en un agua. Debido a que el ácido carbónico que se forma es muy inestable, este comienza a disociarse principalmente en ion bicarbonato e hidrógeno (2), dando una ligera acidez al agua.

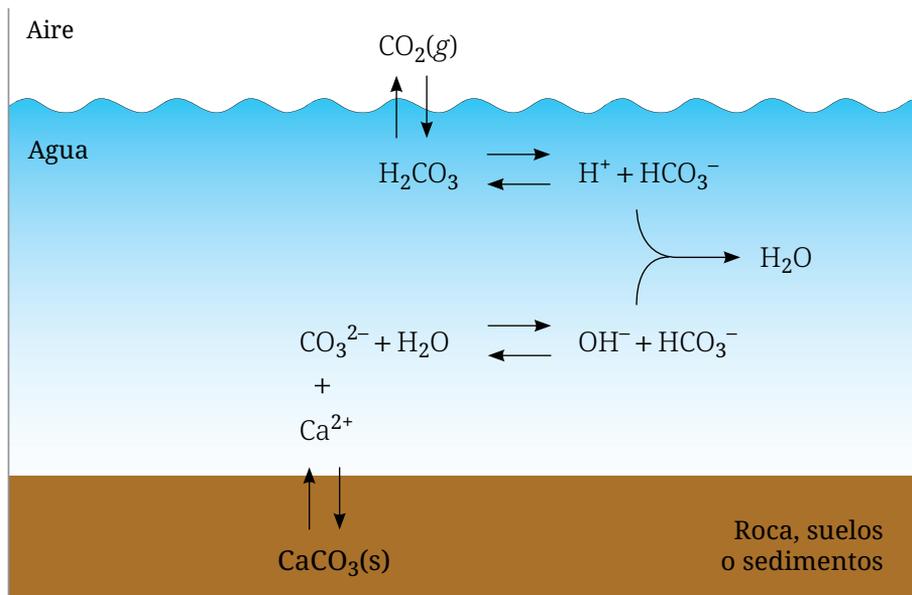


No obstante, la mayor fuente de bicarbonato en un agua natural no es este proceso, sino el proveniente del lavado de rocas carbonatadas, como calizas (3) y dolomías. Al incorporarse el ion carbonato  $(\text{CO}_3)^{2-}$  al agua, aumenta de forma natural el pH de esta, ya que hidroliza parcialmente al agua dando  $\text{OH}^-$  (4), lo que lo convierte en una base moderadamente fuerte.



Al sumar las ecuaciones antes vistas (1, 2, 3 y 4), se obtiene la reacción neta:





**Figura 3.10** Equilibrios trifásico en el sistema  $\text{CO}_2/\text{CO}_3$ .  
Fuente: Mota, 2011.

La saturación de  $\text{CO}_2$  y  $\text{CaCO}_3$  es la que genera aguas bicarbonatadas, las cuales tendrán valores de pH que van de 7 a 9. El carácter ligeramente básico de estas aguas se debe a una mayor existencia del ion carbonato ( $\text{CO}_3^{2-}$ ) en disolución que de ácido carbónico, lo cual influye en que el grado de hidrólisis que da  $\text{OH}^-$  sea mayor.

Es importante resaltar que dentro del sistema de los carbonatos existen más procesos químicos que interrelacionan a las especies involucradas y todos ellos conducen a la formación de bicarbonato ( $\text{HCO}_3^-$ ). Por ejemplo, la reacción directa entre el ácido carbónico y el ion carbonato (5), en este caso el ion bicarbonato que se obtiene como producto puede comportarse tanto como ácido o como base en lo que se refiere a captación de protones, dando protones al medio y pasando a carbonato (6) o tomando protones del medio y pasando a ácido carbónico (7). Una sus-

tancia que puede actuar tanto como ácido como base recibe el nombre de especie anfótera.

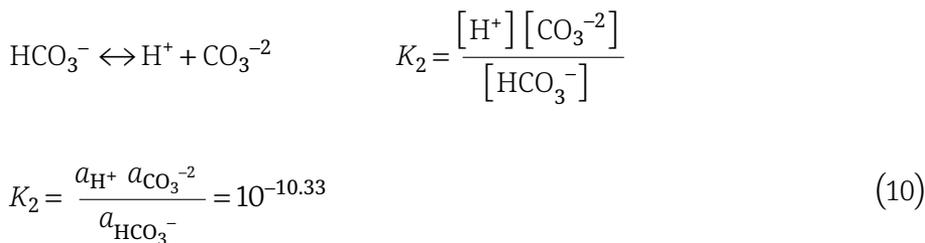
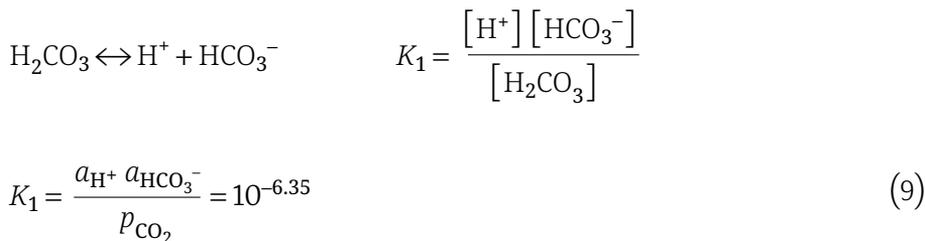
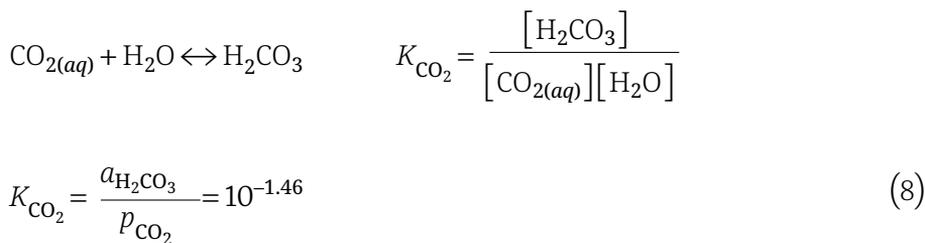


### Constantes de equilibrio, acidez y basicidad

Cuando un equilibrio implica una disociación dando así protones ( $\text{H}^+$ ) o grupos hidróxido ( $\text{OH}^-$ ), la constante de equilibrio asociada a este proceso recibe el nombre de constante de disociación, la cual se caracteriza por los diferentes subíndices que pueden acompañarla de acuerdo con el ion liberado. Si se refiere a un proceso en el que se dan protones (o se captan hidróxidos), se denomina constante de acidez ( $K_a$ ) y si se dan grupos hidróxido (o se captan protones), constante de basicidad ( $K_b$ ).

Se generan así las siguientes reacciones químicas a partir del momento en que el  $\text{CO}_2$  entra en contacto con la fase acuosa del  $\text{H}_2\text{O}$ . Cabe destacar, que en el equilibrio la actividad de disolución del  $\text{CO}_2$  es proporcional a la presión parcial de  $\text{CO}_2$  en la fase gaseosa en contacto con la fase acuosa que contiene  $\text{CO}_2$ .

**Nota:** Los valores de las tres constantes de equilibrio son a 25 °C (Plummer y Busenberg, 1982).



Una condición necesaria de cualquier solución es la denominada electroneutralidad, la cual enuncia que en una solución de electrolitos el número de equivalentes de cationes es igual al número de equivalentes de aniones. En este caso, al ocurrir la descomposición en iones independientes, la solución debe permanecer neutra o sin carga neta. Para el caso de una solución de agua pura, en equilibrio con los carbonatos, esta condición se expresa:

$$[\text{H}^+] = [\text{OH}^-] + [\text{HCO}_3^-] + 2[\text{CO}_3^{-}]$$

Para determinar la condición de equilibrio del agua, se utiliza la ecuación anterior para generar una expresión de cálculo para el pH de equilibrio. Esto significa expresar todos los términos en función de la concentración de hidrógeno y del contenido de  $\text{CO}_2$ . Por ejemplo:

$$K_w = [\text{H}^+][\text{OH}^-] \quad \rightarrow \quad [\text{OH}^-] = \frac{K_w}{[\text{H}^+]}$$

$$K_2 = \frac{[\text{H}^+][\text{CO}_3^{-2}]}{[\text{HCO}_3^-]} \quad \rightarrow \quad [\text{CO}_3^{-2}] = \frac{K_2}{[\text{H}^+]} [\text{HCO}_3^-]$$

$$K_a = \frac{[\text{H}_2\text{CO}_3]}{[\text{CO}_{2(aq)}][\text{H}_2\text{O}]} \quad \rightarrow \quad [\text{HCO}_3^-] = \frac{K_1}{[\text{H}^+]} [\text{CO}_{2(aq)}]$$

$$K_2 = \frac{[\text{H}^+][\text{HCO}_3^-]}{[\text{H}_2\text{CO}_3]}$$

$$K_1 = K_a * K_b$$

$$\text{con lo que: } [\text{CO}_3^{-2}] = \frac{K_2}{[\text{H}^+]} [\text{HCO}_3^-] = \frac{K_1 * K_2}{[\text{H}^+]^2} [\text{CO}_{2(aq)}]$$

Al sustituir las expresiones anteriores en la condición de electroneutralidad, se tiene:

$$[\text{H}^+] = \frac{K_w}{[\text{H}^+]} + \frac{K_1}{[\text{H}^+]} [\text{CO}_{2(aq)}] + 2 \frac{K_1 * K_2}{[\text{H}^+]^2} [\text{CO}_{2(aq)}]$$

En una situación específica, la cantidad de  $\text{CO}_2$  en el agua queda definida por la cantidad de este compuesto en la atmósfera, la cual es conocida.

De esta manera, la ecuación:

$$[\text{H}^+] = \frac{K_W}{[\text{H}^+]} + \frac{K_1}{[\text{H}^+]} [\text{CO}_2(\text{aq})] + 2 \frac{K_1 * K_2}{[\text{H}^+]^2} [\text{CO}_2(\text{aq})]$$

Puede ser resuelta para  $[\text{H}^+]$ :

$$X = \frac{A}{X} + \frac{B}{X^2}$$

$$A = K_W + K_1 * [\text{CO}_2(\text{aq})] \quad B = 2 * K_1 * K_2 * [\text{CO}_2(\text{aq})]$$

$$[\text{CO}_2(\text{aq})] = 55.56 * K_H * P_{\text{CO}_2}$$

$$X^3 - A * X + B = 0 \rightarrow X$$

### 3.3. Minerales, meteorización y procesos superficiales

Los minerales son una parte esencial de distintos procesos que ocurren en la vida diaria, así como para el uso humano, ya sea en su forma de cosméticos como el talco, o incluso para los equipos que usan los dentistas para eliminar caries de los pacientes. Si bien se usan en la parte económica y decorativa de los humanos, también tienen gran importancia en procesos como la meteorización, erosión, erupción de volcanes, etc.

Según la geología, los minerales se pueden definir a partir de cinco características esenciales que se pueden enumerar de la siguiente forma:

1. Fueron creados a partir de procesos naturales de la Tierra: erupciones volcánicas, erosión, etc.

2. Son sólidos: ningún líquido o gas puede considerarse mineral en ese estado.
3. Tienen una estructura cristalina ordenada: hay algunos sólidos naturales que no tienen esa estructura repetitiva necesaria para ser considerado mineral. Por ejemplo, el vidrio volcánico y la obsidiana no serían considerados minerales.
4. Existe una composición química definida: aunque tengan una composición moderadamente variable, tienen que estar dentro de ciertos límites definidos para ser considerados minerales.
5. Son generalmente inorgánicos: la sal es una sustancia inorgánica que puede ser considerada mineral, pero el azúcar, al ser orgánico, no es considerado un mineral.

