



Casa abierta al tiempo

**CARACTERIZACION DE LAS AGUAS  
DE LA CUENCA DEL RIO LERMA A  
TRAVES DE METODOLOGIAS DE  
ESPECIACION METALICA Y LA  
CONSTRUCCION DE GRAFICOS DE  
TILLMANS**

Tesis que presenta  
**I.Q. MARIA DEL CARMEN GONZALEZ CORTES**

para la obtención del grado de

**MAESTRIA EN QUIMICA**

**Julio, 1997**

Asesor  
**M. en C. Icela Dagmar Barceló Quintal**

**UNIVERSIDAD AUTONOMA METROPOLITANA - IZTAPALAPA  
DIVISION DE CIENCIAS BASICAS E INGENIERIA**

---

A mi directora de tesis:

Un profundo agradecimiento a mi asesora, la M. en C. Icela Dagmar Barceló, porque sin su aceptación no hubiera concluido mi maestría, porque su apoyo me ha hecho ser mejor profesor y porque con sus conocimientos me fue posible desarrollar mi trabajo de tesis y concluirlo, además, porque siempre ha sido una amiga y compañera excelente.

Gracias.

---

Agradezco al Dr. Hugo Solís Correa el apoyo y  
las asesorías que hicieron posible  
la conclusión de la tesis.

Agradezco al Dr. Ignacio Allende Abreu, por el apoyo  
y el tiempo que dedicó a la realización  
de este trabajo.

---

Le doy las gracias al apoyo brindado por parte del Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares, por medio del M. en E. Pedro Avila, por la ayuda prestada en la preparación de muestras de especiación.

Le doy las gracias al Centro Interamericano de Recursos del Agua, por medio del Dr. Juan Antonio García Aragón, por la ayuda prestada para la toma de muestras y análisis de oxígeno disuelto.

---

A todos los compañeros y amigos del laboratorio de Electroquímica y  
Especiación de Metales Pesados de la UAM-Azcapotzalco,  
especialmente a Julisa García, por su apoyo.

---

A mi familia:  
A mi padre por su apoyo.  
A mi madre por su ejemplo.  
A mis hermanos por que sin ellos no hubiera podido concluir.  
A mis hermanas por su apoyo y su aliento para concluir lo empezado.  
A mis sobrinos y sobrinas, para que logren concluir  
lo que se propongan en la vida.

---

# Índice

|   |    |
|---|----|
| Justificación   | i  |
| Objetivos   | ii |
| <b>Capítulo 1</b> Introducción  | 1  |
| 1.1 La problemática de la Presa José Antonio Alzate   | 2  |
| 1.2 Características de la Presa Alzate  | 4  |
| 1.3 Antecedentes geológicos de la presa   | 6  |
| <b>Capítulo 2</b> Antecedentes  | 8  |
| 2.1 Clasificación de las aguas naturales  | 10 |
| 2.2 Contaminación   | 17 |
| 2.2.1 Fuentes de contaminación  | 20 |
| 2.3 Calidad del agua  | 23 |
| 2.3.1 Factores biofísicoquímicos que afectan la calidad del agua  | 24 |
| <b>Capítulo 3</b> Fundamentos Teóricos  | 30 |
| 3.1 Estabilización química  | 31 |
| 3.1.1 Dureza  | 31 |
| 3.1.2 Alcalinidad   | 33 |
| 3.2 Condiciones de equilibrio   | 35 |
| 3.2.1 El CO <sub>2</sub> de equilibrio  | 35 |
| 3.2.2 Equilibrio del agua   | 36 |
| 3.2.3 Equilibrio Ácido Base   | 37 |
| 3.2.4 Equilibrio múltiple   | 38 |
| 3.2.5 Producto de solubilidad del CaCO <sub>3</sub>   | 40 |
| 3.2.6 Concentración iónica  | 40 |
| 3.2.7 Electroneutralidad  | 43 |
| 3.3 Determinación de la Agresividad de un agua  | 45 |
| 3.3.1 Diagramas de equilibrio   | 46 |
| 3.3.2 Índices de Langelier para la clasificación cualitativa de las aguas incrustantes y agresivas  | 50 |
| 3.3.3 Relación de los índices de Langelier y la corrección por fuerza iónica de Mojmir Mach para la determinación cuantitativa de la agresividad de las | 56 |

---

|                   |  |            |
|-------------------|--|------------|
| <b>Capítulo 4</b> | <b>Componentes principales de un cuerpo de agua</b>  | <b>60</b>  |
| 4.1               | Materia orgánica   | 60         |
| 4.2               | Componentes inorgánicos  | 64         |
| 4.2.1             | Especies neutras   | 64         |
| 4.2.2             | Especies aniónicas   | 65         |
| 4.2.3             | Metales  | 69         |
| 4.2.3.1           | Influencia de la estructura de un elemento metálico en su polaridad                        | 69         |
| <br>              |  |            |
| <b>Capítulo 5</b> | <b>Especiación Química</b>   | <b>76</b>  |
| 5.1               | Modelamiento experimental  | 82         |
| 5.1.1             | Técnica de intercambio catiónico   | 86         |
| 5.2               | Modelamiento en función de datos teóricos  | 90         |
| 5.2.1             | Teorías ácido-base   | 91         |
| 5.2.1.1           | Modelamiento ácido-base de Pearson   | 91         |
| 5.2.1.2           | Estabilidad de los complejos metálicos   | 94         |
| 5.2.2             | Condiciones de equilibrio  | 101        |
| 5.2.2.1           | Efecto del pH en el equilibrio   | 102        |
| 5.2.2.2           | Obtención de concentraciones de iones complejos  | 105        |
| <br>              |  |            |
| <b>Capítulo 6</b> | <b>Metodología analítica</b>   | <b>107</b> |
| 6.1               | Metodología de muestreo en la presa José Antonio Alzate                                    | 107        |
| 6.1.1             | Características más relevantes de los muestreos  | 108        |
| 6.1.2             | Conservación de las muestras   | 109        |
| 6.1.3             | Pruebas de campo en la presa José Antonio Alzate en el Estado de México                    | 109        |
| 6.2               | Pruebas efectuadas en el laboratorio a las muestras provenientes de la presa "J.A. Alzate" | 112        |
| 6.2.1             | Oxígeno disuelto   | 112        |
| 6.2.2             | Demanda Bioquímica de Oxígeno y Demanda Química de Oxígeno                                 | 113        |
| 6.2.2.1           | Demanda Bioquímica de Oxígeno  | 113        |
| 6.2.2.2           | Demanda Química de Oxígeno   | 114        |
| 6.2.3             | Alcalinidad y dureza   | 116        |
| 6.2.3.1           | Determinación de alcalinidad   | 116        |

---

|   |     |
|---|-----|
| 6.2.3.2 Determinación de dureza   | 117 |
| 6.2.4 Aniones   | 118 |
| 6.2.4.1 Determinación de fosfatos   | 118 |
| 6.2.4.2 Determinación de sulfatos   | 118 |
| 6.2.4.3 Determinación de nitratos   | 120 |
| 6.2.4.4 Determinación de nitritos   | 121 |
| 6.2.4.5 Determinación de cloruros   | 122 |
| 6.2.4.6 Determinación de ciannuros  | 123 |
| 6.2.4.7 Determinación de sulfuros   | 125 |
| 6.2.5 Metales totales y metales totales disueltos   | 126 |
| 6.2.5.1 Metales totales   | 127 |
| 6.2.5.2 Metales disueltos y metales totales disueltos   | 128 |
| 6.2.5.2.1 Metales disueltos   | 128 |
| 6.2.5.2.2 Metales totales disueltos   | 129 |
| 6.2.6 Especiación   | 129 |
| 6.2.6.1 Modelamiento experimental   | 129 |
| 6.2.6.2 Modelamiento teórico  | 132 |
| <br>  |     |
| <b>Capítulo 7</b> Resultados analíticos   | 138 |
| <br>  |     |
| 7.1 Trabajo de campo  | 138 |
| 7.2 Alcalinidad de las muestras de agua en los diferentes<br>sitios de la presa                         | 140 |
| 7.3 Resultados de las concentraciones de los diferentes aniones<br>y cationes monovalentes y divalentes | 147 |
| 7.4 Obtención de los índices de saturación de Langelier para evaluar<br>cualitativamente el agua        | 167 |
| 7.5 Resultados de la agresividad en cada sitio de la pres J.A. Alzate,<br>por medio de fuerza iónica    | 175 |
| 7.6 Especiación   | 198 |
| 7.6.1 Modelamiento experimental   | 198 |
| 7.6.2 Modelamiento teórico  | 206 |
| <br>  |     |
| <b>Capítulo 8</b> Análisis de resultados y conclusiones   | 238 |
| <br>  |     |
| <b>Bibliografía</b>   | 259 |

---

## JUSTIFICACIÓN

En el tramo comprendido entre el nacimiento del río Lerma y la presa José Antonio Alzate, se encuentran ubicados importantes desarrollos industriales con un número aproximado de 2500 industrias<sup>1</sup>, tabla 1, las cuales vierten sus aguas residuales a este río. También diez kilómetros antes de la entrada de las aguas del río Lerma a la presa Alzate, se reciben las aportaciones de aguas residuales de la ciudad de Toluca.

**Tabla 1.** Distribución de los tipos de industria en el corredor industrial Lerma-Santiago.

| Tipo de industria        | Cantidad aproximada |
|--------------------------|---------------------|
| Industria alimenticia    | 200                 |
| Industria cementera      | 40                  |
| Industria química        | 150                 |
| Industria metal-mecánica | 300                 |
| Industria automotriz     | 70                  |
| Industria Textil         | 300                 |
| Industria del acero      | 100                 |
| Industria de polímeros   | 400                 |
| Industria del vidrio     | 50                  |
| Otras                    | 890                 |

Los resultados de la Red Nacional de Monitoreo establecen que la calidad del agua es de alta contaminación, principalmente en el tramo comprendido entre la carretera México-Toluca y la presa Alzate. Asimismo, el agua proveniente de esta presa se utiliza para regar los plantíos que se encuentran alrededor de la misma.

## OBJETIVO GENERAL

Evaluación del grado de agresividad en las aguas provenientes de la cuenca del río Lerma en el Estado de México, principalmente en las diferentes zonas de la presa "José Antonio Alzate" mediante el diseño de los gráficos de Tillmans, índices de saturación de Langelier, gráficos de fuerza iónica y el empleo de metodologías de especiación química.

## OBJETIVOS ESPECÍFICOS

1. Ubicar los sitios para el establecimiento de las campañas de muestreo.
2. Determinar la concentración total de iones  $M^+$ ,  $M^{2+}$ ,  $M^-$  y  $M^{2-}$  como por ejemplo  $Na^+$ ,  $Ca^{2+}$ ,  $Mg^{2+}$ ,  $Cu^{2+}$ ,  $Mn^{2+}$ ,  $Fe^{2+}$ , etc. y  $Cl^-$ ,  $NO_3^-$ ,  $HCO_3^-$ ,  $OH^-$ ,  $CO_3^{2-}$ ,  $SO_4^{2-}$ , etc.
3. Determinar mediante la metodología de especiación los cationes  $M^{2+}$  con el objeto de conocer las diferentes especies que se pueden formar en estado disuelto.
4. Obtener los valores de la fuerza iónica de los cationes y aniones involucrados en el estudio.
5. Obtener los valores de  $CO_2$  en exceso con el cuerpo de agua monitoreado de varios sitios.
6. Obtener a través de las constantes de equilibrio y los resultados del punto 2: las curvas de equilibrio, las curvas de pH y las de evolución con  $CaCO_3$ ,  $Ca(OH)_2$  y aire, para caracterizar la naturaleza del agua y la magnitud de su agresividad, ya que contienen altas concentraciones de contaminantes.
7. Construir con los datos de los puntos 2, 4, 5 y 6 los gráficos de Tillmans, Langelier y Fuerza iónica para la cuenca del río Lerma, principalmente en zonas posteriores al corredor industrial, en el vertedero de la presa "José Antonio Alzate" y en el agua de dicha presa.
8. Establecer y optimizar algún diagrama de especiación para la identificación de las especies que los metales  $M^{2+}$  puedan formar con materia orgánica soluble, principalmente ácidos fúlvicos, ya que servirán de base para un estudio posterior del efecto e influencia que puedan aportar a los procesos de sedimentación

## INTRODUCCIÓN

Los vínculos íntimos y recíprocos que unen a fauna y flora, y el conjunto de los seres vivos con su medio físico, forman la sustancia misma de lo que se llama el equilibrio de la naturaleza. Todo lo que afecta a un componente cualquiera de ese equilibrio es susceptible de perjudicar a una parte, a veces incluso a todo el conjunto del sistema.

El agua, es el elemento que constituye la esencia misma de la vida sobre el planeta, es decir, es el recurso principal que permite la supervivencia de los seres vivos, sin ella la vida es imposible, a pesar de ello parece que al hombre no le importa envenenar sistemáticamente los cursos fluviales, los mares y cualquier otro tipo de receptáculo acuoso.

En los últimos tiempos la mayoría de los cuerpos de agua natural y principalmente en el país han sido contaminados. Es importante encontrar alguna forma, por un lado de determinar el grado y tipo de contaminación, así como los efectos que tiene en el medio que la rodea; y por otro buscar métodos para la conservación, la eliminación de impurezas y el rescate de los diferentes recursos acuíferos.

El estudio del comportamiento fisicoquímico y biológico de los cuerpos de agua naturales es difícil, debido a la variedad de interacciones que se llevan a cabo entre los diferentes compuestos inorgánicos y orgánicos, entre estos y la biota propia del lugar<sup>2</sup>. Si además, los cuerpos de agua están contaminados, el estudio es todavía más complejo, debido a que el material antropogénico al interaccionar con el geogénico incrementan las variedades fisicoquímicas y biológicas,

cambiando las propiedades como: la cantidad de oxígeno disuelto, el pH, la temperatura, etc., generando especies químicas tóxicas para la flora y fauna, disminuyendo la calidad del agua e incluso llegando a eutroficar -cuerpos de agua con altos contenidos de nitrógeno, fosfatos y otros nutrientes- gravemente el medio acuoso conduciéndolo a su pérdida y desaparición.

Los metales pesados se encuentran difundidos en la naturaleza en forma de sales inorgánicas, formando parte de los minerales, pero sólo las formas solubles tienden a emigrar por la acción pluvial hasta llegar a los ríos y lagos, donde se suman a la contaminación causada por el hombre.

En este trabajo se presenta un estudio del comportamiento de los iones metálicos que se encuentran disueltos en la presa "José Antonio Alzate", la cual se encuentra ubicado sobre el río Lerma en el tramo comprendido entre la carretera Toluca-Naucalpan y la población de Ixtlahuaca, a 25 Km al norte de Toluca.

El presente estudio esta basado en: el diseño y obtención de diagramas de equilibrio de Tillmans, índices de saturación de Langelier, diagramas en función de la fuerza iónica y metodologías de especiación química; ya que mediante estos conceptos se pueden determinar por un lado, las especies involucradas en los procesos, esto es, la especiación química nos proporciona información acerca de la naturaleza y propiedades de las posibles especies químicas presentes y, por otro lado, a través de los diagramas indicados y el índice de saturación se puede caracterizar la calidad de un cuerpo de agua.

### **1.1 La Problemática de la Presa José Antonio Alzate.**

El gran desarrollo social y económico registrado en el Estado de México durante el transcurso de las últimas décadas, tiene como consecuencia el constante incremento en la demanda de agua para los diferentes usos; doméstico, agrícola, industrial y público; además de la creciente contaminación de las aguas superficiales y subterráneas, que hacen más difícil satisfacer cada día su demanda, motivo por el cual se tiene que sujetar a tratamientos cada vez más laboriosos y costosos para poderse reutilizar.

Siendo Toluca una ciudad activa, con una gran producción agrícola y un acelerado crecimiento urbano-industrial, están siendo sobreexplotados sus mantos acuíferos y al mismo tiempo contaminando el río Lerma debido a la

descarga de aguas residuales provenientes de la ciudad de Toluca que transporta el desecho de industrias de diferentes ramas, localizadas en el corredor industrial "Toluca-Lerma". Dichas aguas contaminadas, reciben un tratamiento biológico en la planta tratadora de aguas negras EPCCA que se localiza en los límites de la ciudad de Toluca para inmediatamente después ser vertidas al río Lerma, el cual se encuentra en condiciones sépticas durante todo el año y que además de continuar como un colector público de aguas residuales, va perdiendo los signos de vida acuática, de esta manera su utilización puede ocasionar perjuicios tanto al suelo agrícola de la región, como al rendimiento y calidad de los cultivos.

Es importante señalar la competencia que se establece por el uso de agua, tanto por la ciudad, como por la industria y la agricultura, pues las tres necesitan cada vez mayores cantidades; sin embargo, esta última tiende a disminuir e incluso a desaparecer, considerándose como una consecuencia de la falta de uso adecuado de los recursos acuíferos por lo que se ha propiciado el uso de las aguas negras del río Lerma, las cuales aparentemente son benéficas, pero también llevan al suelo y a los cultivos contaminantes tóxicos.

Las descargas no controladas de aguas residuales, municipales e industriales sin tratar o parcialmente tratadas y recientemente los escurrimientos de las aguas utilizadas en el riego agrícola, implican la contaminación continua de las aguas haciendo cada vez más difícil su aprovechamiento para usos múltiples.

Se tienen innumerables ejemplos en países altamente desarrollados en donde, debido principalmente al incremento industrial, las aguas receptoras de los desechos líquidos han cambiado sus características físicas, químicas y biológicas a tal grado, que en ocasiones quedan relegadas a servir únicamente como canales de aguas residuales, lo cual hace cada vez más difícil su aprovechamiento. En otros casos se reducen las aplicaciones del agua, viéndose afectada la cuenca en sus aspectos socioeconómicos y sobre todo de salubridad.

La contaminación por metales pesados está asociada usualmente con las descargas municipales y en los procesos industriales que van directamente a los mantos acuíferos, sin embargo se relaciona también con la lixiviación de desechos, descargas sólidas y por el intemperismo de las rocas, que aportan materiales al sistema fluvial. Dentro de los desechos antropogénicos que alcanzan esta zona, **los metales pesados**, tienen un lugar aparte, ya que su presencia no es evidente a simple vista, estos metales utilizados en procesos

industriales y emitidos al ambiente, alteran los sistemas acuáticos en los que son atrapados y acumulados debido a la dinámica de sedimentación.

El presente trabajo está orientado hacia el estudio en parte de la problemática ambiental que presenta la Presa José Antonio Alzate, la cual, al igual que la mayoría de los mantos acuíferos, recibe aportes de agua residuales en su mayoría sin tratamiento. Dentro de los desechos antropogénicos que transporta el río Lerma están los metales pesados, los cuales en sus formas disueltas participan además del calcio, magnesio, sodio y potasio a la fuerza iónica y por lo tanto a la conductividad, que posteriormente junto con una variedad de aniones y tomando en cuenta la cantidad de oxígeno disuelto, el pH, la temperatura, etc, provocan que el agua pueda ser de naturaleza agresiva (aguas con bajo contenido de  $\text{CO}_2$ ) o incrustante (aguas con altas concentraciones de  $\text{CO}_2$ ) ; además de que son acumulados en la presa, por lo que están presentes en los sedimentos de la misma.

## 1.2 Características de la Presa Alzate.

La presa "José Antonio Alzate"<sup>1</sup>, como se indicó anteriormente se encuentra ubicada sobre el río Lerma en el tramo comprendido entre la carretera Toluca-Naucaupan, en los municipios de Ixtlahuaca y Almoloya de Juárez aproximadamente a 25 Km al norte de Toluca. La presa se construyó de 1960 a 1962 por la compañía constructora Omega S.A. Este vaso se forma al embalsar al río Lerma por medio de una cortina alta de 19 m (cota vertedor 2565.5 m.s.n.m.), 30 km aguas abajo del puente sobre la carretera México Toluca, la capacidad total del embalse es de 49 Mm<sup>3</sup>.

El río Lerma<sup>3</sup> nace en las lagunas del Lerma, situadas cerca de la ciudad de Toluca, y drena una gran región de la altiplanicie central, muy densamente poblada debido a su clima favorable ya que reúne condiciones propicias para el desarrollo de una agricultura intensiva y diversificada. Por el área de su cuenca, este río es el segundo de México en importancia y sólo es superado por la cuenca mexicana del río Bravo. Por su situación geográfica con relación a los centros más poblados del país y por las necesidades que satisface, el Lerma es el más importante de México. El régimen errático y torrencial de esta corriente impide su aprovechamiento en estado natural, ya que la mayor parte del escurrimiento está concentrada de junio a octubre. El escurrimiento medio anual

en el periodo 1947-1961 a la altura de San Bernabé fue de 152 millones de  $m^3$ , con un máximo de 400 millones de  $m^3$  en 1958 y un mínimo de 51 millones de  $m^3$  en 1950.

Al estudiar las posibilidades de almacenamiento de la cuenca alta del río Lerma, se localizó el vaso de San Bernabé, que contaba con dos sitios a primera vista favorables para la construcción de una presa de almacenamiento. El sitio inferior, ubicado en las inmediaciones del cruce de la carretera Toluca-Palmillas presentó condiciones favorables y con mayor capacidad, pero al explorarlo en detalle presentó condiciones geológicas desfavorables que obligaron a desecharlo. El sitio superior localizado a unos 5 Km aguas arriba del anterior, en las inmediaciones de la ex-hacienda de Taboada y donde finalmente se construyó la presa, reúne las mejores condiciones generales y su geología es más favorable que la del sitio inferior, permitiendo la construcción de una cortina más económica. La presa J.A. Alzate forma parte del sistema de almacenamiento para control y aprovechamiento integral del río Lerma en usos múltiples y reviste especial importancia por ser la obra clave de la cuenca, donde se inicia el control del río.

La presa J. A. Alzate tuvo como objetivo básico<sup>3</sup> de construcción el control y aprovechamiento del río Lerma en:

- Riego de 5 400 Ha. de terrenos del valle de Temascalcingo.
- Riego de 2 400 Ha. de terrenos del valle de Ixtlahuaca.
- Regularización de las avenidas para proteger contra inundaciones a las poblaciones y zonas agrícolas ribereñas.
- Retención de los acarreos del río para evitar la sedimentación aguas abajo y reducir los gastos de conservación.
- Desarrollo de la fauna acuática, que se pensó que pudieran llegar a ser un alimento básico para la población regional.
- Fines recreativos, que constituirían una importante fuente de ingresos para la región

En la tabla 1.1 se indican las características de este embalse.

De lo anterior se deduce que el volumen útil es de  $27.3 \text{ Mm}^3$  y que el volumen muerto destinado a almacenar los azolves es de  $8 \text{ Mm}^3$ . Aunque no existen datos, se estima que el volumen actual de azolves es superior a  $1 \text{ Mm}^3$ .

### 1.3 Antecedentes geológicos de la presa <sup>3</sup>

El valle donde se construyó la presa corresponde a una zona lacustre, actualmente cortada por numerosos arroyos (datos de 1962) afluentes del río Lerma, cuyo nacimiento se tiene en la estribación oriental de la Sierra de las Cruces y en las áreas pantanosas aledañas a la población del Lerma; las formaciones lacustres están constituidas por material de origen ígneo, piroclástico o producto de descomposición de las mismas, todos depositados en un medio lacustre generalmente tranquilo, presentándose en estos sedimentos, materiales de origen orgánico; las formaciones son relativamente horizontales, indicio de no estar afectadas por tectonismo regional; únicamente la presencia de antiguos conos volcánicos o productos de estos, afecta los sedimentos localmente.

Tabla 1.1. Características del embalse José Antonio Alzate.

| Área (Ha) | El (m.s.n.m.) | Vol. (Mm <sup>3</sup> ) | Característica |
|-----------|---------------|-------------------------|----------------|
| 1423.00   | 2566.92       | 49.00                   | Nivel máximo   |
| 1049.00   | 2565.50       | 35.30                   | Nivel vertedor |
| 290.00    | 2561.20       | 8.00                    | Nivel mínimo   |

m.s.n.m.- metros sobre el nivel del mar.

Mm<sup>3</sup>.- millones de metros cúbicos.

La obra se desplantó sobre un material de lahar constituido por un conglomerado brechoso cementado y compacto, presentando dos horizontes bien definidos, cuyo contacto irregular es impermeable. El cuerpo superior, conglomerático, descansa sobre una toba arcillosa compacta e impermeable.

El vaso en su totalidad está constituido por sedimentos lacustres que estaban cubiertos por una capa de suelo vegetal de espesor variable, los sedimentos lacustres tienen variaciones en cuanto a granulometría y permeabilidad, pero la capa de suelo vegetal produjo el efecto de una cobertura impermeable. Las condiciones geohidrológicas del vaso son un factor importante, ya que existen básicamente los siguientes tipos de acuíferos: los de **aguas freáticas**, que se encuentran sin presión y ligeramente arriba del nivel de acarreo recientes y los **acuíferos profundos** que se pueden considerar de dos tipos: poco profundos, a escasa presión y los profundos con una presión mayor.

Actualmente el vaso tiene una capacidad total de 35.5 Mm<sup>3</sup>, que incluye 6 Mm<sup>3</sup> para depósito de azolve<sup>3</sup>. El lago formado por el embalse tiene un área de 1,050 Ha. Actualmente esta presa está funcionando como una **laguna de oxidación** y a su vez como **laguna de estabilización**<sup>4</sup> de las descargas que provienen del río Lerma, generando una alta eutroficación.

Los resultados de la Red Nacional de Monitoreo<sup>5</sup> establecen que la calidad del agua es de alta contaminación, principalmente en el tramo comprendido entre la carretera México-Toluca y la presa Alzate. Entre 1992 y 1993 el Gobierno del Estado de México, por conducto de la Secretaría de Ecología y la Dirección General de Estudios y Proyectos Ecológicos, **realizó un diagnóstico preliminar ambiental de la presa y en este programa no se caracterizaron las mediciones de la distribución de metales pesados tanto en estado disuelto como en los sedimentos y por lo tanto no existe ningún estudio de su movilidad en general.**

## ANTECEDENTES

El agua es la sustancia más extraordinaria y más compleja conocida por el hombre; sus propiedades fisicoquímicas se pueden observar en la tabla 2.1.

Tabla 2.1. Propiedades del agua pura.

| Agua en estado líquido  |                                   |
|-------------------------|-----------------------------------|
| Propiedad               | Valores                           |
| Olor                    | inodoro                           |
| Color                   | incolore                          |
| Sabor                   | insípido                          |
| Peso molecular promedio | 18 g/mol                          |
| Momento dipolar         | $1.84 \times 10^{-18}$ e.s.u.     |
| Constante dieléctrica   | 80                                |
| Densidad                | 1.0 g/cm <sup>3</sup>             |
| Punto de ebullición     | 100°C (a nivel de mar)            |
| Punto de fusión         | 0°C (a nivel de mar)              |
| Gravedad específica     | 1.0 ( a 4°C)                      |
| Difusividad térmica     | 0.00143 cm <sup>2</sup> /s a 20°C |
| Viscosidad cinemática   | 0.01004 cm <sup>2</sup> /s a 20°C |
| Conductividad térmica   | 0.00599 cm/°C a 20°C              |
| Calor específico        | 1.0 cal/g°C                       |
| Calor de evaporación    | 540 cal/g a 100°C y 1 atm.        |
| Calor de fusión         | 79 cal/g                          |
| Tensión superficial     | 73 dina/cm a 20°C                 |
| Viscosidad dinámica     | 0.01 poise a 20°C                 |
| Presión de vapor        | 760 mmHg a 100°C a nivel de mar   |

Las moléculas del agua líquida ocupan un volumen de  $2.97 \times 10^{-11} \text{ m}^3$ , se presentan ya sea en forma de unidades o en grupos de moléculas  $\text{H}_2\text{O}$  o como iones hidrógeno o hidróxido. Aún cuando se encuentran en íntimo contacto entre sí, su arreglo es no-direccional y se encuentra en libertad de moverse. El espacio medio de los poros entre las moléculas es de 36.7 % aproximadamente.

La estructura singular del agua, figura 2.1, según el modelo de Repulsión de Pares de Electrones de la Capa de Valencia (RPECV)<sup>6,7</sup> genera una estructura en forma de V. Los átomos de hidrógeno tienen una densidad de carga positiva mientras que el átomo de oxígeno tiene una densidad de carga negativa. Debido a esta distribución de carga, la molécula de agua es una molécula fuertemente polar. Los dipolos de la molécula de agua se atraen entre sí y forman agregados a través de enlaces que se conocen como puente de hidrógeno<sup>8</sup>, figura 2.2.

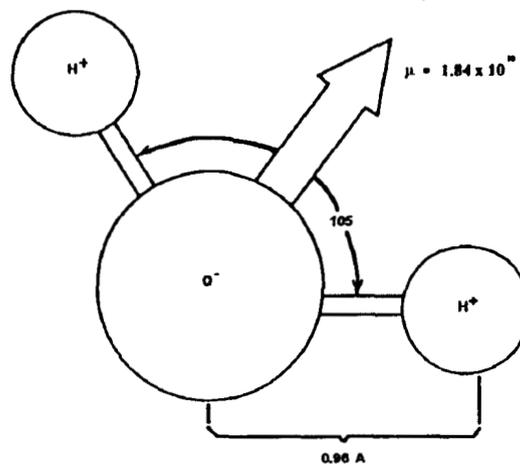
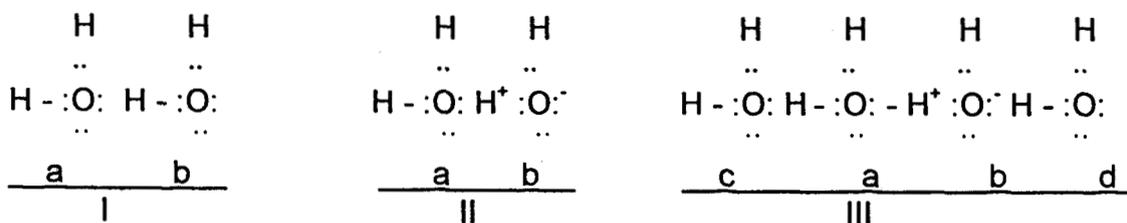
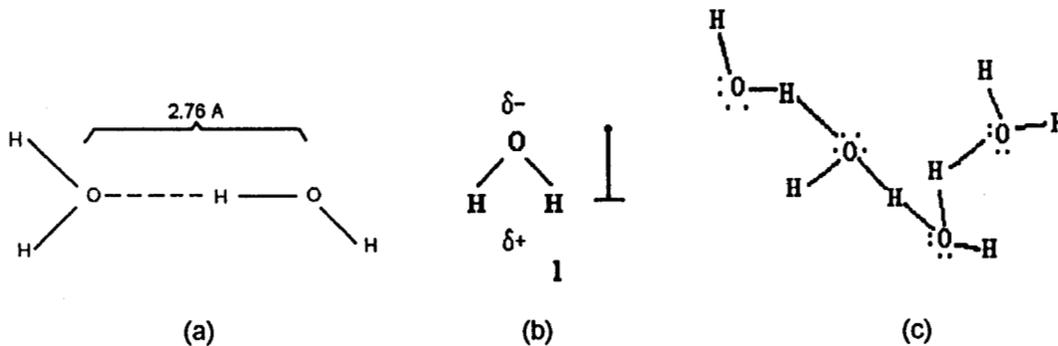


Figura 2.1. Momento dipolar de la molécula de agua

La fuerza del enlace por puente de hidrógeno en el agua se ve incrementada por las diferencias en la polaridad y se ve fortalecida por varias configuraciones posibles de resonancia:





**Figura 2.2.** Puente de hidrógeno formado entre moléculas de agua, (a) distancia oxígeno-hidrógeno, (b) densidades de carga, (c) puente de hidrógeno

El agua tiene algunas propiedades fisicoquímicas muy poco comunes en relación con algunos otros líquidos<sup>9,10,11</sup>, tabla 2.2. Estas propiedades se entienden con facilidad en términos de la elevada electronegatividad del átomo de oxígeno.

El agua exenta de sustancias disueltas conduce muy poco. A 25°C, un dm<sup>3</sup> de agua contiene solamente 10<sup>-7</sup> moles de iones H<sub>3</sub>O<sup>+</sup> y un número igual de iones OH<sup>-</sup> esto es, el pH del agua pura es 7.

El agua disuelve cierta cantidad de casi todos los sólidos o gases con los que se pone en contacto. En el ciclo hidrológico<sup>9,11</sup>, figura 2.3, se puede observar que el agua establece contacto con los gases en la atmósfera y los minerales que hay en los dos primeros kilómetros de la corteza terrestre<sup>5</sup>.

De lo anterior se comprende que la palabra agua se utiliza como sinónimo de la solución/suspensión<sup>12</sup> acuosa diluida de compuestos orgánicos e inorgánicos que constituyen los diversos tipos de sistemas acuáticos.

## 2.1 Clasificación de las aguas naturales:

De acuerdo con su origen, los suministros de agua se clasifican en tres categorías<sup>13</sup>:

Tabla 2.2. La importancia de las propiedades del agua.

| Propiedad  | Importancia   |
|--|---|
| Estado líquido en comparación con los demás compuestos del mismo grupo del oxígeno | Provee el medio para la vida  |
| Excelente solvente   | Transporte de nutrientes y productos de desecho en los procesos biológicos  |
| Alta capacidad calorífica, mayor que otros líquidos a excepción del amoníaco       | Estabilización de la temperatura de organismos y regiones geográficas   |
| Alto calor latente de fusión, mayor que otros líquidos a excepción del amoníaco.   | Estabiliza la temperatura del punto de congelamiento, esto es, modera efectos y tiende a estabilizar el estado líquido. |
| Alto calor de evaporación, mayor que cualquier otro material.                      | Determina la transferencia de calor y moléculas de agua entre la atmósfera y el cuerpo de agua.                         |
| Alta tensión superficial, mayor que cualquier otro líquido.                        | Importante en los fenómenos superficiales, formación de gotas en la atmósfera.  |
| Máxima densidad como un líquido a 4°C  | Congelamiento de la superficie y controla la distribución y circulación de la temperatura en los cuerpos de agua.       |
| Alto valor de la constante dieléctrica en el líquido puro.                         | Alta solubilidad de sustancias iónicas y su ionización en solución  |
| Elevado grado de hidratación   | Moviliza los contaminantes ambientales.   |
| Pequeño grado de disociación   | Provee de un medio neutro con formación de pequeñas cantidades de $H^+$ y $OH^-$  |
| Alta transparencia en las zonas visible y UV cercana del espectro electromagnético | Ausencia de color   |
| Elevada conductividad calorífica   | Puede proveer un mecanismo importante de transferencia de calor.  |

- Aguas superficiales<sup>14,15</sup>

Las aguas superficiales comprenden los ríos, arroyos (escurrimientos superficiales), etc., los cuales presentan una calidad variable a lo largo del curso. En un movimiento relativamente más lento, se encuentran: los embalses, lagos, mares u océanos, éstos tienen una calidad relativamente uniforme. Finalmente, en estado sólido, se encuentra acumulada en grandes cantidades, como hielo y nieve.

