



Fundamentos de Hidrogeoquímica

Luis Antonio García Villanueva

Universidad Nacional Autónoma de México
Facultad de Ingeniería

Fundamentos 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

FUNDAMENTOS DE HIDROGEOQUÍMICA
García Villanueva, Luis Antonio
Universidad Nacional Autónoma de México
Facultad de Ingeniería
2024, 249 págs.

FUNDAMENTOS DE HIDROGEOQUÍMICA

Primera edición electrónica provisional
de un ejemplar (9 MB) en formato PDF
Publicado en línea: febrero de 2024

D.R. © 2024, 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 e ilustraciones: Nismet Díaz Ferro
Foto de portada: Nuraghies, Freepik

Introducción

1

El agua es un recurso natural de mayor presencia en el mundo, pero además de eso, es el recurso fundamental y vital para la existencia de la vida como la conocemos en sus diferentes cambios evolutivos.

2

Se puede encontrar en cualquiera de sus fases y en diferentes sitios: los mares y océanos, los casquetes polares; superficial en ríos, lagos, lagunas, manantiales; de manera subterránea, y en nubosidad y lluvia. Por lo tanto, de alguna manera, en todo lo que existe en el planeta está presente el agua y es precisamente por el ciclo hidrológico.

3

Dentro de esta evolución, el agua tiene una interacción importante con el medio rocoso de la corteza terrestre, donde se generan reacciones químicas que van determinando su composición mineralógica, sin embargo, conforme se va desplazando va cambiando. A lo anterior, se suma la actividad antropogénica como otro factor que afecta directamente a este cambio en la composición de los iones disueltos en el agua.

4

Para identificar la evolución de la calidad del agua, se cuenta con análisis químicos que proporcionan información sobre los cambios que esta ha sufrido, lo cual es una parte que se integra a los diferentes estudios para comprender el flujo regional.

5

6

7

Al respecto, la ciencia que estudia el origen de los componentes presentes en el agua, la evolución química de los cauces de agua superficial y subterráneo, así como su clasificación es la hidrogeoquímica.

La hidrogeoquímica es el resultado de la relación interdisciplinaria entre la hidrogeología y la geoquímica, cuyos desarrollos teóricos fundamentan su aplicación como una herramienta para estudios ambientales que permitan conocer e identificar el origen de contaminación del agua.

No hay que cometer el error de considerar que la hidrogeoquímica es lo mismo que la hidrogeología, más bien, hay que considerar que son un complemento para dar alternativas de solución a problemas ambientales de manera puntual.

1

2

3

4

5

6

7

Contenido

Introducción	III
1. Propiedades fisicoquímicas del agua y su análisis químico	1
1.1 El agua en el medio ambiente	1
1.2 Molécula del agua	4
1.3 Principales contaminantes del agua naturales y antropogénicos. . . .	6
1.4 Expresiones de concentración	11
1.5 Propiedades físicas del agua	21
1.6 Propiedades químicas del agua	25
1.7 Análisis químico del agua	37
2. Hidrología	79
2.1 El agua en la Tierra	79
2.2 Ciclo del agua y la hidrología	82
2.3 El suelo y relación con el agua	91
2.4 Agua superficial y subterránea	100
2.5 Agua mineral y termal	107
3. Química del agua	109
3.1 Solubilidad de minerales	109
3.2 Disolución de minerales	112
3.3 Disolución de gases	115

3.4 Composición química del agua por la interacción con el medio rocoso	122
3.5 Relaciones iónicas	129
3.6 Representaciones gráficas de la composición fisicoquímica del agua	134
3.7 Clasificación del agua	143
3.7.1 Geológico.	144
3.7.2 Sistemas Karsticos	144
3.7.3 Hidroquímico	148
– Clasificación de Alekine	149
– Clasificación de Shchoukarev	150
– Clasificación de Palmer	150
– Clasificación de Scholler	151
4. Equilibrio químico	153
4.1 Constante de equilibrio químico.	153
4.2 Relación del equilibrio químico y la solubilidad	159
4.3 Disolución de minerales solubles	162
4.4 Equilibrio químico de los carbonatos.	163
4.5 Relación cinética y equilibrio químico.	165
5. Procesos hidrogeoquímicos.	170
5.1 Hidrogeoquímica.	170
5.2 Procesos de óxidoreducción	174
5.3 Procesos de adsorción	179
5.4 Procesos de intercambio iónico	186
6. Modelación hidrogeoquímica	189
6.1 Modelación hidrogeoquímica y tipos de modelos	189
6.2 Modelación directa	191
6.3 Modelación inversa	195

6.4 Modelos de especiación química	197
6.5 Modelos de transferencia de masa	204
6.6 Modelos comerciales de balance de masa	206
7. Isótopos en el medio hidrológico	208
7.1 Isótopos en el medio ambiente: agua y suelo	208
7.2 Radiactividad y su decaimiento	218
7.3 Composición de isótopos estables y sus aplicaciones	228
7.4 Variación de isótopos	232
7.5 Isótopos presentes en el medio acuoso	237
Referencias bibliográficas	239

1

Propiedades fisicoquímicas del agua y su análisis químico

1.1 El agua en el medio ambiente

El agua es el recurso más importante para que la vida humana pueda existir, así como de otros factores que harán propicia la vida en determinado ecosistema. Por esta razón, los seres humanos dependemos de la disponibilidad del agua y esto no queda sujeto únicamente al agua destinada para consumo doméstico, sino también tiene gran repercusión en el funcionamiento y continuidad de las actividades agrícolas e industriales.

Debido a la alta demanda de alimentos en las últimas décadas, ha surgido la necesidad de producir una mayor cantidad tanto de alimentos como de energías. De igual forma, se requiere incrementar el abastecimiento y dotación de agua potable a una población que con el paso del tiempo va aumentando de manera considerable.

Sin embargo, la demanda y consumo del agua puede presentar una serie de problemas que dificultarán la posibilidad de usar este líquido, por ejemplo, su alto grado de contaminación, ya que de no poseer la calidad adecuada podría tener implicaciones negativas agravando el problema de escasez. Los cuerpos de aguas superficiales y subterráneos presentan una facilidad relativa para ser contaminados, esto se da por las descargas que no tienen un tratamiento previo, provenientes tanto de aguas municipa-

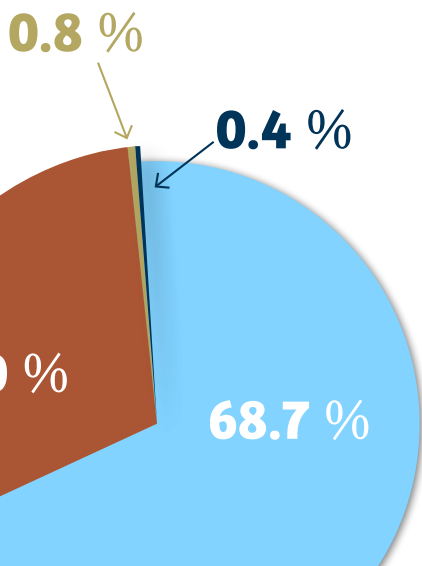
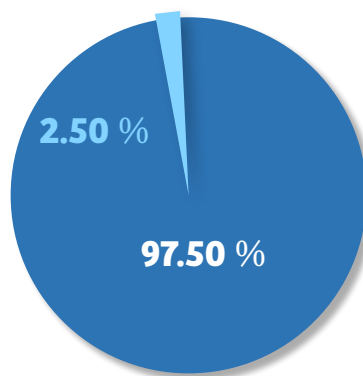
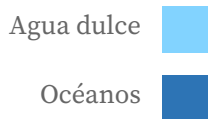
les como industriales, así como los arrastres cuyo origen son las zonas que practican actividades agrícolas y pecuarias.

El agua dulce en el mundo

Se estima que alrededor de 1400 millones de kilómetros cúbicos del planeta Tierra son cuerpos de agua, pero de estos únicamente el 2.5% corresponde a agua dulce (PNUMA, 2007). Este pequeño porcentaje está presente principalmente en ríos, lagos, glaciares, mantos de hielo y acuíferos, lo cual se puede apreciar en las figuras 1.1, 1.2 y 1.3.

Figura 1.1 Gráfica del agua existente en el planeta (Datos de PNUMA)

Agua existente en el planeta



Agua dulce disponible

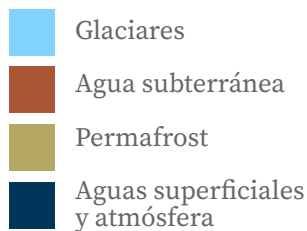
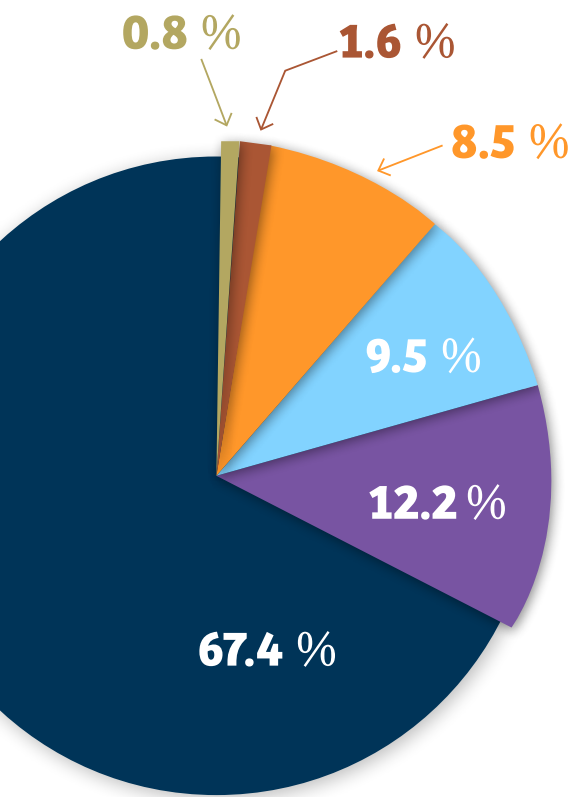


Figura 1.2 Fuentes de agua dulce disponible en el planeta (Datos de PNUMA)



Cuerpos de agua superficiales o en la atmósfera

- Lagos de agua dulce
- Humedad del suelo
- Atmósfera
- Otros humedales
- Ríos
- Plantas y animales

Figura 1.3 Cuerpos de agua dulce superficiales o en la atmósfera (Datos de PNUMA)

En el mundo, existe una reserva de agua dulce que incluye tanto el agua subterránea como la superficial: Centroamérica cuenta con el 1.5% de la reserva mundial, mientras que Sudamérica es la región cuyos recursos hídricos renovables son los mayores con un 31.8% de la reserva total; en segundo lugar, Asia con un 28.9%, seguido de Europa con un 13.9%.

La disponibilidad del agua en cada región o país está ligada íntimamente al balance de agua que presenta la región o país del que se esté hablando. El balance de agua no es más que el volumen de precipitación que recibió la región menos el volumen evaporado de los cuerpos de agua sumado a la evapotranspiración de los vegetales. Dicho de otra forma, el volumen que resta después de las pérdidas ocasionadas por la evaporación y la evapotranspiración de los vegetales terminarán dirigiéndose ya sea a un cuerpo de agua superficial o a la recarga de los acuíferos subterráneos.

Considerando lo anterior, es necesario prestar especial atención en la contaminación y escasez del agua porque ambas situaciones plantean amenazas para la calidad de vida y la salud humana. Es por esto que el libre flujo de un agua no contaminada resulta clave para el sostenimiento de todos los ecosistemas, ya que de alguna forma u otra, todos dependemos del agua.

1.2 Molécula del agua

La molécula del agua es la más abundante en los seres vivos, puesto que esta representa entre el 70% y 90% del peso que estos posean. A diferencia de otras moléculas, el agua mantiene una forma líquida a temperatura ambiente, esto se debe principalmente a la composición de la molécula.

El agua da la impresión de ser una sustancia relativamente simple, sin embargo, su molécula se compone de dos átomos de hidrógeno y un átomo de oxígeno con enlaces polares. Esta molécula tiene forma de una “V” y un ángulo de 104.5° aproximadamente entre cada enlace de oxígeno e hidrógeno, como se muestra en la figura 1.4, lo cual hace que esta molécula polar pueda unirse a otras sustancias polares con cierta facilidad.

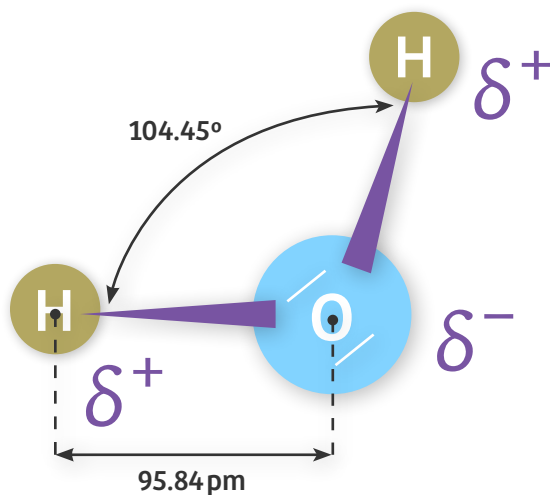


Figura 1.4 Molécula del agua. (Fuerzas Intermoleculares)

Esta geometría es debida a los ocho electrones de valencia, puesto que dos pares corresponden a los enlaces de oxígeno-hidrogeno y los otros dos pares no tienen participación alguna, esto hace que se consideren como “pares libres”.

El agua tiene la notable característica de encontrarse en el estado sólido, líquido y gaseoso en la naturaleza, lo cual constituye una propiedad única; además, otra de sus propiedades es su capacidad como disolvente de sustancias polares, como el amoniaco y el etanol.

Es importante describir el comportamiento de la partícula del agua en los tres estados en que puede presentarse (figura 1.5):

- * **Estado sólido:** las partículas se encuentran fuertemente ligadas entre ellas, además de que el agua toma la forma del recipiente que la contenga. El agua adquiere este estado a la temperatura de 0 °C o menores.
- * **Estado líquido:** las partículas ya no tienen un orden, porque están muy cercas unas de otras, lo que convierte al líquido prácticamente incompresible.
- * **Estado gaseoso:** la distancia entre moléculas es grande, el vapor ocupa todo el espacio del recipiente sin tener forma ni volumen fijo, además de que por ser un gas es técnicamente compresible.

1

2

3

4

5

6

7

5

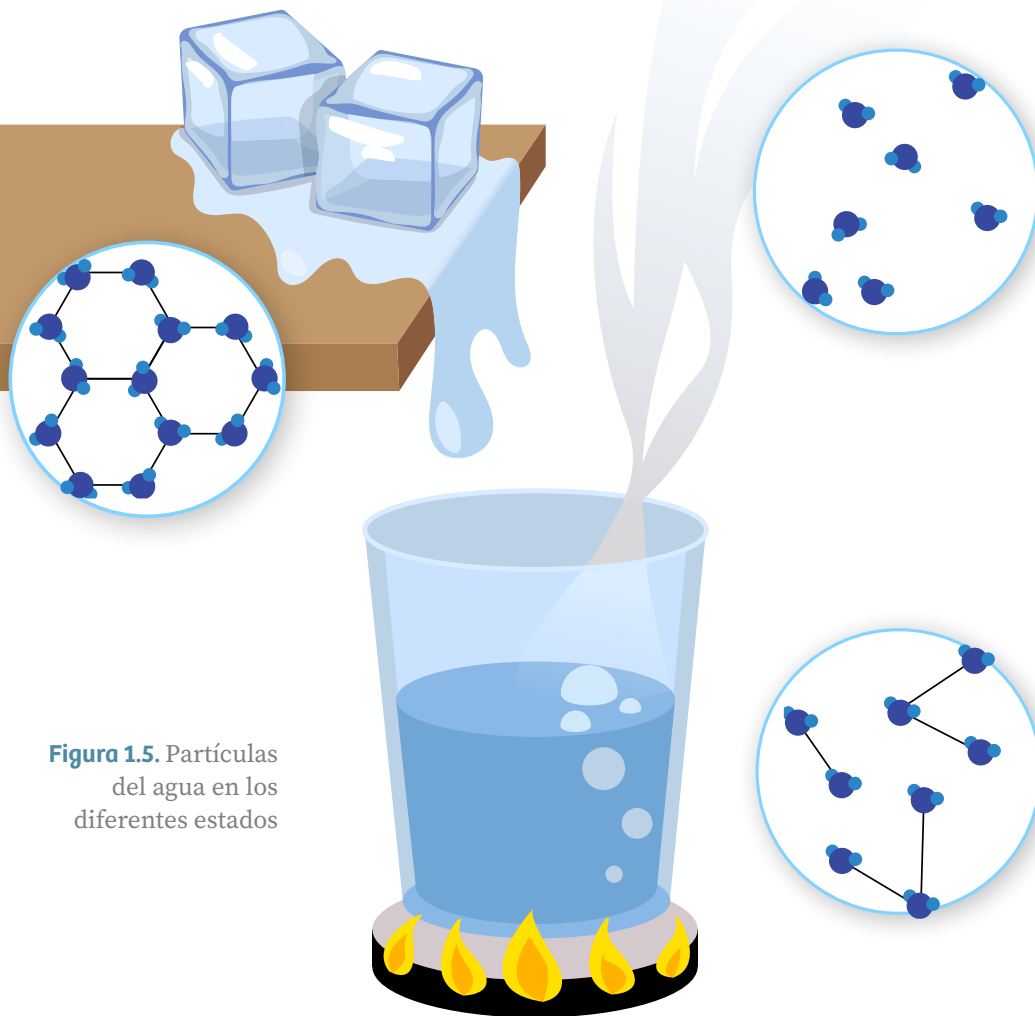


Figura 1.5. Partículas del agua en los diferentes estados

1.3 Principales contaminantes del agua: naturales y antropogénicos

De acuerdo con la Organización Mundial de la Salud, se denomina *agua contaminada* a toda aquella que, por presencia de materia de distinto orden, es inservible para la realización de actividades a las que estaba destinada. Su contaminación se puede adjudicar a dos causas principales: las naturales y las antropogénicas.

La *contaminación natural del agua* se debe a procesos o fenómenos que ocurren dentro de la naturaleza y que inciden en las propiedades con las que contará el agua después de ello, por lo que el agua natural siempre contará con componentes orgánicos e inorgánicos que pueden contaminarla, aunque no haya intervención humana. Respecto a la contaminación natural, se puede decir que esta ocurre de manera generalizada alrededor del mundo y casi siempre en concentraciones bajas.

1

Por otro lado, la *contaminación antropogénica del agua* se origina a través de actividades humanas que afectan directamente la composición de este líquido, haciéndola inútil al uso a la que estaba destinada. Asimismo, la contaminación de este tipo ocurre en sitios específicos vinculados con zonas asignadas a actividades humanas, tales como industrias, espacios de ganadería o agricultura, principalmente; además se presentan en concentraciones elevadas respecto a las aguas contaminadas por causas naturales.

2

3

Principales contaminantes

4

Los principales contaminantes del agua se clasifican de acuerdo con sus propiedades y naturaleza, que pueden tener fuentes naturales o antropogénicas de contaminación, por lo que es importante saber cómo pueden contaminarse en cada una de ellas.

5

Microorganismos patógenos

6

Virus, bacterias, protozoarios y todo aquel microorganismo que sea capaz de transmitir enfermedades a humanos y animales. Entre las enfermedades más destacadas, están el cólera, hepatitis y el tifus, las que a su vez

7

7

hasta el día de hoy provocan muertes prematuras, sobre todo en países en vías de desarrollo.

- * Fuentes antropogénicas: heces y restos orgánicos de personas infectadas, desprendimiento de masas de hielo por el aumento de la temperatura.
- * Fuentes naturales: desprendimientos de masas de hielo por fenómenos naturales.

Compuestos orgánicos

Gasolina, plásticos, petróleo, disolventes y plaguicidas, principalmente, que por su naturaleza se desintegran lentamente y constituyen productos sintéticos. Su estructura molecular es compleja y poco atractiva para microorganismos.

- * Fuentes antropogénicas: industrias y espacios urbanos, aguas de escorrentía y de precipitación.



Figura 1.6. Contaminación del Lago de Maracaibo. (Wilfredo, licencia Creative Commons CC BY-NC-ND 2.0, s.f).

Sustancias químicas inorgánicas

Ácidos, sales y metales, como el mercurio o el plomo. En grandes cantidades, dichas sustancias son nocivas para los seres vivos.

- * Fuentes antropogénicas: actividades mineras, *fracking*, siderurgia, lluvia ácida, sales inorgánicas vertidas por actividades humanas.



Figura 1.7.
Mina Sur de
Chuquibambilla
Chile. (Tenneco,
2007).

Sedimentos y materiales en suspensión

Partículas provenientes del suelo y mezcladas por el paso del agua. En aspectos generales, constituyen el contaminante de agua con mayor cantidad.

- * Fuentes antropogénicas: erosión acelerada producto de actividades humanas, actividades de construcción.
- * Fuentes naturales: erosión.

Contaminación térmica

Se refiere al agua que incrementa su temperatura por acciones humanas, lo cual provoca una disminución del oxígeno disuelto y una alteración en los procesos biológicos de los organismos que se encuentren en el agua.

- * Fuentes antropogénicas: agua caliente liberada por industrias o centros de energía y calentamiento global, deforestación.
- * Fuentes naturales: actividad volcánica, rayos solares y actividad geotérmica del fondo de los océanos o mares.



Figura 1.8 Central geotérmica en Islandia. (Creative Commons, 2010)

Sustancias radiactivas

Concentración negativa de sustancias radiactivas, las cuales provienen de isótopos de naturaleza radiactiva y que pueden irse acumulando hasta alcanzar cantidades más altas que los presentes de forma natural.

- * Fuentes antropogénicas: actividades mineras, uso de armamento bélico, centrales nucleares.

1.4 Expresiones de concentración

Una concentración de una solución es la cantidad relativa de soluto presente en una solución, en donde el soluto es la sustancia que se disuelve. Por lo que, si se desea concentrar una solución, se debe agregar más soluto o reducir la cantidad de solvente.

A continuación, se describen varios métodos para calcular la concentración de soluciones.

1. Porcentaje en masa

Es la cantidad de soluto en gramos que está presente en 100 gramos de solución, se puede expresar de las siguientes formas:

$$\begin{aligned}\% \text{ de masa} &= \frac{\text{masa del soluto}}{\text{masa de la solución}} \times 100 \\ &= \frac{\text{masa del soluto}}{\text{masa del soluto} + \text{masa del solvente}} \times 100 \\ &= \frac{\text{masa del soluto}}{\text{volumen de la solución} + \text{densidad de la solución}}\end{aligned}$$

2. Porcentaje de volumen

Es el volumen de soluto en mL presente en 100 mL de solución, que se expresa de la siguiente forma:

$$\% \text{ de volumen} = \frac{\text{volumen del soluto}}{\text{volumen de la solución}} \times 100$$

Por lo tanto, una solución al 10% de HCl en volumen significa que hay 10 ml de HCl en 100 ml de la solución.

3. Masa por porcentaje de volumen

Es la masa de soluto presente en 100 mL de solución que puede ser calculada usando el porcentaje de volumen:

$$\text{Masa por \% de volumen} = \frac{\text{masa del soluto}}{\text{volumen de la solución}} \times 100$$

Por lo tanto, una solución al 10% de masa por volumen significa que hay 10 g de soluto en 100 ml de solución.

4. Molaridad

Es el número de moléculas gramo del soluto presente en un litro de la solución, se expresa de la siguiente forma:

$$\text{Molaridad (M)} = \frac{\text{moles de soluto}}{\text{volumen de la solución en L}}$$

Es decir, si se tiene 1 mol L^{-1} de solución de KCl, significa que 1 mol de KCl se disuelve en 1 L de agua.

5. Molalidad

Es el número de moles de soluto disueltos en 1 kg de disolvente:

$$\text{Molalidad (m)} = \frac{\text{moles de soluto}}{\text{masa del solvente en kg}}$$

Por lo tanto, si hay una molécula de gramo de un soluto en 1 kg de disolvente, la concentración de la solución es 1 molal.

6. Normalidad

Es el número de equivalentes gramo de soluto disueltos en un litro de solución:

$$\text{Normalidad (N)} = \frac{\text{\# de equivalentes gramo soluto}}{\text{volumen de la solución en L}}$$

Es decir, si un gramo equivalente de un soluto se encuentra presente en un litro de la solución, la concentración de la solución es 1 normal.

7. Fracción molar (X)

La fracción molar de cualquier componente de una solución es la relación entre el número de moles de ese componente y el número total de moles de todos los componentes. La fracción molar total de todos los componentes de cualquier solución es 1, se expresa de la siguiente forma:

$$\text{Fracción molar de A (X}_A\text{)} = \frac{n_A}{n_A + n_B}$$

$$\text{Fracción molar de B (X}_B\text{)} = \frac{n_B}{n_A + n_B}$$

Por lo tanto:

$$Y, X_A + X_B = 1$$

8. Partes por millón (ppm)

Son las partes de un componente por millón de partes de la solución. Es usado comúnmente cuando un soluto está presente en cantidades muy bajas, se expresa de la siguiente forma:

$$ppm = \frac{\text{masa del soluto}}{\text{masa de la solución}} \times 10^6$$

9. Formalidad

Es el número de peso-fórmula-gramo por litro de disolución.

$$F = \frac{\# PFG}{\text{volumen de la solución en L}}$$

Ejercicios

Porcentaje en masa:

- a) Algunos refrescos en la actualidad con 11% de masa de azúcar en su preparación, determinar cuántos gramos contendrá una botellita de refresco “Yoli” con 600 gramos de refresco.

1

2

3

4

5

6

7

Datos	Ecuación	Sustitución
$\% m_{\text{soluto}} = 11$	$\% m_{\text{soluto}} = \frac{m_{\text{soluto}}}{m_{\text{disolución}}} \times 100$	$m_{\text{soluto}} = \frac{11 \% \times 600 \text{ g}}{100 \%}$
$m_{\text{soluto}} = X$	Despejamos	Resultado = 66 g
$m_{\text{disolución}} = 600 \text{ g}$	$m_{\text{soluto}} = \frac{\% m_{\text{soluto}} \times m_{\text{disolución}}}{100}$	

- b) Determinar el porcentaje en masa de un “vida suero oral” que contiene 45 gramos de sal en 225 gramos de disolución.

Datos	Ecuación	Sustitución
$\% m_{\text{soluto}} = X$	$\% m_{\text{soluto}} = \frac{m_{\text{soluto}}}{m_{\text{disolución}}} \times 100$	Resultado = 20 %
$m_{\text{soluto}} = 45 \text{ g}$	Sustitución	
$m_{\text{disolución}} = 225 \text{ g}$	$\% m_{\text{soluto}} = \frac{45 \text{ g}_{\text{soluto}}}{225 \text{ g}_{\text{disolución}}} \times 100$	

Porcentaje en volumen:

- c) Se sabe que el vinagre es una disolución de ácido acético en agua, si al preparar 750 ml de vinagre se utilizan 37.5 ml de ácido acético. Determinar el por ciento en volumen de ácido acético.

1

2

3

4

5

6

7

Datos	Ecuación	Resultado = 5 %
$\% V_{\text{soluto}} = X$	$\% V_{\text{soluto}} = \frac{V_{\text{soluto}}}{V_{\text{disolución}}} \times 100$	
$V_{\text{soluto}} = 37.5 \text{ mL}$	Sustitución	
$V_{\text{disolución}} = 750 \text{ mL}$	$\% V_{\text{soluto}} = \frac{37.5 \text{ mL}}{750 \text{ mL}} \times 100$	

1

2

3

4

- d) En la Facultad de Ingeniería se tomaron a dos estudiantes, uno había consumido una cerveza con un volumen de 355 ml y con un porcentaje de alcohol de 5.3, el otro había tomado una copa de ron con un volumen de 35 ml con una concentración de alcohol del 39%, ellos festejaban su buena calificación en TAR (Tratamiento de aguas residuales). Pero ¿Quién ingirió más alcohol?

Persona A

Datos	Ecuación	Sustitución
$\% V_{\text{soluto}} = 5.3 \%$	$V_{\text{soluto}} = \frac{V_{\text{soluto}}}{V_{\text{disolución}}} \times 100 \%$	$V_{\text{soluto}} = \frac{5.3 \% \times 355 \text{ mL}}{100 \%}$
$V_{\text{soluto}} = X$	Despejamos V_{soluto}	Resultado = 66 g
$V_{\text{disolución}} = 355 \text{ mL}$	$V_{\text{soluto}} = \frac{\% V_{\text{soluto}} \times V_{\text{disolución}}}{100}$	

5

6

7

Persona B

Datos	Ecuación	Sustitución
mL % $V_{\text{soluta}} = 39 \%$	$\% V_{\text{soluta}} = \frac{V_{\text{soluta}}}{V_{\text{disolución}}} \times 100$	$\% V_{\text{soluta}} = \frac{39 \% \times 35 \text{ mL}}{100 \%}$
$V_{\text{soluta}} = X$	Despejamos V_{soluta}	Resultado = 13.65 mL
$V_{\text{disolución}} = 35 \text{ mL}$	$V_{\text{soluta}} = \frac{\% V_{\text{soluta}} \times V_{\text{disolución}}}{100}$	

1

2

3

Molaridad:

- e) Calcular la molaridad de 5 gramos de ácido sulfúrico (H_2SO_4) en una disolución de 200 cm^3 .

Datos:

Pesos atómicos: S = 32 O = 16 H = 1

Ahora, calculando el peso molecular:

$$\text{H}_2\text{SO}_4 = (2 * 1) + (32 + 4 * 16) = 98 \frac{\text{gramos}}{\text{mol}}$$

Calculando moles de ácido sulfúrico:

$$\text{moles de H}_2\text{SO}_4 = \frac{\text{masa H}_2\text{SO}_4}{\text{peso molecular}} = \frac{5}{98} = 0.051 \text{ moles}$$

Calculando molaridad:

$$\text{Molaridad H}_2\text{SO}_4 = \frac{\text{moles H}_2\text{SO}_4}{\text{Volumen de disolución}} = \frac{0.051}{0.2} = 0.255 \text{ M}$$

4

5

6

7

- f) la molaridad de una disolución formada al disolver 12 gramos de hidróxido de calcio $\text{Ca}(\text{OH})_2$ en 200 gramos de agua, si la densidad de esta disolución es de 1050 kg/m^3

Datos:

Pesos atómicos: Ca = 40 O = 16 H = 1

Ahora, calculando el peso molecular:

$$\text{Ca}(\text{OH})_2 = (40 + 2 * 16)(2 * 1) = 74 \frac{\text{gramos}}{\text{mol}}$$

Calculando moles del soluto:

$$\text{moles del soluto} = \frac{\text{masa del soluto}}{\text{peso molecular}} = \frac{12}{74} = 0.162 \text{ moles}$$

Calculando la masa total de disolución:

$$\text{Masa total} = 12 + 200 = 212$$

Para volumen de disolución:

$$1050 = \frac{\text{Kg}}{\text{m}^3} = 1050 \frac{\text{g}}{\text{l}}$$

$$\text{Por lo tanto: } 212 \text{ g} * \frac{1 \text{ litro de disolución}}{1050 \text{ g}} = 0.202 \text{ litros de disolución}$$

Calculando molaridad:

$$\text{Molaridad Ca}(\text{OH})_2 = \frac{\text{moles del soluto}}{\text{Volumen de disolución}} = \frac{0.162}{0.202} = 0.8 \text{ M}$$

1

2

3

4

5

6

7

Molalidad:

- g) Calcular la molalidad de una disolución de 95 gramos de ácido nítrico (HNO_3) en 2.5 litros de agua.

$$\text{Peso molecular de } \text{HNO}_3 = (31 + 14 + 3 * 16) = 63 \frac{\text{g}}{\text{mol}}$$

$$\text{moles de } \text{HNO}_3 = \frac{\text{cantidad de } \text{HNO}_3}{\text{peso molecular } \text{HNO}_3} = \frac{95}{63} = 1.51 \text{ moles}$$

Tenemos el peso del disolvente: 2.5 litros = 2.5 Kg

$$\text{Molalidad} = \frac{\text{moles } \text{HNO}_3}{\text{Kg de disolvente}} = \frac{1.51}{2.5} = 0.255 \text{ m}$$

- h) Calcular los gramos de metanol (CH_3OH) en una disolución 15 molal donde el disolvente son 50 gramos de agua.

$$\text{Peso molecular de } \text{CH}_3\text{OH} = (12 + 3 * 1 + 16 + 1) = 32 \frac{\text{g}}{\text{mol}}$$

$$\text{Molalidad} = \text{moles de } \text{CH}_3\text{OH} * \text{volumen de disolución} = 15 * 0.05 = 0.75 \text{ m}$$

$$\text{Moles de } \text{CH}_3\text{OH} = \frac{\text{cantidad de } \text{CH}_3\text{OH}}{\text{peso molecular } \text{CH}_3\text{OH}} = \text{masa de } \text{CH}_3\text{OH} =$$

$$= 0.75 * 32 = 24 \text{ g}$$

Normalidad:

- i) Calcular la normalidad de 50 gramos de Na_2CO_3 en 100 ml de disolución.

Calculando peso molecular:

$$\text{Peso molecular de } \text{CH}_3\text{OH} = (12 + 3 * 1 + 16 + 1) = 32 \frac{\text{g}}{\text{mol}}$$

$$\text{Molalidad} = \text{moles de } \text{CH}_3\text{OH} * \text{volumen de disolución} = 15 * 0.05 = 0.75 \text{ m}$$

$$\text{Moles de } \text{CH}_3\text{OH} = \frac{\text{cantidad de } \text{CH}_3\text{OH}}{\text{peso molecular } \text{CH}_3\text{OH}} = \text{masa de } \text{CH}_3\text{OH} =$$

$$= 0.75 * 32 = 24 \text{ g}$$

- j) Calcular la normalidad de 20 gramos de hidróxido de berilio $\text{Be}(\text{OH})_2$ en 700 ml de disolución.

$$\text{Peso molecular } \text{Be}(\text{OH})_2 = 43 \frac{\text{g}}{\text{mol}}$$

$$\text{Equivalente del } \text{Be}(\text{OH})_2 = \frac{\text{peso molecular}}{\text{No. de carga del OH}} = \frac{43}{2} = 21.5$$

$$\text{No. de equivalentes en 20 g de } \text{Be}(\text{OH})_2 = \frac{20}{21.5} = 0.93$$

$$\text{N} = \frac{\text{No. de equivalentes}}{\text{litros de disolución}} = \frac{0.93}{0.7} = 1.33 \text{ N}$$

Fracción molar:

- k) Calcular la fracción molar de cada una de las sustancias de la disolución de 10 moles de metanol, 1 mol de etanol y 8 moles de agua.

No. total de moles: $10 + 1 + 8 = 19$

$$x_{\text{metanol}} = \frac{n_{\text{metanol}}}{n_{\text{total}}} = \frac{10}{19} = 0.53$$

$$x_{\text{etanol}} = \frac{n_{\text{etanol}}}{n_{\text{total}}} = \frac{1}{19} = 0.05$$

$$x_{\text{agua}} = \frac{n_{\text{agua}}}{n_{\text{total}}} = \frac{8}{19} = 0.42$$

1.5 Propiedades físicas del agua

El agua es un líquido inoloro, incolora e insípido, tiene cualidades especiales que la hacen muy importante para los seres vivos entre ellas se destacan el hecho de que sea un regulador de temperatura en los seres vivos y en la biosfera, su alta capacidad calórica, su solubilidad, disolvente universal, como también la propiedad de capilaridad, es la única sustancia que se puede encontrar en los tres estados de la materia (líquido, sólido y gaseoso) de forma natural en la Tierra, su punto de congelación es a cero grados Celsius ($^{\circ}\text{C}$), mientras que el de ebullición es a 100°C (a nivel del mar). Las propiedades físicas del agua se atribuyen principalmente a los enlaces por puente de hidrógeno que se presentan en mayor número en el agua sólida, en la red cristalina cada átomo de la molécula de agua está

rodeado tetraédricamente por cuatro átomos de hidrógeno de otras tantas moléculas de agua y así sucesivamente es como se conforma su estructura.



Figura 1.9 El agua de la vida. (Gaceta FacMed, 2018)

Desde el punto de vista de la física, las propiedades y/o características del agua son:

- * Densidad: “Masa de una sustancia que ocupa una unidad de volumen”, es de $1\text{g}/\text{cm}^3$.
- * Amplio margen de temperaturas en fase líquida ($0\text{-}100^\circ\text{C}$): su punto de congelación es a 0°C , mientras que el de ebullición es a 100°C a nivel del mar.
- * Disolvente: el agua es el líquido que más sustancias disuelve (disolvente universal), esta propiedad se debe a su capacidad para formar puentes de hidrógeno con otras sustancias. La capacidad disolvente es la responsable de dos funciones importantes para los seres vivos: es el medio en que transcurren la mayoría de las reacciones del metabolismo, y el aporte de nutrientes, así como la eliminación de desechos que se realizan a través de sistemas de transporte acuosos (digestión).

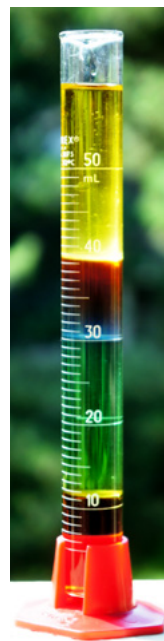


Figura 1.10 Densidades. (Wikipedia, 2013)



Figura 1.11 Punto de ebullición.
(Freepik, 2024)

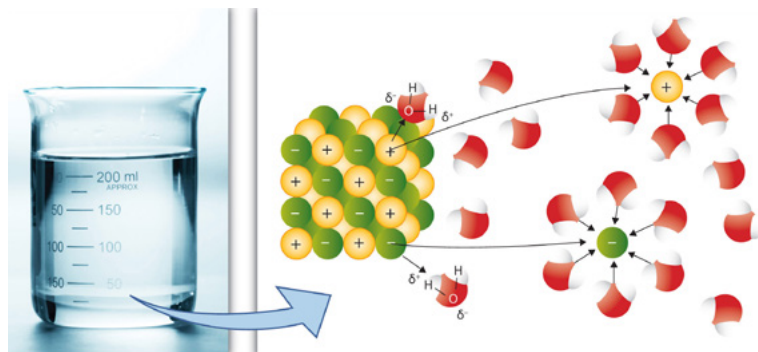


Figura 1.12 Disolvente universal
(Andy Schmitz <http://2012books.lardbucket.org/>).

- * **Fuerza de cohesión:** las moléculas de agua se encuentran fuertemente unidas, formando una estructura compacta que la convierte en un líquido casi incompresible.

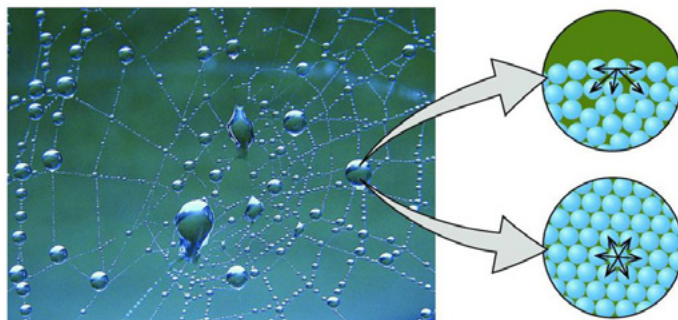


Figura 1.13
Propiedades de los líquidos.
(OpenStax, 2021).

- * **Calor específico:** “Cantidad de energía en forma de calor que se requiere para elevar la temperatura en 1g de una sustancia en 1° C.” El agua absorbe grandes cantidades de calor. Su temperatura desciende más lentamente que la de otros líquidos a medida que va liberando energía al enfriarse.
- * **Estado físico:** sólida, líquida y gaseosa.

- * Color: incolora, si hay color se debe a sustancias existentes en suspensión o disueltas en ella, como materia orgánica procedente de la descomposición de vegetales, así como diversos productos y metabolitos orgánicos que habitualmente se encuentran en ella.
- * Sabor: insípida
- * Olor: inodoro
- * Tensión superficial: “Atracción intermolecular que provoca que un líquido reduzca al mínimo su área superficial”, es pegajosa y elástica.



Figura 1.14 Propiedades físicas del agua.
(Asociación Casa Editora Sudamericana, 2019).

- * Capilaridad: propiedad física que hace que el agua suba por las paredes, contra la fuerza de gravedad; el agua, en tubos muy estrechos es capaz de ascender, las plantas usan la capilaridad para succionar agua del entorno. Esto también se observa fácilmente en un vaso con agua: en el lugar donde el vaso entra en contacto con el líquido, el agua “sube” ligeramente y forma lo que se llama un menisco en las paredes del vaso. Cuanto más estrecho sea el vaso, más sube el menisco.

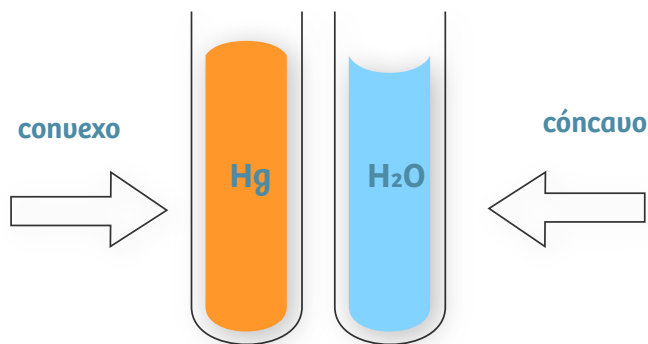


Figura 1.15
Capilaridad

1.6 Propiedades químicas del agua

La mayoría de las moléculas de agua tiene un peso molecular de 18[gr/mol] Sin embargo, debido a los 3 isótopos que tiene cada elemento que constituye la molécula del agua (2 hidrógenos y 1 Oxígeno), puede tener hasta 18 pesos moleculares de agua. En la molécula ambos átomos de hidrogeno están ubicados del mismo lado del átomo del oxígeno, cada enlace con el átomo de oxígeno se encuentra a 105° de separación. Ambos átomos de hidrogeno tienen una carga positiva, mientras que, el átomo de oxígeno tiene carga negativa. Por esta composición de su estructura atómica la molecular de agua es una molécula fuertemente bipolar. Estos bipolos se atraen entre sí y generan agregados a través de enlaces que se conocen como “Puentes de hidrógeno”. Véase Figura 1.16.

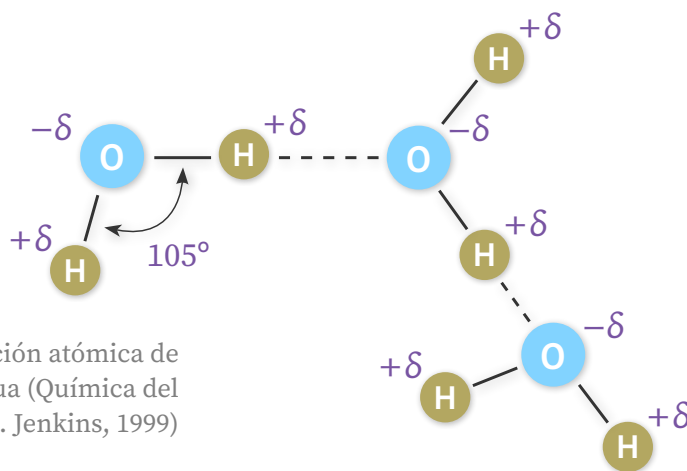


Figura 1.16 Composición atómica de la molécula de agua (Química del agua V.L Snoeyink, D. Jenkins, 1999)

Se cree que en estos agregados del agua a temperatura ambiente (25°C), pueden llegar a tamaños que son 100 moléculas de H_2O .

Los enlaces de hidrógeno en el agua son responsables de las propiedades que este compuesto presenta. Si se compara con otras sustancias de similares estructuras (2 moléculas de agua con otra de otro elemento periódico) como el seleniuro de hidrógeno (H_2Se , se encuentra que posee unas

características físicas anómalas. Ya que, a temperatura ambiente (25°C) y presión atmosférica (1atm) estas sustancias son gaseosas, mientras que, el agua conserva su forma líquida.

El agua es un líquido que sólo se transforma en gas cuando la temperatura aumenta a 100°C o más. Es mucho más densa que las especies relacionadas con ella a cualquier temperatura dada; su densidad máxima se presenta a 4°C. su tensión superficial y constante dieléctrica son mucho más altas de lo que se podría predecir a partir de las propiedades de los otros dihidruros.

Su punto de congelación es más bajo de lo que podría esperarse y se congela pasando a su estado sólido formando hielo, una sustancia de estructura abierta que es menos densa que el agua líquida la cual se forma esto tiene una gran importancia porque si sólo 1 de cada 120 partículas de hielo fuera más denso que el sólido este se formaría en el fondo de los cuerpos acuíferos en el planeta y no sería capaz de flotar y formarse en su superficie. Esto último provocaría que los lagos se congelaran desde el fondo hacia la superficie y como consecuencia se alteraría el ecosistema acuático del mismo, porque se congelaría siempre que la temperatura disminuyera por debajo del punto de congelación del agua.

La polaridad del agua es un factor importante para determinar sus propiedades disolventes. Los minerales que forman la corteza terrestre son en su mayoría sólidos inorgánicos en donde los iones de cargas positivas y negativas existen en una estructura de malla unidos unos con otros por enlaces electrostáticos. El agua, con su carácter bipolar, tiene la capacidad de rodear a un ion de carga positiva con la parte negativa de su molécula, aislando por tanto a este ion de los que le rodean y neutralizando las fuerzas de atracción que mantienen la integridad de la estructura cristalina. El ion, rodeado con moléculas de agua puede dejar la malla de unión en el cristalino y desplazarse hacia la solución en donde se transforma en un ion disuelto.

1

2

3

4

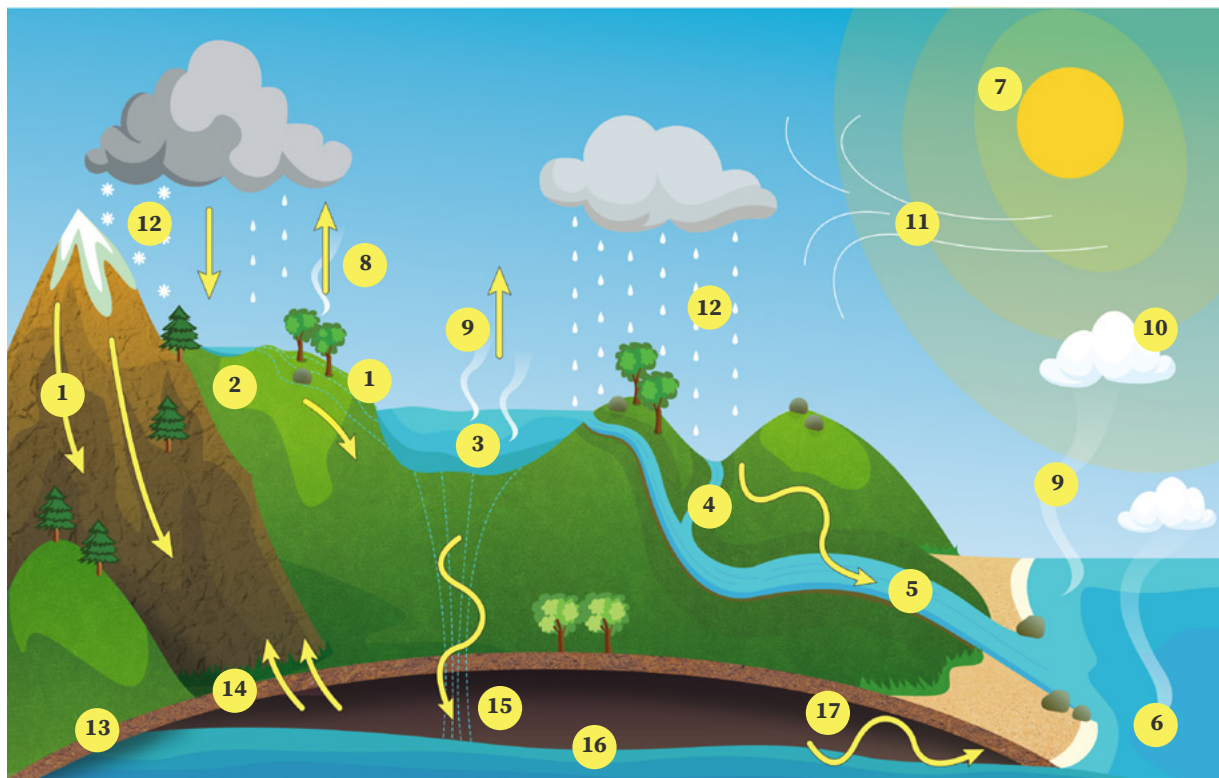
5

6

7

Por anterior descrito, las propiedades disolventes del agua hacen necesarias las distintas definiciones que el diccionario da de la palabra agua. El agua disuelve cierta cantidad de casi todos los sólidos o gases con los que se pone en contacto. En el ciclo Hidrológico de la Tierra (figura 1.7), el agua establece contacto con los gases en la atmósfera (incluyendo contaminantes del aire y emanaciones volcánicas) y los minerales que hay en los primeros kilómetros de la corteza terrestre.

Figura 1.17 Ciclo hidrológico de la tierra (2023)



- | | |
|--------------------------------|---------------------------------------|
| 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 |

En una escala más pequeña, el agua circula en sistemas contruidos por el hombre (conductos y tuberías). En estos sistemas el agua actúa como disolvente de los materiales de los que están hechos y da lugar a fenómenos generales como la corrosión y las incrustaciones.

Composición de los diversos tipos de agua

La composición general de los diversos tipos de agua en la hidrosfera puede estudiarse mejor si se ve como parte del ciclo hidrológico. La cantidad total de agua sobre la Tierra se distribuye de la siguiente forma: los océanos contienen el 97.13 %; los casquetes polares y los glaciares, 2.24 %; el agua subterránea solo representa el 0.61 %, y los ríos, lagos y corrientes, 0.02 % del total.

El océano es aproximadamente una solución 1.1 millones de aniones y cationes; en la tabla 1.1 se da su composición promedio.