Una parte importante de los distintos procesos superficiales que actúan sobre la Tierra se conoce como la *meteorización*. Este proceso se define como la desintegración física, alteración química o descomposición, de las rocas de la superficie. Es claro que la meteorización viene acompañada de otros procesos externos de gran relevancia, entre ellos está la erosión y los procesos gravitacionales. Y en conjunto convierten al planeta tierra en un lugar de constantes cambios, donde hay movimientos de tierra de un lugar a otro, creación de lagos, mares y ríos, así como su eventual desaparición. Estos cambios se reflejan a lo largo de millones de años en todo el planeta.

Este proceso sucede todo el tiempo, aunque no pueda ser observado por el ojo humano. Sus efectos se pueden observar cuando, por ejemplo, está recién hecho el pavimento de la banqueta, pero en unos años se observa que hay grietas y desmoronamiento de algunas partes de la banqueta, esto no es más que la meteorización y otros procesos superficiales en acción.

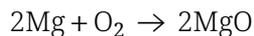
En el proceso en el cual sucede el proceso existe la *meteorización física* y la *meteorización química* (figura 3.11). La meteorización física sucede cuando actúan fuerzas físicas para romper la roca o fragmentarla mecánicamente, mientras que la meteorización química sucede cuando la roca es alterada químicamente y se degrada, ambos procesos se integran para formar la meteorización como se conoce. Por lo que mientras una banqueta se agrieta por las constantes fuerzas físicas que recibe de gente que camina por allí, también se degrada químicamente por las lluvias y organismos que existen en el suelo.



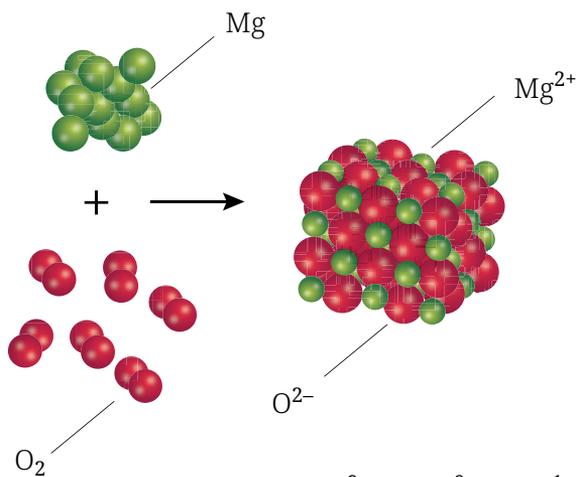
**Figura 3.11** Procesos de meteorización física (izquierda) y química (derecha). Fuente: Beck, 2020

### 3.4. Procesos de óxido reducción

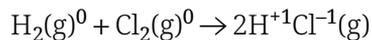
Los *procesos de óxido reducción*, o bien *redox*, son aquellos en los cuales existe una transferencia de electrones de un compuesto a otro. Este tipo de procesos ocurre todo el tiempo, desde la combustión fósil hasta los blanqueadores usados en el hogar. Si se observa un ejemplo de un proceso redox, se puede ver la formación de óxido de magnesio a partir de la combinación entre el magnesio y el oxígeno. Este es un claro ejemplo de un proceso en el cual hay una transferencia de electrones.



En la ecuación anterior existen dos agentes actuantes: un *agente reductor*, es decir, el componente que va a transferir sus electrones, y otro *agente oxidante* que recibirá los electrones. En este caso, el magnesio es el que transferirá sus electrones al oxígeno, por lo que el magnesio se considera el agente reductor, mientras que el agente oxidante, que recibe los electrones, es el oxígeno. Al proceso de pérdida de electrones se le conoce como *reacción de oxidación*, mientras que al proceso de ganancia de electrones, como *proceso de reducción*.



**Figura 3.12** Proceso de oxidación-reducción entre  $\text{O}_2$  y Mg para formar  $2\text{MgO}(\text{s})$   
Fuente: Chang y Goldsby, 2016



Para poder dar seguimiento hacia dónde se están yendo los electrones, así como qué elemento se reduce y qué otro se oxida, se usa la asignación de un *número de oxidación*. Con este número, que se coloca generalmente en la parte superior derecha de los elementos, se logra entender exactamente cuál fue el proceso de transferencia de electrones.

El procedimiento de colocación del número de oxidación queda claro en el cloruro de hidrógeno, en donde se observa que el hidrógeno se está

oxidando al tener un +1, mientras que el cloro demuestra que ha perdido oxidación al indicar que tiene un -1. A partir de los números de oxidación, se sabe que la transferencia de electrones va del hidrógeno al cloro, dando como resultado que el hidrógeno se oxide y que el oxígeno se reduzca.

### 3.5. Componentes orgánicos del agua subterránea

Los *componentes orgánicos* para el caso de las aguas subterráneas es toda aquella materia orgánica disuelta, excluyendo a los hidrocarburos gaseosos. La cantidad de componentes orgánicos puede variar dependiendo de los acuíferos y sus localidades; no obstante, un rango propuesto por Tikhomirov precisa que varían de la siguiente manera: carbono (44.5 % - 87.5 %), hidrógeno (5.5-13.1 %), oxígeno (1.1-15 %) y azufre (2.4 % o menos). El fósforo también es un componente orgánico común en las aguas subterráneas.

#### 3.5.1. Estructura y propiedades

La mayoría de los componentes orgánicos en las aguas subterráneas tienen enlaces covalentes, por lo que los componentes se disuelvan con dificultades. Para tener un mejor entendimiento de la estructura, los componentes se pueden dividir en tres categorías: *no polares*, *formadores de iones* y *compuestos complejos*. Cada uno de ellos se identifica de la siguiente manera:

- \* *No polares*: todos tienen enlaces covalentes y la mayoría son hidrocarburos químicamente pasivos, por lo que son poco solubles en el agua.
- \* *Formadores de iones*: en este grupo se encuentran los carboxílicos, alcoholes, ácidos y fenoles.

- \* *Compuestos complejos*: aquellos que son más desarrollados como las enzimas, clorofila, xantofila y ácidos húmicos, se encuentran en este apartado.

Las propiedades del agua se pueden reducir a tres categorías primordiales desde la perspectiva de la hidrogeoquímica: físicas, químicas y sensoriales. A partir de diversos instrumentos, es posible conocer las distintas variables esenciales para determinar los diferentes parámetros de las aguas subterráneas.

En cuanto a las propiedades sensoriales, basta con observar, probar, tocar y oler el agua, no obstante, se pueden usar turbidímetros, colorímetros, termómetros, etc., para conocer parámetros generales y sencillos sobre la calidad del agua. Si se requiere información más avanzada, se necesitan obtener las propiedades químicas, las cuales proveen variantes como la salinidad.

### 3.6. Transformación biológica

Existen varios procesos en los que la biósfera interactúa con la litósfera, los cuales provocan la fractura de la roca; sin embargo, el más importante, o al menos el más mencionado, es el de la acción del crecimiento de las raíces de las plantas en las fisuras existentes de las rocas. Este crecimiento provoca una fuerza muy grande en las fisuras y es capaz de fracturar la roca.

Este fenómeno es muy conocido y representa un problema en las construcciones humanas, pues el crecimiento constante de plantas dentro de estas fisuras debilita estructuras de edificios y daña los caminos hechos por el hombre.

## 4. Medio rocoso

En ingeniería, el concepto básico para comenzar a abordar el medio rocoso es el de *suelo*. Según Todd y Mays (2005), el suelo es la capa superficial de la corteza terrestre en la que viven numerosos organismos y crece la vegetación, es una estructura de vital importancia para el desarrollo de la vida que sirve de soporte a las plantas y le proporciona los elementos nutritivos necesarios para su desarrollo. El suelo se forma debido a la descomposición de rocas por cambios bruscos de temperatura y la acción de la humedad, aire y seres vivos.

El proceso mediante el cual los fragmentos de roca se hacen cada vez más pequeños, se disuelven o van a formar nuevos compuestos, se conoce como *meteorización* y cuando esto sucede es donde se produce lo que llamamos rocas. Momentos después de ocurrida la meteorización, sucede que los productos rocosos se mezclan con el aire, agua y los restos orgánicos provenientes de plantas y animales para finalmente formar suelos. Este proceso tarda muchos años y, por esa razón, los suelos son considerados recursos naturales no renovables.

En la tabla 4.1, se enlistan los principales componentes del suelo.

1

2

3

4

5

6

**Tabla 4.1.** Principales componentes del suelo

<b>Materia orgánica viva y muerta</b>	<b>Materia inorgánica (originada por el proceso de meteorización)</b>
Restos vegetales	Fósforo
Hongos	Azufre
Lombrices de tierra, insectos y otros animales	Nitrógeno

Fuente: elaboración propia

En el suelo también encontramos agua, que mantiene en solución los nutrientes que serán aprovechados por las plantas, y el aire, que ocupa los poros que el agua deja libres que contienen gases atmosféricos, en su mayoría dióxido de carbono. Según su estado físico, los componentes del suelo se presentan en fase sólida, líquida o gaseosa.

Dentro de las propiedades físicas de los suelos, se encuentran la textura, la estructura, la porosidad, la temperatura, la consistencia y el color. Sus propiedades químicas se manifiestan en la transformación de las sustancias formadoras del suelo, por ejemplo, en la presencia de nutrientes orgánicos e inorgánicos, el intercambio de iones y la acidez del suelo (pH).

Existen varias clasificaciones de los suelos, que dependen de los criterios utilizados para realizarlas: el criterio petrográfico, el cual toma en cuenta las fracciones minerales de los suelos, de donde resultan suelos silíceos, arcillosos, calizos, salinos, etc.; el criterio genético, que considera el proceso que les dio origen, están los suelos autóctonos y los alóctonos, y por último, el criterio climático, donde cada uno de ellos corresponde a una zona climática de la Tierra, por ejemplo, suelo de zona intertropical.

En este capítulo, se abordará el medio rocoso, el cual resulta de vital importancia, ya que como por definición se menciona y más adelante se abordará con profundidad, la hidrogeoquímica se conforma de la interacción del agua con el medio rocoso.

## 4.1. Formaciones geológicas

Las *formaciones geológicas* son el resultado de miles de millones de años de evolución geológica. Las formaciones rocosas que constituyen la corteza terrestre pueden ser observadas en afloramientos en la superficie (Hidrolog, s. f.).

Escondidas en el subsuelo, algunas formaciones son capaces de almacenar agua y otras no, para intentar “visualizar” las rocas subterráneas, existen algunos métodos que permiten analizar las características físicas, químicas y mecánicas de las rocas (Hidrolog, s. f.).

### 4.1.1. Tipos de rocas y características

Las rocas son materiales de la Tierra que se forman como resultado de diferentes tipos de procesos geológicos, por ejemplo, vulcanismo, erosión, procesos químicos, etc., (figura 4.1).

Reconocer los diferentes tipos de rocas e identificar sus diversas características nos permite reconstruir las condiciones de su formación en diferentes “regiones y tiempos”.

Las rocas se dividen en tres tipos:

- \* *Ígneas*: solidificadas a partir de un fundido.
- \* *Sedimentarias*: formadas en la superficie a partir de rocas preexistentes.
- \* *Metamórficas*: formadas a partir de rocas preexistentes como resultado de cambios de presión y temperatura que provocan procesos de recristalización.