Su calidad depende también de las condiciones estructurales del suelo y tipo de vegetación. Las sustancias minerales en disolución se deben al contacto del

agua con la superficie y también al agua subterránea que recibe, aumentando la alcalinidad ( $\text{CO}_3^{2-}$ ,  $\text{HCO}_3^-$ ) y la dureza ( $\text{Ca}^{2+}$ ,  $\text{Mg}^{2+}$ ) presentes en ella.

Debido a la presencia de  $\text{CO}_2$  en las precipitaciones y arrastre de materia orgánica, los carbonatos están siempre presentes en las aguas naturales. Los sulfatos provienen de yacimientos de yeso y de las áreas de cultivo intensos con alta tasa de evaporación, que hace depositar sales sobre el suelo.

Los cloruros aparecen en las aguas superficiales en cantidades más o menos reducidas, aumentando su proporción en áreas con sedimento de origen marino. Los nitratos se encuentran en pequeñas cantidades, aunque ciertos tipos de terrenos originan mayores contenidos. El calcio, magnesio, sodio y potasio son constituyentes comunes de las aguas superficiales. Desde el punto de vista sanitario, este tipo de aguas son susceptibles de ser contaminadas por agua cloacal o de residuos industriales, pero están sujetos a una purificación natural.

Los embalses tienen características similares a los almacenamientos naturales; normalmente, la mejor calidad del agua se encuentra a media profundidad.

Efectos que dificultan el tratamiento de las aguas superficiales<sup>15,16</sup>.

a) Precipitaciones pluviales.

La dilución repentina de un río mediante una fuerte lluvia puede ser un factor desorganizador en una planta de tratamiento de agua. En el caso del tratamiento de agua de ríos cercanos al mar, las mareas crean otra influencia importante en la calidad del agua superficial puesto que hacen disminuir, y a veces invierten, el flujo normal del río. Esto es particularmente notorio durante los períodos de poca lluvia.

b) Bajas temperaturas.

Otra característica de las aguas superficiales, es el cambio de temperatura durante las estaciones. Esto complica el tratamiento y afecta en particular el proceso de coagulación durante el invierno.

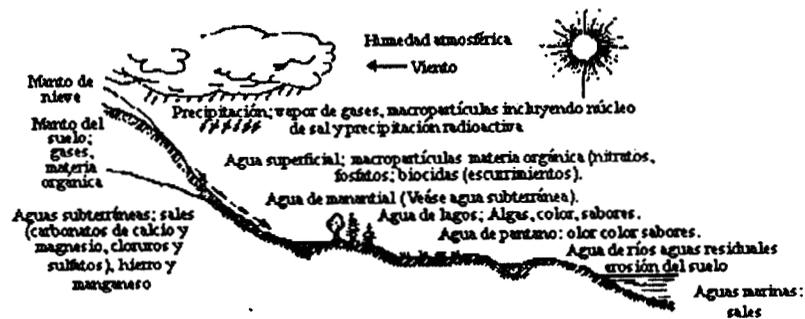
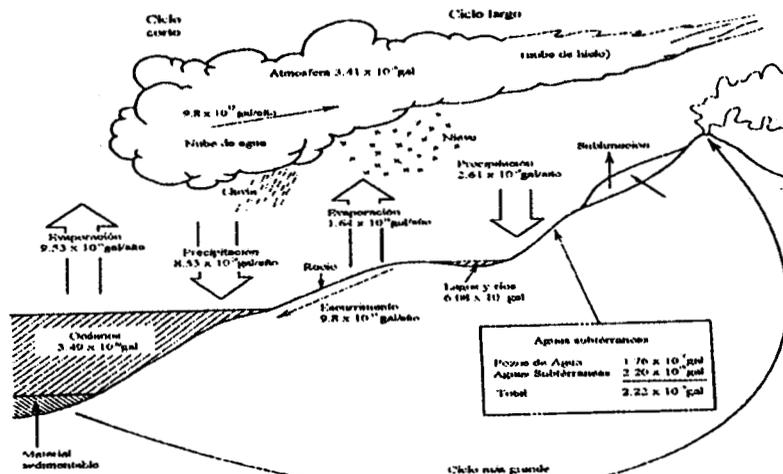
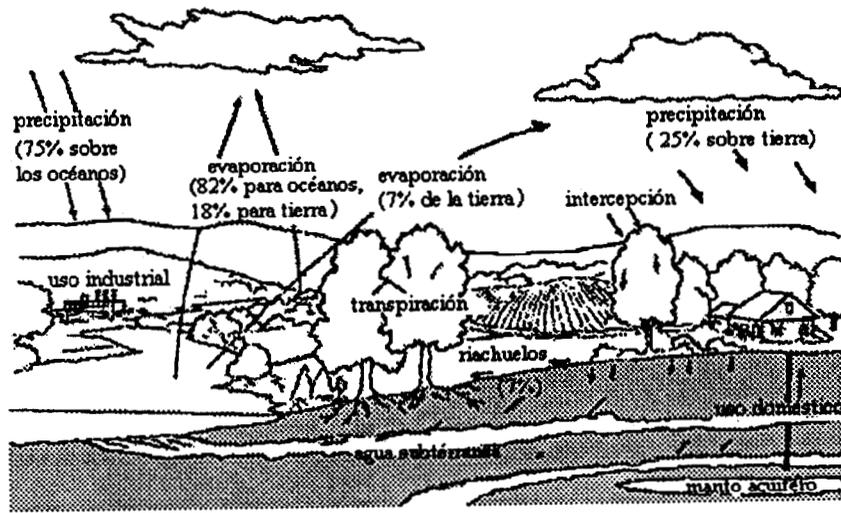


Figura 2.3. Ciclo hidrológico.

Las bajas temperaturas también crean problemas con tapones de aire en los filtros debido al aumento de la solubilidad de los gases y a la mayor viscosidad del agua.

c) Presencia de algas.

Cuando los contaminantes son biodegradables, la actividad bacteriana aumenta con la carga contaminante, tendiendo a reducir el nivel de oxígeno disuelto en la corriente; las algas producen oxígeno durante la fotosíntesis en el día y aumentando su producción hasta una sobresaturación en los días brillantes y soleados, decayendo durante la noche cuando el proceso se restringe. Este ciclo diurno afecta no sólo al oxígeno disuelto, sino también al dióxido de carbono y por lo tanto al pH. Esto puede tener una fuerte influencia en la coagulación de una fuente de agua en las plantas de tratamiento de agua municipales o industriales.

d) Vuelcos estacionales.

En los lagos templados con una profundidad mayor de 60 m, el agua del fondo tiene una temperatura de 4° C durante todo el año, siendo esta la temperatura de máxima densidad de un sistema acuoso. En la primavera, después del deshielo, la temperatura del agua superficial se incrementa de 0 a 4°, lo que provoca un aumento en la densidad del líquido; estos incrementos, generan una circulación vertical en el líquido. Después de este "vuelco de primavera", figura 2.4, el agua superficial se sigue calentando durante el verano, mientras que la densidad disminuye.

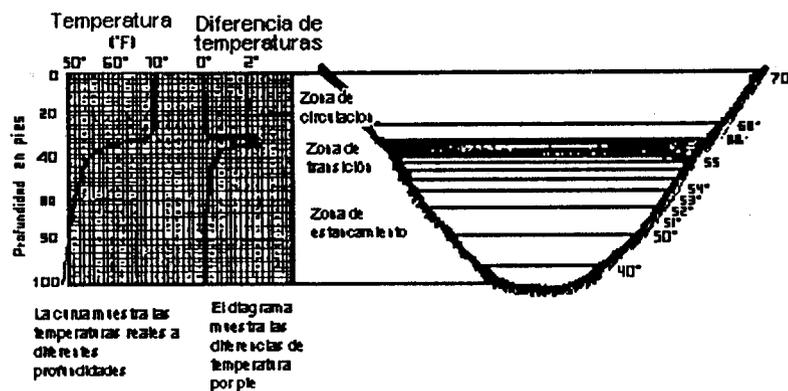


Figura.2.4. Diagrama generado por el "vuelco de primavera".

Nuevamente el enfriamiento durante el otoño y el invierno reduce la temperatura en la superficie hasta su máxima densidad y ocurre el "vuelco de otoño". Durante el período de estancamiento veraniego, la circulación vertical es provocada por el viento, pero esta fuerza no es suficiente para provocar el mezclado del agua del fondo, el hipolimnio. El patrón de circulación inducido por el viento se muestra en la figura 2.5.

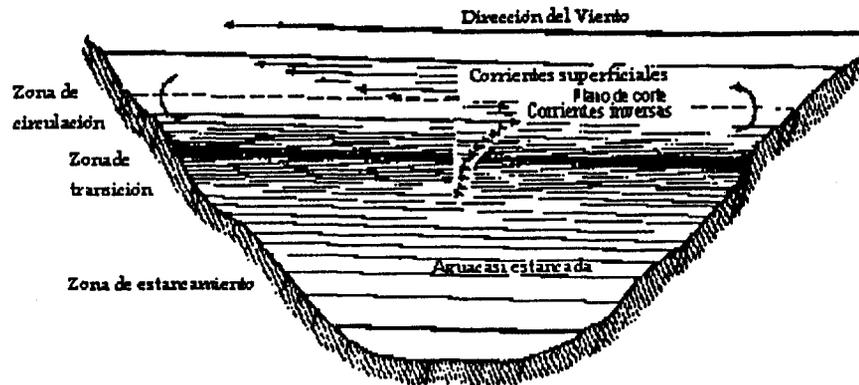


Figura 2.5. Circulación del agua en un lago inducida por el viento.

Entender estas características de los lagos es necesario para localizar adecuadamente las tomas de agua y las descargas de la misma. Ayuda a anticipar los cambios en el tratamiento del agua necesarios para cubrir los cambios en la composición causados por el rearrreglo y la circulación introducida por el viento.

- Aguas subterráneas <sup>15,16</sup>

El agua de precipitaciones, de cursos y masas de agua, penetra a través de las porosidades del suelo, mediante el proceso denominado infiltración.

El agua subterránea, al pasar a través de las capas del terreno, entra en contacto con sustancias orgánicas e inorgánicas. Su contenido, bajo de oxígeno disuelto y alto de bióxido de carbono, le permite disolver  $Fe^{2+}$  y  $Mn^{2+}$ , así como un efecto agresivo sobre el  $CaCO_3$  y permite la descomposición de materia orgánica, de donde asimila nitritos, nitratos y anhídrido sulfuroso.

Por lo general el agua subterránea, es clara, sin olor y más dura que la superficial, desde el punto de vista bacteriológico, son inocuas, si no han recibido descarga de agua contaminada.

- Aguas meteorológicas<sup>15</sup>.

En cuanto a las aguas de lluvia, son de mayor pureza química y física que las aguas superficiales o subterráneas. Puede encontrarse en estado de vapor de agua, como líquido suspendido en nubes, o cayendo en forma de lluvia o rocío, o en estado sólido (nieve y granizo). Retorna a la atmósfera por evaporación de la vegetación, superficie del suelo, del agua (ríos, lagos, océanos), mientras se precipita y por transpiración de los vegetales.

El agua de lluvia se caracteriza por su carencia de sales minerales, es blanda, saturada de oxígeno con alto contenido de CO<sub>2</sub> y por lo tanto corrosiva. Por sus características corrosivas debe evitarse el contacto con estanques, tuberías o accesorios de plomo.

Para que el agua sea aceptable y útil, en términos generales, debe encontrarse libre de sustancias venenosas o fisiológicamente indeseables.

## 2.2 Contaminación

La palabra contaminación se deriva de la raíz griega que significa corromper<sup>17</sup>. La contaminación de agua se considera como la introducción o emisión en ella de organismos patógenos o sustancias tóxicas que la hacen inapropiada para consumo humano o uso doméstico, entonces, la contaminación es un cambio indeseable en las características químicas, físicas y/o biológicas del agua que puede ser perjudicial, ahora o a futuro, para los seres vivos, procesos industriales y condiciones de vida. Los contaminantes son entonces, las desventajas que desacreditan y potencialmente limitan el uso de los recursos acuíferos.

Se ha demostrado que la contaminación en las fuentes acuíferas está relacionada con la lluvia, la naturaleza geológica de la cuenca colectora o del manto acuífero y las actividades de la naturaleza y de la población humana, es decir, los contaminantes ambientales, pueden ser de origen natural o antropogénico<sup>18,19</sup>, en el caso del agua se presentan ambos tipos.

La presencia de contaminantes en el agua puede causar problemas como:

1. olor desagradable
2. la estética del cuerpo de agua puede ser afectada
3. reducción en actividades pesqueras, agropecuarias o de comunicación
4. degradación de la calidad del agua respecto a sus usos.

Los contaminantes se clasifican en tres categorías<sup>13,18</sup>:

- Químicos.

Los contaminantes químicos comprenden tanto productos orgánicos como inorgánicos. El aspecto fundamental resultante de la contaminación por compuestos orgánicos es la disminución de oxígeno como resultante de la utilización del existente en el proceso de degradación biológica de dichos compuestos. Esta disminución de oxígeno disuelto lleva a perturbaciones indeseables del medio y de la biota en ella asentada.

- \* Compuestos orgánicos.

- ◊ Materias orgánicas biodegradables, es decir, aquéllas que pueden ser consumidas por los microorganismos que normalmente viven en el agua.
- ◊ Materias orgánicas no biodegradables como bolsas de plástico, algunos hidrocarburos, el poliestireno, los aceites lubricantes, el asfalto, etc.

- \* Metales pesados.

- ◊ Los iones de metales pesados, tóxicos para los seres humanos, son importantes contaminantes de este grupo. Se presentan en las aguas residuales industriales resultado de las operaciones de tratamiento de superficies, así como de las industrias de fabricación de pigmentos y pintura. Incluyen mercurio, arsénico, cobre, plomo, cadmio. Su presencia, aun en pequeñas cantidades (concentraciones mínimas detectables) pueden causar serios problemas.

- \* Sales de amonio

- ◊ Las sales de amonio se forman principalmente por la degradación de la materia orgánica en medios en los que hay poco aire.

- \* Detergentes, Fenoles y Plaguicidas

- Físicos.

Algunos contaminantes físicos incluyen:

- \* Cambio térmico
- \* Color

- \* Turbidez
  - \* Espumas
  - \* Radiactividad
- **Biológicos**  
Los contaminantes biológicos son los responsables de la transmisión de enfermedades en las aguas de abastecimiento.

Entonces, el grado de contaminación se puede medir física, química y biológicamente. Dependiendo de la naturaleza de las sustancias contaminantes y de los usos que la masa receptora de agua vaya a satisfacer se pueden hacer mediciones de turbidez, color, olor, nitrógeno, fósforo, demanda bioquímica de oxígeno (DBO), demanda química de oxígeno (DQO), materia orgánica, oxígeno disuelto y otros gases, sustancias minerales de muchas clases, bacterias y otros microorganismos y compuestos de flora y fauna acuática mayores.

Los contaminantes también se pueden dividir en <sup>17</sup>:

- **Biodegradables.**- Aguas negras domésticas
- **No degradables.**- Consisten en materiales hechos por el hombre que no se reincorporan al ambiente o lo hacen muy lentamente.
- **Tóxicos.**- Incluyen sustancias tales como sales de metales pesados y una cantidad creciente de compuestos químicos, industriales y agrícolas.

Tratar con contaminantes es un problema, aún cuando éstos están presentes en baja concentración, ya sea biodegradables o no, debido a que intervienen en los procesos bioambientales vitales y plantean una amenaza directa a la salud humana, sobre todo cuando estos contaminantes se consideran tóxicos.

En los cuerpos de agua, los contaminantes se pueden clasificar según la concentración que presentan en <sup>19</sup>:

- \* **Materia disuelta.**- Estos contaminantes se han dividido en cinco clases, las cuales se muestran en la tabla 2.3, la distribución se basa en las primeras cuatro clases, en los niveles de concentración y en la última es para materiales transitorios en el entorno acuático.

- \* Componentes insolubles, que en los suministros acuíferos se han dividido también en dos clases, como se muestra en la tabla 2.4.

**Tabla 2.3. Materiales solubles en los suministros acuíferos.**

| Clase 1 | Componentes primarios (concentraciones mayores a 5 mg/l)   |  |  |
|---------|--|--|--|
|         | Bicarbonato<br>Calcio<br>Cloruro   | Magnesio<br>Materia orgánica<br>Sílice | Sodio<br>Sulfato<br>Sólidos disueltos tot. |
| Clase 2 | Componentes secundarios (concentraciones entre 0.1 y 5 mg/l)   |  |  |
|         | Amoniaco<br>Borato<br>Fluoruro   | Hierro<br>Nitrato                      | Potasio<br>Estroncio                       |
| Clase 3 | Componentes terciarios (concentraciones entre 0.01 y 0.1 mg/l)   |  |  |
|         | Aluminio<br>Arsénico<br>Bario<br>Bromuro   | Cobre<br>Plomo<br>Litio<br>Manganeso   | Fosfato<br>Cinc                            |
| Clase 4 | Componentes a nivel de traza (concentraciones menores a 0.01 mg/l)   |  |  |
|         | Antimonio<br>Cadmio<br>Cromo   | Cobalto<br>Níquel<br>Mercurio          | Estaño<br>Titanio                          |
| Clase 5 | Componentes transitorios   |  |  |
|         | Acidez-alcalinidad<br>Ciclos biológicos<br>Componentes del ciclo del carbono<br>Ciclo del oxígeno<br>Componentes del ciclo del nitrógeno<br>Componentes del ciclo de azufre<br>Componentes del ciclo del fósforo<br>Reacciones Redox<br>Materiales oxidantes del ambiente natural<br>Materiales reductores del ambiente natural<br>Radionúclidos |  |  |

**Tabla 2.4. Componentes insolubles en los suministros acuíferos.**

|         |                        |
|---------|------------------------|
| Clase 1 | Sólidos suspendidos    |
| Clase 2 | Organismos microbianos |

### 2.2.1 Fuentes de contaminación

Las principales fuentes de contaminación de las aguas son las descargas de:

- Aguas residuales domésticas<sup>18</sup>

Las aguas residuales domésticas se componen de varios tipos de aguas residuales producidas en el hogar:

- ⇒ Las aguas de la cocina y el lavado de trastos, rica en desechos orgánicos y grasa más o menos emulsionadas por los detergentes.
- ⇒ Las aguas de lavado de la ropa y las del baño, conteniendo sólidos en suspensión, jabón, shampoos más o menos emulsionados, según la composición de los detergentes que se usen para lavar.
- ⇒ Las aguas provenientes de los excusados, muy ricas en materia hidrocarbonatada y algunas veces patógenos.

Existen algunas otras descargas que tienen la misma composición y que se pueden tomar como descargas de aguas domésticas:

- las aguas de lavado de las calles, banquetas y mercados
- estaciones de tratamiento donde se exhibe ganado
- aguas provenientes de comercios y talleres artesanos
- aguas provenientes de escuelas y hospitales

- Aguas residuales industriales<sup>12,16</sup>

La naturaleza de estas descargas son tan variadas como la cantidad de industrias. Las actividades industriales, particularmente las industrias agroalimentarias, son muy contaminantes. La DBO<sub>5</sub>, la DQO y, sobre todo, las sustancias tóxicas son parámetros sumamente importantes que hay que tomar en cuenta para evaluar la contaminación industrial. Además, no hay que olvidar que un alto contenido de materias en suspensión puede obstruir el drenaje, por lo que este parámetro también debe tomarse en cuenta.

Los riesgos más grandes de los efluentes industriales, aparte de las sustancias tóxicas y sus altas concentraciones, pueden provenir de la presencia de hidrocarburos y de detergentes.

Las propiedades físicas, químicas y biológicas de las aguas residuales industriales son complejas y muy variadas, los principales parámetros que utilizamos para caracterizarlos son:

- a) Físicos: sólidos, temperatura, color y olor.
- b) Químicos: orgánicos: aceites y grasas, fenoles y plaguicidas; e inorgánicos: metales pesados, fósforo, pH, azufre, nitrógeno y compuestos tóxicos.

La relación DBO/DQO se utiliza frecuentemente para caracterizar la contaminación industrial. Si esta relación es superior a 0.5, se considera el efluente como de carácter orgánico, tal es el caso de la mayor parte de las industrias agroalimentarias. La carga orgánica hace que estas aguas sean inestables, es decir que evolucione rápidamente hacia formas "digeridas" con el riesgo del desprendimiento de olores pútridos. El carácter orgánico de estos efluentes los hace susceptibles a un tratamiento biológico. Sin embargo, la solución no es fácil: la presencia de materias en suspensión en altas concentraciones, la presencia de detergentes o de sales pueden hacer que el tratamiento sea difícil.

Si la relación DBO/DQO es inferior a 0.1, se trata de un efluente en el que predominan las sustancias químicas: es el caso de las industrias químicas, siderúrgicas, farmacéuticas, etc. La composición de los efluentes es muy variable de una industria a otra y puede incluir sustancias tóxicas o difícilmente degradables. Los tratamientos son específicos a cada caso, siendo los fisicoquímicos los más adecuados.

#### ● Aguas de lluvia<sup>20</sup>

Durante mucho tiempo se consideró que estas aguas estaban limpias y que podían vertirse en el medio natural sin ningún tratamiento, sin embargo, se ha observado que después de una lluvia intensa, la calidad del agua de los cuerpos receptores se degrada rápidamente: espectacular muerte de peces, desaparición de especies acuáticas e imposibilidad de utilizar estas aguas para potabilizarlas debido a las altas concentraciones de materias en suspensión y de hidrocarburos.

El agua empieza a contaminarse casi desde que comienza a caer en forma de lluvia ya que durante su travesía por la atmósfera disuelve o acarrea los contaminantes atmosféricos; el escurrimiento de estas aguas sobre las

superficies impermeables aumenta la contaminación y después, durante su trayecto por la calle, disuelve gran parte de los contaminantes que se encuentran en ellas, o bien, si la lluvia es intensa puede arrancar partículas de las construcciones y del pavimento; más tarde se dirige hacia las alcantarillas, en los colectores del drenaje se mezcla con los depósitos de las lluvias anteriores y de ahí va hacia las plantas tratadoras de aguas o hacia el medio natural.

Otro fenómeno que ocurre con la lluvia en zonas urbanas es la acidificación del agua, con lo cual aumenta su poder disolvente. De esta manera puede atacar las fachadas de las construcciones, especialmente las metálicas, lo que provoca la introducción de contaminantes metálicos. Las aguas ácidas provocan la disolución de carbonatos y minerales de los suelos, lo que contribuye a aumentar la contaminación por metales en las descargas de aguas en tiempo de lluvia.

- Aguas provenientes de actividades agropecuarias <sup>16,20</sup>

La agricultura ha entrado en un estado de industrialización activa, al menos en los países desarrollados. En éstos se observa una tendencia a la especialización en cultivos y obtener altos rendimientos y, por consecuencia, una mecanización creciente y una modificación profunda de la mentalidad de los agricultores. Entre los inconvenientes de estos cambios para el medio acuático se encuentran los siguientes:

- ◇ La erosión de los suelos a causa del aumento de los monocultivos.
- ◇ El uso de fertilizantes químicos, en lugar de los fertilizantes naturales, que se reciclan de manera natural. El drama es que los vegetales necesitan cierto tiempo para asimilar los fertilizantes químicos y muchas veces para depositar estos en las plantas tienen que disolverse en agua. Esto provoca que, si has sido reciente su aplicación, una lluvia fuerte acarree el fertilizante, lo que hace que las plantas los pierdan y se tengan que hacer nuevas aplicaciones de estos productos. Además, es cierto que muchos fertilizantes químicos son aplicados en exceso, lo que provoca un aumento en las concentraciones de los compuestos utilizados para su elaboración, en los cuerpos receptores de las aguas que escurren de los campos agrícolas.
- ◇ El uso de plaguicidas y otros productos fitosanitarios

En la figura 2.6 se presenta un esquema de las diferentes fuentes de contaminación.

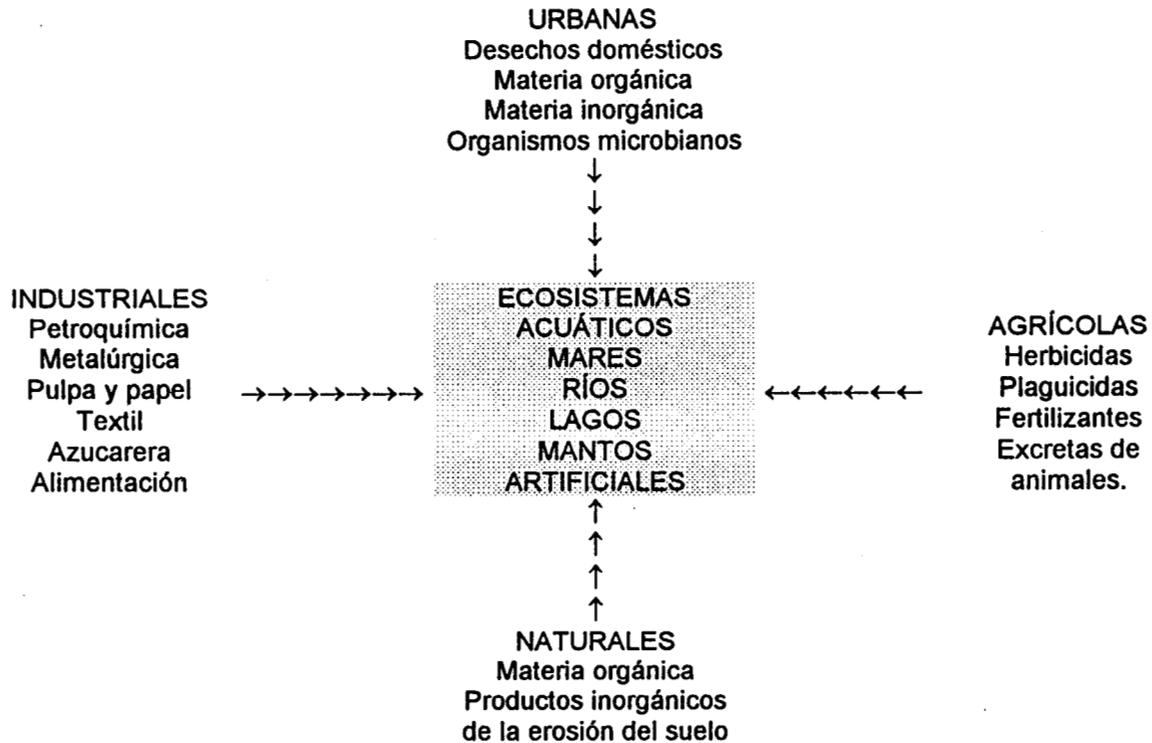


Figura 2.6. Fuentes de contaminación de los desechos de los cuerpos de agua.

### 2.3 Calidad del agua <sup>12,20,21</sup>

El agua tiene la capacidad de disolver, emulsionar y transportar algunas sustancias líquidas o sólidas. Esta capacidad es la causa de que haya diferentes características o calidades. En la tabla 2.5 se muestran los diferentes tipos de agua según el contenido de ciertas sustancias.

En algunos países se ha definido la calidad del agua en función de la concentración de algunas sustancias químicas y biológicas; además, también se consideran algunas de sus características físicas como la temperatura. En la

mayoría de los países, incluyendo México, se consideran como base de los parámetros de calidad del agua los siguientes: pH o acidez, temperatura, olor, sabor, nutrientes como nitratos y fosfatos y materia en suspensión.

**Tabla 2.5.** Diferentes tipos de agua dependiendo del contenido de algunos compuestos.

| Tipo de agua             | Características                         |
|--------------------------|---|
| Ácidas o agresivas       | Alto contenido de CO <sub>2</sub>       |
| Dulces                   | Bajo contenido de sales                 |
| Duras                    | Alto contenido de calcio y magnesio     |
| Ferruginosas             | Alto contenido de hierro                |
| Minerales o terapéuticas | Alto contenido de azufre, potasio, etc. |
| Potable                  | Según norma.                            |

Además de estos parámetros se incluyen ciertos indicadores biológicos y sustancias tóxicas. Aparte de estos parámetros específicos de la calidad del agua se han establecido algunos otros parámetros llamados globales, los cuales no indican el contenido de una sustancia en especial, sino el contenido de un conjunto de sustancias con características similares, por ejemplo, la DBO y la DQO que indican la cantidad de materia biodegradable y la cantidad total de materia orgánica, respectivamente.

### 2.3.1 Factores biofísicoquímicos que afectan la calidad del agua.

Los factores biofísicoquímicos que afectan la calidad del agua, son los ciclos naturales de algunos elementos, principalmente, los ciclos del carbono, oxígeno, nitrógeno, azufre y fósforo, debido a que por medio de ellos se regula la concentración de los elementos en alguno de los tres sistemas: aire, agua o tierra, variando para mantener el equilibrio, la concentración en los otros dos sistemas.

#### Ciclos del carbono, oxígeno, nitrógeno, azufre y fósforo<sup>9,11,12,14,22,23</sup>

El carbono es uno de los elementos principales de la materia viva. Existe la hipótesis de que en el ambiente de la Tierra en sus inicios contenía carbono en forma de metano, más amoníaco, agua e hidrógeno gaseosos. El metano es uno de los compuestos de carbono presentes en el ciclo del carbono, como se indica

en el esquema de la figura 2.7, es producido como resultado de la fermentación de moléculas orgánicas grandes. El  $\text{CO}_2$  y la alcalinidad bicarbonato-carbonato son también importantes en el ciclo. Estas reacciones ocurren en un entorno acuático. El metano se produce mediante descomposiciones anaeróbicas de los compuestos químico-orgánicos y se desprende de los cuerpos de agua mediante la descomposición anaeróbica de los sedimentos orgánicos. El ciclo del carbono como otros ciclos, permite evaluar la distribución y las diferentes transformaciones de este elemento y otros como:  $\text{O}_2$ ,  $\text{N}_2$ , etc. en el planeta.

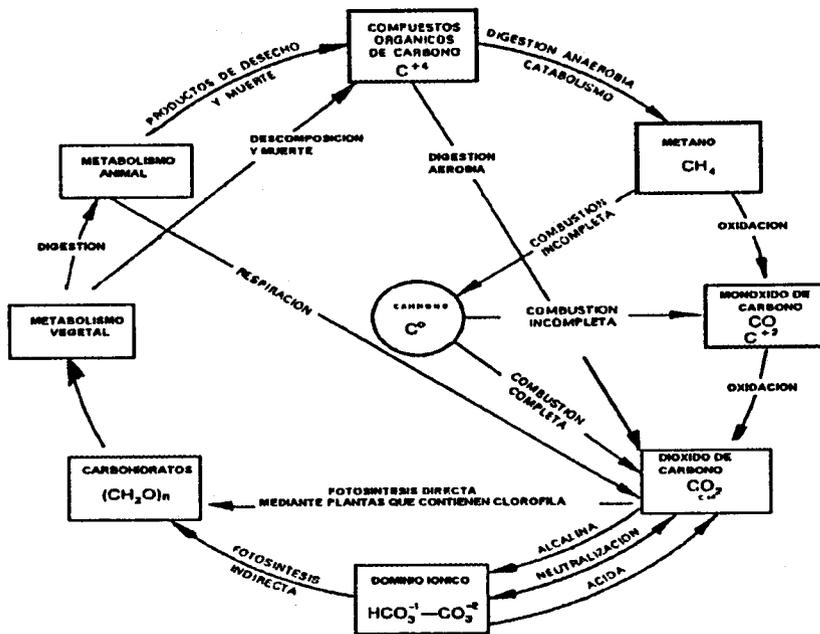


Figura 2.7. Ciclo del Carbono en el planeta.

El contenido de  $\text{CO}_2$  de las aguas superficiales es afectado por la existencia simbiótica de las bacterias y de las algas como se ilustra en la figura 2.7. Durante el periodo de luz solar brillante, las reacciones fotosintéticas proceden rápidamente, de forma que el agua pueda llegar a sobresaturarse con oxígeno más allá de la capacidad bacteriana para utilizarlo. Si las algas requieren más dióxido de carbono que el que se tiene a partir de la respiración bacteriana, asimilan el  $\text{CO}_2$  de la alcalinidad del bicarbonato, produciendo trazas de alcalinidad carbonato. Por esta razón, el  $\text{CO}_2$  y el  $\text{O}_2$  se encuentran en la mayor

parte de las aguas superficiales que se ven afectadas por la luz solar y por los procesos fotosintéticos. La solubilidad teórica del oxígeno expuesto a la atmósfera depende de la temperatura. Una concentración de oxígeno en exceso se debe a la fotosíntesis y una deficiencia suele estar causada por la actividad bacteriana o por agentes reductores.

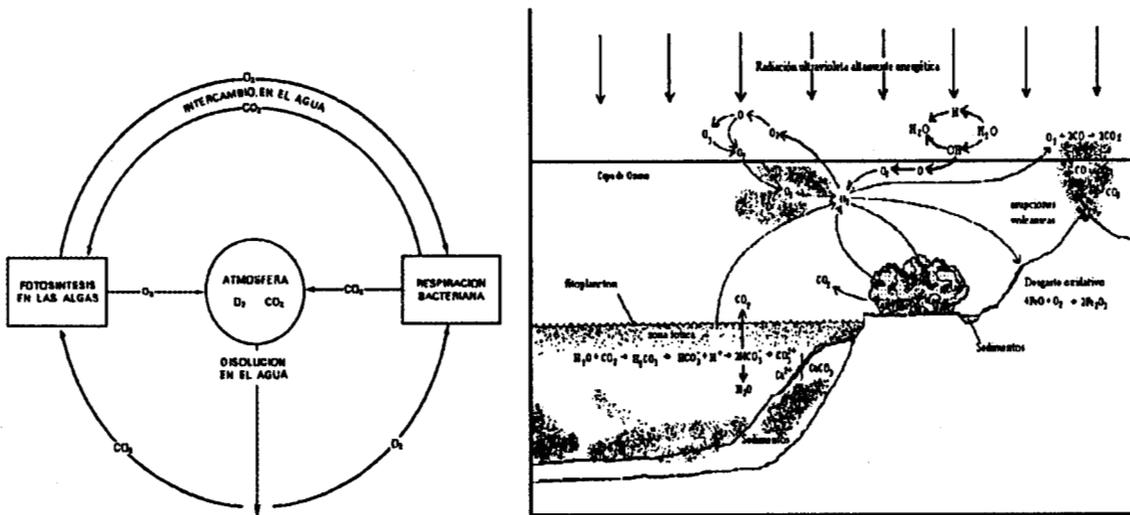


Figura 2.8. Ciclo del Oxígeno.