Constituyente	mg/kg (ppm)
Sodio (Na^+)	10,500
Magnesio (Mg^{2+})	1,350
Calcio (Ca^{2+}) Potasio (K^+)	400
Cloruro (Cl^-)	380
Sulfato (SO_4^{2-})	19,000
Bicarbonato (HCO_3^-)	2,700
Bromuro (BT)	142
Otros sólidos	65
Sólidos disueltos totales	34
Agua (balance)	34,500

Tabla 1.1 Principales constituyentes de agua de mar

Química del agua
D.Jenkins 1999

En esta tabla la categoría "otros sólidos" incorpora a diversas especies que incluyen casi todos los elementos presentes en la corteza terrestre. El contenido de sales disueltas en el agua de mar (los sólidos totales disueltos son aproximadamente 34,500 mg/litro) es suficiente para elevar su densidad a 20 °C hasta un valor de 1.0243 g/cc, que es significativamente mayor que el del agua pura.

De los océanos, el agua se evapora y es transportada sobre las masas territoriales, donde se puede depositar por una u otra forma de precipitación (lluvia, nieve, granizo, etc.). En su recorrido del océano a la superficie terrestre, el agua atraviesa la parte inferior de la atmósfera.

Tabla 1.2 Composición Promedio de la atmósfera

Gas	Porcentaje en volumen	Presión parcial (atm)	Gas	Porcentaje en volumen	Presión parcial (atm)
H ₂ O	0.1-2.8	0.028	CO	$(0.06 - 1) \times 10^{-4}$	$(0.6 - 1) \times 10^{-6}$
N ₂	78.1	0.781	SO ₂	1×10^{-4}	1×10^{-6}
O ₂	20.9	0.209	N ₂ O	5×10^{-5}	5×10^{-7}
Ar	0.93	0.0093	H ₂	5×10^{-5}	5×10^{-7}
CO ₂	0.03	0.0003	O ₃	$(0.1 - 1.0) \times 10^{-5}$	$(0.1 - 1.0) \times 10^{-7}$
Ne	1.8×10^{-3}	1.8×10^{-5}	Xe	8.7×10^{-6}	8.7×10^{-8}
He	5.2×10^{-4}	5.2×10^{-6}	NO ₂	$(0.05 - 2) \times 10^{-5}$	$(0.05 - 2) \times 10^{-8}$
CH ₄	1.5×10^{-4}	1.5×10^{-6}	Rn	6×10^{-18}	6×10^{-20}
Kr	1.1×10^{-4}	1.1×10^{-6}			

Química del agua D.Jenkins 1999

Debido a esto, tiene la posibilidad de equilibrarse con los gases en la atmósfera. La composición promedio de la atmósfera inferior aparece en la tabla 1.2. Es necesario hacer énfasis en que la composición promedio de la atmósfera está sujeta a variaciones considerables, especialmente en los niveles de ciertos constituyentes menores como son CO_2 , CO , SO_2 , NO_x , etc., que son productos de los procesos de combustión y están asociados con la contaminación atmosférica (efecto invernadero) que hay en las comunidades urbano-industriales.

De los principales constituyentes atmosféricos, como N_2 y O_2 , son solubles ligeramente en el agua, mientras que existen otros como el CO_2 y SO_2 que son altamente solubles. Por lo que la composición de la precipitación es muy variable y los contaminantes atmosféricos influyen considerablemente sobre ella. La precipitación cerca de los océanos contiene más SO_4^{2-} , Cl^- , Na^+ y Mg^{2+} al contrario de la precipitación que cae en el interior de la corteza terrestre en una gran extensión de tierra, que tiene menos de los elementos mencionados anteriormente. La lluvia y la nieve, que se generan en una atmósfera que contiene altas concentraciones de SO_2 producido por combustión, pueden ser muy ácidas. Sin embargo, en las cifras en la tabla 1.3, se muestra que el agua de lluvia es sin duda una solución muy diluida de sales disueltas.

Tabla 1.3 Composición de la lluvia y nieve [mg/L]

Constituyente	1	2	3	4	5
SiO ₂	0		1.2	0.3	
Al (111)	0.01				
	0	0.65	1.2	0.8	3.3
	0.2	0.14	0.7	1.2	0.36

Constituyente	1	2	3	4	5
	0.6	0.56	0	9.4	0.97
K ⁺	0.6	0.11	0	0	0.23
NH ₄	0				0.42
HCO ₃ ⁻	3		7	4	0
SO ₄ ²⁻	1.6	2.18	0.7	7.6	6.1
Cl	0.2	0.57	0.8	17	2
	0.02		0	0.02	
NO ₃	0.1	0.62	0.2	0	2.2
Sólidos disueltos totales	4.8		8.2	38	
pH	5.6		6.4	5.5	4.4

Química del agua D.Jenkins 1999

De acuerdo con el tipo de cuenca donde se produzca el agua superficial, esta se clasifica químicamente en tres grupos de acuerdo con los minerales que contiene. En la siguiente tabla 1.4 se muestra dicha clasificación.

Tabla 1.4 clasificación del agua de acuerdo con los minerales contenidos

Constituyentes, mg/litro	A	B	C
SO ₂	9.50	1.20	10.00
Fe(II)	0.07	0.02	0.09
Ca ²⁺	4.00	36.00	92.00

Constituyentes, mg/litro	A	B	C
Mg ²	1.10	8.10	34.00
Na ⁺	2.60	6.50	8.20
K ⁺	0.60	1.20	1.40
HCO ³⁻	18.30	119.00	339.00
SO ²⁻	1.60	22.00	84.00
NO ³⁻	0.41	0.10	13.00
Sólidos disueltos totales	34.0	165.0	434.0
Dureza total como CaCO ₃	14.6	123.0	369.0

Química del agua D.Jenkins 1999

Además, puede agregarse CO₂ al agua en el suelo por la actividad de microorganismos.

En una cuenca donde la tierra sea estéril (que no haya organismos vivos), las aguas generadas por la interacción entre el aire, la tierra y el agua fluirían de nuevo hasta el océano llevando diversos minerales disueltos, así como partículas de suelo como limos, arcillas, arenas y gravas.

Sobre la superficie, el agua de la lluvia ácida desintegra las rocas y se estas partículas de lluvia ácida se combinan con las partículas diluidas de la roca produciendo agua con minerales disueltos, la degradación de estos minerales genera, minerales arcillosos, de los cuales se extraen cationes como K⁺, Na⁺, Ca²⁺ Mg²⁺, además de sílice (SiO₂) que pueden ser utilizados para otras industrias.

Del proceso anteriormente descrito, los minerales degradados que no se ocupan en la industria son lavados por los ríos y transportados hasta el océano donde se lleva a cabo una reacción inversa a la que produjo el desgaste de las rocas, los cationes, el ion bicarbonato, la sílice disuelta y los minerales arcillosos reaccionan para generar nuevas rocas que se depositan en el fondo del mar.

La siguiente imagen (figura 1.18) demuestra el proceso químico anteriormente descrito en una serie de procesos de ingeniería química desarrollada por Siever.

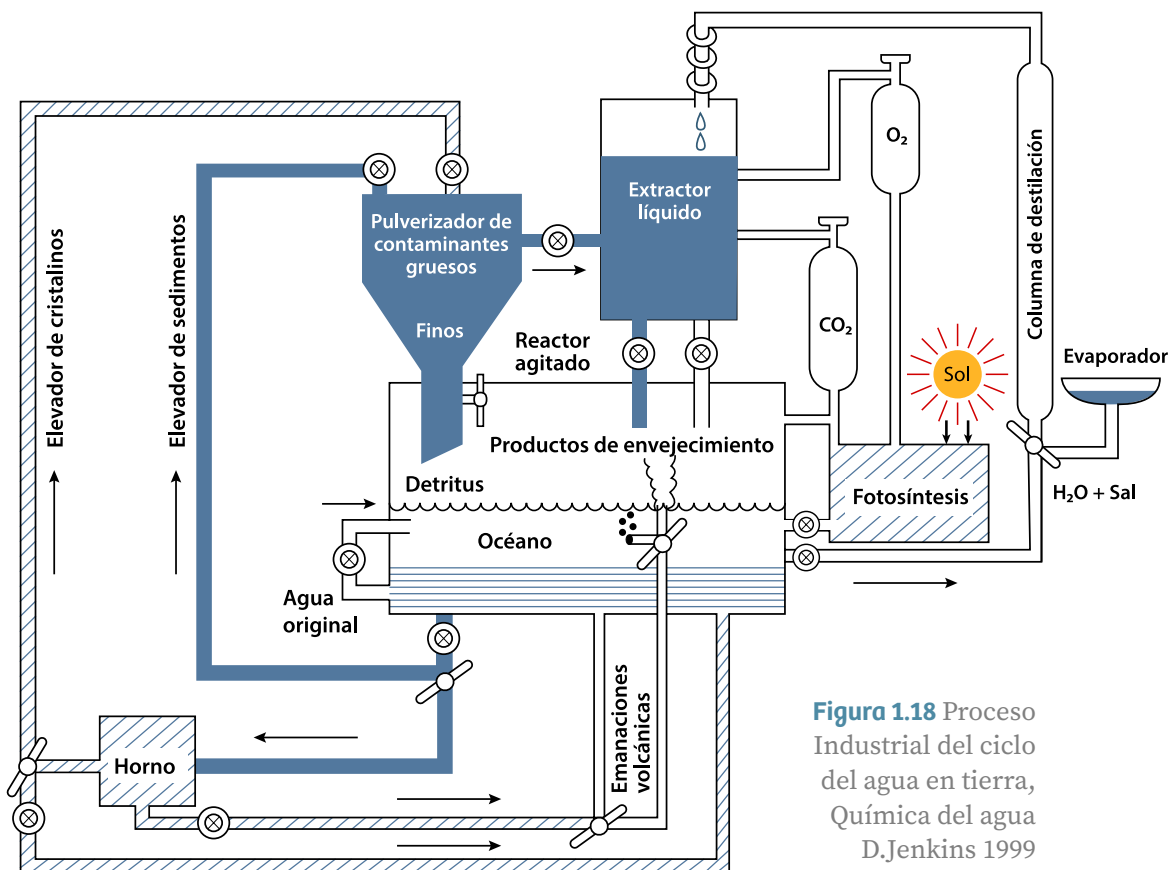


Figura 1.18 Proceso Industrial del ciclo del agua en tierra, Química del agua D.Jenkins 1999

La naturaleza de estas reacciones que se conectan unas con otras a escala global ha tenido ciertas consecuencias importantes para la composición de las aguas naturales. Por ejemplo, las concentraciones de los principales constituyentes disueltos (Ca^{2+} , Mg^{2+} , Na^+ , Cl^- , SO_4^{2-} , HCO_3^{3-} , $\text{SiO}_2(\text{ac})$) varían en un intervalo bastante estrecho debido a la acción reguladora de estas reacciones (figura 1.19). Por la misma razón, la composición del océano es bastante constante respecto a estos principales componentes disueltos.

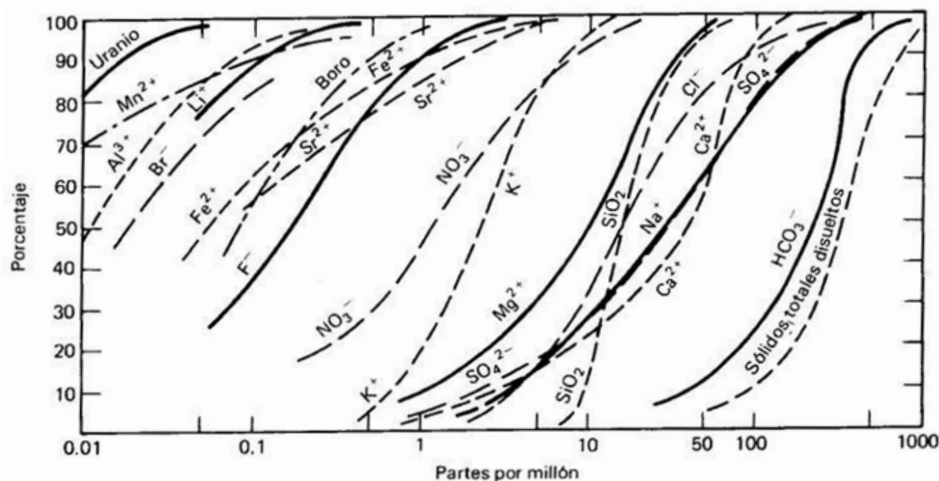


Figura 1.19 Concentraciones de los principales constituyentes disueltos, Química del agua D.Jenkins 1999

Las actividades del hombre pueden influir en la calidad del agua en muy diversas formas incluyendo la descarga de desechos municipales, industriales y agrícolas a las aguas superficiales y subterráneas. Los desechos domésticos aumentan el contenido de materia mineral y orgánica de las aguas naturales. En general, un solo uso municipal del agua contribuye con 300 mg/litro del total de minerales disueltos en el agua. Los componentes individuales que forman estos minerales disueltos no están presentes en la misma relación que sería de esperarse por la mera disolución de roca.

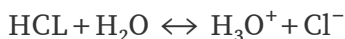
Como se vio en todo el capítulo y capítulos anteriores, el agua reacciona químicamente con casi cualquier otro elemento periódico, esto desde procesos o circunstancias naturales hasta procesos artificiales creados o desarrollados por el hombre, con todo lo anterior visto a continuación se muestran unos cuantos ejercicios de reacciones químicas que involucran al agua.

El agua es uno de los mejores reactivos químicos, interaccionando con iones y moléculas.

Las reacciones con el agua se cuentan entre las más frecuentes dado el papel predominante del agua como disolvente. Las reacciones con el agua son llamadas, en general, reacciones de hidrólisis. Entre ellas, se describirán las más reacciones más características.

Reacciones Ácido-base

Una reacción ácido-base o reacción de neutralización es una reacción química que ocurre entre un ácido, por ejemplo, el ácido clorhídrico (HCl) y una base, el hidróxido de sodio (Na^+OH), produciendo la sal, cloruro de sodio o sal común.



Reacciones Redox

Una reacción de óxido-reducción (redox) es una reacción transferencia de electrones. La especie que pierde los electrones se oxida y la que los gana se reduce. En donde se llama reductor al elemento que cede a los electrones y oxidante a el elemento que los recibe.

1

2

3

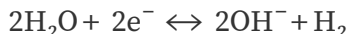
4

5

6

7

El agua puede actuar como oxidante y como reductor, aunque sus capacidades reductoras son limitadas.



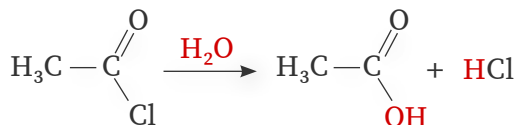
Reacciones con los óxidos

Es una reacción ácido-base entre el ion óxido (base fuerte) y el agua (ácido débil).

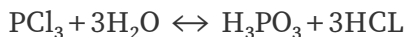


Reacciones con los haluros

Los haluros reaccionan con agua transformándose en ácidos carboxílicos. La hidrólisis transcurre a temperatura ambiente y sin catálisis. El mecanismo consiste en una primera etapa de adición de agua al carbono carbonilo, seguida de una etapa de eliminación de cloruro de hidrógeno.



La mayoría de los haluros de los no metales reaccionan con el agua para dar el ácido oxoácido del no-metal y el haluro de hidrógeno.



1.7 Análisis químico del agua

El agua es un compuesto esencial para la vida, hasta el punto de que esta no sería posible sin ella, su abundancia y distribución hacen del agua el compuesto más importante de la superficie terrestre, pues el agua de mar constituye el 97.6 % de los recursos de agua de todo el planeta, pero su uso está muy restringido para la actividad humana dada su elevada concentración en sales que es del 3.5%.

El agua es el medio en el que se producen la mayoría de las reacciones físicas químicas y bioquímicas que son fundamentales para la vida; se utiliza principalmente en la alimentación de los seres vivos, en la agricultura, la industria, pero desafortunadamente su composición química natural puede verse alterada por dichas actividades.

La consecuencia es la incorporación de sustancias de diferente naturaleza a través de vertidos de aguas residuales o debido al paso de las aguas por terrenos tratados con productos agroquímicos o contaminados. Estas incorporaciones ocasionan la degradación de la calidad del agua provocando diferentes efectos negativos como la modificación de los ecosistemas acuáticos, la destrucción de los recursos hidráulicos, riesgos para la salud, incremento del coste del tratamiento del agua para su uso, daño en instalaciones (incrustaciones, corrosiones, etc.) destrucción de zonas de recreo.

Las aguas contaminadas presentan compuestos diversos en función de su procedencia: pesticidas, tensoactivos, fenoles, aceites y grasas, metales pesados, etc.

Dependiendo del uso que se vaya a hacer, se debe controlar analíticamente la calidad del agua y uno de sus parámetros importantes es el químico.

Parámetros químicos o de calidad química del agua

El análisis químico o de calidad química del agua permite medir los minerales y compuestos presentes, disueltos o en suspensión, determinada por los compuestos o minerales presentes en el agua recolectada en un punto específico y en un momento dado.

A continuación, se mencionan los parámetros a determinar en un análisis químico del agua:

○ pH

El término pH representa la concentración de iones de hidrógeno en una solución. En el agua, este factor es de gran importancia, principalmente en los procesos de tratamiento. La medida del pH tiene amplia aplicación en el campo de las aguas naturales y residuales.

Se define como el logaritmo de la inversa de la concentración de protones:

$$\text{pH} = \log \frac{1}{[\text{H}^+]} = \log [\text{H}^+]$$

El método de medida más común es usar una celda electroquímica que consiste en un electrodo indicador sensible a la concentración de protones, $[\text{H}^+]$, un electrodo de referencia y la muestra.

El valor del pH varía de 0 a 14 (véase la tabla 1.5).

Tabla 1.5 Valores de referencia del pH en agua.

AGUA		
Valor de pH	Clasificación	Características
De 7 a 14	Básica (Alcalina)	Contiene sales básicas.
7	Neutra	Contiene sales neutras.
De 0 a 7	Ácida	Contiene ácidos libres o sales ácidas.

Adaptado de (APHA, 1995)

Cada cambio de una unidad de pH multiplica por 10 la fuerza de acidez o alcalinidad de dicha agua: así, un agua con pH 6 es 10 veces más ácida que un agua con pH 7.

La medición del pH se emplea para expresar la intensidad de la acidez, la basicidad o la alcalinidad, hay que entender que el pH no indica la cantidad de compuestos ácidos o alcalinos en el agua, sino la fuerza que éstos tienen.

En la rutina de los laboratorios de las estaciones de tratamiento es medido y ajustado siempre que necesario para mejorar el proceso de coagulación/floculación del agua y también el control de la desinfección (véase la figura 1.20).

Material:

- a) Potenciómetro
- b) Cubetas
- c) Frasco lavador
- d) Papel absorbente
- e) Solución tampón

pH Técnica:

- a) Conectar el equipo y esperar su estabilización.
- b) Lavar los electrodos con agua destilada y secarlos con papel absorbente.
- c) Calibrar el equipo con las soluciones estándares (pH 4-7 o 10).
- d) Lavar los electrodos otra vez con agua destilada y secarlos.
- e) Introducir los electrodos de la muestra a ser probada y hacer la lectura.
- f) Lavar una vez más y dejarlos inmersos en agua destilada.
- g) Desconectar el equipo.

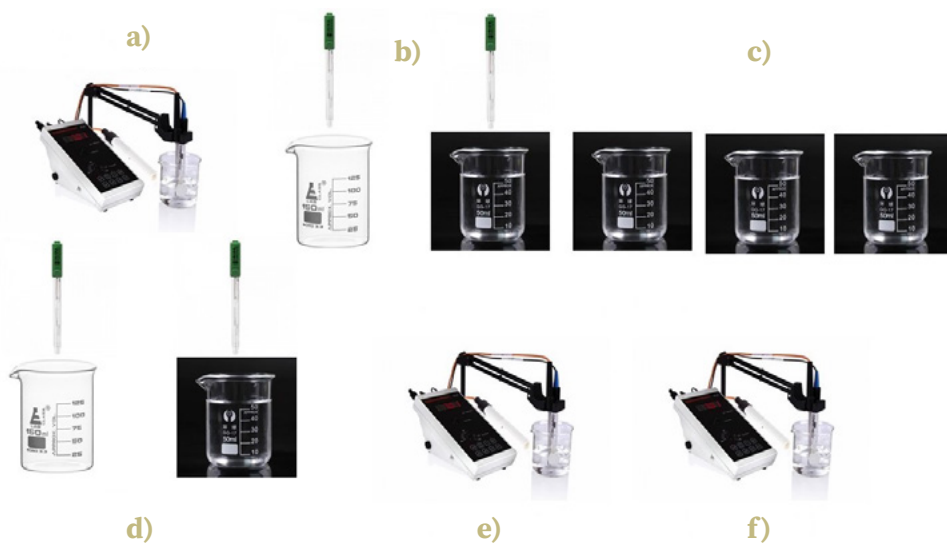


Figura 1.20 Diagrama de flujo de la Prueba de pH.
(Fundación Nacional de Salud 2013)

Alcalinidad

La alcalinidad total de un agua es dada por la suma de diferentes formas de alcalinidad existentes, es decir, es la concentración de hidróxidos, carbonatos y bicarbonatos, expresada en términos del carbonato de calcio. Se puede decir que la alcalinidad mide la capacidad del agua en neutralizar los ácidos.

La medida de la alcalinidad es de fundamental importancia durante el proceso de tratamiento del agua, ya que es en función de su concentración que se establece la dosificación de los productos químicos utilizados.

Normalmente las aguas superficiales tienen alcalinidad natural en concentración suficiente para reaccionar con el sulfato de aluminio en los procesos de tratamiento. Cuando la alcalinidad es muy baja o inexistente, existe la necesidad de que se provoque una alcalinidad artificial con aplicación de sustancias alcalinas, como la cal hidratada o barrilla (carbonato de sodio) para que se alcance ese objetivo.

Cuando la alcalinidad es muy elevada, se hace al revés, acidificándose el agua hasta que se obtenga una concentración de alcalinidad suficiente para reaccionar con el sulfato de aluminio u otro producto utilizado en el tratamiento del agua.

Método de determinación: Titulación con Ácido Sulfúrico.
(véase la figura 1.21).



Figura 1.21 Diagrama de flujo de la Prueba de Alcalinidad. (Fundación Nacional de Salud 2013).

Material:

- a) Pipeta volumétrica de 50 ml.
- b) Frasco Erlenmeyer de 250 ml.
- c) Bureta de 50 ml.
- d) Fenolftaleína.
- e) Indicador metil-orange.
- f) Mezcla indicadora de verde de bromocresol/rojo de metila.
- g) Solución de ácido sulfúrico 0.02 N.
- h) Solución de bisulfato de sodio 0.1 N.

Técnica:

- a) Tomar 50 ml de la muestra y ponerla en el Erlenmeyer.
- b) Adicionar tres gotas de la solución indicadora de verde de bromocresol/rojo de metila.
- c) Titular con la solución de ácido sulfhídrico 0.02 N hasta el cambio de color azul verdoso para rosado.
- d) Anotar el volumen total de (H_2SO_4) gasto (V) en ml.

Cálculo:

$$\text{Alcalinidad total de } (\text{CaCO}_3) = (V)(20)$$

Donde:

V= Volumen total de H_2SO_4 gasto

Ejemplo: Determinar la alcalinidad de una muestra de agua de 50 ml aplicando la ecuación de la titulación correspondiente donde el (H_2SO_4) gasto es de 10 mg/l

$$\text{Alcalinidad total de } (\text{CaCO}_3) = (V)(20)$$

Sustituyendo:

$$\text{Alcalinidad total de } (\text{CaCO}_3) = (10 \text{ mg/l})(20)$$

$$\text{Alcalinidad total de } (\text{CaCO}_3) = 200 \text{ (mg/l)}$$

La alcalinidad en el agua tanto natural como tratada, usualmente es causada por la presencia de iones carbonatos (CO_3^{2-}) y bicarbonatos (HCO_3^-), asociados con los cationes Na^+ , K^+ , Ca^{+2} y Mg^{+2} .

Se aplica para la determinación de la alcalinidad de carbonatos y bicarbonatos, en aguas naturales, domésticas, industriales y residuales. La medición de la alcalinidad sirve para fijar los parámetros del tratamiento químico del agua, así como ayudarnos al control de la corrosión y la incrustación en los sistemas que utilizan agua como materia prima o en su proceso.

La alcalinidad se determina por titulación de la muestra con una solución valorada de un ácido fuerte como (HCl), mediante dos puntos sucesivos de equivalencia, indicados por medio del cambio de color de dos indicadores ácido-base adecuados:



Cuando se le agrega a la muestra de agua indicador de fenolftaleína y aparece un color rosa, esto indica que la muestra tiene un pH mayor que 8.3 y es indicativo de la presencia de carbonatos.

Se procede a titular con (HCl) valorado, hasta que el color rosa vire a incoloro, con esto, se titula la mitad del (CO_3^{2-})

Enseguida se agregan unas gotas de indicador de azul bromofenol, apareciendo una coloración azul y se continúa titulando con (HCl) hasta la aparición de una coloración verde.

Con esto, se titula los bicarbonatos (HCO_3^-) y la mitad restante de los carbonatos (CO_3^{2-}).

Si las muestras de agua tienen un pH menor que 8.3 la titulación se lleva a cabo en una sola etapa.

Se agregan unas gotas de indicador de azul de bromofenol, apareciendo una coloración azul y se procede a titular con solución de HCl hasta la aparición de un color verde con eso se titula los (HCO_3^-).

○ Dureza

La dureza total es calculada como siendo la suma de las concentraciones de iones calcio y magnesio en el agua, expresados como carbonato de calcio.

La dureza de un agua puede ser temporal o permanente. La dureza temporal, también llamada dureza de carbonatos, es producida por la presencia de bicarbonatos de calcio y magnesio. Ese tipo de dureza resiste a la acción de los jabones y genera incrustaciones. Se denomina temporal porque los bicarbonatos, por la acción del calor, se descomponen en gas carbónico, agua y carbonatos insolubles que se precipitan.

Los principales componentes de la dureza son los bicarbonatos, sulfatos y cloruros, ya que los carbonatos y los hidróxidos son muy insolubles y están en pocas cantidades en el agua.

La dureza procedente de los bicarbonatos se llama dureza carbonatada, y la procedente de sulfatos, cloruros, nitratos y otros compuestos es la dureza no carbonatada.

La dureza total es la suma de la dureza temporal más la dureza permanente, es decir, es la suma de dureza carbonatada + no carbonatada y la suma de dureza cálcica + magnésica.

Método de determinación: complexometría con AEDT (ácido etilendiaminotetracético), y el resultado se suele expresar en (mg/l) de (CaCO_3) (véase la figura 1.22)

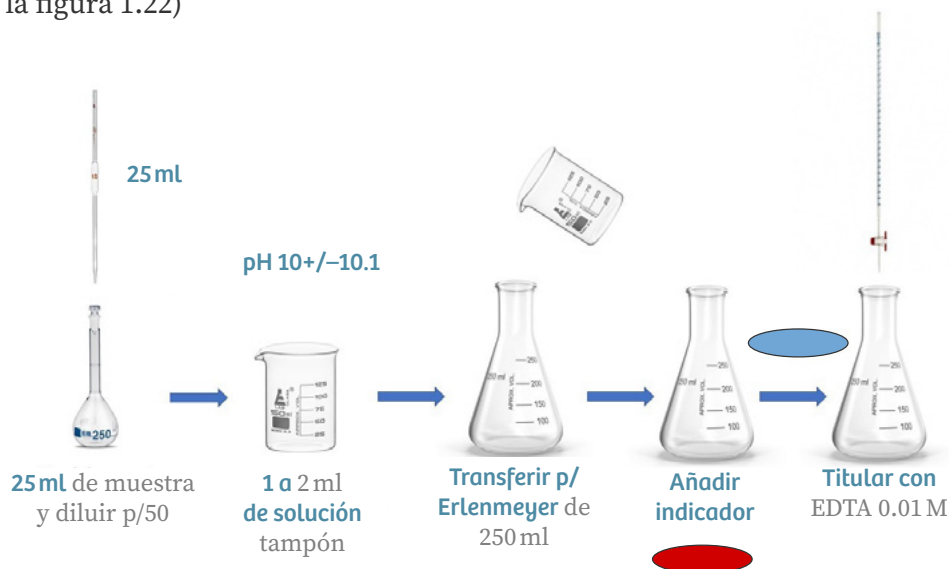


Figura 1.22 Diagrama de flujo de la Prueba de Dureza. (Fundación Nacional de Salud 2013)

La dureza permanente, también llamada dureza de no carbonatos, se debe a la presencia de sulfatos, cloruros y nitratos de calcio y magnesio, resiste también a la acción de los jabones, pero no genera incrustaciones por ser sus sales muy solubles en el agua. No se descompone por la acción del calor.

Método de determinación: Titulación con AEDT.

Material necesario:

- a) Bureta de 50 ml.
- b) Pipeta volumétrica de 25 ml.
- c) Balón volumétrico de 50 ml.
- d) Becker de 100 ml.
- e) Frasco Erlenmeyer de 250 ml.
- f) Solución estándar de AEDT 0.01 M.
- g) Solución tampón.
- h) Indicador eriochrome black T.
- i) Inhibidor I – cianuro de sodio P.A en polvo.
- j) Inhibidor II – sulfuro de sodio.

Técnica:

- a) Tomar 25 ml de la muestra y diluir para 50 ml con agua destilada en balón volumétrico.
- b) Transferir para un becker de 100 ml y adicionar 1 a 2 ml de la solución tampón para elevar el pH a 10 ± 0.1 .
- c) Transferir para un frasco Erlenmeyer de 250 ml y adicionar alrededor de 0.05 gramos del Indicador negro de eriocromo T.
- d) Titular con AEDT 0.01M agitar continuamente hasta el desaparecimiento del color purpuro rojizo y la aparición del color azul (final de la titulación).
- e) Anotar el volumen de AEDT gasto (ml).
- f) Hacer un blanco con agua destilada.
- g) Sustraer el volumen de AEDT gasto en la titulación del blanco del volumen de AEDT gasto en la titulación de la muestra. La diferencia es el volumen que será aplicado en el cálculo abajo.

1

2

3

4

5

6

7

Cálculo:

$$\text{Dureza total de CaCO}_2 = \frac{(\text{ml de AEDT})(100)(F_c)}{\text{ml de la muestra (l)}}$$

Donde:

F_c = Factor de corrección sea diferente de 1.

Unidades = (mg CaCO_3 /l)

Ejemplo: Determinar la dureza de una muestra de agua de 50 ml con 30 ml de AEDT, aplicando la ecuación de la titulación correspondiente y suponiendo que el factor de corrección es de 0.2.

$$\text{Dureza total de CaCO}_2 = \frac{(\text{ml de AEDT})(100)(F_c)}{\text{ml de la muestra (l)}}$$

Sustituyendo:

$$\text{Dureza total de CaCO}_2 = \frac{(0.030)(100)(0.2)}{(0.05 \text{ l})}$$

$$\text{Dureza total de CaCO}_2 = 12.0 \left(\frac{\text{mg CaCO}_3}{\text{l}} \right)$$

Salinidad

La cantidad de sólidos disueltos totales (SDT) es uno de los principales indicadores de la calidad del agua. La salinidad del agua es el contenido total de sales. Así, la cantidad de cloruro sódico es una parte de esta salinidad y la dureza del agua (sales de magnesio y calcio) es otra parte de la salinidad del agua.

El SDT es el total de sales disueltas y se puede expresar en (mg/l), (g/m³) o ppm (mg/l). El hecho de que el agua tenga sales en disolución hace que esta sea conductiva a la electricidad. Así un agua con muchas sales es muy conductiva y la medida de la conductividad nos permite evaluar de una forma rápida la salinidad del agua.

Las sales más frecuentes en el agua son las de calcio, magnesio y sodio. En aguas no salobres, el 90% del contenido de sales en el agua, son por presencia de calcio y magnesio. Además, dicho calcio y magnesio son molestos en la utilización del agua.

Método de determinación: titulación con SDT

Se hace mediante conductímetros o medidores de SDT y debe realizarse antes de tratamientos de descalcificación de agua. Durante el proceso de descalcificación de agua, los carbonatos son sustituidos por sodio, lo que no altera la concentración total de sólidos disueltos, pero disminuye la dureza del agua.

Material:

- a) Crisol o placa de evaporación.
- b) Desecador.
- c) Horno de Secado.
- d) Balanza de análisis.
- e) Botas o calzado adecuado.
- f) Guantes.
- g) Bata de Laboratorio.
- h) Mascarilla.

Técnica:

- a) Calentar un crisol limpio a 103°C a 105°C, durante una hora.

- b) Conservar el crisol en un desecador hasta que se necesite.
- c) Elegir un volumen de muestra que proporcione un residuo entre 2.5 y 200 mg.
- d) Transferir un volumen medido de muestra, bien mezclado a el crisol previamente pesado y evapórese hasta que se seque en un baño de vapor o en un horno de secado (si es necesario agregue más muestra).
- e) Si la evaporación se lleva a cabo en un horno de secado, reducir la temperatura hasta 2°C aproximadamente, por debajo del punto de ebullición 100°C, a fin de evitar salpicaduras.
- f) Secar la muestra evaporada al menos durante una hora en un horno a 103°C a 105°C.
- g) Enfriar el crisol en un desecador para equilibrar la temperatura y pesar en una balanza analítica.
- h) Efectuar los cálculos necesarios y registrar los mismos.

Cálculo:

$$\text{Sólidos Disueltos Totales (SDT)} = \frac{(A - B)(1000)}{\text{volumen (l)}}$$

Donde:

A = Peso del residuo seco más crisol (mg)

B = Peso del crisol (mg)

Volumen = Volumen de la muestra (ml)

Unidades = (mg/l)

Ejemplo: Determinar la salinidad de una muestra de agua de 50 ml mediante la determinación correspondiente si el peso del crisol es de 80 mg y el peso final es de 120 mg.

$$\text{Sólidos Disueltos Totales (SDT)} = \frac{(A - B)(1000)}{\text{volumen (l)}}$$

Sustituyendo:

$$\text{Sólidos Disueltos Totales (SDT)} = \frac{(120 \text{ mg} - 80 \text{ mg})(1000)}{(0.050 \text{ l})}$$

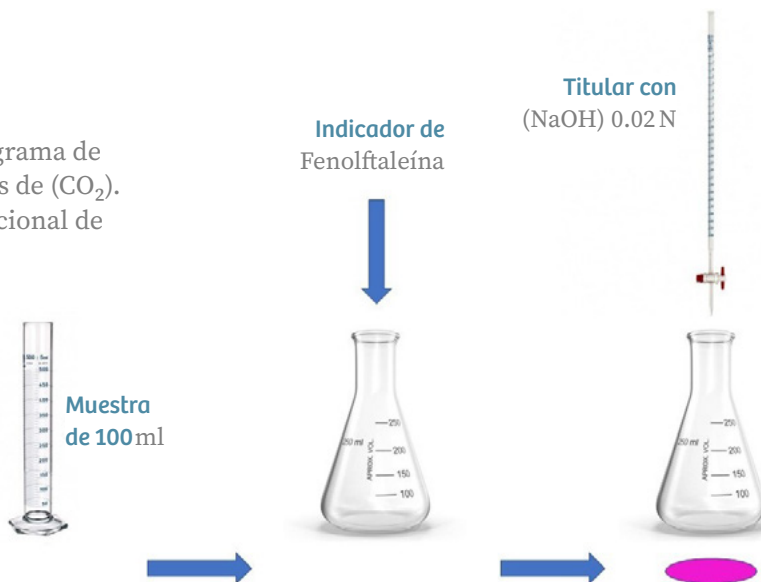
$$\text{Sólidos Disueltos Totales (SDT)} = 800,000 \text{ (mg/l)}$$

Gas carbónico libre

El gas carbónico contenido en el agua puede contribuir significativamente para la corrosión de las estructuras metálicas y de materiales a base de cemento (tubos de fibrocemento) de un sistema de suministro de agua. Por esa razón, su concentración debe ser conocida y controlada.

Método de determinación: Titulación con Hidróxido de sodio (véase la figura 1.23)

Figura 1.23 Diagrama de flujo de Análisis de (CO₂). (Fundación Nacional de Salud 2013).



Material:

- a) Bureta de 50 ml.
- b) Frasco Erlenmeyer de 250 ml.
- c) Pipeta volumétrica de 100 ml.
- d) Tapón de goma.
- e) Hidróxido de sodio 0.02N.
- f) Fenolftaleína.

Técnica:

- a) Tomar 100 ml de muestra (sin agitar) en un Erlenmeyer.
- b) Adicionar 10 gotas de fenolftaleína, si colorea, no contiene CO₂, si no colorea, proseguir.
- c) Titular con la solución de hidróxido de sodio (NaOH) 0.02 N gota a gota que aparezca leve color rosado persistente al menos por 30 segundos.
- d) Tomar nota del volumen (ml) de NaOH gasto (V).

Cálculo:

$$CO_2 \text{ libre} = (V)(10)(Fc)$$

Donde:

Fc = Factor de corrección

Para calcular el CO_2 total, aplicar la siguiente fórmula:

$$CO_2 \text{ total} = A + 0.44 (2B + C) (\text{mg/l})$$

Donde:

A = mg/l de (CO_2) libre

B = Alcalinidad debido al bicarbonato

C = Alcalinidad debido al carbonato

Ejemplo: Determinar el gas carbónico libre mediante la titulación correspondiente, en una muestra de agua con un factor de corrección de 0.3, (CO_2) libre igual a 0.60 mg/l una alcalinidad B de 0.30 mg/l y una alcalinidad C de 0.40 mg/l.

$$CO_2 \text{ libre} = (V)(10)(Fc)$$

Obtenemos:

$$CO_2 \text{ total} = A + 0.44(2B + C) \text{ (mg/l)}$$

Sustituyendo:

$$CO_2 \text{ total} = (0.60 \text{ mg/l}) + 0.44(2(0.30 \text{ mg/l}) + 0.40 \text{ (mg/l)})$$

$$CO_2 \text{ total} = 1.264 \text{ (mg/l)}$$

Aplicando en:

$$CO_2 \text{ libre} = (V)(10)(Fc)$$

Sustituyendo:

$$CO_2 \text{ libre} = (1.264 \text{ (mg/l)})(10)(0.3)$$

$$CO_2 \text{ libre} = 3.792 \text{ (mg/l)}$$

1

2

3

4

5

6

7

○ Materia orgánica / Carbono Orgánico Total

La materia orgánica existente en el agua, tanto la que se encuentra disuelta como en forma de partículas, se valora mediante el parámetro carbono orgánico total (COT) o en inglés (TOC, *Total Organic Carbon*) que es la cantidad de carbono que contienen los compuestos orgánicos.

Los compuestos orgánicos existentes en el medio acuático se pueden clasificar en dos grandes grupos atendiendo a su biodegradabilidad, es decir, a la posibilidad de ser utilizados por microorganismos como fuente de alimentación y para su medida se utilizan los parámetros denominados DQO (demanda química de oxígeno) y DBO (demanda bioquímica de oxígeno), que se expone en los siguientes parámetros.

El carbono orgánico total es esencialmente valioso en el control de procesos cuando incluso la determinación de DQO puede ser demasiado lenta. Los métodos de COT son más reproducibles que aquellos de la DBO o de la DQO y permiten el análisis de un gran número de muestras.

Se utilizan métodos instrumentales, dando resultados en pocos minutos, y requiriendo menos de 1 ml de muestra.

Método de determinación: Titulación por combustión analítica

El procedimiento más general implica la introducción de una micro muestra en un tubo de combustión catalítica mantenido a 960°C, que vaporiza el agua. En una corriente de aire la materia orgánica se convierte en (CO₂) y (H₂O). El agua se condensa, y la corriente de gas se pasa, a través de una celda de flujo continuo, a un analizador de infrarrojos (IR). La cantidad de (CO₂) registrada es proporcional al contenido de carbono de la muestra (véase la figura 1.24).

1

2

3

4

5

6

7

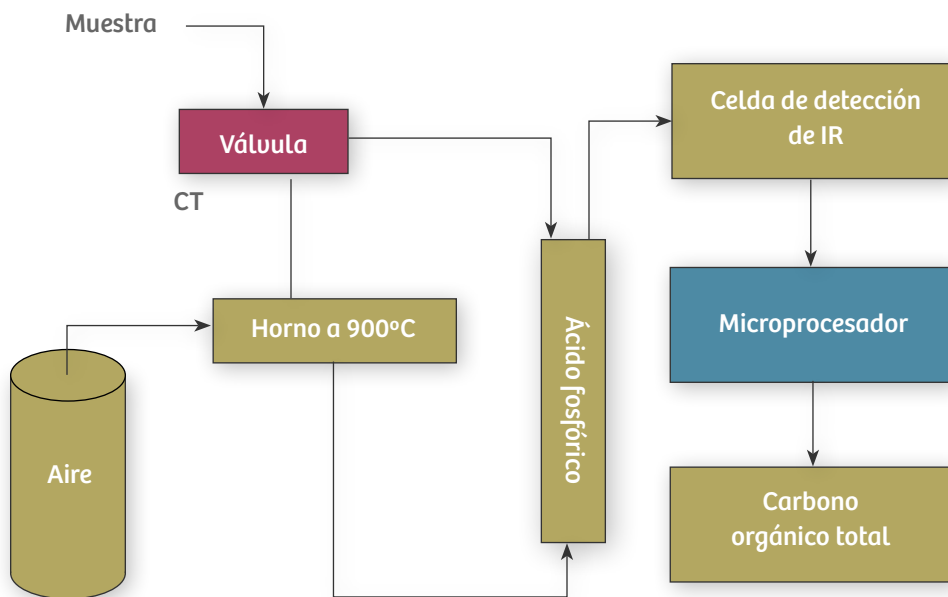


Figura 1.24 Diagrama de flujo para obtener el Carbono Orgánico Total (Catalán 1990)

Uno gran problema de este método es que liberan (CO_2) Para acabar con este problema se realizan dos determinaciones.

1. Una de carbono total, en la que la muestra ha pasado por un reactor que contiene ácido fosfórico que convierte los carbonatos inorgánicos en (CO_2) y después por el tubo de combustión catalítica en la que se transforma el carbono orgánico.
2. En una segunda determinación la muestra sólo pasa por el reactor de ácido fosfórico por lo que sólo estamos determinando carbono inorgánico. La diferencia de las dos determinaciones nos da carbono orgánico total (ver figura 1.24).

○ Demanda Química del Oxígeno (DQO)

Es la cantidad de oxígeno consumido por los cuerpos reductores presentes en el agua sin la intervención de los organismos vivos. Efectúa la determinación del contenido total de materia orgánica oxidable, sea biodegradable o no.

Es susceptible de oxidación por un fuerte oxidante químico (dicromato potásico, $\text{Cr}_2\text{O}_7\text{K}_2$). La mayor parte de la materia orgánica resulta oxidada por una mezcla a ebullición de los ácidos crómico y sulfúrico.

Material:

- a) Tubos de digestión.
- b) Calentador de bloques a 150°C .
- c) Bureta.
- d) Pipetas.
- e) Dosificador de agua destilada.
- f) Agitador magnético para mezclar completamente.

Técnica:

1. 1. La muestra se lleva a ebullición con reflujo en presencia de sulfato de mercurio para evitar la interferencia de los cloruros, colocando los tubos en el digestor de bloques a 150°C durante dos horas. Se enfría a temperatura ambiente, se quitan los tapones y se añaden dos gotas ferroína.
2. Agitar rápidamente con un agitador magnético mientras se titula con sal de Mohr 0.01 N. De la misma forma se somete a reflujo y titulan dos blancos que contienen los reactivos y un volumen de agua destilada igual al de la muestra.

1

2

3

4

5

6

7

Cálculo:

$$DQO = \frac{(A - B)(N)(8000)(F)}{\text{volumen muestra } (l)}$$

Donde:

A = los ml de valorante gastados para el blanco

B = los ml de valorante gastados para la muestra

N = la normalidad del valorante

F = el factor de dilución de la muestra

$$N = \frac{[\text{volumen de dicromato (ml)} * 0.1]}{\text{volumen muestra (ml)}}$$

Unidades: (mgO₂/l)

Ejemplo: Determinar la Demanda Química de Oxígeno (DQO) de una muestra de agua de 50 ml si $A = 38$ ml, $B = 23$ ml, $N = 0.04$ y $F = 0.15$.

$$DQO = \frac{(A - B)(N)(8000)(F)}{\text{volumen muestra } (l)}$$

Sustituyendo:

$$DQO = \frac{(38 \text{ ml} - 23 \text{ ml})(0.04)(8000)(0.15)}{0.050}$$

$$DQO = 14,400 \text{ (mgO}_2\text{/l)}$$

1

2

3

4

5

6

7

○ Demanda Bioquímica del Oxígeno (*DBO*)

Es la cantidad de oxígeno necesaria por las bacterias para descomponer la materia orgánica presente, es decir permite determinar la materia orgánica biodegradable.

Esta transformación biológica precisa un tiempo superior a los 20 días, por lo que se ha aceptado, como norma, realizar una incubación durante 5 días, a 20 °C, en la oscuridad y fuera del contacto del aire, a un pH de 7-7.5 y en presencia de nutrientes y oligoelementos (componentes químicos imprescindibles para el organismo, ya que brindan los nutrientes

esenciales para que todos los procesos funcionen correctamente) porque permiten el crecimiento de los microorganismos. A este parámetro se le denomina (*DBO₅*).

Método de determinación: analítico yodométrico de Winkler (U.S.G.S. 2006). Es utilizado para determinar la contaminación de aguas domésticas en términos de la cantidad de oxígeno descargado en cuerpos naturales en donde prevalecen condiciones aeróbicas. La prueba es una de las más importantes en el control de actividades contaminantes en ríos (APHA 1995).

Otro de los métodos más utilizados es el método respirométrico. Consiste en una botella de digestión que se encuentra unida a un manómetro. El volumen de muestra utilizado está en función de la *DBO₅* prevista.

Durante la determinación, los microorganismos respiran el oxígeno disuelto en el agua de la muestra y a medida que este se va consumiendo el oxígeno contenido en el aire de la botella va pasando a la muestra. En el transcurso de la oxidación de la materia orgánica se genera (CO_2) que

pasa al volumen de aire. En el digestor de goma hay (NaOH) que retiene el (CO_2) y lo elimina del volumen de aire, creándose una depresión en la botella de digestión que es indicada en el manómetro.

Muestras muy polucionadas precisan más oxígeno en los 5 días que el que contiene la muestra, por lo que se usa el método de dilución. Se añade oxígeno disuelto a la muestra, se inocula, si es preciso, con microorganismos apropiados y se incuba durante 5 días, determinándose la diferencia entre el oxígeno inicialmente presente y el que resta a los 5 días.

Cálculo:

$$DBO_5 = \frac{(D_1 - D_2) - (B_1 - B_2)f}{P}$$

Donde:

D_1 = oxígeno disuelto inicial de la muestra

D_2 = oxígeno disuelto de la muestra después de 5 días a 20°C

B_1 = oxígeno disuelto inicial del agua de dilución

B_2 = oxígeno disuelto del agua de dilución después de la incubación a 20°C

f = proporción de semilla en la muestra diluida

P = fracción decimal volumétrica

Unidades: (mgO_2/l)

Ejemplo:

Determinar la Demanda Bioquímica de Oxígeno (DBO) a cinco días por el método de determinación correspondiente si se sabe que $D_1 = 100$ mg, $D_2 = 68$ mg, $B_1 = 50$ mg, $B_2 = 35$ mg, $f = 0.1$ y $P = 0.030$.

$$DBO_5 = \frac{(D_1 - D_2) - (B_1 - B_2)f}{P}$$

Sustituyendo:

$$DBO_5 = \frac{(100 \text{ mg} - 68 \text{ mg}) - (50 \text{ mg} - 35 \text{ mg})(0.1)}{(0.030 \text{ l})}$$

$$DBO_5 = 56.67 \text{ (mgO}_2\text{/l)}$$

○ Nitrógeno y derivados

Las formas inorgánicas del nitrógeno incluyen nitratos (NO_3^-) y nitritos (NO_2^-) amoníaco (NH_3) y nitrógeno molecular (N_2). De forma natural, en el medio acuático, también se producen compuestos orgánicos nitrogenados que contienen nitrógeno amínico o amídico, constituyendo compuestos heterocíclicos (estructuras cíclicas que contienen átomos distintos del carbono (O, S, N) tales como purinas y piridinas.

○ Nitratos

Se pueden determinar mediante una colorimetría. En presencia de salicilato sódico, los nitratos dan el p-nitrosalicilato sódico de color amarillo, susceptible de una determinación colorimétrica a 420 (nm).

Método de determinación: Espectrofotometría o Cromatografía iónica.

○ Nitritos

Su presencia en agua suele indicar la contaminación de carácter fecal frecuente, habida cuenta de su inestabilidad.

Su determinación se puede realizar mediante una colorimetría. El nitrito presente se hace reaccionar con 4-aminobencenosulfonamida en presencia de ácido fosfórico, a pH 1.9, para formar una sal de diazonio que produce un compuesto coloreado con dihidrocloruro de N⁻ (1-naftil)-1,2-diaminoetano. El compuesto coloreado se mide a 540 (nm).

Método de determinación: Espectrofotometría o Cromatografía iónica.

En aguas residuales, su presencia es mínima habida cuenta del estado reductor de este medio. Por el contrario, la producción de (NO₃⁻) en depuradoras de aguas residuales debe tenerse en cuenta, pues se convierte en factor limitante del crecimiento en sistemas hídricos si existe abundancia de fósforo, promoviendo fenómenos indeseables como la eutrofización.

○ * Amoniaco / Amonio

En disolución acuosa hay un equilibrio entre el amoníaco y el ion amonio:



En ambas especies el nitrógeno actúa con número de oxidación -3, es decir, se trata del compuesto más reducido para este elemento.

Método de determinación: Método de Nessler, que se basa en la formación de una dispersión coloidal amarillo-marrón al adicionar a la muestra el reactivo K₂[HgI₄]:



Las muestras deben ser pretratadas con ZnSO_4 y un álcali para eliminar algunos iones (Ca^{2+} , Mg^{2+} , Fe^{3+}) que precipitan con el reactivo Nessler. En ocasiones, es conveniente separar el NH_3 por destilación, para eliminar la turbidez, el color natural y ciertos compuestos orgánicos que interfieren en la reacción.

○ *El nitrógeno Kjeldahl (NTK)

Mide la cantidad de nitrógeno amoniacal y de nitrógeno orgánico además indica el contenido proteínico del agua.

Método de determinación: Volumetría o Espectrofotometría, Mineralización, Destilación (método Kjeldahl) y determinación del ion amonio por Espectrofotometría o Volumetría.