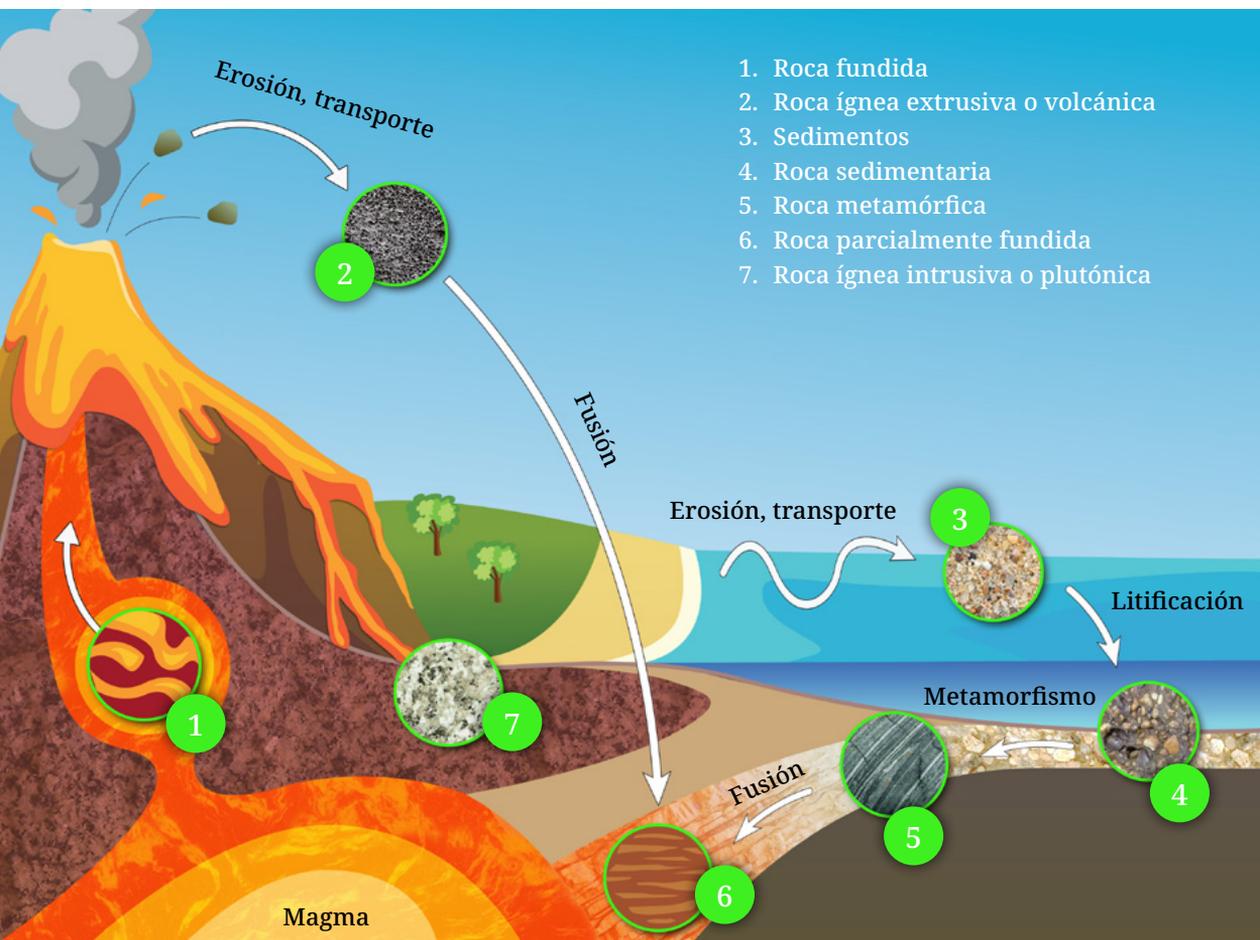


Figura 4.1 Ciclo de las rocas

## Rocas ígneas

Las *rocas ígneas* se forman a partir del enfriamiento, solidificación y cristalización de un fundido, el cual es producto de la fusión parcial de rocas de la corteza o el manto superior, que se genera en el interior de la Tierra a profundidades de alrededor de 250 km. Cuando este material asciende a lo largo de la corteza (capas interiores de la Tierra) se le denomina *magma* y cuando llega a la superficie terrestre se le conoce como *lava*.

Al respecto, se definen dos ambientes de formación para una primera clasificación:

- \* *Rocas ígneas extrusivas o volcánicas*: las que se forman a partir de lava, es decir, que cristalizan en la superficie terrestre.
- \* *Rocas ígneas intrusivas o plutónicas*: las que se forman cuando el magma cristaliza antes de llegar a la superficie.

Existen otras características que derivan y están asociadas al ambiente de formación y que también se consideran en la clasificación: la textura (tamaño, forma y orden de los cristales) y la composición de los minerales que conforman las rocas (cantidad de silicatos de diferentes colores, cuarzo y plagioclasa Ca), como se ilustra en la figura 4.2.

1

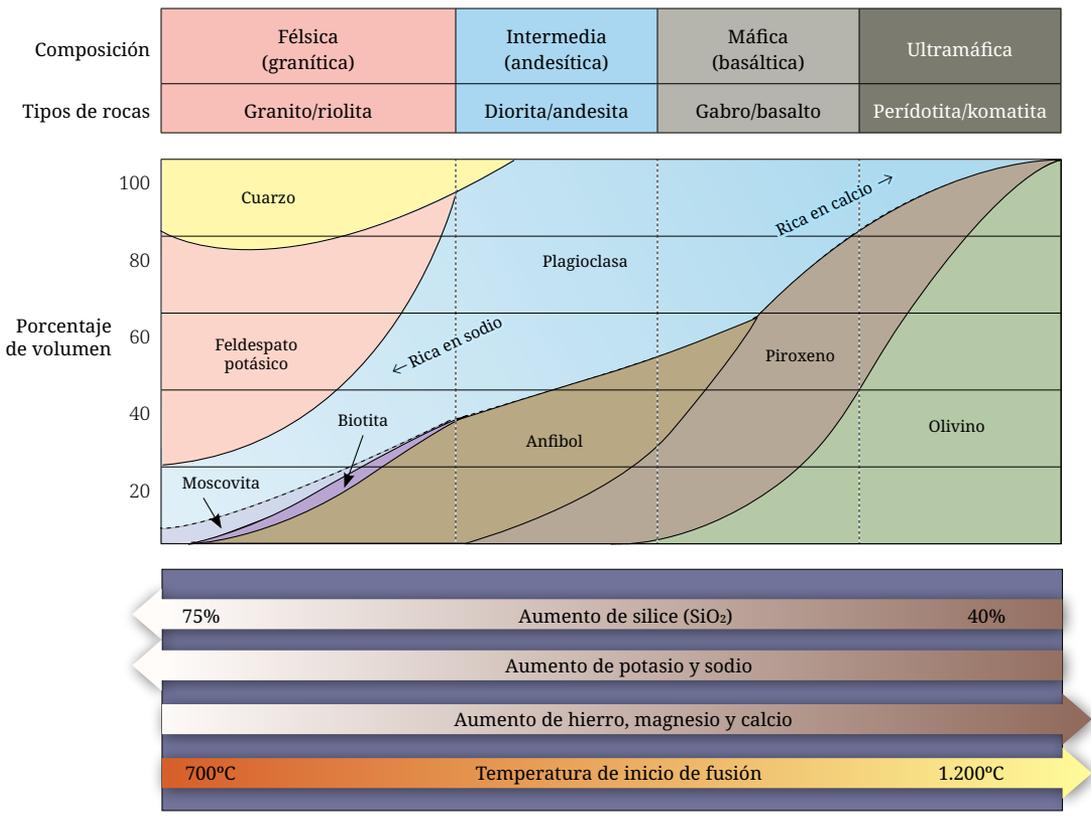
2

3

4

5

6



**Figura 4.2** Composición de la rocas.  
 Fuente: Tarbuck y Lutgens (2005)

### Rocas sedimentarias

Las *rocas sedimentarias* se forman en la superficie de la Tierra a partir del depósito de sedimentos, los cuales son producto de la *meteorización* o *intemperismo* de rocas preexistentes y son *transportados* por agentes, como agua, hielo y viento. Además, estos sedimentos experimentan varios cambios antes de convertirse en una roca sedimentaria.

Es importante mencionar que la meteorización de las rocas no solo se da de forma física generando partículas sólidas, sino también de forma

química, generando una descomposición que implica el transporte de material disuelto en agua, es decir, un fluido cargado de diferentes iones de acuerdo con la composición de la roca.

El *depósito* de las partículas sólidas tiene lugar cuando el viento y las corrientes de agua disminuyen de velocidad y a medida que los glaciares se derriten. Esto ocurre en cuencas o lugares pendiente abajo de su lugar de formación debido a la gravedad, un delta en la desembocadura de un río y el lodo del fondo de un lago, son algunos ejemplos (Tarbuck y Lutgens, 2005).

Por otra parte, el depósito de las partículas disueltas en agua se debe más bien a cambios químicos o de temperatura en el agua que promueven la cristalización o precipitación del material; también puede ocurrir por actividad biológica.

Ya que tanto la energía de los agentes de transporte como el intemperismo mismo son elementos dinámicos, el depósito de sedimentos se vuelve algo intermitente y otorga a las rocas sedimentarias una disposición en capas muy característica de ellas, aunque no única de su tipo: la *estratificación*.

Conforme ocurre la sedimentación, los sedimentos más antiguos van siendo enterrados por los más jóvenes, es así que comienza la *compacción*, por el peso que tienen encima, y la *cementación* (precipitación de minerales entre los granos sedimentarios individuales) por medio del agua que percola entre las partículas con algún espacio abierto y que va cargada de materiales cementantes. Todos estos cambios físicos, químicos e incluso biológicos ocurridos después del depósito se conocen como *procesos diagenéticos*.



**Nota:** La compactación y cementación de los sedimentos se puede englobar en el término del proceso de litificación. La litificación es un proceso diagenético. La diagénesis también abarca los cambios después de la litificación.

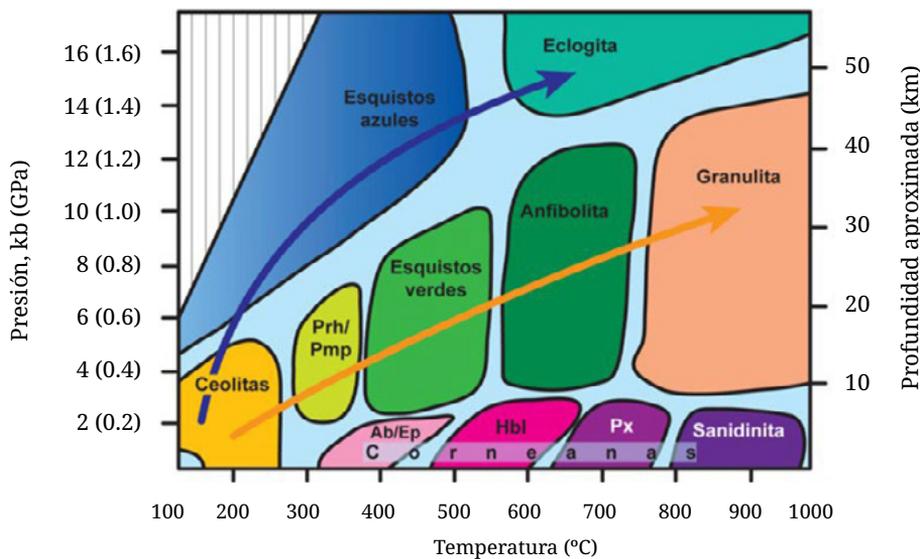
Una de las clasificaciones más básicas de las rocas sedimentarias se hace con base en el origen del sedimento y se divide en tres categorías:

- \* *Rocas sedimentarias detríticas:* formadas por material transportado como partículas sólidas y generado por meteorización física (mecánica) primordialmente.
- \* *Rocas sedimentarias químicas:* el sedimento es producto de partículas solubles. En este tipo de rocas, la meteorización predominante es la química.
- \* *Rocas sedimentarias orgánicas:* los sedimentos que constituyen estas rocas pueden ser tanto detríticos como químicos, lo imprescindible en su formación es la acumulación de grandes cantidades de materia orgánica y condiciones especiales que permitan una cierta preservación o la retardación de la descomposición de esta antes de ser enterrada y sometida a las condiciones de presión y temperatura que terminarán su transformación.