Al igual que el ciclo del carbono y del oxígeno, el ciclo del nitrógeno está relacionado con la vida en el medio acuático. Por ejemplo el amoníaco es uno de los componentes transitorios en el agua, es parte del ciclo del nitrógeno y se ve influido por la actividad biológica. Como se representa en un ciclo del  $N_2$ , el  $NH_3$  es el producto natural de la descomposición de los compuestos orgánicos nitrogenados. El amoníaco se oxida mediante la acción bacteriana, **primero hasta nitrito y después hasta nitrato**, de forma que la concentración se ve continuamente afectada por la descomposición de los compuestos orgánicos nitrogenados y por la aportación de las bacterias nitrificantes que descomponen el amoníaco en nitrato.

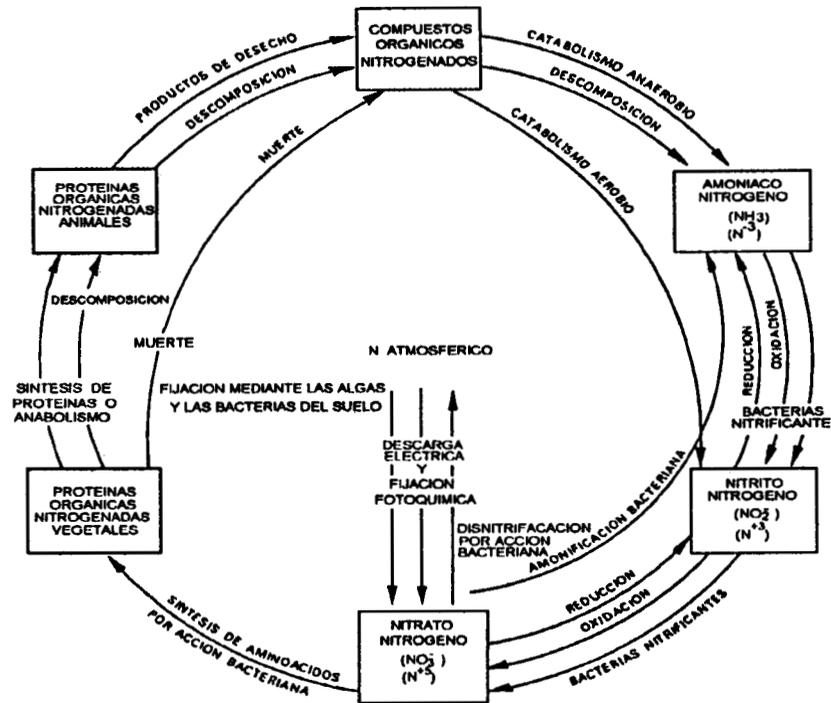
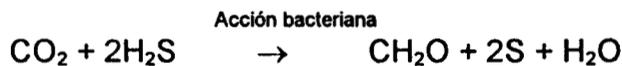
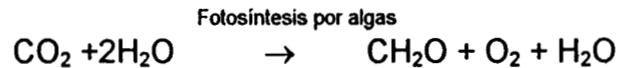


Figura 2.9. Ciclo del Nitrógeno.

El azufre reemplaza al oxígeno en un compuesto con propiedades similares, debido a que pertenecen al mismo grupo en la tabla periódica ( $3s^23p^4$  el primero y el segundo  $2s^22p^4$ ). Ciertas bacterias pueden metabolizar el átomo de azufre para formar  $H_2S$ , al igual que las algas y otras plantas pueden metabolizar al oxígeno para formar agua en la fotosíntesis para dar lugar a  $O_2$  libre y carbohidratos. El subproducto del proceso bacteriano de la ruptura del  $H_2S$  es el azufre libre. Las ecuaciones químicas correspondientes son:



El H<sub>2</sub>S, que se encuentra presente en algunas aguas de pozo profundas y algunas aguas superficiales estancadas, generalmente es producido por la descomposición anaeróbica de los compuestos orgánicos que contienen azufre o mediante las bacterias reductoras del sulfato, que son capaces de convertirlo a sulfuro. En la figura 2.10 se presenta el ciclo del azufre en la naturaleza.

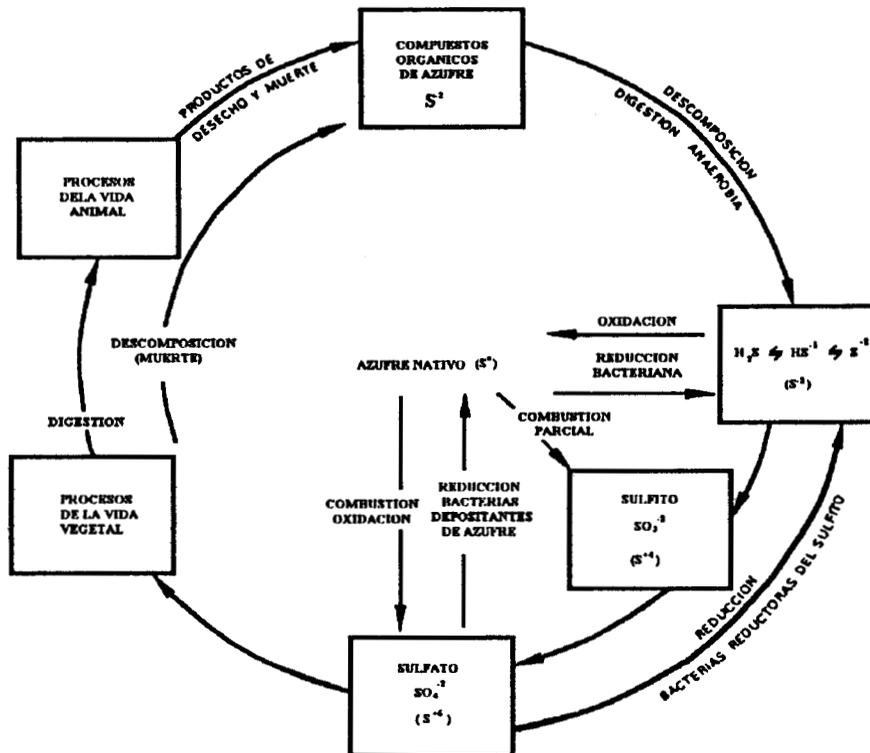
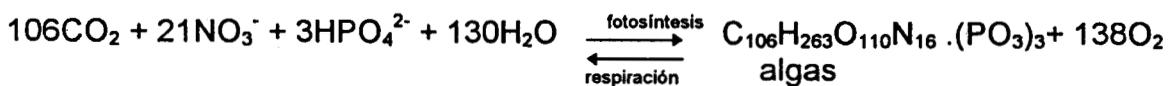


Figura 2.10. Ciclo del Azufre

El fósforo, es considerado uno de los elementos nutrientes, por lo tanto, ayuda a la preservación de los seres vivos en el medio acuoso. Todos los organismos fitoplanctónicos obtienen fósforo de la columna de agua y este elemento es retornado a la misma, después de la muerte y descomposición de los organismos vivos. La estequiometría de la reacción del fosfato (y nitrato) por estos organismos es:



En la figura 2.11 se pueden observar los procesos que forman el complejo ciclo del fósforo.

El fósforo se clasifica en: fosfato soluble, fósforo orgánico soluble y coloidal. El fosfato soluble por lo general es una pequeña parte de la cantidad total de fósforo presente en el agua. Las aguas con alto contenido de materiales húmicos tienden a tener mas altos contenidos de fósforo que aguas limpias. Durante períodos de estancamiento, esto es, deficiencia de oxígeno, las aguas cercanas al fondo, comienzan a ser enriquecidas en fosfato, por la descomposición del plancton y la reducción de los compuestos fosforados presentes en el sedimento.

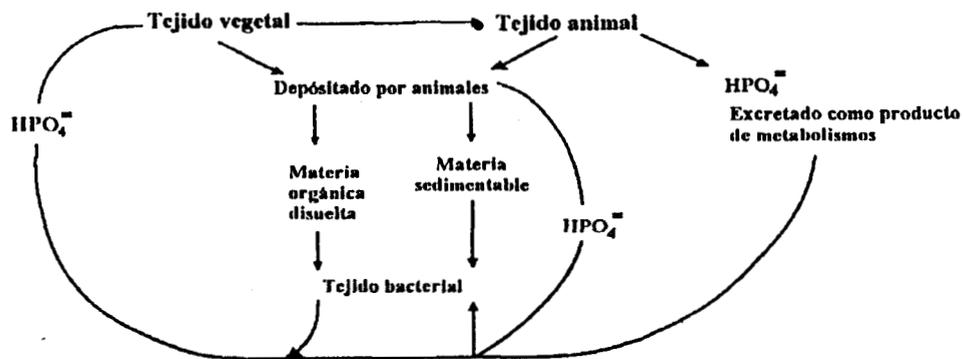


Figura 2.11. Ciclo del Fósforo.

## FUNDAMENTOS TEÓRICOS

La fórmula que representa la presencia de un ion acuoso en una solución<sup>10</sup> es  $M(H_2O)^{n+}$ , lo cual significa que el catión se encuentra hidratado, sin embargo por lo general se utiliza solamente el símbolo  $M^{n+}$ . Los iones metálicos en agua están enlazados o coordinados a moléculas de agua o a otras moléculas reconocidas como bases fuertes.

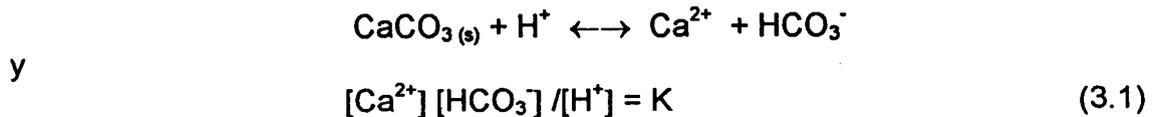
Los iones metálicos en solución acuosa alcanzan un estado de máxima estabilidad a través de reacciones químicas. Las reacciones ácido-base, de precipitación, de acomplejamiento y de oxido-reducción son los mecanismos por los cuales un ion metálico en agua adquiere una forma más estable.

Los iones metálicos hidratados tienden a perder protones en solución acuosa, por lo tanto son considerados como ácidos. La acidez de un ion metálico se incrementa con su aumento de carga, y decrece cuando se incrementa el radio. La tendencia de los iones metálicos hidratados a comportarse como ácidos puede tener un importante efecto sobre el ambiente acuático.

El ion oxhidrilo,  $OH^-$ , se puede enlazar a un ion metálico; además también puede funcionar como un grupo puente para unir dos iones metálicos, formando especies complejas, de tipo polimérico. Si los procesos de acomplejamiento continúan, los polímeros coloidales hidratados son formados y, finalmente, se puede generar un precipitado.

### 3.1 Estabilización química<sup>10,19</sup>

La estabilización química consiste en el ajuste del pH, concentración de iones calcio y la alcalinidad del agua en su equilibrio de saturación con  $\text{CaCO}_3$ . Debido a que un agua estabilizada no disuelve ni precipita  $\text{CaCO}_3$ , no removerá las incrustaciones ni precipitará depósitos de  $\text{CaCO}_3$ . Las condiciones de equilibrio se pueden representar por las ecuaciones:



El punto de saturación del  $\text{CaCO}_3$  también se puede caracterizar por  $[\text{H}^+]_{\text{eq}}$  ó  $\text{pH}_{\text{eq}}$  que son, respectivamente, la concentración de ion hidrógeno o el pH en el equilibrio con  $\text{CaCO}_3$ . Si la concentración de  $[\text{H}^+]$  es mayor que la de  $[\text{H}^+]_{\text{eq}}$ , no se deposita  $\text{CaCO}_3$ , en cambio si ocurre lo contrario, esto es  $[\text{H}^+]$  es menor que  $[\text{H}^+]_{\text{eq}}$ .

#### 3.1.1 Dureza

La dureza, antiguamente, se definía como la capacidad de los cationes de una muestra de agua para reemplazar los iones sodio y/o potasio de jabones para formar productos poco solubles. Actualmente se define como **la concentración de carbonato de calcio que es químicamente equivalente a la concentración de cationes de la muestra**<sup>19</sup>.

Se consideran aguas duras aquellas aguas que requieren considerable cantidad de jabón para producir espuma y que producen incrustaciones en las tuberías para agua caliente, calentadores, calderas y unidades en la cuales la temperatura del agua aumenta.<sup>15,24,25</sup>

El carbonato cálcico produce incrustaciones poco consistentes y apenas adherentes. Por el contrario el sulfato de calcio forma incrustaciones muy duras sobre todo en las partes más calientes de las calderas. La sílice produce una costra dura y muy poco conductora del calor. La dureza de las aguas naturales varía considerablemente de acuerdo con el lugar. En general, las aguas superficiales son más blandas que las aguas subterráneas. La dureza de un agua

refleja su naturaleza en cuanto la formación geológica con la cual ha estado en contacto. Los principales cationes que causan dureza y los principales aniones asociados a ellos se encuentran en la tabla 3.1.

En la práctica, debido a la gran diferencia que existe en las aguas naturales entre las concentraciones de  $\text{Ca}^{2+}$  y  $\text{Mg}^{2+}$  y los otros cationes que producen dureza, se acostumbra decir que la dureza se debe, a la presencia de los cationes de  $\text{Mg}^{2+}$  y  $\text{Ca}^{2+}$ .

Tabla 3.1. Cationes y aniones asociados causantes de la dureza.

| CATIONES<br>(Causantes de dureza) | ANIONES<br>(Asociados) |
|-----------------------------------|------------------------|
| $\text{Ca}^{2+}$                  | $\text{HCO}_3^-$       |
| $\text{Mg}^{2+}$                  | $\text{SO}_4^{2-}$     |
| $\text{Si}^{4+}$                  | $\text{Cl}^-$          |
| $\text{Fe}^{2+}$                  | $\text{NO}_3^-$        |
| $\text{Mn}^{2+}$                  | $\text{SiO}_3^{2-}$    |

### Clasificación de las aguas según su dureza .

|                 |                            |
|-----------------|----------------------------|
| 0-50 ppm        | Aguas muy suaves           |
| 50-100 ppm      | Aguas moderadamente suaves |
| 100-150 ppm     | Aguas ligeramente duras    |
| 150-300 ppm     | Aguas duras                |
| 300 - o más ppm | Aguas muy duras            |

Se ha clasificado a la dureza según :

#### 1. El ion metálico ( catión ).

- Dureza al calcio ( $D_{\text{Ca}}$ )
- Dureza al magnesio ( $D_{\text{Mg}}$ )

#### 2. El ion asociado ( anión ).

- Dureza carbonatada.
- Dureza no carbonatada.

Por lo anterior en la práctica se acepta que la dureza se debe a la presencia de  $\text{Ca}^{2+}$  y  $\text{Mg}^{2+}$ ; así se tiene que:

$$D_T = D_{\text{Ca}} + D_{\text{Mg}}$$

donde:

$$D_T = \text{Dureza total}$$

De la dureza total, la que es **químicamente equivalente a los bicarbonatos presentes en agua** se le conoce como dureza carbonatada ( $D_C$ ). Como el bicarbonato en las aguas naturales es **usualmente determinado por medio de la alcalinidad y expresada en términos de  $\text{CaCO}_3$** , la alcalinidad de la mayoría de las aguas naturales es considerada igual a la dureza carbonatada. Como esta dureza carbonatada es posible eliminarla hirviendo el agua durante cierto tiempo, algunos autores también la llaman **dureza temporal**.

La parte de calcio y magnesio que queda disuelto, para asociarse con los sulfatos, nitratos y cloruros de los metales alcalinotérreos, es el que proporciona al agua la dureza no carbonatada, también llamada **dureza permanente**.

$$D_T = D_C + D_{\text{NC}}$$

donde:

$$\begin{aligned} D_T &= \text{Dureza total} \\ D_C &= \text{Dureza carbonatada} \\ D_{\text{NC}} &= \text{Dureza no carbonatada} \end{aligned}$$

### 3.1.2 Alcalinidad

La alcalinidad<sup>5</sup> es una medida de la capacidad de un agua para neutralizar un ácido fuerte. En las aguas naturales esta capacidad se puede atribuir a bases como  $\text{HCO}_3^-$ ,  $\text{CO}_3^{2-}$  y  $\text{OH}^-$ , lo mismo que a las especies presentes, con frecuencia en pequeñas concentraciones, como son: silicatos, fosfatos y bases orgánicas. Este parámetro se expresa por lo general en miligramos por litro o miliequivalentes por litro.

La alcalinidad de la mayoría de las aguas naturales superficiales esta determinada principalmente por el sistema carbonato:

$$\text{Alcalinidad total} = [\text{HCO}_3^-] + 2[\text{CO}_3^{2-}] + [\text{OH}^-] - [\text{H}^+] \quad (3.2)$$

El contenido de bicarbonato en el agua está dado por el equilibrio del ácido carbónico<sup>12,26</sup>. A partir de éste, se puede obtener una relación porcentual en función del pH para obtener las concentraciones de bicarbonato, carbonato y CO<sub>2</sub>. De esta relación se obtiene que en valores de pH mayores a 8, no hay prácticamente ácido carbónico libre, al mismo tiempo en los valores de pH menores a 8, la cantidad del ion carbonato es despreciable. Por otra parte, en valores de pH menores a 5 se tiene que predomina la existencia del dióxido de carbono.

Tabla 3.2. Relación porcentual de las formas iónicas del sistema carbonato a 20 °C..

| Forma iónica                  | pH   |      |      |       |       |       |       |      |
|-------------------------------|------|------|------|-------|-------|-------|-------|------|
|                               | 4    | 5    | 6    | 7     | 8     | 9     | 10    | 11   |
| CO <sub>2</sub>               | 99.7 | 97.0 | 76.7 | 24.99 | 3.22  | 0.32  | 0.02  | 0.0  |
| HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup> | 0.3  | 3.0  | 23.3 | 74.98 | 96.70 | 95.84 | 71.43 | 20.0 |
| CO <sub>3</sub> <sup>=</sup>  | 0.0  | 0.0  | 0.0  | 0.03  | 0.08  | 3.84  | 28.55 | 80.0 |

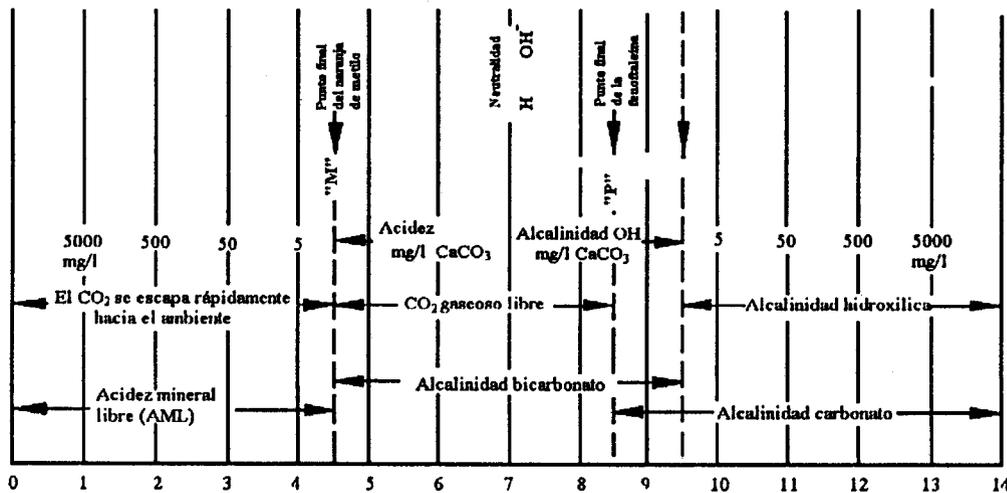
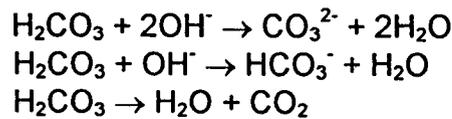


Figura 3.1. Acidez y diferentes tipos de alcalinidad y sus intervalos de pH.

así se tiene que:

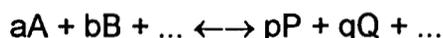
- a pH ≥ 8
- a pH < 8
- a pH < 5



### 3.2 Condiciones de equilibrio<sup>6</sup>.

Sin embargo y a pesar de tomar en cuenta el factor de actividad, hay que recordar que las reacciones no proceden en forma unidireccional y completa, por lo tanto hay que considerar que las reacciones siempre están en equilibrio.

Para una reacción química general, se tiene



y su constante de equilibrio está determinada por la ecuación:

$$[P]^p [Q]^q \dots / [A]^a [B]^b = K \quad (3.3)$$

el valor de la constante, K, determina la cantidad de reactivos y productos que se forman en el equilibrio:

- 1) Si  $K \gg 1$ , entonces la reacción se desplaza hacia la derecha.
- 2) Si  $K \ll 1$ , la reacción se desplaza hacia la izquierda. Se obtiene una alta generación de reactivos.
- 3) Si  $K \cong 1$  las cantidades de reactivos y productos presentes en el equilibrio serán del mismo orden de magnitud.

#### 3.2.1 El CO<sub>2</sub> de Equilibrio<sup>15,25,26</sup>.

Se define como CO<sub>2</sub> de equilibrio a la cantidad de CO<sub>2</sub> que tiene que estar presente en un agua para que se mantenga en solución el bicarbonato que se encuentra en la misma.

Podemos expresarlo por el equilibrio dinámico:



Si en un instante el agua contiene una cantidad de CO<sub>2</sub> libre, ataca al CaCO<sub>3</sub>, la ecuación se desplaza **hacia la derecha**; por el contrario, si la **cantidad es**

menor, la ecuación se desplazará hacia la izquierda y tiende a precipitar el  $\text{CaCO}_3$ .

Cuando el  $\text{CO}_2$  libre es mayor que el  $\text{CO}_2$  de equilibrio.

$$\text{CO}_2(\text{libre}) = \text{CO}_2(\text{equilibrio}) + \text{CO}_2(\text{exceso})$$

Este  $\text{CO}_2$  (en exceso) recibe el nombre  **$\text{CO}_2$  agresivo potencial**, y una parte de él será  **$\text{CO}_2$  agresivo real** dependiendo del material con que se ponga en contacto. Esta acción agresiva del  $\text{CO}_2$  produce **corrosión**, y cuando el  $\text{CO}_2$  se encuentra en defecto se produce precipitación, a esta acción se le denomina **incrustación**.

**Por esta razón, las aguas con  $\text{CO}_2$  en exceso se denominan aguas agresivas. Si por el contrario el  $\text{CO}_2$  (libre) <  $\text{CO}_2$  (equilibrio) las aguas se denominan incrustantes.**

### 3.2.2 Equilibrio del agua <sup>27,28</sup>

El agua en el equilibrio está parcialmente ionizada



A temperatura ambiente sólo se encuentran presentes concentraciones del intervalo de  $10^{-7}$  M de  $\text{H}^+$  y de  $\text{OH}^-$  en el equilibrio. La ecuación de equilibrio es la misma que para cualquier reacción, sin embargo se puede hacer la consideración de que debido a la cantidad tan pequeña de iones presentes a comparación de la cantidad de agua total, este último valor se puede considerar constante e incluirse en la constante de equilibrio:

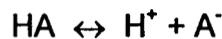
$$[\text{H}^+][\text{OH}^-] = K[\text{H}_2\text{O}] = K_w \quad (3.4)$$

La constante  $K_w$  se denomina producto iónico del agua y tiene un valor de  $1 \times 10^{-14}$   $(\text{mol/l})^2$  a  $25^\circ\text{C}$

El equilibrio que se tiene al ionizarse el agua es independiente de los solutos presentes o de los equilibrios dados entre las especies  $\text{H}^+$ ,  $\text{OH}^-$  y demás presentes en el medio acuoso.

### 3.2.3 Equilibrio Ácido Base <sup>5,6,19,26,28</sup>

Los ácidos según Brønsted-Lowry se pueden definir como sustancias que donan protones, por ejemplo, con el agua originan los iones hidronio,  $\text{H}_3\text{O}^+$ , que por simplicidad se escriben  $\text{H}^+$ . Un ácido fuerte reacciona en forma esencialmente completa, y la concentración de  $\text{H}^+$  es entonces igual a la concentración molar del ácido. Los ácidos débiles reaccionan de modo incompleto y se establece un equilibrio. Una ecuación general para la reacción de cualquier ácido débil es:



en la que el símbolo A representa cualquier fragmento molecular. La expresión del equilibrio de la disociación anterior se puede representar como:

$$(\text{H}^+)(\text{A}^-) / (\text{HA}) = K \quad (3.5)$$

en donde K es la constante de equilibrio o más específicamente, constante de ionización ácida y se representa entonces por  $K_a$ .

Algunos ácidos como el ácido carbónico<sup>a</sup>,  $\text{H}_2\text{CO}_3$ , tienen más de un hidrógeno ionizable, entonces, la ionización se lleva a cabo en etapas, con una constante de ionización del ácido para cada paso:

| $\text{H}_2\text{CO}_3 \rightarrow 2\text{H}^+ + \text{CO}_3^{2-}$ |   |   |
|--|---|---|
|  | Ecuación  | Expresión de equilibrio   |
| Primera ionización   | $\text{H}_2\text{CO}_3 \rightarrow \text{H}^+ + \text{HCO}_3^-$ | $(\text{H}^+) (\text{HCO}_3^-) / (\text{H}_2\text{CO}_3) = K_1$ |
| Segunda ionización   | $\text{HCO}_3^- \rightarrow \text{H}^+ + \text{CO}_3^{2-}$      | $(\text{H}^+) (\text{CO}_3^{2-}) / (\text{HCO}_3^-) = K_2$      |

donde  $K_1$  y  $K_2$  son las constantes sucesivas de equilibrio.

Las bases, que complementan a los ácidos, son sustancias que toman o aceptan iones hidrógeno del agua o de los ácidos, o que generan iones hidroxilo en el agua.

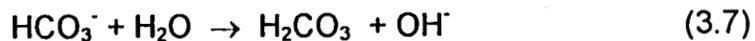
<sup>a</sup> Este ácido no se puede aislar, presenta un equilibrio con el sistema  $\text{CO}_2\text{-H}_2\text{O}$ .

Para una base débil que reacciona en forma incompleta, la expresión de equilibrio queda:



La constante de equilibrio para estas reacciones se denomina específicamente constante de ionización básica y con frecuencia se escribe  $K_b$  para diferenciarla de la anterior.

La reacción del ion bicarbonato en agua, da como resultado la siguiente ecuación:



pero también



El  $\text{HCO}_3^-$ , en la ecuación 3.7, actúa como una base y su constante de ionización está determinada por la ecuación:

$$(\text{H}_2\text{CO}_3)(\text{OH}^-) / (\text{HCO}_3^-) = K_b$$

Existe una relación complementaria entre ácidos y bases, y entre las constantes ácidas y básicas de ionización, la cual es universal para las soluciones acuosas.

$$K_a = K_w/K_b \quad (3.8)$$

donde  $K_w$  proviene de la ecuación de equilibrio de la ionización del agua

### 3.2.4 Equilibrio múltiple<sup>19,29</sup>

En solución, las reacciones químicas que se observan no son procesos simples, sino que están compuestas por procesos complejos. Se pueden dar diferentes tipos de reacciones, como son: competitivas, reversibles y consecutivas. Independientemente del tipo de reacción, un compuesto, puede ser utilizado como reactivo y producto a la vez. Para ejemplificar lo anterior, se tomará el caso de reacciones consecutivas, donde en una reacción se generan productos, los cuales pueden intervenir en un segundo proceso de equilibrio:



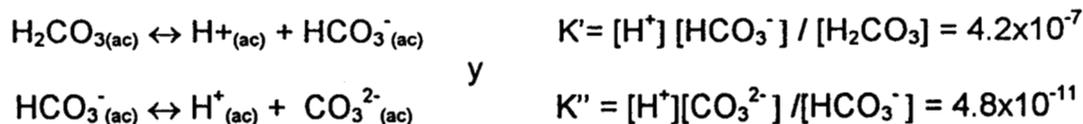
Para cada reacción se pueden formular por separado las constantes de equilibrio:

$$K' = [C] [D] / [A] [B] \quad K'' = [E] [F] / [C] [D]$$

o se puede escribir una ecuación general:

$$K = [E] [F] / [A] [B] = K'K''$$

La ionización de ácidos dipróticos en disolución acuosa presenta equilibrios múltiples, por ejemplo para el ácido carbónico, para una temperatura de 20 °C y un pH alrededor de 7.5, se tiene:



obteniendo los logaritmos de los valores de las constantes de equilibrio, se obtiene el pK correspondiente a la disociación, esto es el pK al cual ambas especies se encuentran a la misma concentración.

$$\begin{array}{l} \text{pH} = -\log K' = 6.31 \quad \text{y} \quad \text{pH} = -\log K'' = 10.37 \\ [\text{H}_2\text{CO}_3] = [\text{HCO}_3^-] \quad [\text{HCO}_3^-] = [\text{CO}_3^{2-}] \end{array}$$

En la determinación de concentraciones de componentes de un equilibrio múltiple, se usan los diagramas logarítmicos de concentración en función del pH, figura 3.2.

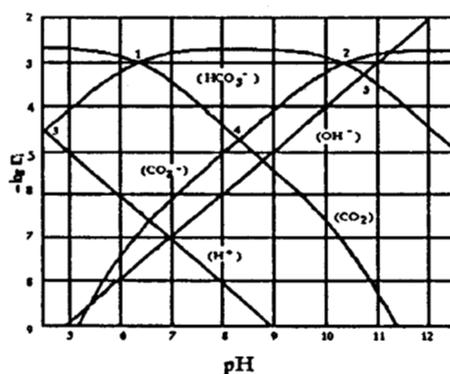
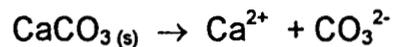


Figura 3.2. Diagrama logarítmico de concentración para el sistema carbonato  $2 \times 10^{-3}$  M, a 20 °C.

### 3.2.5 Producto de solubilidad del $\text{CaCO}_3$ <sup>28,30</sup>

Las relaciones de solubilidad de los solutos ionizados también se derivan de la teoría del equilibrio químico. El producto de solubilidad ( $K_{ps}$ ) de un compuesto iónico es el producto de las concentraciones de los iones que se forman del compuesto en la solución saturada. En el caso general, para un compuesto de fórmula  $A_mB_n$ , el  $K_{ps}$  viene dado por la relación  $K_{ps}=[A^{+a}]^m[B^{-b}]^n$ . El equilibrio entre una sal débilmente soluble, como el  $\text{CaCO}_3$  y sus iones en una solución saturada está dada por una ecuación como:



y su expresión de equilibrio queda:

$$[\text{Ca}^{2+}][\text{CO}_3^{2-}]/[\text{CaCO}_3]_{(s)} = K \quad (3.9)$$

Como la actividad de un sólido a una temperatura dada es constante, se le da un valor de uno, con lo cual la ecuación anterior, queda:

$$[\text{Ca}^{2+}][\text{CO}_3^{2-}] = K[\text{CaCO}_3]_{(s)} = K_{ps} \quad (3.10)$$

Sí el producto iónico para una sustancia dada es menor que el valor de la constante de solubilidad ( $K_{ps}$ ), la solución es insaturada y podrá disolver más soluto. En cambio, cuando  $K_{ps}$  sea menor que el producto iónico, la solución es sobresaturada y tenderá a precipitar el exceso en forma de lodo o a depositarlo en forma de una incrustación.

### 3.2.6 Concentración iónica<sup>15,19,31,32,33,34</sup>

Las propiedades de un ion en solución siempre se verán afectadas por la presencia de los demás iones, debido a un efecto interiónico, esto es, las fuerzas de repulsión y atracción existentes entre ellos. La magnitud del efecto interiónico es función de la concentración iónica total, definida como

$$\mu = \frac{1}{2} \sum c_i z_i^2 \quad (3.11)$$

donde:  $\mu$  = concentración iónica total o fuerza iónica en moles por litro

$z_i$  = valencia del ion

$c_i$  = concentración del ion en moles/litro

Como resultado de la interacción de los iones, se tiene que de cierta concentración molar de un componente de la solución acuosa, solo una fracción reacciona; a la fracción que realmente reacciona de este componente se le denomina actividad<sup>b</sup>:

**actividad = concentración iónica molar x factor de actividad.**

En soluciones muy diluidas, las actividades y las concentraciones iónicas molares son semejantes, esto quiere decir que el coeficiente de actividad se acerca a la unidad mientras más diluida es la muestra; sin embargo, en soluciones algo más concentradas el coeficiente de actividad sí es relevante y es necesario obtener su valor, el cual se puede determinar aproximadamente mediante:

$$\log f = \frac{-A z^2 \mu^{1/2}}{B + C \mu^{1/2}} \quad (3.12)$$

donde:

f = factor de actividad

z = estado de oxidación del ion cuyo coeficiente de actividad se determina, para un ion monovalente z=1

A = parámetro que depende de la temperatura. Para 20° C vale 0.5.