○ Fósforos y derivados

Los compuestos que contienen fósforo (P), tales como los fosfatos y nitrógenos son bionutrientes, es decir, sustancias necesarias para el crecimiento vegetal (Orozco et al., 2005).

El fósforo elemental no se encuentra habitualmente en el medio natural, pero los ortofosfatos, pirofosfatos, metafosfatos, polifosfatos y fosfatos orgánicamente unidos sí se detectan en aguas naturales y residuales. El fósforo es considerado como un macronutriente esencial, siendo acumulado por una gran variedad de organismos vivos.

El exceso de fosfatos causa la eutrofización, la cual provoca un incremento incontrolado de floraciones algales de cianobacterias (organismos microscópicos con células muy simples que realizan fotosíntesis y contribuyen muy positivamente a generar oxígeno, reciclar nutrientes y captar carbono y nitrógeno atmosférico al agua) estas producen toxinas en el organismo que las ingiere y una drástica disminución de oxígeno disuelto en el agua (Sharpley 2003).

En principio, estos bionutrientes no deberían ser considerados como contaminantes del agua, pero la actividad humana ha aportado excesos en los ecosistemas acuáticos (Sharpley 2003). En concentraciones superiores a 0.02 (ppm) de fósforo generalmente acelera la eutrofización (Sharpley 2003).

Los fosfatos están presentes en las aguas superficiales como resultado de la meteorización y lixiviación (proceso químico en la minería para extraer minerales valiosos del mineral) de las rocas portadoras de fósforo procedentes de la erosión del suelo, de aguas residuales, escorrentía agrícola y precipitación atmosférica (Kiely, 1999).

El fósforo inorgánico (ortofosfatos: fosfato trisódico, disódico, monosódico y diamónico; y polifosfatos: hexametafosfato y tripolifosfato de sodio, y pirofosfato tetrasódico) pueden provenir de agua residual doméstica como resultado de la degradación metabólica de las proteínas y eliminación de los fosfatos presentes en la orina. Las polifosfatos pueden estar presentes en algunos detergentes sintéticos (Sawyer 2001).

En la actualidad hay una fuente mayoritaria de aporte de fósforo al medio hídrico: los detergentes utilizados en la limpieza doméstica (se estima que aportan el 50% del fósforo presente en aguas naturales en zonas urbanas. El contenido en fósforo de un agua se reparte en tres tipos de compuestos: inorgánicos, orgánicos (disueltos o en suspensión) y en tejidos vivos.

En los inorgánicos, englobados bajo la forma de fosfatos, han de considerarse los equilibrios de disociación que sufre el ácido fosfórico:



En general, en aguas de pH neutro (entre 7 - 8), el 10 % del fósforo inorgánico se encuentra como (H_2PO_4^-) y el 90 % restante como ($\text{H}_2\text{PO}_4^{2-}$), directamente asimilable por la mayoría de los microorganismos acuáticos.

Método de determinación: Colorimetría. Los iones fosfato, con una solución ácida que contiene iones molibdato y antimonio forman un complejo antimonio-fosfomolibdato.

La reducción de este complejo con ácido ascórbico forma un complejo azul de molibdeno, intensamente coloreado. La medida de absorbancia a 880 (nm) permite determinar la concentración de fosfato.

Los polifosfatos y ciertos compuestos organofosforados se determinan tras su transformación, por hidrólisis con ácido sulfúrico, en fosfatos que se determinan por el método del molibdato.

○ Aceites y grasas

En este grupo se incluyen los aceites y las grasas que se encuentren en estado libre, ya sean de origen animal, vegetal o mineral, destacando entre estos últimos por su especial importancia los derivados del petróleo. La mayoría de estos productos son insolubles en el agua, pero pueden

1

2

3

4

5

6

7

existir en forma emulsionada (mezcla heterogénea de dos líquidos inmiscibles) o saponificada (nombre con el que se conoce el proceso químico de la hidrólisis de un éster en un medio básico, por el cual un cuerpo graso, unido a una base y agua).

Según su mezcla con los hidrocarburos, dan un aspecto irisado al agua, así como un sabor y un olor particulares.

Método de determinación: Extracción con disolventes o Análisis gravimétrico o por espectroscopia infrarroja.

○ Hidrocarburos

Bajo la denominación de hidrocarburos se encuentran agrupados una serie de compuestos cuya característica común es el presentar en su estructura átomos de carbono y de hidrógeno. Entre todas estas sustancias, se pueden diferenciar dos grupos que presentan una mayor importancia, los hidrocarburos derivados del petróleo y los hidrocarburos aromáticos policíclicos (HAPs). Estos últimos son cancerígenos.

Método de determinación: Espectrofotometría de infrarrojos o Cromatografía.

○ Detergentes

Como detergentes se designan a las sustancias que poseen unas importantes propiedades limpiadoras. Se trata de productos complejos constituidos por uno o varios agentes surfactantes (elemento que actúa como detergente, emulsionante o humectante y que permite reducir la tensión super-

1

2

3

4

5

6

7

ficial que existe en un fluido) compuestos minerales (carbonatos, fosfatos, polifosfatos, perboratos), frecuentemente asociados a materias orgánicas mejorantes, a enzimas y a secuestrantes. De todos ellos, los más característicos son los surfactantes, productos químicos orgánicos que reducen la tensión superficial del agua y de otros líquidos.

Método de determinación: Espectrofotometría.

○ Cloros y Cloruros

Generalmente los cloruros están presentes en aguas brutas y tratadas en concentraciones que pueden variar de pequeños trazos hasta centenas de (mg/l). Están presentes en forma de cloruro de sodio, calcio y magnesio. El agua del mar tiene elevada concentración de cloruros que está alrededor de 26,000 (mg/l). Altas concentraciones de cloruros pueden restringir el uso del agua debido al sabor que le confieren y por el efecto laxativo que pueden provocar. Los métodos convencionales de tratamiento de agua no remueven cloruros. Se puede hacer su remoción por ósmosis inversa o electrólisis (intercambio de iones).

Método de Determinación: Titulación con nitrato de plata.
(véase la figura 1.25)

Material:

- a) Bureta de 50 ml.
- b) Becker de 250 ml.
- c) Frasco Erlenmeyer de 250 ml.
- d) Medidor de pH.
- e) Probeta de 100 ml.
- f) Solución estándar de nitrato de plata 0.0141N.

- g) Solución indicadora de cromato de potasio (K_2CrO_4).
- h) Hidróxido de sodio 1N.
- i) Ácido sulfúrico 1N.
- j) Cloruro de sodio 0.0141N.

Técnica:

- a) Poner 100 ml de muestra en el Erlenmeyer.
- b) Ajustar el pH entre 7 y 10, si es necesario con (NaOH) o (H_2SO_4).
- c) Adicionar 1 ml de la solución indicadora de (K_2CrO_4).
- d) Titular con la solución estándar de nitrato de plata 0.041N hasta el viraje para amarillo rojizo que es el punto final de la titulación.
- e) Hacer un blanco como la muestra.

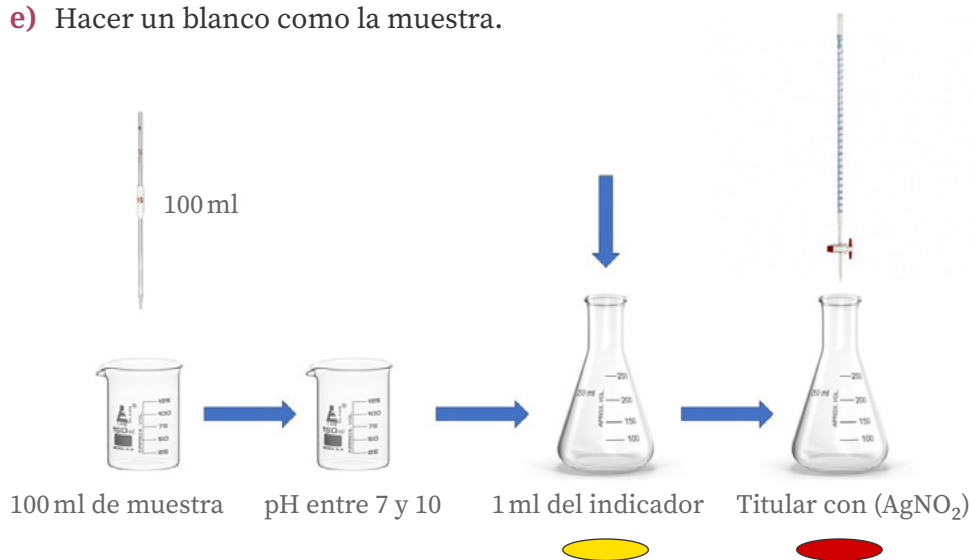


Figura 1.25 Diagrama de flujo del Análisis de Cloruros. (Fundación Nacional de Salud 2013)

Ejemplo: Determinar la cantidad de cloruros presentes en una muestra de agua de 50 ml con el método de determinación correspondiente si se sabe que $A = 50$ mg $B = 15$ mg $N = 1.0$

$$Cl = \frac{(A - B)(N)(35.45)}{(l) \text{ de la muestra}}$$

Sustituyendo:

$$Cl = \frac{(50 \text{ mg} - 15 \text{ mg})(1.0)(35.45)}{(0.050 \text{ l})}$$

$$Cl = 24,815 \left(\frac{\text{mg}}{\text{l}} \right)$$

El cloro elemental es un gas amarillo-verdoso altamente soluble en agua. Cuando se disuelve en ausencia de sustancias nitrogenadas (con la materia orgánica nitrogenada forma cloraminas) u otros productos que puedan interferir, el cloro es rápidamente hidrolizado a ácido hipocloroso (HOCl) y ácido clorhídrico (HCl). A su vez el ácido clorhídrico se disocia fácilmente a iones hidrógeno y cloruro, mientras que el ácido hipocloroso, que es un ácido débil, se disocia parcialmente en iones hidrógeno y iones hipoclorito (HCl^-). Las proporciones relativas de (Cl_2), (HOCl) y (OCl^-) en equilibrio (especies que en conjunto se denominan cloro libre disponible) se encuentran controlados por el pH, la temperatura y la fuerza iónica.

El cloro en agua reacciona fácilmente con las sustancias nitrogenadas para producir mono-, di- y triaminas, N-cloraminas y N-cloramidas y otros compuestos N-clorados (conocidos en conjunto como cloro disponible combinado).

Tanto las formas de cloro libre como las de cloro combinado participan en diversas reacciones con compuestos orgánicos para generar productos clorados. El cloro que permanece en agua después de un tratamiento se denomina cloro residual. El conjunto de cloro libre y cloro combinado se

nombrada cloro residual total (CRT) o (TRC total residual chlorine) en inglés. La medida de CRT se considera suficiente para definir la toxicidad sobre los organismos acuáticos de agua dulce.

El ion cloruro se encuentra ampliamente distribuido en el medio ambiente, generalmente en forma de cloruro sódico, potásico o cálcico. El gran inconveniente de los cloruros es el sabor desagradable que comunican al agua. Son también susceptibles de ocasionar una corrosión en las canalizaciones y en los depósitos, en particular para los elementos de acero inoxidable.

Método de determinación: Potenciometría con electrodo de ion específico.

○ Fluoruros

La mayoría de los fluoruros asociados con cationes monovalentes son solubles en agua, pero aquellos formados con cationes divalentes son normalmente insolubles.

Método de determinación: Potenciometría con electrodo de ion específico.

○ Sulfatos

El ion sulfato (SO_4^{2-}) es la forma oxidada estable del azufre, siendo muy soluble en agua.

Sin embargo, los sulfatos de plomo, bario y estroncio son insolubles. El sulfato disuelto puede ser reducido a sulfito y volatilizado a la atmósfera como (H_2S), precipitado como sales insolubles o incorporado a organismos vivos. Los sulfatos sirven como fuente de oxígeno a las bacterias, en condiciones

1

2

3

4

5

6

7

anaeróbicas, convirtiéndose en sulfuro de hidrógeno. Pueden ser producidos por oxidación bacteriana de los compuestos azufrados reducidos, incluyendo sulfuros metálicos y compuestos orgánicos.

Método de determinación: Turbidimetría, Gravimetría o Cromatografía iónica.

○ Cianuros

Como cianuros se incluyen una serie de diversos compuestos orgánicos caracterizados por el grupo $-C \equiv N$. Los gérmenes aerobios responsables de la depuración y los peces son sensibles a un contenido de 0,1 (mg/l) de (HCN).

Método de determinación: Potenciometría con electrodo de ion específico tras destilación previa.

○ Haloformos

Los derivados orgánicos de halógenos (Cl, F, Br, I) presentes en el agua se clasifican con el nombre de haloformos. Los compuestos que se han identificado más a menudo en agua son los trihalometanos, así como también el tetracloruro de carbono y el dicloroetano.

Método de determinación: Cromatografía de gases con detector de captura de electrones tras extracción previa.

1

2

3

4

5

6

7

Metales

Principalmente se agrupan los compuestos constituidos por los diferentes elementos metálicos, por lo cual las características de estos dependen, entre otros factores, del metal que esté incorporado.

Desde la perspectiva de los potenciales efectos que pueden generar, quizás los de mayor importancia son los compuestos de mercurio y de cadmio.

El mercurio puede formar numerosas especies, algunas con una apreciable solubilidad mientras que otras son bastante insolubles. La concentración de mercurio en medios acuosos es relativamente pequeña, encontrándose normalmente unido a materia particulada y al sedimento.

El mercurio presenta una elevada toxicidad potencial, principalmente como consecuencia de los procesos de bioacumulación (proceso de acumulación de sustancias químicas en organismos vivos de forma que estos alcanzan concentraciones más elevadas que las concentraciones en su medio o en los alimentos).

En las aguas naturales el cadmio se encuentra normalmente en la forma divalente, formando compuestos orgánicos e inorgánicos, principalmente como ion libre, cloruros y carbonatos.

Los carbonatos, sulfuros, e hidróxidos de cadmio presentan una baja solubilidad en agua, mientras que la solubilidad del ion cadmio disminuye con el incremento de pH porque se favorece la formación del hidróxido. El cadmio presenta una toxicidad elevada con efecto acumulativo.

El análisis de los metales presentes en un agua puede referirse a varias fracciones, que son diferentes y que, por tanto, ofrecerán diferentes resultados analíticos (véase la tabla 1.6)

Tabla 1.6 Análisis de los metales presentes en agua

METALES	CARACTERÍSTICAS
Totales	Corresponden a la concentración de metales después de someter la muestra de agua a algún proceso de digestión.
Suspensión	Son los retenidos en el filtro anterior.
Disueltos	Son los existentes en la muestra no acidificada y filtrada a través de un filtro de 0.45 (μm).

Adaptado de (APHA, 1995)

Si se quieren determinar metales disueltos o en suspensión, lo más aconsejable es efectuar la filtración lo antes posible desde la toma de muestras. Igual puede decirse respecto a los metales extraíbles: la extracción, cuanto antes, mejor.

Método de determinación: complexometría o espectrofotometría de absorción atómica.

Plaguicidas

Los plaguicidas se clasifican según sus usos, en insecticidas, fungicidas, herbicidas, acaricidas, nematocidas, rodenticidas, etc.

También pueden clasificarse atendiendo a sus características químicas. Además de sustancias minerales (azufre, sulfato de cobre, arseniato de plomo y de calcio), se emplean particularmente los compuestos orgánicos clorados, como son los insecticidas: lindano, aldrín, dieldrín o los herbicidas derivados de fenoxiácidos. Están presentes en el agua en concentraciones extremadamente bajas, generalmente menores que 0.1 ($\mu\text{g/l}$).

Entre los demás compuestos orgánicos, se encuentran principalmente los ésteres fosforados utilizados como insecticidas (paratión, malatión). Pero existen también compuestos orgánicos u organometálicos, cuyas moléculas llevan incorporados grupos funcionales muy variados: derivados de la urea, de las triacinas, empleados como herbicidas, carbamatos y ditiocarbamatos utilizados como fungicidas, etc.

En el medio acuático, la toxicidad de los pesticidas varía en función de su naturaleza y según las especies y su estado de desarrollo (huevo, alevín, adulto), así como dependen del medio en el que viven las especies piscícolas (contenidos en gases disueltos, temperatura y pH). Para los peces, los insecticidas clorados son mucho más tóxicos (aproximadamente 100 veces) que los derivados organofosforados.

Los herbicidas son mucho menos tóxicos que los insecticidas (2000 a 3000 veces menos). Considerados en su conjunto, los pesticidas fosforados son mucho más tóxicos para el hombre y los mamíferos que los pesticidas clorados.

Método de determinación: Cromatografía líquida de alta resolución, en inglés High Performance Liquid Chromatography (HPLC).

La medida directa de la muestra no es factible debido a la baja concentración y a la presencia de interferencias. Se emplea, por ello, una extracción. También se utiliza la cromatografía líquida de alta presión.

○ Oxígeno disuelto

El oxígeno es un oxidante que se encuentra en la atmósfera y juega un papel muy importante en las reacciones de oxidación-reducción acuosas,

1

2

3

4

5

6

7

así como también en la respiración microbiana, y es necesario para la vida de los peces y otros organismos acuáticos. El oxígeno es moderadamente soluble en agua, dependiendo la solubilidad de la temperatura, la salinidad, la turbulencia del agua y la presión atmosférica: disminuye cuando aumenta la temperatura y la salinidad, y cuando disminuye la presión atmosférica.

La solubilidad del oxígeno atmosférico en aguas dulces, a saturación y al nivel del mar, oscila aproximadamente entre 15 (mg/l) a 0°C y 8 (mg/l) a 25°C.

Método de determinación: electrometría o volumetría, aunque el método clásico es el de Alsterberg, donde se fija el oxígeno en la muestra mediante la adición de álcali-ioduro-nitruro y sulfato de manganeso, se añade ácido sulfúrico que libera yodo y se valora este con tiosulfato sódico utilizando almidón como indicador.

Interpretación de los resultados

El producto final de los trabajos de laboratorio serán los informes de resultados tras los diferentes análisis y ensayos realizados. Un estudio de caracterización de aguas residuales, sin una valoración final de los resultados en función de los objetivos inicialmente definidos, nos daría una información parcial. Por esta razón se hace necesario una interpretación de los datos analíticos frente a diferentes criterios. Estos criterios de valoración, apoyados generalmente en estudios científicos, han sido establecidos como guía para alcanzar unos niveles de seguridad en la contaminación que garanticen la salud humana, la protección del medio ambiente y la protección de los sistemas de saneamiento y depuración.

1

2

3

4

5

6

7

Los criterios utilizados en la valoración de las características analizadas en los vertidos de aguas residuales son, generalmente, aquellos reflejados en la legislación nacional, autonómica o municipal.

Las tablas 1.7 y 1.8 presentan los niveles de referencia para diversos parámetros en aguas potables y aguas residuales, respectivamente.

Tabla 1.7 Características fisicoquímicas del agua potable

AGUAS POTABLES (véase unidades en cada apartado)		
Parámetro	Nivel guía	Valor máximo
Temperatura °C	12	20
pH	6.5 a 8.5	9.5
Conductividad	200	-
Cloruros	25	200
Sulfatos	25	250
Sílice	-	-
Calcio	100	-
Magnesio	30	50
Sodio	20	150
Potasio	10	12
Aluminio	0.05	0.2
Dureza total	-	-
Residuo seco a 180°C	-	1500
Oxígeno disuelto	-	-
Dióxido de carbono libre	-	-

(Reglamento técnico sanitario, 1990)

1

2

3

4

5

6

7

Tabla 1.8 Características fisicoquímicas del agua residual

AGUAS RESIDUALES URBANAS (mg/l)			
Parámetro	Contaminación fuerte	Contaminación media	Contaminación ligera
Sólidos Totales	1000	500	200
Volátiles	700	350	120
Fijos	300	150	80
Sólidos en suspensión totales	500	300	100
Volátiles	400	250	70
Fijos	100	50	30
Sólidos disueltos totales	500	200	100
Volátiles	300	100	50
Fijos	200	100	50
DBO ₅ a 20°C	300	200	100
Oxígeno consumido	150	75	30
Oxígeno disuelto	0	0	0
Nitrógeno total	86	50	25
Orgánico	35	20	10
Amoniaco libre	50	30	15
Nitritos	0.1	0.05	0
Nitratos	0.4	0.2	0.1
Cianuros	175	100	15

(Reglamento técnico sanitario, 1990)

1

2

3

4

5

6

7

Tema. 1.7 Análisis químico del agua

Determinar la Demanda Bioquímica de Oxígeno (*DBO*) a cinco días por el método de determinación correspondiente si se sabe que

$$D_1 = 92 \text{ mg}, D_2 = 81 \text{ mg}, B_1 = 7 \text{ mg}, B_2 = 5 \text{ mg}, dd = 0.1 \text{ y } P = 0.030$$

$$R = 30.0 \text{ (mgO}_2\text{/l)}$$

Determinar la Cantidad de cloruros presentes en una muestra de agua de 35 ml con el método de determinación correspondiente si se sabe que

$$A = 40 \text{ mg}, B = 20 \text{ mg}, N = 1.0$$

$$R = 20, 257.14 \text{ (mg/l)}$$

Determinar la cantidad de cloruros presentes en una muestra de agua de 20 ml con el método de determinación correspondiente si se sabe que

$$A = 60 \text{ mg}, B = 55 \text{ mg}, N = 1.0$$

$$R = 8, 862.5 \text{ (mg/l)}$$

Determinar la alcalinidad de una muestra de agua de 50 ml aplicando la ecuación de la titulación correspondiente donde (H_2SO_4) gasto es de 5 ml/l.

$$R = 100 \text{ (mg/l)}$$

Determinar la alcalinidad de una muestra de agua de 50 ml aplicando la ecuación de la titulación correspondiente donde (H_2SO_4) gasto es de 17 ml/l.

1

2

3

4

5

6

7

$$R = 340 \text{ (mg/l)}$$

Determinar la dureza de una muestra de agua de 40 ml con 30 ml de AEDT, aplicando la ecuación de la titulación correspondiente, suponiendo que el factor de corrección es de 0.2.

$$R = 15.0 \text{ (mg CaCO}_3\text{/l)}$$

Determinar la dureza de una muestra de agua de 25 ml con 10 ml de AEDT, aplicando la ecuación de la titulación correspondiente, suponiendo que el factor de corrección es de 0.2.

$$R = 8.0 \text{ (mg CaCO}_3\text{/l)}$$

Determinar la salinidad de una muestra de agua de 40 ml mediante la determinación correspondiente si el peso del crisol es de 85 mg y el peso final es de 110 mg.

$$R = 625,000 \text{ (mg/l)}$$

Determinar la salinidad de una muestra de agua de 40 ml mediante la determinación correspondiente si el peso del crisol es de 85 mg y el peso final es de 110 mg.

$$R = 450,000 \text{ (mg/l)}$$

Determinar el Gas Carbónico Libre mediante la titulación correspondiente, en una muestra de agua con un factor de corrección de 0.3, (CO_2) libre igual a 0.70 mg/l una alcalinidad B de 0.25 mg/l y una alcalinidad C de 0.39 mg/l.

$$R = 3.93 \text{ (mg/l)}$$

1

2

3

4

5

6

7

Determinar el Gas Carbónico Libre mediante la titulación correspondiente, en una muestra de agua con un factor de corrección de 0.25, (CO_2) libre igual a 0.65 mg/l una alcalinidad B de 0.24 mg/l y una alcalinidad C de 0.29 mg/l.

$$R = 2.878 \text{ (mg/l)}$$

1

Determinar la Demanda Química de Oxígeno (DQO) de una muestra de agua de 25 ml, si

$$A = 10 \text{ ml}, B = 4 \text{ ml}, N = 0.04 \text{ y } F = 0.15$$

2

$$R = 11,520 \text{ (mg } O_2/l)$$

3

Determinar la Demanda Química de Oxígeno (DQO) de una muestra de agua de 45 ml, si

$$A = 25 \text{ ml}, B = 20 \text{ ml}, N = 0.04 \text{ y } F = 0.15$$

4

$$R = 5,333.33 \text{ (mg } O_2/l)$$

Determinar la Demanda Bioquímica de Oxígeno (DBO) a cinco días por el método de determinación correspondiente si se sabe que

5

$$D_1 = 85 \text{ mg}, D_2 = 80 \text{ mg}, B_1 = 4 \text{ mg}, B_2 = 2 \text{ mg}, dd = 0.1 \text{ y } P = 0.040$$

6

$$R = 7.5 \text{ (mg } O_2/l)$$

7

2.1 El agua en la tierra

El agua es la fuente de toda la vida que se encuentra presente en el planeta Tierra, por lo tanto, se encuentra presente de diferentes formas por todos los rincones de la Tierra y presentan una distribución muy variable dependiendo la región, ya que existen regiones donde la abundancia de agua es basta y otras por el contrario donde existe una gran escasez del líquido vital.

Cuando se trata de la distribución del agua en el planeta, es necesario comenzar hablando del agua salada ya que la mayor parte de agua que se encuentra presente en la Tierra corresponde a este sector del agua salada esto es así gracias a que el porcentaje mayor del agua que cubre proviene tanto de océanos como mares. De forma más puntual un 96,54% del agua total del planeta proviene de allí. Esto significa que los mares y los océanos contienen más de 1.338.000.000 kilómetros cúbicos de agua.

Sin embargo, contrario a lo que el colectivo común piensa la cantidad total de agua en el planeta permanece constante sin presentar cambio alguno. El agua puede estar presente en diversas formas dígase forma sólida (hielo), líquida y gaseosa (vapor de agua) esta se puede observar en océanos, ríos, nubes, lluvias y otras formas de precipitación en frecuente cambio de estados.

En conjunto las diferentes formas que presenta el agua contribuyen al ciclo de agua, donde el agua superficial se evapora convirtiéndose en vapor de agua que posteriormente será condensada convirtiéndose en nubes las cuales se precipitaran dando origen a la lluvia, la lluvia podrá tomar dos caminos, el primero sería incorporarse a cuerpos de agua superficial donde permanecerá un tiempo hasta evaporarse nuevamente y la segunda será la infiltración de esta al suelo donde terminara por recargar los acuíferos subterráneos. En la figura 2.1 se encuentran los principales usos de agua en México.

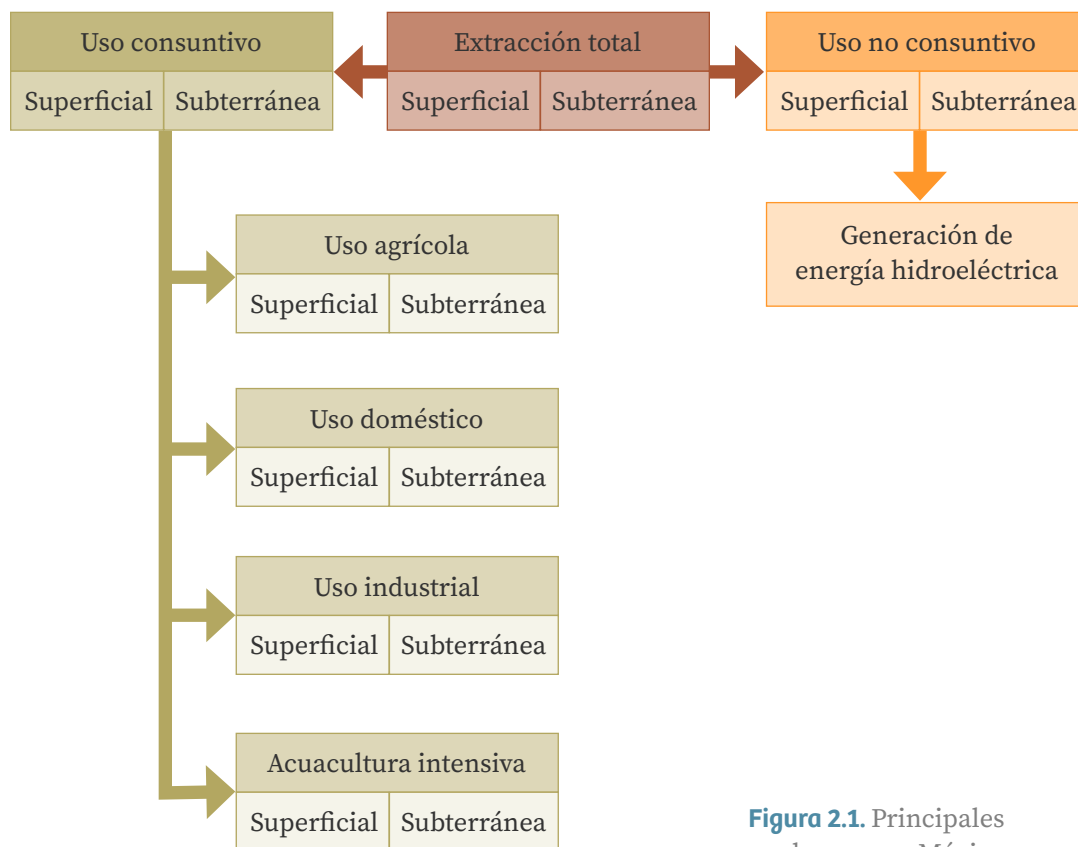


Figura 2.1. Principales usos de agua en México (Adaptación del esquema de Jumapam 2021).

Del agua total existente en el mundo un 97.5% se encuentra en mares y océanos de agua salada, por lo que únicamente un pequeño 2.5% es agua dulce. Ahora del total de agua dulce que se encuentra en el mundo un 69% se encuentra en los polos y las cumbres de las montañas más altas presentes de forma sólida (hielo).

La segunda mayor concentración de agua dulce mundial se encuentra en la humedad presente en los suelos y los acuíferos profundos con un significativo 30%. Finalmente, solo el 1% de agua dulce presente en el mundo es la que escurre a través de cuencas hidrográficas en formas de arroyos y ríos que son depositados en lagos, lagunas y otros cuerpos de agua superficiales, este pequeño porcentaje es el que se encuentra en constante reposición gracias al ciclo hidrogeológico.

En la actualidad existe una problemática bastante importante cuando se habla de agua dulce ya que esta constituye una serie de recursos naturales muy escasos, amenazados y en peligro de extinción por más dramático que esto suene. Sin embargo, esto se justifica ya que una serie de estudios sobre los balances hídricos del planeta arrojan que solamente el 0.007% de las aguas dulces se encuentran de manera real disponibles para todos los usos humanos directos.

Dicho de otra forma, los procesos sociales vitales dependen únicamente de esta pequeñísima porción del agua presente en el planeta. Las evaluaciones más recientes de los especialistas y organizaciones internacionales conectadas con los problemas del agua expresan como fecha crítica el año 2025 debido a que para este año se tiene estimado que más de las dos terceras partes de la humanidad sufrirá algún estrés por la falta de este líquido vital.

Teniendo presente que el agua es un recurso natural que puede agotarse, a continuación, se presentara una serie de consejos a seguir para el cuidado del agua.

- * Reutilizar el agua en otras tareas del hogar (Lavar pisos, regar las plantas o para el baño)
- * Instalación de un sistema de captación de agua pluvial.
- * Duchas más cortas (en promedio con una duración de 5 minutos o menos).
- * Nunca dejar que el agua de los grifos corra de manera innecesaria al lavarte los dientes, lavar los trastes o afeitarte.
- * Cuidado con las fugas en el baño, la cocina y la instalación hidráulica en general.

2.2 Ciclo del agua y la hidrología

El ciclo del agua o ciclo hidrológico es un proceso natural que está constituido por un conjunto de fenómenos físicos y químicos que ocurren entre el agua y el medio ambiente, los cuales trazan las posibles trayectorias del compuesto químico por la atmósfera, superficie y subsuperficie de la Tierra en sus diferentes estados de la materia.

Al tratarse de un ciclo, establecer un inicio y final de este es indiferente al objeto de estudio por lo que las distintas fases, no tienen un orden específico. Dichas fases que integran el ciclo del agua son:

1. **Precipitación.** Durante esta etapa, el agua contenida en las nubes en forma de vapor se condensa debido a un fenómeno atmosférico que ocurre entre el calor del sol y el agua evaporada. La precipitación también incluye la caída de nieve, aguanieve, granizo y lluvia.

En el ciclo del agua, esta fase representa una dotación de agua dulce sobre ecosistemas que requieren de este líquido para la vida animal y vegetal.

2. Infiltración. Una vez sucedida la fase de precipitación, parte del agua que cae sobre la superficie terrestre se filtra para seguir uno de los siguientes trayectos:

a) Transpiración. Después de filtrarse, parte del agua es utilizada por las plantas para su crecimiento, sin embargo, el agua excedente es evaporada por las mismas en un fenómeno que se denomina transpiración vegetal.

b) Evaporación. Cuando el agua se infiltra y queda retenida en los estratos debajo de la superficie, se evapora y constituye esta parte de la infiltración. Conjuntamente la transpiración y evaporación en esta etapa es estudiada como evapotranspiración y su investigación tiene múltiples aplicaciones a nivel social.

3. Escorrentía superficial. Se refiere a la cantidad de agua que se descarga de una cuenca de drenaje durante un periodo de tiempo determinado, por lo que es el flujo de agua por tierra, después de cada lluvia o deshielo. La escorrentía puede ser clasificada en:

a) Escorrentía superficial: Esta escorrentía no logra infiltrarse en la superficie del terreno debido a las pendientes y acción de la gravedad, por lo que suele alimentar a los mares y océanos.

b) Escorrentía hipodérmica: Esta escorrentía se infiltra dentro del terreno y circula por el subsuelo en cortas distancias y poca profundidad, cuando se encuentra con un canal de flujo pasa a ser escorrentía superficial.

c) **Escorrentía subterránea:** Esta escorrentía se infiltra hasta el punto de alcanzar el nivel freático y circula hasta alcanzar la red de drenaje principal.

4. **Condensación.** En esta parte del proceso, el agua pasa de estado gaseoso a líquido, esto se produce cuando la presión de vapor de agua es mayor que la presión de vapor de saturación, generando las nubes o en ciertas zonas nieblas.

En la figura 2.2, se muestra un esquema del proceso anteriormente mencionado.

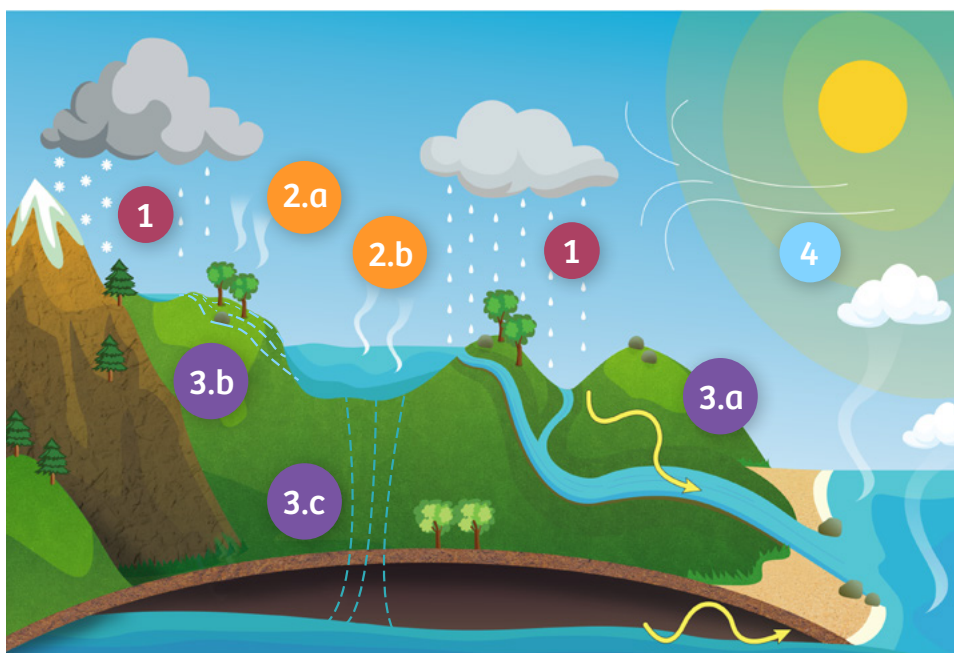


Figura 2.2 El Ciclo del agua

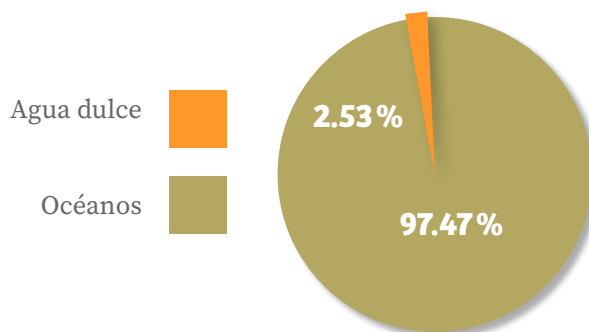
De acuerdo con informes presentados por la UNESCO, se estima que en el globo existe un volumen de 1,386,000,000 kilómetros cúbicos de agua de los cuales la separación de agua salada y dulce se muestra en la Tabla 2.1.

Tabla 2.1. Volúmenes de agua

Componente	Volumen (Km ³)	Porcentaje
Agua salada	1,350,955,400	97.47%
Agua dulce	35,029,210	2.53%
Agua total	1,385,984,610	100.00%

Estos porcentajes se pueden representar de otra manera como en la figura 2.3 que se muestra a continuación:

Figura 2.3.
Porcentajes
de agua en el
mundo



La mayor parte del agua salada se encuentra en océanos, mares, acuíferos cercanos a las costas y algunos lagos. De todo este volumen, sólo pequeñas cantidades son sometidas a procesos de desalinización debido a que este tipo de procesos resulta ser bastante caro, sin embargo, la importancia del agua salada radica en el mantenimiento de la flora y fauna marina y en la navegación interoceánica de grandes barcos.

Por otra parte, el agua dulce es explotada debido a que los procesos de tratamiento son mucho menos costosos a comparación del agua salada. No obstante, grandes cantidades de agua dulce son inutilizables debido a que están almacenadas en glaciares gigantescos, es decir, se encuentran en estado sólido.

A continuación, en la tabla 2.2 se muestra la distribución de agua dulce en el globo.

Tabla 2.2. Volúmenes y porcentajes de agua dulce

Componente	Volumen (km ³)	Porcentaje
Agua dulce no utilizable	24,378,020	69.59%
Agua dulce superficial	104,590	0.30%
Agua dulce subterránea	10,546,600	30.11%
Agua dulce total	35,029,210	100.00%

Esta tabla puede ser vista de una forma gráfica como se muestra en la figura 2.4.

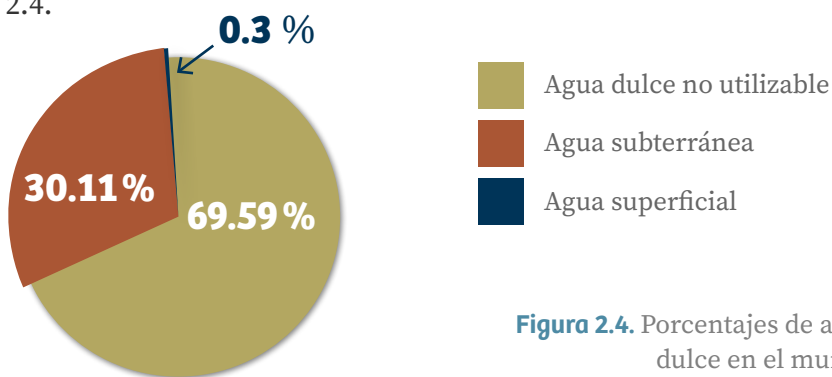


Figura 2.4. Porcentajes de agua dulce en el mundo

El agua dulce superficial está representada por los ríos, lagos, embalses y pantanos y es una de las principales fuentes de suministro en los proyectos de ingeniería. Cabe mencionar que el vapor de la atmósfera y la nieve acumulada en las montañas son porcentajes muy pequeños que varían en el transcurso del año.

Factores meteorológicos, geográficos, geológicos, y astronómicos entre otros, interfieren para que el agua no esté distribuida uniformemente.

Debido a esto, existe déficit en algunas zonas y exceso en otras.

A continuación, se presenta la tabla 2.3 en donde por clasificación climatológica se hace una distribución de los recursos hidráulicos sobre el globo.

Tabla 2.3. Clasificación del clima según Köppen

Grupo climatológico	Características	Tipo climático	Precipitación
Climas húmedos tropicales	Se presenta en zonas de alta precipitación, con temperaturas mayores a los 18°C	Bosque lluvioso Savanna	No hay estación seca/ combina lluvias y sequías
Climas secos	Se presenta en zonas semi áridas, en las cuales la evaporación es mayor a la precipitación.	Estepa Desierto	Costa estación seca/ constantemente seco
Climas húmedos mesotérmicos	Se presenta en zonas lluviosas, donde los periodos de inviernos son cortos y las temperaturas varían entre 0°C y 18°C.	Mediterráneo Verano húmedo Verano frío	Verano seco, invierno lluvioso/llueve todo el año y mayormente en verano/llueve todo el año, pero mayormente en invierno
Climas húmedos microtérmicos	Se presenta en zonas lluviosas, con periodos largos de invierno, con temperaturas menores a 0°C en los meses fríos y mayores a 10°C en los cálidos.	Verano cálido Verano frío Boreal	Llueve todo el año, pero más en invierno, Nieve en invierno/llueve todo el año, pero más en verano, largo periodo de nieve/poca lluvia en el año, mayor en verano
Climas polares	Las temperaturas están siempre por debajo de los 0°C.	Tundra Capa de hielo	Poca precipitación en el año, subsuelo congelado/poca precipitación en el año, superficie cubierta por nieve y hielo

1

2

3

4

5

6

7

Hidrología

La hidrología se define como la ciencia que estudia el agua en la naturaleza, su distribución, circulación, movimiento, almacenamiento y propiedades físicas y químicas en los océanos, la atmósfera y la superficie terrestre. Todo este estudio está relacionado a cada fase del ciclo del agua o hidrológico.

Acuíferos

Son formaciones naturales que se dan debido a las precipitaciones y a formaciones rocosas e impermeables que permiten el almacenamiento de agua debajo de la superficie terrestre. La importancia de los acuíferos radica en que son zonas que, por almacenar agua, permite su

extracción y uso humano, además que el agua que fluye por los acuíferos alimenta a cuerpos de agua como lagos, pantanos, manantiales que son sustento de vida para diferentes tipos de vida.

Existen distintas clasificaciones para los acuíferos, que se basan en distintos criterios para su definición:

* **Por su extensión:**

- **Acuíferos locales o puntuales:** se refiere a los que son pequeños o de pequeña extensión.
- **Acuíferos regionales:** de gran extensión.

* **Por su presión hidrostática:**

- **Acuíferos libres:** se refiere a los cuerpos de agua que están por encima de la formación permeable, por lo que están en contacto con el aire.

1

2

3

4

5

6

7

- **Acuíferos confinados:** son aquellos que se encuentran por debajo de la formación impermeable, por sus condiciones físicas, existe una mayor presión hidrostática además de estar en una zona totalmente saturada.
- **Acuíferos semiconfinados:** Son aquellos que se encuentran por debajo de un estrato que no es del todo permeable, por lo que permite la circulación del agua a través de éste.

En la figura 2.5 y 2.6 se presentan los acuíferos libres y confinados respectivamente.

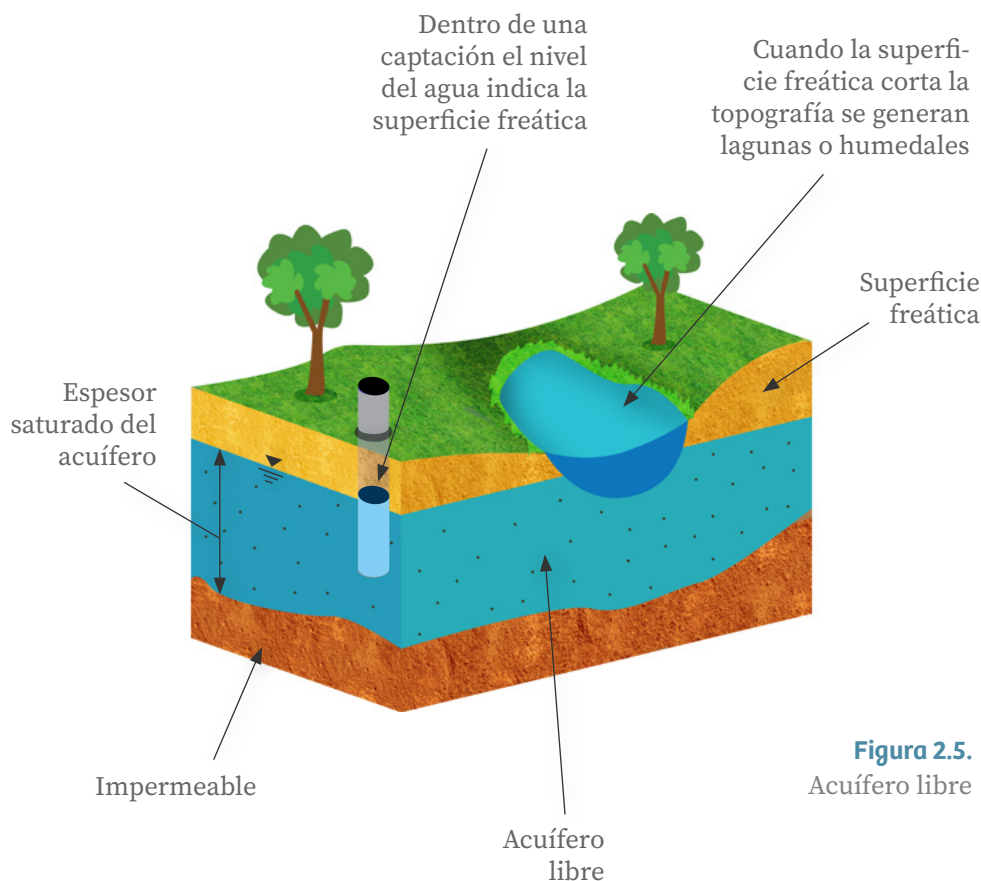


Figura 2.5.
Acuífero libre

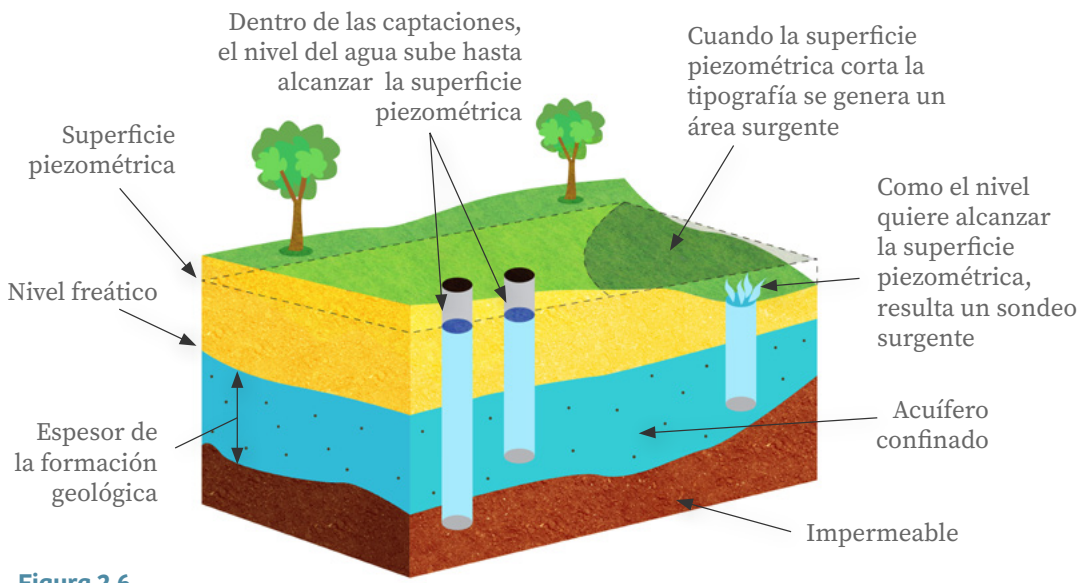


Figura 2.6.
Acuífero confinado

Por último, en la figura 2.7, se integra el acuífero semiconfinado.

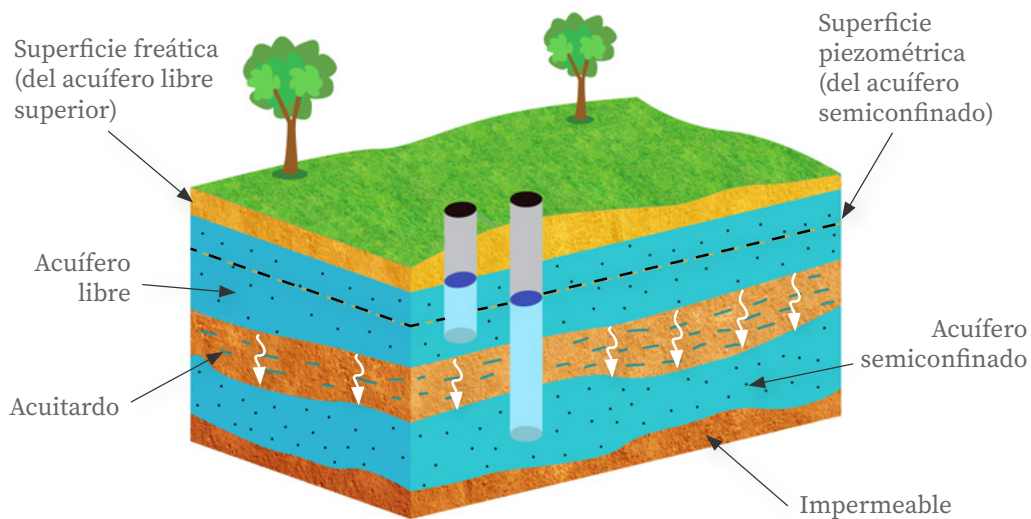


Figura 2.7.
Acuífero semiconfinado

* **Por las características litológicas (características de la roca):**

- **Acuíferos detríticos:** Son aquellas que contienen rocas de tipo detríticos, que son sedimentos con una porosidad intergranular ocasionada por un proceso de formación de roca en el cual un gas se transforma en un sólido.
- **Acuíferos carbonatados:** Son de alta permeabilidad, conformados por rocas sedimentarias dolomíticas y de calizos.

2.3 El suelo y relación con el agua

La definición de “suelo” es un término que tiene muchas definiciones e interpretaciones del que hacen uso diferentes profesionales, su definición e interpretación varía de acuerdo con la rama de estudio y aplicación, pero siempre compartiendo características en común.