### Rocas metamórficas

El *metamorfismo* es un proceso que ocurre en el interior de la Tierra, en profundidades a partir de los 8 km generalmente. Consiste en cambios mineralógicos, texturales y, en ocasiones, composicionales (metasomatismo) en rocas preexistentes, debido a que estas se someten a condiciones de presión (pueden ser esfuerzos) y temperatura significativamente diferentes a las predominantes durante su formación inicial, además de que interactúan con fluidos químicamente activos.

Los cambios en los protolitos, es decir, la roca que sufre el metamorfismo y crea una roca metamórfica nueva, son graduales, por lo que su visibilidad depende del grado de metamorfismo y este último se puede clasificar en *facies metamórficas* (rocas y características mineralógicas de las rocas que se forman a condiciones similares de presión y temperatura), como se representa en la figura 4.3.



Prh/Pmp: Prehnita-Pumpellita

Ab/Ep: Albita-Epidota

Hbl: hornbléndicas

Px: piroxénicas

**Figura 4.3.** Facies metamórficas.

Fuente Tarbuck y Lutgens (2005)

El metamorfismo se puede clasificar, según el ambiente tectónico en el que ocurre o con base en la manera en que se desarrolla, como *metamorfismo de contacto*, *metamorfismo regional*, *metamorfismo hidrotermal*, *metamorfismo de impacto* y *metamorfismo dinámico*. Asimismo, las rocas metamórficas también tienen diversas formas de clasificarse, ya sea por su textura (foliadas y no foliadas), la clase química de su protolito (pelíticas, básicas, cuarzo-feldespáticas, calcáreas y calco-silicatadas), etcétera.

### 4.1.2. Composición mineralógica

Una roca es considerada un agregado de minerales, es decir, es el agregado de dos o más minerales, sin embargo, existen rocas que se conforman exclusivamente de un solo mineral.

Los *minerales* son definidos por la geología como sustancias químicas sólidas e inorgánicas con estructura atómica característica y composición química definida; además, deben cumplir con los siguientes criterios:

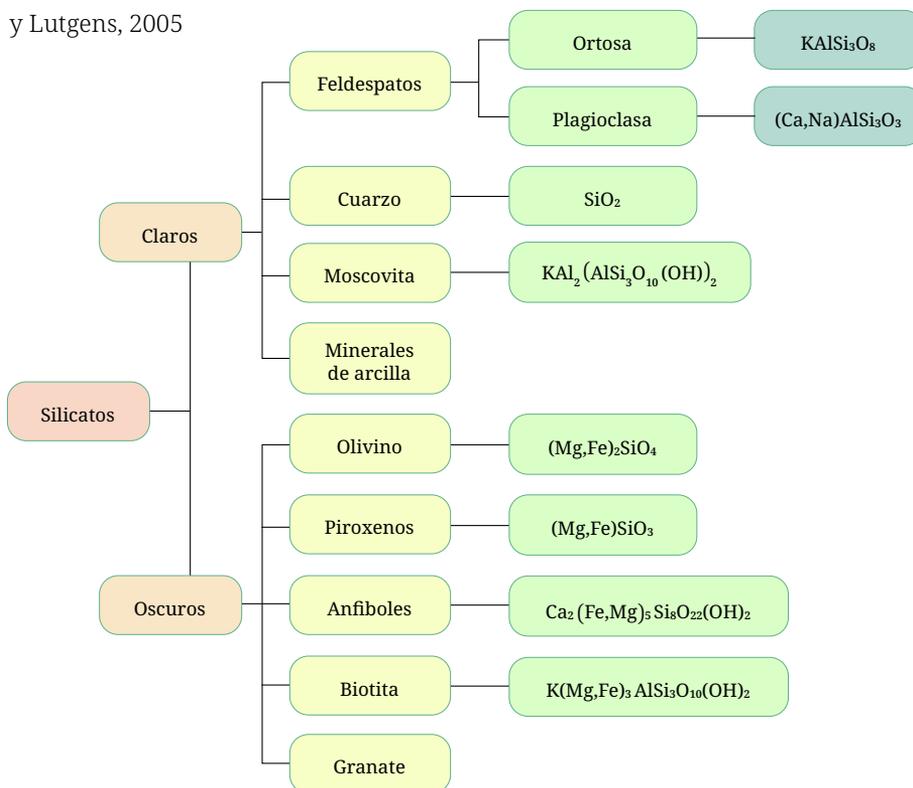
- \* Aparecer de forma natural.
- \* Ser inorgánico.
- \* Ser sólido.
- \* Tener estructura interna ordenada.
- \* Tener composición química definida con rangos de variación.

Los minerales poseen una estructura interna característica, los átomos que los constituyen se encuentran ordenados, formando lo que se conoce como retículo cristalino, una red tridimensional de unidades estructurales que se repiten en todas direcciones del espacio. Se ha probado que solo se pueden tener catorce tipos de redes espaciales. A estas redes se les denomina redes de Bravais.

Debido a que los silicatos constituyen el 90% de la masa de la corteza terrestre, es común que la clasificación de los grupos minerales se dé con base en este criterio, es decir, distinguir entre silicatos y no silicatos. Una clasificación más detallada la podemos observar en la figura 4.4.

**Figura 4.4** Clasificación de los silicatos.

Fuente: Modificado de Tarbuck y Lutgens, 2005



### 4.1.3. Sistemas geológicos kársticos

El término alemán *karst*, según Garasic y Garasic (2015), tiene su origen etimológico en el vocablo indoeuropeo “kar”, “gar”, khar” o “ghar” que significa “roca” o también “cueva”. Las *formaciones kársticas* se entienden como terrenos resultados de la hidrología de una zona del planeta en combinación con la morfología y geología local compuesta por distintos minerales de los cuales se describirán las evaporitas, carbonatos y rocas de silicatos en conjunto con una porosidad secundaria bien desarrollada del terreno.

El estudio de zonas kársticas resulta particularmente relevante por el hecho de que cubren aproximadamente 20% de la superficie del planeta (Frumkin, 2013), además de afloramientos de rocas carbonatadas que cubren el 13% de la misma superficie. Parte de esta información es fundamental, debido a que en la localización de este tipo de formación geológica contiene cerca del 25% de la población mundial asentada en estas zonas.

Los Alpes Dináricos, que comprenden actualmente la región poniente de Eslovenia en frontera con Italia, es una de las zonas kársticas más extensas y se caracteriza por ausencia de vegetación y afloramientos de roca carbonatada, resultado de alta solubilidad y porosidad secundaria bien desarrollada, lo que ofrece morfologías conformadas por oquedades tales como depresiones cerradas, cuevas, etc.

En una definición más simplificada, se considera una zona kárstica al terreno en el cual domina la disolución química sobre los procesos mecánicos de meteorización y formación de suelo, debido a que el material, producto de la meteorización de la roca en forma de solución, propicia el desarrollo de zonas subterráneas de drenaje y formaciones rocosas que no se pueden encontrar en ambientes de rocas insolubles. Cabe señalar que no solo la filtración de agua contribuye a la disolución, también existen procesos fluviales, glaciación, la acción de las mareas y otros procesos son cruciales para que se lleve a cabo dicha disolución.

A grandes rasgos, las formaciones kársticas están constituidas por rocas carbonatadas, minerales solubles en agua como yeso, su fase anhídrica la anhidrita, así como distintos tipos de cloruros de los cuales destaca la halita. Todos estos minerales, también son conocidos como *evaporitas* formadas por evaporación, poseen una velocidad de disolución que es factor de riesgo en combinación con las actividades humanas.

1

2

3

4

5

6

Como factor de riesgo, recientemente se ha observado la influencia en la disolución del ácido sulfúrico y la contribución a la acidez del suelo por medio de CO<sub>2</sub>, además de mezclas de distintas soluciones con diferentes grados de saturación, efectos de la temperatura y agentes microbiológicos.

En conclusión, el proceso más importante en las zonas kársticas es la disolución; sin embargo, actualmente también dichas zonas están sujetas a factores externos de carácter ambiental, climatológico, tectónico y antrópico; además, en su forma de entendimiento más reciente, se dice que es un fenómeno de superficie.

### Distintas clasificaciones de los sistemas kársticos

El estudio de sistemas kársticos ha sido desarrollado en diferentes regiones del planeta, ya que es un fenómeno natural que encontramos en prácticamente todo el mundo; por este motivo, se han elaborado distintas clasificaciones.

**Clasificación por morfología.** Las primeras clasificaciones se realizaron, respecto al producto final de la formación kárstica, por sus formas:

- \* Dolina kárstica. Se caracteriza por presentar cavidades cerradas y depresiones estrechas.
- \* *Pavimento kárstico*. Principalmente se presentan amplias extensiones de terreno de roca carbonatada expuesta y esculpida.
- \* *Torre kárstica o cono kárstico*. Caracterizados por colinas inclinadas separadas por cañones o depresiones cerradas.
- \* *Polje kársticos*. Notables por sus vastas dimensiones, son depresiones cerradas de gran magnitud.

**Clasificación por clima.** Existen otras clasificaciones que toman en cuenta la localización de la zona kárstica en cuestión, especialmente una desarrollada a partir de los años cincuenta y promovida por un investigador francés de nombre Jean Corbel:

- \* *Zona kárstica ártica.*
- \* *Karst árido.*
- \* *Zona kárstica templada.*
- \* *Zona kárstica tropical.*

**Clasificación por cobertura.** También se pueden clasificar conforme a la superficie que cubre las zonas kársticas, cuya clasificación fue desarrollada en 1967 por el científico James F. Quinlan, quien detalla su trabajo en sus notas no publicadas. Quinlan plantea que existen tres grupos principales de karst: cubierto, expuesto y subacuoso.

#### 1. Karst cubierto:

- \* *Karst de subsuelo.* Su superficie está cubierta por residuos de suelo insolubles casi siempre producto de rocas kársticas.
- \* *Karst envuelto.* Superficie rocosa totalmente cubierta por una especie de chapa delgada de sedimentos también de origen kárstico, como lo son loess o ceniza volcánica.
- \* *Karst enterrado.* Superficie kárstica cubierta en su totalidad por otra capa de material kárstico completamente distinta en cuestiones de tiempo a la que está abajo, es decir, se trata de una capa de mayor antigüedad en comparación a la que la cubre, también llamada paleokarst.
- \* *Karst interestratales.* Formaciones kársticas que se han desarrollado dentro y debajo de otras ya existentes que siempre son más jóvenes que las capas que las cubren.

## 2. Karst expuesto:

- \* *Karst desnudo*. Sin ninguna cobertura, a excepción de nieve en temporadas.
- \* *Karst desnudo 2*. Resultado de la exposición por erosión de karts cubierto, subsuelo o interestratal.
- \* *Karst exhumado*. Formación que después de haber sido cubierta yace nuevamente sobre roca sana.