B = parámetro que depende de la temperatura y la constante dieléctrica del solvente. En agua, para 20 °C vale 1.0

C = parámetro que depende de la temperatura y del diámetro del ion cuyo coeficiente se determina. Para diámetros prácticamente iguales se toma el valor promedio y para 20°C vale 0.9

Entonces:

$$\log f = - \frac{0.5 z^2 \mu^{1/2}}{1 + 0.9 \mu^{1/2}} \quad (3.13)$$

y si se denomina:

$$\xi = \frac{\mu^{1/2}}{1 + 0.9 \mu^{1/2}} \quad (3.14)$$

<sup>b</sup> Para una definición más rigurosa consultar la referencia 34 páginas 618-625 y 857-874.

entonces  $\log f_1 = -0.5 \xi$  (3.15)

La ecuación que representa el primer grado de disociación del ácido carbónico, podemos expresarla en concentración molar.

$$\frac{[H^+][HCO_3^-]}{[H_2CO_3]} = K_1' \quad (3.16)$$

expresada en función de la actividad, sería:

$$\frac{(H^+)(HCO_3^-)}{(H_2CO_3)} = K_1 \quad (3.17)$$

Si se comparan las dos ecuaciones anteriores, se puede observar, que

$$K_1 = \frac{(H^+)(HCO_3^-)}{(H_2CO_3)} = \frac{[H^+]f_H[HCO_3^-]f_{HCO_3}}{[H_2CO_3]} \quad (3.18)$$

de donde:

$$K_1 = K_1' f_H f_{HCO_3} \quad (3.19)$$

y si se representa como  $f_1$  al coeficiente de actividad de un ion monovalente, como:

$$K_1 = K_1' f_1^2 \quad (3.20)$$

al aplicar los logaritmos, se obtiene la siguiente ecuación:

$$\log K_1 = \log K_1' + 2\log f_1 \quad (3.21)$$

sustituyendo,  $\log f_1 = -0.5 \xi$ , en la ecuación anterior, se tiene:

$$pK_1 = pK_1' + \xi \quad (3.22)$$

Si se procede en forma análoga en la ecuación del segundo grado de disociación del  $\text{H}_2\text{CO}_3$ .

$$\frac{[\text{H}^+][\text{CO}_3^{2-}]}{[\text{HCO}_3^-]} = K_2^1 \quad (3.23)$$

se tendrá: 
$$pK_2 = pK_2^1 + 2\xi \quad (3.24)$$

De la ecuación del producto de solubilidad,  $[\text{Ca}^{2+}][\text{CO}_3^{2-}] = K_{ps}^1$ , se obtendrá:

$$pK_{ps} = pK_{ps}^1 + 4\xi \quad (3.25)$$

y de la ecuación de ionización del agua,  $[\text{H}^+][\text{OH}^-] = K_w^1$ , se tendrá:

$$pK_w = pK_w^1 + \xi \quad (3.26)$$

Si los valores de  $pK_1^1$ ,  $pK_2^1$ ,  $pK_{ps}^1$  y  $pK_w^1$ , son constantes para una temperatura dada, se puede observar que  $pK_1$ ,  $pK_2$ ,  $pK_{ps}$  y  $pK_w$  son funciones de la fuerza iónica.

### 3.2.7 Electroneutralidad<sup>21,26</sup>.

En las aguas naturales existen iones que permanecen constantes, es decir, no intervienen en el proceso de alcalinización, por ello se les denomina "iones ajenos"; sin embargo las concentraciones de estos iones sí influyen en las ecuaciones de electroneutralidad y de la fortaleza iónica.

La cantidad de cationes y de aniones debe de ser la misma, cuando está expresada en equivalentes, en un cuerpo de agua. Lo que se indica mediante la ecuación de electroneutralidad:

$$\sum \text{Cationes} = \sum \text{Aniones} \quad (3.27)$$

al expresarla en concentraciones molares, adopta la forma:

$$\sum |z_i^+| [M_i^{z_i^+}] = \sum |z_j^-| [A_j^{z_j^-}]$$

$$2[\text{Ca}^{2+}] + 2[\text{Cat}^{2+}] + [\text{Cat}^+] + [\text{H}^+] = 2[\text{CO}_3^{2-}] + 2[\text{An}^{2-}] + [\text{An}^-] + [\text{HCO}_3^-] + [\text{OH}^-] \quad (3.28)$$

donde:  $[\text{Cat}^{2+}]$ : concentración molar de cationes ajenos divalentes  
 $[\text{Cat}^+]$ : concentración molar de cationes ajenos monovalentes  
 $[\text{An}^{2-}]$ : concentración molar de aniones ajenos divalentes  
 $[\text{An}^-]$ : concentración molar de aniones ajenos monovalentes

No se toma en consideración los iones tri o polivalentes debido a que generalmente, en las aguas naturales sus concentraciones son muy pequeñas.

Al desarrollar la ecuación de la fuerza iónica,  $\mu = 1/2 \sum c_i z_i^2$ , introduciendo la ecuación de electroneutralidad, queda:

$$\mu = 2[\text{Ca}^{2+}] + 2[\text{Cat}^{2+}] + 1/2[\text{Cat}^+] + 1/2[\text{H}^+] + 2[\text{CO}_3^{2-}] + 2[\text{An}^{2-}] + 1/2[\text{HCO}_3^-] + 1/2[\text{OH}^-] + 1/2[\text{An}^-] \quad (3.29)$$

Del análisis de las condiciones de equilibrio, se obtienen seis ecuaciones, que son:

|  |  |
|--|--|
| $[\text{H}^+][\text{OH}^-] = K[\text{H}_2\text{O}] = K_w$  | Ecuación de ionización del agua                          |
| $(\text{H}^+) (\text{HCO}_3^-) / (\text{H}_2\text{CO}_3) = K_1$  | Ecuación de la primera ionización del ácido carbónico    |
| $(\text{H}^+) (\text{CO}_3^{2-}) / (\text{HCO}_3^-) = K_2$   | Ecuación de la segunda ionización del ácido carbónico    |
| $[\text{Ca}^{2+}][\text{CO}_3^{2-}] = K_{ps}$  | Ecuación del producto de solubilidad del $\text{CaCO}_3$ |
| $\sum \text{Cationes} = \sum \text{Aniones}$   | Ecuación de electroneutralidad                           |
| $\mu = 2[\text{Ca}^{2+}] + 2[\text{Cat}^{2+}] + 1/2[\text{Cat}^+] + 1/2[\text{H}^+] + 2[\text{CO}_3^{2-}] + 2[\text{An}^{2-}] + 1/2[\text{HCO}_3^-] + 1/2[\text{OH}^-] + 1/2[\text{An}^-]$ | Ecuación de la fortaleza iónica                          |

las cuales rigen el estado de equilibrio de un agua, y donde existen 7 incógnitas, si se conocen las concentraciones de los iones ajenos:

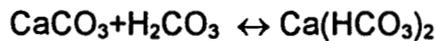
$$[\text{Ca}^{2+}], [\text{CO}_3^{2-}], [\text{HCO}_3^-], [\text{H}_2\text{CO}_3], [\text{H}^+], [\text{OH}^-] \text{ y } \mu$$

La solución del sistema de seis ecuaciones con siete incógnitas consiste en hallar una relación funcional entre dos variables cualesquiera del sistema. La

representación gráfica de esta relación es la **CURVA DE EQUILIBRIO**. Cada tipo de agua posee su curva de equilibrio.

Cuando se trata de la agresividad (estado de no equilibrio) del  $\text{CO}_2$ , hay que determinar la relación que expresa las cualidades constantes del proceso. Esto depende del tipo de material con el cual el agua agresiva o en desequilibrio se pone en contacto. La representación gráfica de esta invariante del sistema es la **CURVA DE EVOLUCION**.

Por ejemplo, si se relaciona con el  $\text{CaCO}_3$ :



Un mol de ácido carbónico [ $\text{H}_2\text{CO}_3$ ] en exceso posibilita la formación de dos iones gramos de [ $\text{HCO}_3^-$ ], entonces:

$$[\text{H}_2\text{CO}_3] + 1/2[\text{HCO}_3^-] = \text{constante} \quad (3.30)$$

que proporciona una ecuación más al sistema anterior.

### 3.3 Determinación de la Agresividad de un Agua<sup>26</sup>.

Pasos a seguir:

- 1) Se elige un sistema de coordenadas
- 2) Se gráfica la curva de equilibrio
- 3) Se sitúa el punto correspondiente a nuestra agua
- 4) A través de este punto se traza la curva de evolución
- 5) El punto de intersección de las curvas de equilibrio y evolución nos dará valores de las variables después que el agua ha alcanzado el equilibrio.

Es importante la elección del sistema de coordenadas por la influencia que ejerce en las formas de las curvas.

### 3.3.1 Diagramas de Equilibrio (Teoría de Tillmans).

Tillmans<sup>15</sup>, al desarrollar su modelo introduce las simplificaciones siguientes a la ecuación de la fuerza iónica:

- 1) No considera la presencia de iones ajenos, tales como  $Mg^{2+}$ ,  $Pb^{2+}$ ,  $Na^+$ ,  $Cl^-$ ,  $NO_3^-$ , etc.
- 2) No considera la presencia de las concentraciones de  $H^+$  y  $OH^-$ .
- 3) No considera la presencia de  $CO_3^{2-}$  (por los valores dados en la tabla 3.2).
- 4) Supone la fuerza iónica constante, no considerando la influencia, que ejerce en los valores de  $K_1^1$ ,  $K_2^1$ ,  $K_{ps}^1$ , y  $K_w^1$ .

Análisis de las limitaciones :

- Las limitaciones 1 y 4, conducen a la errónea situación de que todas las aguas tengan la misma curva de equilibrio.
- En la limitación 2, se toma en consideración que las aguas naturales tienen un pH entre 6 y 8 por lo tanto se tiene  $[H^+] = 10^{-6}$  ó  $10^{-8}$  y como  $H_2O \rightarrow H^+ + OH^-$ , entonces  $[H^+] \cong [OH^-] \cong 0$ ; valores que resultan muy pequeños si se comparan con los de  $[Ca^{2+}]$  y  $[HCO_3^-]$
- De la limitación 3, se tiene que en aguas naturales,  $[Ca^{2+}]$  es del orden de  $10^{-3}$  y  $[Ca^{2+}][CO_3^{2-}] = K_{ps}^1 = 10^{-8.33}$ , entonces,  $[CO_3^{2-}] = 10^{-8.33} / 0.5 \times 10^{-3} = 1 \times 10^{-5}$  lo cual se considera un valor despreciable comparado con la concentración de  $Ca^{2+}$ .

Del análisis anterior se concluye que para aguas naturales con un pH entre 6 y 8 las limitaciones 1 y 4 son las únicas que afectan de manera considerable.

Con las limitaciones establecidas, las ecuaciones de electroneutralidad, primera y segunda disociación del  $CO_2$  y producto de solubilidad del  $CaCO_3$ , quedan:

$$2[Ca^{2+}] = [HCO_3^-] \quad (3.31)$$

$$[H^+] [HCO_3^-] = K_1^1 [H_2CO_3] \quad (3.32)$$

$$K_2^1 [HCO_3^-] = [H^+] [CO_3^{2-}] \quad (3.33)$$

$$[\text{Ca}^{2+}] [\text{CO}_3^{2-}] = K_{ps}^1 \quad (3.34)$$

multiplicando miembro a miembro las tres últimas ecuaciones, simplificando y despejando se tiene:

$$[\text{Ca}^{2+}] = \frac{K_1^1 K_{ps}^1 [\text{H}_2\text{CO}_3]}{K_2^1 [\text{HCO}_3^-]^2} \quad (3.35)$$

sustituyendo esta última ecuación en la de electroneutralidad se obtiene:

$$[\text{H}_2\text{CO}_3] = \frac{1}{2} \frac{K_2^1}{K_1^1 K_{ps}^1} [\text{HCO}_3^-]^3 \quad (3.36)$$

Ecuación de la forma de  $y = Ax^3$ , que corresponde a una parábola cúbica que pasa por el origen. Basándose en lo anterior, Tillmans adoptó su sistema de coordenadas:

|          |                               |
|----------|-------------------------------|
| ordenada | $[\text{H}_2\text{CO}_3]$     |
| abcisa   | $\frac{1}{2}[\text{HCO}_3^-]$ |

#### Ventajas de este sistema de coordenadas:

- 1.- La ecuación de la curva de equilibrio tiene fácil representación geométrica; es decir, la curva de equilibrio está perfectamente definida (parábola cúbica que pasa por el origen).
- 2.- De la ecuación de la primera disociación del  $\text{CO}_2$  y si  $[\text{H}^+]$  es una constante, se tiene:

$$[\text{H}_2\text{CO}_3] = Q [\text{HCO}_3^-] \quad (3.37)$$

Ecuación de una recta que pasa por el origen.

Por lo tanto, se puede decir que las curvas para un mismo pH, están representadas por líneas rectas que pasan por el origen. Al mismo tiempo, mientras mayor es el pH, menor será  $[\text{H}^+]$  y también la pendiente de la recta. Las curvas de evolución, por ejemplo para  $\text{CaCO}_3$  estarán dadas, entonces, por las siguientes ecuaciones:

$$[H_2CO_3] + 1/2 [HCO_3^-] = \text{constante}$$

$$[H_2CO_3] = -1/2 [HCO_3^-] + c$$

$$y = -x+b \text{ (recta con pendiente -1)}$$

En las figuras siguientes, se presentan las curvas de equilibrio, pH y de evolución con CaCO<sub>3</sub>.

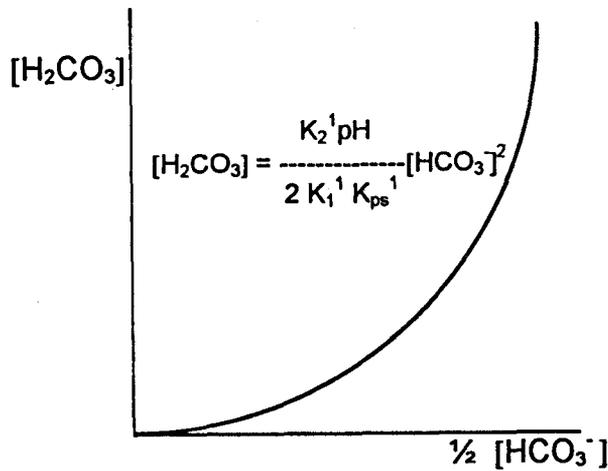


Figura 3.3. Curva de equilibrio

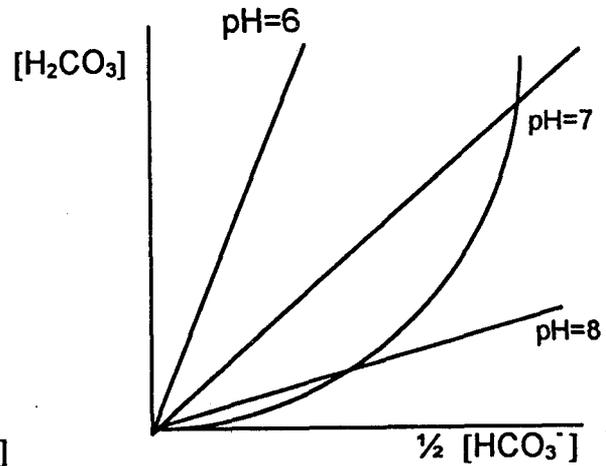


Figura 3.4. Curvas del mismo pH

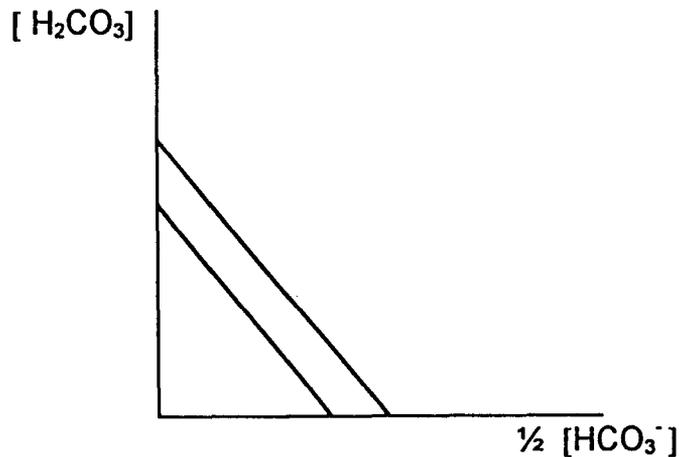


Figura 3.5. Curva de evolución para el CaCO<sub>3</sub>

Dándole valores arbitrarios a  $[\text{HCO}_3^-]$ , obtendremos los valores correspondientes de  $[\text{H}_2\text{CO}_3]$ , para elaborar la curva de equilibrio del sistema. Al **no considerar los iones ajenos** la curva de equilibrio será una sola para todas aguas. Sabiendo que: a 20 °C de temperatura,  $K_1^1 = K_1 = 10^{-6.34}$ ;  $K_2^1 = K_2 = 10^{-10.25}$ ;  $K_{ps}^1 = K_{ps} = 10^{-8.32}$ , entonces:

$$\frac{K_2^1}{K_1^1 K_{ps}^1} = \frac{10^{-10.25}}{10^{-6.34} \times 10^{-8.32}} = 10^{4.41}$$

De lo anterior y al darle valores arbitrarios a  $[\text{HCO}_3^-]$ , se obtiene el siguiente gráfico:

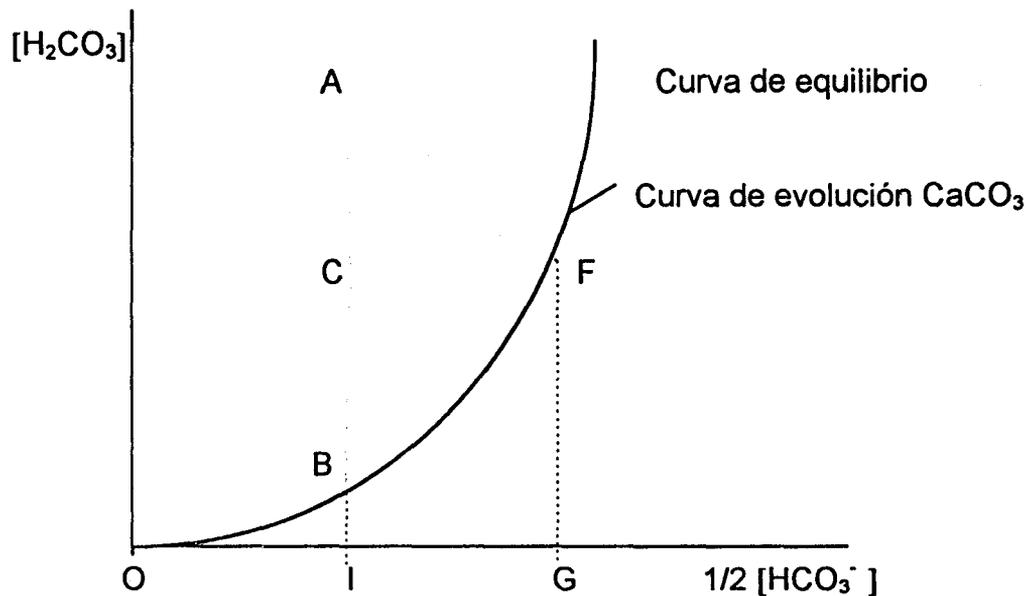


Figura 3.6. Diagrama de Tillmans.

Sea A, un punto que representa el agua sujeta a estudio, donde  $[\text{H}_2\text{CO}_3] = \overline{\text{AI}}$  y  $1/2 [\text{HCO}_3^-] = \overline{\text{OI}}$ . Como el punto se encuentra por arriba de la curva de equilibrio, quiere decir que la cantidad de  $[\text{H}_2\text{CO}_3]$  del agua es mayor que el correspondiente a la cantidad de  $1/2 [\text{HCO}_3^-]$ , para que estuviera en equilibrio, por lo tanto tiene un exceso de  $[\text{H}_2\text{CO}_3]$  que la hace potencialmente agresiva.

Análisis de la curva de evolución para  $\text{CaCO}_3$ : (AF), que tiene pendiente -1:

- La  $[\text{H}_2\text{CO}_3]$  aumenta de I hasta G para alcanzar el equilibrio.
- La  $[\text{HCO}_3^-]$  disminuye desde A hasta C para alcanzar el equilibrio.

Significado de cada una de las rectas:

AI =  $\text{CO}_2$  total  
 FG =  $\text{CO}_2$  en equilibrio después del contacto  
 AC =  $\text{CO}_2$  agresivo  
 AB =  $\text{CO}_2$  en exceso

Sí el punto que representa el agua de estudio está por debajo de la curva de equilibrio, se clasifica a ésta como un agua incrustante. Sin embargo, debido a las limitaciones que impone Tillmans, se consideran todas las aguas como iguales, independientemente de su comportamiento.

Por otro lado, Langelier propone un método cualitativo para la determinación del comportamiento (agresivo o incrustante), el cual se explica a continuación.

### 3.3.2 Índices de Langelier para la Clasificación Cualitativa de las Aguas Incrustantes y Agresivas <sup>15,19,35,36,37,38</sup>

De las condiciones de equilibrio se puede determinar que el punto de saturación del  $\text{CaCO}_3$  también se puede caracterizar por  $[\text{H}^+]_{\text{eq}} = [\text{H}^+]_s$  ó  $\text{pH}_{\text{eq}} = \text{pH}_s$ , que son respectivamente la concentración del ion hidrógeno o el pH en el equilibrio o saturación hipotética con  $\text{CaCO}_3$ .

Por debajo de  $\text{pH}_{\text{eq}}$ , no se deposita  $\text{CaCO}_3$ , dentro de esta categoría se encuentran algunas aguas naturales de alcalinidad y dureza bajas y con elevado contenido de  $\text{CO}_2$ . Por encima de  $\text{pH}_{\text{eq}}$ , se precipita  $\text{CaCO}_3$ , lo que provoca acumulación de éste al ponerse en contacto con algún cuerpo sólido.

Para dar una medida sobre la estabilidad de un agua determinada, Langelier propuso que a la diferencia entre el pH del agua determinado directamente por el análisis y el pH de equilibrio o de saturación se le denomine como **índice de saturación**, el cual entonces responde a la siguiente ecuación:

$$I_s = pH - pH_s \quad (3.38)$$

donde:

$I_s$  = índice de saturación  
 $pH$  = pH obtenido directamente por el análisis  
 $pH_s$  = pH de saturación de Langelier

De la expresión se deduce que:

$I_s < 0$  el agua está subsaturada de  $CO_2$  y por lo tanto es agresiva  
 $I_s = 0$  el agua está en equilibrio  
 $I_s > 0$  el agua se encuentra sobresaturada de  $CO_2$  y por lo tanto es incrustante

Langelier explica que este índice es solo una relación cualitativa de la agresividad del agua y que su valor no nos ayuda para juzgar sobre la actividad real. Un mayor valor del índice de Langelier no coincide necesariamente con una mayor agresividad del agua.

Dos aguas con la misma agresividad, pueden tener distinto índice de saturación, también se puede demostrar que dos aguas con el mismo índice de saturación pueden tener agresividades diferentes.

La fórmula de Langelier resulta útil para:

- 1) Controlar el proceso de desacidificación del agua. Si el agua es agresiva y por desacidificación la llevamos a su estabilización (equilibrar los valores de pH, alcalinidad, contenido de calcio, la fuerza iónica determinada mediante análisis), debe cumplir la ecuación de Langelier.
- 2) Calcular el pH que tendrá el agua agresiva al estabilizarse, si el exceso de  $CO_2$  se elimina por el proceso de aereación.
- 3) La evaluación cualitativa del agua, es decir, definir si es agresiva, si está en equilibrio o es incrustante.

**Determinación del Índice de Saturación de Langelier para un agua dada:**

De la ecuación de electroneutralidad:

$$2[\text{CO}_3^{2-}] + [\text{HCO}_3^-] + [\text{OH}^-] = 2[\text{Ca}^{2+}] + 2[\text{Cat}^{2+}] + [\text{H}^+] - 2[\text{An}^{2-}] - [\text{An}^-] \quad (3.39)$$

se obtiene:

$$2[\text{CO}_3^{2-}] + [\text{HCO}_3^-] + [\text{OH}^-] = \text{Alcalinidad} + [\text{H}^+] \quad (3.40)$$

Langelier expresa la alcalinidad como la diferencia entre la suma de todos los cationes, excepto el hidrógeno, y la suma de todos los aniones procedentes de ácidos minerales, lo cual corresponde a la definición de alcalinidad.

Sustituyendo las ecuaciones de la segunda disociación del  $\text{CO}_2$ , y la de ionización del agua, en la ecuación anterior, se tiene:

$$\frac{2K_2^1}{[\text{H}^+]} [\text{HCO}_3^-] + [\text{HCO}_3^-] + \frac{K_w^1}{[\text{H}^+]} = \text{Alcalinidad} + [\text{H}^+] \quad (3.41)$$

por otra parte al dividir término a término la ecuación del producto de solubilidad del  $\text{CaCO}_3$  entre la ecuación de la segunda disociación del ácido carbónico, se tiene:

$$\frac{\frac{[\text{CO}_3^{2-}] [\text{Ca}^{2+}]}{[\text{H}^+] [\text{CO}_3^{2-}]} = \frac{K_{ps}^1}{K_2^1}}{[\text{HCO}_3^-]} \quad \text{entonces:} \quad \frac{[\text{Ca}^{2+}] [\text{HCO}_3^-]}{[\text{H}^+]} = \frac{K_{ps}^1}{K_2^1}$$

y por lo tanto:

$$[\text{HCO}_3^-] = \frac{K_{ps}^1 [\text{H}^+]}{K_2^1 [\text{Ca}^{2+}]} \quad (3.42)$$

Sustituyendo ésta última ecuación en la ecuación 3.41, se tiene:

$$\frac{[\text{H}^+]_s K_{ps}^1}{[\text{Ca}^{2+}] K_2^1} - \frac{2K_2^1}{[\text{H}^+]_s} + 1 + \frac{K_w^1}{[\text{H}^+]_s} = \text{Alcalinidad} + [\text{H}^+]_s \quad (3.43)$$

Esta forma de la ecuación no es de uso práctico, ya que la concentración de saturación de los iones hidrógenos aparece en ambos miembros y resulta difícil de despejar, entonces Langelier considera que:

- $[\text{H}^+]_s$  y  $K_w^1/[\text{H}^+]_s$  son muy pequeños en relación a la alcalinidad.
- $2K_2^1/[\text{H}^+]_s$  es muy pequeño con respecto a la unidad.

con lo cual se pueden desprejar ambos términos:

$$\frac{K_{ps}^1 [\text{H}^+]_s}{K_2^1 [\text{Ca}^{2+}]} = \text{Alcalinidad} \quad (3.44)$$

La primera consideración limita el uso de la ecuación a pH's entre 5 y 9 y la segunda limita el uso a un pH < 8.3, esto implica no considerar al ion carbonato, debido a que este se presenta solo a pH's mayores a 8.3, como se puede observar en la figura 3.7.

Entonces:

$$[\text{H}^+]_s = \frac{K_{ps}^1}{K_2^1} [\text{Ca}^{2+}] (\text{Alcalinidad}) \quad (3.45)$$

aplicando logaritmos y cambiando signos:

$$\text{pHs} = \text{p}K_2^1 - \text{p}K_{ps}^1 + \text{p}[\text{Ca}^{2+}] + \text{p}[\text{Alcalinidad}] \quad (3.46)$$

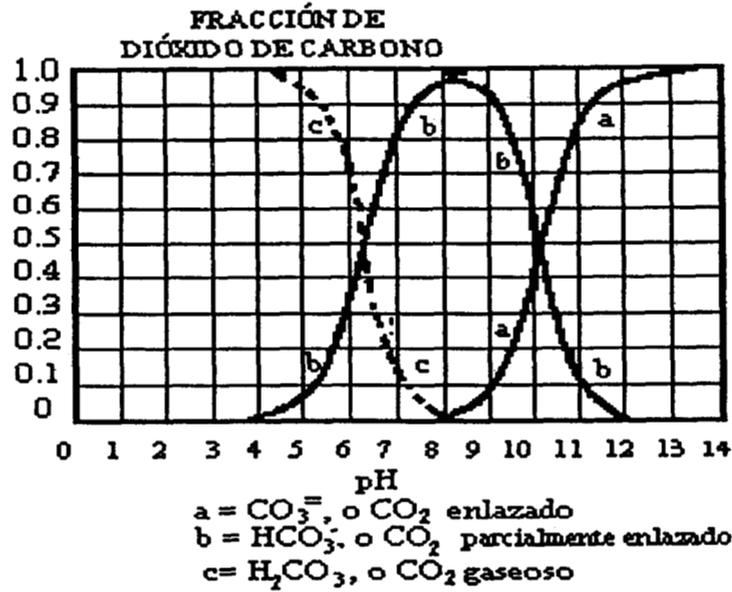


Figura 3.7. Diagrama de distribución del sistema  $\text{H}_2\text{CO}_3$  a 20 °C.

entonces:  $p[\text{H}^+]_s = f(\text{Ca}, \text{Alc.}, \mu)$

Considerando que cuando se mide con un potenciómetro, se obtienen actividades y no concentraciones y sabiendo que:

$$\begin{aligned} p[\text{H}^+]_s &= \text{pH}_s - \frac{1}{2}\xi \\ pK_2^1 &= \text{pK}_2 - 2\xi \\ \text{pK}_{\text{ps}}^1 &= \text{pK}_{\text{ps}} - 4\xi \end{aligned}$$

se tiene:

$$\text{pH}_s = \text{pK}_2 - \text{pK}_{\text{ps}} - \log [\text{Ca}^{2+}] - \log [\text{Alc}] + 2.5 \xi \quad (3.47)$$

Para expresar  $\xi$  y si la fuerza iónica del agua bajo estudio es menor a  $10 \times 10^{-3}$ , Langelier utiliza:

$$\xi = \frac{\mu^{1/2}}{1 + 0.9 \mu^{1/2}} \quad (3.48)$$

Por las limitaciones introducidas, la alcalinidad en la fórmula de Langelier, ecuación 3.43, es igual al contenido de los bicarbonatos; entonces:  $[Alc]=[HCO_3^-]$ ; y además, si se sustituyen por miligramos-equivalentes las concentraciones molares, se puede escribir la ecuación como:

$$pH_s = 6.301 + pK_2 - pK_{ps} - \log [Ca^{2+}] - \log [HCO_3^-] + 2.5 \mu^{1/2} \quad (3.49)$$

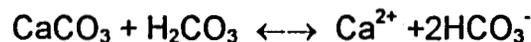
Esta ecuación es la que se utiliza para determinar el pHs de Langelier y la diferencia  $pK_2 - pK_{ps}$ , está tabulada para distintas temperaturas:

Tabla 3.5. Tabulación de  $pK_2 - pK_{ps}$  a diferentes temperaturas

| Temperatura °C   | 0    | 10   | 20   | 30   | 40   | 50   | 60   | 70   | 80   |
|------------------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|
| $pK_2 - pK_{ps}$ | 2.69 | 2.33 | 2.09 | 1.80 | 1.71 | 1.58 | 1.41 | 1.27 | 1.15 |

La ecuación de Langelier para el pH de saturación (pHs), es la ecuación que expresa el estado de equilibrio del agua. Eso significa que si el agua está en equilibrio químico, cumple con la ecuación de Langelier y si no está en equilibrio, no se cumple y el pHs calculado de la ecuación 3.47, es el pH que tendría el agua si estuviera en equilibrio con el contenido de calcio y bicarbonato dados, sin cambios en éstos y en la fuerza iónica. Un agua que no está en equilibrio, utilizando  $CaCO_3$ , cambia las concentraciones de  $Ca^{2+}$  y  $HCO_3^-$ , así como la fuerza iónica.

El equilibrio de solubilidad del  $CaCO_3$  también se puede expresar mediante otros parámetros, si se toma en consideración la siguiente ecuación:



cuya ecuación de equilibrio será:

$$[Ca^{2+}][HCO_3^-]^2 / [H_2CO_3] = K_{ps}K_1/K_2 \quad (3.50)$$

De aquí, se puede observar, que también se puede utilizar la concentración del  $H_2CO_3$  o del  $HCO_3^-$ , en lugar de la concentración de  $H^+$  asociada a la solubilidad de equilibrio. Además, la cantidad presente de  $CaCO_3$  depositado no se puede predecir solamente a partir de los datos de saturación, también dependen de la

concentración de los iones que se consideran "ajenos" presentes en el cuerpo de agua de estudio, principalmente cuando se trata de aguas residuales industriales, hidrometalúrgicas, etc.

### 3.3.3 Relación de Índices de Langelier y la Corrección por Fuerza Iónica de Mojmir Mach para la Determinación Cuantitativa de la Agresividad de las Aguas<sup>26</sup>.