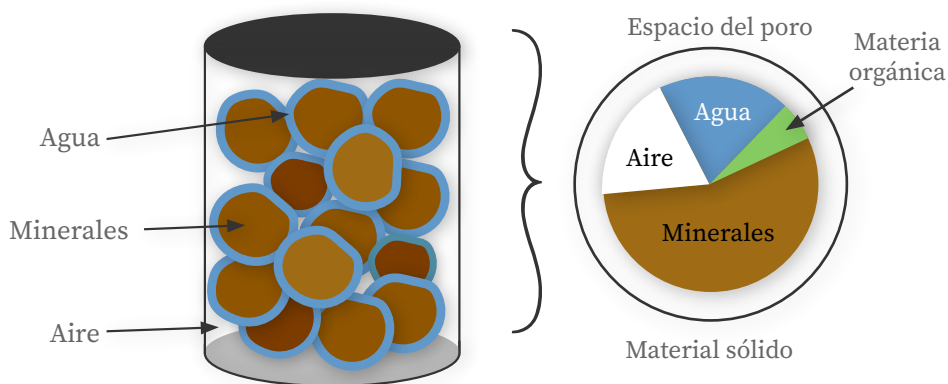


Figura 2.8. Composición de los suelos

De una manera general se puede decir que el Suelo es un “Conjunto con organización definida y propiedades que varían vectorialmente”. Una de sus características es que en la dirección vertical (ordenadas) generalmente sus propiedades cambian mucho más rápidamente que en la horizontal (abscisas).

Los suelos deben su origen a una gran variedad de causas que excede cualquier tipo de descripción por muy detallada que esta sea, como resultado se tiene una diversidad de tipos de suelos resultantes. La formación del suelo es un proceso que tarda mucho tiempo para que alcance las propiedades físicas y químicas necesarias para ser considerado un suelo.

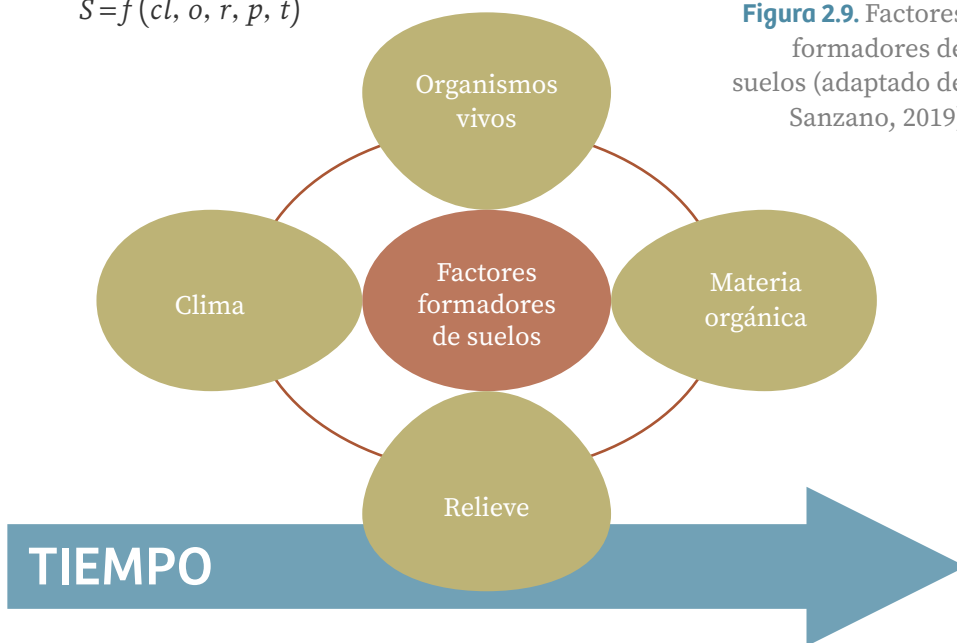
El proceso de formación del suelo está determinado por la interacción de cinco factores de formación (véase la figura 2.9).

1. Clima (*cl*)
2. Organismos (*o*)
3. Relieve/topografía (*r*)
4. Material orgánico/parental (*p*)
5. Tiempo (*t*)

Por simplicidad el suelo se puede expresar mediante la siguiente igualdad:

$$S = f(cl, o, r, p, t)$$

Figura 2.9. Factores formadores de suelos (adaptado de Sanzano, 2019)



Composición del suelo

Los suelos están compuestos por tres fases, la fase sólida, la fase líquida y la fase gaseosa. Además, otro porcentaje muy pequeño es una mezcla entre la materia orgánica, minerales y organismos vivos.

- a) **Fase sólida:** Representa el esqueleto del suelo y son aquellas partículas o fragmentos de roca que se encuentran en el mismo, compuesta en un 95% de materia inorgánica y entre 1 y 5% a materia orgánica. La materia inorgánica puede dividirse de acuerdo con el tamaño de las partículas de arena, limo y arcilla.
- b) **Fase gaseosa:** Representa el aire, gases atrapados o generados por la materia orgánica o reacciones químicas de los mismos (poros no ocupados por el agua).
- c) **Fase líquida:** Representa el agua libre que rellena los poros o espacios entre las rocas, su contenido puede ser variable de acuerdo con las condiciones del suelo.

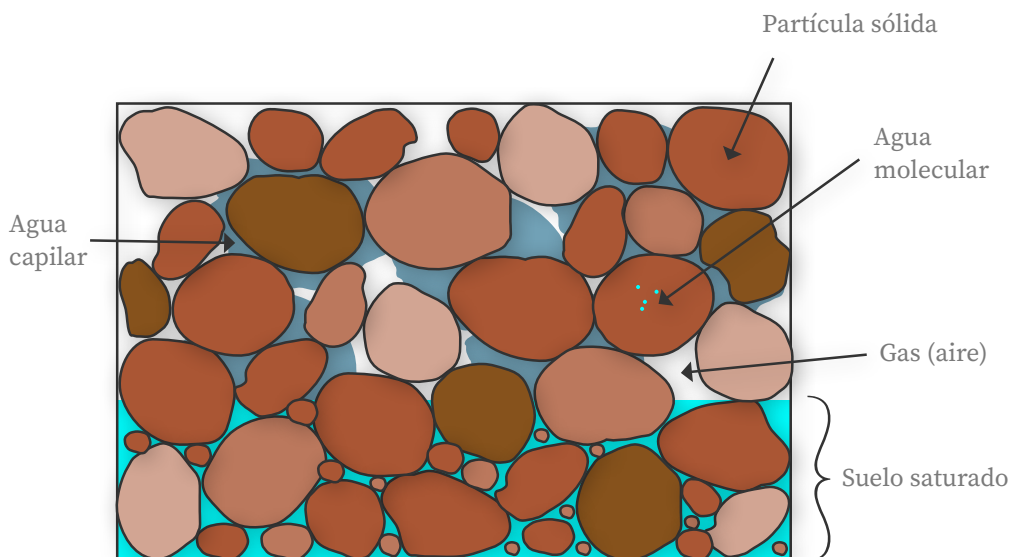


Figura 2.10 Composición del suelo. (Adaptado de Bianco Geymet)

Cuando el agua llega a la superficie por medio de precipitación o riego, se infiltra al suelo por gravedad llenando los poros, grietas y fisuras del suelo alcanzando de manera parcial o máxima capacidad de almacenamiento mandando el excedente a recarga de arroyos, ríos o cualquier tipo de cuerpos de agua.

Del total de agua dulce en la Tierra, 80% está en forma de hielo y en forma líquida cerca del 1% se considera superficial y de este porcentaje entre 20% y 40% es utilizable por los suelos y es biológicamente activa, por ello el agua en el suelo es tan importante en los ecosistemas terrestres.

Importancia del agua en el suelo:

- * Evapotranspiración
- * Nutrición de plantas
- * Formación de solución de suelo (Agua + nutrientes del suelo)
- * Control de alto grado en el aire y temperatura del suelo

Infiltración

La infiltración de agua en el suelo es muy importante, porque de ahí se componen las fases del suelo, ya se líquida, sólida y gaseosa, teniendo en cuenta que el agua compone la fase líquida del suelo y sin esta el suelo estaría muerto, solo roca y aire que son los componentes de la fase sólida y gas.

La infiltración es el proceso por el cual el agua en la superficie de la tierra entra en el suelo. La tasa de infiltración, en la ciencia del suelo, es una medida de la tasa a la cual el suelo es capaz de absorber la precipitación o la irrigación. Se mide en pulgadas por hora o milímetros por hora.

1

2

3

4

5

6

7

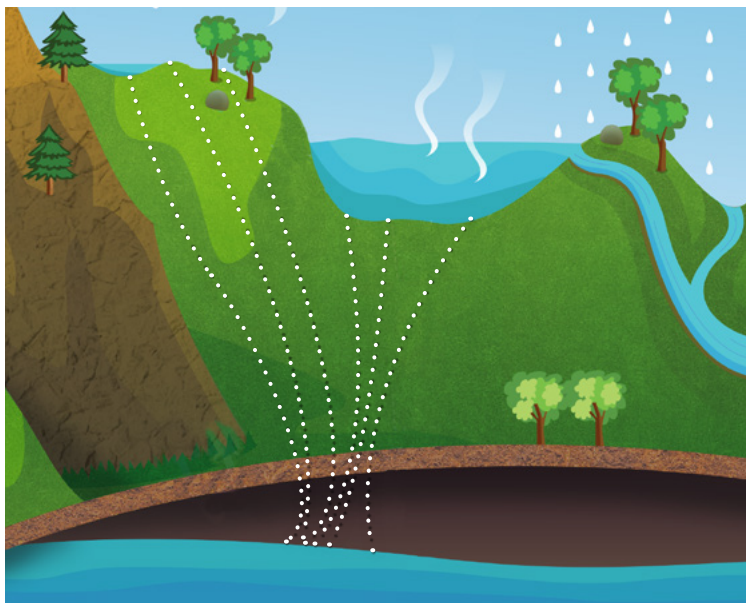


Figura 2.12
Infiltración

Permeabilidad

Permeabilidad es la propiedad que tiene el suelo de transmitir el agua y el aire, mientras más permeable sea el suelo, mayor será la filtración. Por regla general, como se muestra a continuación, mientras más fina sea la textura del suelo, más lenta será la permeabilidad:

Tabla 2.4. Variación de la permeabilidad según la textura del suelo (FAO, 2021)

Suelo	Textura	Permeabilidad
Suelos arcillosos	Fina	De muy lenta a muy rápida
Suelos limosos	Moderadamente fina	
	Moderadamente gruesa	
Suelos arenosos	Gruesa	

Tabla 2.5. Permeabilidad media para diferentes texturas de suelo en cm/hora (FAO, 2021).

Arenosos	5 cm/hora
Franco arenosos	2.5 cm/hora
Franco	1.3 cm/hora
Franco arcillosos	0.8 cm/hora
Arcilloso limosos	0.25 cm/hora
Arcilloso	0.05 cm/hora

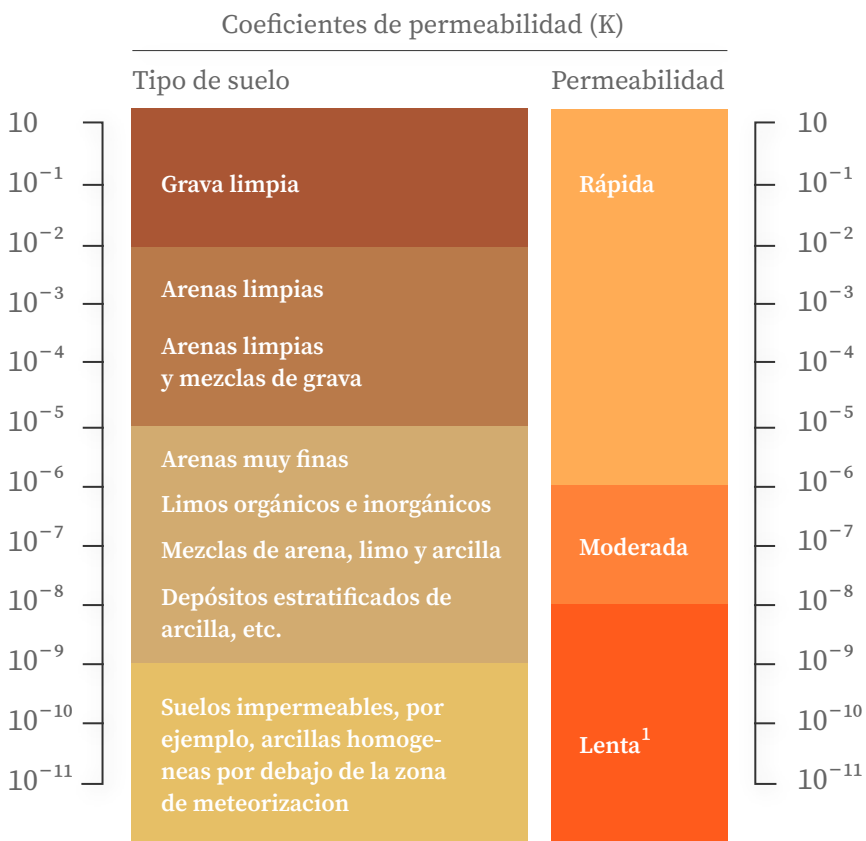


Figura 2.13. Coeficiente de permeabilidad. (Adaptado de FAO, 2021)
1. Prácticamente impermeable

Drenaje

- * Es la forma de desalojo del agua en una cuenca.
- * Es toda estructura, natural o artificial, que facilitan el escurrimiento y evita el almacenamiento del agua en una zona particular.
- * Existen dos tipos de drenaje: el natural, formado por las corrientes superficiales y subterráneas; el artificial, integrado por conducciones construidas por el hombre.

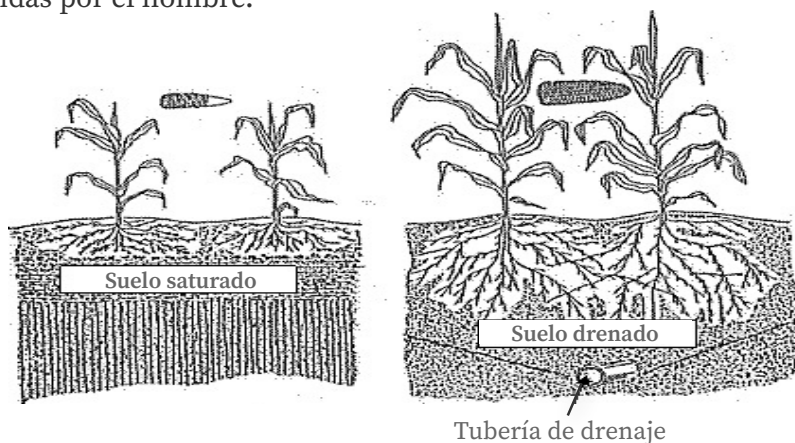


Figura 2.15 Drenaje. (Universidad Complutense de Madrid, 2019)

Escorrimento

El escurrimiento es un proceso físico que consiste en el escurrimiento del agua de lluvia por la red de drenaje hasta alcanzar la red fluvial. La esorrentía es uno de los procesos básicos que se incluye en el ciclo del agua.

Se pueden distinguir varios tipos de esorrentía:

- * **Esorrentía superficial o directa:** es la precipitación que sobre la superficie del terreno discurre por la acción de la gravedad sin infiltrarse en el suelo.

- * **Escorrentía hipodérmica:** es el agua de precipitación infiltrada en el suelo que se mueve sobre los horizontes superiores y reaparece almacenado como manantial o se incorpora a la red de drenaje superficial.
- * **Escorrentía subterránea:** es la precipitación que se infiltra hasta el nivel freático circulando hasta alcanzar la red de drenaje.



Figura 2.16.
Escurrimiento

Formas de agua en el suelo

- * **Agua gravitacional:** esta agua depende del tamaño del poro en el suelo mientras más grande sea más rápido se pierde el agua en el suelo a causa de la gravedad.
- * **Agua retenida:** Del mismo modo que la gravitacional depende del tamaño del poro en el suelo, en esta forma mientras más fino sea el poro mejor retención tendrá del agua.

- * **Agua de combinación química:** Es agua en combinación con elementos o compuestos químicos que es biológicamente inactiva.
- * **Agua capilar:** Es agua contenida en poros de tamaño pequeño y es biológicamente activa.
- * **Agua higroscópica:** Es agua en forma de vapor que no puede ser absorbida por plantas y es retenida por sólidos de los suelos con valores de tensión a -31 bar.

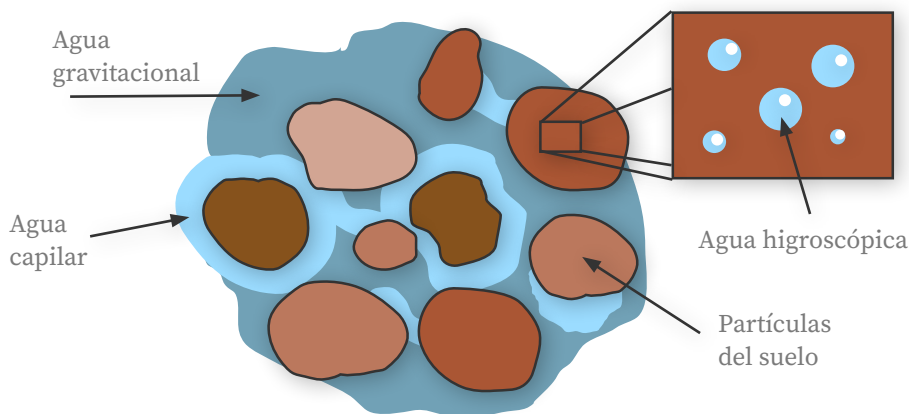


Figura 2.16. Formas de agua en el suelo

2.4 Agua superficial y subterránea

Agua superficial

Las aguas superficiales son las aguas que circulan sobre la superficie de la corteza terrestre. El agua superficial se produce por la escorrentía generada a partir de las precipitaciones o por el afloramiento de aguas subterráneas. Una vez producida, el agua superficial sigue el camino que le ofrece menor resistencia pudiéndose presentar en forma correntosa, como en el caso de ríos y arroyos, o quietas si se trata de lagos o embalses.

La calidad de los ríos y arroyos varía de acuerdo con los caudales estacionales y puede cambiar significativamente a causa de las precipitaciones y vertidos que recibe, o del terreno y la composición mineralógica del mismo. Los lagos y embalses presentan, en general, menor cantidad de sedimentos que los ríos, sin embargo, están sujetos a mayores impactos desde el punto de vista de actividad microbiológica por la cantidad de movimiento que presentan ya que, al tener poco o nulo movimiento en el recorrido del ciclo del agua, comparado con ríos o mares que tiene corrientes marinas, facilita la generación de microbiota. (Figura 2.17).



*fotografía de: Sendas de viaje, las demás con licencia de Creative Commons

Figura 2.17. Aguas Superficiales

Agua subterránea

El agua subterránea es de esencial importancia para nuestra civilización porque supone la mayor reserva de agua potable en las regiones habita-

das por los seres humanos. Puede aparecer en la superficie en forma de manantiales, o puede ser extraída mediante pozos. En tiempos de sequía, puede servir para mantener el flujo de agua superficial, pero incluso cuando no hay escasez, es preferible utilizar agua subterránea porque no tiende a estar contaminada por residuos o microorganismos. Aunque el agua subterránea está menos contaminada que la superficial, la contaminación de este recurso también se ha convertido en una preocupación en los países industrializados, porque actualmente se generan residuos que acaban en rellenos sanitarios, los cuales a veces podrían no estar correctamente diseñados, permitiendo el intercambio entre los lixiviados del relleno y el agua subterránea.

A nivel global, el agua subterránea representa unas veinte veces más que el total de las aguas superficiales de todos los continentes e islas, de ahí la importancia de esta agua como reserva y como recurso de agua dulce. Además, tiene un importante papel en la naturaleza. El efecto de la gran reserva de agua respecto al flujo anual es esencial para mantener el caudal de base de muchos ríos y la humedad del suelo en las riberas y áreas bajas. (Figura 2.18).

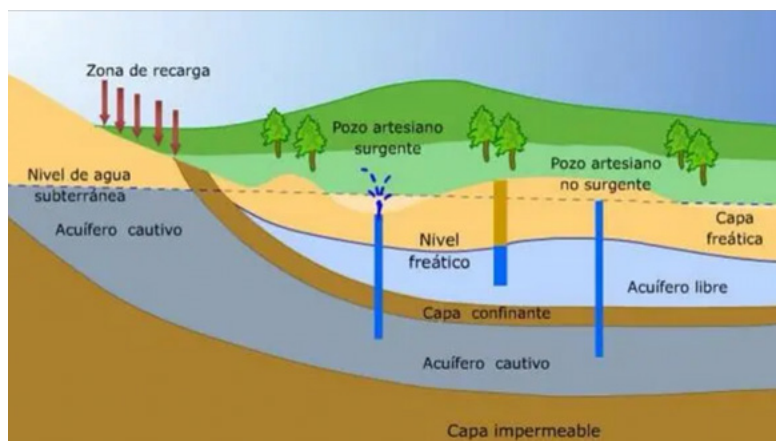


Figura 2.18. Aguas Subterráneas, Jefferson Valencia, 2021

De acuerdo con Conagua el subsuelo mexicano aloja gran número de acuíferos fuentes de agua que funcionan a la vez como vasos de almacenamiento, redes de acueductos y plantas de tratamiento naturales. Se han definido 653 acuíferos para fines de evaluación, manejo y administración de las aguas nacionales del subsuelo.

Conviene destacar algunos atributos que el agua subterránea presenta por naturaleza y que le confieren ciertas ventajas:

- * Menores pérdidas por evaporación
- * Menor exposición a la contaminación
- * Disponibilidad menos afectada por las variaciones climáticas
- * Amplia distribución espacial
- * Menor pérdida de la capacidad de almacenamiento
- * Temperatura del agua constante

La importancia del agua subterránea es mayor en países como México con extensas regiones áridas, donde el subsuelo suele ser la principal y la única fuente permanente de agua.

Disponibilidad Media Anual de Agua Subterránea (DMA):

Es el volumen medio anual de agua subterránea que, cuando es positivo, puede ser extraído de un acuífero para diversos usos, adicional a la extracción ya concesionada y a la descarga natural comprometida, sin poner en peligro el equilibrio de los ecosistemas. Cuando este valor es negativo indica un déficit.

1

2

3

4

5

6

7

Descarga Natural Comprometida (DNC):

Es el volumen que representa una fracción de la descarga natural de un acuífero, se determina sumando los volúmenes de agua concesionados de los manantiales y del caudal base de los ríos que están comprometidos como agua superficial, alimentados por un acuífero, más las descargas que se deben conservar para no afectar la alimentación de acuíferos adyacentes, sostener el uso ambiental y prevenir la inmigración de agua de mala calidad al acuífero considerado. (Figura 2.19).



Figura 2.19. Descarga Natural de Aguas, Anónimo 2021

Recarga Media Anual (R):

Es el volumen de agua que recibe un acuífero, en un intervalo de tiempo específico, se obtiene dividiendo la recarga total deducida del balance de aguas subterráneas, entre el número de años del intervalo de tiempo utilizado para plantearlo. Figura 2.20.

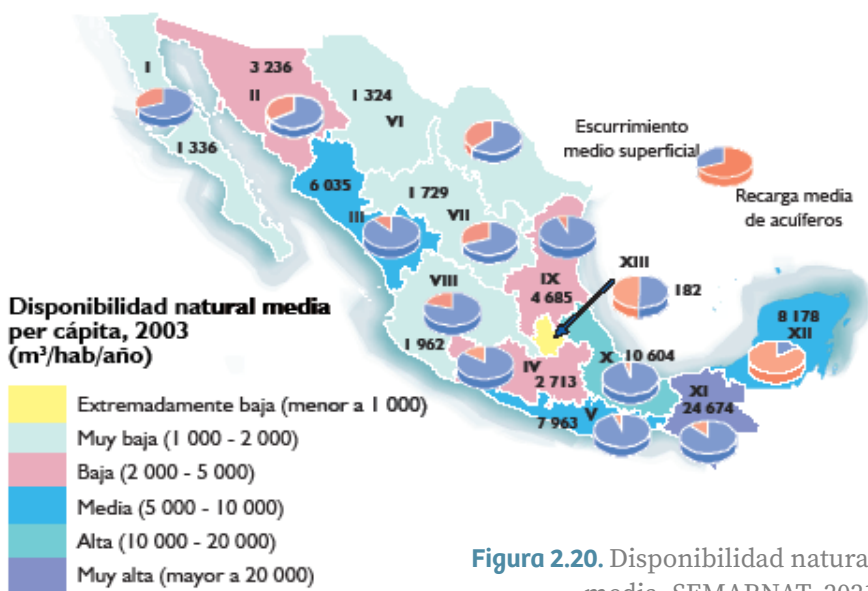


Figura 2.20. Disponibilidad natural media, SEMARNAT, 2021

Volumen de Extracción de Aguas Subterráneas (VEAS):

Se determina sumando los volúmenes anuales de agua asignados o concesionados por la Comisión mediante títulos inscritos en el Registro Público de Derechos de Agua (REPGA), los volúmenes de agua que se encuentren en proceso de registro y titulación y, en su caso, los volúmenes de agua correspondientes a reservas, reglamentos y programación hídrica, determinados para el acuífero de que se trate, todos ellos referidos a una fecha de corte específica. En el caso de los acuíferos en zonas de libre alumbramiento, la extracción de aguas subterráneas será equivalente a la suma de los volúmenes de agua extraídos estimados con base en los estudios técnicos, que sean efectivamente extraídos, aunque no hayan sido titulados ni registrados, y en su caso, los volúmenes de agua concesionados de la parte vedada del mismo acuífero. Los volúmenes de agua inscritos en el Registro Nacional Permanente no serán contabilizados en la extracción

para fines de la determinación de la disponibilidad de agua, a menos que las verificaciones de campo demuestren que son extraídos físicamente.

Relación entre agua subterránea y superficial

La relación entre las dos aguas, en la actualidad, se debe a que ambas forman parte del mismo Ciclo Hidrológico (ver figura 1.17), formando parte al ciclo general del agua. Este se inicia con la evaporación del agua en mares y océanos por la energía solar y finalizando con la lluvia, hasta que la precipitación penetra en la superficie de la corteza terrestre llenando poros y fisuras del suelo.

Las aguas superficiales se generan a través de la precipitación atmosférica, pero también de aflorar agua subterránea o por la fusión de placas de hielo.

Contamos con tres tipos de agua superficial: el agua que corre por escorrentías, la que se encuentra almacenada en un lago natural o artificial y la que está en estuarios.

En el caso de las aguas subterráneas hablamos de aguas que forman parte del nivel freático, bien sea en un pozo o en acuífero bajo tierra.

Una parte de la precipitación caída (en forma de lluvia, nieve o granizo) discurre por la superficie terrestre formando arroyos y ríos, lo que genera que exista la escorrentía superficial. Otra parte se infiltra en el terreno, rellenando poros y fisuras en el suelo que puede ser con baja o a alta permeabilidad; cuando éstos se saturan, el agua fluye por gravedad hacia los cuerpos de agua superficiales (manantiales, ríos, mares, etc.) dando lugar a la escorrentía subterránea.

1

2

3

4

5

6

7

Las aguas superficiales y las aguas subterráneas están muy relacionadas, pues es muy frecuente que el agua subterránea aflore en fuentes y manantiales para seguir un recorrido superficial, mientras que en otros casos el agua superficial se infiltra, pasando a formar parte del agua subterránea.

Desde el punto de vista de su explotación hay que tener en cuenta una serie de características diferenciales entre las aguas superficiales y subterráneas.

- * La velocidad de desplazamiento de las aguas superficiales es muy superior (del orden de 100,000 veces) al de las aguas subterráneas.
- * El volumen de agua subterránea almacenada es mucho mayor que el volumen del agua que discurre superficialmente en un momento dado.
- * Las aguas que discurren superficialmente se concentran en un pequeño número de ríos, mientras que las aguas subterráneas se mueven y ocupan grandes extensiones.
- * Las corrientes superficiales tienen grandes variaciones de caudal, mientras que las subterráneas experimentan unas variaciones muy pequeñas.

2.5 Agua mineral y termal

Se ha estimado que existen alrededor de 1,400 millones de kilómetros cúbicos de agua en el planeta, de los cuales sólo 2.5% corresponden a agua dulce (PNUMA, 2007). Este pequeño porcentaje se localiza principalmente en los ríos, lagos, glaciares, mantos de hielo y acuíferos del mundo.

Casi tres cuartas partes del agua dulce están contenidas en los glaciares y mantos de hielo, de los cuales alrededor de 97% son prácticamente inaccesibles para su uso, ya que se encuentran en Antártica, el Ártico y Groenlandia.

Del agua dulce existente en el planeta 30% corresponde a agua subterránea y solo el 0.4% a aguas superficiales y en la atmósfera. Si se considera al agua dulce no congelada (31.2%), el agua subterránea representa el 96%, agua que además resulta importante como abastecimiento para arroyos, manantiales y humedales, así como un recurso fundamental para satisfacer las demandas de agua de muchas sociedades en el mundo.

Mientras que las aguas superficiales (lagos, embalses, ríos, arroyos y humedales) sólo retienen el 1% del agua dulce no congelada. Aunque el agua presente en la atmósfera equivale a un volumen significativamente menor a la que se encuentra en los lagos, es muy importante por su papel en la regulación del clima.



Figura 2.23

Aguas termales de Polques, Bolivia (Creative Commons, 2006)

Aguas superficiales y subterráneas

Las aguas superficiales son todas aquellas quietas o corrientes en la superficie del suelo. Se trata de aguas que discurren por la superficie de las tierras emergidas y que, de forma general, proceden de las precipitaciones de cada cuenca.

3

Química del agua

3.1 Solubilidad de minerales

Cuando un mineral entra en contacto con agua, este puede disolverse, la solubilidad de un mineral está dada por la concentración que este presenta en el agua bajo ciertas condiciones de equilibrio.

Uno de los procesos más importantes que contribuyen a la existencia de minerales solubles en las aguas naturales es la meteorización química, es importante por muchas razones, ya que favorece la formación del suelo y la modificación de la composición de las aguas naturales, tanto de manera benéfica como negativa.

La meteorización química sucede a través de varios procesos, durante ellos los minerales componentes de las rocas tienen una interacción con las aguas naturales y con los gases que integran la atmósfera, producto de esta interacción se crean productos termodinámicamente más estables con las condiciones donde sucede el fenómeno. Algunas de las consecuencias de este fenómeno son el aumento de la acidez en las aguas y enriquecimiento del suelo por CO_2 . A continuación se discute a cerca de los minerales formadores de rocas que son susceptibles a solubilizarse, estos minerales pueden sufrir tres mecanismos de meteorización química: disolución congruente, incongruente y oxidación-reducción, como se muestra en la Figura 3.1.



Figura 3.1. Meteorización química (rocasyminares.net)

Primeramente, la disolución congruente se presenta cuando un mineral presenta una disociación en sus iones constituyentes, éstos se liberan en agua formando así, una solución electrolítica. Los cloruros y los sulfatos son dos de los minerales que presentan enlaces iónicos y son los más propensos a meteorizarse por este fenómeno, dentro de los minerales que menos pueden presentar esta disolución son aquellos que poseen un enlace covalente, tal como el cuarzo. Un ejemplo de este tipo de disolución es la disolución de la calcita, el carbonato de calcio es un componente fundamental de las rocas sedimentarias y también es un constituyente común de muchos suelos. Las aguas que circulan a través de las rocas y suelos carbonatados tienden a reaccionar con la calcita, disolviéndola o precipitándola hasta alcanzar un equilibrio. La meteorización del carbonato de calcio ejerce un control importante en la concentración de las especies carbonatadas disueltas en las aguas naturales y en el pH de dichas soluciones.

Hablandose de la disolución incongruente, esta es un proceso que deja como resultado una o más fases sólidas secundarias, afecta a la mayoría de los minerales silicatados que interactúan con las soluciones acuosas naturales. Para poder entender este tipo de disolución se puede estudiar la disolución incongruente del feldespato en aguas ácidas que produce un mineral hidratado del grupo de las arcillas denominado caolinita, y al mismo tiempo libera cationes, iones bicarbonato y ácido silícico en solución. La transformación del feldespato en arcilla ocurre por hidrólisis ácida, un proceso mediante el cual los cationes contenidos en la estructura del feldespato son remplazados por los iones hidrógeno derivados de la disociación del ácido carbónico presente en las aguas naturales.

En el proceso de oxidación-reducción es importante entender el estado de valencia y el comportamiento geoquímico de los elementos, muchos elementos químicos como el Fe (Hierro), Cr (Cromo) o el As (Arsénico), existen en la naturaleza en más de un estado de valencia. El estado de valencia se define como la carga eléctrica que un átomo adquiriría si formara iones en una solución, este número puede afectar el comportamiento geoquímico de los elementos.

En las reacciones redox (oxidación-reducción) se involucran las transferencias de electrones de un átomo a otro, produciendo un cambio en el estado de valencia de los elementos, si este pierde electrones se presenta una oxidación y se incrementa su número de valencia, en el caso contrario, si el elemento recibe electrones se reduce disminuyendo su número de oxidación. La tendencia de un elemento químico a dar o recibir electrones depende de su electronegatividad. Por lo general, los elementos más electronegativos tienden a recibir, y los menos electronegativos tienden a dar.

Un ejemplo muy sencillo de reacción redox está representado por la meteorización química del hierro metálico que, en contacto con el oxí-

1

2

3

4

5

6

7

geno de la atmósfera, se transforma en hematita. El hierro metálico se oxida, perdiendo 3 electrones y adquiriendo valencia 3+ en la hematita; mientras que el oxígeno se reduce, recibiendo los electrones liberados por el hierro, adquiriendo valencia 2- en la hematita.

3.2 Disolución de minerales

La disolución de un mineral está formada por una cadena de procesos que incluye principalmente:

1. El transporte de solutos desde el seno de la solución a la superficie.
2. La adsorción en la superficie del soluto.
3. La reacción química en la superficie.
4. La desorción de los productos de la reacción química en la superficie.
5. Finalmente, el transporte de los productos de la superficie al seno de la solución.

Estos procesos se producen simultáneamente, pero algunos pueden ser más rápidos que otros.

Así que la velocidad total de la reacción de disolución o cristalización dependerá de la velocidad del proceso más lento (Hill, 1986). Si el proceso de transporte de los iones hacia o desde la superficie es el limitante por ser el más lento, entonces el equilibrio se establece en la superficie del mineral creándose un gradiente de concentración desde la superficie del mineral hasta la solución. Cuando la reacción química en la superficie del mineral es más lenta que el transporte de los iones ocurre que todo ion sacado del mineral será transportado rápidamente a la solución, no apareciendo de esta forma el gradiente de concentración en la interfase.

También pueden existir casos donde se establece un estado intermedio y ninguno de los dos procesos prevalece sobre el otro, sino que ambos influyen notoriamente en la velocidad total de la reacción de disolución o cristalización.

La solubilidad de los minerales parece estar relacionada con el mecanismo de disolución de estos (Berner, 1980).

- a) La disolución de minerales escasamente solubles es generalmente controlada por los procesos en la superficie.
- b) La disolución de los minerales más solubles está controlada por procesos de transporte.

De esta forma se puede predecir con bastante acierto el mecanismo de disolución de los diferentes minerales, pero hay que tener en consideración que muchas veces la presencia de sustancias inhibidoras y la composición de la solución pueden hacer que varíe el mecanismo de disolución.

Disolución congruente e incongruente de los minerales

- a) Cuando los productos de una reacción de disolución son todos especies iónicas, se dice que la disolución es congruente.
- b) Cuando, por el contrario, la disolución de un mineral da lugar a especies iónicas y moléculas no solubles, se dice que la disolución es incongruente.

Este último es el caso de muchos aluminosilicatos, en presencia de C_2 (o de hidrogeniones) el agua disuelve este tipo de mineral y libera sodio, bicarbonato y ácido silícico en el seno de la solución, mientras deposita el mineral arcilloso caolinita. Este proceso ocurre corrientemente como resultado del intemperismo de las rocas graníticas.

1

2

3

4

5

6

7

Las aguas en estos casos pueden disolver secuencial o sucesivamente estos minerales. Donde coexistan calcita y dolomita a bajas temperaturas, y el agua se encuentre saturada respecto a la dolomita, será sobresaturada respecto a la calcita, precipitando este último mineral a medida que se disuelve el primero; en este caso el agua disuelve incongruentemente a la dolomita.

Si, por el contrario, este proceso ocurre a una temperatura superior a 10°C , se producirá la disolución de la dolomita en forma incongruente.

Si el proceso de disolución de ambos minerales tiene lugar secuencialmente, entonces puede ocurrir la disolución incongruente, con independencia de la temperatura del agua.

A manera de resumen los minerales pueden recuperarse mediante la disolución, aprovechando la solubilidad en agua y la forma masiva de la ocurrencia geológica.

Los minerales que pueden recuperarse fácilmente por su solubilidad en agua son los carbonatos, nitratos, boratos, sulfatos y halita. Estos minerales tienen dos características básicas que permiten su explotación a bajo costo por métodos de disolución in situ:

1. Son altamente solubles en agua.
2. Se presentan en mantos o capas de gran tamaño donde el mismo mineral resulta ser la roca encajonante.

1

2

3

4

5

6

7

3.3 Disolución de Gases

Una disolución es una mezcla homogénea en una fase de dos o más componentes, que pueden ser gases, líquidos o sólidos. El modelo más simple de disolución es el de disolución ideal. Al igual que en el modelo del gas ideal (para el que se supone que no existen fuerzas de interacción entre las moléculas que constituyen el gas) en este tipo de disolución ideal, se supone que las interacciones intermoleculares son del mismo tipo que las que existen entre las moléculas de las sustancias puras que componen la mezcla.

Todas las disoluciones están formadas por un disolvente y un soluto.

- * **Disolvente:** Es aquel componente de la mezcla que se encuentra en el mismo estado que la disolución o aquel que está más presente.
- * **Soluto:** Es aquel componente de la mezcla que se encuentra en un estado distinto del de la disolución.

Características generales de una disolución:

- * Todas constan de un soluto y un disolvente.
- * Son mezclas en las cuales no se puede reconocer ambos componentes de la disolución a simple vista (mezclas homogéneas).
- * El soluto desaparece al disolverse.
- * El volumen final de la disolución no es la suma de los volúmenes del soluto y el disolvente.

Otras características:

1. Las propiedades físicas de la disolución no son las mismas que las del disolvente y dependen de la concentración.
2. Las propiedades químicas no varían.

3. El disolvente y el soluto sólo pueden separarse por cambios de estado: evaporación, condensación, etc.
4. No presenta sedimentación.
5. Los factores de solubilidad son la naturaleza del soluto y del disolvente, la presión y la temperatura.
6. A mayor temperatura la disolución será más rápida, excepto en el caso de los gases.
7. A mayor presión aumenta la solubilidad en los gases, mientras que en los líquidos y sólidos no presenta gran importancia.

Clasificación de las disoluciones

Existen diferentes clasificaciones para las disoluciones, de manera general se presenta una clasificación a continuación (véase tabla). En función del número de componentes estas disoluciones pueden ser de grado 'n' por simplicidad y a manera de ejemplo únicamente se nombra la cuaternaria como última, como se muestra en la Tabla 3.1.

Tabla 3.1 Clasificación de las disoluciones

Clasificación de las disoluciones	
Naturaleza	Sólida
	Líquida
	Gaseosa
Número de componentes	Binaria
	Ternaria
	Cuaternaria

Adaptado
(Brown, 1998)

Clasificación de las disoluciones líquidas

De manera puntual las disoluciones líquidas también se clasifican (Tabla 3.2).

Tabla 3.2 Clasificación de las disoluciones líquidas

Clasificación de las disoluciones líquidas	
Disolvente	Acuosas
	No acuosas
Estado	Soluto sólido
	Soluto líquido
	Soluto gaseoso
Naturaleza	Electrolíticas
	No electrolíticas

Adaptado
(Brown, 1998)

Tipos de disoluciones

También existe la posibilidad de clasificar las disoluciones de acuerdo con la naturaleza del soluto y disolvente (tabla 3.3)

Tabla 3.3 Tipos de disoluciones de acuerdo con su naturaleza

Tipos de disoluciones			
Naturaleza	Soluto	Disolvente	Ejemplo
Disoluciones Sólidas	Sólido	Sólido	Aleaciones Metálicas
	Líquido	Sólido	Benceno en caucho
	Gas	Sólido	Aleación de hidrógeno en paladio

1

2

3

4

5

6

7

Tipos de disoluciones

Disoluciones Líquidas	Sólido	Líquido	Sal en agua
	Líquido	Líquido	Alcohol en agua
	Gas	Líquido	Amoniaco en agua
Disoluciones Gaseosas	Sólido	Gas	Partículas en sistema coloidal
	Líquido	Gas	Gotas en sistema coloidal
	Gas	Gas	Aire (mezcla de gases)

Adaptado (Brown, 1998)

La descripción de una disolución implica conocer sus componentes y sus cantidades relativas es decir saber acerca de su concentración, para ello se enuncian las siguientes relaciones.

Formas de expresar la concentración

Molaridad (M)

$$M_i = \frac{n_i}{L_{\text{disolución}}}; [\text{mol/l}]$$

Normalidad (N)

$$N_i = \frac{\text{equivalentes}_i}{L_{\text{disolución}}}; [\text{equivalentes/l}]; \text{equivalentes}(i) = n_i * \text{valencia}$$

Porcentaje en peso ($\% P/p$)

$$\% \text{ Peso} = \left(\frac{\text{masa}_{\text{soluta}}}{\text{masa}_{\text{disolución}}} \right) (100)$$

1

2

3

4

5

6

7

Partes por millón (*ppm*)

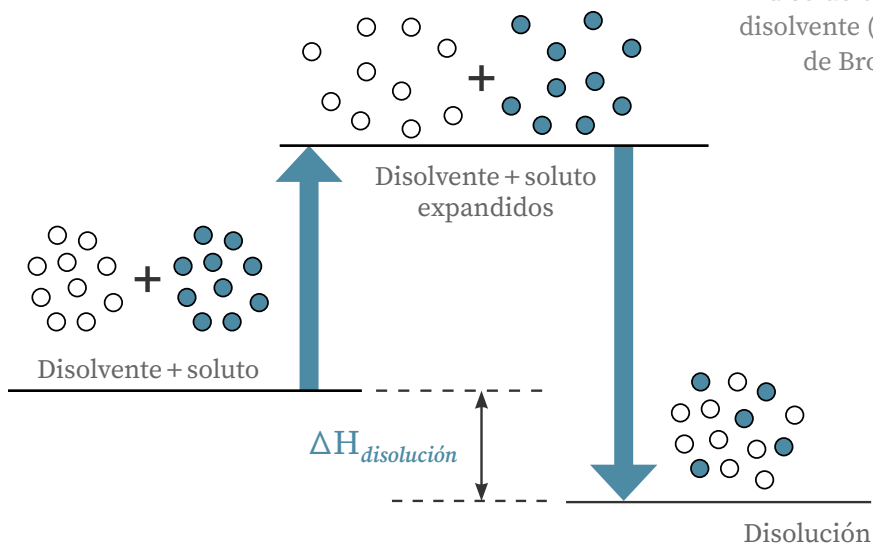
$$ppm = \left(\frac{masa_{soluta}}{masa_{disolución}} \right) (100)$$

Proceso de disolución

Dicho proceso se muestra en la figura 3.2

1. El soluto y disolvente se alejan hasta la distancia media que tendrán en la disolución. Para ello deben vencer las atracciones soluto-soluto y disolvente-disolvente.
2. El soluto y disolvente se mezclan con lo que se establecen interacciones soluto-disolvente que estabilizan la disolución.
3. En el diagrama el proceso es exotérmico, aunque, en muchos casos, la disolución es un proceso endotérmico.

Figura 3.2. Proceso de disolución estrato-disolvente (Adaptado de Brown,1998)



1

2

3

4

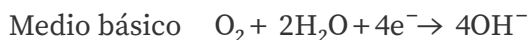
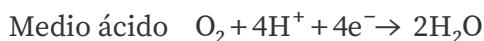
5

6

7

Disolución de gases en agua

El oxígeno es, sin duda, el más importante agente oxidante del agua natural, en ausencia de otros procesos naturales poco frecuentes y de contaminantes. Cuando actúa químicamente en un proceso redox, cada uno de sus átomos constituyentes se reducen desde un estado de oxidación 0 hasta el -2 del H_2O o del OH^- , dependiendo de si la reacción tiene lugar en medio ácido o básico, respectivamente. En aguas naturales, donde el pH medio fluctúa entre 7 y 8, quizá sea el segundo proceso (medio básico) el que tenga una mayor realidad.



Pero la capacidad oxidante de un agua por la presencia de oxígeno depende directamente de la concentración de oxígeno disuelto en ella. Dado el carácter apolar del oxígeno, es de esperar que su solubilidad en agua sea bastante pequeña.

Ley de Henry

La Ley de Henry (formulada en 1803 por William Henry) enuncia que, “a una temperatura constante, la cantidad de gas disuelto en un líquido es directamente proporcional a la presión parcial que ejerce ese gas sobre el líquido”.

1

2

3

4

5

6

7

Matemáticamente puede formularse como:

$$C_A = (K_H)(P_A)$$

C_A = concentración molar (molaridad) del gas disuelto (mol/l)

K_H = Constante de Henry ; P_A = Presión parcial del gas (atm)

Un ejemplo de la aplicación de la ley de Henry está dado por las precauciones que deben tomarse cuando un buzo vuelve a la superficie. Al disminuir la presión parcial de los distintos gases, disminuye la solubilidad de estos en la sangre, con el consiguiente riesgo de una eventual formación de burbujas. Para evitarlo, debe someterse al llamado proceso de descompresión, el cual debe efectuarse lentamente.

En la siguiente tabla (3.4) donde se muestran valores para la constante de Henry de algunos gases disueltos en agua a 20 °C.

Tabla 3.4 Valores de la constante de Henry para gases disueltos en agua a 20 °C

GAS	KH (mol/atmL)
Argón	0.0015
Dióxido de Azufre	13
Dióxido de Carbono	0.032
Helio	0.00037
Hidrógeno	0.00085
Neón	0.0005
Nitrógeno	0.00063
Oxígeno	0.0013

(Brown,1998)

1

2

3

4

5

6

7

Se puede ver que las solubilidades en agua del CO_2 y, en especial, del SO_2 son bastante superiores al resto. Esto es debido a que estos dos gases reaccionan con el agua dando los correspondientes ácidos. Como el ácido sulfuroso es un ácido muy fuerte, se disocia y, por tanto, su solubilidad aumenta también. De ahí que los fenómenos de lluvia ácida sean tan importantes.

Ejemplo de la Ley de Henry:

$$\text{Ecuación de Henry} \quad C_A = (K_H)(P_A)$$

De acuerdo a la tabla de valor de la constante de Henry para el nitrógeno a 20°C es:

$$0.00063$$

Aplicando la ecuación de Henry y sustituyendo valores

$$C_A = [0.00063 \text{ (mol/atmL)}](1.5 \text{ (atm)})$$

$$C_A = [0.000945 = 9.45 \times 10^{-4}] \text{ (mol/l)}$$

3.4 Composición química del agua por la interacción del medio rocoso

La determinación de las propiedades químico-físicas de un agua es una herramienta indispensable para diferentes tipos de especialistas cuyo punto de interés principal y común es el agua y sus características, por ejemplo están los hidrólogos, hidrogeólogos, karstólogos, geomorfólogos, ingenieros sanitarios y otros especialistas relacionados con este recurso.

Cuando se busca implementar alguno de los métodos hidrogeoquímicos en el estudio de la disolución hídrica, será necesario tener presente tanto el balance hídrico como los parámetros geoquímicos por los que se caracteriza cada uno de los sistemas, la composición química del agua está ligada íntimamente con el área de descarga del acuífero debido a los componentes presentes en la misma.

La composición química de las aguas meteóricas se encuentra bajo control debido a los equilibrios químicos que surgen a partir de los carbonatos y de otros minerales, además, dichos equilibrios pueden variar con el tiempo. Por lo tanto, si se van a realizar análisis químicos y mediciones de pH o conductividad estos se deben realizar “in situ”.

En el caso de las aguas minerales los equilibrios químicos presentan un mayor grado de sensibilidad, es por eso que debido a la manipulación de las muestras estas puedan sufrir cambios en el estado de los equilibrios, así como en la composición química obtenida en laboratorio. Por tales razones hay ocasiones donde existe una variación considerable de la composición química que realmente presenta el agua en la fuente.

Gran parte de los karstólogos norteamericanos y algunos europeos en los últimos años han optado por emplear mediciones de pH, temperatura y conductividad eléctrica en campo, además de estas también han realizado análisis volumétricos donde se obtienen mediciones de CO_2 disuelto, HCO_3^- , CO_3^{2-} , Cl^- , SO_4^{2-} - Ca^{2+} y Mg^{2+} .

Otra práctica de uso común es la de preservar una réplica de la muestra en el campo por adición de un ácido mineral fuerte y luego se lleva al laboratorio, donde se determina Na^+ y K^+ por fotometría de llama; así como los microcomponentes y elementos trazas, mediante absorción atómica, fluorescencia de rayos X u otra técnica analítica.

1

2

3

4

5

6

7

Gran parte de los cambios sufridos por las muestras en su composición química resultan por lo general en la pérdida de CO_2 , pérdida de calcio por precipitación de CaCO_3 , oxidación de H_2S a sulfato (SO_4^{2-}), precipitación de dióxido de silicio (SiO_2) en forma de cuarzo o calcedonia; así como oxidación y precipitación de hierro y manganeso.

Existe una serie de componentes los cuales prácticamente no se ven afectados por almacenar las muestras, de entre estos destacan principalmente el sulfato, siempre que no haya H_2S pues en ese caso este, al oxidarse, incrementaría el contenido de SO_4^{2-} , litio, sodio, potasio, fluoruro, bromuro, yoduro y boro.

Por lo contrario, hay un número de microconstituyentes que con el paso del tiempo terminan adhiriéndose a las paredes del frasco donde son contenidos, lo que da paso a que estos reporten un menor número al que realmente contiene la muestra. Por esta razón una parte de la muestra se conserva mediante tratamiento con un ácido mineral como podría ser ácido nítrico, además de esto, la muestra debe ser conservada en frío antes de ser enviada al laboratorio.