## 3. Karst subacuoso:

- \* *Karst ahogado o embebido*. Toda formación kárstica sumergida en un mar o lago.
- \* *Karst subfluvial*. Formaciones desarrolladas bajo la superficie de inundación de ríos.
- \* *Karst submarino*. Karst que se desarrolló debajo de la zona de mareas.

## Procesos de meteorización en zona kárstica, disolución de los carbonatos

Las formaciones kársticas pueden entrar en otra clasificación respecto al tipo de roca que los conforma, que de igual manera influirá en la meteorización que presentarán:

- \* *Carbonato kárstico* (limo y dolomita).
- \* *Evaporita kárstica* (yeso, sales, y sus derivados).
- \* *Silicato kárstico* (cuarcitas, granitos y otras rocas ígneas y metamórficas).

Adquieren importancia cuando hablamos de disolución y solubilidad, entendiendo el término *disolución* como el proceso mediante la roca o

parte de ella en combinación con el agua que da como resultado una solución o conjunto de solutos. Asimismo, como se ha estudiado, la disolución de las rocas carbonatadas es una reacción química reversible que provoca la formación de karst carbonatado en rocas calizas.

En el caso particular de las rocas carbonatadas, o de carbonato de calcio, su agente principal para la disolución es el dióxido de carbono, debido a que estas rocas son muy poco solubles en agua pura. El dióxido de carbono es un gas que está presente en la atmósfera, en el suelo (por respiración de las plantas y filtraciones de agua) y disuelto en el agua de lluvia y subterráneas, además de ríos, lagos y océanos, y que junto con el agua forma el ácido carbónico  $H_2CO_3$ .

La solubilidad del dióxido de carbono está en función de la temperatura, por ejemplo, la solubilidad de la calcita disminuye a razón de 13% por aumento de un grado Celsius. Esto se explica debido a la cantidad de caliza que puede ser disuelta en equilibrio de saturación por unidad de volumen de agua es directamente proporcional a la presión parcial de dióxido de carbono en el aire con la que el agua está en contacto e inversamente proporcional a la temperatura del agua, conocida esta relación como *ley de Henry*.

De esta manera, cuando se alcanza el punto de equilibrio por saturación para la calcita, cesa la disolución; así, si el agua saturada desciende y se enfría, se convierte en agua agresiva o corrosiva, la cual también alcanza esta condición cuando se mezcla con agua con distinta concentración de carbonato de calcio.

La cuantificación de la disolución de las calizas depende de la pendiente de la superficie, la precipitación anual, la intensidad de esta y la dirección del viento prevalente, para lo cual se han desarrollado varios métodos para obtener las tasas de disolución en las calizas. Aquí menciona-

1

2

3

4

5

6

remos el *método hidroquímico de Corbell* (1959), el cual consiste en medir la cantidad de caliza transportada anualmente por un cauce o curso de agua y comparar dicha cantidad con la superficie de terrenos calizos en la cuenca de drenaje, expresando estos valores por  $\text{m}^3/\text{año}/\text{km}^2$ .

Muchas de las formaciones kársticas se pueden interpretar a través de la cinética química de las muchas reacciones de los carbonatos, que son la base de los más complejos modelos computacionales que nos permiten conocer el desarrollo de las cuevas.

El ataque que provoca el ácido carbónico a las rocas carbonatadas se puede interpretar como un fenómeno de corrosión a gran escala, el cual genera soluciones corrosivas que aprovechan las debilidades geológicas de la roca para provocar fracturas y distintos tipos de falla y formación de karst. Como resultado, podemos observar un número determinado de accidentes geológicos, conocidos como *depresiones cerradas*, el cual se ajusta al siguiente modelo:

$$n = N_0 e^{\nu dc^j}$$

Donde:

- $n$ : número de depresiones cerradas en una profundidad dada
- $N_0$ : coeficiente de ajuste del número de depresiones cerradas contadas
- $d$ : profundidad característica dada de la zona kárstica en cuestión
- $dc$ : profundidad en metros de la depresión cerrada

### Tipos de karst

La manera en la que se conforman los paisajes kársticos es aprovechando los procesos químicos que ocurren en los estratos geológicos, donde los

flujos superficiales y subterráneos acarrean las soluciones producidas hacia los sitios donde se desarrolla el karst y, a su vez, se llevan los productos resultantes de las reacciones.

- \* *Fluviokarst*. Al igual que otros tipos de roca, los procesos fluviales en zona kársticas esculpen paisajes, así las entradas de agua subterráneas se distinguen por arroyos y depresiones cerradas. Las salidas de agua subterránea formadas se caracterizan por manantiales que regresan el agua del subsuelo a los cauces.
- \* *Karst alpino*. Su entorno es de alta montaña donde se combinan distintos procesos, los más importantes de ellos de carácter climático que presentan temperaturas extremadamente bajas con estratos de nieve en invierno y rayos solares intensos con grandes tormentas de lluvia en el verano. Esta combinación garantiza la formación de cavidades profundas de varios kilómetros de extensión debido a los altos gradientes hidráulicos.
- \* *Karst glaciar*. Muchas áreas kársticas en latitudes polares fueron impactadas por las contracciones y movimientos de las placas tectónicas, así como los avances y retracciones de las glaciaciones en el Pleistoceno. De esta manera, el escurrimiento de los glaciares dejaron expuestas algunas partes de roca caliza sana o carbonatada, lo que actualmente pudiera ser pavimento kárstico producto de glaciaciones previas.
- \* *Karst eogénico o de costa*. Al igual que el “karst alpino”, se refiere a las condiciones de medio ambiente que suelen incluir los efectos de erosión y filtración de las olas, así como la acción de mareas ascendentes y descendentes; y hablando en tiempo geológico, los cambios de nivel del mar que se han presentado debido a las glaciaciones. Esa serie de factores en combinación con un gradiente amplio de temperaturas, humedad y salinidad crean aspectos distintos de las química de las rocas carbonatadas.

1

2

3

4

5

6

## 5. Hidrogeoquímica

La hidrogeoquímica estudia las propiedades químicas del agua tanto de cuerpos superficiales como subterráneos, con especial interés en aquellos que dependan de la geología regional, analiza los procesos de interacción con el suelo y el impacto que tiene esta interacción con los iones disueltos en el agua.

### 5.1. Clasificaciones hidroquímicas

De acuerdo con Fagundo y González (2005), las clasificaciones hidroquímicas se basan en el tipo como en la cantidad de iones que están disueltos en el agua, y las más comunes son las siguientes:

- \* Clasificación de Alekine
- \* Clasificación de Shchoukarev
- \* Clasificación de Kurlov
- \* Clasificación de Palmer
- \* Clasificación de Schoeller

1

2

3

4

5

6

## Clasificación Alekine

Toma en cuenta los tres aniones más comunes carbonatos ( $\text{HCO}_3^- + \text{CO}_3^{2-}$ ), cloruros ( $\text{Cl}^-$ ) y 33 sulfatos ( $\text{SO}_4^{2-}$ ), del mismo modo los cationes dan paso a tres clases diferentes dependiendo de cuál predomine ( $\text{Ca}^{2+}$ ,  $\text{Mg}^{2+}$  o  $\text{Na}^+$ ).

*Tipo:*

- \* Aguas bicarbonatadas (predominio de  $\text{HCO}_3^-$ )
- \* Aguas sulfatadas (predominio del  $\text{SO}_4^{2-}$ )
- \* Aguas cloruradas (predominio del  $\text{Cl}^-$ ).

*Clases:*

- \* Aguas cálcicas (predominio del  $\text{Ca}^{2+}$ ).
- \* Aguas magnésicas (predominio del  $\text{Mg}^{2+}$ ).
- \* Aguas sódicas (predominio del  $\text{Na}^+$ ).

## Clasificación de Shchoukarev

Este método utiliza un criterio diferente. Cuando los iones de una especie química superan el 25% de miliequivalentes de aniones o cationes, se clasifican de la siguiente manera:

1. *Con relación a los aniones:*

- \* Aguas bicarbonatadas.
- \* Aguas sulfatadas.
- \* Aguas cloruradas.
- \* Aguas bicarbonatadas sulfatadas.
- \* Aguas bicarbonatadas cloruradas.
- \* Aguas sulfatocloruradas.
- \* Aguas sulfatocloruradas bicarbonatadas.

1

2

3

4

5

6

2. Con relación a los cationes:
  - \* Aguas cálcicas.
  - \* Aguas magnésicas.
  - \* Aguas sódicas.
  - \* Aguas calcicomagnesianas.
  - \* Aguas calcicosódicas.
  - \* Aguas magnesicosódicas.
  - \* Aguas cálcico-magnésico-sódicas.

### Clasificación de Kurlou

Este método de clasificación es muy similar al de Shchoukarev, pero con la diferencia de que en lugar de un límite de 25% del total de aniones o cationes, considera el 20% para poder ser clasificadas.

### Método de clasificación Palmer

Este método se basa en la consideración de que las sales de ácidos fuertes originan salinidad y las de débiles alcalinidad, por lo que el criterio de clasificación es el que sigue:

- S1: Salinidad primaria (por álcali).
- S2: Salinidad secundaria (dureza permanente).
- S3: Salinidad terciaria (acidez).
- A1: Alcalinidad primaria (alcalinidad permanente).
- A2: Alcalinidad secundaria (alcalinidad temporal).

## Método de clasificación de Schoeller

Este método considera el contenido en miliequivalentes por litro de las especies químicas disueltas, da un orden de importancia el cual se describe a continuación:

*cloruros > sulfatos > bicarbonatos + carbonatos*

### 1. Con relación al cloruro (r Cl<sup>-</sup>):

- \* Aguas hipercloruradas (> 700 hasta saturación).
- \* Aguas clorohalásicas (420-700).
- \* Aguas cloruradas fuerte (140-420).
- \* Aguas cloruradas medias (40-140).
- \* Aguas oligocloruradas (15-40).
- \* Aguas cloruradas normales (< 10).

### 2. Sobre la base del SO<sub>4</sub><sup>2-</sup> (r SO<sub>4</sub><sup>2-</sup>)

- \* Aguas hipersulfatadas (> 58).
- \* Aguas sulfatadas (24-58).
- \* Aguas oligosulfatadas (6-24).
- \* Aguas sulfatadas normales (< 6).

### 3. Con relación a la concentración de bicarbonato más carbonatos

(r HCO<sub>3</sub><sup>-</sup> + r CO<sub>3</sub><sup>2-</sup>):

- \* Aguas hipercarbonatadas (> 7).
- \* Aguas carbonatadas normales (2-7).
- \* Aguas hipocarbonatadas (< 2).

Por último, el *índice de intercambio de base* (IIB) se utiliza para indicar la relación entre los iones que se intercambian respecto a los inicialmente presentes en el agua.

## 5.2. Representación gráfica de la composición a aguas minerales

Se han empleado muchos tipos de gráficos para mostrar la composición química del agua; sin embargo, debido a la necesidad de representar una cantidad grande de datos, ninguna representación es capaz de proveer una solución completa. Enseguida, se describen los gráficos más comunes y sus características principales (Appelo y Postma, 2005).

### Diagrama de barras y circular

Para el diagrama de barras, se utilizan dos columnas consecutivas: en la de la izquierda, se colocan los porcentajes de cationes, y en la de la derecha los porcentajes de aniones, en las que se respeta un orden descendente para cada grupo. En la figura 5.1, se muestra el orden que se debe seguir (Fagundo y González, 2005; Appelo y Postma, 2005).

En la misma figura 5.1, se ilustra de otra forma la composición química del agua con un diagrama circular mediante la unión de dos semicírculos, 180°, que están repartidos para cada tipo de ion y el diámetro del círculo representa el total de sólidos disueltos.