En este método se consideran también la aportación de los iones denominados "ajenos" a la fuerza iónica está dada por la ecuación siguiente:

$$\mu = \frac{1}{2} \sum c_i z_i^2 \quad (3.51)$$

la cual al desarrollarla, se obtiene:

$$\mu = 2[\text{Ca}^{2+}] + 2[\text{Cat}^{2+}] + \frac{1}{2} [\text{Cat}^+] + \frac{1}{2} [\text{H}^+] + 2[\text{CO}_3^{2-}] + 2[\text{An}^{2-}] + \frac{1}{2} [\text{An}^-] + \frac{1}{2} [\text{HCO}_3^-] + \frac{1}{2} [\text{OH}^-] \quad (3.52)$$

y si al multiplicarla por dos, queda:

$$2\mu = 4[\text{Ca}^{2+}] + 4[\text{Cat}^{2+}] + [\text{Cat}^+] + [\text{H}^+] + 4[\text{CO}_3^{2-}] + 4[\text{An}^{2-}] + [\text{An}^-] + [\text{HCO}_3^-] + [\text{OH}^-] \quad (3.53)$$

por otro lado, la ecuación de electroneutralidad,  $\Sigma \text{Cationes} = \Sigma \text{Aniones}$ , expresados en equivalentes, desarrollada, genera la siguiente expresión:

$$0 = 2[\text{Ca}^{2+}] + 2[\text{Cat}^{2+}] + [\text{Cat}^+] + [\text{H}^+] - 2[\text{CO}_3^{2-}] - 2[\text{An}^{2-}] - [\text{An}^-] - [\text{HCO}_3^-] - [\text{OH}^-] \quad (3.54)$$

Si se suman estas dos últimas ecuaciones, 3.53 y 3.54, miembro a miembro, y se divide luego entre dos, se obtiene:

$$\mu = 3[\text{Ca}^{2+}] + 3[\text{Cat}^{2+}] + [\text{Cat}^+] + [\text{H}^+] + [\text{CO}_3^{2-}] + [\text{An}^{2-}] \quad (3.55)$$

Las aguas naturales, generalmente tienen un pH mayor de 4.5, esto permite despreciar a  $\text{H}^+$ , por lo tanto:

$$\mu = 3[\text{Ca}^{2+}] + 3[\text{Cat}^{2+}] + [\text{Cat}^+] + [\text{CO}_3^{2-}] + [\text{An}^{2-}] \quad (3.56)$$

y representando a los iones "ajenos" como:

$$A = 3[\text{Cat}^{2+}] + [\text{Cat}^+] + [\text{An}^{2-}] \quad (3.57)$$

se tiene que la ecuación se puede representar como:

$$\mu = 3[\text{Ca}^{2+}] + [\text{CO}_3^{2-}] + A \quad (3.58)$$

De la ecuación 3.34, se despeja  $[\text{CO}_3^{2-}]$  y se obtiene:

$$[\text{CO}_3^{2-}] = \frac{K_{ps}^1}{[\text{Ca}^{2+}]} \quad (3.59)$$

sustituyendo a  $[\text{CO}_3^{2-}]$  en la ecuación anterior:

$$\mu = 3 [\text{Ca}^{2+}] + \frac{K_{ps}^1}{[\text{Ca}^{2+}]} + A \quad (3.60)$$

obteniéndose una ecuación de segundo grado, que se puede resolver:

$$[\text{Ca}^{2+}] = \frac{(\mu - A) \pm ((\mu - A)^2 - 12K_{ps}^1)^{1/2}}{6} \quad (3.61)$$

sustituyendo en la ecuación  $[\text{CO}_3^{2-}][\text{Ca}^{2+}] = K_{ps}^1$  y multiplicando por la conjugada del denominador se obtiene:

$$[\text{CO}_3^{2-}] = \frac{1}{2} [(\mu - A) - ((\mu - A)^2 - 12K_{ps}^1)^{1/2}] \quad (3.62)$$

Considerando que los iones ajenos no cambian sus concentraciones y que  $K_{ps}^1$  depende de  $\mu$  se puede decir que  $[\text{CO}_3^{2-}] = f(\mu)$

En forma similar se pueden obtener las ecuaciones de todas las variables en función de la fortaleza iónica. Para simplificar la escritura de las ecuaciones de las distintas variables, los grupos de los iones ajenos, producto de las transformaciones matemáticas, se expresan:

$$A = 3[\text{Cat}^{2+}] + [\text{Cat}^+] + [\text{An}^{2-}] \quad (3.63)$$

$$C = 12[\text{Cat}^{2+}] + 5[\text{Cat}^+] - 4[\text{An}^{2-}] - 3[\text{An}^-] \quad (3.64)$$

$$D = 4[\text{An}^{2-}] - 1/2[\text{Cat}^{2+}] + 3/2[\text{An}^-] \quad (3.65)$$

por lo tanto se tiene:

$$[\text{Ca}^{2+}] = \frac{[(\mu - A) + ((\mu - A)^2 - 12K_{ps}^{-1})^{1/2}]}{6} \quad (3.61)$$

$$[\text{CO}_3^{2-}] = \frac{1}{2} [(\mu - A) - ((\mu - A)^2 - 12K_{ps}^{-1})^{1/2}] \quad (3.62)$$

$$[\text{HCO}_3^-] = \frac{1}{3} [C - 2\mu + 4((\mu - A)^2 - 12K_{ps}^{-1})^{1/2}] \quad (3.66)$$

$$[\text{H}^+] = \frac{K_2^{-1} [(\mu - A) + ((\mu - A)^2 - 12K_{ps}^{-1})^{1/2}] [C - 2\mu + 4((\mu - A)^2 - 12K_{ps}^{-1})^{1/2}]}{18K_{ps}^{-1}} \quad (3.67)$$

$$[\text{H}_2\text{CO}_3] = \frac{K_2^{-1} [(\mu - A) + ((\mu - A)^2 - 12K_{ps}^{-1})^{1/2}] [C - 2\mu + 4((\mu - A)^2 - 12K_{ps}^{-1})^{1/2}]}{54 K_1^{-1} K_{ps}^{-1}} \quad (3.68)$$

Con estas ecuaciones es posible calcular y dibujar la curva de equilibrio de un agua, para cualquier sistema de coordenadas.

Debemos tener presente que para determinar el pH mediante potenciometría, la ecuación será:

$$\text{pH} = 0.653 + \text{p}K_2 - \text{p}K_{ps} - \log(\mu - A) - \log(\mu - D) + 2.5\xi \quad (3.69)$$

Las ecuaciones de las variables se simplifican si consideramos que el  $\text{pH}$  es menor de 8.3, entonces se tendrá:

de la ecuación 3.57

$$[\text{Ca}^{2+}] = (1/3)(\mu - A) \quad (3.70)$$

de la tabla 3.2

$$[\text{CO}_3^{2-}] = 0 \quad (3.71)$$

$$[\text{HCO}_3^-] = 2/3(\mu - D) \quad (3.72)$$

$$[\text{H}^+] = \frac{2 K_2^{-1} (\mu - A) (\mu - D)}{9K_{ps}^{-1}} \quad (3.73)$$

$$[\text{H}_2\text{CO}_3] = \frac{4 K_2^{-1} (\mu - A) (\mu - D)^2}{27 K_1^{-1} K_{ps}^{-1}} \quad (3.74)$$

Una vez calculados las variables necesarias y con la aportación de los iones ajenos se pueden desarrollar las curvas de evolución y de equilibrio.

### Cálculo de la Fuerza Iónica de Equilibrio.

Para calcular las  $\mu_{eq}$  se recomienda adoptar valores cercanos (un poco mayores) que el valor de  $\mu_{real}$  calculado con el agua agresiva. Los valores de  $\mu_{propuestos}$ , deben encontrarse tan cerca uno del otro, que permita trazar una recta en ese tramo (independientemente de la forma de la curva) sin incurrir en errores apreciables.

Se entra a la gráfica con el valor de  $1/2[\text{HCO}_3^-] + [\text{H}_2\text{CO}_3]$  de la muestra en su estado original, que al intersectarse la línea que representa este valor con la curva, nos da  $\mu_{eq}$ , en el eje de ordenadas.

Para calcular las agresividades, según el método de Fuerza iónica, se tendrán las siguientes ecuaciones:

- $Agr = 1/3 (\mu_{eq} - \mu_{real})$
- $Agr = [\text{Ca}^{2+}]_{eq} - [\text{Ca}^{2+}]_{real}$
- $Agr = 1/2 [(\text{HCO}_3^-)_{eq} - (\text{HCO}_3^-)_{real}]$

El resultado de las tres ecuaciones deberán ser aproximadamente iguales.

Cuando  $Agr = 0$  el agua se encuentra en equilibrio, pero si  $Agr > 0$  entonces es agresiva (puesto que hay menos  $\text{Ca}^{2+}$  o  $\text{HCO}_3^-$  de los necesarios para alcanzar el  $K_{ps}^{-1}$ ).

## COMPONENTES PRINCIPALES DE UN CUERPO DE AGUA

Si bien es cierto que el agua está compuesta por moléculas de H<sub>2</sub>O, un cuerpo acuoso contiene además algunas otras especies, debido a que el agua disuelve cierta cantidad de casi todos los sólidos o gases presentes en la atmósfera con los que se pone en contacto y los minerales que hay en los dos primeros kilómetros de la corteza terrestre, esto quiere decir que contiene una serie de compuestos orgánicos e inorgánicos los cuales darán paso a los diversos tipos de sistemas acuáticos.

### 4.1 Materia orgánica <sup>12,16,17</sup>.

La materia orgánica está constituida principalmente por: C, H, O, N, los cuales se conocen como biogénéticos, es decir, engendrados de la vida.

**La materia orgánica en el agua se presenta como organismo viviente, animal o vegetal, como producto de la vida orgánica, en forma de albúmina, urea, tejidos, etc., disueltos o en suspensión y también como residuo de la descomposición, incluyendo materia mineral en forma de sales de amonio, nitratos o carbonatos.**

El contenido de materia orgánica en las aguas subterráneas, generalmente, es muy bajo, sobre todo si el agua corre por suelos arenosos que sirven de filtros a estas aguas. En las aguas superficiales este contenido es generalmente grande.

## Componentes principales de un cuerpo de agua.

Algunos residuales líquidos son soluciones muy concentradas de materia orgánica, de origen vegetal o animal que se pudren en el suelo y son arrastrados por el escurrimiento o se descomponen dentro de la propia fuente. Estas sustancias no son nocivas para la salud, pero bajan la calidad del agua al afectar sus propiedades organolépticas, es decir producen una coloración amarillenta, **dan carácter ácido al agua** y si su concentración es grande, producen un mal olor característico.

Las sustancias orgánicas más peligrosas que se encuentran en las aguas son de origen animal, producto de organismos muertos o de las excreciones humanas y animal. Estas sustancias llegan al afluente arrastradas por el escurrimiento o por vertimiento directo del residual. Los mantos subterráneos pueden contaminarse por infiltración de fugas en el alcantarillado o a partir de pozos negros excavados dentro del manto o muy cerca de él, por construcciones de lagunas de estabilización, lecho de secado u otro tratamiento similar, en lugares cercanos al manto, favorecido por una mala filtración del suelo.

Las sustancias orgánicas sirven de alimento para los organismos acuáticos inferiores y superiores. Algunas plantas toman como alimento los productos de oxidación surgidos de la actividad vital de los microbios. La materia muerta consumida por la fauna y la flora acuática, sirve para la construcción de cuerpos como fuente de energía vital. A su vez los organismos inferiores sirven de alimento para los superiores. De esta manera la sustancia muerta se transforma en materia viva siempre más y más organizada.

### Determinación de la Materia Orgánica.

Existen varios métodos o ensayos para determinar el contenido de materia orgánica en las aguas residuales :

1. Determinación de los sólidos volátiles.
2. Demanda Bioquímica de Oxígeno (DBO).
3. Demanda Química de Oxígeno (DQO).
4. Carbón Orgánico Total (COT).
5. Demanda Total de Oxígeno (DTO) .
6. Enzimas Deshidrogenosas .

Los principales métodos son la determinación de la DBO y la DQO, los cuales se describirán a continuación:

A) Demanda Química de Oxígeno (DQO).

La prueba de la demanda química de oxígeno se usa para medir el contenido de materia orgánica en aguas naturales y residuales<sup>15</sup>. Consiste en una medida de control de la calidad del agua que corresponde a la cantidad del oxígeno necesaria para oxidar la materia presente en el agua por medio de un oxidante fuerte en medio ácido, que conforme a la ley General del Equilibrio Ecológico y la Protección del Ambiente, antes de la descarga a un cuerpo receptor debe ajustarse a los máximos permisibles contenidos en las normas técnicas ecológicas y condiciones particulares de descargas fijadas por la autoridad competente, y que se miden conforme a las normas oficiales expedidas por la misma<sup>24,25</sup>.

Las relaciones aproximadas entre los distintos parámetros de carbono y oxígeno se presentan en la tabla 4.1 estimados a partir de un gráfico de Eckenfelder y Ford<sup>39</sup>. Los valores indicados en la tabla son valores medios típicos, las relaciones correctas para una agua residual determinada deben ser evaluadas en cada caso, ya que dependen de su composición química. Así los valores de la tabla 4.1 deben solamente utilizarse para estimaciones aproximadas si no se dispone de datos concretos.

Tabla 4.1. Valores medios de los parámetro referentes al oxígeno en aguas residuales como porcentaje de la demanda teórica de oxígeno.

|                             |     |
|-----------------------------|-----|
| Demanda Teórica de Oxígeno  | 100 |
| DTO                         | 92  |
| DQO (normalizado)           | 83  |
| DBO                         |     |
| Con nitrificación           | 58  |
| Eliminando la nitrificación | 52  |
| DQO (método rápido)         | 70  |

\* Para parámetros tomando como referencia al carbono COT representa un 95 % del carbono orgánico teórico (COTe).

B) Demanda Bioquímica de Oxígeno (DBO).

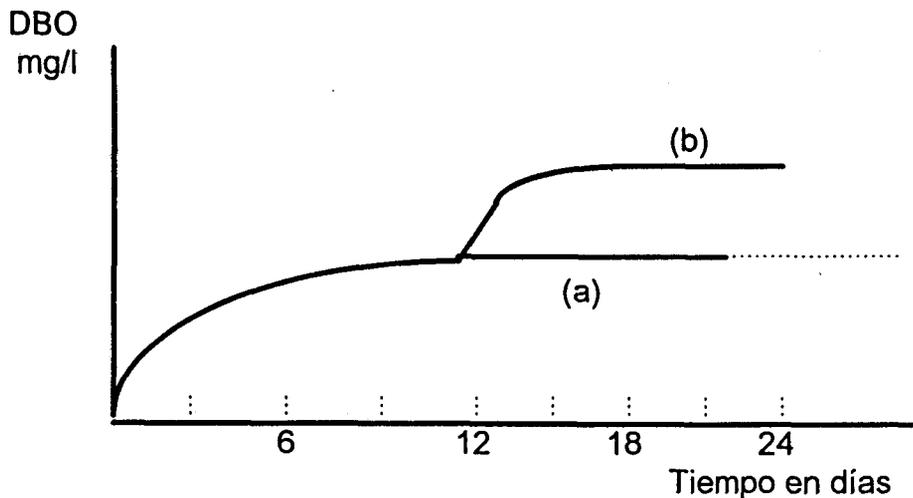
La demanda bioquímica de oxígeno se usa como una medida de la cantidad de oxígeno requerido para la oxidación de la materia orgánica biodegradable presente en la muestra de agua y como resultado de la

Componentes principales de un cuerpo de agua.

**acción de oxidación bioquímica aerobia** <sup>24,25,39,40</sup>. La demanda de oxígeno de las aguas residuales es resultado de tres tipos de materiales <sup>13</sup>:

- (1) materiales orgánicos, utilizables como fuente de alimentación por organismos aeróbicos;
- (2) nitrógeno oxidable, derivado de la presencia de nitritos, amoníaco y en general compuestos orgánicos nitrogenados que sirven como alimentación para bacterias específicas;
- (3) compuestos químicos reductores (ion ferroso, sulfitos, sulfuros, que se oxidan por oxígeno disuelto).

El proceso de estabilización de la materia orgánica se desarrolla en dos etapas. Durante la primera etapa, la mayor parte de la materia orgánica carbonácea se desdobra, con producción de CO<sub>2</sub> y húmicos <sup>15</sup>. En la segunda etapa son atacadas las sustancias nitrogenadas en alta proporción y se produce además una cierta nitrificación. La figura no. 4.1 muestra la forma de la curva de DBO.



- (a) Curva para la demanda (carbonización)  $y = L(1 - 10^{-kt})$   
(b) Curva por demanda combinada (carbonización más nitrificación)

**Figura 4.1.** Curva normal para oxidación de materia orgánica.

En la figura 4.1<sup>15</sup>, se presentan las formas de las curvas y en ellas se observan que con el aumento de la temperatura, aumenta la rapidez del proceso y el grado de descomposición. Al mismo tiempo, comienza más rápidamente la segunda etapa (nitrificación).

Teóricamente, se requeriría un tiempo infinito para la oxidación completa (por medio biológico) de la materia orgánica pero para los fines prácticos la reacción puede considerarse completa a los 20 días. El método más usado en la actualidad es determinar la DBO a los 5 días y a 20°C; eliminando la influencia de la etapa de nitrificación (en aguas residuales normales a esta temperatura comienza aproximadamente a los 8 o 9 días).

La cantidad de materia orgánica presente se puede determinar mediante la cuantificación del oxígeno disuelto, es decir, los microorganismos contenidos en el agua consumen el oxígeno disuelto y **este oxígeno consumido es directamente proporcional a la materia orgánica oxidada.**

## 4.2 Componentes Inorgánicos.

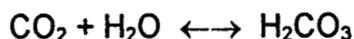
### 4.2.1 Especies neutras.

Bióxido de carbono (CO<sub>2</sub>)<sup>6,15,22</sup>

El CO<sub>2</sub> es un componente normal de las aguas naturales. Las fuentes que suministran CO<sub>2</sub> a las aguas son: la atmósfera y oxidación biológica de materia orgánica.

El bióxido de carbono puede entrar en las aguas superficiales por absorción desde la atmósfera cuando su presión parcial en las aguas superficiales es menor que la presión parcial del CO<sub>2</sub> en la atmósfera (Ley de Henry). En caso contrario, si la presión parcial de este componente en el agua excede a la de la atmósfera, el CO<sub>2</sub> escapará del líquido. Es decir que las aguas superficiales están constantemente absorbiendo y desprendiendo CO<sub>2</sub>, para mantenerse en equilibrio con el de la atmósfera.

El CO<sub>2</sub> se presenta en forma de gas, no es combustible ni comburente, con el agua reacciona como un ácido de Lewis para formar el ácido carbónico, el cual no es posible aislar. A continuación se presenta la reacción ácido-base:



Esta ecuación se encuentra fuertemente orientada hacia la izquierda y en solución se acepta que existe 99% de  $\text{CO}_2$  y 1% de  $\text{H}_2\text{CO}_3$ , debido que la solución adquiere ciertas propiedades ácidas. Basándose en esto, se usa a uno o al otro entendiéndose que al nombrarlos se está haciendo referencia a la suma:  $\text{CO}_2 + \text{H}_2\text{CO}_3$ .

#### 4.2.2 Especies aniónicas.

- Bicarbonatos ( $\text{HCO}_3^-$ ) y Carbonatos ( $\text{CO}_3^{2-}$ )<sup>22</sup>.

El ion carbonato es el componente alcalino principal de casi todas las fuentes de agua, por lo general se encuentra en el intervalo de 5-5000 mg/l como carbonato de calcio. También se genera a partir de la descomposición del ácido carbónico en agua, generándose primeramente el bicarbonato y posteriormente el carbonato. Este ácido carbónico se produce en aguas que contienen  $\text{CO}_2$ .

El control de la alcalinidad es importante en muchas aplicaciones industriales debido a su importancia en el índice de estabilidad del carbonato de calcio

- Cloruros ( $\text{Cl}^-$ )<sup>12,15,41</sup>

El cloro como ion cloruro es uno de los principales aniones en las aguas naturales y en las aguas negras. En concentraciones excesivas puede impartir al agua un sabor salino. Si el contenido de cloruros del agua es grande, esto se debe a depósitos salinos subterráneos o a la contaminación del suelo por aguas residuales. El agua de los manantiales contiene normalmente hasta unos 30 mg/l de cloruro. Las aguas muy contaminadas pueden tener sobre 1000 mg/l. Sin embargo un gran contenido de cloruros en el agua no siempre indica contaminación.

Por el sabor es posible reconocer el cloruro de sodio en el agua desde una cantidad de 300 a 400 mg/l. Además del cloruro de sodio, suelen estar presentes en el agua, algunas veces los cloruros de magnesio y potasio. Una alta cantidad de cloruros, en especial en presencia de magnesio y con una

dureza carbonatada pequeña actúa sobre los metales y los corroe. La corrosión aumenta con la temperatura y la presión.

• Nitritos ( $\text{NO}_2^-$ ) <sup>12,15,41</sup>

Los nitritos son sustancias muy inestables y si se presentan en las aguas pueden tener uno de estos tres orígenes, por:

1. Nitrificación incompleta por falta de oxígeno, por lo general en este caso, el aporte de materia orgánica es superior a la capacidad de mineralización del suelo, o que las aguas tienen su fuente muy cerca del lugar donde se inicia el proceso de nitrificación con escasa oxigenación.
2. Producción en exceso por desnitrificación bajo la acción de las bacterias sobre los nitratos y ciertos gérmenes de naturaleza patógena. Por lo general las aguas artesianas profundas son muy pobres en oxígeno y frecuentemente por esta razón, no contiene nitratos sino nitritos y amoníaco.
3. Procedencia del suelo, originados por el uso de fertilizantes en proceso de reducción y que son arrastrados por las precipitaciones pluviales a los mantos acuíferos.

• Nitratos ( $\text{NO}_3^-$ ) <sup>12,15,41</sup>

El agua mineral suele contener desde unas decenas a unos miligramos de nitrato por litro; sin embargo en terrenos poblados podemos encontrar decenas y centenas de mg/l. También algunas aguas minero-medicinales contienen mucho nitrato.

Por lo general, la materia orgánica de procedencia vegetal proporciona muy pocos nitratos a las aguas y casi todos tienen su origen en la materia animal. Además, se pueden originar por la descomposición de la materia orgánica antigua. Los nitratos son absorbidos por el suelo en cantidades insignificantes, lo que hace que se puedan infiltrar hasta distancias muy largas del lugar de origen. El agua puede agotar los nitratos de los yacimientos minerales.

La prueba de los nitratos se puede usar en ciertos casos para diagnosticar la contaminación del agua, con la prueba del amoníaco y de los nitritos. En estos casos es importante la determinación cuantitativa de los nitratos. Sin embargo,

## Componentes principales de un cuerpo de agua.

la ausencia de amoníaco, de nitritos y de nitratos (estos últimos pueden estar presentes en trazas) en el agua, es un índice de su pureza, ya que se puede concluir que el agua no está contaminada por afluentes dudosos desde el punto de vista higiénico.

En la actualidad conocer los compuestos de nitrógeno que existen en las aguas tiene una importancia considerable, principalmente en las aguas de abastecimiento por su influencia en la práctica de la desinfección. Si controlamos la nitrificación el costo de los tratamientos aerobios pueden disminuirse. En tratamientos biológicos aerobios es importante la determinación del nitrógeno orgánico y amoniacal. Mientras que en los fangos es el mejor factor para determinar su valor fertilizante. También el contenido de nitrógeno influye en el crecimiento de las algas y en las formas reducidas al ser oxidadas, afectan al oxígeno disuelto.

- Fosfatos ( $\text{HPO}_4^{2-}$  y  $\text{H}_2\text{PO}_4^-$ )<sup>12,15,41,42</sup>

Las aguas que reciben aguas negras, crudas o depuradas, drenaje agrícola y ciertos desechos industriales, contienen normalmente concentraciones apreciables de fosfatos. Además de esto, con frecuencia se agregan diversas formas de fosfatos a las aguas domésticas o residuales de industrias ( como por ejemplo cervecerías) y en ocasiones se identifican en una misma muestra tanto ortofosfato como polifosfatos (fosfatos deshidratados molecularmente).

También se pueden combinar huellas de fosfatos con la materia orgánica, aunque tales fosfatos muy rara vez exceden de unos cuantos decimos de miligramos por litro. En sus varias formas también se pueden presentar en la **materia suspendida** o en los **sedimentos** de las muestras.

**Los análisis de fosfatos sirven fundamentalmente para el control de la dosificación de productos químicos en los tratamientos o como medio para mostrar que existe contaminación.**

Generalmente los fosfatos junto al amoníaco, nitritos y los cloruros se encuentran en el agua. Solo excepcionalmente las aguas inofensivas contienen fosfatos y estos proceden de la disolución de las capas limpias del suelo. El nivel crítico para los fosfatos ha sido establecido alrededor de 0.01 mg/l<sup>42</sup>.

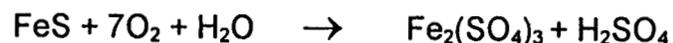
- Sulfatos ( $\text{SO}_4^{2-}$ ) <sup>12,15,42</sup>

El agua de las precipitaciones disuelve durante el paso por el aire los compuestos de azufre, que esencialmente en forma de bióxido y trióxido de azufre han llegado al aire por medio del humo. En el aire que no está excepcionalmente contaminado, suele haber hasta  $2 \text{ mg/m}^2$  de trióxido de azufre; en el agua de la lluvia en la ciudad, más o menos  $20 \text{ mg/l}$ . Sin embargo en la vecindad de las fábricas químicas se ha encontrado hasta  $500 \text{ mg/l}$  de  $\text{SO}_4^{2-}$ .

El agua subterránea agota los sulfatos del suelo. Generalmente en el agua subterránea se encuentra el sulfato de calcio. La mayor parte de estas aguas contienen iones sulfatos hasta  $70 \text{ mg/l}$ , y a veces en cantidades mayores, especialmente en las capas geológicas formadas por yeso y calcita. Además del sulfato de calcio pasan al agua subterránea, con bastante frecuencia los sulfatos de magnesio y de sodio. El contenido de ambos compuestos tienen que ser bajos en agua potable, porque causan **diarreas**. En general, se consideran aguas no aptas para beber, ni otros usos específicos, aquellas cuyo contenido de sulfatos sea mayor de  **$250\text{-}300 \text{ mg/l}$**  <sup>42</sup>.

Hay aguas minero-medicinales que poseen una alta concentración de sulfatos y por eso se clasifican como aguas **sulfatadas**. Los sulfatos pueden ser de origen mineral u orgánico. En este último caso como resultado final de la mineralización de los compuestos del azufre en el agua o en el suelo; no son dañinos y no son indicativos de la contaminación del agua subterránea.

Las aguas subterráneas con reacción ácida, al ponerse en contacto con los yacimientos de los minerales de hierro adquieren el sulfato ferroso. Tales aguas reciben el nombre de **vitriolas**. Si el nivel del agua subterránea oscila en las capas que contiene pirita, puede producirse durante el descenso del agua y en presencia del aire, la oxidación del sulfuro en sulfato férrico y en ácido sulfúrico.



este ácido sulfúrico libre descompone los carbonatos formando sulfato de calcio y liberando el bióxido de carbono. Sin embargo cuando hay poco carbonato no se produce la reacción, quedando ácido sulfúrico libre. Por un

proceso similar puede pasar al agua el sulfato manganoso proveniente de formaciones geológicas.

**El agua superficial natural contiene, por regla general sólo sulfatos, los otros compuestos del azufre solamente entran al cuerpo de agua por la contaminación debido a las aguas residuales.** Las aguas residuales contienen a menudo cantidades altas de sulfato y de ácido sulfúrico libre, principalmente las aguas residuales de industrias como: las refinerías, las de producción de ácido sulfúrico, las de petróleo, etc.

Los sulfatos son importantes desde el punto de vista técnico, ya que representan el componente principal del agua con dureza no carbonatada en presencia de los cationes de calcio y magnesio principalmente. La dureza no carbonatada de los sulfatos es inconveniente, ya que son en su mayoría insolubles. Los sulfatos no atacan a los metales, sin embargo el ácido sulfúrico libre produce la corrosión de éstos y del hormigón. El límite considerado como dañino es de 300 mg/l de  $\text{SO}_4^{2-}$ .

#### 4.2.3 Metales <sup>12,14,19,43,44,45,46</sup>

Es importante tener en cuenta las propiedades químicas de un metal tales como su estructura, relación periódica, capacidad de coordinación, etc., para el estudio de sus mecanismos químicos y su interacción con las sustancias existentes en el medio donde se encuentra <sup>43</sup>.

##### 4.2.3.1 Influencia de la estructura de un elemento metálico en su polaridad <sup>44</sup>.

Es importante considerar la estructura de los diferentes iones, por ejemplo:

1. El ion hidrógeno ( $\text{H}^+$ ) es el típico ion sin electrones externos el cual se estabiliza en solución mediante un proceso de solvatación. Existen también los iones con configuración de gas noble ( $\text{ns}^2\text{np}^6$ ) en su capa más externa, excepto para  $n=1$ , para la cual no existen orbitales p y la configuración de capa inerte es  $1s^2$ . Este tipo de configuraciones son obtenidas por los elementos representativos de los grupos IA ( $\text{ns}^1$ ), IIA ( $\text{ns}^2$ ) y IIIB ( $\text{ns}^2\text{np}^1$ ), mediante la pérdida completa de sus electrones en la capa de valencia. Elementos de los grupos VIIB ( $\text{ns}^2\text{np}^5$ ), VIB ( $\text{ns}^2\text{np}^4$ ) y VB ( $\text{ns}^2\text{np}^3$ ) a través de la adquisición

respectiva de 1, 2 y 3 electrones en sus capas más externas, ver tabla 4.2 para ejemplos.

2. Es importante también considerar iones con estructura de 18 electrones en su última capa, como son, los elementos postransicionales de los grupos IB  $((n-1)d^{10}ns^1)$ , IIB  $((n-1)d^{10}ns^2)$ , IIIB  $(ns^2np^1)$  y IVB  $(ns^2np^2)$  que poseen configuración de la última y penúltima capa de  $(n-1)s^2(n-1)p^6(n-1)d^{10}ns^{1,2}np^{0,1,2}$ , que al perder sus electrones de valencia forman iones de configuración  $ns^2np^6nd^{10}$ , ejemplos en la tabla 4.3.

Tabla 4.2. Ejemplos de iones con configuración de gas noble.

| Estructura iónica $ns^2$     |                  |                 |    |                 |                  |                  |                  |
|------------------------------|------------------|-----------------|----|-----------------|------------------|------------------|------------------|
|                              |                  | H <sup>+</sup>  | He | Li <sup>+</sup> |                  |                  |                  |
| Estructura iónica $ns^2np^6$ |                  |                 |    |                 |                  |                  |                  |
| N <sup>3-</sup>              | O <sup>2-</sup>  | F <sup>-</sup>  | Ne | Na <sup>+</sup> | Mg <sup>2+</sup> | Al <sup>3+</sup> |                  |
| P <sup>3-</sup>              | S <sup>2-</sup>  | Cl <sup>-</sup> | Ar | K <sup>+</sup>  | Ca <sup>2+</sup> | Sc <sup>3+</sup> | Ti <sup>4+</sup> |
| As <sup>3-</sup>             | Te <sup>2-</sup> | Br <sup>-</sup> | Kr | Rb <sup>+</sup> | Sr <sup>2+</sup> | Y <sup>3+</sup>  | Zr <sup>4+</sup> |
|                              |                  | I <sup>-</sup>  | Xe | Cs <sup>+</sup> | Ba <sup>2+</sup> | La <sup>3+</sup> | Ce <sup>4+</sup> |
|                              |                  | At <sup>-</sup> | Rn | Fr <sup>+</sup> | Ra <sup>2+</sup> | Ac <sup>3+</sup> | Th <sup>4+</sup> |

Tabla 4.3 Ejemplos de configuración de iones con 18 electrones en su última capa.

| Ejemplos   | Configuración     |
|--|-------------------|
| Cu <sup>+</sup> , Zn <sup>2+</sup> , Ga <sup>3+</sup> , Ge <sup>4+</sup> | $3s^23p^63d^{10}$ |
| Ag <sup>+</sup> , Cd <sup>2+</sup> , In <sup>2+</sup> , Sn <sup>4+</sup> | $4s^24p^64d^{10}$ |
| Hg <sup>2+</sup>   | $5s^25p^65d^{10}$ |

3. Cuando los elementos que tienen una configuración de la capa de valencia  $ns^2np^x$  (donde  $x = 1, 2, 3$ ) pierden solo sus electrones p, se forman cationes con configuración  $ns^2$ . Esto es posible solo cuando las energías de los electrones ns y np difieren suficientemente como para presentar una ionización por pasos durante la formación del enlace químico. En consecuencia, solo los elementos postransicionales de los grupos IIIB, IVB y VB forman iones, como por ejemplo: Ga<sup>+</sup>, Ge<sup>2+</sup> y As<sup>3+</sup> para  $4s^2$ ; In<sup>+</sup>, Sn<sup>2+</sup> y Sb<sup>3+</sup> para  $5s^2$  y Tl<sup>+</sup>, Pb<sup>2+</sup> y Bi<sup>3+</sup> para los iones  $6s^2$ .
4. Los iones de los metales de transición, que se forman al perderse los electrones externos de la capa de valencia, pero sin ionizar a los electrones d, presentan la configuración de la capa externa  $ns^2np^6nd^x$  ( $x = 1$  a 9), estos son

#### Componentes principales de un cuerpo de agua.

clasificados como iones d, debido a las similitudes entre ellos. Por ejemplo:  $Ti^{3+}$ ,  $Cr^{2+}$ ,  $Cr^{3+}$ ,  $Co^{2+}$ ,  $Fe^{3+}$ ,  $Cu^{2+}$ , etc.

5. Existen iones denominados poliatómicos en el que un elemento en combinación con otro, con electronegatividad alta como el oxígeno, fluor y cloro, mediante la formación de enlaces covalentes pueden reducir su propia electronegatividad y la carga formal y formar un gran número de oxoaniones, tioaniones, oxocaciones, halocomplejos, etc., por lo general forman fácilmente compuestos de coordinación, como por ejemplo:  $[Cu(NH_3)_4]^{2+}$ ,  $[Mn(H_2O)_6]^{2+}$ ,  $[Fe(H_2O)_6]^{3+}$ , etc.

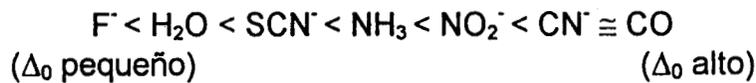
Las configuraciones de cationes donde existe presencia de electrones d, como en los casos 3, 4 y 5 principalmente, son iones con nubes electrónicas deformables por los campos eléctricos de otras especies, es decir, se comportan como iones de esferas "blandas". El caso contrario lo presentan los iones de configuración de 8 electrones (caso 1), donde, se consideran esferas "duras", ya que no se deforman fácilmente.

Una característica importante de los elementos del bloque d, de los periodos 4, 5 y 6 de la tabla periódica, la energía de los orbitales y la configuración electrónica resultan en una extensa variedad de estados de oxidación.

Los electrones de los orbitales s, p o d, pueden estar acoplados o no acoplados. Los niveles de energía de los orbitales d son alterados por el campo eléctrico de los pares electrónicos donadores en los ligandos. Básicamente, los cinco orbitales electrónicos d de los metales centrales son divididos dentro de dos orbitales de alta energía denominados  $e_g$  y tres orbitales de baja energía denominados  $t_{2g}$ , separados por un intervalo de energía  $\Delta_0$ , cuando interaccionan los ligandos<sup>45</sup>.

Sí un ligando es "débil",  $\Delta_0$  es pequeña; para ligando "fuertes",  $\Delta_0$  es grande. El resultado del juego de orbitales electrónicos en un complejo octaédrico de un metal con 4, 5, 6 o 7 electrones en el orbital d puede tener predominantemente pares de electrones en este orbital, conociéndosele entonces como un complejo de bajo espín (campo alto); y si presenta varios electrones desapareados, entonces será un complejo de alto espín (campo débil). La estabilidad resultante de un complejo ML, lábil o inerte, es una consecuencia directa de una interacción débil o fuerte del orbital d del metal de transición con los orbitales de los ligandos.

La fuerza relativa de ligandos con respecto a la energía de orbitales d divididos,  $\Delta_0$  es conocida como la "serie espectroquímica" de Irving-Williams:



Las series de transición están cruzadas, la configuración  $d^5$  del  $\text{Mn}^{2+}$  representa relativamente una tendencia débil hacia el enlace covalente, el  $\text{Zn}^{2+}$  es el que cierra las series. En general, el carácter covalente de enlaces tiende a incrementar de izquierda a derecha para la transición de los metales.