Constituyentes mayoritarios

Anhídrido carbónico (CO_2), Bicarbonatos (HCO_3^-) y Carbonatos (CO_3^-)

El anhídrido carbónico disuelto en agua, al igual que los diversos compuestos que esta forma en ella juega un papel importante en la química del agua. El anhídrido carbónico se disuelve en el agua en función de su presión parcial. Una parte permanece en disolución en forma de gas mientras otra reacciona con el agua para dar ácido carbónico (H_2CO_3) que se disocia parcialmente para dar iones carbonato y bicarbonato. La disolución de

1

2

3

4

5

6

7

calizas y dolomías potenciada por el aporte de CO_2 y/o ácidos orgánicos o inorgánicos, es otra de las fuentes principales de carbonatos y bicarbonatos, aunque con velocidades de incorporación al agua mucho menores.

Cloruros (Cl^-)

Haciendo a un lado a las evaporitas y rocas de origen marino, las demás rocas en general presentan escasa proporción de cloruros, pero debido a la elevada solubilidad que presentan las sales estas pasan rápidamente a la fase acuosa pudiendo alcanzar concentraciones muy altas.

Por su parte el agua proveniente de la lluvia constituye una fuente importante de Cl^- fenómeno que se vuelve más notorio en zonas costeras, sin embargo, estas altas concentraciones se ven reducidas rápidamente una vez que se encuentra tierra adentro.

La concentración de Cl^- en las aguas subterráneas suele ser muy variable ya que presenta valores que van desde los 10(mg/l) a más de 2,000 o 3,000 (mg/l), dando así un rango muy alto entre los valores que pueden presentarse.

Sulfatos (SO_4^-)

El ion sulfato procede del lavado de terrenos formados en ambiente marino, de la oxidación de sulfuros que se encuentran distribuidos en rocas ígneas y sedimentarias, de la descomposición de sustancias orgánicas. La mayoría de las aguas subterráneas sulfurosas presentan contenidos apreciables de HS^- o H_2S que incluso a concentración muy baja, confieren al agua el típico olor a huevo podrido.

1

2

3

4

5

6

7

Iones Nitrato (NO_3^-), Nitrito (NO_2^-) y Amonio (NH_4^+)

Los compuestos nitrogenados presentes en las aguas naturales están íntimamente relacionados con el ciclo del nitrógeno. El nitrógeno puede aparecer en forma de NH_3 , NH_4 , y que, por oxidación, estas formas reducidas pueden transformarse en N_2 (gas) y, finalmente en NO_3 , que es la forma más usual. Los nitratos pueden estar presentes en las aguas subterráneas debido al resultado de la disolución de rocas que los contengan, o bien por la oxidación bacteriana de materia orgánica. Su concentración en aguas subterráneas no contaminadas varía ampliamente, aunque no suele sobrepasar los 10 mg/l.

Ion Calcio (Ca^{++})

El calcio es uno de los principales cationes presentes en la mayoría de las aguas naturales debido a la presencia de una amplia difusión en rocas ígneas, sedimentarias y metamórficas. Para las rocas ígneas se encuentra presente como constituyente esencial de los silicatos, siendo un fenómeno más común en las plagioclasas. Por su parte en las rocas sedimentarias aparecen en forma de carbonato: CaCO_3 , (calcita y aragonito), $\text{CaMg}(\text{CO}_3)_2$ (dolomita) o de sulfato $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ (yeso) o CaSO_4 (anhidrita).

La concentración presente en las aguas subterráneas de Ca^{++} es ampliamente variable ya que para aguas dulces se presentan valores entre 10 y 250 (mg/l), en aguas de terrenos yesíferos puede llegar a 600(mg/l) y en salmueras de CaCl hasta 50,000(mg/l).

Ion Sodio (Na^+)

El sodio es liberado por la meteorización de silicatos tipo albita ($\text{NaAlSi}_3\text{O}_8$) y la disolución de rocas sedimentarias de origen marino.

Las sales de Na^+ son altamente solubles y tienden a permanecer en solución. La concentración de Na^+ en aguas naturales es muy variable, pudiendo alcanzar hasta 120,000 mg/l. en zonas evaporíticas; sin embargo, raramente sobrepasa 100 o 150 mg/l. en aguas dulces normales.

Ion Potasio (K^+)

Procede de la meteorización de feldspatos y ocasionalmente de la solubilización de depósitos de evaporitas. En aguas subterráneas el contenido K^+ no suele sobrepasar 10 mg/l. aunque en casos excepcionales pueden alcanzarse 100,000 mg/l. (salmueras).

Constituyentes minoritarios

Ion fluoruro (F^-)

Está relacionado con la alteración de rocas plutónicas. Su concentración en pocas ocasiones sobrepasa 2 mg/l. En contenidos superiores a 1 mg/l. puede ser nocivo.

Ion bromuro (Br^-)

Comportamiento similar al Cl^- , pero menos abundante. La relación $\text{Cl}^- / \text{Br}^-$ es mucho mayor en aguas continentales que en el agua del mar.

1

2

3

4

5

6

7

Ion ioduro (I^-)

Esencial para la nutrición humana. Su circulación parece estar influenciada por procesos bioquímicos. En agua del mar su concentración es de 0.06 mg/l.

Boro (B)

Esencial en pequeñas cantidades para el crecimiento de las plantas. En concentraciones excesivas es perjudicial tanto en los suelos como en las aguas de riego. Procede de la alteración de rocas ígneas y gases volcánicos, agua marina.

Fósforo (P)

En las aguas naturales parece encontrarse en forma de ortofosfato (PO_4^{-3}). Nutriente esencial para las plantas, pero en concentraciones menores que el nitrato. Las principales fuentes de fosfatos se asocian a la explotación de rocas ígneas o sedimentarias marinas que contienen este elemento.

Hierro (Fe)

Elemento esencial para el metabolismo de animales y plantas. En aguas subterráneas suele encontrarse en forma de Fe^+ aunque puede presentarse como Fe^{+3} , $FeOH^{+2}$, $FeOH^+$ en función del pH. La concentración de este elemento en el agua está controlada por procesos de equilibrio químico como oxidación-reducción, precipitación y disolución de hidróxidos, carbonatos y sulfuros.

1

2

3

4

5

6

7

3.5 Relaciones Iónicas

Saber las características físicas y químicas de un cuerpo de agua natural, es de gran ayuda en diferentes campos de la ciencia e ingeniería. Por ello, llevar a cabo técnicas de recolección e investigación adecuadas, nos brindarán la información necesaria para el estudio y evaluación del agua.

Entre los criterios bajo los cuáles se considera hacer un estudio de las propiedades del agua, está el uso de las relaciones iónicas las cuales hacen posible comprender la influencia de las reacciones físico-químicas en las zonas subterráneas. Del mismo modo, esta propiedad nos muestra de forma representativa, el tipo de materiales por las que circuló el agua, así como los procesos físicos bajo los cuales se modificaron. Algunas de las relaciones más representativas son:

$$r \frac{\text{Mg}^{2+}}{\text{Ca}^{2+}}$$

Es una muestra de la acidez de las rocas donde circula el agua. Esta relación iónica entre la calcita y la dolomita del agua natural.

$$r \frac{\text{Ca}^{2+}}{\text{Na}^+}$$

Muestra la relación entre la calcita y la mineral sal de roca (halita) u otras fuentes de sodio. En aguas kársticas este cociente supera la unidad, pero en zonas más profundas el valor es inferior.

$$r \frac{\text{K}^+}{\text{Na}^+}$$

Esta relación ayuda a distinguir las diferentes características del agua superficial. Del mismo modo, refleja el intercambio iónico en aguas subterráneas.

$$r \frac{\text{HCO}_3^-}{\text{Cl}^-}$$

Muestra la relación entre la calcita y halita que se encuentran disueltos en el agua, por otra parte, muestra el grado de intrusión de las aguas marinas en los karsts litorales.

1

2

3

4

5

6

7

$$r \frac{\text{SO}_4^{2-}}{\text{Cl}^-}$$

Muestra la relación entre el yeso y halita, también de otros agentes que sean ajenos a Karsts.

$$r \frac{\text{Cl}^- - (\text{Na}^+ \text{K}^+)}{\text{Cl}^-}$$

Con esta relación se puede obtener el índice de cambio de base, este cambio relaciona los iones cambiados en una reacción de intercambio iónico y los iones que existían previamente en el medio.

$$r \frac{\text{Cl}^- - (\text{Na}^+ \text{K}^+)}{\text{SO}_4^{2-} + \text{HCO}_3^- \text{NO}_3^-}$$

Con esta relación se obtiene el índice de desequilibrio.

Principales elementos disueltos y salinidad del agua

Las concentraciones iónicas en el agua superficial y subterránea se deben al tipo de minerales en las rocas y el suelo con los que tiene contacto en el ciclo hidrológico. Existen algunos iones que se encuentran siempre en cantidades considerables, estos son llamados iones mayoritarios, algunos de estos iones son los siguientes:

Calcio

La corteza terrestre contiene un 3.2% de calcio y es debido a esto, que el calcio es el ion dominante en la mayoría de las aguas superficiales y es el segundo en cantidad sólo por debajo del sodio en los cuerpos superficiales.

Las sales solubles de calcio $\text{Ca}(\text{HCO}_3)_2$, CaCl_2 , $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2$, se acumulan en las aguas naturales y con el flujo de estas, ingresan a las depresiones inter-

nas, mares y océanos. Además, como resultado de la evaporación, una parte del calcio se precipita formando calcita, yeso, anhidrita y dolomita.

Sodio

El sodio en la corteza terrestre es igual a 2.35 %, además, se sabe que las sales de sodio se encuentran en grandes cantidades en las aguas freáticas de las regiones semidesérticas y desérticas. La mineralización de las aguas freáticas varía de 1-2 hasta 100-200 g/L. Los suelos salinos contienen entre 2 y 3 % de sales de sodio, mientras que las costas pueden contener de 10 a 20 %.

Los siguientes minerales se precipitan durante la evaporación de las aguas de los suelos: halita, mirabilita, y salitre sódico.

Magnesio

Este elemento es el octavo más abundante en la corteza terrestre con una proporción del 2.07 %. En su mayoría, el magnesio se puede encontrar en gran concentración en el magma, del mismo modo, la solubilidad de este elemento es variable dependiendo de su composición, por ejemplo, el sulfato de magnesio (MgSO_4) y el cloruro de magnesio (MgCl_2) son fácilmente solubles en agua. Por otro lado, el bicarbonato de magnesio ($\text{Mg}(\text{HCO}_3)_2$), el carbonato de magnesio (MgCO_3) son menos solubles en el líquido.

El flujo del agua en rocas sedimentarias y en los suelos, conforman una influencia directa con el magnesio mediante minerales salinos como la magnesita, dolomita, kieserita, entre otros.

1

2

3

4

5

6

7

Potasio

Con un porcentaje de 2.3% en la corteza terrestre, este elemento se encuentra en rocas y minerales denominados como félsicos y máficos. El compuesto de carbonato de potasio al entrar en contacto con ácidos y sales se transforman en cloruros, sulfatos y nitratos. En cuanto a la injerencia del potasio en los suelos salinos y sódicos, este no presenta gran absorción si se compara con el sodio, esto debido a la reducida cantidad de aguas superficiales y freáticas. Algunas de las sales minerales más importantes del potasio son: la Silvita (KCl), kainita ($\text{KClMgSO}_4\text{H}_2\text{O}$), y el salitre potásico (KNO_3).

Cloro

Gran parte de la concentración de este elemento, se encuentra en cuerpos de agua como océanos, ríos y lagos. Su presencia depende de la zona considerada, en rocas extrusivas tiene una proporción del 0.05% mientras que en las rocas alcalinas su porcentaje es del 0.7%.

Este ion tiene gran presencia en suelos de zonas áridas y en las aguas freáticas. Los minerales del cloro que alteran el contenido del agua natural son: halita (NaCl), Silvita (KCl), carnalita ($\text{KClMgCl}_2\cdot 6\text{H}_2\text{O}$), cloruros de magnesio y cloruros de calcio.

Azufre

La corteza terrestre contiene un 0.06% de este elemento, mientras que en la hidrósfera se contiene el 0.09%, del cual una cantidad considerable se encuentra en los océanos. El azufre elemental reacciona con algunas can-

1

2

3

4

5

6

7

tidades de oxígeno disuelto, formando el ion de sulfito que, al combinarse con el agua, forma el ácido sulfúrico.

Carbono

En las soluciones acuosas de los suelos sódicos y en los suelos salinizados se puede encontrar carbonato y bicarbonato de sodio. Además, el carbono se encuentra disuelto en el agua marina en forma de dióxido de carbono, bicarbonatos y carbonatos en proporciones mutuas que mantienen un determinado equilibrio.

Dispositivos para el muestreo de agua subterránea

Cuando se requiere conocer las características físicas y químicas del agua subterránea, con el fin de obtener un análisis representativo de esta y poder realizar las relaciones que anteriormente se mencionaron, es necesario obtener muestras del agua que se desea estudiar.

Los equipos más usados para el monitoreo de aguas subterráneas son los siguientes:

1. Bombas. Pueden ser de diferente diseño y capacidad de bombeo, dependiendo de la profundidad del muestreo.
2. Equipos tipo-thief y tipo-graph. Son dispositivos que se utilizan dentro de los pozos a una profundidad específica, son generalmente usados en acuíferos muy profundos (mayores a 100 m).
3. Sistemas sellados o empaquetados. Son sistemas los cuales permiten extraer agua a una profundidad específica dentro de un pozo.

1

2

3

4

5

6

7

4. Equipos para muestreo “in-situ”. Son copas porosas y piezómetros puntuales, los cuales son instalados de manera permanente a una profundidad específica en un acuífero, con el fin de tomar muestras puntuales.
5. Sistemas de muestreo de agua intersticial. Son utilizados para obtener información detallada sobre la calidad del agua subterránea a diferentes profundidades.

3.6 Representaciones gráficas de la composición fisicoquímica del agua

La fisicoquímica es parte de la química que estudia las propiedades físicas y estructura de la materia, las leyes de la interacción química, así como las teorías que las gobiernan. La fisicoquímica recaba los datos necesarios de los gases, líquidos, sólidos, soluciones y dispersiones coloidales a fin de sistematizarlos en leyes y darles un fundamento teórico.

Se establecen relaciones de energía en transformaciones físicas y químicas para predecir la magnitud y velocidad con la que se producen, determinándose cuantitativamente los factores reguladores. En este sentido, deben tomarse en cuenta las variables comunes de la temperatura, presión y concentración, además de los efectos en la interacción estrecha de la materia misma en cuanto a su naturaleza y estructura. Para realizar este propósito la fisicoquímica se apoya ampliamente en la experimentación, cuyos métodos y técnicas desempeñan un papel tan importante como las leyes, métodos físicos y matemáticos.

En posesión de los datos necesarios, la fisicoquímica procede a correlacionarlos con fines teóricos en virtud de los dos métodos generales de ataque, que son el termodinámico y el cinético. En el primero se usan las leyes fundamentales de la termodinámica para obtener conclusiones

basadas en las relaciones de energía que ligan las etapas iniciales y finales de un proceso. El enfoque cinético exige para su operación una descripción muy específica y detallada de los procesos, para que a partir del mecanismo postulado, sea factible deducir la ley, procesos y etapas.

En muchas ocasiones la información proporcionada en una tabla es tan singular o importante que se decide presentar esos resultados de forma gráfica. El objetivo básico de un gráfico es transmitir la información de forma tal que pueda ser captada rápidamente, de un golpe de vista. Un gráfico debe ser ante todo sencillo y claro, a pesar de su aspecto artístico, ya que se elabora para ser incluido en un trabajo científico.

La representación gráfica de los datos constituye una herramienta de trabajo muy eficiente en la interpretación de las propiedades de un agua, así como para hacer comparaciones o correlaciones. También permite ver con facilidad el comportamiento y evolución de un agua en un territorio determinado, a través del tiempo considerando sus propiedades físicas y químicas. Es por ello, que es muy importante esta representación de los análisis físico-químicos del agua.

Se utilizan representaciones gráficas para obtener una visualización sencilla y lo más completa posible de composición y características químicas de las aguas.

- * Diagramas divariantes
- * Diagramas de barras Collins (diagramas de balance iónico)
- * Diagramas circulares
- * Diagramas de Piper-Hill-Langelier (diagramas triangulares)
- * Diagrama de Stiff modificado
- * Diagrama Schoeller-Barkalof
- * Diagrama de Gibbs (boomerang)

1

2

3

4

5

6

7

- * Mapas de isolíneas
- * Mapas de puntos escalados

Diagrama de barras Collins y Diagramas circulares

En los Diagramas de Collins o barras se representan la concentración de aniones (a la derecha) y cationes (a la izquierda) en dos columnas juntas. El valor de concentración se expresa en miliequivalentes por litro (mEq/l), por lo que la altura de ambas columnas es teóricamente igual.

Los diagramas circulares, son equivalentes a los de Collins, con la diferencia que se grafican cationes y aniones en el mismo círculo, donde se puede representar otros parámetros, por ejemplo, TDS (Total de Sólidos Disueltos), como un círculo interior. Por lo regular, sólo se permite representar la composición de una muestra, con lo que se obtiene una visualización rápida de la variación de la composición del agua. Dichas gráficas se presentan en la figura 3.3.

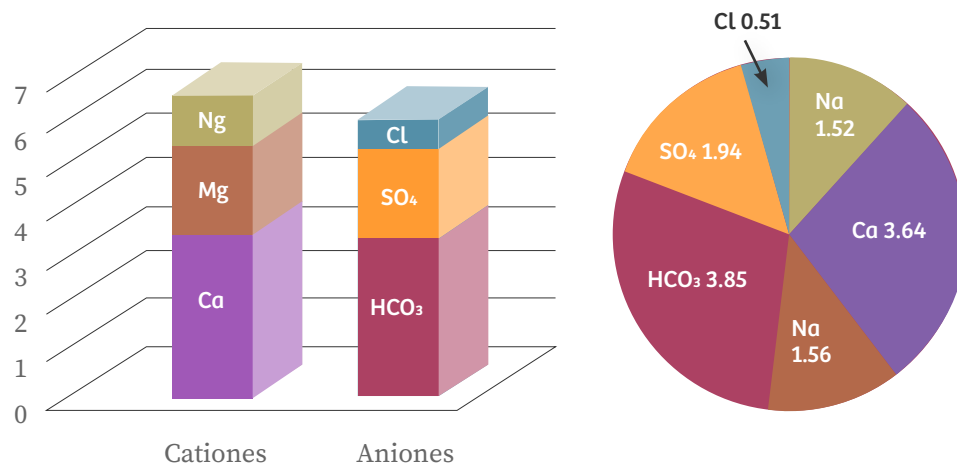


Figura 3.3 Diagramas de barras y circulares (Adaptado de Milán, 2015)

Diagrama de barras Piper-Hill-Langelier

Los diagramas triangulares de Hill y Piper permiten representar un gran número de muestras en un sólo gráfico. En éstos, los triángulos de aniones y cationes ocupan los ángulos inferiores izquierdo y derecho con sus bases alineadas. La parte central del diagrama posee forma de rombo y sobre este se proyectan los puntos de cada uno de los triángulos por medio de una recta paralela al borde superior del rombo. La intersección de estas dos rectas representa la composición del agua con respecto a una determinada agrupación de aniones y cationes. Se muestra dicho diagrama en la imagen 3.4.

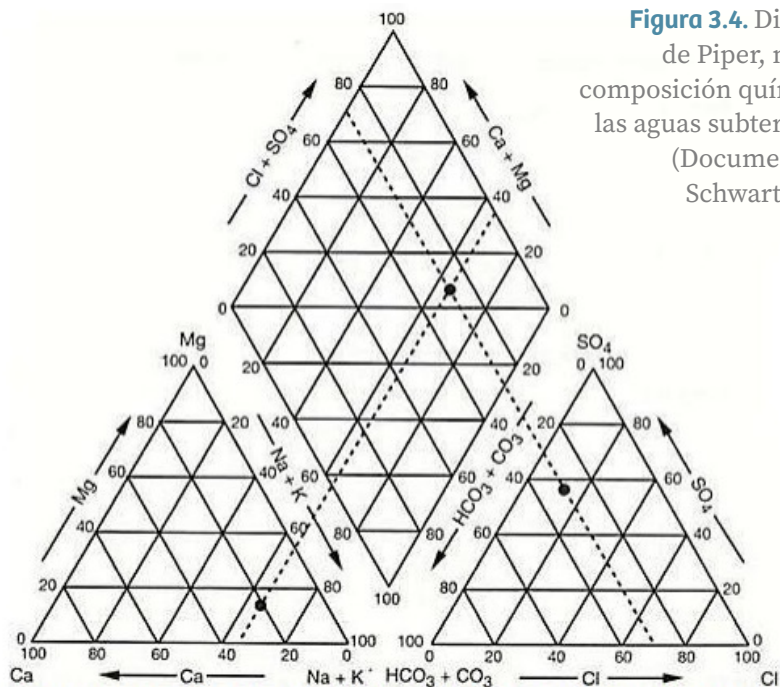


Figura 3.4. Diagrama de Piper, muestra composición química de las aguas subterráneas. (Documento and Schwartz, 1997)

En este tipo de diagramas no se representan concentraciones absolutas. Frente a este inconveniente y la imposibilidad de representar más de tres iones por triángulo, estos diagramas permiten reflejar las variaciones cau-

sadas por mezclas de aguas, precipitaciones-disoluciones, procesos de intercambio iónico.

Estos diagramas permiten ilustrar la evolución hidroquímica de las aguas y establecer de forma directa el tipo de agua en relación con las facies hidroquímicas.

Diagrama de Stiff

En los Diagramas de Stiff o Poligonales se representan en escala logarítmica la concentración de aniones (hacia la derecha) y cationes (hacia la izquierda) en semirrectas paralelas, uniendo los extremos para generar un polígono. Es importante mencionar que sobre cada semirrecta se toma un solo ion.

Dos características sobresalen en este tipo de diagrama: por un lado, permite visualizar claramente diferentes tipos de agua (cada una con una configuración particular) y, en forma simultánea, permite dar idea del grado de mineralización (ancho de la gráfica) que se presenta. Para construir este tipo de gráfica se toman los valores en mg/l correspondiente a los aniones y cationes dados por el análisis químico realizado a la muestra en el laboratorio.

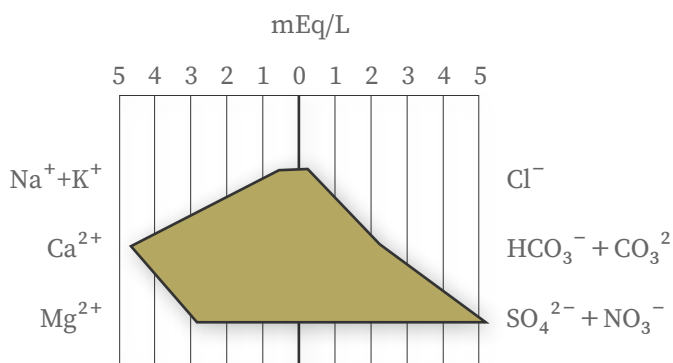


Figura 3.5. Stiff-Diagramas que relejan la composición química de las aguas subterráneas. (Appelo y Postma 2005)

Diagrama de Gibbs (boomerang)

En el diagrama de Gibbs (figura 3.6) es graficada la concentración de los sólidos disueltos totales (eje y) en función de la relación $\text{Na}/(\text{Na}^+\text{Ca})$. Se caracteriza por poseer tres zonas asociadas a los procesos de evaporación, interacción agua-roca y precipitación atmosférica. Este diagrama es aplicado predominantemente a las aguas superficiales más que para las subterráneas. La química de aguas superficiales está determinada por tres factores: precipitación, reacciones de intemperismo y el dominio de evaporación-cristalización.

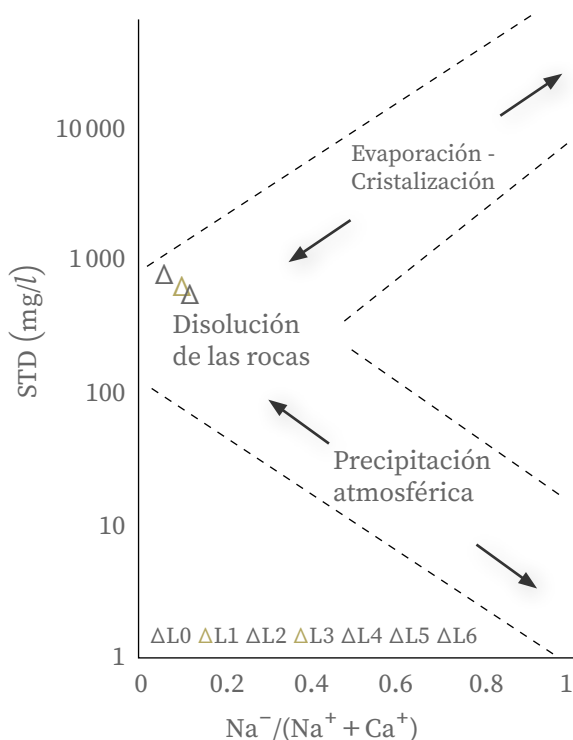


Figura 3.6. Diagrama de Gibbs del agua de la Laguna Liquidámbar (Reyes, 2019)

Diagramas divariantes

Se utilizan para representar la variación de un parámetro con respecto a otro. En ocasiones, permiten visualizar la variación de varios parámetros con respecto a uno mismo. Otras veces se utilizan para visualizar la variación de índices o relaciones. Mostrado en la figura 3.7.

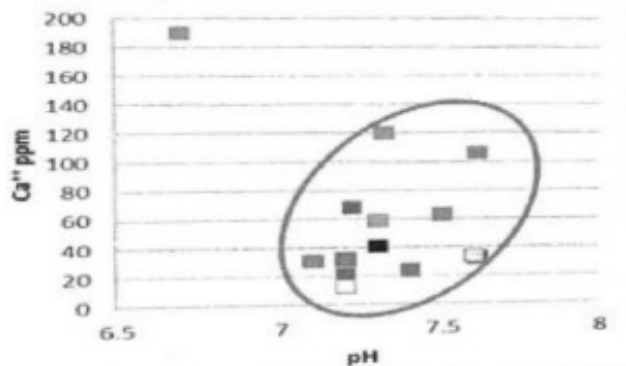


Figura 3.7. Diagrama divariantes (Milán, 2019)

Diagrama Schoeller-Barkalof

Permite representar varias muestras en un mismo diagrama, para que puedan ser comparadas. Se disponen varias semirrectas o columnas verticales paralelas, igualmente espaciadas y divididas en escala logarítmica y con el mismo módulo. A cada semirrecta se le asocia un anión o un catión, exceptuando a la primera columna, que no tiene asociada ningún ion y su unidad de medida es en mEq/l, las demás tienen como unidad de medida mg/l. El orden de las columnas es el siguiente:

- * Columna 1: sin ion, unidad de medida mEq/l
- * Columna 2: Ca, unidad de medida mg/l
- * Columna 3: Mg, unidad de medida mg/l
- * Columna 4: Na, unidad de medida mg/l

- * Columna 5: Cl, unidad de medida mg/l
- * Columna 6: SO₄, unidad de medida mg/l
- * Columna 7: HCO₃, unidad de medida mg/l
- * Columna 8: NO₃, unidad de medida mg/l

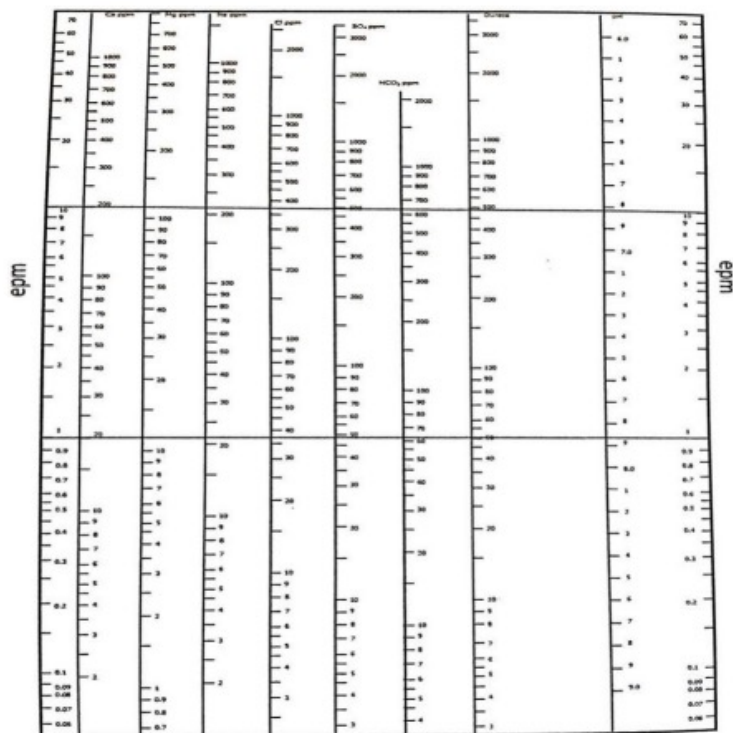


Figura 3.8. Diagrama Schoeller-Barkalof (Milán, 2019)

Mapas de isolíneas

Incluyen líneas que representan puntos con un mismo valor del parámetro analizado, se determinan mediante técnicas de análisis geostatístico. Permiten evaluar la tendencia (gradiente) regional de determinado

parámetro e identificar las áreas o sectores anómalos con respecto a esa tendencia regional. (Figura 3.9)

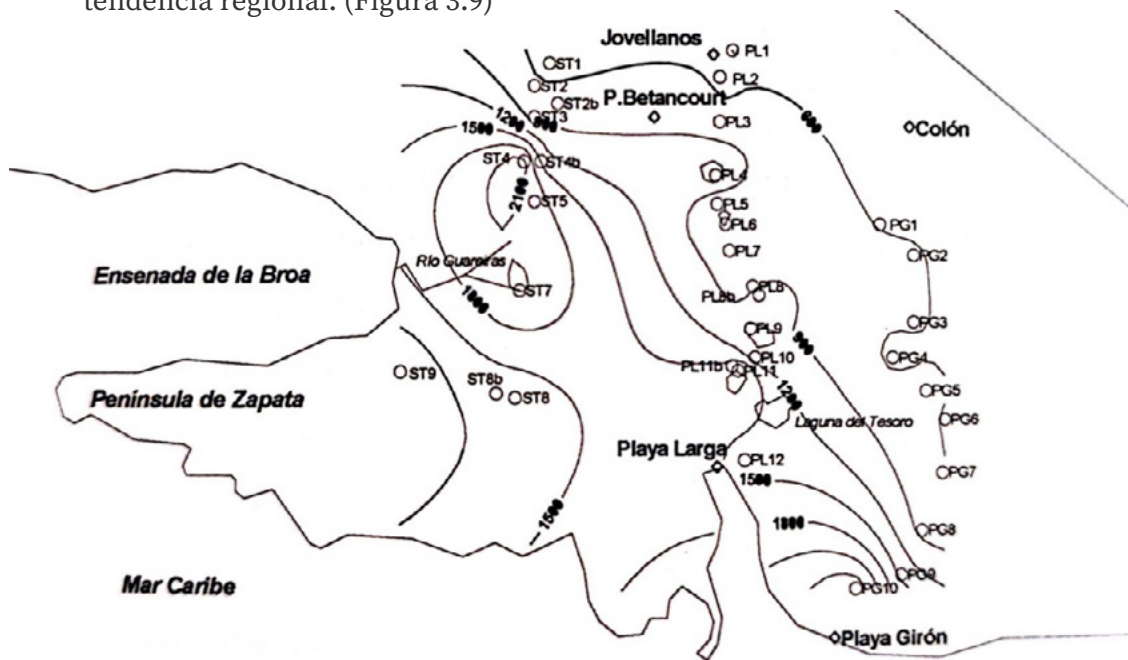


Figura 3.9. Mapas de aislóneas de conductividad eléctrica. (Fagundo y González, 2016)

Mapas de puntos escalados

Se representa el parámetro en el mapa mediante puntos cuyo tamaño es proporcional al valor del parámetro. Una variante es la representación de rangos de valores mediante diferentes colores.

La principal ventaja es que ofrece una información directa sobre la localización de los puntos de muestreo. La principal desventaja es que cuando los puntos están muy próximos, estos se superponen, perdiendo definición. Se muestra en la figura 3.10.

1

2

3

4

5

6

7

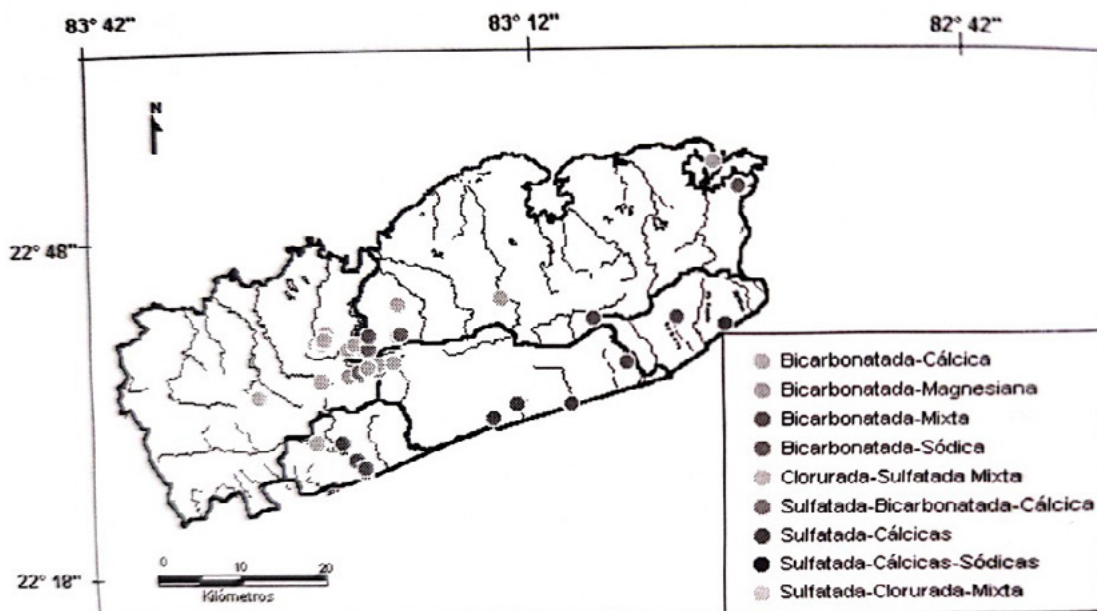


Figura 3.10. Distribución espacial de los tipos hidroquímicos de aguas. (Fagundo y González, 2016)

3.7 Clasificación del Agua

El agua es una sustancia compuesta por dos átomos de hidrógeno y un átomo de oxígeno (H_2O), compone la mayor parte de nuestro planeta con alrededor de un 70% de presencia en la tierra y esta se puede encontrar en los tres estados físicos de la materia, sólido en forma de hielo; gaseoso en forma de vapor y finalmente líquido, como se encuentra normalmente. Las aguas naturales pueden clasificarse principalmente en cuatro diferentes tipos, atmosférica, subterránea, superficial y marinas. Cada una de ellas posee características y composiciones específicas.

3.7.1 Clasificación geológica

Las aguas naturales se han clasificado de formas distintas, con el tipo de roca a las que se asocia, características físico-químicas, agresividad, uso y otras propiedades particulares. Dichas aguas pueden agruparse de la manera siguiente:

1. Aguas Juveniles (No involucradas en la circulación atmosférica)
 - a) Magmáticas
2. Otras aguas juveniles como:
 - a) Aguas surgentes o reciclables (involucradas en la circulación atmosférica).
 - b) Aguas meteóricas
 - Aguas de precipitación (lluvia o nieve)
 - Aguas de suelo
 - Aguas subterráneas cercanas a la superficie (subsuperficiales)
 - c) Aguas oceánicas que penetran en los acuíferos.
 - d) Aguas fósiles o connatas.
 - De origen marino
 - De origen no marino
 - e) Aguas metamórficas
 - Aguas con alto contenido de CO₂ y boro.

3.7.2 Clasificación Kárstica

Las aguas que circulan en forma superficial o subterránea por una región kárstica pueden considerarse de dos formas, alóctonas ó autóctonas, con relación al subsuelo.

Se consideran aguas alóctonas a aquellas que originan una litología tal como los granitos, los sedimentos de origen volcánico, las areniscas, las

arcillas y otros medios poco permeables, constituidos por minerales insolubles, principalmente aluminosilicatos.

Es importante destacar que en muchos casos la composición química de estas aguas es diferente de las precipitaciones en cuanto a su grado de mineralización y tipo de agua.

En otras ocasiones, los procesos de intemperismo y condiciones de flujo que se encuentran en el medio (Figura 3.12), es decir, la composición química de estas aguas es muy diferente de la típica que debe ofrecer esa litología, aunque es común la presencia de rasgos que las distinguen de las aguas kársticas carbonatadas.

En la figura 3.11 se muestran las propiedades químico-físicas de aguas naturales de estos dos tipos.

N°	T(°C)	pH	CE (μS/cm)	CO ₂ (mg/L)	HCO ₃ ⁻ (meq/L)	Cl ⁻ (meq/L)	SO ₄ ²⁻ (meq/L)	Ca ²⁺ (meq/L)	Mg ²⁺ (meq/L)	Na ⁺ +K ⁺ (meq/L)
1	22,0	6,98	41	2,7	0,25	0,11	0,00	0,10	0,00	0,26
2	15,8	6,52	38	4,0	0,18	0,17	0,00	0,065	0,02	0,27
3	28,0	6,69	150	18,5	1,00	0,40	0,10	0,50	0,10	0,90
4	24,0	7,55	200	3,3	1,75	0,32	0,06	1,08	0,32	0,73
5	23,8	8,10	490	2,6	5,15	0,72	0,20	2,60	1,30	2,17
6	23,8	8,30	400	1,0	3,85	0,39	0,48	0,10	3,90	0,72
7	22,2	7,72	575	19,8	6,80	0,37	0,01	3,90	2,67	0,61
8	26,0	6,50	1290	209,0	13,60	0,45	0,14	4,78	4,62	4,79
9	27,4	6,90	1100	38,5	6,20	2,28	1,74	2,86	6,68	2,68
10	21,1	7,15	500	22,9	4,70	0,25	0,00	4,64	0,24	0,07
11	22,2	8,25	230	1,0	2,00	0,37	0,09	1,79	0,21	0,46
12	22,0	8,24	243	1,3	2,50	0,39	0,06	1,40	0,89	0,86
13	25,0	8,00	140	0,9	1,00	0,31	0,08	0,60	0,20	0,59
14	22,2	7,95	350	3,3	3,25	0,42	0,08	2,66	0,34	0,75
15	22,8	7,50	375	8,8	3,90	0,39	0,12	3,40	0,32	0,69
16	24,6	7,31	414	17,4	4,00	0,39	0,29	2,99	0,49	1,20
17	22,2	7,22	377	19,8	3,50	0,31	0,00	3,37	0,12	0,40
18	23,0	7,30	505	19,8	4,45	0,53	0,90	4,00	0,60	1,28
19	23,4	6,80	700	59,4	6,10	0,49	1,01	4,80	0,60	2,20
20	27,0	7,39	650	14,4	4,00	0,82	2,00	3,59	1,48	1,75
21	23,8	7,58	560	50,6	5,15	0,78	0,20	4,47	0,76	0,90
22	25,6	7,30	900	75,7	7,15	1,27	1,34	7,30	1,38	1,08
23	31,8	7,70	610	30,8	5,55	1,11	0,04	3,52	2,06	1,12
24	30,0	7,20	4505	49,0	3,75	1,10	35,42	28,02	6,11	6,14
25	28,0	7,83	400	1,50	3,25	0,68	0,58	2,20	0,59	1,72
26	22,6	7,90	380	1,1	4,15	0,35	0,06	3,40	0,50	0,66
27	23,0	7,35	610	18,0	4,93	0,73	0,58	4,85	0,67	0,72
28	23,0	7,40	522	13,0	4,98	0,73	0,40	3,60	1,67	0,84
29	25,0	7,60	1100	30,8	6,21	4,64	0,26	4,39	2,91	3,81
30	25,0	7,40	1000	16,5	4,25	6,30	0,36	3,88	0,88	6,15
31	25,0	7,30	9950	23,1	5,35	92,00	4,04	7,32	16,08	77,99
32	25,0	7,60	30000	30,8	5,00	271,00	20,80	13,20	52,80	230,80

Figura 3.11. Propiedades químico-físicas de algunas aguas naturales tomadas como ejemplos, por ser representativas de diferentes condiciones hidrogeológicas (Fagundo y González, 2016)

Nota: Aguas de lluvia (1-2); arroyos superficiales que discurren por: areniscas, esquistos y pizarras (3), sedimentos efusivo -sedimentarios (4-5), serpentinitas (6), sedimentos terrígeno-carbonatados (7); pozos en serpentinitas asociados al drenaje profundo (8-9); curso superficial en la zona de alimentación de un macizo kárstico (10); aguas de cueva (11-12); resurgencias y surgencias kársticas (13-15); manantiales kársticos someros (16-19); manantiales kársticos asociados al drenaje profundo (20-24); ríos superficiales kársticos (25-26): pozos en cuencas cerradas en una llanura kárstica (27-28); dolinas, casimbas y lagunas en una llanura kárstica litoral (29-32).

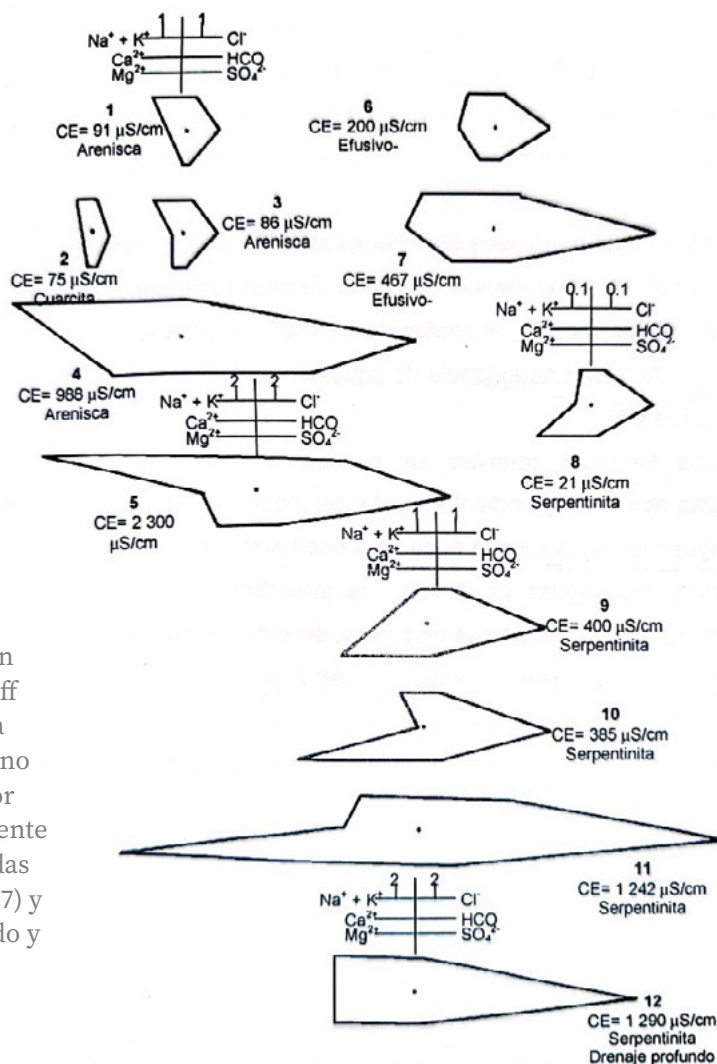
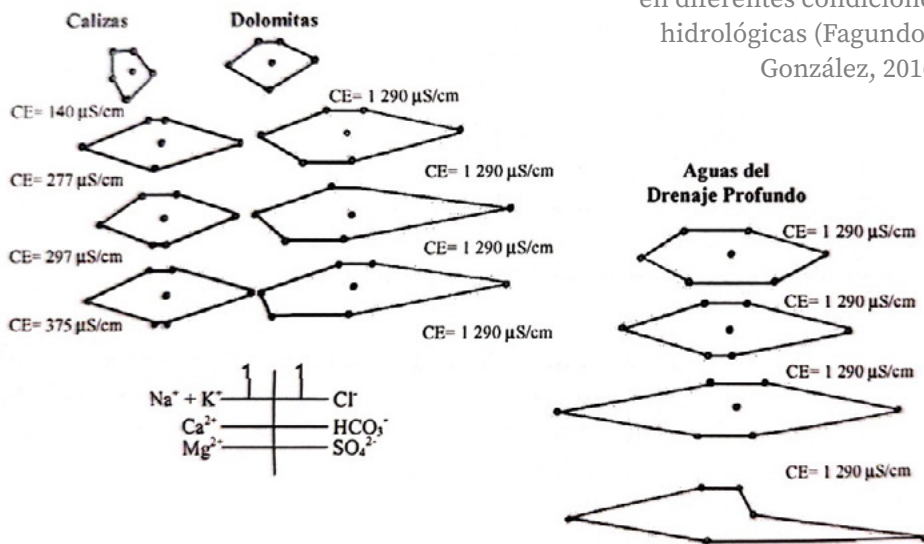


Figura 3.12. Representación mediante diagramas de Stiff de la composición química de aguas de drenaje alóctono al Karst, que se mueven por aluminosilicatos con diferente grado de acidez: rocas ácidas (1-5), mediante ácidas (6 y 7) y ultrabásicas (8-12) (Fagundo y González, 2016).

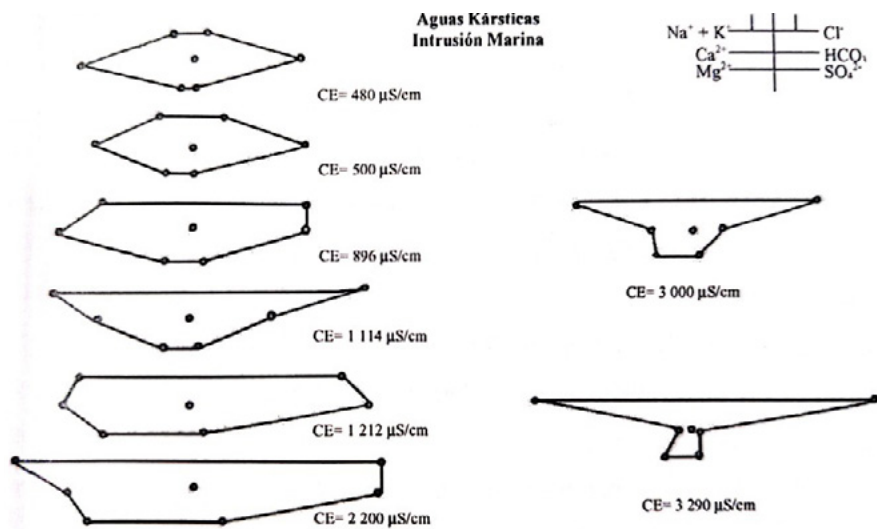
Por otra parte, las aguas AUTÓCTONAS de los macizos kársticos calcáreos son característicos por reflejar aquellos iones que son disueltos durante el proceso de erosión química, HCO_3^- , Ca^{2+} y Mg^{2+} , además de una mineralización no muy elevada. El contenido de SO_4^{2-} y Cl^- depende de la presencia de yeso o rocas salinas o bien, de procesos producto de la actividad humana. (Figura 3.13)

Figura 3.13. Representación mediante diagramas de Stiff de la composición química de aguas kársticas que se mueven en diferentes condiciones hidrológicas (Fagundo y González, 2016)



En los terrenos carbonatados litorales puede existir una menor o mayor cantidad de iones de Cl^- y Na^+ en función del grado de intrusión marina. Aunado a ello, a cierto nivel de mezcla, el contenido de Mg^{2+} es superior al del Ca^{2+} , resultado de la mayor abundancia de este ion en el mar, ilustrado en la Figura 3.14.

Figura 3.14. Representación mediante diagramas de Stiff de aguas Kársticas litorales con diferente grado de mezcla con el agua de mar (Fagundo y González, 2016)



Las aguas kársticas también se pueden clasificar en relación con su movimiento horizontal y vertical en donde se encuentra (macizo), en el primer caso se distinguen las aguas de la zona de alimentación, conducción y emisión. En el segundo caso, aguas de la zona de aireación (vadosas), de la zona de saturación (mixtas) y finalmente de la zona de saturación y circulación profunda (freáticas).

3.7.3 Clasificación Hidroquímica

Los criterios de clasificación químico-físicos de las aguas kársticas prácticamente no se distinguen de los utilizados para las aguas naturales en general; estos se basan en el contenido de los iones más abundantes.

Existen cuatro principales métodos para la clasificación de estas aguas, los cuales son:

Clasificación de Alekine

Dicho método considera los tres iones más importantes, $\text{HCO}_3^- + \text{CO}_3^{2-}$, $\text{Cl}^- + \text{SO}_4^{2-}$. Al mismo tiempo cada clase se divide en tres grupos según el catión predominante (Ca^{2+} , Mg^{2+} o Na^+). Finalmente, la clasificación de las aguas es:

Tipo:

- I. Aguas bicarbonatadas (predominio de HCO_3^-).
- II. Aguas sulfatadas (predominio de SO_4^{2-}).
- III. Aguas cloruradas (predominio de Cl^-).

Clases:

- a) Aguas cálcicas (predominio del Ca^{2+})
- b) Aguas magnésicas (predominio del Mg^{2+})
- c) Aguas sódicas (predominio del Na^+)

Grupos:

1. $r \text{HCO}_3^- > r \text{Ca}^{2+} + r \text{Mg}^{2+}$
2. $r \text{HCO}_3^- < r \text{Ca}^{2+} + r \text{Mg}^{2+} < r \text{HCO}_3^- + r \text{SO}_4^{2-}$
3. $r \text{HCO}_3^- + r \text{SO}_4^{2-} < r \text{Ca}^{2+} + r \text{Mg}^{2+}$, es decir, $r \text{Cl}^- > r \text{Na}^+$
4. $r \text{HCO}_3^- = 0$. Este grupo no existe en el tipo I.

En 1982 Gutiérrez presenta una modificación del método de Alekine, en el que se comparan los pesos equivalentes (en % mEq/L) de un agua cualquiera. Cuando un catión o anión presenta más de 50 % mEq/L, el tipo de agua recibe el nombre del ion, por ejemplo, bicarbonatada cálcica. Cuando un catión o anión no alcanza 50 %, pero su contenido es mayor de 33 % mEq/L, el tipo de agua corresponde a un nombre combinado, por ejemplo, bicarbonatada cálcico-magnésica.