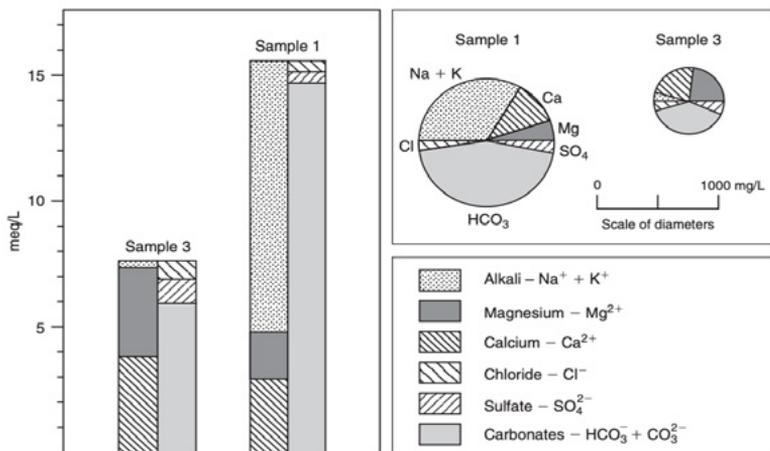


Figura 5.1 Representación gráfica circular y de barras para composición química de agua. Fuente: Appelo y Postma, 2005

## Diagrama de Stiff

El diagrama de Stiff refleja la composición mediante el uso de un polígono, cuyos vértices están definidos por un eje vertical cortado por tres ejes horizontales. Los ejes horizontales indican la concentración de iones, partiendo del cruce con el eje vertical. En la figura 5.2, se representa este gráfico (Fagundo y González, 2005; Appelo y Postma, 2005).

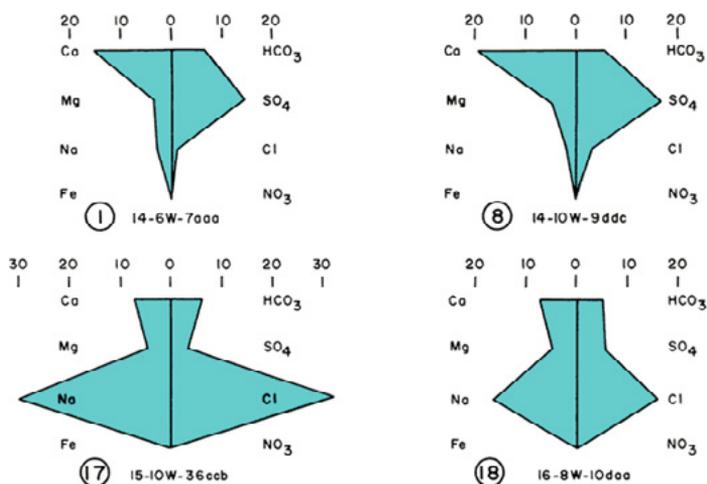


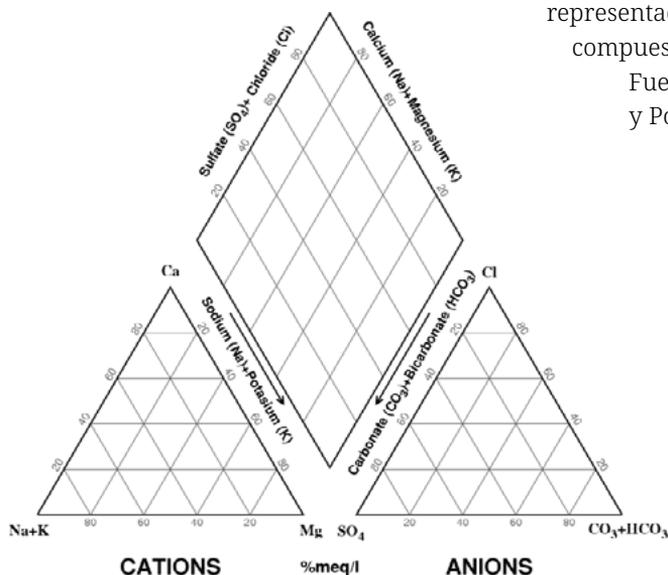
Figura 5.2 Ejemplo de representación gráfica de Stiff.  
Fuente: Appelo y Postma, 2005

## Diagrama de Piper

Otro método de representación gráfica es el diagrama de Piper. Existen algunas variantes de este método; sin embargo, el más sencillo consiste en dos triángulos equiláteros uno para los aniones y otro para los cationes, donde los ejes indican ya sea la concentración o porcentaje del total de iones. En la figura 5.3, se muestra un ejemplo de este método usando un gráfico compuesto (Fagundo y González, 2005; Appelo y Postma, 2005).

Figura 5.3 Ejemplo de representación gráfica compuesta de Piper.

Fuente: Appelo y Postma, 2005



De entre varias formas de representar gráficamente la concentración mineral en aguas, muchas veces se prefiere usar el diagrama de Piper porque en este se puede apreciar el contenido de más de una muestra en un solo diagrama, lo cual facilita el estudio (Appelo y Postma, 2005).

### 5.3. Procesos hidrogeoquímicos

Para la adecuada caracterización del tipo de agua, es fundamental conocer e identificar los mecanismos que se presentan en la conformación de las propiedades, los cuales se denominan *procesos hidrogeoquímicos*. A partir de la interacción fisicoquímica con la atmósfera o suelo del sitio de dichos procesos, es posible definir y usar un modelo hidrogeoquímico.

## Precipitación

Se define a la *precipitación* como aquellas reacciones cuyo producto es un sólido, lo cual ocurre en la naturaleza constantemente y pueden identificarse distintas causas: presentarse reacciones con la roca para formar precipitados insolubles debido al efecto salino, el cual provoca el aumento de la solubilidad en la solución, o bien la adición de un ion común, esto sucede cuando al adicionarse un ion que es común con uno de los iones de la sal, desplazan el equilibrio de la reacción por el principio de Le Châtelier; otra opción es por la variación en la presión y temperatura, parámetros que afectan la solubilidad de algunos componentes químicos, y finalmente, la oxidación de materia orgánica disuelta al tener contacto con la superficie atmosférica que da lugar a compuestos menos solubles.

## Disolución

El *grado de disolución* en el caso de la interacción mineral-agua depende de los siguientes parámetros: solubilidad, concentración del mineral en el agua, presión y temperatura que posea el medio circundante. Dentro de los minerales más solubles, se encuentran la calcita, dolomita, yeso, halita y silvita, que sirven como fuente de aporte de iones mayoritarios; mientras que los silicatos y rocas insolubles dan lugar a los iones minoritarios o elementos traza. Los gases más comunes en este proceso son nitrógeno, argón, oxígeno, helio, dióxido de carbono, amonio, metano y sulfuro de hidrógeno.

## Disolución de gases

El agua es bien conocida como disolvente natural e incluso puede disolver los gases de la atmósfera como el oxígeno. La solubilidad que tendrán estos gases en agua dependerá de varios factores, entre ellos, la presión y la temperatura. Por medio de la *ley de Henry*, se puede modelar la disolución de los gases, por ejemplo, el CO<sub>2</sub>:

$$p\text{CO}_2 = D (\text{H}_2\text{CO}_3)$$

Donde:

$p\text{CO}_2$  es la presión parcial del dióxido de carbono.

$D$  es el coeficiente de difusión a una temperatura dada.

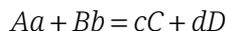
$\text{H}_2\text{CO}_3$  es la representación de la molécula de gas disuelta.

## Disoluciones minerales

Existen minerales que reaccionan rápidamente en contacto con el agua. Este es el caso de los minerales solubles, como fluorita, yeso y la mayoría de los carbonatados en los cuales el tiempo para alcanzar el equilibrio será mucho menor a otros minerales, como los silicatos, que a bajas temperaturas no alcanzan el equilibrio.

Asimismo, debe considerarse el tipo de minerales que ya lleva consigo el agua, debido a que cuando esta contiene minerales con iones comunes a los que están disueltos en su medio, disminuye su capacidad para disolver esos minerales, como sucede con agua saturada de calcita por un medio poroso rico en yeso. Por el contrario, la solubilidad de los minerales en el agua, cuya carga salina no contiene iones comunes con respecto

al terreno que atraviesa, incrementa la solubilidad de este. Para la descripción de la reacción del agua al equilibrio, aplica la ley de acción de masas, mediante la expresión de equilibrio:



$$K = \frac{((C)^c(D)^d)}{((A)^a(B)^b)}$$

Donde  $K$  representa la constante de equilibrio.

En esta ecuación, se utiliza la concentración molar de un soluto para calcular la solubilidad del mineral; sin embargo, la ley de acción de masas solo es válida para la actividad de iones, la cual es la concentración total corregida por los efectos de la electrostática y por la presencia de complejos acuosos.

El producto de la solubilidad ( $K_{ps}$ ) parte de la ecuación de acción de masas y permite estimar la concentración de los iones disueltos:

$$K_{ps} = aA^a aB^b$$

La solubilidad de un mineral en las aguas naturales se deduce de las expresiones termodinámicas para el agua pura y está determinada por la temperatura, la presión parcial de los gases disueltos, el pH, el potencial redox, la concentración relativa de otros iones. En la tabla 5.1, se presenta la solubilidad en agua a 25 °C de varios minerales de las rocas karsificables.

**Tabla 5.1** Reacción química, pH, solubilidad y concentración en las aguas meteóricas de algunos minerales constitutivos de las rocas, que se disuelven congruentemente y pueden originar formas kársticas o pseudokársticas

Mineral	Reacción química	pK	Solubilidad	Concentración (mg/L)
Halita	$\text{NaCl} = \text{Na}^+ + \text{Cl}^-$	1.6	360000	5-10000
Silvita	$\text{KCl} = \text{K}^+ + \text{Cl}^-$	0.9	244000	0-10000
Anhidrita	$\text{CaSO}_4 = \text{Ca}^{2+} + \text{SO}_4^{2-}$	4.5		
Yeso	$\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O} = \text{Ca}^{2+} + \text{SO}_4^{2-} + 2\text{H}_2\text{O}$	4.6	2400	0-1500
Calcita	$\text{CaCO}_3 = \text{Ca}^{2+} + \text{CO}_3^{2-}$	8.4	$(100 \cdot 10^{-3}, 480 \cdot 10^{-1})$ bar	10-300
Dolomita	$\text{CaMg}(\text{CO}_3)_2 = \text{Ca}^{2+} + \text{Mg}^{2+} + 2\text{CO}_3^{2-}$	17	$(90 \cdot 10^{-3}, 500 \cdot 10^{-1})$ bar	10-300
Sílice	$\text{SiO}_2 + 2\text{H}_2\text{O} = \text{H}_4\text{SiO}_4$			10-300 $\text{CaCO}_3$
Cuarzo	$\text{SiO}_2 + 2\text{H}_2\text{O} = \text{H}_4\text{SiO}_4$	37	12	3.12
Gibbsita	$\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 2\text{H}_2\text{O} + \text{H}_2\text{O} = 2\text{Al} + 6\text{OH}$		0.001	Trazas

Fuente: Modificado de Fagundo y González, 2005

### Actividad

La *actividad* representa la cantidad de concentración efectiva de la especie y toma en cuenta las desviaciones respecto al comportamiento ideal, provocado por la presencia de complejos acuosos. Por lo general, en soluciones diluidas, la actividad y la concentración son iguales. La ecuación para relacionar la actividad y la concentración es la siguiente:

$$a = \gamma C$$

Donde:

$\gamma$  : es el coeficiente de actividad.