- Calcio

El calcio presenta un sólo estado de oxidación de +2, y un radio iónico de 0.97 Å. De entre las sales que genera se encuentra el  $\text{CaCO}_3$ , que es al que se le atribuye la dureza de los cuerpos de agua natural. Está presente en muchos minerales, sobre todo en la piedra caliza. Los depósitos de piedra caliza son, con frecuencia, residuo de fósiles de pequeños organismos acuáticos. El calcio es uno de los factores principales para determinar el índice de estabilidad.

- Magnesio

Al igual que el metal anterior, el magnesio presenta un estado de oxidación único de +2, con un radio iónico de 0.65 Å. Debido a su tamaño el ión metálico de este metal, forma complejos con mayor facilidad ya que es más polarizante que el  $\text{Ca}^{2+}$  por tener un radio más pequeño, asimismo la solubilidad de las sales de este metal con los iones cloruro, carbonato y sulfato es mayor que para las sales generadas con el ion calcio. La dureza de magnesio de un agua es por lo general, aproximadamente una tercera parte de la dureza total. El magnesio es un componente primordial de muchos minerales, como la dolomita, magnesita y muchas variedades de arcilla.

- Hierro

Presenta preferentemente dos estados de oxidación 2+ (reductor) y 3+ (el más estable), aunque también llega a presentar el estado de oxidación +6 el cual es fuertemente oxidante, por lo que es muy inestable. La presencia de un electrón en cada uno de los cinco orbitales d en el ion  $\text{Fe}^{3+}$  y de un electrón en sólo cuatro de los orbitales d en el ion  $\text{Fe}^{2+}$ , explica la fácil oxidación del  $\text{Fe}^{2+}$  al  $\text{Fe}^{3+}$ . Estos iones presentan coloración la cual está asociada a su orbital d incompleto y a la naturaleza de los ligandos que circundan al ion. El hierro se

encuentra en la mayor parte de las rocas ígneas y en los minerales arcillosos. En ausencia de oxígeno, el hierro es bastante soluble en estado reducido, sin embargo, cuando se oxida es casi completamente insoluble.

- Manganeseo

El manganeseo exhibe varios estados de oxidación importantes: +7 (fuertemente oxidante), +6, +4, +3 y +2 (el más estable). Las sales de carbonato y fosfato de manganeseo (II) son insolubles. También el  $Mn(OH)_2$  precipita. Está presente en muchos suelos, sedimentos y además en las rocas metamórficas. En el agua libre de oxígeno, se disuelve fácilmente en estado manganoso ( $Mn^{2+}$ ). En el estado oxidado, el manganeseo es bastante insoluble. Los materiales orgánicos pueden quelatar al manganeseo al igual que lo hacen con el hierro. Debido a que el manganeseo se acumula en los sedimentos, es común encontrar niveles altos de manganeseo en las aguas profundas, mientras que puede no evidenciarse en las superficiales.

- Cobre

El cobre exhibe dos estados de oxidación: +2 y +1, el primero es el más estable y el segundo solamente es estable en solución acuosa si forma parte de un ion complejo estable. Puede estar presente en el agua por el contacto de ésta con minerales que lo contienen o con desechos minerales en la producción de cobre, sin embargo, es más probable que sea un producto de corrosión de la tuberías y de amalgamas de cobre o por haberse agregado deliberadamente, como sulfato de cobre, al depósito de agua para el control de algas.

- Cinc

Presenta un solo estado de oxidación: +2, debido a que presenta el orbital d lleno. Tiene un radio iónico de 0.74 Å. Su comportamiento químico se asemeja al del magnesio en estado sólido y al calcio en solución, aunque con una solubilidad considerablemente menor en las aguas naturales con un pH neutro y que tengan de bicarbonato. El cinc puede estar presente en el agua debido a las descargas de desechos de las operaciones metal-mecánicas o a la corrosión de tuberías de acero galvanizado.

- Sodio

El ion sodio presenta un radio iónico de 0.95 Å, forma sales solubles en agua con muchos aniones, aunque ciertos complejos en los minerales no lo son. La principal sal que se produce es NaCl, aunque también se produce la sal de NaNO<sub>3</sub>. Este metal no es considerado tóxico, ya que su concentración no está limitada por lo Estándares Federales de Agua Potable, sin embargo, al ser consumido en grandes proporciones, sobre todo como NaCl, genera problemas digestivos en los seres vivos.

- Potasio

Como metal, es más reactivo que el anterior, y las sales que genera son más solubles que las generadas por el sodio. Tiene la tendencia a formar polihaluros gradualmente más estables, como el K<sup>+</sup>I<sub>3</sub><sup>-</sup>. El radio iónico que presenta el K<sup>+</sup> tiene un valor de 1.33 Å. No es considerado como un metal tóxico, aunque en concentraciones altas, puede generar alteraciones en los organismos vivos. El potasio está relacionado estrechamente con el sodio, tanto que rara vez se analiza como un componente separado en los análisis de agua. su ocurrencia es menor en la naturaleza y por esta razón se encuentra en concentraciones más bajas que el sodio.

- Cadmio

El cadmio exhibe un estado de oxidación de +2; las soluciones acuosas de sus sales contienen iones [Cd(H<sub>2</sub>O)<sub>4</sub>]<sup>2+</sup> y son incoloros a causa de que sus capas de electrones d están completamente llenas, esto es, los iones cadmio son no transicionales. El óxido de cadmio por lo general se obtiene como sólido café aunque se han obtenido especímenes que varían de amarillo hasta negro.

El cadmio presenta una solubilidad limitada como Cd<sup>2+</sup>, poco soluble, puede precipitarse como carbonato o eliminarse mediante intercambio catiónico, está restringido en las fuentes de agua potable a un máximo de 0.01 mg/l. La toxicidad del cadmio esta asociada con la inhibición de los sistemas enzimáticos, ya que interfiere fuertemente con las metaloproteínas, metaloenzimas, metaloaminas y fosfolípidos.

- Plomo

El plomo con una estructura de valencia de  $6s^26p^2$  presenta un radio iónico de 1.2 Å en estado de oxidación (II) y 0.84 Å en estado de oxidación (IV), tiende a formar compuestos divalentes debido a que sus dos electrones s son más inertes por el efecto del par inerte. El estado de oxidación más estable del plomo es (II), forma iones complejos como el  $[\text{PbCl}_6]^{4-}$ ,  $[\text{Pb}(\text{OH})_6]^{4-}$ .

Los límites de plomo en el agua potable se han establecido como de 0.05 mg/l, lo cual se logra fácilmente mediante una buena filtración. En las aguas de desecho, en donde el plomo puede estar acompañado con materia orgánica, puede hallarse solubilizado y se puede requerir de la oxidación de materia orgánica para lograr la eliminación total del plomo.

## ESPECIACIÓN QUÍMICA

El estudio del comportamiento de cuerpos acuosos contaminados es difícil debido a la gran variedad de interacciones que se lleva a cabo entre las especies químicas presentes y la materia orgánica, por tal motivo es necesario un estudio específico de cada cuerpo de agua.

Lo más importante que distingue a los metales pesados de otros contaminantes tóxicos es el hecho de no ser biodegradables y que una vez que entran al ambiente, su potencial tóxico es controlado en gran extensión por su forma fisicoquímica. La determinación de las diferentes especies es de gran importancia para estimar la disponibilidad y toxicidad en los organismos presentes en un cuerpo de agua. La toxicidad de un metal hacia un organismo en particular dependerá de muchos factores, tales como: edad, área de contacto y estructura poblacional del organismo y concentraciones iónicas del metal.

Actualmente los investigadores<sup>47,48,49,50,51</sup> se han centrado en los estudios de Especiación Química para entender la toxicidad, la bioacumulación, la biodisponibilidad y el transporte de un elemento en particular. Cuando se quiere conocer la biodisponibilidad de un metal tóxico, el medir concentraciones totales del mismo no informa como es dicha biodisponibilidad.

**La especiación química se puede definir como una metodología en forma sistemática para determinar a las sustancias en sus diferentes formas fisicoquímicas en un medio<sup>51</sup>.**

La especiación química es una técnica mediante la cual es posible diferenciar las formas de un metal dentro de una matriz compleja como lo es un cuerpo de agua natural. Se pueden conocer las especies involucradas en los procesos, es decir, la especiación química nos proporciona información acerca de la naturaleza y propiedades de las posibles especies químicas en las cuales un elemento se puede encontrar e incluso de su movilidad en el cuerpo de agua.

La especiación metálica en agua tiene por objeto determinar sistemáticamente a los metales en sus diferentes formas fisicoquímicas tanto disueltos, como asociados a la materia en suspensión o a los sedimentos<sup>52</sup>; también auxilia en el entendimiento de la toxicidad, la bioacumulación, la biodisponibilidad y el transporte o movilidad de los metales en el medio cuando cambia algún parámetro fisicoquímico como pH, temperatura, conductividad, etc., con el objeto de identificar las especies que son el origen de los efectos nocivos para la vida acuática.

Los elementos en sistemas de agua natural están presentes en varias formas<sup>53,54</sup> químicas, como son: iones, pares iónicos, complejos orgánicos o inorgánicos y asociados a coloides o partículas suspendidas. Las interacciones entre los elementos disueltos y los componentes del sistema acuático, incluyendo la biota, sedimentos y coloides están influenciados por las formas que presentan estos metales disueltos, figura 5.1.

Una gran parte de los metales disueltos en medio acuoso en condiciones fisicoquímicas normales, son adsorbidos rápidamente por partículas; sin embargo los metales una vez fijados en los sólidos pueden adquirir movilidad, cuando las condiciones fisicoquímicas como temperatura, conductividad, pH, etc., sufren alguna modificación.

De lo anterior se desprende que para estudiar el comportamiento de las especies disueltas en un cuerpo de agua, no solamente se deben determinar las cantidades totales de metal, sino también la forma en que se encuentra unido a los diferentes compuestos orgánicos e inorgánicos.

Sin embargo, algunas formas específicas de los metales pesados son potencialmente más tóxicas y tienden a ser más peligrosas para la biota de un cuerpo de agua. Generalmente los elementos no esenciales para la vida, como el

plomo y el cadmio son usualmente más tóxicos que los elementos esenciales como el cobre y el cinc, aunque en exceso todos pueden ser dañinos<sup>55,56</sup>.

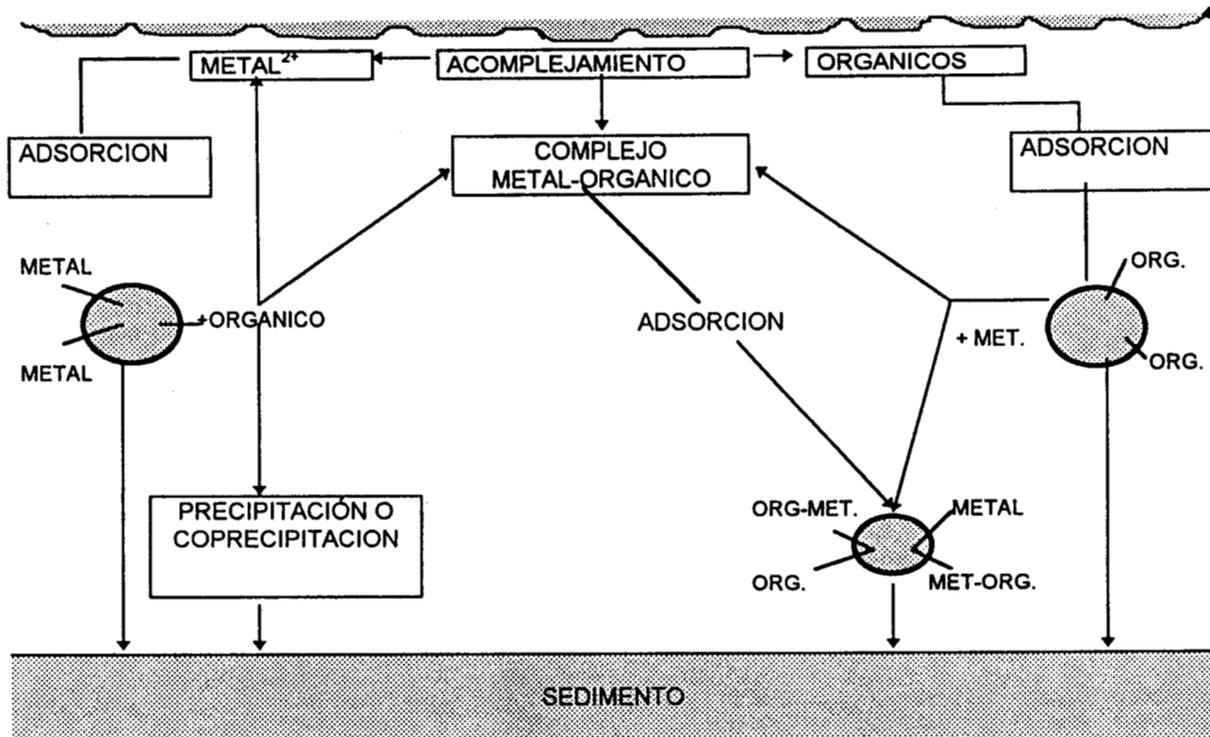


Figura 5.1. Diferentes formas para el transporte de metales pesados en un cuerpo de agua.

La especiación de un elemento es la determinación de las formas fisicoquímicas individuales de ese elemento que juntas forman la concentración total en una muestra. Es ahora bien sabido que las medidas de especiación son necesarias para el estudio de la toxicidad de los metales para los organismos acuáticos y para entender el transporte del metal en ríos y estuarios, no nos da información sobre su interacción con sedimentos o partículas suspendidas<sup>57</sup>.

Los metales pesados en sistemas acuosos pueden presentarse como complejos orgánicos e inorgánicos de diferentes tamaños, o pueden estar asociados con materiales particulares de naturaleza heterogénea. Stumm y Brauner<sup>48</sup> han descrito diversas formas en las cuales puede estar presente un metal, tabla 5.1.

Florence<sup>57,58</sup>, considera para los metales pesados en aguas naturales las formas acuosas siguientes:

- metales adsorbidos a partículas (retenidos en poro 0.45  $\mu\text{m}$ )
- iones libres hidratados
- complejos inorgánicos simples
- complejos orgánicos simples
- complejos inorgánicos estables
- complejos orgánicos estables
- absorbidos por coloides inorgánicos
- absorbidos por coloides orgánico-inorgánicos.

**Tabla 5.1** Clasificación por su tamaño de las formas en que puede estar presente un metal en un sistema acuosa, según Stumm y Brauner.

| Fase                | Clase  | Tamaño       |
|---------------------|--|--------------|
| Disuelta            | Complejos metálicos inorgánicos<br>Complejos metálicos con pequeñas moléculas orgánicas<br>Iones metálicos libres  | 0 -0.8 nm    |
| Coloidal            | Metales asociados con orgánicos<br>Coloides de óxido de hierro   | 0.8 - 400 nm |
| Sólidos suspendidos | Metales enlazados a carbonatos<br>Metales adsorbidos o enlazados a oxihidroxos de hierro y manganeso<br>Especies metálicas acomplejadas inorgánicamente<br>Metales adsorbidos o contenidos en las redes de arcilla, arena y cieno. | > 400 nm     |

Aunque la concentración de un metal disuelto puede ser similar en dos sistemas acuáticos las formas químicas de ese metal pueden ser muy diferentes. **Se dice “disuelto”, al metal que pasa a través del filtro de 0.45  $\mu\text{m}$ <sup>47</sup>. La mayoría de las partículas coloidales se incluyen en esa fracción “filtrable”, que es mejor término que disuelto, pero esto no es definitivo ya que habrá que especificar el tamaño del filtro.**

La determinación de formas químicas o físicas es de gran importancia no solamente para conocer el comportamiento geoquímico de los elementos metálicos en aguas naturales sino también para estimar la disponibilidad y futura

toxicidad en los organismos. Sin embargo es muy difícil determinar directamente las especies químicas.

En años recientes se han desarrollado algunos modelos de especiación química<sup>52,53,59,60,61</sup>, sin embargo, cada uno de ellos están orientados a evaluar las especies de un cuerpo de agua particular, que no se puede utilizar tal cual en otro cuerpo de agua, debido a la gran variedad de interacciones que se llevan a cabo entre los iones metálicos presentes con aniones inorgánicos y materia orgánica, por tal motivo es necesario un estudio específico de cada cuerpo de agua, por ejemplo el modelo de especiación empleado por Batley y Florence<sup>62</sup> para agua de mar, figura 5.2.

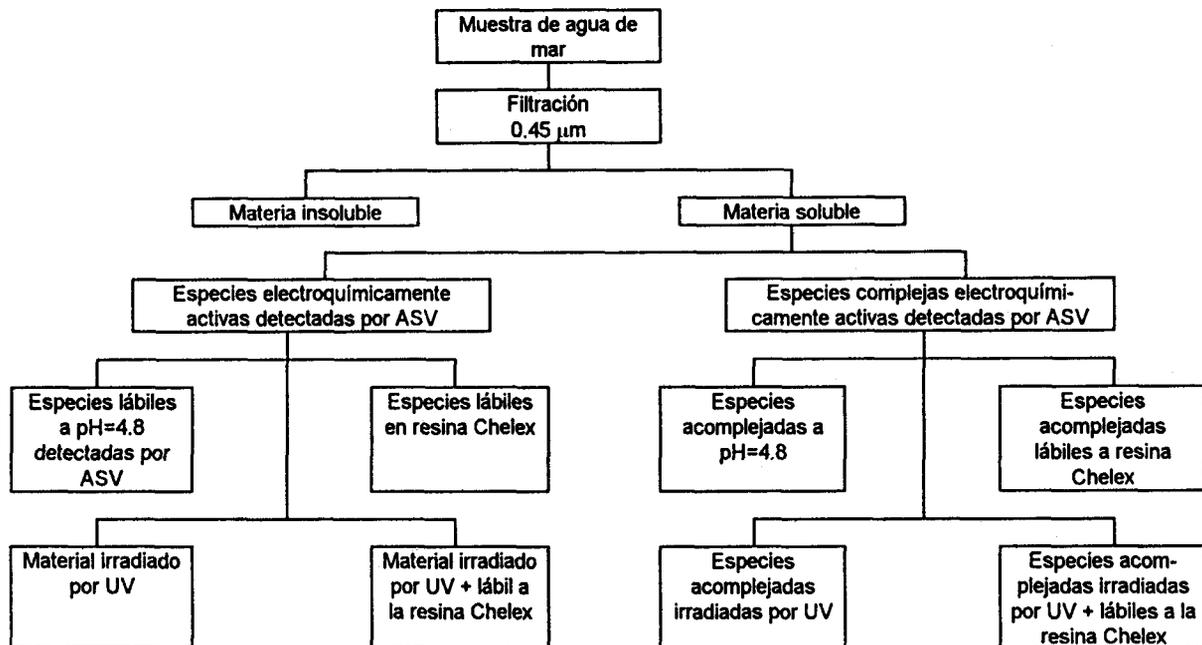


Figura 5.2. Esquema de especiación utilizado por Batley y Florence para agua de mar.

Los esquemas químicos de especiación son más fáciles de ser estandarizados y pueden dar información sobre las diversas formas químicas presentes en el agua. Esta información puede ayudar a identificar una fuente de contaminación. Si la toxicidad relativa de estas formas es conocida, se puede hacer una predicción acerca de su toxicidad global.

Los problemas de contaminación por metales y ácidos, son manifestaciones de disturbios ácido-base en el sentido más general. Las consecuencias biológicas de la contaminación metálica dependen del resultado de la especiación química, la cual es una función de la clase y cantidad de bases de Lewis, del estado redox y del pH de un ambiente particular.

Se consideran cuatro factores importantes presentes en los ambientes acuáticos y terrestres que afectan la solubilidad, la movilidad y biodisponibilidad de los metales asociados a las partículas de los sedimentos<sup>63</sup>:

- a) Disminución del pH localmente proveniente de efluentes mineros y de la lluvia ácida.
- b) Cambio en las condiciones redox.
- c) El aumento de la presencia de agentes acomplejantes naturales y sintéticos que puedan formar complejos solubles, algunos muy estables con los metales traza, que de otra manera serían adsorbidos por los materiales sólidos.
- d) El aumento de la concentración salina, efecto de la competencia de los sitios de adsorción de los sólidos y la formación de los cloruros complejos formados con metales pesados.

La especiación de metales traza en aguas está basado en el uso de dos diferentes técnicas:

1. Modelamiento en función de datos experimentales<sup>61</sup>. Consiste en determinar la concentración de las especies metálicas en muestras de agua por vía experimental, es difícil debido a las bajas concentraciones de los metales, por lo que se debe de trabajar con equipo altamente sofisticado y preciso como es el espectrofotómetro de absorción atómica por horno de grafito o mediante el técnicas voltamperométricas.
2. Modelación en función de datos teóricos<sup>47</sup>. En este método se determina la especiación mediante el uso de información ya publicada, junto con concentraciones conocidas de iones y sólidos suspendidos en el agua, con los cuales se pueden determinar las concentraciones en equilibrio de varias especies. El mayor obstáculo para el uso exitoso de este método es la falta de datos termodinámicos confiables. El modelamiento por computadora es tan poderoso y bueno, siempre y cuando se le alimente con la información adecuada.

## 5.1 Modelamiento experimental.

Para poder determinar, experimentalmente, las diferentes especies metálicas que se forman en el medio acuoso, se debe de tomar en consideración sus características fisicoquímicas. Existen diversos métodos para determinarlas:

### 1) Resinas de intercambio iónico.

Este método es uno de los más utilizados, debido a que da información acerca de la biodisponibilidad del metal, figura 5.3<sup>51</sup>. El intercambio iónico consiste en el intercambio reversible de iones entre un medio sólido y una solución. Para ser efectivos, los intercambiadores de iones sólidos deben:

- i) contener sus propios iones,
- ii) ser insolubles en agua y
- iii) proporcionar suficiente espacio en su estructura porosa para que los iones pasen libremente al interior y hacia el exterior del sólido.

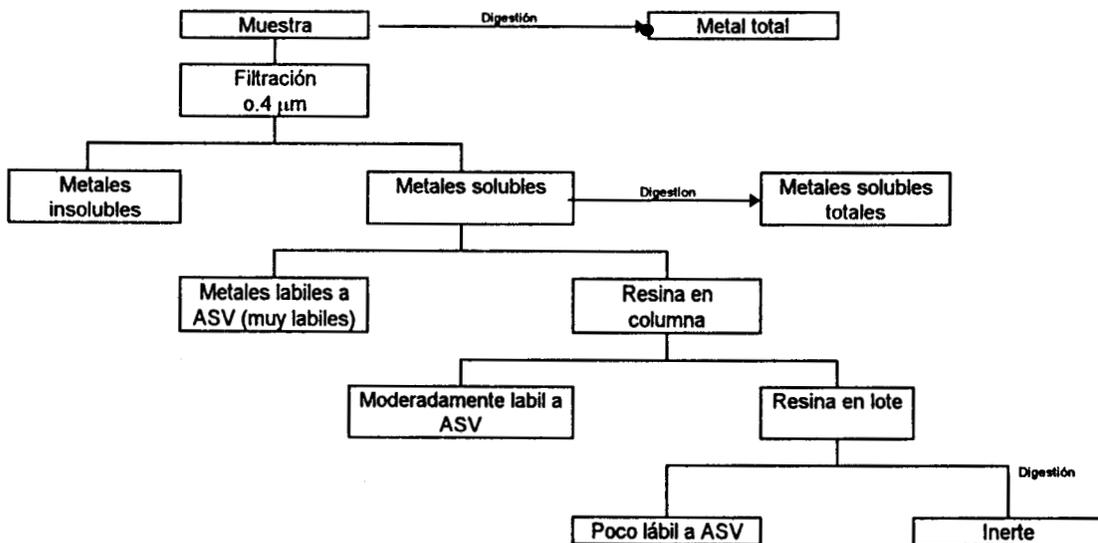


Figura 5.3. Esquema de especiación para muestras acuosas.

Existen diversas resinas tanto aniónicas como catiónicas que pueden ser utilizadas para la determinación de las especies, tabla 5.2<sup>19,30</sup>. Los cambiadores catiónicos tienen una estructura cargada negativamente, pero sus poros contienen cationes que mantienen su electroneutralidad. Los cambiadores aniónicos poseen las cargas eléctricas exactamente opuestas. Estas resinas actúan esencialmente como un sólo ion, de gran tamaño, cargado múltiplemente en el cual se encuentran miles de átomos ligados en una red tridimensional. La carga de la red se neutraliza por pequeños iones de carga opuesta dentro de ella, en donde se mantiene por cargas electrostáticas sin estar ligados a la matriz de intercambio iónico. En esta forma, son capaces de intercambiar su lugar con los iones de una solución. La carga de la matriz está asociada a los grupos funcionales.

Tabla 5.2. Capacidad de intercambio para resinas de intercambio sintéticas.

| Tipo de intercambiador<br>Substancia e ion     | Grupo funcional<br>intercambiador                           | Regeneración                    | Nombre comercial                            |
|--|---|---------------------------------|---|
| <b>Resinas para intercambio de cationes</b>    |   |                                 |   |
| Acido fuerte, H <sup>+</sup> y Na <sup>+</sup> | ac. sulfónico<br>(-SO <sub>3</sub> H)                       | Exceso de ácido fuerte o NaCl   | Amberlite IR-120<br>Dowex 50                |
| Acido débil, H <sup>+</sup> y Na <sup>+</sup>  | ac. carboxílico<br>(-COOH)                                  | Acido o NaCl                    | Amberlite IRC-50<br>Chelex-100              |
| <b>Resinas para intercambio de aniones</b>     |   |                                 |   |
| Base fuerte, OH <sup>-</sup>                   | ion amonio cuaternario<br>(-R <sub>3</sub> N <sup>+</sup> ) | Exceso de base fuerte           | Amberlite IRA-400<br>Dowex 1,2<br>Rexyn 201 |
| Base débil, OH <sup>-</sup>                    | grupo amina<br>(-RH <sub>2</sub> N <sup>+</sup> )           | Na <sub>2</sub> CO <sub>3</sub> | Amberlite IR-45<br>Dowex 3                  |

Dentro de la solución y del medio de intercambio iónico lo que se debe de mantener es la electroneutralidad y no el número de iones en el cambiador.

Esta es la técnica que se usó para la determinación experimental de las concentraciones de las diferentes especies para las muestras provenientes de la presa "José Antonio Alzate".

## 2) Técnicas para la medida de metales asociados a compuestos orgánicos.

Existen varios métodos, por los cuales se puede determinar la cantidad de metales asociados a compuestos orgánicos en cuerpos de agua natural. Estos métodos pueden ser químicos o físicos:

a) Irradiación ultravioleta<sup>57,64,65,66</sup>

La descomposición de compuestos orgánicos en aguas naturales puede llevarse a cabo por radiación ultravioleta. Por este método se puede determinar la cantidad de metales asociados a coloides orgánicos en aguas naturales.

b) Oxidación por ácidos concentrados<sup>52,65,67,68</sup>

El total de la materia orgánica puede ser completamente oxidada al agregársele ácidos concentrados seguido de un calentamiento, lo cual libera todos los metales pesados.

c) Descomposición de materia orgánica por ozonólisis<sup>66</sup>

Esta técnica aunque destruye la materia orgánica, permitiendo la medición de la concentración de los metales pesados, presenta el inconveniente de modificar la concentración de dichos metales.

3) Diferenciación de las especies metálicas por tamaño de partícula.

Otra forma de determinar las especies presentes en fase disuelta, es en base a su tamaño o peso molecular. Los procesos más utilizados en especiación son:

a) Centrifugación<sup>69,70</sup>

Existen dos parámetros que determinan la separación de las partículas, los cuales son el tiempo y la velocidad de centrifugación, sin embargo también se debe de considerar la densidad de la solución. Esta técnica fue utilizada por Benes y Steines<sup>69</sup> (1975) obteniendo separación de partículas de hasta 190 nm centrifugando una muestra a 3000 rpm por media hora.

b) Diálisis<sup>71,72,73</sup>

Este método permite la separación de los diferentes grupos de especies en base al tamaño de partícula. Varios autores han trabajado con este proceso, disminuyendo el tiempo requerido para llegar al equilibrio.

c) Filtración <sup>48,66,74</sup>

En este proceso se recomienda utilizar una serie de filtros comenzando por uno que tenga un poro grande, terminando con el de  $0.45 \mu\text{m}$ , esto es debido a sí se utiliza solo el de  $0.45 \mu\text{m}$  la filtración se hace muy lenta debido a la presencia de coloides, figura 5.4.

d) Ultrafiltración <sup>66,72,75,76</sup>

En este proceso, al igual que en el anterior, figura 5.5, se utilizan membranas, con tamaño de poro muy pequeño (hasta  $0.015 \mu\text{m}$ ) sin embargo, existen varios problemas que lo hacen un proceso poco utilizado. Los principales problemas son:

- i) caro,
- ii) se contaminan, tanto las membranas como el equipo muy fácilmente,
- iii) la filtración es sumamente lenta y
- iv) debido al gradiente de concentración de las membranas pueden darse cambios en la concentración de metales asociados a coloides y por lo tanto cambiar la fortaleza iónica.

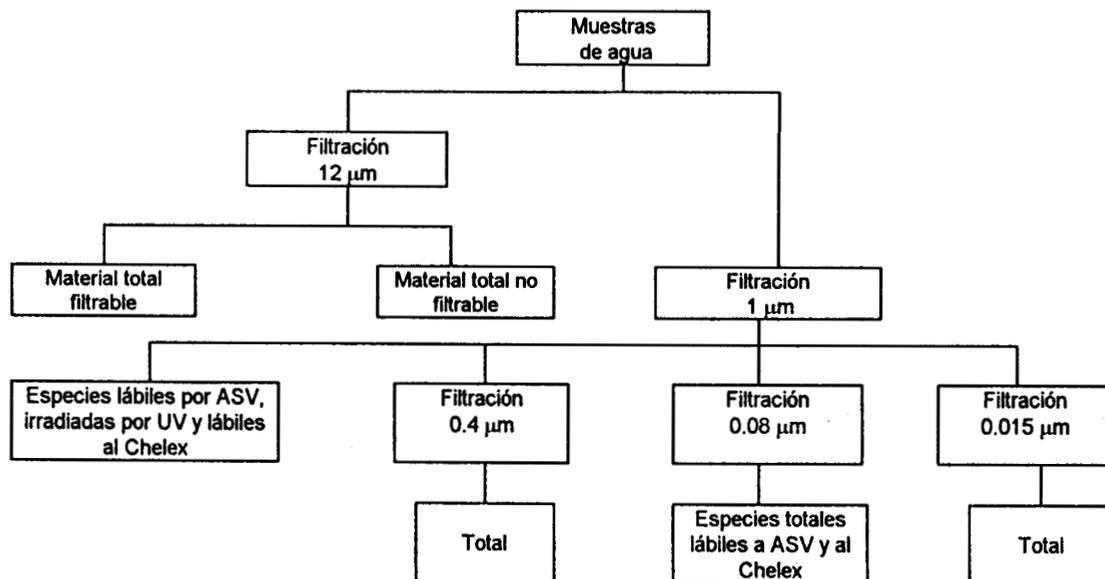
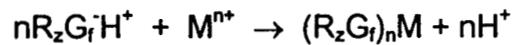


Figura 5.4. Esquema de Laxen y Harrison para aguas de estuarios y costas.

Existen algunas otras técnicas más sofisticadas, pero menos estudiadas como son: catálisis<sup>77,78,79</sup>, radiotrazadores<sup>80,81</sup>, etc. Sin embargo de todas las técnicas presentadas la más conveniente es la técnica de resina de intercambio catiónico.

### 5.1.1 Técnica de intercambio catiónico.

En la determinación de las especies metálicas, las resinas utilizadas son las catiónicas, ya que como su nombre lo indica, existe un intercambio de cationes en ellas. Este método está basado en el intercambio catiónico<sup>19,30</sup>, en donde la resina mediante los grupos funcionales que contiene, puede sufrir la siguiente reacción:



en donde  $R_z$  representa la resina y  $G_r$  el grupo funcional contenido en ella.

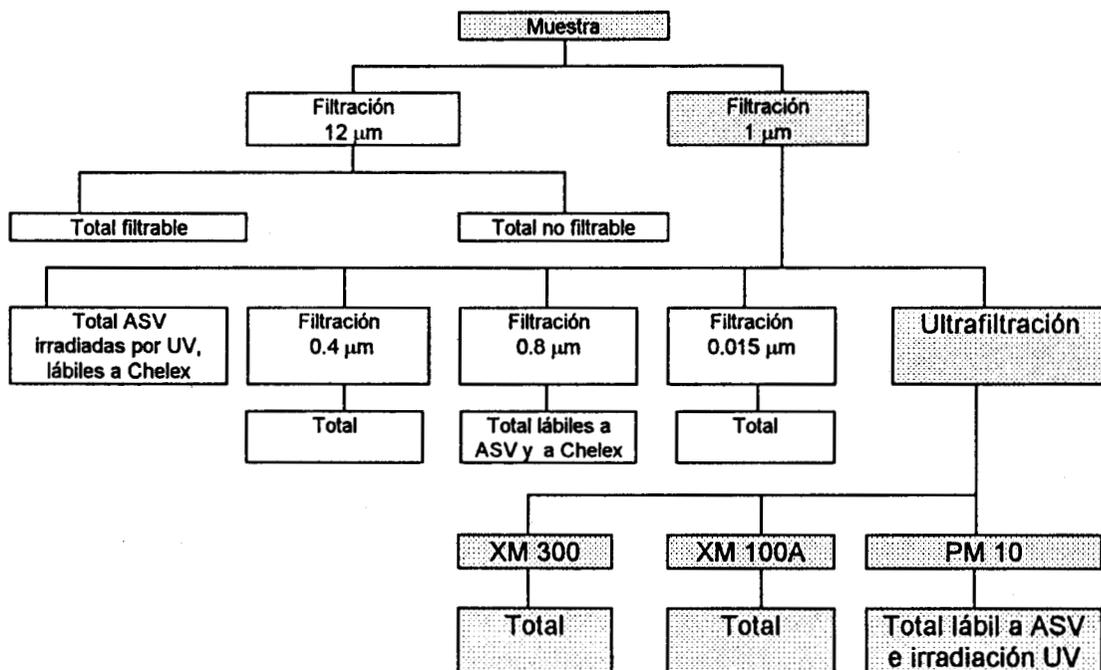
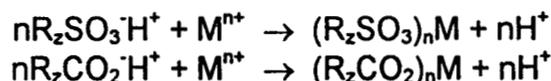


Figura 5.5. Esquema de separación física de Laxen y Harrison (1981a).