Clasificación de Shchoukareu

Este método para clasificar las aguas emplea un índice en lo iones que se encuentran en un porcentaje superior al 25 % del total de miliequivalentes de aniones o de cationes.

1. Respecto a la relación de los aniones:
 - a) Aguas bicarbonatadas.
 - b) Aguas sulfatadas.
 - c) Aguas cloruradas.
 - d) Aguas bicarbonatadas sulfatadas.
 - e) Aguas bicarbonatadas cloruradas.
 - f) Aguas sulfatocloruradas.
 - g) Aguas sulfatocloruradas bicarbonatadas.

2. Respecto a la relación de los cationes:
 - a) Aguas cálcicas.
 - b) Aguas magnésicas.
 - c) Aguas sódicas.
 - d) Aguas calcicomagnesianas.
 - e) Aguas calcicosódicas.
 - f) Aguas magnesicosódicas.
 - g) Aguas cálcico-magnésico-sódicas.

Clasificación de Palmer

En este método las características de las aguas naturales dependen de la salinidad. Toma en cuenta que las sales de ácidos fuertes originan salinidad, mientras los ácidos débiles proporcionan alcalinidad, de acuerdo con este método las aguas se caracterizan por las siguientes propiedades:

1

2

3

4

5

6

7

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

Clasificación de Scholler

Dicho método toma como parámetro el contenido (mEq/L) de los compuestos disueltos con la importancia siguiente: cloruros > sulfatos > bicarbonatos + carbonatos > índice de intercambio de base (IIB) > relaciones entre aniones y cationes. Mediante este método se establecen los tipos de aguas siguientes:

1. Con relación al cloruro ($r \text{Cl}^-$)
 - a) Aguas hipercloruradas (> 700 hasta saturación).
 - b) Aguas clorohalásicas (420-700).
 - c) Aguas cloruradas fuerte (140-420).
 - d) Aguas cloruradas medias (40-140).
 - e) Aguas oligocloruradas (15-40).
 - f) Aguas cloruradas normales (< 10).
2. Sobre la base del SO_4^{2-} ($r\text{SO}_4^{2-}$)
 - a) Aguas hipersulfatadas (> 58).
 - b) Aguas sulfatadas (24-58).
 - c) Aguas oligosulfatadas (6-24).
 - d) Aguas sulfatadas normales (< 6).

1

2

3

4

5

6

7

3. Con relación a la concentración de bicarbonato más carbonatos
($r \text{HCO}_3^- + r \text{CO}_3^{2-}$)
- a) Aguas hipercarbonatadas (> 7).
 - b) Aguas carbonatadas normales (2-7).
 - c) Aguas hipocarbonatadas (< 2).

Por último, el IIB se utiliza para indicar la relación entre los iones que se intercambian respecto a los inicialmente presentes en el agua.

1

2

3

4

5

6

7

4

EQUILIBRIO QUÍMICO

4.1 Constante de equilibrio químico

Todos los procesos químicos evolucionan, desde los reactivos hasta la formación de productos a una velocidad que cada vez es menor, ya que a medida que transcurren hay menos cantidad de reactivos. Por otro lado, según van apareciendo moléculas de los productos, estas pueden reaccionar entre sí y dar lugar nuevamente a reactivos, y lo hacen a una velocidad mayor, porque cada vez hay más.

El proceso continúa hasta que la velocidad de formación de los productos es igual a la velocidad de descomposición de estos para formar nuevamente los reactivos. Es decir, se llega a la formación de un estado dinámico en el que las concentraciones de todas las especies reaccionantes (reactivos y productos) permanecen constantes. Ese estado se conoce como equilibrio químico.

El equilibrio químico es un estado de un sistema reaccionante en el que no se observan cambios a medida que transcurre el tiempo, a pesar de que siguen reaccionando entre sí las sustancias presentes.

En la mayoría de las reacciones químicas, los reactivos no se consumen totalmente para obtener los productos deseados, sino que, por el contrario, llega un momento en el que parece que la reacción ha concluido. Se

puede comprobar, analizando los productos formados y los reactivos consumidos, que la concentración de todos permanece constante.

Es decir, “el equilibrio químico se establece cuando existen dos reacciones opuestas que tienen lugar simultáneamente a la misma velocidad”.

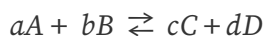
Constante de equilibrio químico

Se sabe que las concentraciones de las sustancias que intervienen en un proceso, cuando este llega al equilibrio, son las mismas, independientemente de la concentración inicial.

Existe una relación entre estas concentraciones (reactivo y producto) que hace que permanezcan constantes, siempre y cuando la temperatura no varíe.

Guldberg y Waage en 1864, encontraron la ley (que lleva su nombre) donde relacionaban las concentraciones de los reactivos y productos en el equilibrio con una magnitud, que se denominó constante de equilibrio.

Así pues, si tenemos un equilibrio de la forma:



$$K_d = \rightarrow (\text{directa}) \quad \text{y} \quad K_i = \leftarrow (\text{inversa})$$

La velocidad de la reacción directa o hacia la derecha, si es un proceso elemental, será:

$$V_d = K_d [A]^a [B]^b$$

Mientras que para la reacción inversa (hacia la izquierda):

$$V_i = K_i [C]^c [D]^d$$

K_d y K_i son las constantes de velocidad específicas para ambas reacciones, derecha e izquierda respectivamente. Ambas velocidades son iguales en el equilibrio $V_d = V_i$, se cumple que:

$$K_d [A]^a [B]^b = K_i [C]^c [D]^d$$

Pasando ambas constantes al mismo lado, y las concentraciones al otro:

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

Como a la temperatura a la que se ha realizado el proceso K_d y K_i son constantes, se puede escribir:

$$\frac{K_d}{K_i} = K_c$$

Por lo tanto:

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

Esta constante K_c es la que se denomina constante de equilibrio.

K es siempre constante, independientemente de las concentraciones de las sustancias reaccionantes en el equilibrio.

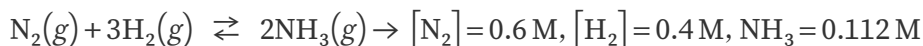
Siempre es igual a K_d el cociente de dos cantidades que en sí mismas son constantes a una K_i temperatura dada.

Los valores que se emplean para K_c están numéricamente relacionados con las concentraciones molares, K_c se considera adimensional, es decir, no tiene unidades.

Ejemplo: Cálculo de la constante de equilibrio químico

En el proceso de formación del amoníaco, realizado a 500 °C en un recipiente de 10 litros, se ha encontrado en el equilibrio la presencia de 6 moles de N_2 , 4 moles de H_2 y 1,12 moles de NH_3 . ¿Cómo será el rendimiento de esa reacción a 500 °C?

Solución:



Entonces:

$$\left(\frac{\text{Mo}}{l}\right) \text{ en equilibrio} = \frac{6}{10}, \frac{4}{10}, \frac{1.12}{10}$$

Aplicando la ecuación:

$$K_c = \frac{[NH_3]^2}{[N_2] * [H_2]^2} = \frac{(0.112)^2}{(0.6)(0.4)^3} = 0.33$$

$$K_c = 0.33$$

Este valor indica que la reacción a 500 °C está desplazada hacia la izquierda; por tanto, el rendimiento será bajo.

Ley de Acción de Masas

En un proceso elemental, ‘el producto de las concentraciones en el equilibrio de los productos elevadas a sus respectivos coeficientes estequiométricos, dividido por el producto de las concentraciones de los reactivos en el equilibrio elevadas a sus respectivos coeficientes estequiométricos’. Es una constante para cada temperatura, llamada constante de equilibrio.

La magnitud K_c informa sobre la proporción entre reactivos y productos en el equilibrio químico, así:

- i) Cuando $K_c > 1$: En el equilibrio resultante la mayoría de los reactivos se han convertido en productos.
- ii) Cuando $K_c \rightarrow \infty$: En el equilibrio resultante prácticamente solo existen los productos.
- iii) Cuando $K_c < 1$: En el equilibrio resultante, la mayoría de los reactivos quedan sin reaccionar, formándose solo pequeñas cantidades de productos.

Constante de equilibrio en función de la presión

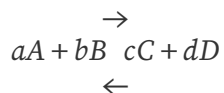
Existen otras formas para expresar la constante de equilibrio. Hasta ahora, se ha utilizado la expresión de K_c para relacionar las concentraciones de las sustancias que participan en el equilibrio.

La presión de un gas es proporcional al número de moles de cada litro, y a partir de la ecuación de los gases:

$$pV = nRT$$

Se puede expresar también $p = n/RT$ o también como $p = cRT$.

Con ella se puede representar el cambio necesario para establecer el equilibrio en términos de presiones, en aquellas reacciones cuyos componentes son gaseosos, en función de la presión parcial de las sustancias gaseosas que intervienen en el equilibrio. Esta nueva constante se denota K_p . Si en la reacción:

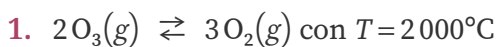


Cabe aclarar que en la constante K_p solo intervienen las especies en estado gaseoso.

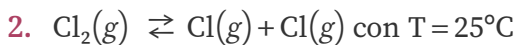
Ejercicio

Tema 4.1 Constante de equilibrio químico.

Evalúa el rendimiento de los siguientes equilibrios escribiendo las constantes:



$$R = 2.54 \times 10^{12}$$



$$R = 1.4 \times 10^{-38}$$

4.2 Relación del equilibrio químico y la solubilidad

En las reacciones de disolución de minerales, la constante de equilibrio se conoce comúnmente como constante del producto de solubilidad (KPS). El logaritmo inverso de esta constante de equilibrio se denomina pK y tiene una gran significación geoquímica:

$$pK = -\log(K)$$

La solubilidad de un mineral en agua pura se puede calcular a partir de la constante del producto de solubilidad; por ejemplo, la disolución de la anhidrita, la cual puede representarse mediante la ecuación química de disociación. En este caso, la constante del producto de solubilidad de la anhidrita (K_{anh}) es:

$$K_{anh} = (Ca^{2+})(SO_4^{2-}) = 3.4 \times 10^{-5}$$

La solubilidad de un mineral en las aguas naturales es mucho más compleja de lo que se deduce de las expresiones termodinámicas para el agua pura.

En el medio natural estos elementos están relacionados de tal manera que no puede predecirse exactamente la forma en que ocurrirá el proceso.

En la siguiente tabla (véase Tabla 4.1) que presenta la solubilidad en agua a 25 °C de varios minerales constitutivos, el valor de pK , así como las reacciones químicas correspondientes.

Su análisis dice que el pK es un buen indicador de la solubilidad relativa de los minerales, lo cual se debe a que en las reacciones de equilibrio las actividades de los iones o moléculas se encuentran elevados a una potencia igual al número de moles en la reacción de disolución balanceada.

1

2

3

4

5

6

7

Por ejemplo, la solubilidad de la calcita en agua pura a $p\text{CO}_2$ 1 bar (1 atm) es de 500 mg/l, mientras que la solubilidad de la dolomita bajo las mismas condiciones es cercana a este valor (480 mg/l), a pesar de que las constantes de equilibrio difieren en un orden de 8. La similar solubilidad se debe a que, en este caso, el término (CO_3^{2-}) se encuentra elevado a la segunda potencia en la dolomita y a la primera potencia en la calcita.

Tabla 4.1. Solubilidad, pK y concentración de minerales constitutivos a 25°C en agua

Mineral	pK	Solubilidad	Concentración (mg/l)
Halita	-1.6	360,000	5 a 10,000
Silvita	-0.9	244,000	0 a 10,000
Andrihita	4.5	×	×
Yeso	4.6	2,400	0 a 1,500
Calcita	8.4	100*, 480**	10 a 300
Dolomita	17	90*, 500**	10 a 300
Sílice	17	120	3.65
Cuarzo	37	12	3.12
Gibbsita	37	0.001	Trazas

(Cyronak, 2014)

*Multiplicado por 10^{-3} bar

** Multiplicado por 10^{-1} bar

Con relación al efecto de la solubilidad de los minerales sobre el paisaje kárstico se puede indicar que, a causa de la alta solubilidad de las rocas salinas, los depósitos de estos minerales son rápidamente destruidos por

la acción disolvente de las aguas meteóricas, en estos casos sólo se pueden apreciar algunos afloramientos poco voluminosos de halita o silvita. En ocasiones desempeñan un papel importante en los procesos de karstificación de tipo intersticial.

Los afloramientos de anhidrita y yeso son algo más comunes en la naturaleza, los procesos de karstificación son muy intensos en las rocas ricas en estos minerales. En ocasiones se forman cavernas de grandes magnitudes y depresiones kársticas en terrenos donde abunda el yeso. Sin embargo, algunas cuevas en yeso no alcanzan mayores dimensiones a causa de la destrucción de las galerías, como consecuencia de la intensa corrosión química.

Las calizas y dolomías constituyen los afloramientos más comunes de las rocas kársticas. La solubilidad y contenido en las aguas son similares al de los minerales calcita y dolomita, constitutivos respectivamente de estas rocas.

Las areniscas silíceas y las cuarcitas son frecuentes en los afloramientos. El contenido de (SiO_2) en las aguas procedentes de estas rocas suele ser mayor que el encontrado en las aguas que se originan en las rocas carbonatadas, aunque en ocasiones existe algún solapamiento en los rangos de concentración.

Las formas de disolución más significativas están asociadas a las aguas termales, ya que la solubilidad de la cuarcita se incrementa rápidamente con la temperatura, siendo superior a la de la calcita a $100\text{ }^\circ\text{C}$.

1

2

3

4

5

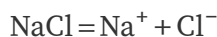
6

7

4.3 Disolución de minerales solubles

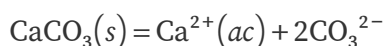
Cuando los productos de una reacción de disolución son todas especies iónicas, se dice que la disolución es congruente. En el caso de la disolución por las aguas naturales de los minerales halita, calcita, dolomita y yeso, cuyas reacciones y ecuaciones de equilibrio químico se muestran a continuación:

Halita



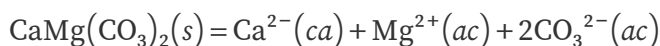
$$K_h = a_{\text{Na}^+} a_{\text{Cl}^-}$$

Calcita



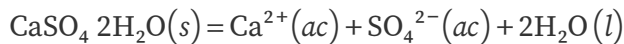
$$K_c = a_{\text{Ca}^{2+}} a_{\text{CO}_3^{2-}}$$

Dolomita



$$K_d = a_{\text{Ca}^{2+}} a_{\text{Mg}^{2+}} a_{\text{CO}_3^{2-}}^2$$

Yeso



$$K_y = a_{\text{Ca}^{2+}} a_{\text{SO}_4^{2-}}$$

1

2

3

4

5

6

7

4.4 Equilibrio químico de los carbonatos

Los carbonatos (CO_3^{2-}) son sales que resultan de la combinación del ácido o un éster carbónico y un metal.

Los carbonatos se clasifican en grupos isoestructurales, correspondientes a los sistemas trigonal y rómbico. Al primero pertenecen los grupos de la calcita y de la dolomita. Al sistema rómbico, el grupo del aragonito. También pueden dividirse en carbonato anhidros e hidratados.

Clasificación

Los carbonatos anhidros e hidratados han sido clasificados en grupos isoestructurales. Según su estructura cristalina y composición química se dividen en:

Anhidros

Grupo de la calcita: Integrado por el carbonato de calcio, carbonato cálcico o creta (MgCO_3). También por los carbonatos de magnesita (CaCO_3). La smithsonita, carbonato de zinc (ZnCO_3), pertenece igualmente a este grupo del sistema cristalino trigonal.

Grupo de la dolomita: Lo conforma la dolomita, carbonato de calcio y magnesio (CaMgCO_3).

Grupo del aragonito: El carbonato de aragonito es la presentación cristalina del carbonato de calcio y comparte la misma fórmula química (CaCO_3).

1

2

3

4

5

6

7

Básicos o hidratados

Los más comunes en esta categoría son los carbonatos de cobre, adicionalmente pertenecen al grupo el natrón, lanthanita, lansfordita, termotrinita, la hidromagnesita, entre otros.

Importancia de los carbonatos

Los carbonatos son compuestos químicos abundantes en la naturaleza, tienen una alta capacidad de neutralización y múltiples usos en la industria. Son los de mayor presencia en la superficie terrestre y que además son los más utilizados son el carbonato de calcio y de magnesio. Tienen tantas o más aplicaciones que el cuarzo y las arcillas.

Las rocas calizas y dolomías, ricas en estos compuestos, se emplean en procesos de oxidación atmosférica. También en la desulfuración en la industria metalúrgica y más comúnmente, en la descontaminación y preparación de los suelos. Mientras que los carbonatos de zinc, anhidros o hidratados, tienen su lugar en la industria farmacéutica.

En la siguiente tabla (4.2) se muestran los valores pK de especies carbonatadas a diferentes temperaturas.

Tabla 4.2 Valores de pK de especies carbonatadas en función de la temperatura

T (°C)	pK_{CO_2}	pK_1	pK_2	pK_w	pK_c
0	1.11	6.58	10.63	14.93	8.38
5	1.19	6.52	10.55	14.73	8.39
10	1.27	6.46	10.49	14.53	8.41
15	1.34	6.42	10.43	14.35	8.43
20	1.41	6.38	10.38	14.17	8.45
25	1.47	6.35	10.33	14	8.48

(Snoeyink, 1990)

4.5 Relación cinética y equilibrio químico

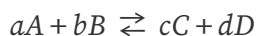
La cinética química permite ver el mecanismo a través del cual el sistema pasa de un estado a otro, así como el tiempo que demora esta transición.

Por otra parte, el equilibrio químico, usa como herramienta la termodinámica, ya que por medio de esta, se muestra en qué dirección ocurre la reacción, pero sin decir el tiempo que demorará la misma, estudiando solamente los estados iniciales y finales, sin tomar en cuenta el mecanismo por el cual pasa de un estado a otro.

El equilibrio se puede estudiar desde el punto de vista cinético (con los principios cinéticos) siempre que se tome como el estado donde las velocidades de las reacciones de formación e inversa sean iguales.

El equilibrio químico es un estado de un sistema reaccionante en el que no se observan cambios a medida que transcurre el tiempo, a pesar de que la reacción sigue. Es decir, se establece, cuando existen dos reacciones opuestas que tienen lugar simultáneamente a la misma velocidad.

En términos de velocidad, se puede expresar si tenemos una reacción:



$\rightarrow (v_d)$ donde es la velocidad de formación de los productos.

$\leftarrow (v_i)$ donde es la velocidad de descomposición de los productos.

Cuando ambas velocidades se igualan, se considera que el sistema está en equilibrio.

1

2

3

4

5

6

7

En un sistema en equilibrio se dice que el mismo se encuentra desplazado hacia la derecha si hay más cantidad de productos (C y D) presentes en el mismo que de reactivos (A y B) y se encontrará desplazado hacia la izquierda cuando ocurra lo contrario.

Se podrían tener, por tanto, las dos situaciones representadas (véase las Figuras 4.1 y 4.2).

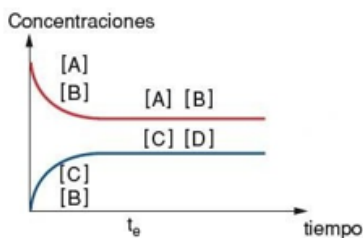


Figura 4.1. Representación de un sistema en equilibrio cuando predominan los reactivos (Hounslow, 1995)

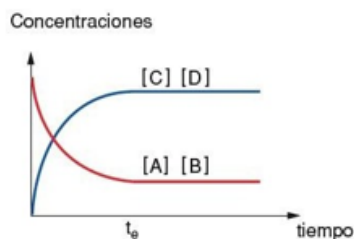


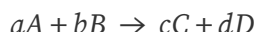
Figura 4.2. Representación de un sistema en equilibrio cuando predominan los reactivos (Hounslow, 1995)

No ocurre así con la cinética química, la cual no puede ser estudiada con los principios del equilibrio químico. Así que la cinética química se puede considerar una ciencia más fundamental que la termodinámica.

Desafortunadamente, la complejidad de la cinética química radica en que la teoría de esta ciencia es muy difícil de aplicar con exactitud. Como resultado se puede encontrar que la termodinámica dice con precisión la magnitud de la reacción, pero solamente la cinética química dirá, con cierta confianza, la velocidad de esta.

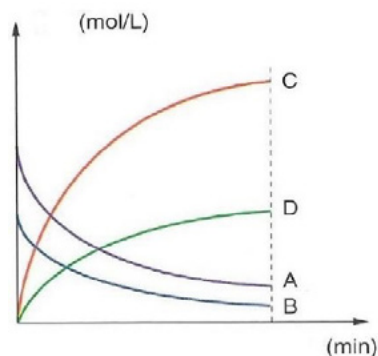
Velocidad de reacción

Se considera la reacción química (general):



Se define la velocidad de una reacción como el cambio (disminución o aumento) de las concentraciones de los reactivos o de los productos conforme pasa el tiempo. La concentración de una sustancia se expresa en mol/l y se representa utilizando unos corchetes. Por ejemplo, [A] es la concentración, expresada en mol/l, del reactivo A. (véase la Figura 4.3).

Figura 4.3. Representación de la velocidad de reacción para diferentes sustancias (Hounslow,1995)



Se debe tomar en cuenta que:

- Las concentraciones de los reactivos disminuyen conforme pasa el tiempo, por lo que su variación será negativa.
- Las concentraciones de los productos aumentan conforme pasa el tiempo, por lo que su variación será positiva.
- La velocidad de reacción es específica de cada reacción, es decir depende de las sustancias que intervienen, se calcula de la siguiente manera:

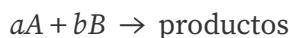
$$v = -\frac{1}{a} \frac{d[A]}{dt} = -\frac{1}{b} \frac{d[B]}{dt} = \frac{1}{c} \frac{d[C]}{dt} = \frac{1}{d} \frac{d[D]}{dt}$$

El signo negativo que aparece delante de los dos primeros términos se debe a que las variaciones de $[A]$ y $[B]$ son negativas; de esta manera, la velocidad de reacción es una cantidad positiva.

Se observa que si las concentraciones de las sustancias (reactivos o productos) no varían conforme pasa el tiempo, la velocidad de reacción se anula, lo cual significa que la reacción se encuentra en equilibrio.

La ecuación cinética, ecuación de velocidad, ley de velocidad o ley cinética, es la ecuación que relaciona la velocidad de una reacción con las variables que influyen en ella (concentraciones de las sustancias, temperatura, presencia de catalizadores, entre otros) dicha ecuación debe tener en cuenta que la velocidad de una reacción disminuye conforme pasa el tiempo, pues disminuye la concentración de los reactivos.

Experimentalmente se comprueba que para una reacción:



La ecuación cinética puede expresarse como directamente proporcional al producto de las concentraciones de los reactivos elevadas a una determinada potencia:

$$v = k[A]^\alpha [B]^\beta$$

Donde k es la constante de velocidad, α es el orden (parcial) de reacción con respecto al reactivo A y β es el orden (parcial) de reacción con respecto al reactivo B .

A la suma de los órdenes parciales de reacción de cada reactivo se le llama orden global de reacción.

1

2

3

4

5

6

7

De la ecuación de velocidad se deduce que la unidad de la velocidad de reacción es ($\text{mol} * L^{-1} s^{-1}$).

El valor de k depende de la temperatura, aumentando su valor con esta. También depende de la energía de activación, que será explicada en el siguiente apartado, y de la presencia de un catalizador.

Por lo general los órdenes de reacción más habituales son cero, uno y dos.

Factores que influyen en la velocidad de reacción

La velocidad de reacción aumentará cuando aumente el número de choques eficaces entre las moléculas reaccionantes. Así pues, los factores que influirán en la velocidad de una reacción serán los siguientes:

- 1. Naturaleza de los reactivos:** la velocidad de cualquier reacción química suele depender tanto de las características químicas como de los estados físicos de las sustancias que reaccionan. Generalmente, la velocidad de reacción aumenta cuanto mayor sea la superficie de contacto de los reactivos.
- 2. Concentración de los reactivos:** Cuanto mayor sea la concentración de los reactivos, con mayor probabilidad se producirán choques eficaces entre ellos, por lo que la velocidad de reacción aumentará.
- 3. Temperatura:** Al aumentar la temperatura, aumentará la velocidad de las partículas reaccionantes, por lo que será más probable que haya choques eficaces entre ellas.

1

2

3

4

5

6

7

5

PROCESOS HIDROGEOQUÍMICOS

5.1 Hidrogeoquímica

Es una conjunción de tres principales ciencias, una de ellas es la química, específicamente la del agua, la cual concierne el estudio de los procesos y reacciones químicas de la misma, ya que afectan su distribución, circulación e interacción de elementos disueltos en aguas naturales. La geología combinada y complementada con la biología, , debido a que durante el ciclo hidrológico, el agua interactúa con la biosfera. Específicamente puede ser definida como el análisis de los aspectos químicos del agua y su interrelación con las rocas de la corteza terrestre.

La hidrogeoquímica explica los fenómenos químicos y físicos que caracterizan, describen y clasifican a las aguas del subsuelo, analizando el comportamiento y evolución acorde a la cuantificación de sus componentes químicos.

Estudios hidrogeoquímicos

Existen diferentes aspectos y especies mayoritarias que determinan en una medida importante el comportamiento químico de las aguas.

- * **Calcio:** Cation principal por su difusión en rocas ígneas, sedimentarias y metamórficas, aparece absorbido en las superficies de minerales y rocas. Es moderadamente soluble a muy soluble y este contribuye a la “dureza” del agua. Su química está asociada a los iones CO_3H^- y CO_2 .
- * **Carbonatos y bicarbonatos:** Tanto el CO_3^{2-} como el CO_3H^- provienen de la disolución del CO_2 atmosférico (gas) en agua de lluvia y de la incorporación del CO_2 del suelo al agua de infiltración. Los carbonatos y bicarbonatos transfieren alcalinidad al agua. No son oxidables ni reducibles en aguas naturales.
- * **Cloruros:** El cloro es el halógeno más difundido; muy soluble en agua; muy estable en disolución; difícilmente precipitable; no se oxida ni se reduce en aguas naturales; normalmente, aparece como ion Cl^- en aguas naturales; proviene de la meteorización de rocas ígneas, del lavado de rocas, de evaporitas, de procesos de contaminación puntual.
- * **Magnesio:** Similar al calcio, pero más soluble y difícil de precipitar. Su forma predominante es Mg^{2+} . Puede formar complejos como MgOH^+ , MgSO_4 o $\text{HCO}_3^- \text{Mg}^+$. Junto al calcio contribuye a la dureza del agua. Proviene de minerales ferromagnesianos en rocas ígneas.
- * **Sodio:** Es el elemento alcalino con mayor presencia en el agua a lo largo del planeta, suele estar asociado al ion Cl^- . Es un indicador de aguas blandas. Dada a su alta solubilidad. Su forma predominante es el Na^+ .
- * **Sulfatos:** A 25 °C y 1 atm, las formas estables del azufre son SO_4^{2-} , HSO_4^- , S, HS^- , H_2S y S^{2-} aunque generalmente aparece en estado de máxima oxidación (SO_4^{2-}); en medios reductores, con abundante materia orgánica, puede sufrir reducción bacteriana de SO_4^{2-} a HS^- .

1

2

3

4

5

6

7

Técnicas Hidrogeoquímicas e Isotópicas

La hidrogeoquímica estudia el flujo de agua como vehículo de transporte, así como sus características físicoquímicas, químicas e isotópicas. Algunos de los alcances de estos estudios son la comprensión de los problemas de calidad y contaminación del agua, la definición de variables hidrogeológicas como recarga, tiempos de residencia y sistemas de flujo y puede informar sobre los procesos naturales y/o las actividades antrópicas que influyen cualitativamente sobre un sistema hídrico.

La interpretación hidrogeoquímica requiere estudiar la composición del agua (hidroquímica) e identificar y explicar su distribución espacial, así como la variación temporal en la localidad de estudio. Se apoya en una amplia gama de herramientas que incluyen representaciones gráficas en diagramas y mapas, cálculo y valoración de relaciones iónicas, análisis de datos termodinámicos, planteo de modelos de balance de masas y, eventualmente, desarrollo de pruebas simples en laboratorio.

El objetivo es obtener una representación simplificada del sistema a analizar, donde las variaciones de la composición del agua se expliquen a través de un conjunto de variables modificadoras que actúan sobre una solución inicial de estudio, como por ejemplo el agua de lluvia.

Técnicas Isotópicas

Las técnicas isotópicas se han aplicado en hidrología e hidrogeología a nivel mundial durante más de 50 años, constituyéndose en una herramienta muy valiosa para la investigación y la solución de problemas relacionados con el medio ambiente y la ingeniería.

1

2

3

4

5

6

7

La utilización de los isótopos estables del agua ($\delta^2\text{H}$ y $\delta^{18}\text{O}$), son muy útiles para identificar las diferentes fuentes de recarga de agua subterráneas y distinguir aguas con una composición química similar, ya que son trazadores ideales porque son parte de la molécula de agua y no reaccionan como otros elementos disueltos en el agua. Se utilizan para conocer:

- * Procesos de interacción agua-roca (Utilizando concentración absoluta y relativa de los iones mayoritarios y traza en el agua).
- * Localización de zonas de recarga y origen de aguas subterráneas. (Con análisis de composición isotópica de aguas subterráneas).

Aplicaciones de las técnicas hidrogeoquímicas e isotópicas

Algunas de las utilidades de las técnicas hidrogeoquímicas son el estudio de las filtraciones como lagos, embalses o relaves, además del origen y desplazamiento de las aguas subterráneas.

Aunado a ello se encuentra el análisis de la evaporación de salares, la interacción de aguas superficiales junto con aguas subterráneas, así como el nacimiento y movimiento de aguas de recarga con los contaminantes en sistemas de aguas subterráneas.

Modelación Hidrogeoquímica

Esta modelación se caracteriza por aplicar diversos conceptos y aspectos físicos- químicos para interpretar sistemas geoquímicos. El objetivo de este modelo es crear o idear modelos teóricos que describan la observación y comportamiento en el agua y las rocas; es decir, utilizar datos del sistema como la mineralogía, composición de gases, datos isotópicos, fis-

co-químicos; para determinar las reacciones químicas ocurridas, en qué medida tienen lugar, las condiciones bajo las que suceden (es decir, si es un sistema cerrado, en equilibrio, constante, variable), además del cambio en la calidad del agua y su mineralogía en respuesta a los procesos naturales y las perturbaciones del sistema.

Para estos modelos geoquímicos se elaboran dos aproximaciones diferentes:

- * **Modelación directa (o simulación):** Pronostica la composición del agua y la transferencia de masa que puede producirse de reacciones químicas hipotéticas. Esta misma tiende a generalizar la naturaleza y es desarrollada para responder a circunstancias idealizadas.
- * **Modelación inversa (o aproximación de balance de masa):** Define la transferencia de masa a partir de elementos de algunas de las ciencias relacionadas, especialmente datos químicos, isotópicos y mineralógicos observados y analizados. Este modelo fue desarrollado como una estrategia determinista para identificar las composiciones químicas de las aguas subterráneas.

5.2 Procesos de óxido-reducción

Casi todas las formas de vida en la Tierra dependen del agua. Alrededor de un 97% del agua del planeta se encuentra en el mar, por lo que no es apta para el consumo humano ni para la agricultura. Se sabe que las tres cuartas partes del agua dulce que hay en el planeta están inmovilizadas en forma de nieve, glaciares o extensiones heladas. Se ha estimado que la humanidad consume alrededor de una quinta parte del agua de escorrentía que va al mar, y la mayor fracción se dedica a tareas agrícolas de toda índole, ya sea riego, ganado, etc. Se cree que esta fracción puede aumentar hasta las tres cuartas partes hacia el año 2025.

1

2

3

4

5

6

7

Resulta, por tanto, muy importante comprender los procesos químicos que tienen lugar en el agua tanto para comprender la biología relacionada con ella como elaborar procesos de purificación adecuados que lleven a obtener agua apta para el consumo.

Dentro de los tres tipos de procesos químicos más importantes que se llevan a cabo en el agua son: reacciones ácido-base (o de neutralización), reacciones de oxidación-reducción (redox) y reacciones de precipitación, esta última enmarcada dentro de un concepto más amplio: la solubilidad.

Las reacciones ácido-base y de precipitación controlan el contenido de iones inorgánicos en el agua, mientras que las reacciones redox controlan el tipo de iones y, sobre todo, el contenido y características de la materia orgánica presente. Así, el pH y el contenido de los iones principales de un agua natural vienen casi determinados por la solubilización del CO_2 en agua y el lavado de los carbonatos de las rocas.

Reacciones REDOX

Las reacciones de óxido reducción también llamadas REDOX son aquellas en las que está involucrado un cambio en el número de electrones asociado a un átomo determinado, cuando este átomo o el compuesto del cual forma parte se transforman desde un estado inicial a otro final con liberación de energía.

En el agua subterránea, este proceso ocurre por la presencia de microorganismos y/o de ciertos iones y sustancias como Fe^{3+} , Mn^{3+} , SO_4^{2-} , H_3O^+ y $\text{Fe}(\text{OH})_3$.

1

2

3

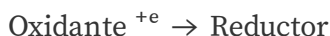
4

5

6

7

El potencial redox, consiste en que las sustancias oxidantes son capaces de fijar electrones, mientras que las reductoras los ceden esta relación que define el equilibrio cuantitativo está dado por la ecuación siguiente:

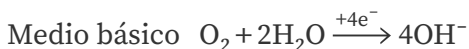
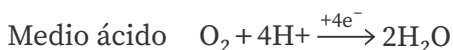


Sin embargo, como los electrones no pueden existir en estado libre en solución, la reacción tiene que ser completa. Para que un oxidante pueda fijar los electrones, es necesaria la presencia de un reductor que sea capaz de cederlos.

En la práctica, es preciso contar con la actuación de los sistemas redox para producir una reacción química. En los modelos hidrogenoquímicos de especiación, desarrollados en las últimas décadas, esta variable juega un papel fundamental en la determinación de la calidad de las aguas subterráneas (González et al. 2003).

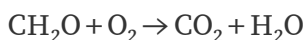
El oxígeno disuelto

Es el más importante agente oxidante del agua natural. Cuando actúa químicamente, cada uno de sus átomos constituyentes se reducen desde un estado de oxidación 0 hasta el -2 del H_2O o del OH^- , dependiendo de si la reacción tiene lugar en agua ácida o básica, respectivamente, aunque sólo este último caso debe de tenerse en cuenta para el caso de aguas naturales, cuyos valores de pH varían entre 7 y 8.



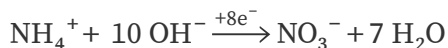
Demanda de oxígeno y carbono total

La sustancia más común presente en un agua que puede ser oxidada por el oxígeno es la materia orgánica de origen biológico, como la materia vegetal y los residuos de animales. Si se supone, por simplicidad, que la materia orgánica es un hidrato de carbono polimérico con una fórmula empírica aproximada a CH_2O , la reacción de oxidación que tendría lugar sería:



De igual forma, el oxígeno disuelto en agua se consume por la oxidación del amoníaco y del catión amonio presentes también en agua como resultado de la actividad biológica, dando lugar a la formación de nitratos.

Por ejemplo, la semirreacción que tendría lugar para el caso del amonio en medio básico (natural) sería:



que, combinada con $2 \times (\text{O}_2 + 2 \text{H}_2\text{O} \xrightarrow{+4e^-} 4 \text{OH}^-)$

da una reacción global $\text{NH}_4^+ + 2 \text{O}_2 + 2 \text{OH}^- \rightarrow \text{NO}_3^- + 3 \text{H}_2\text{O}$

Problemas

1. El dinucleótido de nicotinamida adenina (abreviada NAD^+ en su forma oxidada y NADH en su forma reducida) es una coenzima que contiene la vitamina B3 y cuya función principal es el intercambio de electrones e hidrogeniones en la producción de energía de todas las células.

1

2

3

4

5

6

7

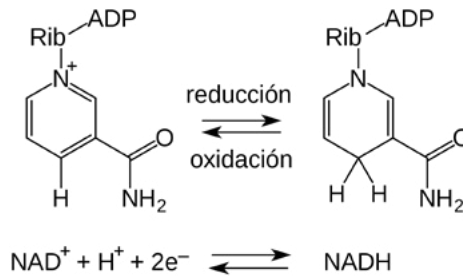
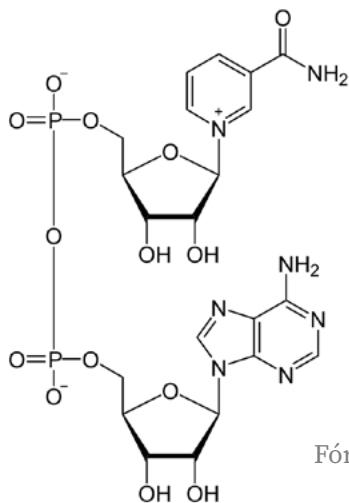
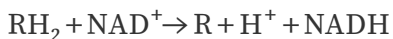


Figura 5.1
Fórmula química
de la NAD^+

Fórmula 5.2. Proceso
de óxido-reducción
de NAD^+



Gana e^- : NAD^+

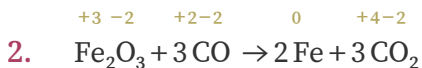
Pierde e^- : R

Oxidante: NAD^+

Reductor: RH_2

NAD^+ se reduce a NADH

RH_2 se oxida a R



Fe gana electrones y reduce +3 a 0

C pierde electrones y oxida de +2 a +4

Fe_2O_3 es el oxidante

CO es el reductor

Fe_2O_3 se reduce a Fe

CO se oxida a CO_2

1

2

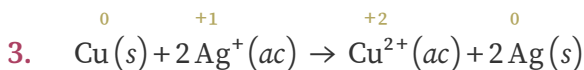
3

4

5

6

7



Ag gana electrones y reduce +1 a 0 C pierde electrones y oxida de 0 a +2

Ag⁺ es el oxidante

Cu es el reductor

Ag⁺ se reduce a Fe

Cu se oxida a Cu²⁺

5.3 Procesos de adsorción

Entender los métodos de diseño técnicos de los sistemas de adsorción es un aspecto importante en el proceso del diseño, no sólo de la industria química sino también en el campo ambiental debido a la contaminación del entorno y el consumo de energía. Sin embargo, el proceso de adsorción viene preparado para ser un método de separación útil en los procesos de purificación y separación a gran escala de los nuevos procesos de producción de materiales, por ejemplo, los productos médicos y bioquímicos.

La adsorción es un proceso de adhesión de partículas de un contaminante a la superficie de la fase sólida. En concepto clásico, la adsorción se considera rápida en comparación con la velocidad del flujo y reversible.

Isoterma lineal

La manera más común de representarla es mediante el concepto de isoterma de adsorción lineal K_d que se define como:

$$k_d = dS/dC \text{ (L/kg)}$$

donde S es la cantidad de contaminante adsorbido en la fase sólida (mg/kg) y C es la concentración del contaminante en el agua. El valor de K_d se obtiene generalmente a partir de prueba de lotes basada en la adición de diferentes cantidades de contaminantes en un lote con agua y fase sólida del lugar investigado. Luego se determinan las concentraciones de equilibrio del contaminante en el agua y en la fase sólida, posteriormente K_d se calcula como la pendiente de la línea recta que se genera en el gráfico.

$$S = f(C)$$

Existen otros tipos de isothermas de adsorción como la isoterma de Freundlich y la isoterma de Langmuir.

Isoterma de Freundlich

El principal problema de la isoterma de adsorción lineal está relacionado con la falta de de adsorción con el aumento de la concentración en el agua. Esto es erróneo ya que el número de sitios de adsorción es limitado y hay saturación de sitios de adsorción cuando la concentración en el agua se vuelve muy alta.

El isoterma de adsorción de Freundlich, es expresado como:

$$S = KF \cdot CN$$

en donde se toma en cuenta la disminución de la adsorción con el aumento de la concentración en el agua. El exponente N , que es generalmente < 1.0 , cambia la pendiente de la línea recta a concentraciones más altas en el agua. Sin embargo, no existe un límite máximo de adsorción.

Isoterma de Langmuir

Finalmente, el isoterma de adsorción de Langmuir, expresada como:

$$S = \frac{S_{m\acute{a}x} K_L C}{1 + K_L C}$$

donde $S_{m\acute{a}x}$ es la cantidad maxima de contaminante que puede ser adsorbida. Cuando la concentracion en el agua es alta el producto $K_L \times C \gg 1$, se obtiene $S = S_{m\acute{a}x}$, que es asıntota del grafico $S = f(C)$ o lımite de adsorción.

La representacion grafica de los isotermas se presenta a continuacion en la figura 5.3:

A. Coeficiente de distribucion B. Isotrema Freundlich C. Isotrema Langmuir

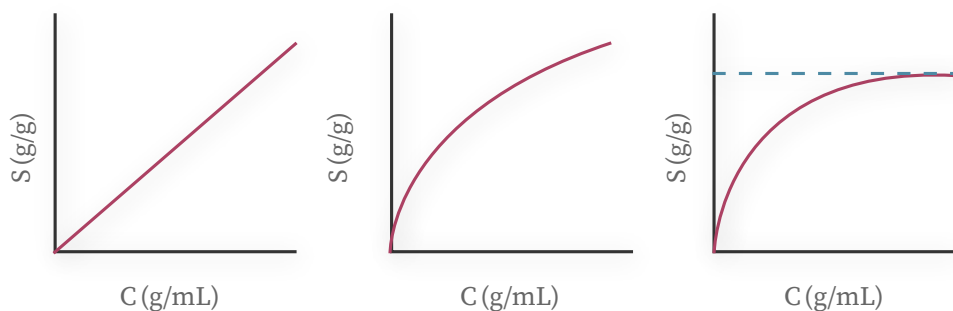


Figura 5.3. Esquema que representa la forma de las ecuaciones de la isoterma de adsorción: (A) coeficiente de distribucion (B) isoterma de adsorción de Freundlich, (C) isoterma de adsorción de Langmuir. (Zeman, J. & Šracek O.)

Diferencia entre absorción y adsorción

Cuando una sustancia se adhiere a una superficie se llama adsorción, donde la sustancia se adhiere a la superficie interna de adsorbente. Cuando la sustancia es absorbida de otra forma se llama absorción, por ejemplo, cuando un gas está en una solución, es absorción.

El ejemplo de un isoterma de carbón activo se muestra en la figura 5.4:

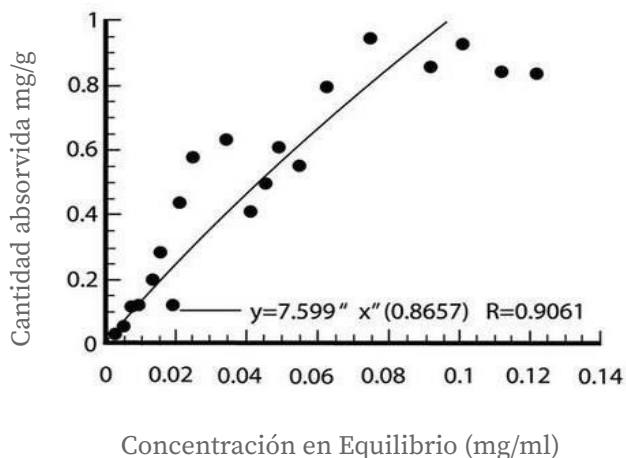


Figura 5.4. Isoterma de carbón activo. (Motoyuki Suzuki)

Carbón Activado

Los carbonos activos o carbón activado, son los adsorbentes carbonosos microporosos cuya historia se data al año 1600 a.C. cuando se carbonizaban las brasas de madera utilizadas con fines medicinales en Egipto. En Japón, un pozo de agua fue encontrado con un filtro de carbón en la parte inferior de este que servía para limpiar el agua, el hallazgo fue en un viejo santuario (Kashiwara Jingu, Nara) construido en el siglo 13 d.C. En Europa, el carbón de madera y más tarde el carbón de hueso, se utilizaron para refinar el azúcar de betabel, una práctica iniciada en Francia a causa del bloqueo contra el continente durante la época napoleónica. En el siglo

20, durante las guerras mundiales, la necesidad de desarrollar máscaras de gas estimuló un rápido crecimiento en investigación de adsorción. Muchos libros han sido publicados en aplicaciones de carbono activo.

Microporos

Los microporos es el lugar dónde se lleva a cabo la adsorción, se presentan como espacios bidimensionales entre dos tipos de paredes del absorbente, así como planos cristalinos bidimensionales compuestos de átomos de carbono. La distancia entre dos planos de grafito es de 0.376 nm pero en el caso del carbón activado que tiene una estructura cristalina desordenada se presenta como una estructura turbo estática.

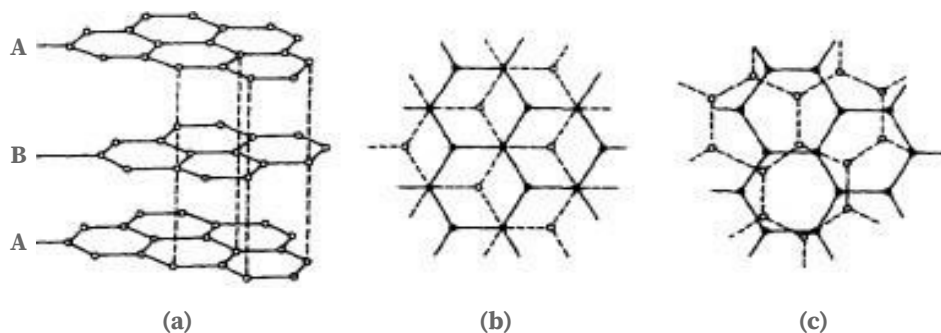


Figura 5.5. Estructura de Grafito (a,b) y estructura turbo estática (c).
(Motoyuki Suzuki)

Algunos de los materiales adsorbentes son los siguientes:

Cenizas

El carbón activado también contiene cenizas como residuo del material inicial, donde la cantidad de cenizas va en un rango del 1 % al 12 %. Las cenizas consisten en su mayoría de Sílice, alúmina, hierro, y metales alcalinotér-

reos. Las funciones cuantitativas de estos no están muy claras todavía, pero se sabe que, gracias a su interacción con el agua, tienen una reacción positiva en el tratamiento de agua con carbón activado en polvo. Básicamente tienen efectos catalizadores, por ejemplo, el hierro modifica el tamaño y distribución de los poros en la etapa de activación y regeneración.

Actualmente en el mercado existen dos formas en las que se encuentra el carbón activado, una es granular y la otra es en polvo. El carbón activado en polvo en su mayoría se produce de madera y polvo de madera o aserrín. Este tiene una aplicación en la decoloración de procesos de alimentos, refinación de azúcar, producción de aceites y glutamato de sodio así como en la producción de vino. También se utiliza en el tratamiento de aguas para consumo humano y aguas residuales.

Sílice

El sílice en estado puro, SiO_2 , es un material químicamente inactivo y es un material no polar como el cuarzo, pero cuando se le agrega un grupo funcional de hidróxido (grupo silanol) la superficie se convierte en muy polar o hidrofílica. El gel de sílice es una partícula adsorbente preparada por la coagulación de una solución coloidal de ácido silícico y seguido de una deshidratación controlada. Al final del secado quedan unos pequeños granos los cuales se dividen en dos en el mercado, los tipos A y tipo B, la diferencia entre estos radica en el tamaño de los poros en el tipo A es 2.0nm y B es 7.0nm aproximadamente. Las aplicaciones de estos tienen que ver con el control de la humedad relativa gracias a su capacidad de adsorción del agua.

1

2

3

4

5

6

7

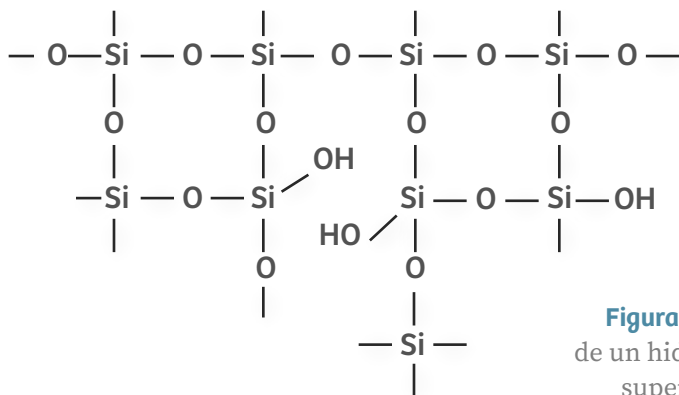


Figura 5.6. Superficie de un hidrocido en una superficie de silice. (Motoyuki Suzuki)

Alúmina activada

Los óxidos de aluminio se pueden presentar en diversas estructuras cristalinas. La alúmina activada (alumina porosa) usada como adsorbente es básicamente alúmina. Las partículas de alúmina porosa son producidas por la deshidratación de diferentes hidratos de aluminio, en la mayoría de los casos, trihidrato de alúmina, $\text{Al}_2\text{O}_3\cdot\text{H}_2\text{O}$. La alúmina también se usa como agente de control de humedad relativa.

Zeolita

Hoy en día existe la zeolita sintética, pero nos enfocaremos en la zeolita que se encuentra en la naturaleza. La zeolita es minada en Japón y en países cercanos a este, es muy limitada y sólo se puede excavar la clinoptilolita y la mordenita. Los principales usos de la zeolita natural como adsorbente se presentan como agente de secado, desodorantes, adsorbentes para la separación de aire, intercambio de iones para la purificación de agua, en este último caso específicamente, para remover iones de amonio o iones de metales pesados, este sirve para suavizar el agua y para mejorar el suelo.

1

2

3

4

5

6

7

5.4 Procesos de intercambio iónico

El proceso de intercambio iónico, es el proceso de sorción más frecuente y que consiste en el reemplazo de cationes o aniones disueltos, que son retenidos por la fase sólida (adsorción), e intercambiados por otros cationes o aniones que son liberados en la solución (desorción).

Algunos de los sistemas hidroggeoquímicos donde es más común encontrar los procesos de intercambio iónico son el intercambio catiónico, que involucra a los cationes Ba^{2+} , Sr^{2+} , Ca^{2+} , Mg^{2+} , Be^{2+} , Cs^+ , K^+ , Na^+ y Li^+ .