$C$ : es la concentración

$\alpha$ : es la actividad

### Ecuación de Deby-Hückel

Debido a que las soluciones acuosas no son ideales, para el cálculo de un modelo hidrogeoquímico es necesario calcular el coeficiente de actividad para cada una de las sustancias dadas mediante la ecuación de Deby-Hückel (Fagundo y González, 2005):

$$\log \gamma_i = - \frac{Az_i^2\sqrt{I}}{1+Bd_i\sqrt{I}}$$

Donde:

$\gamma$  : Coeficiente de actividad

$A$  y  $B$ : Constantes que dependen de la temperatura a 25°C

$A = 0.5085$

$B = 0.3285 \times 10^{10} \text{ m}^{-1}$

$Z$ : Valencia de ion.

$l$ : Fuerza iónica.

$d$ : parámetro empírico del tamaño de los hidratos.

### Fuerza iónica

Esta representa una función de concentración de todos los iones presentes en ella. Se puede determinar a partir de la ecuación de Lewis y Randall, que se representa:

$$\mu = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n Z_i^2 m_x$$

Donde:

$m$ : molalidad como unidad de concentración.

$Z$ : carga del ion.

### Intercambio iónico

El *intercambio catiónico* es responsable de la química inorgánica del suelo, la cual está asociada a los coloides presentes en los suelos. Estos incluyen las arcillas como a la materia orgánica. Los coloides son partículas muy pequeñas con grandes áreas superficiales por unidad de volumen o peso. Debido a que las partículas poseen una carga neta negativa, atraen a los iones de carga positiva, como  $\text{Ca}^{2+}$ ,  $\text{Mg}^{2+}$ ,  $\text{K}^+$ . Por lo tanto, se puede inferir que la capacidad de intercambio catiónico es igual a la carga total negativa en las partículas del suelo. Además, una estimación de la capacidad de intercambio catiónico de los suelos es mediante la cantidad de materia orgánica en estos, así como por la cantidad y el tipo de arcillas que presenten. Los minerales con mayor potencial de intercambio iónico son la caolinita, montmorillonita, clorita, illita, vermiculita y zeolita.

### Índice de saturación

Este parámetro indica qué tan alejado se encuentra el sistema del equilibrio con respecto a la formación de cierto mineral; por lo tanto, indicará si el mineral en cuestión continuará disuelto, precipita o si la concentración permanece constante.

1

2

3

4

5

6

$$IS = \log \frac{a_C^c a_D^d}{Kps} = \log \frac{IAP}{Kps} = \log \Omega$$

Donde:

$Kps$ : producto de solubilidad

$\Omega$ : Estado de saturación

$a_C^c a_D^d$ : son las actividades de los iones del mineral estudiado, obtenidas a partir del análisis químico del agua.

$IAP$ : es el producto de las actividades de las especies presentes.

Por lo cual dependiendo del valor de  $IS$  indicará el estado de la solución:

$IS = 0$  se encuentra en equilibrio el mineral

$IS > 0$  se indica una sobresaturación

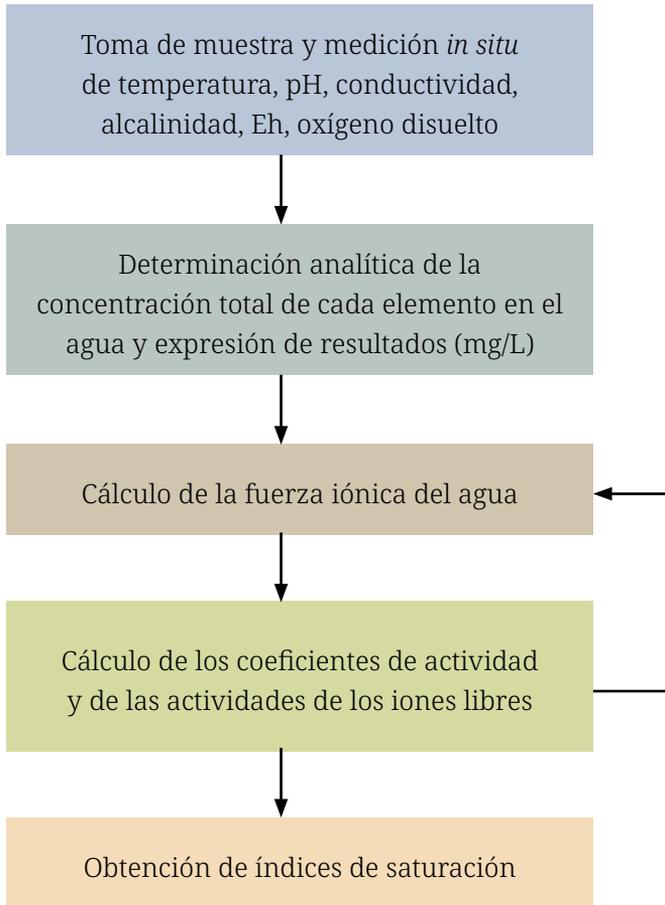
$IS < 0$  se define una condición de instauración.

Como los diferentes tipos de agua normalmente no están en equilibrio, se determina su estado de saturación con respecto a los índices de saturación de los minerales. Este estado de saturación es fundamental para poder identificar en qué sentido ocurre la reacción al interactuar agua roca en un acuífero.

### Procedimiento de los cálculos del $IS$ en el modelo

Los cálculos numéricos pueden ser realizados rápidamente por los códigos empleados en los programas de cómputo, pero esto se lleva a cabo mediante un procedimiento como el que se muestra en la figura 5.4.

**Figura 5.4.** Esquema para el cálculo del IS.  
Fuente: Martínez *et al.*, 2000



## 6. Modelación hidrogeoquímica

1

Un “modelo químico para sistemas geológico” es la interpretación más aceptada de lo que es un *modelo hidrogeoquímico*, el cual tiene por objetivo realizar el cálculo de las propiedades químicas y los procesos, como son la termodinámica, cinética o mecánica cuántica de un sistema, por lo que puede interpretarse también como la aplicación de modelos numéricos, los que proporcionan información de manera detallada acerca de su origen, así como la interacción.

2

### 6.1. Antecedentes

3

El modelo hidrogeoquímico puede determinar las reacciones que han ocurrido, así como las condiciones en las cuales se presentaron, qué presencia han tenido y la predicción del cambio de la composición mineralógica y de la calidad del agua al estar expuesta a procesos naturales y a las perturbaciones del sistema.

4

A partir de 1970, destacan diversas contribuciones en esta materia cuando se difunden los primeros programas para computadoras que permitieron realizar todas estas determinaciones de manera más sencilla, en especial, el código WATEQ (Truesdell y Jones, 1974). Su constante mejora dio paso a la creación de varios más, como MINEQL (Westall et al., 1976), BALANCE (Parkhurst et al., 1982), PHREEQE (Parkhurst et al., 1980), MINTEQ (Felmy et al., 1984) NETPATH (Plummer et al., 1991), PHREEQC 2.0

5

6

(Parkhust y Appelo, 1999), por mencionar algunos de los más utilizados, aunque alrededor del mundo se han desarrollado otros.

Esto ha sido posible gracias al avance en los nuevos equipos y programas actuales que cada vez pueden resolver más y mejor los cálculos requeridos en los modelos de equilibrio, y desde interfaces amigables con el modelador, siempre y cuando este último cuente con el conocimiento tanto metodológico como del sitio de estudio.

Por lo anterior, nace lo que se conocerá como *modelación hidrogeoquímica*, que se define como el proceso por el cual los principios fisicoquímicos se aplican a la interpretación del origen y funcionamiento de los sistemas hidrogeoquímicos (Fagundo y González, 2012). Aun cuando existen actualmente los programas de modelación que facilitan este proceso, su desarrollo puede llevarse a cabo de forma manual si se tiene el conocimiento adecuado de las condiciones de equilibrio.

## 6.2. Tipos de modelos hidrogeoquímicos

Los modelos pueden realizarse mediante dos aproximaciones, modelación directa y modelación indirecta, las cuales se recomienda usar siempre en las condiciones más adecuadas (Fagundo y González, 2012).

### Modelación directa

Fue desarrollada con el objetivo de responder a cuestiones hipotéticas sobre las condiciones de reacción entre un líquido con determinadas características y una roca bajo condiciones experimentales restringidas por el modelador.

La modelación directa facilita obtener predicciones en la evolución de la composición del agua durante el transporte como resultado de un conjunto de reacciones químicas conocidas y dado un tipo agua inicial de composición fisicoquímica conocida.

SOLUCIÓN INICIAL + REACCIONES  
DATO DE ENTRADA → SOLUCIÓN FINAL +  
PRODUCTOS RESULTADO

Este tipo de modelación también permite la simulación de mezclas de agua de diferente composición para lograr que al final del proceso pueda compararse con agua de composición conocida y, aunque pueden no coincidir en absoluto con esta, resulta ser de gran ayuda para corroborar el grado de conocimiento que se posee de los procesos físicos y químicos que realmente ocurren en el medio.

### Modelación inversa

Es una inferencia de las reacciones que se producen entre un agua y una roca después de reaccionar y que dan origen a su composición mineralógica. Su desarrollo está basado en una estrategia determinista para la interpretación de las composiciones químicas de los cuerpos de agua. Es de gran utilidad si se cuenta con los datos necesarios para poder realizarse.

El programa calcula la cantidad neta de masa transferida entre las distintas fases del medio (líquida, sólida y gaseosa) para cada una de las reacciones específicas.

1

2

3

4

5

6

SOLUCIÓN INICIAL + REACCIONES → SOLUCIÓN FINAL  
 DATO DE ENTRADA RESULTADO DATO DE ENTRADA

Los programas que responden a este tipo de modelos pueden significar ventajas y limitaciones al efectuar el cálculo del balance de masas, por ejemplo, los programas BALANCE y NETPATH pueden calcular la transferencia de masa entre las distintas fases del medio, pero no incluyen las propiedades termodinámicas, por lo que el usuario tiene que comprobar que el estado de saturación sea coherente con respecto a las disoluciones y precipitaciones calculadas, además de solicitar análisis bien equilibrados y libres de errores analíticos.

Independientemente del software ocupado para realizar este proceso, siempre debe considerarse al interpretar los resultados, lo siguiente:

- \* Aunque en el medio real, un mismo resultado puede ser producto de diversas reacciones, la modelación inversa no permite conocer cuál de las propuestas es la más probable.
- \* Este tipo de modelación supone que el agua se encuentra en equilibrio con el medio; sin embargo, en realidad, las diferencias entre las muestras tomadas sobre la misma línea de flujo pueden corresponder a las variaciones temporales en la recarga del medio acuoso y no a reacciones con minerales.
- \* Como es una evaluación entre dos puntos de un mismo flujo, no se considera la posibilidad de que una reacción invierta su sentido a lo largo del trayecto, lo que sucede con frecuencia en la realidad.
- \* Se recomienda que en algunos casos se combinen ambos tipos de modelación, ya que ayuda a reducir la incertidumbre que genera el usar un solo tipo e incluso apoya para tener un acercamiento de comprobación.

1

2

3

4

5

6

Actualmente, se han desarrollado modelos hidrogeoquímicos clasificados en cuatro grupos:

- \* Modelos de especiación y solubilidad
- \* Modelos de balance de masa
- \* Modelos de transferencia de masa
- \* Códigos de transporte de masas químicas.