Los intercambiadores catiónicos se pueden dividir en dos: fuertemente ácidos, aquellos que tienen grupos derivados del ácido sulfónico ( $-SO_3H$ ); y los

débilmente ácidos, que tienen grupos ácidos carboxílicos (-CO<sub>2</sub>H). Los primeros son semejantes al ácido sulfúrico, por lo tanto se ionizan completamente y los segundos solo se ionizan parcialmente. Los protones de estos grupos pueden intercambiarse con otros cationes:



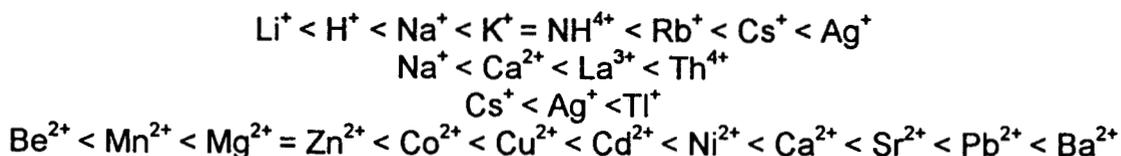
El intercambiador iónico tiene una capacidad limitada para almacenar iones llamada capacidad de intercambio, ésta en una resina se puede decir que es el número total de equivalentes por unidad de volumen o por unidad de peso de la resina.

La capacidad de intercambio de resinas catiónicas ácidas débiles depende del pH, funcionan excelente en un intervalo de pH entre 5 y 14, a valores de pH más bajos no se produce el intercambio debido a que la resina retiene fuertemente a los protones; mientras que las resinas ácidas fuertes pueden emplearse en todo el intervalo de pH, esto es, de 1 a 14.

Existen algunos factores que influyen en los valores de intercambio, o selectividad, los cuales son <sup>30</sup>:

- En concentraciones acuosas bajas, a mayor carga del ion, mayor afinidad presentará hacia la resina.
- En iones de la misma carga, a concentraciones acuosas bajas, mientras más pequeño sea el ion hidratado, mayor afinidad tendrá hacia la resina.
- A concentraciones acuosas elevadas la selectividad de la resina se modifica, obteniéndose el comportamiento contrario al presentado en el inciso (a).

Algunos órdenes de afinidad característicos en resinas sintéticas, para grupos de iones son:



Una de las resinas que mejor responden a la especiación en intercambio catiónica, es la resina Chelex 100. Esta resina tiene la ventaja de poderse trabajar muy fácilmente además de que casi no contiene impurezas.

La Resina Chelex 100 presenta una red de estireno, conteniendo grupos funcionales iminodiacetato,  $\text{OOC-CH}_2\text{-NH-CH}_2\text{-COO}^-$ , para efectuar el intercambio catiónico. Tiene una capacidad nominal total de 2 meq/ gramo seco. Esta resina la fabrica la Dow Chemical Company y la vende en su forma sódica.

La resina Chelex-100 permite trabajar con iones metálicos libres y metales débilmente complejados. El grupo quelato iminodiacetato (imda) es un buen acomplejante de los metales pesados<sup>82,83</sup>. Estos en su forma iónica son fuertemente acomplejados por los átomos de nitrógeno y oxígeno del grupo imda, debido al pequeño diámetro de poro que presenta esta resina (1.5 a 3 mm), también, debido a la estabilidad que presenta el grupo imda, los metales débilmente acomplejados pueden disociarse y asociarse preferentemente con ella. La forma iónica del metal retenida por la resina es la más fácilmente biodisponible, mientras que las partículas coloidales, son potencialmente disponibles y solo participan en la solubilización y transporte del metal.

Figura y McDuffie<sup>84</sup>, proponen que la causa de la incompleta retención por parte de la resina hacia algunos metales traza en aguas naturales, se debe a la lenta disociación de los complejos metálicos en solución.

Se han probado dos formas de trabajar con esta resina para la determinación de concentraciones de metales pesados en aguas naturales:

- a) Resina en columna. Los iones metálicos son arrastrados por la muestra de agua que desciende a través de la columna de resina a una velocidad de flujo de entre 1 y 2 ml/min<sup>85,86</sup>. Este método presenta un serio inconveniente, debido a que la columna de resina se bloquea, en la parte superior, después de un cierto intervalo de tiempo. Al reaccionar la resina con los metales pesados, sus partículas incrementan su tamaño, no permitiendo el paso de la corriente de agua o el contacto de la resina con las formas iónicas presentes en el agua.
- b) Técnica en lote. Esta técnica se caracteriza por los grandes tiempos de contacto que son requeridos (16-24 horas) los cuales son utilizados para

establecer el completo equilibrio de la resina y la muestra<sup>87,88</sup>. Este método ha sido criticado, en el sentido de que en el transcurso del tiempo, los equilibrios químicos pueden desplazarse, por lo tanto las especies acomplejadas pueden sufrir cambio, sobre todo aquellas donde los quelatos son suficientemente lábiles ya que estos pueden ser desplazados<sup>89</sup>.

La resina puede ser utilizada en su forma sódica, pero debido a que se cambian las condiciones de pH por su uso, se estudiaron algunas otras de sus presentaciones, como son la cálcica y la protónica. La forma protónica de la resina, también cambia las condiciones de pH de la muestra. La forma cálcica, mantiene estables las condiciones de pH en la muestra y permite llevar a cabo el análisis sobre un amplio intervalo de valores de pH. Por lo cual, la forma cálcica<sup>90</sup> de la resina Chelex-100 es ahora preferida sobre la forma sódica<sup>87</sup> y protónica<sup>83</sup>.

El uso de la resina Chelex-100 es una técnica flexible, la cual permite obtener la concentración de iones metálicos en un amplio intervalo de pH. La determinación, ya sea por el uso de la resina en el análisis de muestras ya sea en columna o en lote, es una técnica rápida, barata y no fácilmente se contamina, lo cual facilita su manejo.

En los esquemas de especiación, figuras 5.2 a 5.5 se puede observar que existen principalmente dos fracciones, la fracción electroquímicamente disponible, o lábil medida por ASV y la no lábil o inerte. En la primera, se incluyen iones metálicos libres así como algunos metales débilmente acomplejados. En la segunda, se tiene a las especies metálicas enlazadas, las cuales son asociadas con una gran variedad de materiales coloidales orgánicos e inorgánicos.

Además de la técnica de especiación es necesario utilizar técnicas de análisis muy sensibles para la adecuada determinación de las diferentes formas fisicoquímicas de los metales presentes en una muestra de agua. Algunas técnicas son particularmente apropiadas para los estudios de especiación, como son para la determinación de iones metálicos libres, electrodos selectivos o la voltamperometría de redisolución anódica. También se puede utilizar la técnica de espectrofotometría de absorción atómica ya sea por flama o por horno de grafito, debido a las concentraciones que se tienen ( $10^{-6}$  a  $10^{-10}$  M) de los metales pesados.

- a) Electroodos selectivos<sup>61,65,91</sup>. En esta técnica, la respuesta solamente proviene de la actividad de los iones metálicos libres (hidratados), donde se pueden determinar concentraciones de metales de hasta  $10^{-9}$  M, sin embargo no es recomendable utilizarla cuando se tiene muestras de agua con altos contenidos de materia orgánica, ya que se presentan interferencia por los agentes acomplejantes<sup>92</sup>.
- b) Voltamperometría de redisolución anódica<sup>57,58</sup>. La más usada en este tipo de estudios es la de pulso diferencial por su alta sensibilidad, con un límite de detección de cerca de  $10^{-9}$  M, para la determinación directa de metales pesados en aguas naturales. Esta técnica analítica tiene una capacidad intrínseca para los estudios de especiación, debido a que en ellos se distinguen dos fracciones: la disponible electroquímicamente -lábil-, la cual puede ser tóxica, y la enlazada o fracción electroquímicamente inerte<sup>93</sup>, la cual es menos apropiada para demostrar las propiedades tóxicas.
- c) Espectrofotometría de absorción atómica por horno de grafito<sup>72,89,94,95</sup>. No es una técnica selectiva, sin embargo si es una técnica muy sensible y disponible para la medición de concentraciones de metales totales. Esta técnica puede ser utilizada en conjunto con un proceso previo de separación, para dar información acerca de una especie o un grupo de especies metálicas.

Otra técnica que puede ser utilizada para la determinación de la concentración de las especies es la fluorescencia de rayos X<sup>96</sup>, sin embargo en ésta, los metales disueltos tienen que co-precipitarse antes del análisis.

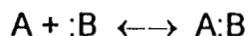
## 5.2 Modelamiento en función de datos teóricos.

Si bien es cierto que es necesario conocer las concentraciones experimentales de cada especie de cada metal, muchas veces es imposible debido a problemas técnicos. Existe otro método para determinar las especies metálicas presentes en un cuerpo de agua y sus concentraciones, el cual está basado en datos teóricos, pero como ya se mencionó, también presenta algunos problemas, como es la falta de datos termodinámicos.

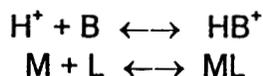
La especiación y el comportamiento de un metal en el medio ambiente natural, su acción bioquímica como nutriente tóxico y la eficiencia en el control de procesos se deben entender en base a la estructura electrónica del metal en forma coordinada, es decir, que reaccione con bases Lewis (modelo ácido-base de Lewis), las reacciones de transferencia electrónica y las reacciones de radicales libres. Desde un punto de vista general, en todas las reacciones químicas las moléculas y los iones tienden a aprovechar la estabilidad de los electrones de valencia. Para entender los equilibrios que se establecen en un medio acuoso, se deben de estudiar: las reacciones ácido-base y las condiciones de equilibrio

### 5.2.1 Teorías ácido-base.

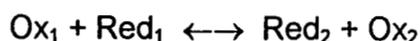
En reacciones de coordinación, es decir, aquellos que involucran ácidos y bases de Lewis implican que los pares de electrones son donados por las bases a los ácidos de Lewis:



El comportamiento ácido-base de Brønsted en agua, la formación de complejos metal-ligando en solución y en reacciones heterogéneas:



son reacciones ácido-base de Lewis. En procesos redox, los electrones son completamente transferidos entre pares redox:



La importancia de las estabilidades de los metales y de los ligandos depende en parte de la suavidad o de la dureza, para ello es preciso analizar el modelo ácido-base de Pearson<sup>97</sup>.

#### 5.2.1.1 Modelo ácido-base de Pearson.

El concepto de ácidos y bases duros y suaves puede ser empleado para explicar y predecir reacciones químicas, así como las estabilidades de compuestos e iones complejos.

Acidos y Bases Duras y Suaves de Pearson (ABDSP)<sup>97,98,99,100</sup>

Pearson ha propuesto una clasificación diferente de ácidos y bases cualitativa, pero es útil porque correlaciona y explica muchas observaciones:

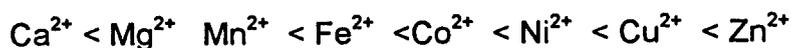
- Acido Duro.- Es aquel que se une a bases que se enlazan fuertemente al  $H^+$ . El ácido duro será: de tamaño pequeño, de carga positiva alta y sus electrones de valencia serán difíciles de distorsionar o separar.
- Base Dura.- Es aquel que se une fácilmente al  $H^+$ . El átomo donante es difícil de polarizar y de alta electronegatividad, es difícil de oxidar y está asociada con orbitales completos, de baja energía.
- Acido suave.- Es aquel que se une fuertemente a bases altamente polarizables. El ácido suave tendrá: un átomo aceptor de gran tamaño, con carga positiva o cero, varios electrones de valencia fácilmente donables.
- Base suave.- Es el que se une fuertemente al  $CH_3Hg^+$  y tiene un átomo donante, fácilmente oxidable y asociado a orbitales vacíos de baja energía.

Clasificación de los ácidos y bases en suaves y duras.

Es posible clasificar cualquier ácido o base como duro o suave mediante su tendencia hacia un reactivo duro o suave según el comportamiento del equilibrio. Los términos duros y suaves son relativos y no existe una clara línea divisoria entre ellos. Esto se ilustra parcialmente mediante una tercera categoría "intermedia" en ácidos y bases, tablas 5.3 y 5.4. Pero aún dentro de un grupo de entidades duras o suaves, no todas tendrán una dureza o suavidad equivalente.

Para predecir el carácter duro o suave se pueden dar las siguientes reglas<sup>98,100,101</sup>:

1. Para aceptores de configuración electrónica idéntica, un aumento en la carga significa fortalecer las propiedades suaves, debido a la capacidad de polarizar a la base, sí el descenso que acompaña la polarización del aceptor no es muy grande. El número de electrones  $d$  en el metal es importante para juzgar si es duro o suave. Así tenemos que en la serie de Irving Williams el incremento de suavidad depende del tamaño del radio.



$\xrightarrow{\hspace{10em}}$   
 disminuye el radio  
 (aumenta la capacidad de polarizar al ligando)

2. Los grupos que transfieren carga al átomo central aumentarán el carácter suave de ese átomo, ya que una transferencia de carga de ese tipo es equivalente a una reducción en el estado de valencia. Así, mientras más polarizable es el donante, más pronunciado es el carácter suave del aceptor.

**Tabla 5.3.** Clasificación de los ácidos en duros, intermedios y suaves.

| Ácidos duros   |
|--|
| $\text{H}^+$ , $\text{Li}^+$ , $\text{Na}^+$ , $\text{K}^+$ , ( $\text{Rb}^+$ , $\text{Cs}^+$ )<br>$\text{Be}^{2+}$ , $\text{Be}(\text{CH}_3)_2$ , $\text{Mg}^{2+}$ , $\text{Ca}^{2+}$ , $\text{Sr}^{2+}$ ( $\text{Ba}^{2+}$ )<br>$\text{Sc}^{3+}$ , $\text{La}^{3+}$ , $\text{Ce}^{4+}$ , $\text{Gd}^{3+}$ , $\text{Lu}^{3+}$ , $\text{Th}^{4+}$ , $\text{U}^{4+}$ , $\text{UO}_2^{2+}$ , $\text{Pu}^{4+}$<br>$\text{Ti}^{4+}$ , $\text{Zr}^{4+}$ , $\text{Hf}^{4+}$ , $\text{VO}^{2+}$ , $\text{Cr}^{3+}$ , $\text{Cr}^{6+}$ , $\text{Mo}^{3+}$ , $\text{WO}^{4+}$ , $\text{Mn}^{2+}$ , $\text{Mn}^{7+}$ , $\text{Fe}^{3+}$ , $\text{Co}^{3+}$<br>$\text{BF}_3$ , $\text{BCl}_3$ , $\text{B}(\text{OR})_3$ , $\text{Al}^{3+}$ , $\text{Al}(\text{CH}_3)_3$ , $\text{AlCl}_3$ , $\text{AlH}_3$ , $\text{Ga}^{3+}$ , $\text{In}^{3+}$<br>$\text{CO}_2$ , $\text{RCO}^+$ , $\text{NC}^+$ , $\text{Si}^{4+}$ , $\text{Sn}^{4+}$ , $\text{CH}_3\text{Sn}^{3+}$ , $(\text{CH}_3)_2\text{Sn}^{2+}$<br>$\text{N}^{3+}$ , $\text{RPO}_2^+$ , $\text{ROPO}_2^+$ , $\text{As}^{3+}$<br>$\text{SO}_3$ , $\text{RSO}_2^+$ , $\text{ROSO}_2^+$<br>$\text{Cl}^{3+}$ , $\text{Cl}^{7+}$ , $\text{I}^{5+}$ , $\text{I}^{7+}$<br>HX (moléculas con enlaces de hidrógeno) |
| Ácidos con comportamiento intermedio   |
| $\text{Fe}^{2+}$ , $\text{Co}^{2+}$ , $\text{Ni}^{2+}$ , $\text{Cu}^{2+}$ , $\text{Zn}^{2+}$<br>$\text{Rh}^{3+}$ , $\text{Ir}^{3+}$ , $\text{Ru}^{3+}$ , $\text{Os}^{2+}$<br>$\text{B}(\text{CH}_3)_3$ , $\text{GaH}_3$<br>$\text{R}_3\text{C}^+$ , $\text{C}_6\text{H}_5^+$ , $\text{Sn}^{2+}$ , $\text{Pb}^{2+}$<br>$\text{NO}^+$ , $\text{Sb}^{3+}$ , $\text{Bi}^{3+}$<br>$\text{SO}_2$   |
| Ácidos suaves  |
| $\text{Co}(\text{CN})_5^{3-}$ , $\text{Pd}^{2+}$ , $\text{Pt}^{2+}$ , $\text{Pt}^{4+}$<br>$\text{Cu}^+$ , $\text{Ag}^+$ , $\text{Au}^+$ , $\text{Cd}^{2+}$ , $\text{Hg}^+$ , $\text{Hg}^{2+}$ , $\text{CH}_3\text{Hg}^+$<br>$\text{BH}_3$ , $\text{Ga}(\text{CH}_3)_3$ , $\text{GaCl}_3$ , $\text{GaBr}_3$ , $\text{GaI}_3$ , $\text{Tl}^+$ , $\text{Tl}(\text{CH}_3)_3$<br>$\text{CH}_2$ , carbenos<br>Aceptores $\pi$ , trinitrobenzenu, cloroanilina, quinonas, tetracianoetileno, etc<br>$\text{HO}^+$ , $\text{RO}^+$ , $\text{RS}^+$ , $\text{RSe}^+$ , $\text{Te}^{4+}$ , $\text{RTe}^+$<br>$\text{Br}_2$ , $\text{Br}^+$ , $\text{I}_2$ , $\text{I}^+$ , $\text{ICN}$ , etc.<br>$\text{O}$ , $\text{Cl}$ , $\text{Br}$ , $\text{I}$ , $\text{N}$ , $\text{RO}^+$ , $\text{RO}_2^+$<br>$\text{M}^0$ (átomos metálicos) y metales voluminosos  |

3. Un ligando (base) suave combina alta polarización, con orbitales d vacíos en la capa más externa. Mientras más disponibles sean estos orbitales d, más suave es el ligando.

Tabla 5.4. Clasificación de las bases en duras, intermedias y suaves.

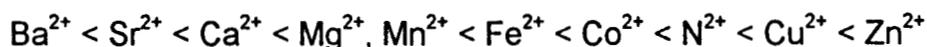
| Bases duras   |
|---|
| NH <sub>3</sub> , RNH <sub>2</sub> , N <sub>2</sub> H <sub>4</sub><br>H <sub>2</sub> O, OH <sup>-</sup> , O <sup>2-</sup> , ROH, RO <sup>-</sup> , R <sub>2</sub> O<br>CH <sub>3</sub> COO <sup>-</sup> , CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup> , NO <sub>3</sub> <sup>-</sup> , PO <sub>4</sub> <sup>3-</sup> , ClO <sub>4</sub> <sup>-</sup><br>F <sup>-</sup> (Cl <sup>-</sup> ) |
| Bases de comportamiento intermedio  |
| C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> NH <sub>2</sub> , C <sub>5</sub> H <sub>5</sub> N, N <sub>3</sub> <sup>-</sup> , N <sub>2</sub><br>NO <sub>2</sub> <sup>-</sup> , SO <sub>3</sub> <sup>2-</sup><br>Br <sup>-</sup>  |
| Bases suaves  |
| H <sup>-</sup><br>R <sup>-</sup> , C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> , C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> , CN <sup>-</sup> , RNC, CO<br>SCN <sup>-</sup> , R <sub>3</sub> P, (RO) <sub>3</sub> P, R <sub>3</sub> As<br>I <sup>-</sup>   |

4. El disolvente puede tener un gran efecto sobre las propiedades duras y suaves. Solutos duros tenderán a disolverse en disolventes duros y viceversa. Así el agua es un disolvente duro, pero los disolventes que no contienen hidrógeno ácido para formación del enlace de hidrógeno son generalmente suaves.

**La coordinación de ligandos muy suaves con un aceptor suave, puede convertirlo en un aceptor duro en relación con otro ligando, dado que no se le quedan electrones d para coordinar con otros ligandos suaves.**

### 5.2.1.2 Estabilidad de los complejos metálicos.

Para conocer las tendencias en la estabilidad de los complejos metálicos, una de las primeras correlaciones fue la de las serie de estabilidad de Irving-Williams. Para un ligando determinado, la estabilidad de los complejos, con iones metálicos en estado de oxidación II, lleva el siguiente orden:



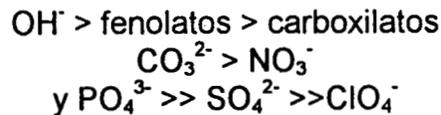
Este orden está relacionado con la disminución en el radio iónico. Los ligandos y los iones metálicos se clasifican como pertenecientes, según Ahrlund, Chatt y Davies<sup>102</sup>, al tipo (a) y (b) de acuerdo a sus preferencias para enlazarse. Los iones metálicos del tipo (a) incluyen a los iones de metales alcalinos,

cationes (a) o duros, forman complejos más fuertes con los donadores de electrones del segundo periodo: N, O y F.

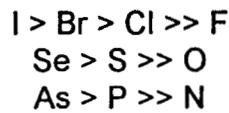
Para los metales (a), la extrema preferencia de donar, en orden de decrecimiento de estabilidad, es:



y para ligandos diferentes, con el mismo átomo donador, el orden de incremento de estabilidad es conforme el incremento de la basicidad de los ligandos, así para donadores de oxígeno se tiene:



Para los cationes (b) o "suaves", la preferencia de afinidad para donar es:



Turner, Whitfield y Dickon<sup>104</sup> aplican  $\Delta \log K = \log K_{MY} - \log K_{MZ}$ , donde Y y Z son los ligandos que compiten para enlazarse al metal M, como medida del carácter de la clase (b). Como resultado, clasifican a los iones metálicos acuosos como (a), (a'), (b) o (b'), donde (a') indica la tendencia de unirse a (a) y (b') indica la tendencia de unirse a (b'). También se han identificado a (a') y (b') como un donador intermedio.

Para un donador "suave" dado, la preferencia de afinidad usualmente observada de las series típicas entre los cationes (b) o "suaves" reflejan la fuerza relativa del enlace covalente, mientras que para los cationes (a), las afinidades son claramente relacionadas hacia el enlace iónico o electrovalente, caracterizado por el potencial iónico ( $z/r$ ). En términos termodinámicos o energéticos, las contribuciones relativas son reflejadas en la entalpía y entropía de reacción, respectivamente. Esto es, para la estabilidad de formación de complejos acuosos:

$$-RT \ln K = \Delta G^\circ = \Delta H^\circ - T\Delta S^\circ$$

En términos de aceptores de metales y propiedades de ligandos donadores, la estabilidad de un ácido-base de Lewis<sup>105</sup>, es decir,  $M+L = ML$ , está relacionado con el radio iónico, carga, polaridad, diferencias de electronegatividad de M y de L, potenciales de ionización, afinidades electrónicas, calores de solvatación de iones de la fase gaseosa, reducción de metales y oxidación de ligandos en solución. Estas propiedades no son independientes, y no se espera que las correlaciones que se obtengan sean siempre sencillas. Sin embargo la clasificación de metales en aceptores suaves o (b), duros o (a) e intermedios o (a', b'), sobre las bases de propiedades atómicas, es bastante aceptable.

Las figuras 5.6, 5.7 y 5.8<sup>106</sup> muestran la clasificación de cationes metálicos divalentes en términos de  $(z/r)$  y algunas características como son: segunda ionización en fase gaseosa del átomo metálico, su electronegatividad, el promedio del segundo potencial de ionización y el calor de solvatación de  $M^{2+}_{(g)}$ .

El parámetro  $(z/r)$  es escogido para reflejar la fuerza de enlace iónico, mientras que en el eje de las abscisas se utilizan varios parámetros con el fin de obtener la fuerza del enlace covalente.

Williams y Hale<sup>107</sup> han determinado, haciendo consideraciones semejantes a las propuestas anteriormente, la siguiente secuencia de metales divalentes de (a) a (b):

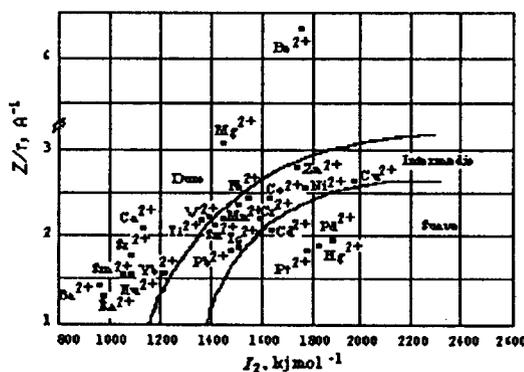
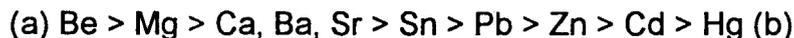


Figura 5.6. Plano de  $z/r$  contra los potenciales de la segunda ionización para cationes  $M^{2+}$

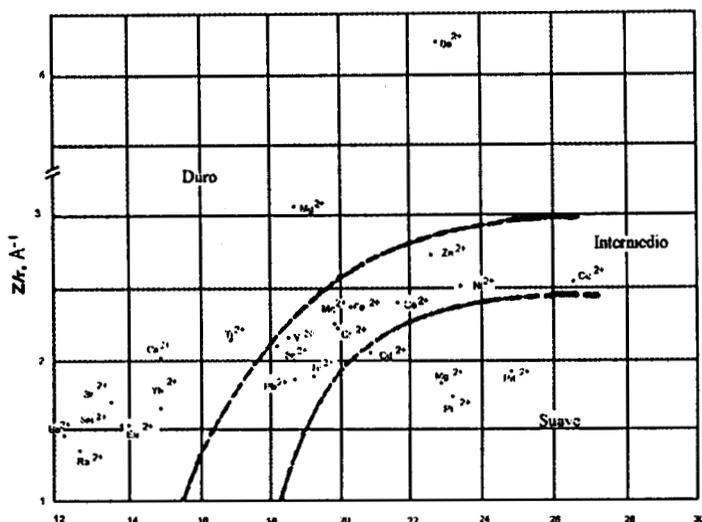


Figura 5.7. Plano de  $z/r$  contra electronegatividad del orbital para cationes  $M^{2+}$

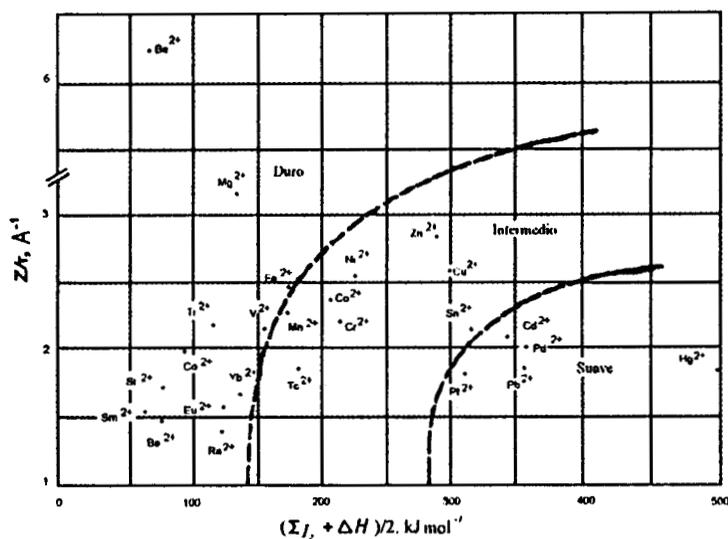
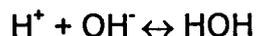


Figura 5.8. Plano de  $z/r$  contra el promedio del segundo potencial de ionización y calores de solvatación de  $M^{2+}$

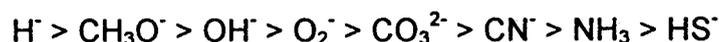
Para donadores de electrones, un intento por clasificar las bases en duras y suaves se muestra en la figura 5.9, para ligandos univalentes, usando la propiedad atómica ( $z/r$ ) y la polaridad molar de la base. De estas figuras se puede determinar que la dureza y suavidad no son absolutas.

$H^+$ , ácido duro.

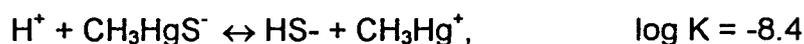
La reacción central en agua ácido duro-base dura, es:



El  $H^+$  al reaccionar con  $OH^-$  no genera un compuesto duro-duro<sup>97</sup>, ya que como la reacción es altamente exotérmica ( $\Delta H \ll 0$ ) el  $H^+$  es considerado, en este caso como un ácido intermedio, sin embargo en solución acuosa, el protón es extremadamente fuerte y generalmente duro con afinidad para bases en agua, exhibiéndose preferentemente fuerte para las bases duras:



El  $H^+$  es considerado como el conductor del equilibrio ácido-base,  $pH = -\log [H^+]$ , sobre todo en la química del agua. El modelo de ácidos y bases suaves y duras realmente se basa en un principio simple: la "afinidad entre un protón y un ion metálico (ácido de Lewis)" compitiendo por una base Lewis. Dos reacciones de competencia de ácido-base ejemplifican la preferencia de  $H^+$  por la base dura y del ion  $CH_3Hg^+$ , considerado un ácido de Pearson suave, para la base suave:



En las reacciones redox con formación de complejos, el  $H^+$  juega también un papel importante porque estas reacciones son usualmente mecanismos de formación de complejos ácido-base de Lewis en los que existe transferencia de electrones en las reacciones.

A continuación se enuncian algunas teorías para explicar la preferencia de los ácidos duros por las bases duras y de los ácidos suaves por las bases suaves<sup>101</sup>.

### 1. Teoría del enlace iónico y del enlace covalente.

Establece que la existencia de un enlace entre una base dura y un ácido duro genera un carácter predominantemente iónico y si los participantes son un ácido y una base suaves, entonces el enlace predominante es el covalente.

## 2. El enlace $\pi$ de Chatt.

Los ácidos suaves que contienen electrones en orbitales d externos permiten que exista una retrodonación, esto es, el ligando dona un par de electrones al ácido, pero el éste, debido a la existencia de electrones en los orbitales d, también puede donar a los ligandos un par de electrones. Por lo que se puede considerar que las bases suaves son aceptores de electrones y la mayoría de los ácidos suaves son los re-donantes para formación del enlace  $\pi$ .

En base a esto último, se puede decir que:

- Acido suave será el metal de un compuesto de coordinación aceptor de pares de electrones de los ligandos, que posteriormente se transforma en un donador por retrodonación  $\pi$  de electrones en los orbitales d.
- Base suave es el ligando donador de electrones al ácido suave para formar el enlace  $\sigma$  y posteriormente se transforma en aceptor de electrones provenientes del ácido, formándose el enlace  $\pi$ .
- Acido duro es un compuesto de coordinación con características contrarias al ácido suave.
- Base dura será el átomo donador en el complejo.

### 5.2.2 Condiciones de equilibrio<sup>6,7,109,110</sup>

Todos los iones complejos son inestables en menor o mayor grado y pueden disociarse en formas características para dar los iones o moléculas de las cuales ellos fueron formados. Para la ecuación



la expresión de la ecuación de equilibrio queda:

$$K = \frac{[\text{metal}][\text{ligando}]}{[\text{complejo}]}$$

El valor de la constante de equilibrio,  $K$ , es una medida de la inestabilidad del ion: para un ion complejo que es muy estable y se disocia muy poco el valor de la constante será muy pequeño, por el contrario, el ion complejo que es relativamente inestable y se disocia en alto grado tendrá un valor relativamente grande de  $K$ .

La formación de iones complejos ofrece un método para controlar la concentración de un ion metálico en solución. Así, **un ion metálico puede estar impedido para precipitar o tomar parte en una reacción, por formación de un ion complejo y disminución de la concentración del metal.**

La gran mayoría de las reacciones en solución acuosa implican combinaciones simples y directas de un anión con un catión. Como una regla general, siempre que dos electrolitos están presentes en solución, pueden interactuar: el ion positivo de un electrolito puede combinarse con el ion negativo del otro electrolito, siendo generando un compuesto cuando el producto formado es insoluble, o si sólo está débilmente ionizado. La fórmula química del compuesto estará determinada por la carga de los iones combinados.

Algunos compuestos son solubles en agua, mientras otros no lo son; sin embargo, aun las sales más insolubles son, en pequeño grado, solubles en agua. A la constante relacionada con el equilibrio de la disociación de una sal en el agua, se le denomina, como se indicó en el capítulo 3, constante de solubilidad:

$$K_{ps} = K[Sal]_s = [Cat^{n+}][An^{m-}]$$

Solamente se formará un precipitado cuando el producto iónico de una sal sea mayor que la constante del producto de solubilidad.

Mediante las siguientes reglas es posible determinar la separación de algunos iones de otros, cuando están presentes en solución<sup>28,29,111</sup>:

- 1.- Todas las sales de los metales alcalinos son solubles.
- 2.- Todas las sales de amonio son solubles.
- 3.- Todas las sales que contienen  $NO_3^-$ ,  $ClO_3^-$ ,  $ClO_4^-$ , y  $C_2H_3O_2^-$  son solubles.
- 4.- Todos los cloruros, bromuros y ioduros son solubles excepto los de  $Ag^{2+}$ ,  $Pb^{2+}$  y  $Hg^{2+}$ . El  $PbCl_2$  es ligeramente soluble.

- 5.- Todos los sulfatos son solubles excepto los de  $Pb^{2+}$ ,  $Sr^{2+}$  y  $Ba^{2+}$ ; los de  $Ag^+$  y  $Ca^{2+}$  son ligeramente solubles.
- 6.- Todos los óxidos metálicos, excepto los de los metales alcalinos y  $Ca^{2+}$ ,  $Sr^{2+}$  y  $Ba^{2+}$  son insolubles.
- 7.- Todos los hidróxidos son insolubles, excepto los de los metales alcalinos,  $Ba^{2+}$  y  $Sr^{2+}$ . El  $Ca(OH)_2$  es poco soluble.
- 8.- Todos los carbonatos, fosfatos, sulfuros y sulfitos son insolubles, excepto los de  $NH_4^+$  y de los metales alcalinos.

y las siguientes son para la formación de algunos iones complejos<sup>109,110,111</sup>

- 1.- Los cationes de los elementos de transición tienen una fuerte tendencia por formar iones complejos.
- 2.- Los metales alcalinos y alcalinotérreos forman pocos iones complejos.
- 3.- Todos los cationes forman complejos estables con los iones  $Cl^-$  en solución, siempre y cuando la concentración de  $Cl^-$  sea alta.