La capacidad de intercambio es determinada por cuántos miliequivalentes puede cambiar una fase sólida por cada 100 g de la misma. Cuando el total de cationes intercambiables (TCI) del material resulta superior a las concentraciones totales de cationes del agua, puede asumirse que la fase sólida se comportará como un intercambiador ilimitado.

Durante los procesos hidroggeoquímicos, existen cargas eléctricas que interactúan con las partículas minerales y que cuando estas interactúan entre sí, se absorben las cargas ubicadas en su último orbital, llegando a ser cationes o aniones.

Los materiales que tienden a fungir como los mejores intercambiadores, son los de tamaño coloidal, ya que al tratarse de un proceso que ocurre en la interfaz sólido-líquido, cuanto más fina sea la granulometría, mayor será la superficie específica y más eficiente será el proceso.

Los coloides son característicos por el desbalance en su carga neta superficial, que permite mantener adsorbida una capa de iones, que pueden ser reemplazados por otros disueltos en agua. Esta adsorción de cationes o aniones dependen del pH, ya que los valores elevados de pH, permite que prevalezca la carga superficial negativa y viceversa.

1

2

3

4

5

6

7

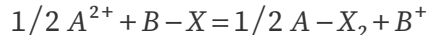
Los minerales que contienen un mayor potencial de intercambio son la caolinita, montmorillonita, clorita, illita, vermiculita y zeolita.

En el intercambio iónico más común se produce el reablandamiento del agua (al ser enriquecido de sodio), así como un aumento en la porosidad y permeabilidad de los minerales enriquecidos con calcio o magnesio.

Este proceso, al ser una reacción de equilibrio, obedece la ley de acción de masas y puede expresarse con su constante de equilibrio o coeficiente de selectividad.

Por ejemplo:

El intercambio entre un catión divalente A y otro monovalente B (donde $-x-$ representa el ion adsorbido).



Por lo tanto, la ecuación estaría controlada por la constante de equilibrio:

$$KA/B = [A - X_2]^{0.5} [B^+] / [B - X][A^{2+}]^{0.5}$$

Cabe mencionar que la constante no sólo depende de la temperatura, presión, pH (en algunos casos) y fuerza iónica, sino que también de las características y composiciones del intercambiador. En estos casos, el cálculo se debe realizar mediante convenciones obtenidas experimentalmente. Una de las más usuales es la convención de Gaines-Thomas (Appelo y Postma, 1994).

Por ejemplo:

$$KA/B = \beta A^{0.5} [B^+] / [\beta B][A^{2+}]^{0.5}$$

Donde β es la fracción equivalente que en el caso del catión A es igual a $\beta A = \text{mEq } A - X_2 / 100 \text{ mg/TIC (mEq/l)}$.

El proceso de intercambio iónico, es un cambio de una sustancia o ión por otra sobre la superficie de un sólido. Este fenómeno, es muy común en materiales geológicos sedimentarios con presencia de arcillas, las cuales tienen partículas de tamaño coloidal con la capacidad de intercambiarse por absorción en la superficie, debido a que se generan cargas eléctricas que interaccionan con el agua.

Los sitios cargados, adquieren grupos OH^- que quedan adsorbidos entre la superficie del mineral y otras capas de cationes y aniones en la zona adyacente con los grupos OH^- donde se establecerá una carga neta, que puede ser negativa o positiva, dependiendo de las condiciones ácido base en el medio (Parks, 1976; Morell, 1997).

1

2

3

4

5

6

7

6.1 Modelación hidrogeoquímica y tipos de modelos

Como se hizo mención anteriormente, la modelación Hidrogeoquímica se basa en el análisis, entendimiento y aplicación de principios físico-químicos, aunado con los sistemas geoquímicos. El objetivo de la modelación geoquímica es idear formas en las cuales se explique lo observado en el agua y rocas, además de crear modelos teóricos y matemáticos para explicar estos fenómenos.

Dicha modelación consiste en utilizar efectivamente los datos del sistema; la mineralogía, composición de los gases, así como los datos isotópicos y físico-químicos para determinar los siguientes puntos:

- * Reacciones químicas ocurridas.
- * En qué medida han tenido lugar estas reacciones.
- * En qué condiciones han ocurrido (sistema abierto o cerrado, en equilibrio químico o no, temperatura constante o variable, entre otras.)
- * El cambio en la calidad del agua, la mineralogía en respuesta a procesos naturales y a perturbaciones del sistema.

La aplicación de estos conceptos y modelaciones es útil en aguas subterráneas, dando origen a la comprensión de estas, así como las causas que provienen de sus variaciones espaciales y temporales.

Algunos cálculos complejos que requieren los modelos de equilibrio son a consecuencia de la dificultad de los sistemas hidrogeoquímicos en la realidad, además de recurrir a los procedimientos iterativos.

Características de las modelaciones

Estas dos modelaciones llevan consigo propiedades inherentes que obligan a utilizarlas bajo condiciones más adecuadas.

Para sistemas con datos adecuados químicos, isotópicos y mineralógicos, la aproximación inversa de especiación y balance de masa proporciona el medio más directo para determinar cuantitativamente modelos de reacción geoquímica.

Mientras que sistemas con datos inadecuados o inexistentes la modelización directa proporciona un método de predicción de reacciones geoquímicas.

En casos específicos es de utilidad combinar ambos tipos de simulación.

Con ello nos ayuda a dar una mejor interpretación de la modelación geoquímica, predecir las reacciones químicas que pueden ocurrir entre algunas fases particulares (minerales, gases y materia orgánica) y el agua subterránea (o superficial), en sistemas reales, controlados (en laboratorio) o hipotéticos.

Ambos pueden utilizar técnicas termodinámicas y cinéticas; sin embargo, hay que resaltar que actualmente la mayor parte de las modelaciones se basan en un supuesto equilibrio, realizando cálculos de especiación, balance de masa y simulaciones de reacción. El modelo geoquímico,

1

2

3

4

5

6

7

junto con las ecuaciones de flujo y transporte (modelo hidrogeológico), es el paso final en la modelización de sistemas interactivos entre el agua y las rocas del medio.

Hoy en día existen modelos hidrogeoquímicos agrupados en cuatro grupos fundamentales:

1. Modelos de Especiación: calculan las especies acuosas y determinan el estado de saturación de las soluciones.
2. Modelos de Balance de masa: calculan reacciones a lo largo de un camino de flujo.
3. Modelos de Transferencia de Masa: similares a los modelos de especiación, pero también calcula la transferencia de masa entre fases.
4. Códigos de Transporte de Masas Químicas: modelos de transporte de masas acoplados con los flujos hidrodinámicos advectivos y dispersivos.

Existen dos aproximaciones diferentes bajo las cuales se pueden aplicar estos modelos geoquímicos, la modelación directa e inversa.

6.2 Modelación directa

La modelación o simulación directa, predice la composición del agua y la transferencia de masa producto de reacciones químicas hipotéticas, una respuesta del agua a procesos naturales y perturbaciones del sistema. Suele inclinarse hacia una forma genérica en su naturaleza, desarrollada para responder a situaciones hipotéticas como las consecuencias termodinámicas y cinéticas donde una roca reacciona con un fluido bajo ciertas condiciones experimentales. Dichas restricciones o condiciones están controladas por el modelador.

1

2

3

4

5

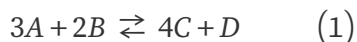
6

7

La evaluación cuantitativa de la interacción química agua-roca para ambos métodos, se basa en la utilización de un modelo de especiación y transferencia de masa. Este modelo calcula las concentraciones de todas las especies en solución (iones libres, pares de iones y compuestos de coordinación), así como sus actividades y coeficientes de actividad. Para calcular la actividad de los iones individuales se utiliza la teoría de Debye-Hückel.

Equilibrio químico, ley de acción de masas y producto de solubilidad (K).

Una reacción química reversible es aquella que se puede producir en ambas direcciones, es decir con la misma intensidad en ambas direcciones y se dice que se encuentra en equilibrio. Se expresa con la siguiente ecuación.



Si se considera que en la reacción anterior los coeficientes A, B, C y D son sustancias, entonces se tienen 3 moléculas de sustancia A y reaccionan con 2 de B para darle lugar a 4 moléculas de C y 1 de D. Simultáneamente 4 moléculas de C y una de D se unen para generar 3 de A y 2 de B. Esto quiere decir que la intensidad en ambas direcciones es la misma, por lo que aparentemente no sucede nada y el sistema no cambia a través del tiempo.

Si se tiene una reacción química reversible, entonces se cumple la Ley de Acción de Masas y aplicada a la reacción (1) resulta:

$$k = \frac{(C)^4(D)}{(A)^3(B)^2} \quad (2)$$

donde:

K : Es una constante característica de esa reacción a una determinada temperatura (si no se indica 25°C).

A , B , C y D : Actividades de cada sustancia.

Exponentes 4, 3 y 2: Siguen el ejemplo de la ecuación (1).

No se incluyen las sustancias sólidas ni el H_2O . A “ K ” suele denominarse producto de solubilidad en caso de una reacción reversible de disolución de una fase sólida.

Desequilibrio de la reacción y producto de actividades iónicas (PAI)

Si a una muestra de agua determinada se le aplica la expresión (2) el resultado obtenido de K corresponde al caso teórico en que la reacción está en equilibrio. Al resultado obtenido con la expresión PAI se le denomina Producto de Actividades Iónicas (PAI o IAP en inglés) y se refiere a un caso real. Se expresa con la siguiente expresión:

$$PAI = \frac{(C)^4(D)}{(A)^3(B)^2} \quad (3)$$

donde:

$PAI > K$ El numerador es demasiado grande y el denominador pequeño para lograr el equilibrio ($PAI = K$).

$PAI = K$ El numerador de (3) debe de ser más pequeño y el denominador aumentar.

Ambas condiciones se logran si la reacción (1) se produce con mayor intensidad hacia la izquierda que hacia la derecha.

$PAI < K$ Para un agua real, se alcanzará el equilibrio si la reacción se produce con más intensidad hacia la derecha.

Índices de saturación

Como resultado de esta modelación, se definen los índices de saturación (SI), respecto a los minerales de interés. Los índices de saturación permiten pronosticar la evolución de la solución acuosa, debido a procesos de interacción agua-roca como disolución y precipitación.

La ecuación para índices de saturación o estado de saturación (Ω), parte de la relación entre K (Producto de solubilidad) y IAP (Producto de la actividad de iones).

$$\Omega = \frac{PAI}{K}$$

El resultado indica que para los valores:

$\Omega = 1$ existe equilibrio.

$\Omega > 1$ indica super-saturación.

$\Omega < 1$ indica subsaturación.

Para desviaciones de equilibrio más grandes, se puede implementar una escala logarítmica dada por el Índice de saturación (SI).

$$SI = \log \left(\frac{PAI}{K} \right)$$

donde:

SI : Índices de saturación

PAI : Producto de actividad iónica

K : Constante de equilibrio del constituyente.

De acuerdo al valor de SI obtenido se tiene que:

$SI = 0$, se considera que el sistema se encuentra en equilibrio de saturación.

$SI < 0$, el sistema se encuentra en condiciones de subsaturación (disolución).

$SI > 0$, el sistema se encuentra en condiciones de sobresaturación (precipitación).

6.3 Modelación inversa

Este tipo de modelación infiere que las reacciones que ocurrieron entre agua y roca después de reaccionar, dan origen a una composición mineralógica específica, este desarrollo está basado en una estrategia determinista para la interpretación de las composiciones químicas de los cuerpos de agua.

De igual forma, la modelación inversa permite cuantificar las fases de reacción gaseosa y acuosa en cantidades apropiadas a fin de determinar las diferencias entre los productos iniciales y finales.

Esta modelación suele aplicarse entre dos puntos, en los cuales se infiere que se encuentran ante una conexión hidráulica a lo largo de una línea de flujo. En donde destacan que en ciertas ocasiones la conectividad entre ambos puntos no siempre puede ser posible.

1

2

3

4

5

6

7

El modelo cuantifica los procesos y las reacciones posibles que pudiesen ocurrir entre los puntos extremos además de la fase mineral definida.

Para la realización de una modelación inversa se debe de contemplar lo siguiente:

- * Conocer la química del punto inicial y final que se encuentren con la misma tendencia de flujo.
- * La dispersión y difusión influye en la química de la solución.
- * La composición química del punto analizado prevalece durante un tiempo considerado.
- * Las fases minerales usadas en la modelación son o estuvieron presentes en el acuífero.

Este tipo de modelación, supone que el agua se encuentra en equilibrio con el medio, sin embargo, todas las diferencias de las muestras tomadas sobre una misma línea de flujo, pueden corresponder a las variaciones temporales en la recarga del medio acuoso y no a reacciones con minerales.

Como se mencionó con anterioridad, este proceso se encuentra entre dos puntos de un mismo flujo, es por esto que no consideran la posibilidad de que una reacción invierta su sentido a lo largo del trayecto, lo que sucede con frecuencia en la realidad.

Usualmente se combinan ambos tipos de modelación, con el fin de lograr reducir la incertidumbre que se genera al usar un solo tipo e incluso esta práctica, ayuda a realizar comprobaciones.

Esta modelación busca determinar las reacciones y condiciones de transferencia de masa, que formarán una determinada composición, por lo tanto, se analizará la composición inicial del agua, la cual determinará la

distribución de especies que se encuentren en la solución y en los índices de saturación.

Se analizará la disolución de los gases, ya que el tipo de agua de estudio, será capaz de solubilizar dichos gases, donde dependerá de la naturaleza del gas, de la presión y de su temperatura. Con ayuda de la modelación de la ley de Henry para el caso de CO_2 , la cual se representa:

$$\rho\text{CO}_2 = KX_{\text{CO}_2}$$

donde:

K es el coeficiente de Henry

X_{CO_2} Es la concentración en fracción molar, molaridad

ρCO_2 Es la presión parcial de CO_2

$$X_{\text{CO}_2} = \frac{\text{Moles de soluto}}{\text{Moles de disolución}}$$

$$K = \frac{\text{Presión parcial del gas por encima de solución}}{\text{Solución de moles de gas por litro de solución}}$$

6.4 Modelos de especiación química

Especiación química es el proceso de determinación de la probabilidad de formación de todos los compuestos a través de las especies químicas participantes y, su concentración a partir de las condiciones de equilibrio establecidas. Para ello debe de considerarse la termodinámica de equilibrio químico de las diferentes especies solubles, complejos acuosos,

sólidos con actividad fija, sólidos precipitados que pueden convertirse en sólidos disueltos, sólidos disueltos que tienen el potencial de precipitar o todos aquellos fenómenos que alteren la química inicial.

La especiación química involucra el análisis de sistemas acuosos en equilibrio y su interpretación a partir de diferentes escenarios, tales como, cambios de pH, temperatura, potencial REDOX, solubilidad, adsorción, etc.

En la literatura podemos encontrar suficientes modelos para la especiación en diferentes tipos de matrices como pueden ser:

- * Suelos
- * Aguas superficiales
- * Aguas marinas

Para la especiación del agua dulce los modelos que describen la influencia de los procesos o reacciones de los contaminantes son:

- * PHREEQC (Parkhurst 1999)
- * WATEQ4F (Ball & Nordstrom 1991)
- * CHESS (Santore & Driscoll 1995)
- * MINTEQA2 (Allison et al 1991)
- * WHAM (Tipping 1994)
- * MINEQL+ (Schecher & McAvoy 1992)
- * HydroQual (O'Connor et al 1971)
- * BioMet

Si bien los softwares antes mencionados no son todos los que se pueden emplear, si son algunos de los más empleados a nivel internacional. A continuación, se proponen los siguientes pasos para la correcta selección del modelo a utilizar.

1

2

3

4

5

6

7

Selección de modelo a utilizar

Para seleccionar el modelo a utilizar se deberá analizar la base teórica de cada uno de ellos, y analizar las siguientes variables:

- * **Tipo de software:** uso libre o de paga.
- * **Intervalo de aplicación:** se tomará en cuenta si el software ha sido desarrollado para agua dulce, salada o suelos.
- * **Tipo de variables de entrada:** de acuerdo a qué datos se necesitan, pueden ser entradas de datos experimentales o si deben de realizar cálculos o revisión de literatura para obtenerlos.
- * **Tipos de variables de salida:** se busca un simulador con la capacidad de mostrar las diferentes especies de los metales y la biodisponibilidad de estos.
- * **Cantidad de elementos validados:** tomar en cuenta el número y los metales a analizar.
- * **Velocidad de cómputo:** revisar que el simulador no rebase la capacidad del procesador del computador a utilizar.

PHREEQC

Descripción general del modelo

PHREEQC es un software libre escrito en lenguaje C en 1995 que permitió modelar a través de simulaciones las reacciones químicas y procesos de transporte en el agua natural o contaminado. El programa se basa en la química de equilibrio de soluciones acuosas que interactúan con minerales, gases, soluciones sólidas, intercambiadores y las superficies de adsorción. PHREEQC utiliza y crea distintos archivos que contienen información necesaria para la ejecución del modelo y la interpretación de los datos.

1

2

3

4

5

6

7

El programa utiliza un conjunto de bases de datos que suministran los datos de especies químicas necesarios para que estas puedan ser procesadas por el código. Algunas de las bases de datos distribuidas con el código son:

- * PHREEQC.dat
- * iso.dat
- * LLNL.dat
- * MINTEQ.dat
- * minteq.v4.dat
- * PITZER.dat
- * t_h.dat
- * WATEQ4F.dat

Archivo de Entrada (.pfr)

Es el archivo creado por el modelador o usuario, se ingresan los datos en lenguaje C a través de KEYWORDS y datos para los distintos parámetros requeridos en la ejecución de operaciones.

Las KEYWORDS son palabras que hacen parte del lenguaje de PHREEQC y le indican al programa a través del código los cálculos que se le están solicitando. Existen 48 keywords, estas son algunas de ellas entre muchos otros:

- * EQUILIBRIUM_PHASES
- * EXCHANGE_MASTER_SPECIES
- * EXCHANGE_SPECIES
- * ISOTOPE_ALPHAS
- * PHASES
- * SOLUTION_MASTER_SPECIES

- * NAMED_EXPRESSIONS
- * PRINT
- * SAVE
- * SELECTED_OUTPUT
- * TITLE

Cada Keyword tiene funciones diferentes y pueden ser:

- * Organizar el archivo de entrada
- * Organizar los datos de salida
- * Optimizar las operaciones entre otros KEYWORD
- * Ajustar el solucionador

Archivo de salida (.phr.out)

Una vez corre el modelo se genera un archivo de salida que contiene los datos producto de los cálculos ejecutados por el programa. Los datos allí reportados deben ser interpretados por el modelador.

El programa permite modelar:

- * Equilibrios en Intercambio Iónico
- * Equilibrios en Complejización de Superficies
- * Equilibrio de gases a presiones fijadas
- * Transporte Advectivo
- * Modelamiento geoquímico inverso

1

2

3

4

5

6

7

Cálculos de equilibrio con PHREEQC

Los cálculos a mano son útiles para tener un entendimiento de los principios básicos, sin embargo, el cálculo de la actividad de iones y de estados de saturación puede volverse tedioso y puede resolverse de una manera más sencilla con ayuda de la computadora. Se calcula la reacción aplicando las siguientes ecuaciones:

1. Ley de acción de masas



2. Producto de solubilidad

$$K = \frac{(X)^x(Y)^y}{(C)^c(D)^d}$$

Cálculos de especiación usando PHREEQC

Como ya se mencionó anteriormente, los datos de entrada en PHREEQC se manipulan a través de los KEYWORDS. Para hacer un cálculo de especiación química se utiliza el keyword SOLUTION seguido de la composición del agua. PHREEQC calcula la actividad de iones y los estados de saturación para los minerales relevantes. El código calcula la reacción aplicando el siguiente procedimiento:

1. Cálculo de la fuerza iónica

$$I = \frac{1}{2} \sum m_i z_i^2$$

2. Cálculo del coeficiente de actividad

$$-\ln y_i = z_i^2 * F + S1 + S2 + S3 + z_i * S4$$

3. Cálculo de la actividad química

$$\alpha_i = y_i m_i$$

Si se indicó un modelo cinético para la reacción se procede al cálculo de la concentración de especies teniendo en cuenta las posibles asociaciones para así calcular los coeficientes de saturación de las fases resultantes, de lo contrario PHREEQC procederá con los siguientes pasos:

4. Cálculo de la constante de equilibrio

$$K_i = \alpha_i \prod_m^{M_{ag}} \alpha_m c_{i,m}$$

Si se indica algún criterio de equilibrio para el componente, se procede al cálculo para cumplir con el criterio de equilibrio y se procede al cálculo de la concentración de especies, teniendo en cuenta las posibles asociaciones para así calcular los coeficientes de saturación de las fases resultantes y dar fin al procedimiento. Si no se indicó algún criterio de equilibrio para el componente se procede al paso 6.

Se procede a calcular la concentración de especies teniendo en cuenta las posibles asociaciones para proceder al cálculo de los coeficientes de saturación para las fases resultantes y así dar fin al procedimiento.

6.5 Modelos de transferencia de masa

Generalmente este tipo de modelos se asemejan a los procesos de especiación, lo cual significa que una o dos especies progenitoras, darán origen a otra especie de una sola generación, de esta forma se dice que los modelos son capaces de calcularla partición de un elemento entre las diferentes especies acuosas y sus complejos, pero al mismo tiempo, también logra calcular los cambios causados por los procesos de transferencia de masa. Por lo tanto, comparte limitaciones en cuanto a su proceso homólogo, en donde este modelo logra predecir todo el comportamiento geoquímico de su sistema y determina si las reacciones van en equilibrio.

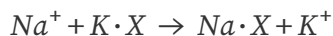
Los modelos de transferencia de masa, son capaces de calcular los procesos causados por:

- * Disolución/precipitación
- * Intercambio iónico/absorción
- * Gasificación/desgasificación
- * Evaporación
- * Mezcla
- * Calentamiento

Es de suma importancia considerar la correcta aplicación de la modelación hidrogeoquímica, ya que requiere de ciertos parámetros tomados en campo al momento de tomar la muestra, por ejemplo: la temperatura, pH, Eh y oxígeno disuelto.

Es necesario mencionar que se determinará de manera clara y rigurosa, el cumplimiento de que, si los datos con que se alimentará el modelo no representan las condiciones originales del agua subterránea a estudiar, los resultados que rendirá el modelo no serán confiables para utilizarlos en interpretaciones geoquímicas.

Respecto a los procesos que son ocasionados por el intercambio iónico, en donde se describe la composición del agua además de la superficie de un sólido, como por ejemplo en el caso del potasio, en donde este es intercambiado por sodio, se genera:



Además de expresar la ley de masas:

$$\frac{K Na}{K} = \frac{[Na \cdot X][K^+]}{[K \cdot X][Na^+]}$$

KNa/K Es un coeficiente de selectividad, debido a que varía con respecto a varios factores.

En el caso del estado estándar, se interpretará cuando el intercambiador está totalmente saturado, y será el momento donde la actividad del ion intercambiable sea igual a 1. Se expresa con la fracción molar o equivalente, siendo el total, la cantidad de espacios disponibles o de cationes que no son intercambiables.

Para el caso de la fracción molar se calcula como:

$$\beta_I^M = \frac{m \text{ mol } I \cdot X_i \text{ por cada kilogramo de sedimentos}}{\text{Cationes intercambiables totales}}$$

En la fórmula se representa la cantidad de cationes en el intercambiador con respecto a su cantidad total de cationes adsorbidos en la superficie, y se obtiene al dividir los equivalentes entre su respectiva valencia.

En el caso de la fracción equivalente de un ion, se calcula:

1

2

3

4

5

6

7

$$\beta_I = \frac{\text{meq } I \cdot X_i \text{ por cada kilogramo de sedimentos}}{\text{Capacidad de intercambio catiónico}}$$

Respecto a la fórmula, en el numerador se representa la cantidad de equivalentes que se encontrarán adsorbidos en el intercambiador y en el denominador, estarán los espacios disponibles totales del material intercambiador.

6.6 Modelos comerciales de balance de masa

El propósito de estos dichos modelos es definir la masa neta de minerales o gases que se encuentran disueltos y/o precipitados durante toda la extensión, o también nombrado camino de flujo.

Este modelo considera el intercambio iónico entre moléculas del fluido en cuestión, además de calcular la mezcla de hasta 5 tipos de aguas distintas.

A su vez, estima la edad del líquido con ayuda del isótopo carbono catorce. (^{14}C), los modelos son:

- * BALANCE (Parkhurst et al, 1982)
- * NETPATH (Plummer et al, 1991)

Los datos que deben introducirse para que estos modelos funcionen son los datos químicos completos de todas las moléculas que componen la solución, datos mineralógicos y probables reacciones de transferencia de masas.

Si se asume que el flujo se encuentra en estado estacionario, la dispersión prácticamente es insignificante y se requiere información sobre las condiciones mineralógicas a lo largo del camino del flujo.

1

2

3

4

5

6

7

Ayuda a determinar las reacciones químicas con mayor relevancia que controlan la evolución química del agua, igualmente facilita el determinar los caminos de flujo, las velocidades de flujo y las velocidades de reacción.

La interpretación de esto puede resultar en varios modelos posibles y el usuario opta por la decisión más adecuada.

Cabe resaltar que el modelo NO depende del equilibrio termodinámico.

1

2

3

4

5

6

7

7

ISÓTOPOS EN EL MEDIO AMBIENTE

7.1 Isótopos en el medio ambiente: agua y suelo

Los isótopos pueden ser definidos como átomos del mismo elemento, diferenciándose por el número de neutrones (Mazor, 1991). Por lo que cada elemento tiene un número constante de protones, pero puede tener diversos tipos de isótopos dependiendo del número de neutrones.

No todos los átomos de un mismo elemento son idénticos y cada una de estas variedades corresponde a un isótopo diferente.

La palabra isótopo se utiliza para indicar que todos los tipos de átomos de un elemento químico están ubicados en el mismo sitio de la tabla periódica.

A pesar de que puedan tener cualquier cantidad de neutrones hay algunas combinaciones de protones y neutrones preferidas en los diferentes átomos. Los que son ligeros (con pocos protones y neutrones) tienden a igualar la cantidad de neutrones y protones, mientras que los más pesados suelen tener más neutrones que protones.

Isótopos de origen natural

Los elementos que se pueden encontrar en la naturaleza pueden estar en una gran variedad de configuraciones distintas. La masa que aparece en la tabla periódica de los elementos es el promedio de todas las masas de todos ellos que se pueden encontrar de forma natural.

Los isótopos del hidrógeno, por ejemplo, son de origen natural.

El hidrógeno se puede presentar en tres configuraciones distintas: el protio (hidrógeno-1), (1H), (${}^1\text{H}$) o (${}^1_1\text{H}$) el deuterio (hidrógeno-2), (2H), (${}^2\text{H}$) o (${}^2_1\text{H}$) y el tritio (hidrógeno-3), (3H), (${}^3\text{H}$) o (${}^3_1\text{H}$). Estos tres isótopos se utilizan como combustible de la fusión nuclear.

En el aspecto de las armas nucleares, son los elementos básicos que conforman la bomba de hidrógeno (Bomba H).

Otros isótopos altamente inestables (del 4H al 7H) han sido sintetizados en laboratorio, pero nunca observados en la naturaleza.

La mayoría de los elementos naturales están formados por varios isótopos naturales que sólo pueden ser separados por procedimientos físicos.

Por ejemplo, el hidrógeno tiene 3 isótopos: H; Hidrógeno común y 1 protón (${}^1_1\text{H}$) (véase la figura 7.1):

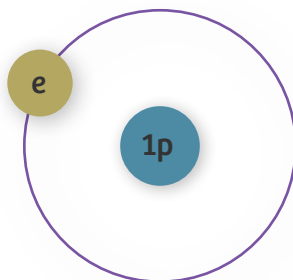
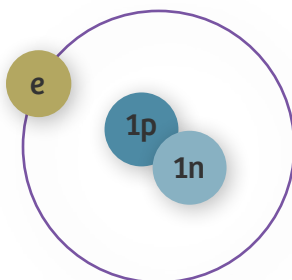


Figura 7.1.
Isótopo Protio

Es el isótopo más común del hidrógeno, con una abundancia de más del 99,98 %. Debido a que el núcleo de este isótopo está formado por un solo protón se le ha bautizado como protio, nombre que, a pesar de ser muy descriptivo, es poco usado.

D; Deuterio; hidrógeno estable pesado; 1 protón + 1 neutrón – (${}^2_1\text{H}$)
(véase la figura 7.2):

Figura 7.2.
Isótopo
Deuterio



Es el otro isótopo estable del hidrógeno, su núcleo contiene un protón y un neutrón. El deuterio representa el 0.0026 % o el 0.0184 % (según sea en fracción molar o fracción atómica) del hidrógeno presente en la Tierra, encontrándose las menores concentraciones en el hidrógeno gaseoso, y las mayores (0.015 % o 150 ppm) en aguas oceánicas.

El deuterio no es radiactivo y no representa un riesgo significativo de toxicidad. El agua enriquecida en moléculas que incluyen deuterio en lugar de hidrógeno 1H (protio), se denomina agua pesada.

El deuterio y sus compuestos se emplean en marcado no radiactivo en experimentos y también en disolventes usados en espectroscopía. El agua pesada se utiliza como moderador de neutrones y refrigerante en reactores nucleares. El deuterio es también un potencial combustible para la fusión nuclear con fines comerciales.

T; Tritio; hidrógeno radioactivo; 1 protón + 2 neutrones – (${}^3_1\text{H}$)
(véase la figura 7.3):

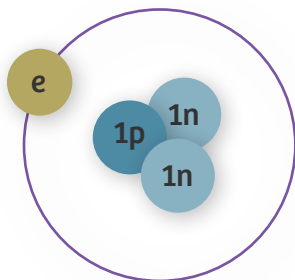


Figura 7.3.
Isótopo Tritio

Es radiactivo, desintegrándose a través de una emisión beta.

Posee un periodo de semidesintegración de 12.33 años. Pequeñas cantidades de tritio se encuentran en la naturaleza por efecto de la interacción de los rayos cósmicos con los gases atmosféricos. También ha sido liberado tritio por la realización de pruebas de armamento nuclear.

El tritio se usa en reacciones de fusión nuclear, como trazador en Geoquímica Isotópica y en dispositivos luminosos autoalimentados.

El oxígeno también tiene 3 isótopos (véase la figura 7.4):

O; oxígeno común; 8 protones + 8 neutrones – (${}^{16}_8\text{O}$)

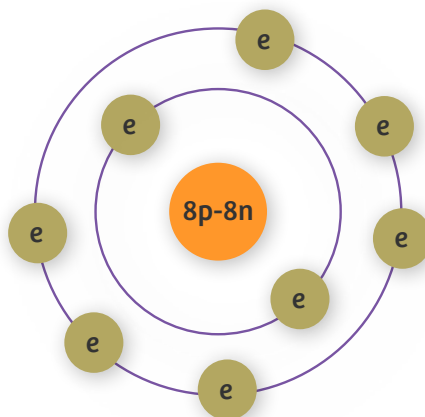
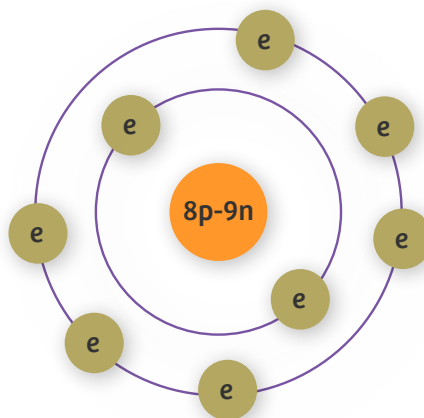


Figura 7.4.
Isótopo del
Oxígeno-16

El oxígeno-16 es el isótopo de oxígeno más abundante y representa el 99,762 % de la abundancia natural del oxígeno. La abundancia relativa y absoluta es alta porque es un producto principal de la evolución estelar y porque es un isótopo primordial, lo que significa que puede estar formado por estrellas que inicialmente estaban hechas exclusivamente de hidrógeno.

O; oxígeno (muy raro) pesado;
8 protones + 9 neutrones – ($^{17}_8\text{O}$)
(véase la figura 7.5):

Figura 7.5.
Isótopo del
Oxígeno-17

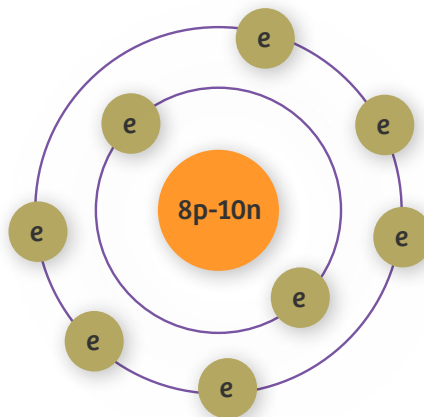


Es un isótopo poco abundante de oxígeno (0.0373 % en agua de mar, aproximadamente el doble de abundante que el deuterio).

Siendo el único isótopo estable de oxígeno que posee una característica favorable de la relajación independiente en agua líquida

O; oxígeno pesado, 8 protones
+ 10 neutrones – ($^{18}_8\text{O}$)
(véase la figura 7.6):

Figura 7.6. Isótopo
del Oxígeno-18



1

2

3

4

5

6

7

Es el segundo isótopo más abundante de oxígeno después del oxígeno-16. Es un isótopo estable que existe naturalmente en el medio ambiente. La abundancia de este isótopo en la naturaleza es del 0.2 %.

Se utiliza junto al deuterio en estudios de hidrología, como trazador para entender el origen de las aguas meteóricas.

Isótopos Estables

Los isótopos estables (IE) tienen origen natural, no parecen decaer en otros isótopos en tiempo geológico y pueden ser producidos por el decaimiento de otros isótopos. Los isótopos estables naturales del agua y de otras sustancias se emplean para rastrear el origen, la historia, las fuentes, los sumideros y las interacciones en los ciclos del agua, el carbono y el nitrógeno.

Algunas aplicaciones de los isótopos estables se muestran en la siguiente tabla. (Véase tabla 7.1).

Tabla 7.1. Aplicación de los isótopos estables

Aplicación de los isótopos estables	
Ecología	Definición de redes tróficas
Agronomía	Suelos, Fisiología vegetal
Hidrología	Caracterización de acuíferos
Petroquímica	Materia orgánica en sedimentos
Climatología	Variación isotópica de anillos de árboles
Arqueología	Estudio en colágeno de huesos, pelos, uñas
Forense	Procedencia. Detección del origen de drogas ilegales
Alimentación	Denominación de Origen

(Elaboración propia, 2021)

Isótopos Inestables

Los isótopos radioactivos (inestables) (IR) son átomos isótopos que decaen espontáneamente con el tiempo formando otros isótopos que emiten partículas alfa o beta y hasta gamma [Kendall, 1998].

Los isótopos radiactivos tienen un núcleo atómico inestable (por el balance entre neutrones y protones) por lo que emiten energía y partículas cuando cambia de su forma original a una más estable.

Cada uno tiene un periodo de desintegración característico. La energía puede ser liberada principalmente, en forma de rayos alfa (núcleos de helio), beta (electrones o positrones) o gamma (energía electromagnética) como se ha mencionado anteriormente.

En su mayoría son fabricados en laboratorios nucleares mediante un bombardeo de partículas subatómicas, por lo que estos isótopos suelen tener una corta vida, en su mayoría por la inestabilidad y radioactividad que presentan.

Dentro de los usos que se les dan a los IR, se presenta el Iridio 192 que se usa para verificar que las soldaduras de tubos estén selladas herméticamente, sobre todo en tubos de transporte de crudo pesado y combustibles; algunos isótopos del Uranio también son usados para labores de tipo nuclear como generación eléctrica.

Algunas otras aplicaciones de los isótopos inestables se muestran en la siguiente tabla. (Véase tabla 7.2).

1

2

3

4

5

6

7

Tabla 7.2 Aplicación de los isótopos inestables

Aplicación de los isótopos inestables	
Medicina	Tratamiento de enfermedades
Industria	Control de procesos productivos
Agricultura	Control de plagas
Arte	Verificación de objetos históricos/artísticos
Arqueología	Fecha de eventos geológicos
Farmacología	Estudio del metabolismo de los fármacos antes del uso público

(Elaboración propia, 2021)

Suelo

La energía atómica es usada en su mayoría, para los reactores nucleares. Sin embargo, pocos saben que hay otro aspecto de esa energía que ha transformado su vida cotidiana en los últimos 20 a 30 años.

Cuando en 1957 se creó el Organismo Internacional de Energía Atómica, uno de sus objetivos iniciales más importantes era fomentar el empleo de los radioisótopos y de las fuentes de irradiación en la investigación, la industria, la agricultura y la medicina.

Hoy son contadas las personas que aprecian hasta qué punto se ha conseguido ese objetivo.

Por ejemplo, los radioisótopos y la irradiación controlada, se emplean para mejorar los cultivos de plantas alimenticias, para conservar los alimentos, para descubrir aguas subterráneas, para esterilizar productos médicos,

para analizar hormonas, para radiografiar tuberías, para el control de procesos industriales y para el estudio de la contaminación ambiental.

Gran número de los objetos que utilizamos en nuestra vida cotidiana deben sus propiedades a la irradiación durante su fabricación.

En nuestra vida cotidiana necesitamos alimentos, agua y buena salud. Hoy los isótopos han llegado a desempeñar una importante función en las tecnologías cuyo fin es satisfacer esas necesidades básicas.

A continuación, se describen las principales aplicaciones en el suelo:

Fitonutrición

El eficaz empleo de abonos es de gran importancia ya que éstos no solo son costosos, sino que el uso inadecuado o excesivo de abonos es caro y puede perjudicar al medio ambiente. Es por lo tanto, esencial que la máxima cantidad del abono utilizado penetre en la planta, limitándose a un mínimo las pérdidas debidas a una aplicación errónea o a la desacertada elección del momento de aplicación.

Los abonos marcados con isótopos radiactivos como el fósforo-32 o con isótopos estables como el nitrógeno-15 sirven para determinar la cantidad de abono absorbida por la planta y la que se pierde en el medio ambiente. El nitrógeno-15 permite además evaluar directamente la cantidad de nitrógeno atmosférico fijada en condiciones de campo.

1

2

3

4

5

6

7

Lucha contra los insectos

Algunos insectos son importantes para mantener el equilibrio ecológico natural, otros destruyen valiosas plantas alimenticias. Algunos insectos, como el mosquito y la mosca tsé-tsé, son vectores de enfermedades infecciosas.

Se ha estimado que, a escala mundial, las pérdidas de las cosechas ocasionadas por los insectos pueden ascender al 10 % de la cosecha total, cantidad igual al total de la cosecha de un país como los Estados Unidos de América o la ex Unión de Repúblicas Socialistas Soviéticas (URSS).

Mutaciones

Durante los últimos 15 años, las alteraciones genéticas radio inducidas han contribuido de manera creciente al mejoramiento de los cultivos, la fitogenética mutacional ha pasado a ser rama esencial de la fitotecnia. Las autoridades nacionales competentes han autorizado y aprobado para la producción comercial alrededor de 200 variedades de plantas de cultivo obtenidas por mutaciones inducidas, así como un número similar de variedades de plantas ornamentales obtenidas por selección.

Producción y sanidad pecuarias

En muchas regiones del mundo la producción pecuaria está obstaculizada por el deficiente crecimiento, capacidad reproductiva y producción de leche del ganado, que limitan la disponibilidad por el hombre de productos de origen animal, tales como carne, leche, huevos, fibras, cuero, etc.

1

2

3

4

5

6

7

Esta disminución de la producción animal obedece a una nutrición insuficiente o desequilibrada, a una mala adaptación a las condiciones climáticas predominantes, y a las enfermedades parasitarias, entre otras.

Una de las técnicas que se ha desarrollado en los últimos 50 años es el uso de isótopos estables (IE), de distintos elementos tales como carbono, oxígeno, hidrógeno y nitrógeno. Esta técnica ha sido de gran utilidad en el seguimiento de procesos ecológicos y fisiológicos (Squeo y Ehleringer 2004).

Ello, debido a que los isótopos estables tienen un relativo bajo costo (Squeo y Ehleringer 2004), no decaen radiactivamente (Kendall y Caldwell 1998, De Vries 2000), y pueden mantener en el tiempo la razón entre el isótopo más liviano y el más pesado (De Vries 2000, White 2005).

7.2 Radioactividad y su decaimiento

La radioactividad o decaimiento radiactivo, es el proceso en el cual un núcleo inestable decae en otro que puede ser estable o inestable emitiendo una partícula o radiación electromagnética. Al núcleo inicial se lo conoce como núcleo padre y al resultante como núcleo hijo. La radiación emitida puede ser una partícula alfa, beta o un fotón γ .

Radioactividad natural y artificial

La radiactividad puede ser *natural* o *artificial*, la única diferencia entre ellas es su procedencia, lo que significa que los efectos de ambas radiaciones son idénticos.

1

2

3

4

5

6

7

La radiactividad natural se encuentra en la naturaleza debido a las cadenas de elementos radiactivos naturales y de origen no antropogénico. Está presente constantemente en el medio ambiente, por ejemplo, en la erupción de un volcán.

Por otro lado, la radioactividad artificial es la que se genera en la medicina nuclear o en las reacciones de fisión nuclear de las centrales nucleoelectricas para obtener energía.

Al utilizar o manipular la radiación natural o artificial, es común que se produzcan residuos radiactivos.

Tipos de radioactividad

Hay tres tipos de emisiones: rayos alfa, beta y gamma. Las partículas alfa tienen carga positiva, las beta son negativas y los rayos gamma son neutrales (véase figura 7.7)

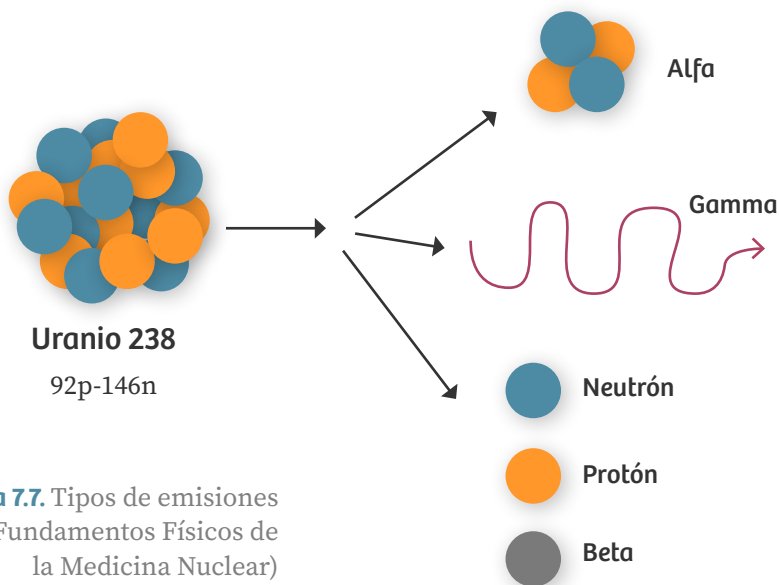


Figura 7.7. Tipos de emisiones
(Adaptado de Fundamentos Físicos de
la Medicina Nuclear)

Estas emisiones se pueden condensar en dos tipos generales:

- * Radiaciones electromagnéticas (radiación gamma y rayos X),
- * Partículas (radiaciones alfa y beta).

Cada tipo de emisión tiene diferente poder de penetración en la materia y diferente energía de ionización, es decir, que pueden causar daños a la vida de diferentes formas.

Decaimiento padre-hijo

La forma más simple de decaimiento se expresa considerando un núcleo padre P decayendo en un núcleo hijo H con una constante de decaimiento λ_P , pudiendo ser H estable o inestable.



La tasa de la merma del número de núcleos padre $N_P(t)$ es igual a la actividad a determinado tiempo definida anteriormente, por lo que tenemos que:

$$\frac{dN_P(t)}{dt} = -A_P(t) = -\lambda_P N_P(t)$$

por lo que podemos reescribir esta ecuación diferencial en su forma integral para encontrar el comportamiento de $N_P(t)$ y hallar la relación exponencial:

$$N_P(t) = N_P(0)e^{-\lambda_P t}$$

De esto, se desprende directamente que la actividad de la sustancia de núcleos idénticos P al tiempo t será:

$$A_p(t) = A_p(0)e^{-\lambda P t}$$

donde $A_p(0) = -\lambda_p N_p(0)$ es la actividad inicial de la sustancia, así como $N_p(0)$ es la cantidad de núcleos P en la sustancia al tiempo $t = 0$.

Este comportamiento es igual para todas las sustancias con un número grande de radionucleidos idénticos, y las características intrínsecas de la especie se encuentran en la constante de decaimiento λ . Asimismo, existen dos cantidades que definen a los diferentes radionucleidos: (i) tiempo de hemivida, semivida o período de semidesintegración $T_{1/2}$, y (ii) tiempo de vida medio o período de desintegración τ_p . El tiempo de semivida es el tiempo en el cual la sustancia decae a la mitad en su número de radionucleidos P , mientras que el tiempo de vida medio es aquel en el cual la sustancia decae a $1/e$ de ellos. Así,

$$N_p(t = (T_{1/2})_p) = \frac{1}{2} N_p(0) = N_p(0)e^{-\lambda_p (T_{1/2})_p}$$

De igual forma:

$$A_p(t = (T_{1/2})_p) = \frac{1}{2} A_p(0) = A_p(0)e^{-\lambda_p (T_{1/2})_p}$$

Por estas ecuaciones, se encuentra que $\lambda_p = 0,693 / (T_{1/2})_p$ y, de forma análoga, que $\lambda_p = 1 / \tau_p$ o $\tau_p = 1,44 (T_{1/2})_p$.

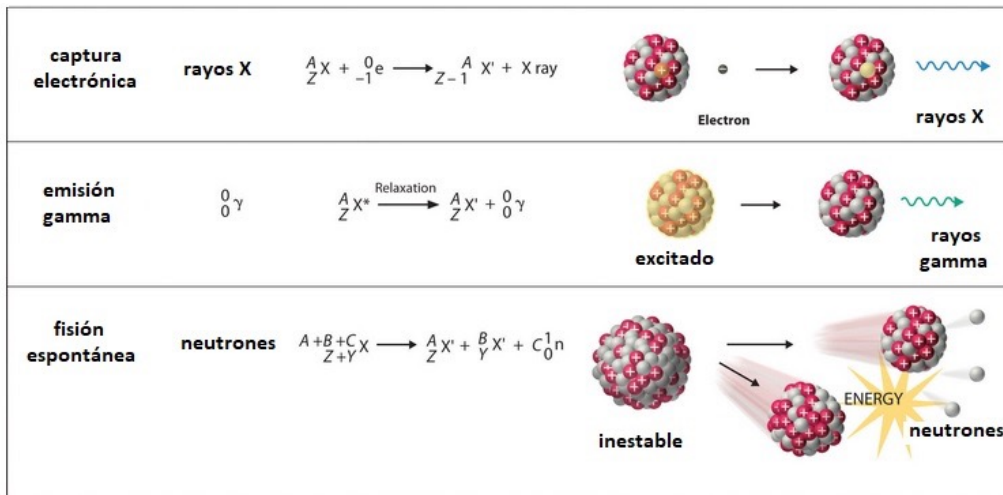


Figura 7.8. Decaimiento padre-hijo
(Fundamentos Físicos de la Medicina Nuclear)

Series de decaimiento

El decaimiento de un núcleo padre P en un núcleo hijo H , por lo expuesto en la sección anterior, estará gobernado por las constantes de decaimiento de cada uno, λ_P y λ_H . Asimismo, en caso que H no sea estable, este decaerá en un *nieto* G de la misma forma que P lo hizo en H .

Este caso, más común (por lo general P no decae en un elemento estable directamente) da como resultado lo que se conoce como serie de decaimiento, donde el último producto es estable. Es decir, en una serie de decaimientos P produce hijos, nietos, y así sucesivamente hasta alcanzar un producto estable.

La cantidad de núcleos H en la sustancia ahora dependerá de cuántos son generados por P y cuántos decaen según λ_H . P los incrementará de forma exponencial mientras que λ_H hará su parte para decrecerlos. De esto se sigue que la cantidad $N_H(t)$ depende tanto de λ_P como de λ_H de la forma:

$$\frac{dN_D(t)}{dt} = \lambda_P N_P(t) - \lambda_H N_H(t)$$

Asumiendo cantidades iniciales para cada uno como $N_P(0)$ y $N_H(0) = 0$ (no hay elementos de la especie H en $t = 0$, se tiene que:

$$N_D(t) = N_P(0) \frac{\lambda_P}{\lambda_H - \lambda_P} [e^{-\lambda_P t} - e^{-\lambda_H t}]$$

De la misma forma, se encuentra que la actividad de la sustancia de elementos H posee una actividad en función del tiempo dada por

$$A_H(t) = A_P(t) \frac{\lambda_H}{\lambda_H - \lambda_P} [1 - e^{-(\lambda_H - \lambda_P)t}]$$

Si asumimos al inicio ausencia de elementos H , entonces $A_H(t)$ inicia en 0 y crece hasta alcanzar un máximo en un $(t_{max})_H$ dado por

$$(t_{max})_H = \frac{\ln(\lambda_P / \lambda_H)}{\lambda_P - \lambda_H}$$

Equilibrio en actividades padre-hijo

Muchas veces, en las series $P \xrightarrow{\lambda_P} H \xrightarrow{\lambda_H} G$, la relación A_H/A_P adquiere una cantidad constante a medida que crece t . Veamos, la relación entre A_H y A_P se puede obtener de la ecuación:

$$\frac{A_H(t)}{A_P(t)} = \frac{\lambda_H}{\lambda_H - \lambda_P} [1 - e^{-(\lambda_H - \lambda_P)t}]$$

y se deben considerar 3 situaciones especiales:

1. $(T_{1/2})_H > (T_{1/2})_P$

Implica que $\lambda_H < \lambda_P$ y la relación entre las actividades será

$$\frac{A_H(t)}{A_P(t)} = \frac{\lambda_H}{\lambda_P - \lambda_H} [e^{-(\lambda_P - \lambda_H)t} - 1]$$

con lo que el cociente de las actividades crecerá exponencialmente con el tiempo y no alcanzará equilibrio alguno

2. $(T_{1/2})_H < (T_{1/2})_P$

Implica que $\lambda_H > \lambda_P$ y la relación entre las actividades será

$$\frac{A_H(t)}{A_P(t)} = \frac{\lambda_H}{\lambda_H - \lambda_P} [e^{-(\lambda_P - \lambda_H)t} - 1] \xrightarrow{t_{grandes}} \frac{\lambda_H}{\lambda_H - \lambda_P} = \text{cte.} > 1$$

con lo que la relación entre las actividades tiende a ser proporcional y constante (independiente del tiempo) en un equilibrio transitorio.