### Modelos de especiación y solubilidad

Calculan las especies acuosas y determinan el estado de saturación de las soluciones, como también la partición de un elemento entre las diferentes especies acuosas y complejos para determinar el estado de saturación en la solución, siempre que se cuente con el estudio completo del agua. No obstante, pueden existir ciertas limitaciones en dicho estudio, por lo que el agua necesita estar en condiciones de dilución  $< 0.7$  molar y, aunque no se puede modelar para condiciones de no equilibrio, ayuda a determinar si el agua está en condiciones de disolver o precipitar sólidos o gases (Fagundo y González, 2012).

Los programas de cómputo que manejan actualmente estos modelos son WATEQ4F (Ball y Nordstrom, 1991), PHREEQC (Parkhurst y Appelo, 1999), MINTEQA2 (Allison et al., 1991), EQ3/6 (Wolery, 1992), EQBRM (Anderson y Crerar, 1993), SOLVEQ, CHILLER (Reed, 1982).

### Modelos de balance de masa

Calculan reacciones a lo largo de un cauce, ayudados de datos químicos completos de todas las especies en solución, datos mineralógicos y las

posibles reacciones de transferencia de masa, y pueden definir la masa neta de minerales o gases, tanto disueltos como precipitados a lo largo de una corriente.

El modelo considera que el flujo se encuentra en estado estacionario y se requiere de un amplio conocimiento mineralógico a lo largo de la corriente, lo que puede ayudar a determinar las reacciones químicas más importantes que controlan la evolución química del agua. Asimismo, conociendo las corrientes y las velocidades de estas últimas, dicho modelo puede calcular las velocidades de reacción.

Los programas de cómputo que están dedicados a este tipo de modelos son BALANCE (Parkhurst *et al.*, 1982), NETPATH (Plummer *et al.*, 1991) y PHREEQC (Parkhurst y Appelo, 1999).

### Modelos de transferencia de masa

Muy parecidos a los procesos de especiación, estos modelos pueden calcular la partición de un elemento entre las diferentes especies acuosas y complejas, pero también los cambios causados por los procesos de transferencia de masa, que aunque comparten limitaciones en cuanto a su proceso homólogo, estos pueden predecir todo el comportamiento geológico del sistema.

PHREEQE/PHREEQC, PHRQPITZ, SOLMINEQ, MINTEQA2, MINTEQ, MINEQL y EQ3/6 son los encargados de realizar de manera simultánea modelos de especiación y solubilidad.

1

2

3

4

5

6

## Códigos de transporte de masa química

Finalmente, se cuenta con el código de transporte de masa química, que aunque maneja un modelo de flujo simple, en una sola dimensión o de carácter estacionario, su implementación puede llegar a presentar problemas numéricos significativos. Es útil para obtener un primer acercamiento de la evolución química del agua y las relaciones en modelos de masas acoplados con los flujos hidrodinámicos.

Entre los principales programas dedicados a este tipo de modelación, se encuentran de manera libre o comercial PREEQM-2D, PHREEQC y CHM-TRNS.

1

2

3

4

5

6

## Referencias bibliográficas

- Alonso, C. (2014). Termoquímica. *Química 2.º Bachillerato*. [http://www.alonsoformula.com/inorganica/\\_private/Quimica2bach04cast.pdf](http://www.alonsoformula.com/inorganica/_private/Quimica2bach04cast.pdf)
- Aparicio, F. (1989). *Fundamentos I de hidrogeología de superficie*. México: Limusa.
- Appelo, C. y Postma, D. (2005). *Geochemistry, Groundwater and Pollution*. London: CRC Press.
- Beck, K. (2020, 16 de febrero). What Are Five Examples of Chemical Weathering? *Sciencing*. <https://sciencing.com/five-examples-chemical-weathering-5627796.html>
- Carpi, A. (2003). Ácidos y Bases: Una Introducción. VisionLearning. <https://www.visionlearning.com/es/library/Qu%C3%ADmica/1/%C3%81cidos-y-Bases/58>
- Castaños, E. (2015, 24 de junio). Relación entre las constantes del equilibrio. Blog Cienciadelux. <https://cienciadelux.com/2015/06/24/relacion-entre-las-constantes-de-equilibrio/>
- Castillo, S. (2017). *Cinética Química*. UNAM. Facultad de Química. [http://depa.fquim.unam.mx/amyd/archivero/CQ1\\_348.pdf](http://depa.fquim.unam.mx/amyd/archivero/CQ1_348.pdf)
- Chang, R. y Goldsby, K. (2016). *Química*. Ciudad de México: McGraw Hill.
- Comisión Nacional del Agua (CONAGUA). (2006). El ciclo del agua. Departamento Didáctica de las Ciencias Experimentales. [http://www.capa.gob.mx/cultura/pdfs/ciclo\\_agua.pdf](http://www.capa.gob.mx/cultura/pdfs/ciclo_agua.pdf)
- Fagundo, J. y González, P. (2005). Hidrogeoquímica. Centro Nacional de Medicina Natural y Tradicional (CENAMENT). Ministerio de Salud Pública. La Habana. <https://docplayer.es/29994859-Hidrogeoquimica-juan-reynerio-fagundo-castillo-patricia-gonzalez-hernandez.html>

1

2

3

4

5

6

- Garasic, M. y Garasic, D. (2015). Speleogenesis in Dinaric karst área. *Geophysical Research Abstracts* Vol. 17, EGU2015-10058, EGU General Assembly. <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2015EGUGA..1710058G/abstract>
- Geoinnova. (2015, 25 de marzo). La extracción de agua subterránea acelera el aumento del nivel del mar. <https://geoinnova.org/blog-territorio/la-extraccion-de-agua-subterranea-acelera-el-aumento-del-nivel-del-mar/>
- Gilli, E., Mangan, C. y Mudry, J. (2003). *Hydrogeology, objectives, methods, applications*. CRC Press.
- Graham, S., Parkinson, C. y Chaine, Mous. (2010, 1 de octubre). A Multi-Phased Journey. *The Water Cycle*. The Earth Observatory NASA. <https://earthobservatory.nasa.gov/features/Water/page2.php>
- Hidrolog. (s. f.). Formaciones geológicas. En *Perfilaje geofísico*. <http://www.hydrolog.com.br/espanhol/conteudo/index/formacoes-geologicas>
- Hiru.eus. (2014). Reacciones ácido-base. Concepto y Teorías. Departamento de Educación. Gobierno Vasco Sitio web: <https://www.hiru.eus/es/quimica/reacciones-acido-base-concepto-y-teorias>
- INEGI. (2018). Zona hidrológica San Luis Potosí. Agosto 2020, de MAPAS <https://www.inegi.org.mx/temas/hidrologia/default.html#Descargas>
- Jones, S. y Or, D. (1999, abril). Microgravity effects on water flow and distribution in unsaturated porous media: Analyses of flight experiments. *Water Resources Research*, Vol. 35, No. 4, 929–942. [https://www.researchgate.net/publication/11803815\\_Microgravity\\_Effects\\_on\\_Water\\_Flow\\_and\\_Distribution\\_in\\_Unsaturated\\_Porous\\_Media\\_Analyses\\_of\\_Flight\\_Experiments](https://www.researchgate.net/publication/11803815_Microgravity_Effects_on_Water_Flow_and_Distribution_in_Unsaturated_Porous_Media_Analyses_of_Flight_Experiments)
- Llopis, N. (2005). *Fundamentos de hidrogeología cárstica*. Madrid: Blume.
- Martín, T. y Serrano, A. (2014, octubre). Primer principio de la termodinámica. En *Curso de Física Básica*. Universidad Politécnica de Madrid. Consultado en julio de 2020 de <http://www2.montes.upm.es/dptos/digfa/cfisica/termo1p/primerp.html>

1

2

3

4

5

6

- Mathe, L. (2014). Hidrología. [Presentación PPT Video]. Universidad tecnológica de Santiago <https://slideplayer.es/slide/136379/>
- Montenegro, H. y Malagón, D. (1990). *Propiedades físicas de los suelos*. Bogotá: Instituto Geográfico Agustín Codazzi (IGAC).
- Mota, A. (2011). Química de las aguas naturales. En *Química del medio ambiente. Parte II. El agua*. Universidad de Granada. <https://www.ugr.es/~mota/Parte2-Tema06.pdf>
- Motta, B., Bendeck, M., Correa, A., Marulanda, J., Montenegro, H., y Rodríguez, C. (1990). *Métodos analíticos del laboratorio de suelos*. Bogotá: Ministerio de Hacienda y Crédito Público; Instituto Geográfico Agustín Codazzi (IGAC).
- Peón, J. (2015). Curso de Cinética Química. Laboratorio de Química. UNAM. <https://www.iquimica.unam.mx/dr-jorge-peon-peralta>
- Pérez, I. (2016). Agua, pH y equilibrio químico. Ciudad de México: Subsecretaría de Educación Media Superior.
- Portal Educativo. (2019). Representación de la relación entre calor, trabajo y energía interna. Julio 2020, de Educación España <https://www.portaleducativo.net/tercero-medio/20/energia-calor-y-trabajo>
- Pozas, A., Martín, R., Rodríguez, Á., Ruiz, A. y Vasco, A. (2016). Química 2 Bachillerato. Madrid: McGraw-Hill Interamericana.
- Rivas, P. (2014). Escorrentía (Escurrimiento). Mayo 2020, de SlideShare. <https://slideplayer.es/slide/5517857/>
- Smith, N. (2018, 26 de abril). Earth Right Now: What Is Up With Earth's Water Resources? UCET. <https://ucet.org/earth-right-now-what-is-up-with-earths-water-resources/>
- Tarback, E. (2012). *Ciencias de la Tierra: una introducción a la geología física*. Londres: Pearson Education.
- Tarback, E. y Lutgens, F. (2005). *Ciencias de la Tierra. Una introducción a la geología física*. 8ª. Madrid: Pearson.
- Tikhomirov, V. (2016). *Hydrogeochemistry. Fundamentals and Advances*. Wiley-Scrivener.

1

2

3

4

5

6

Todd, D., y Mays, L. (2005). *Groundwater Hydrology*. 3th.. Hoboken, NJ.: WILEY.

TP-Laboratorio Químico. (2020). Concepto de pH. En *Química General*. Portal de Contenidos Educativos de Química General y Laboratorio Químico <https://www.tplaboratorioquimico.com/quimica-general/acidos-y-bases/concepto-de-ph.html>

USGS. (2020). USGS Water Data for the Nation. Mayo 2020, de Agencia de Geología de Estados Unidos. <https://waterdata.usgs.gov/nwis>

### Imágenes diseñadas por la Unidad de Apoyo Editorial

Figura 2.3: Díaz-Ferro, N. (2022, diciembre). Ciclo hidrológico. [JPG, 3300 × 2097 px]. Universidad Nacional Autónoma de México, Facultad de Ingeniería. Archivo de imágenes UDAE.

Figura 2.10: Díaz-Ferro, N. (2022, diciembre). Medios de extracción del agua. [JPG, 3300 × 2325 px]. Universidad Nacional Autónoma de México, Facultad de Ingeniería. Archivo de imágenes UDAE.

Figura 4.1: Díaz-Ferro, N. (2022, diciembre). Ciclo de las rocas. [JPG, 3300 × 2450 px]. Universidad Nacional Autónoma de México, Facultad de Ingeniería. Archivo de imágenes UDAE.

1

2

3

4

5

6



*Apuntes de hidrogeoquímica*  
se publicó de manera provisional  
en el repositorio de la Facultad  
de Ingeniería en enero de 2023.  
Primera edición provisional electrónica de un  
ejemplar (6 MB) en formato PDF.

El cuidado de la edición y diseño estuvieron  
a cargo de la Unidad de Apoyo Editorial de la  
Facultad de Ingeniería. Las familias tipográficas  
utilizadas son Bree y Noto Serif con  
sus respectivas variantes.