3. $(T_{1/2})_H < (T_{1/2})_P$

Implica que $\lambda_H > \lambda_P$ y la relación entre las actividades será, por lo visto en el caso anterior:

$$\frac{A_H(t)}{A_P(t)} = \frac{\lambda_H}{\lambda_H - \lambda_P} [e^{-(\lambda_P - \lambda_H)t} - 1] \xrightarrow{t_{grandes}} \approx 1$$

alcanzando un equilibrio transitorio en el que las actividades de padre e hijo son iguales, conocido como equilibrio secular.

Modos de decaimiento

Los distintos modos de decaimiento, emiten distintas partículas energéticas, ya sean cargadas, neutras o fotones. A saber, las partículas emitidas por cada modo de decaimiento son

- * α en decaimientos α ,
- * electrones en decaimientos β^- ,
- * positrones en decaimientos β^+ ,
- * neutrinos en decaimientos β^+ ,
- * antineutrinos en decaimientos β^- ,
- * rayos γ en decaimientos γ ,
- * electrones atómicos orbitales en conversión interna,
- * neutrones, tanto en decaimiento por emisión de neutrones como en fisión espontánea,
- * núcleos pesados en fisión espontánea, y
- * protones en decaimiento de emisión de protones.

En cada una de estas transformaciones se debe conservar la energía total, el momento, la carga, el número atómico y la cantidad de nucleones. La energía de las partículas emitidas será igual a la diferencia de energía en reposo del nucleido producido. Si la transformación es entre un nucleido P a un nucleido H , la energía de desintegración va a estar dada por el valor Q :

$$Q = \{M(P) - [M(H) + m]\}c^2$$

donde $M(P)$, $M(H)$ y m son las masas en reposo de los núcleos (unidades de masa atómica unificada) de padre, hijo y partícula emitida, respectivamente. Así, para que pueda existir el decaimiento radiactivo, Q debe ser positivo, en lo que se conoce como proceso exotérmico.

1

2

3

4

5

6

7

Decaimiento alfa

Se produce al emitir dos protones y dos neutrones, por lo que A debe decrecer en 4 y Z debe decrecer en 2. Entonces la reacción se escribe:

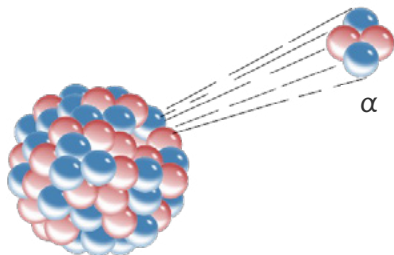
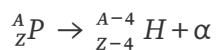
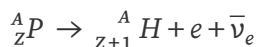


Figura 7.9.
Decaimiento alfa
(Fundamentos
Físicos de la
Medicina Nuclear)

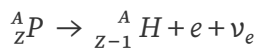
Decaimiento beta –

Se produce al convertirse un neutrón en un protón, en un núcleo rico en neutrones. En este caso también se emite un antineutrino. Entonces, A se mantiene y Z debe crecer al incrementarse la cantidad de protones.



Decaimiento beta +

Se produce al convertirse un protón en un neutrón, en un núcleo rico en neutrones. En este caso también se emite un neutrino. Entonces, A se mantiene y Z debe decrecer una unidad al por la conversión de neutrón en protón.



1

2

3

4

5

6

7

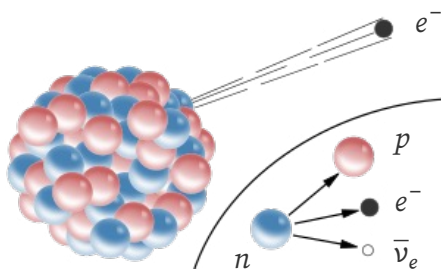
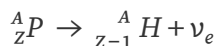


Figura 7.10.
Decaimiento beta
(Fundamentos
Físicos de la
Medicina Nuclear)

Captura electrónica

Se produce cuando un electrón orbital es capturado por un protón, convirtiéndolo en neutrón en la transformación que emite un neutrino. Así, A se mantiene, pero decrece en una unidad la cantidad de protones.



Decaimiento gamma y conversión interna

Los nucleidos hijo, después de un decaimiento $\alpha\alpha$ o $\beta\beta$, suelen quedar en un estado excitado. Para alcanzar el estado estable, suelen emitir rayos γ o transferir esta energía a un electrón orbital (por lo general de la capa K) en un proceso que se conoce como conversión interna. Este electrón, que es expulsado, deja un “espacio libre” que será ocupado por un electrón de una capa superior, emitiendo en esta transición un fotón característico, y/o generará la emisión de un electrón conocido como electrón Auger.

En estos casos, no cambian ni A ni Z , solo se pasa de un estado excitado a uno estable, y estos procesos se pueden describir por:

1

2

3

4

5

6

7

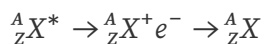
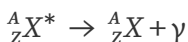
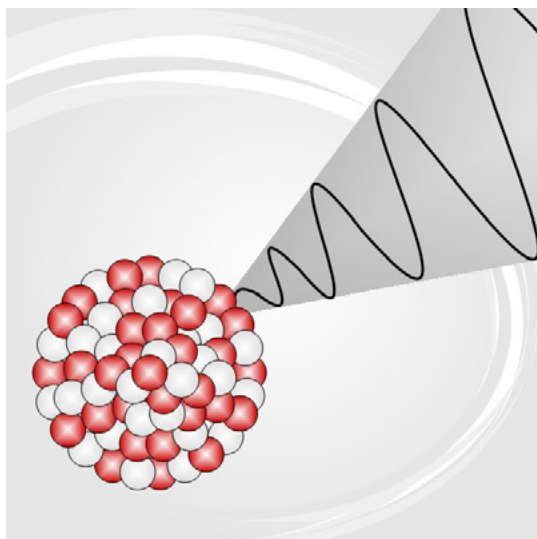


Figura 7.11
Decaimiento
Gamma



7.3 Composición de isótopos estables y sus aplicaciones

Los isótopos estables son átomos no radioactivos de un determinado elemento químico, tienen el mismo número de protones, pero difieren en el número de neutrones. Por ejemplo, el carbono normal tiene un peso atómico 12, es decir, contiene 6 neutrones y 6 protones, pero también hay átomos estables de carbono con un neutrón más y peso atómico 13. La abundancia relativa del isótopo pesado respecto del ligero recibe el nombre de traza o firma isotópica y se representa en notación delta por medio de la relación de esta proporción en la muestra, respecto a unos estándares internacionales, expresando los resultados en partes por millón.

1

2

3

4

5

6

7

Isótopos de carbono

Estables

Inestable (radiactivo)

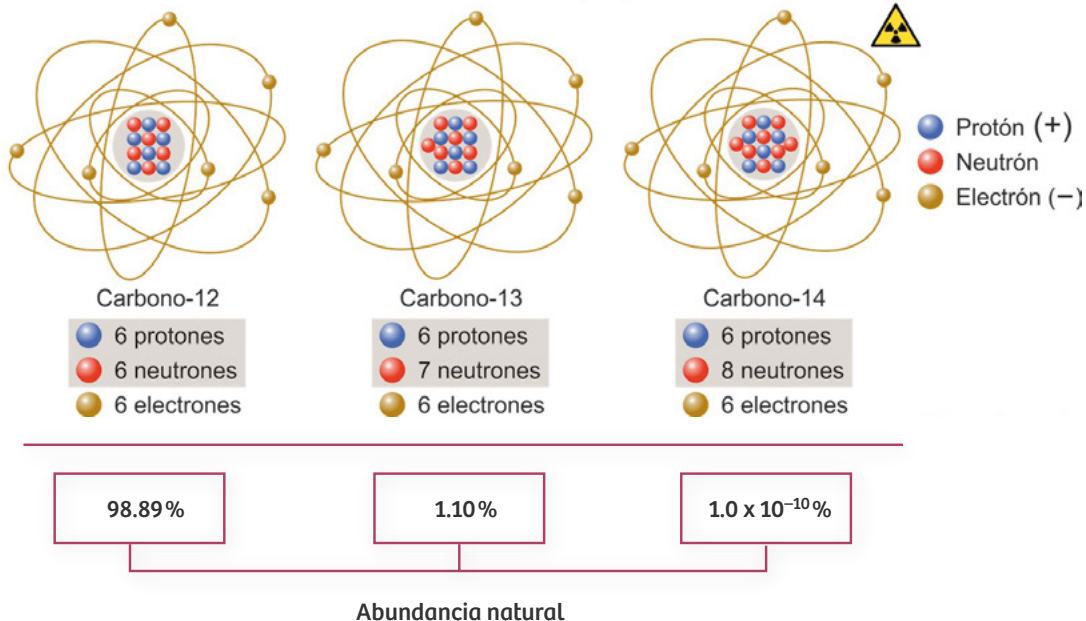


Figura 7.12. Los tres isótopos de carbono, estables e inestables (A.I. Casado 2019)

Varios procesos biogeoquímicos dan lugar a variaciones espacio-temporales en las concentraciones isotópicas de los niveles tróficos basales. A su vez, estas diferencias se transmiten a lo largo de las cadenas tróficas de una forma predecible. Por ello, las aproximaciones isotópicas son una herramienta especialmente útil a la hora de trazar el flujo de materia y energía en ecosistemas naturales.

De los primeros 82 elementos de la tabla periódica, 80 tienen isótopos estables. A través de la medición y el análisis de su distribución se pueden emplear en muchas aplicaciones prácticas.

1

2

3

4

5

6

7

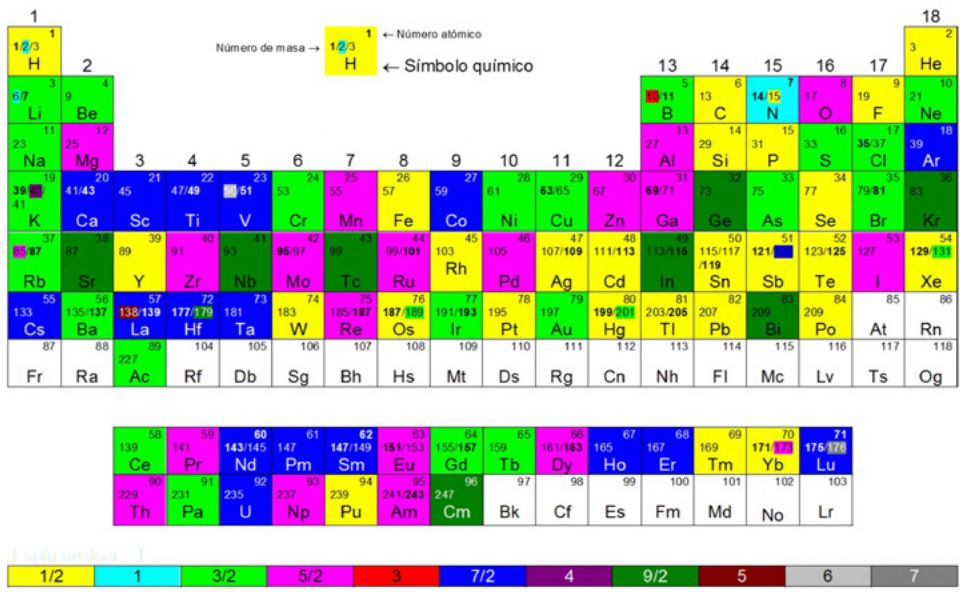


Figura 7.13. Ejemplo de tabla periódica de isótopos (Ariza Castolo. 2017)

Una forma de utilizar isótopos estables es midiendo su cantidad y proporción en muestras, por ejemplo, de agua. Los isótopos estables naturales del agua y de otras sustancias se emplean para rastrear el origen, la historia, las fuentes, los sumideros y las interacciones en los ciclos de agua, el carbono y el nitrógeno.

Los isótopos estables también se pueden utilizar como trazadores, que se añaden deliberadamente al sistema que se desea analizar, por ejemplo, en la agricultura o la nutrición. Para ello, deben separarse por medio de técnicas muy sofisticadas, como la espectrometría de masas.

En el ámbito del campo de la nutrición humana, se han utilizado con frecuencia una serie de isótopos para evaluar algunas de las cuestiones más importantes y básicas en esta área de investigación como son la composición corporal, el gasto energético, el recambio de proteínas y los estu-

dios metabólicos. Algunos de los isótopos estables más empleados en este campo de investigación son el deuterio (^2H hidrógeno), ^{18}O oxígeno, ^{13}C carbono y ^{15}N nitrógeno.

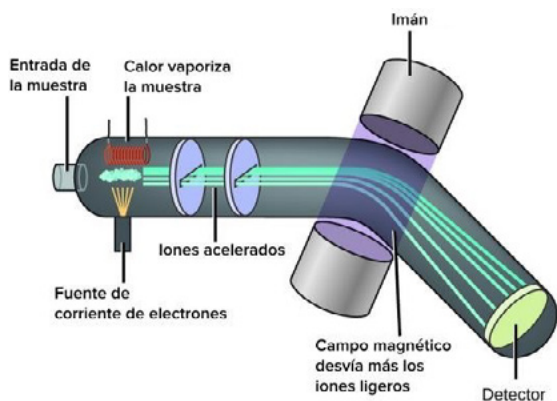


Figura 7.14. Proceso de espectrometría de masas (Antonio Camacho. 2018)

Hoy en día todavía hay confusión y preocupación sobre su seguridad, lo que puede dificultar el uso adecuado de estos isótopos para estudios en humanos y por ello en el avance del conocimiento de la investigación científica en esta área.

De igual forma, la amplia distribución diferencial de los isótopos estables en la naturaleza permite su uso como trazadores naturales de procesos fisicoquímicos en los ecosistemas. Así, la concentración relativa de los isótopos de hidrógeno, carbono, nitrógeno, oxígeno o azufre, ha permitido realizar estudios sobre el patrón de movimiento de los animales, ya que las proporciones isotópicas geográficas se conservan en los tejidos de los individuos tras la migración. Esto también sucede sobre cadenas tróficas, teniendo en cuenta que, entre niveles tróficos sucesivos, se produce un ligero enriquecimiento en los isótopos pesados de Carbono y Nitrógeno respecto de su dieta debido al propio metabolismo.

Por otra parte, el Nitrógeno puede utilizarse como indicador de una eutrofización incipiente causada por el aumento de los aportes de nitrógeno

antropogénico, ya que los vertidos residuales de origen humano suelen estar enriquecidos en este isótopo respecto al ambiente. Además, su aplicación en ecofisiología vegetal permite determinar el tipo de fotosíntesis que utilizan las plantas (C3, C4 y CAM) con base a la relación entre Carbono y Nitrógeno. En ecología microbiana, para identificar funciones metabólicas de microorganismos crecidos sobre sustratos marcados con Carbono, identificando cuáles lo han incorporado en su DNA, RNA o fosfolípidos.

También son una herramienta muy útil en diagnósticos clínicos y en la industria deportiva para pruebas antidopajes. La certificación del origen y calidad alimenticia son igualmente aplicaciones frecuentes.

El uso de isótopos estables en biología ha aumentado en los últimos años debido al gran poder que tienen los isótopos para medir procesos que antes eran difíciles e incluso imposibles de cuantificar utilizando otros métodos. A pesar de que la mayoría de los estudios con isótopos se han concentrado en zonas templadas, en años recientes han aumentado los estudios realizados en los trópicos, lo cual ha permitido entender en detalle procesos complejos. Esta revisión enfatiza aquellos estudios que utilizan la composición isotópica de hidrógeno, carbono, nitrógeno y oxígeno para estudiar procesos biogeoquímicos en ambientes tropicales, tanto a escala molecular como regional. Al detallar los avances recientes sobre estudios en los trópicos, se espera estimular más estudios en esta área.

7.4 Variación de Isótopos/Fraccionamiento Isotópico

El fraccionamiento isotópico se define como el fenómeno a través del cual la composición isotópica de un elemento de un determinado compuesto cambia por medio de la transición de este compuesto de un estado físico o de una composición química a otra.

1

2

3

4

5

6

7

Se distinguen tres procesos de fraccionamiento isotópico dependientes de la masa, que son:

1. Termodinámico (en los sistemas de equilibrio físico o químico).
2. Cinético (en las reacciones (bio)químicas de una única dirección o irreversibles).
3. Fraccionamiento de transporte durante los procesos difusivos.

La variabilidad en la composición isotópica del ciclo hidrológico se debe a la dependencia del fraccionamiento isotópico con la masa, junto con las transiciones de fase y los procesos de transporte del ciclo (véase figura 7.15).

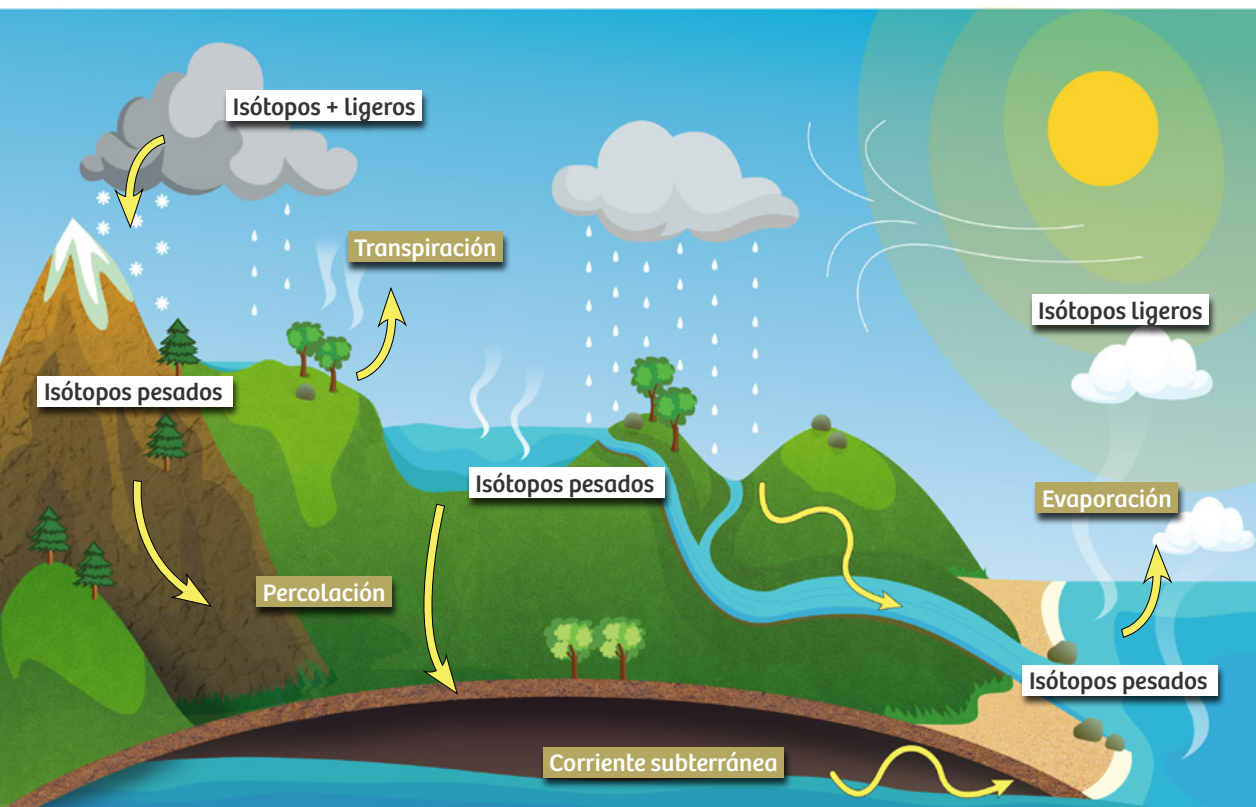


Figura 7.15. Procesos del transporte del ciclo hidrológico

Uno de los fenómenos que presenta fraccionamiento independiente de la masa es aquel en el que los isótopos del oxígeno atmosférico ^{17}O , ^{16}O se ven afectados por las colisiones de los gases atmosféricos con partículas cósmicas y las reacciones fotoquímicas en la atmósfera superior.

Fraccionamiento Isotópico de equilibrio

Se puede describir el efecto isotópico termodinámico o de equilibrio entre moléculas (con un elemento en común) o entre fases que coexisten en equilibrio mediante una reacción de intercambio, donde X^0 y X^1 son especies isotópicas del elemento X .



El factor del fraccionamiento isotópico (en el equilibrio) α se define mediante la constante (de equilibrio) de esta reacción de intercambio:

$$K_X(T) = \frac{[AX^1][BX^0]}{[AX^0][BX^1]} = \frac{R_{AX}}{R_{BX}} = \alpha_{\frac{AX}{BX}}$$

El efecto isotópico en el equilibrio depende de la temperatura (T). En la ecuación, R representa el cociente de las abundancias de las respectivas especies isotópicas. El subíndice $\frac{AX}{BX}$ representa un valor de AX relativo a BX .

Para el equilibrio entre fases (por ejemplo, entre el vapor y el líquido) la expresión equivalente es:

$$\frac{R_{(fase1)}}{R_{(fase2)}} = \alpha_{\frac{1}{2}}(T)$$

1

2

3

4

5

6

7

La relación $\alpha_{\frac{1}{2}} = \frac{R_1}{R_2}$ también se puede escribir de la siguiente manera:

$$\alpha_{\frac{1}{2}} = \frac{1 + \delta_1}{1 + \delta_2}$$

El fenómeno de fraccionamiento más relevante en los procesos atmosféricos es el del equilibrio entre el agua líquida y el vapor. Este proceso de intercambio isotópico se escribe como:

$$\alpha_{\frac{L}{V}} = \frac{1 + \delta_1}{1 + \delta_2}$$

Fraccionamiento Isotópico cinético

El factor de fraccionamiento isotópico de las reacciones químicas o bioquímicas de un sólo sentido o irreversibles se designa mediante α_{ki} . A menudo se habla del fraccionamiento cinético para distinguirlo del fraccionamiento termodinámico o de equilibrio.

Generalmente el factor de fraccionamiento isotópico se define como el cociente entre la relación isotópica nueva y la antigua (la nueva relativa a la antigua):

$$a_{cin} = \frac{R_{fase\ nueva}}{R_{fase\ original}}$$

Los efectos isotópicos cinéticos son generalmente mayores que los del equilibrio. Esto se debe a que en principio un proceso de equilibrio consiste en dos procesos unidireccionales en sentido contrario (véase figura 7.16). Por consiguiente, el factor de fraccionamiento en el equilibrio es el cociente de dos factores de fraccionamiento cinéticos. Los efectos ciné-

1

2

3

4

5

6

7

ticos, al igual que los efectos del equilibrio, disminuirían exponencialmente al aumentar la temperatura (Melander, 1960).

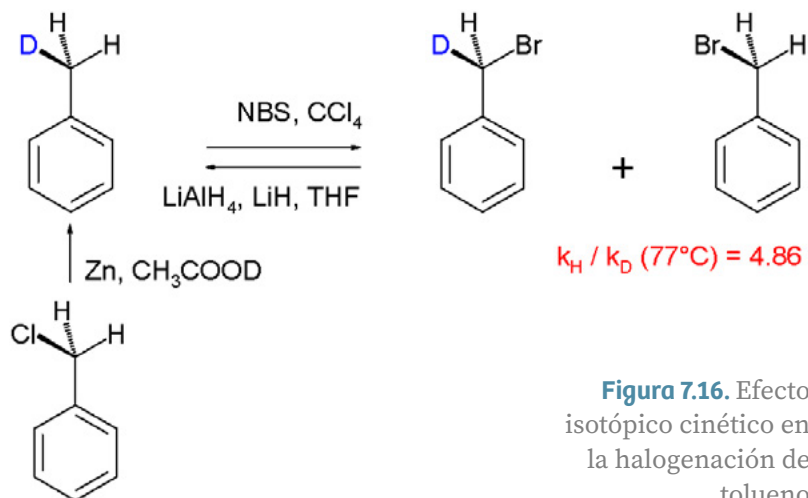


Figura 7.16. Efecto isotópico cinético en la halogenación de tolueno

Fraccionamiento Isotópico de transporte

Debido a las diferentes movilidades de las especies isotópicas del agua, aparece un caso especial de fraccionamiento isotópico. Se debe diferenciar los factores de fraccionamiento isotópico de transporte de los cinéticos descritos anteriormente.

Con el fraccionamiento isotópico de transporte:

1. Tienen más importancia las diferencias másicas de las moléculas isotópicas, que las diferencias atómicas de masa. En el caso del proceso de transporte, los efectos de la sustitución del hidrógeno y del oxígeno son similares, ligeramente superior para el oxígeno.
2. Tiene lugar un proceso cinético del gas, el efecto de la temperatura es pequeño y positivo, y aumenta con $T^{\frac{1}{2}}$.

1

2

3

4

5

6

7

7.5 Isótopos presentes en el medio acuoso

Contenido de isótopos estables de agua del mar

Entre los isótopos ambientales, los isótopos estables de hidrógeno y oxígeno son los utilizados habitualmente en los estudios de la interconexión entre agua marina y agua subterránea.

El hidrógeno presenta dos isótopos estables de masas 1 y 2, siendo la abundancia del segundo, denominado deuterio (^2H), próxima a unos 160 átomos por millón. (véase la figura 7.17).

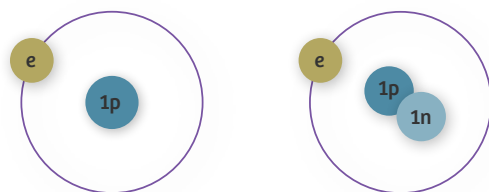


Figura 7.17. Isótopos Protio y Deuterio

El oxígeno se compone de tres isótopos estables, de masas 16, 17 y 18, siendo la abundancia de este último de aproximadamente 2000 átomos por millón. El isótopo de masa 17 es raramente utilizado en trabajos geoquímicos, y no es considerado en este libro. (véase la figura 7.18).

El océano, que contiene más del 97% del agua en la superficie terrestre, presenta un contenido en isótopos estables bastante uniforme. Por esta razón, y también porque el océano representa el punto de partida y de llegada en el ciclo hidrológico, la composición isotópica media del océano ha sido tomada como referencia para expresar las concentraciones en oxígeno 18 y deuterio (^2H) en los compuestos naturales.

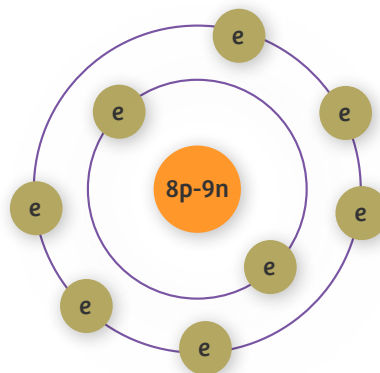


Figura 7.18. Oxígeno-17

1

2

3

4

5

6

7

Las aguas superficiales del océano están ligeramente enriquecidas en isótopos estables como consecuencia de la evaporación, ya que este proceso elimina preferencialmente agua isotópicamente menos pesada.

Contenido de isótopos estables en agua dulce

El agua isotópicamente ligera pasa a la fase vapor de un modo preferencial durante la evaporación, ya que presenta una presión de vapor superior frente a las moléculas de agua que contienen isótopos pesados.

Por otra parte, el vapor procedente del océano (que es la mayor fuente de agua en la atmósfera) está siempre empobrecido en oxígeno 18 y deuterio (^2H) en una cuantía que depende de varios factores, siendo el más importante la humedad relativa de la atmósfera.

La evaporación en la naturaleza no ocurre en condiciones de equilibrio termodinámico, y esto determina un incremento en el factor de fraccionamiento isotópico entre las fases líquido y vapor.

Cuando el vapor atmosférico se condensa para formar las nubes y más tarde la precipitación, el proceso de fraccionamiento isotópico se invierte con respecto a la evaporación, y el agua isotópicamente pesada se condensa con mayor facilidad.

La condensación de este vapor se produce sólo cuando se alcanza la saturación y sin embargo se trata de un proceso que ocurre en condiciones de equilibrio termodinámico.

1

2

3

4

5

6

7

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ACUAE Fundación (Año de publicación desconocido). Distribución del agua dulce y salada en la Tierra. 15/08/2021, de Acuae Fundación Sitio web: <https://www.fundacionaquae.org/agua-dulce-salada/>
- AGUILERA, M., Voltas, J., Ferrio, J.P. y Serrano, L. (2010). Evolución estacional de $\delta^{13}\text{C}$ en hojas y madera de dos quercíneas mediterráneas concurrentes (*Quercus*).
- ALCORLO, P. (2008). Distintas aplicaciones de isótopos estables ($\delta^{13}\text{C}$ y $\delta^{15}\text{N}$) en el estudio de ecosistemas acuáticos continentales. Técnicas y aplicaciones multidisciplinares de los isótopos ambientales 1:347-374.
- AMAYA arévalo, A.J. (2015). Evaluación hidrogeoquímica e hidroquímica de la subcuenca del río Aranchacal (maestría). Facultad de Ingeniería y Arquitectura, Universidad de El Salvador, El Salvador.
- APPELO, C., & Postma, D. (2005). *Geochemistry, groundwater and pollution*. Amsterdam: The Netherlands.
- AULA VIRTUAL de Biología. (s. f.). Aula virtual de biología. Recuperado 28 de julio de 2021, de <https://www.um.es/molecula/sales02.htm>
- BERNER R.A (1980). *Early Diagenesis – a theoretical approach*. Princeton University Press, Princeton N.J., 241 pp
- BERNER R.A. (1980). *Early Diagenesis - a theoretical approach*. Princeton University Press. Princeton, N.J., 241 pp
- BIBIANO, L., Gárfias, J., & Llanos, H. (mayo-junio, 2015). Hidrogeoquímica y procesos naturales de ablandamiento del agua subterránea en sistemas kársticos. *Tecnología y Ciencias del Agua*, 6(3), 57-78.

1

2

3

4

5

6

7

- BIGEISEN, J. (1965). Chemistry of isotopes. Science. 147:463–471.
- BOSCHKER, H.T.S. y Middelburg, J.J. (2002). Stable isotopes and biomarkers in microbial ecology. FEMS Microbiology Ecology 40:85–95.
- BRAND, W.A. (1996). High precision isotope ratio monitoring techniques in mass spectrometry. Journal of Mass Spectrometry 31:225–235.
- BROWN, T.; LeMay, H. E.; Bursten, B. E. 1998. Química: La ciencia central, 7ª ed.; Prentice Hall: México.
- BUSTAMANTE, E. A. “Identificación de procesos hidrógeoquímicos aplicando modelación inversa en el acuífero Soconusco, Chiapas.” INSTITUTO POLÍOSINO DE INVESTIGACIÓN CIENTÍFICA Y TECNOLÓGICA, A.C. San Luis Potosí. Febrero de 2017. Revisado el 14 de septiembre 2021.<<https://ipicyt.íeposítoíioinstitucional.mx/jspui/bitstíeam/1010/1259/1/ÍMPI-CYÍB 8Í32017.pdf>>
- BUSTAMANTE, E. A. “Identificación de procesos hidrógeoquímicos aplicando modelación inversa en el acuífero Soconusco, Chiapas.” INSTITUTO POLÍOSINO DE INVESTIGACIÓN CIENTÍFICA Y TECNOLÓGICA, A.C. San Luis Potosí. Febrero de 2017. Revisado el 27 de septiembre de 2021.<<https://ipicyt.íeposítoíioinstitucional.mx/jspui/bitstíeam/1010/1259/1/ÍMPI-CYÍB 8Í32017.pdf>>
- CAPÍTULO 4: Investigación Hidrogeoquímica. (s. f.). TDX. Recuperado 1 de septiembre de 2021, de <https://www.tdx.cat/bitstream/handle/10803/6215/05Capitulo4.pdf?sequence=6>
- CARBAJAL, A; González, M. (2012). Propiedades y funciones biológicas del agua. Recuperado el 26 de junio de 2021 de: <https://www.ucm.es/data/cont/docs/458-2013-07-24-Carbajal-Gonzalez-2012-ISBN-978-84-00-09572-7.pdf>
- CHANG, R. (2016). Química (12.a ed.). Editorial McGraw-Hill.
- CHANG, R.; Goldsby, K. A. 2013. Química, 11a ed. Editorial McGraw-Hill, México, D.F.
- CNA, Semarnat. Estadísticas del Agua en México. Edición 2004. México 2004.

1

2

3

4

5

6

7

- COHESIÓN y adhesión del agua (artículo). (s. f.). Khan Academy. Recuperado 28 de julio de 2021, de <https://es.khanacademy.org/science/apbiology/chemistry-of-life/structure-of-water-and-hydrogenbonding/a/cohesion-and-adhesion-in-water>
- CRAIG, H. Isotopic variations in meteoric waters - Science, 133, 1702-1703, 1961.
- CURSO de Modelamiento Hidrogeoquímico con PHREEQC. Gidahatari < https://static1.squarespace.com/static/521e95f4e4b01c5870ce81cf/t/53876603e4b06ea569948da7/1401382403236/02_+Entrada_PHRREQC.pdf >, < https://static1.squarespace.com/static/521e95f4e4b01c5870ce81cf/t/53876781e4b024b91f1ed725/1401382785749/04_Reacciones_SistAq.pdf >
- CYRONAK (2014) Benthic coral reef calcium carbonate dissolution in an acidifying ocean. Nature Climate Change 4: 969-976.
- DAS, B. M. (2014). Fundamentos de Ingeniería Geotécnica (4.a ed.). Cengage Learning.
- DE VRIES J. 2000. Environmental isotopes in the hydrological cycle principles and applications. Vol. I: Introduction Theory, Methods. Willem G Mook ed. Centre for Isotope Research, Groningen, 271 p.
- DEPARTAMENTO DE FÍSICA. (2016). Actividad y Leyes del Decaimiento Radioactivo. 2021, de Universidad Nacional de La Plata Sitio web: <http://www.fisica.unlp.edu.ar/materias/radioactividad/apuntes/ActividadYLeyesDeDecaimientoRadioactivo.pdf>
- DESCONOCIDO. (Desconocido). LA COMPOSICION QUIMICA DE LAS AGUAS SUBTERRANEAS NATURALES. 8/09/2021, de Desconocido Sitio web: https://aguas.igme.es/igme/publica/libro43/pdf/lib43/1_1.pdf
- DONADO, L.D. (1999), Hidrogeoquímica. Mulligan, B., (2007), Hidrogeoquímica
- ECURED. (s. f.). Enlace iónico - EcuRed. Recuperado 8 de septiembre de 2021, de https://www.ecured.cu/Enlace_i%C3%B3nico

1

2

3

4

5

6

7

- EDUARDO Elueterio Mariño, García Fernando Rodolfo. “Apuntes sobre las aplicaciones ambientales de la hidrogeoquímica,” Universidad Nacional de la Pampa. Proyecto de Investigación y desarrollo 075/2011 “Comportamiento y evolución espacio- temporal del arsénico en aguas subterráneas de la República de Argentina” 1 septiembre 2018.
- EL AGUA, algo extraordinario. (s.f). Recuperado el 27 de junio de 2021 de: <http://espacientifico.weebly.com/tema-1---bloque-vi.html>
- ENCINAS, M. (2011). Medio ambiente y contaminación. Principios básicos. Recuperado el 29 de junio de 2021 de [https://addi.ehu.es/bitstream/handle/10810/16784/Medio %20Ambiente %20y %20Contaminaci %C3 %B3n. %20Principios %20b %C3 %A1sicos.pdf?sequence=6](https://addi.ehu.es/bitstream/handle/10810/16784/Medio%20Ambiente%20y%20Contaminaci%C3%B3n.%20Principios%20b%C3%A1sicos.pdf?sequence=6)
- EXPRESSING Concentration of Solutions. (s. f.). Toppr. Recuperado 29 de junio de 2021, de [https://www.toppr.com/guides/chemistry/solutions/expressing- concentration-of-solutions/](https://www.toppr.com/guides/chemistry/solutions/expressing-concentration-of-solutions/)
- FAGUNDO Castillo y González Hernández. (2005). González Hernández. La Habana, Cuba: Centro Nacional de Medicina Natural y Tradicional (CENAMENT)
- FAGUNDO, J. C., & González, P. (2016). Hidrogeoquímica Química del Agua Subterránea. Alemania: Editorial Académica Española.
- FIGINI, A., Gomez, G., Hijahte, H. Y Carbonarl, J. (1983). Los isótopos ambientales (Tritio. Carbono 14, Deuterio y Oxígeno 18) en el estudio de la salinización de las aguas. Revista del Museo de la plata Tomo IX.
- FIGUEREDO-Rodríguez, H., & Lara Hernandez, A. (2012). Estudio para conocer la calidad del agua del parque nacional Lagunas de Montebe- llo. Comitán, Chiapas: GEIC.
- FRY, B. (2006). Isotope notation and measurement. Stable Isotope Ecology. pp 23- 31. Springer, USA.
- G. (2020, 14 abril). Explicación sencilla del punto de ebullición. Espacio- Ciencia.com. <https://espaciociencia.com/punto-de-ebullicion/>

1

2

3

4

5

6

7

- GANNES, L.Z., del Rio, C.M. y Koch, P. (1998). Natural Abundance Variations in Stable Isotopes and their Potential Uses in Animal Physiological Ecology. Comparative.
- GARCÍA, M. (2009). Biología y geología. National Distance Education University. Recuperado el 29 de junio de 2020 de https://www.researchgate.net/profile/Manuel-Rodriguez-80/publication/263925744-La_hidrosfera_El_ciclo_del_agua_La_contaminacion_del_agua_Metodos_de_analisis_y_depuracion_El_problema_de_la_escasez_del_agua/links/5486d67c0cf2ef34478c2e1e/La-hidrosfera-El-ciclo-del-agua-La-contaminacion-del-agua-Metodos-de-analisis-y-depuracion-El-problema-de-la-escasez-del-agua.pdf
- HILL, C. and Forti, P. (1986). Cave Minerals of the World. Ed. National Speleological Society, Huntsville, Alabama
- HILL, C. and Forti, P. (1986). Cave Minerals of the World. Ed. National Speleological Society, Huntsville, Alabama, pp. 238.
- HÖTZL, H. Arid-Zone Hydrogeology: Investigations with Isotope Techniques – International Atomic Energy Agency, Vienna, 1980.
- HOUNSLOW, A. W. (1995). Water quality data. Analysis and Interpretation. CRC Press. USA.
- HOUNSLOW, A. W. (1995). Water quality data. Analysis and Interpretation. CRC Press. USA.
- Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica, A.c. (2017, febrero). Identificación de procesos hidrogeoquímicos aplicando modelación inversa en el acuífero Soconusco, Chiapas (SN).
- J. REYNERO Fagundo Castillo. Patricia González. (2005). HIDROGEOQUÍMICA. La Habana, Cuba: Ministerio de Salud Pública. (P.314)
- J. REYNERO Fagundo Castillo. Patricia González. (2005). HIDROGEOQUÍMICA. La Habana, Cuba: Ministerio de Salud Pública. (P.314)
- JORIO, L. (2020). ¿La próxima pandemia podría emerger del hielo? Swisinfo.ch. Recuperado el 29 de junio de 2021 de https://www.swisinfo.ch/spa/enfermedades-y-calentamiento-global_-la-pr%C3%B3xima-pandemia-podr%C3%ADa-emerger-del-hielo-/45785554

1

2

3

4

5

6

7

- JUAN Reynero Fagundo Castillo, Patricia González Hernández. (2005). Modelación Hidrogeoquímica y control de calidad del agua. En HIDROGEOQUÍMICA(314). La Habana, Cuba: Ministerio de Salud Pública.
- JUÁREZ, E. (1974). Mecánica de suelos I, 3a ed: Fundamentos de la mecánica de suelos (3.aed.). Editorial Limusa.
- JUMAPAM. (Desconocido). Distribución de Agua en el Planeta. 15/08/2021, de Jumapam Sitio web: <http://jumapam.gob.mx/cultura-del-agua/distribucion-de-agua-en-el-planeta/>
- KENDALL C, E Caldwell. 1998. Fundamentals of isotope geochemistry. In Kendall C and JJ McDonnell eds. Isotope tracers in catchment hydrology. Elsevier Science, Amsterdam, p. 51-86.
- L. y Quercus faginea Lam.). dinámica de la eficiencia en uso del agua. Ecosistemas 19: 6- 13.
- LEGORRETA, H. (2016). Comportamiento de Suelos, 1a ed: Exploración y muestreo (1.aed.). Facultad de Ingeniería, UNAM.
- LORENZO Valenzuela, Jorge Ramírez-Hernández y Ramón B. Palomares. “Composición Isotópica del Agua Subterránea y su Relación con la Salinidad en el Valle de San Luis Río Colorado en Sonora, México.” Universidad Estatal de Sonora.
- LOS TRES ESTADOS DEL AGUA. (s.f). Recuperado el 27 de junio de 2021 de: <https://www.edumedia-sciences.com/es/media/133-los-tres-estados-del-agua>
- LOZADA, J.A. (2018) Identificación de los procesos hidrogeoquímicos en el sistema lagunar Montebello, mediante la modelación inversa en Phreeqc [tesis de licenciatura, Universidad Nacional Autónoma de México] Repositorio institucional UN. <http://132.248.9.195/ptd2018/julio/0776269/0776269.pdf>
- MANAHAN S. E. (2010). Environmental Chemistry. CRC Press.
- MANAHAN S. E. (2010). Environmental Chemistry. CRC Press.

1

2

3

4

5

6

7

- MARINERO-Orantes, E. A., Durán-Zarabozo, O., Zúniga-González, C. A., & Molina, A. (2016). Caracterización hidrogeoquímica del agua superficial de la subcuenca del río acahuapa, departamento de San Vicente, El Salvador. *Revista Iberoamericana De Bioeconomía Y Cambio Climático*, 1(2), 139–148. <https://doi.org/10.5377/ribcc.v1i2.2480>
- MAZOR, Emanuel. *Applied chemical and isotopic groundwater hydrology* - Open Univ. Press, 1991.
- MELANDER G., Mensing TM (2004), *Isótopos: principios y aplicaciones* (John).
- MID America Regional Council. (s.f.). ¿Qué es la contaminación por sedimentos? Agua limpia. Vida sana. Recuperado el 29 de junio de 2021 de https://www.marc.org/Environment/Water-Resources/pdfs/brochures/sediment_espanol.aspx
- MORAN, J. (2016). *Modelación Hidrogeoquímica en Tres Ambientes Naturales en México: Cárstico, Volcánico y Cuenca Sedimentaria*. [Tesis de Doctorado. Instituto Potosino De Investigación Científica y Tecnológica A.C.]:
- MORAN, J. (2016). *Modelación Hidrogeoquímica en Tres Ambientes Naturales en México: Cárstico, Volcánico y Cuenca Sedimentaria*. [Tesis de Doctorado. Instituto Potosino De Investigación Científica y Tecnológica A.C.]:
- MOTA Ávila A. (2011) *Química del Medio Ambiente*. Departamento de Química Inorgánica. Facultad de Ciencias. Universidad de granada. España.
- MOTA, A. (2011). TEMA V. *Química de los procesos de oxidación-reducción en aguas naturales*. septiembre 6, 2021, de Departamento de Química Inorgánica, Universidad de Granada. Sitio web:
- MOTOYUKI Suzuki. *Adsorption Engineering*, Tokyo. Diciembre 1989.
- O. PLANAS. (2009). ¿Qué es la radioactividad? 2021, de *Energía Nuclear* Sitio web: <https://energia-nuclear.net/que-es-la-energia-nuclear/radioactividad>
- ORDOÑEZ, J. (2011). *Aguas Subterráneas-Acuíferos*. Foro Peruano para el

1

2

3

4

5

6

7

Agua. Recuperado el 10 de agosto de 2021, de https://www.gwp.org/globalassets/global/gwp-sam_files/publicaciones/varios/aguas_subterranas.pdf

P. PÉREZ. (2020). Fundamentos Físicos de la Medicina Nuclear. 2021, de Facultad de Matemática, Astronomía, Física y Computación Sitio web: <https://www.famaf.unc.edu.ar/~pperez1/manuales/cmn/capitulo2.html>

PEÓN, J. (2007). El agua, una sustancia tan común como sorprendente. Recuperado el 26 de junio de 2021 de: https://www.amc.edu.mx/revistaciencia/images/revista/58_3/PDF/04-545.pdf

PNUMA e INE, Semarnat. GEO México 2004. Perspectivas del Medio Ambiente en México. México. 2004

PNUMA-GEMS. Programa del Agua Water Quality Outlook. PNUMA Sistema Mundial de Vigilancia del Medio Ambiente, Programa del Agua, Instituto Nacional de Investigación sobre el Agua. Burlington, Ontario. 2007.

PORTAL de Suelos de la FAO | Organización de las Naciones Unidas para la Alimentación y la Agricultura. (s. f.). FAO. Recuperado 25 de agosto de 2021, de <http://www.fao.org/soils-portal/es/>

PROCESOS químicos del agua. Concentraciones y actividades. USAL. Julio 2012 <https://hidrologia.usal.es/temas/Procesos_quimicos.pdf>

R. H. Petrucci, W. S. Harwood, F. G. Herring, Química General, 8a edición, (Prentice Hall, Madrid, 2003). <http://biblos.uam.es/>

REYES, J. S. (2017). Propuesta de un Modelo Hidrogeoquímico para el Sistema Lagunar Montebello, Chiapas. Ciudad de México: Facultad de Química, UNAM.

REYES, J. R (2017) "Propuesta de un modelo hidrogeoquímico para el sistema lagunar Montebello, Chiapas" [Tesis de licenciatura, Universidad Autónoma de México]. https://tesiunam.dgb.unam.mx/F/YIY14JPYA-9GB1H8YU224MYAVXNKAKTNYMU_1P7FBCGSQX4PDN4Q-25237?func=full-set-set&set_number=866561&set_entry=000013&format=999

REYNERIO, F. C. J., & Patricia, G. (2012). Hidrogeoquímica. Eae Editorial Academia Española.

1

2

3

4

5

6

7

- RIVERA, Giraldo Angélica Azucena. “Especiación de metales en aguas fluviales de la cuenca hidrográfica del Ebro y cálculo de la concentración biodisponible”. Universidad Industrial de Santander. Escuela de Ingeniería Química. Bucaramanga 2015 <<http://tangara.uis.edu.co/biblioweb/tesis/2015/160138.pdf>>
- RIVERA, Giraldo Angélica Azucena. “Especiación de metales en aguas fluviales de la cuenca hidrográfica del Ebro y cálculo de la concentración biodisponible”. Universidad Industrial de Santander. Escuela de Ingeniería Química. Bucaramanga 2015 <<http://tangara.uis.edu.co/biblioweb/tesis/2015/160138.pdf>>
- SÁNCHEZ, F. J. (2017). Hidrología Superficial y Subterránea. Createspace Independent Pub., 414 pp.
- SÁNCHEZ, J. (2001, 6 enero). El ciclo hidrológico. Departamento de Geología. Recuperado el 10 de agosto de 2021, de <https://web.archive.org/web/20090205224502/http://ausma.uncoma.edu.ar/academica/materias/riego/clave/temas/T020.pdf>
- SÁNCHEZ, J. (2018). Qué es la contaminación térmica y cuáles son sus causas. Ecología verde. Recuperado el 29 de junio del 2021 de <https://www.ecologiaverde.com/que-es-la-contaminacion-termica-y-cuales-son-sus-causas-1477.html>
- SCHWAB, Glenn; Frevert, Richard. Elementary Soil and Water Engineering. Wiley International Edition
- SECRETARÍA de la infraestructura y política hídrica Ministerio del interior, Obras públicas y viviendas Presidencia de la Nación, Consejo hídrico Federal, & Fondo para la investigación científica y tecnológica. (2018, septiembre). Apuntes sobre aplicaciones ambientales de la hidrogeoquímica (SN).
- SEMARNAT. (2011). AGUA. 27/07/2021, de SEMARNAT Sitio web:https://apps1.semarnat.gob.mx:8443/dgeia/informe_12/pdf/Cap6_agua.pdf
- SHARP Z., 2006. Principios de la geoquímica de isótopos estables (Prentice Hall).

1

2

3

4

5

6

7

- SNOEYINK, V. L. y Jenking, D. (1990). Química del Agua.
- SQUEO F, J Ehleringer. 2004. Isótopos estables: Una herramienta común para la ecofisiología vegetal y animal. In Fisiología Ecológica en Plantas: Mecanismos y Respuestas a Estrés en los Ecosistemas. Marino H ed. Ediciones de la Universidad Católica de Valparaíso, Valparaíso, Chile, p. 59-80
- USSR Comitee for the Internacional Hydrological Decade. “World Water Balance and Water Resources of the Earth”. Studies and Reports in Hydrology. Vol 25. UNESCO. Paris.
- V. CALZADA, H. Cerecetto. (2019). Una introducción a la Química Nuclear. 2021, de Universidad de la República Sitio web: <https://www.cse.udelar.edu.uy/wp-content/uploads/2019/05/Una-introduccio%C-C%81n-a-la-Qui%CC%81mica-Nuclear.pdf>
- VALDIVIELSO, A. (2020, 19 octubre). ¿Qué es un acuífero? iAgua. Recuperado el 10 de agosto de 2021, de <https://www.iagua.es/respuestas/que-es-acuifero>
- VERA, C., Carmilloni, I., & Kornblihtt, A. (2010). Ciencias naturales «El ciclo del agua». Recuperado el 10 de agosto de 2021, de Ministerio de Educación de la Nación Argentina. <http://www.bnm.me.gov.ar/giga1/documentos/EL002315.pdf>
- VERSIÓN final recibida Ene. 04, 2013. <<https://scielo.conicyt.cl/pdf/info-tec/v24n2/art08.pdf>> (pag 59)
- WHAT is Hydrology? (s. f.). USGS. Recuperado 05 de agosto de 2021, de https://www.usgs.gov/special-topic/water-science-school/science/what-hydrology?qt-science_center_objects=0#qt-science_center_objects
- WILEY & Sons). Hoefs J., 2004. Geoquímica de isótopos estables (Springer Verlag).
- ZEMAN, J. & Sracek, O. (2004) Introduction to Enviromental Hydrogeochemistry

1

2

3

4

5

6

7



Fundamentos de hidrogeoquímica

se publicó de manera provisional en el repositorio de la Facultad de Ingeniería en febrero de 2024.

Primera edición
provisional electrónica de un ejemplar
(9 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, Source Serif Pro y Sienna Math Pro con sus respectivas variantes.