### 5.2.2.1 Efecto del pH en el equilibrio<sup>10,109,112,113</sup>

La solubilidad de muchas sustancias depende del pH de la solución. Considerando el equilibrio de solubilidad para la siguiente reacción,



se puede determinar que el equilibrio se desplaza hacia la derecha al aumentar la concentración del ion hidrógeno, esto es, al disminuir el pH de la solución, debido a que se establece una competencia por el anión quelatante con el ion hidrógeno. También al añadir iones  $OH^-$ , con lo que aumenta el pH, se desplaza el equilibrio hacia la izquierda, por lo que disminuye la solubilidad del compuesto.

Para ver el efecto cuantitativo del pH en la solubilidad del producto, MA, se debe determinar primero el pH de una disolución saturada de MA. Se escribe

$$K = [M^{2+}] [A^{2-}] / [MA] \quad (5.1)$$

Conociendo los equilibrios y el pH que se establecen con la ecuación anterior puede calcularse la concentración de  $M^{2+}$  libre en varias condiciones de solución. Si A representa la concentración total de formas del anión no acomplejadas, se tiene:

$$[A] = [A^{(m-x)}] + [HA^{(m-x+1)}] + [H_2A^{(m-x+2)}] + \dots \quad (5.2)$$

donde m es el estado de oxidación más estable y m-x cubre toda la gama de estados que puede tener A a diferentes pH's.

Teniendo además todas las ecuaciones de disociación protónica del complejo:

$$K_{a1} = \frac{[H^+][H_{m-1}A^1]}{[H_mA]} \quad K_{a2} = \frac{[H^+][H_{m-2}A^2]}{[H_{m-1}A^1]} \quad \text{etc.}$$

se tiene:

$$\frac{[A]}{[A^m]} = \frac{1}{\alpha} = 1 + \frac{[H^+]}{K_{a_m}} + \frac{[H^+]^2}{K_{a_{m-1}}K_{a_m}} + \frac{[H^+]^3}{K_{a_{m-2}}K_{a_{m-1}}K_{a_m}} + \dots$$

en donde  $\alpha$  es la fracción de las especies totales del complejo que existen como  $A^m$ , o sea,

$$A^n = \alpha[A] \quad (5.3)$$

Para una reacción general ácido-base,  $HA \leftrightarrow H^+ + A^-$ , suponiendo que no hay interacción del producto en otro sistema, y sabiendo que  $[HA] = \alpha_{HA}C$ ,  $[A^-] = \alpha_A C$  y  $\alpha_{HA} + \alpha_A = 1$ , la ecuación anterior se reduce a:

$$[HA] / [A^-] = 1/\alpha = 1 + [H^+] / K$$

obteniendo el menos logaritmo de la anterior expresión y despejando, se tendrá una ecuación de la forma:

$$pK = pH + \log \alpha_{HA}/(1-\alpha_{HA})$$

Con esta variable,  $\alpha$ , se puede construir un diagrama en función del pH, el cual se denomina diagrama de distribución. Este diagrama es muy útil, ya que conociendo la concentración total de una especie, se puede calcular la concentración de cada una de las formas que presenta en el sistema a analizar. Un ejemplo de estos diagramas se muestra en la figura 5.11. Este tipo de diagramas proporcionan amplia información, con bastante precisión.

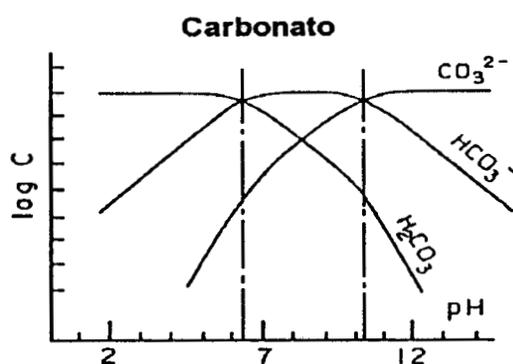
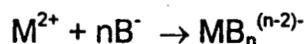
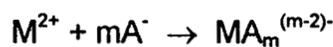


Figura 5.11. Diagrama de distribución para el sistema  $\text{H}_2\text{CO}_3$ .

### 5.2.2.2 Obtención de concentraciones de iones complejos <sup>10,112,114,115</sup>

La evaluación de la concentración del ligando (anión) libre es independiente de la naturaleza y concentración del metal.

Por otro lado, considerando un ion metálico divalente,  $\text{M}^{2+}$ , en agua, en presencia de varios ligandos ( $\text{A}^-$ ,  $\text{B}^-$ , etc.) se tendrán las siguientes ecuaciones de formación de complejos:



⋮

y sus ecuaciones en el equilibrio están dadas por:

donde  $\beta$  es la constante de formación o estabilidad del complejo.

Haciendo un balance de masa para el metal  $M^{2+}$  en función de las ecuaciones anteriores, se tendrá para el metal total ( $M_T$ ):

$$M_T = [M^{2+}] + [MA_m^{(m-2)-}] + [MB_n^{(n-2)-}] + \dots \quad (5.4)$$

$$M_T = [M^{2+}] + (1 + \beta_m[A^-]^m + \beta_n[B^-]^n + \dots) \quad (5.5)$$

Como se vio en la ecuación 5.3,  $[A^-]^m = \alpha_A^m [A]^m$ , por lo tanto,  $[B^-]^n = \alpha_B^n [B]^n$ , sustituyendo estas ecuaciones en la ecuación 5.5, se tiene:

$$M_T = [M^{2+}] + (1 + \beta_m \alpha_A^m [A]^m + \beta_n \alpha_B^n [B]^n + \dots) \quad (5.6)$$

En muchos casos, se pueden hacer las siguientes consideraciones:

- a) Si  $1 \gg \beta_m \alpha_A^m [A]^m, \beta_n \alpha_B^n [B]^n, \dots$ , entonces  $M^{2+}$  es la especie dominante.
- b) Si  $\beta_m \alpha_A^m [A]^m \gg 1, \beta_n \alpha_B^n [B]^n, \dots$ , entonces  $MA_m^{(m-2)-}$  es la especie dominante y así sucesivamente.

La metodología a seguir para calcular los complejos de metales puede ser:

- 1) Listar todas las especies consideradas.
- 2) Calcular las concentraciones de ligando libre.
- 3) Calcular cada uno de los términos de la ecuación 5.6 y determinar cuales son los términos significativos.
- 4) Obtener la distribución de los metales.

## METODOLOGÍA ANALÍTICA

### 6.1 Metodología de Muestreo en la Presa José Antonio Alzate.

La recolección de muestras de agua naturales (lagos, ríos, presas, etc.) es un proceso muy importante y difícil. Aún en aguas superficiales, para el análisis de trazas de metales, se corre el peligro de contaminarlas si no se tiene el suficiente cuidado; el riesgo de esto con muestras a mayor profundidad es mayor, a menos que el paso inicial sea dado correctamente, de lo contrario se perderían horas de trabajo<sup>116,117,118</sup>

Si se desea analizar todos los componentes disueltos en las aguas, probablemente se encontrarían todos los elementos de la tabla periódica, variando las proporciones de estos de acuerdo al origen e historia de cada agua. Antes de darse a la tarea del análisis de los elementos en sus diferentes formas en el agua (disueltos o no), se tiene que plantear la estrategia que nos garantice cualitativamente y que represente lo más fielmente posible a la fuente de donde proviene la muestra.

La estrategia a seguir consiste en dar solución a los siguientes puntos:

1. Definir él o los elementos que se van analizar.
2. Establecer límites probables de la concentración esperada de cada uno de ellos.
3. Muestrear según él o los elementos a analizar.
4. Tratar la muestra según él o los elementos a analizar.
5. Analizar el elemento conforme al método más idóneo.

### 6.1.1 Características más Relevantes de los Muestreos.

La toma de muestras es uno de los pasos fundamentales en el proceso de análisis, debido a que en esta etapa se pueden introducir errores muy serios que afectarán la precisión de los resultados finales, es por eso que se deben realizar todos los esfuerzos posibles para conservar las características originales de la muestra y así lograr altos índices de confiabilidad y validez en los resultados.

Existen diferentes tipos de agua según de donde provengan: ríos, lagos, potable, lodos, desechos industriales, mares, etc.<sup>119</sup>. Para caracterizar el tipo de agua de algún sitio es necesario establecer estrategias tanto para el muestreo como del análisis químico a seguir. Para ello se debe desarrollar un programa de monitoreo analítico considerando

- ① Los objetivos.
- ② La obtención de muestras representativas.
- ③ Las posibles fuentes de variación durante el muestreo tales como: flujo, etapa del proceso, concentración, características físicas, localización, profundidad.

También es importante tener en cuenta, dependiendo del tipo de agua y del sitio:

- ① La descarga residual.
- ② La entrada de corriente tributarias
- ③ Salida de canal.
- ④ Presa, represa, mar o sitio de descarga.
- ⑤ Caída o cascadas.
- ⑥ Zonas cubiertas de lirio.

En la toma de muestras para el análisis de metales los recipientes deberán ser, de preferencia de polipropileno<sup>120,121</sup> y estar perfectamente limpios. Cuando se van a hacer determinaciones del orden de ppm, cualquier pequeña cantidad de polvo, aceite, óxido de hierro y otras sustancia pueden alterar los resultados.

En el muestreo se deben usar recipiente limpios como se indicó anteriormente y ser enjuagados varias veces antes de llenarlos con el agua que de la cual se va a tomar la muestra<sup>122,123</sup>. Dependiendo del número de elementos a determinar y de las concentraciones esperadas, los volúmenes de muestra pueden variar, tomándose generalmente un litro.

### 6.1.2 Conservación de las Muestras.

Las aguas naturales y tratadas, así como las residuales, originadas por los desechos industriales y domésticos, son sistemas en constante evolución; al tomar una muestra de éstos y tratar de conservarla, resulta prácticamente imposible alcanzar la estabilidad completa de cada uno de los constituyentes, ya que los cambios químicos continúan inevitablemente en la muestra que ha sido recolectada<sup>123</sup>. Lo único que se puede lograr es retardar éstos cambios a través de técnicas de preservación. Una vez que la muestra ha sido recolectada de la fuente, los cambios que se efectúan en ella son químicos o biológicos. Al sacar una muestra de la fuente y colocarla en un medio cerrado, cambian las condiciones de: temperatura, presión y pH, lo que origina que se rompa el equilibrio en que se encontraba en relación a la atmósfera y con el medio que la rodeaba, cambiando así sus propiedades físicas y químicas. Los cationes sensibles a estos cambios pueden precipitar como hidróxidos o formar complejos con otros elementos generados por el cambio; si las nuevas condiciones son oxidantes o reductoras, los cationes y aniones pueden cambiar de estado de oxidación<sup>38</sup>. Otros pueden disolverse o volatilizarse con el transcurso del tiempo.

Los métodos de preservación<sup>123</sup> de muestras son relativamente limitados y pretenden generalmente:

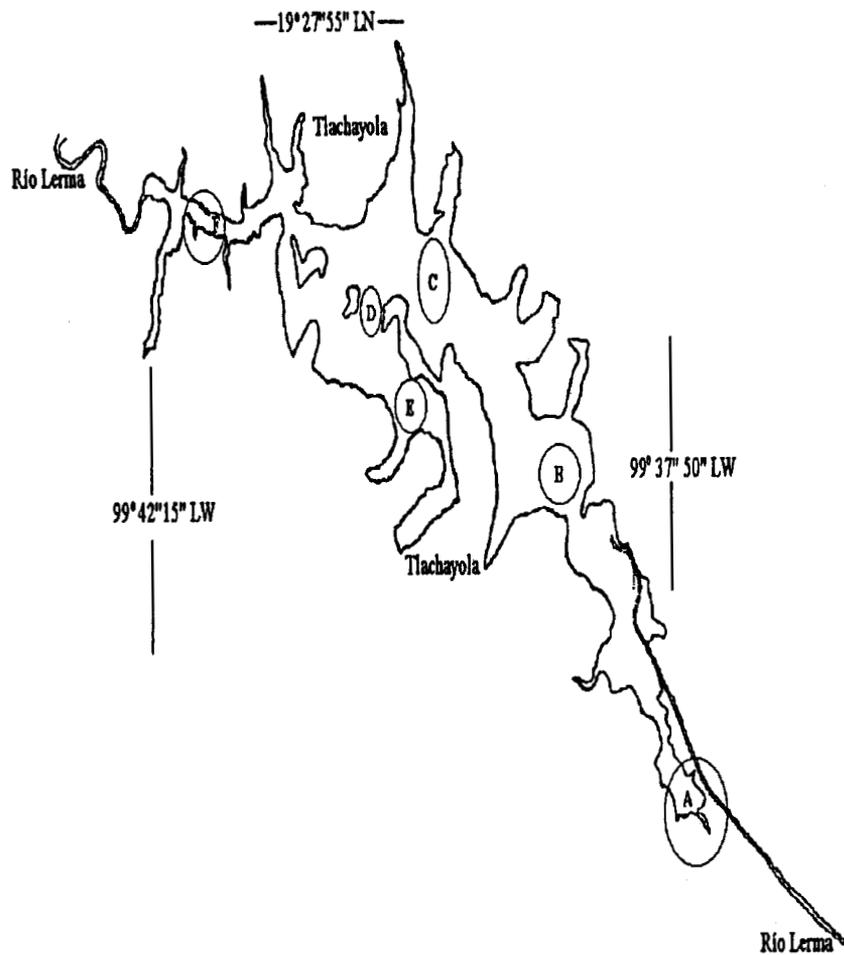
1. Retardar la acción biológica.
2. Retardar la hidrólisis de los compuestos químicos y complejos.
3. Reducir la volatilización de los constituyentes.

Los métodos de preservación se limitan generalmente al control del pH, adición química, refrigeración y congelación<sup>123</sup>. En la tabla 6.1 se dan las condiciones recomendadas por la agencia de protección del medio ambiente (EPA)<sup>122</sup> de E.U.A. para conservación de algunos elementos de interés en las muestras.

### 6.1.3 Pruebas de Campo en la Presa José Antonio Alzate en el Estado de México.

Se diseñó el siguiente plan experimental para las campañas de muestreo en la Presa "José Antonio Alzate".

- Primeramente se realizó un estudio físico de la presa, para determinar las zonas de muestreo, dependientes de la morfología de la misma y la corriente del río Lerma. De aquí se obtuvo que se podía evaluar el comportamiento de la presa mediante seis zonas, las cuales se indican en la figura 6.1.



- Sitio A. Entrada del río Lerma a la presa
- Sitio B. Derrotero del río.
- Sitio C. Parte media de la presa.
- Sitio D. Zona de transición.
- Sitio E. Zona de agua pluvial.
- Sitio F. Cortina de la presa.

Figura 6.1. Mapa de la Presa José Antonio Alzate

Tabla 6.1. Recomendaciones de la EPA para conservación y envasado de muestras.

| ELEMENTO                          | CONSERVADOR  | TIEMPO DE ALMACENAMIENTO                 |
|-----------------------------------|--|--|
| Arsénico                          | HNO <sub>3</sub> a pH < 2  | 6 meses                                  |
| Cloruros                          | No requiere  | 7 días                                   |
| Dureza                            | Refrigerar a 4°C<br>HNO <sub>3</sub> a pH < 2                      | 7 días                                   |
| Metales totales                   | *Filtrar en el lugar y conservar con:<br>HNO <sub>3</sub> a pH < 2 | 6 meses                                  |
| Metales en material en suspensión | *Filtrar en el lugar   | 6 meses                                  |
| Mercurio disuelto                 | HNO <sub>3</sub> a pH < 2  | 38 días en vidrio<br>13 días en plástico |
| Mercurio total                    | HNO <sub>3</sub> a pH < 2  | 38 días en vidrio<br>13 días en plástico |
| Selenio                           | HNO <sub>3</sub> a pH < 2  | 6 meses                                  |
| Sulfatos                          | Refrigérese a 4° C   | 7 días                                   |

\* Filtrado a través de una membrana de 0.45 micras.

También se determinó con este examen, la profundidad en la que se iba a tomar a la muestra. Esta selección se efectuó considerando la máxima altura del agua en la presa, tomando como base la época, temperatura ambiente, sol, viento, actividades de riego, siembra, etc.

- Posteriormente se realizó un trabajo de campo para efectuar mediciones físicas en la presa, las cuales fueron:
  - \* pH
  - \* Temperatura
  - \* Conductividad
  - \* O<sub>2</sub> disuelto
  - \* Turbiedad

Este trabajo se realizó a diferentes horas, con el fin de determinar cuál sería el mejor horario de muestreo para la recolección de las muestras para los estudios posteriores, en función de la mayor concentración de oxígeno disuelto, ya que es el parámetro que indica las condiciones de mayor actividad química y biológica, y a diferentes profundidades de la columna de agua: 20 cm, 50 cm y fondo (cuidando de no revolver el sedimento).

- Finalmente y tomando en cuenta los resultados del trabajo de campo anterior, se realizó en una nueva campaña de muestreo la recolección de muestras para los siguientes análisis:

- \* Demanda Bioquímica de Oxígeno y Demanda Química de Oxígeno
- \* Alcalinidad y Dureza
- \* Aniones (fosfatos, sulfatos, nitratos, nitritos, cloruros, cianuros y sulfuros)
- \* Metales disueltos totales y metales totales
- \* Especiación.

Las muestras recolectadas para DBO y DQO, alcalinidad, dureza y aniones después de recolectadas, se mantuvieron a temperaturas bajas -en hielo-, hasta su tratamiento. Para las muestras destinadas a la medición de metales pesados totales se les agregó 1 ml de ácido nítrico por litro de muestra, grado "ultrapuro", además de mantenerlas a temperaturas bajas.

Las muestras destinadas a la determinación de las especies, se mantuvieron a temperaturas bajas (aproximadamente 4 °C), con ayuda de hielo, en lo que fueron transportadas al ININ donde tanto la muestra como el recipiente contenedor se expusieron en una atmósfera de nitrógeno líquido para mantener la temperatura lo más baja posible y después se mantuvieron en congelación.

## **6.2 Pruebas Efectuadas en el Laboratorio a las muestras provenientes de la presa "J. A. Alzate.**

### **6. 2.1 Oxígeno disuelto<sup>126</sup>.**

Los niveles de oxígeno disuelto se emplean como indicadores de la contaminación de un cuerpo de agua. Con base en la demanda de O<sub>2</sub> de los contaminantes presentes, se puede determinar cuando un agua es de baja calidad, es decir, el oxígeno disuelto se presenta en bajas concentraciones, o un agua es de buena calidad, cuando la concentración de oxígeno es elevada.

#### **Reactivos.**

1. Solución de sulfato manganoso. Disolver 364 g de sulfato manganoso monohidratado (MnSO<sub>4</sub>.H<sub>2</sub>O) en un litro de agua destilada.
2. Solución alcali-yoduro-azida. Disolver 500 g de hidróxido de sodio (NaOH) en agua destilada. Por otro lado, disolver 135 g de yoduro de sodio (NaI) en agua destilada. Mezclar ambas soluciones y llevarlas a 500 ml con agua destilada. Disolver 10 g de azida de sodio (NaN<sub>3</sub>) en 40 ml. de agua destilada. Mezclar las soluciones y aforar a un litro con agua destilada.
3. Solución de tiosulfato de sodio. Disolver 6.205 g de tiosulfato de sodio pentahidratado ( Na<sub>2</sub>S<sub>2</sub>O<sub>3</sub>.5H<sub>2</sub>O) en agua destilada y hervida. Agregar 0.4 g de hidróxido de sodio (NaOH) sólido y aforar a un litro.

4. Solución de almidón. Disolver 4 g en 200 ml. de agua destilada. Hervir por tres minutos. Dejar reposar y agregar 0.4 g de ácido salicílico.
5. Acido sulfúrico concentrado ( $H_2SO_4$ ).

### **Procedimiento.**

- a) Se llenaron las botellas Wheaton para DBO con las muestras (tres por zona y profundidad), cuidando que no contuvieran burbujas de aire y que tuvieran el sello hidráulico.
- b) Se le agregó a cada muestra 2 ml de solución de sulfato manganeso y 2 ml. de solución alcali-yoduro-azida, cuidando que la punta de las pipetas se localizara por debajo del cuello de la botella Wheaton. Se taparon y se agitaron hasta homogeneizar.
- c) Se dejaron reposar hasta que el precipitado cubría la mitad del frasco. Se le adicionaron 2 ml de ácido sulfúrico concentrado a cada frasco y se agitaron
- d) De cada frasco se tomó 100 ml y se vaciaron en matraces erlenmeyer. Estas muestras se titularon con solución de tiosulfato de sodio 0.025 N hasta coloración amarillo paja. Se les adicionó 1 ml. de almidón por matraz y se continuo con la titulación hasta que desapareció el color. Anotándose los mililitros de tiosulfato consumidos.

### **Cálculos.**

$$C_{O_2} = (C_1) (V_1) (8000) / V_c$$

donde:  $C_{O_2}$  = Concentración de oxígeno disuelto en mg/l.

$C_1$  = Concentración del tiosulfato de sodio

$V_1$  = Volumen de tiosulfato utilizado

$V_c$  = Volumen corregido =  $(V_f - 4)(100)/V_f$

$V_f$  = Volumen del frasco Wheaton

## **6.2.2 Demanda Bioquímica de Oxígeno y Demanda Química de Oxígeno.**

### **6.2.2.1 Demanda Bioquímica de Oxígeno<sup>124</sup> (DBO).**

Método de incubación a 20 °C durante 5 días que mide la oxidación de la materia orgánica biodegradable presente en aguas naturales y residuales.

### **Reactivos.**

1. Solución amortiguadora de fosfatos. Disolver en 500 ml. de agua 8.5 g de  $KH_2PO_4$ , 33.4 g de  $Na_2HPO_4 \cdot 7H_2O$ , 21.75 g de  $K_2HPO_4$  y 1.7 g de  $NH_4Cl$  y diluir a un litro.

2. Solución de cloruro de calcio. Disolver en agua destilada 27.5 g de cloruro de calcio ( $\text{CaCl}_2$ ) y aforar a un litro.
3. Solución de cloruro férrico. Disolver en agua destilada 0.25 g de  $\text{FeCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$  y diluir a un litro
4. Solución de sulfato de magnesio. Disolver 22.5 g de sulfato de magnesio heptahidratado ( $\text{MgSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ ) en un litro de agua destilada.
5. Solución de ácido sulfúrico 0.1 N.
6. Solución de NaOH 0.1 N.

**Procedimiento.**

- a) Saturar de oxígeno el agua de dilución y adicionar las soluciones de: cloruro de calco, sulfato de magnesio, cloruro férrico y fosfato (amortiguadora).
- b) Las muestras que presentaron pH's correspondientes a soluciones alcalinas ( $\text{pH} > 7.5$ ) o ácidas ( $\text{pH} < 6.5$ ) se neutralizaron a un pH de 6.5 a 7.5 con las soluciones de  $\text{H}_2\text{SO}_4$  o NaOH.
- c) Se hicieron 3 diluciones de la muestra en frascos de DBO con el agua de dilución por triplicado, tomando 1 ml. de muestra en cada caso. Se prepararon tres botellas adicionales con agua de dilución para el blanco.
- d) Se determinó el oxígeno disuelto en un frasco de cada dilución y del blanco, después de 15 minutos de haber hecho la dilución.
- e) El resto de los frascos se mantuvieron a 20 °C para su incubación durante 5 días, manteniendo el sello hidráulico.
- e) Después de los 5 días se determinó la cantidad de oxígeno disuelto.

**Cálculos.**

$$C_{\text{DBO}} = \frac{(\text{Ci}-\text{Cf}) - (\text{Cbi}-\text{Cbf})}{\text{Dilución} *}$$

- donde :
- $C_{\text{DBO}}$  = Concentración de la  $\text{DBO}_5$  en mg/l
  - Ci = Concentración de oxígeno disuelto inicial, mg/l
  - Cf = Concentración oxígeno disuelto en las muestras incubadas.
  - Cbi = Concentración del oxígeno disuelto inicial en el blanco
  - Cbf = Concentración del oxígeno disuelto en el blanco incubado
  - Dilución \*= dilución expresada en decimales

**6.2.2.2 Demanda Química de Oxígeno<sup>124</sup> (DQO).**

El método utilizado para determinar la demanda química de oxígeno fue el de reflujo con dicromato de potasio, el cual consiste en la oxidación de la materia

orgánica así como la materia inorgánica oxidable que se encuentra en el agua, en un medio fuertemente ácido determinándose después el exceso de oxidante.

### **Reactivos.**

1. Solución de dicromato de potasio 0.25 N. Disolver 3.0647 g de  $K_2Cr_2O_7$  (secado previamente durante dos horas a 105 °C). en agua destilada, aforar a 250 ml y homogeneizar la solución.
2. Solución de sulfato ferroso amoniacal. Pesar exactamente 24.5 g de sulfato ferroso amoniacal hexahidratado,  $[Fe (NH_4)_2(SO_4)_2 \cdot 6H_2O]$ , y disolver en aproximadamente 200 ml de agua, agregar cuidadosamente 5 ml de ácido sulfúrico concentrado, enfriar y aforar a 250 ml.
3. Solución de ácido sulfúrico-sulfato de plata. Pesar 9.512 g de sulfato de plata y disolver en 250 ml de  $H_2SO_4$  concentrado.
4. Solución indicadora de ferroína. Disolver en agua 0.7425 g de 1.10-fenantrolina y 0.3475 g de sulfato ferrosos heptahidratado, aforar a 50 ml.
5. Sulfato mercúrico.

### **Procedimiento.**

- a) Valoración de la solución de sulfato ferroso amoniacal: 25 ml de la solución de dicromato de potasio se diluyeron a 250 ml con agua destilada y se les agregó 20 ml de ácido sulfúrico concentrado, se mezcló perfectamente, se dejó enfriar y se le agregó unas gotas de solución indicadora de ferroína. Se valoró con la solución de sulfato ferroso amoniacal. Se obtiene la concentración exacta de la solución mediante la fórmula:

$$C = C_1 V_1 / V$$

donde C = concentración del sulfato ferrosos amoniacal  
C<sub>1</sub> = concentración del dicromato de potasio  
V<sub>1</sub> = volumen del dicromato de potasio.  
V = volumen gastado en la titulación

- b) Se transfirió una muestra de 50 ml o una porción diluida a 50 ml con agua destilada a un matríz, se agregó aproximadamente 0.4 g de sulfato mercúrico y algunas perlas de vidrio. Después se adicionaron 5 ml de solución  $H_2SO_4$ - $AgSO_4$  hasta disolver el  $HgSO_4$  y 25 ml de la solución de dicromato de potasio 0.25 N y se mezcló.
- c) Se conectó el matríz de (b) al condensador y se hizo circular agua para enfriarlo.

- d) Por el extremo superior del condensador se agregó lentamente 70 ml de la solución  $H_2SO_4-Ag_2SO_4$  y se agitó con movimiento circular.
- e) Se calentó el matríz con la mezcla y se mantuvo a reflujo durante 2 horas a partir del momento en que comenzó la ebullición. Después, se dejó enfriar y se lavó el condensador con 25 ml de agua destilada. Se añadió más agua hasta completar aproximadamente un volumen de 300 ml, se retiró el matríz del condensador y se enfrió a temperatura ambiente.
- f) Con la solución de sulfato ferroso valorado y utilizando ferroína como indicador se tituló el exceso de dicromato.
- g) Se sometió al mismo procedimiento un blanco con 50 ml de agua destilada.

**Cálculos.**

$$C_{DQO} = \frac{(V_a - V_b)C_1 \times 8000}{V}$$

- donde :
- $C_{DQO}$  = Concentración de la DQO, en mg/l
  - $V_a$  = ml de  $[Fe (NH_4)_2(SO_4)_2]$  usado para el blanco.
  - $V_b$  = ml de  $[Fe (NH_4)_2(SO_4)_2]$  usado para la muestra.
  - $C_1$  = normalidad de  $[Fe (NH_4)_2(SO_4)_2]$
  - $V$  = volumen de la muestra, en ml.

**6.2.3 Alcalinidad y Dureza.**

**6.2.3.1 Determinación de Alcalinidad<sup>24,124</sup>.**

Se utilizó el método volumétrico para determinar la alcalinidad total en una muestra de agua.

**Reactivos utilizados:**

1. Acido sulfúrico 0.02 N. Se diluyen 50 ml de la solución madre a 250 ml.
2. Solución madre de ácido sulfúrico. Diluir 1.5 ml de  $H_2SO_4$  concentrado a 500 ml con agua destilada.
3. Solución de  $Na_2CO_3$  0.02 N. Disolver 1.06 g de  $Na_2CO_3$  (secado a 140 °C durante 24 horas) en agua destilada.
4. Indicador de anaranjado de metilo.
5. Indicador de fenolftaleina.

**Procedimiento.**

- a) Valoración del ácido sulfúrico. Se toman 50 ml de solución de carbonato de sodio por duplicado y se titula con el ácido 0.02 N. Se obtiene la concentración exacta de la solución mediante la fórmula:

$$C = C_1 V_1 / V$$

donde C = concentración del ácido sulfúrico  
 $C_1$  = concentración del carbonato de sodio  
 $V_1$  = volumen del carbonato de sodio  
 V = volumen gastado en la titulación

- b) Se tomaron 50 ml de la muestra de agua.
- a) Se le adicionaron 3 gotas de fenolftaleína y en caso de no desarrollar color se le agregan 3 gotas de anaranjado de metilo.
- b) Se tituló con el ácido sobre una superficie blanca, hasta el punto de equivalencia, el cual se alcanzó cuando cambió el color del indicador a un color canela característico y a un pH de 4.3.
- c) Se efectuaron titulaciones por triplicado, para cada sitio y profundidad.

En la tabla 6.2 se indica el predominio de la alcalinidad para ciertas condiciones<sup>24</sup>.

Tabla 6.2. Formas predominantes de alcalinidad.

| CONDICION      | ALCALINIDAD           | ESPECIES mol/lt   |
|----------------|-----------------------|---|
| $V_f = V_{am}$ | $CO_3^{2-}$           | $[CO_3^{2-}] = V_f \times N \times V^{-1}$  |
| $V_f = 0$      | $HCO_3$               | $[HCO_3] = V_{am} \times N \times V^{-1}$   |
| $V_{am} = 0$   | $OH^-$                | $[OH^-] = V_f \times N \times V^{-1}$   |
| $V_f > V_{am}$ | $OH^-$ y $HCO_3$      | $[CO_3^{2-}] = V_{am} \times N \times V^{-1}$<br>$[OH^-] = (V_f - V_{am}) \times N \times V^{-1}$ |
| $V_{am} > V_f$ | $CO_3^{2-}$ y $HCO_3$ | $[CO_3^{2-}] = V_f \times N \times V^{-1}$<br>$[HCO_3] = (V_{am} - V_f) \times N \times V^{-1}$   |

$V_f$  = volumen de ácido para alcanzar el punto de equivalencia con fenolftaleína.

$V_{am}$  = volumen de ácido para alcanzar el punto de equivalencia con anaranjado de metilo.

V = volumen de la muestra en ml.

N = normalidad del titulante.

### 6.2.3.2 Determinación de Dureza<sup>125</sup>

Esta análisis se hizo tomando en cuenta la definición de "dureza", en función de la concentración de los iones de  $Ca^{2+}$  y  $Mg^{2+}$ . Esta determinación se realizó mediante la técnica espectrofotométrica de Absorción Atómica por flama.

## 6.2.4 Aniones

### 6.2.4.1 Determinación de Fosfatos<sup>125</sup>.

Para su determinación, se procedió primero a una digestión ácida de la muestra y después se determinó su contenido de fósforo mediante la técnica por colorimetría.

#### **Reactivos.**

1. Acido sulfúrico concentrado.
2. Acido nítrico concentrado.
3. Solución indicadora de fenolftaleína.
4. Hidróxido de sodio 1N.

#### **Procedimiento.**

- a) A 50 ml de muestra se le adicionó 1 ml de ácido sulfúrico y 5 ml de ácido nítrico concentrados. Inmediatamente se efectúa una digestión ácida.
- b) Se enfrió y se adicionaron 20 ml de agua destilada, una gota de indicador y suficiente NaOH para producir un tinte rosa en la solución. Se transfirió la solución neutralizada, se filtró (se procede a esto cuando es necesario) y se aforó con agua destilada. El fósforo total se determinó colorimétricamente, para lo cual se construyó una curva de calibración tratando la soluciones patrón por digestión.

#### **Cálculos .**

$$C_P = \frac{w \times 1000}{V}$$

donde  $C_P$  = concentración de P, en mg/l  
 $w$  = mg de P leídos en la curva  
 $V$  = volumen de la muestra en ml.

### 6.2.4.2 Determinación de Sulfatos<sup>125</sup>

#### **Reactivos Utilizados.**

1. Acido clorhídrico 2 M. Diluir 1.8 ml de HCl en 100 ml de agua destilada.

2. Solución de Sulfato 100 ppm. Disolver 1.4797 g de sulfato de sodio anhidro en agua destilada y diluir a un litro. Preparar estándares conteniendo 10, 25, 50, 100, 150 y 200 ppm.
3. Solución de Bario. De una solución de 1000 ppm, prepara estándares de 2.5, 5, 7.5, 10, 15 y 20 ppm, agregando a cada estándar 5 ml de una solución de 2000 mg/l de potasio.
4. Solución sobresaturada de potasio. Disolver 20.2206 g en 100 ml de agua destilada.

### **Preparación de la muestra.**

- a) Se transfirió 10 ml de muestra a un matraz volumétrico de 50 ml y se le agregaron 5 ml de ácido clorhídrico 2 M, calentándose la muestra hasta una temperatura entre 90 -95 °C.
- b) Se añadieron lentamente 10 ml de solución de Bario de 200 ppm con agitación, continuándose con el calentamiento durante 5 minutos. Después se enfrió hasta temperatura ambiente.
- c) Se aforó con agua destilada y se mantuvo el sistema en reposo durante un día.
- d) Posteriormente se decantó el líquido sobrenadante y se centrifugó hasta obtener una solución transparente.
- e) Se tomaron 10 ml de esta última solución, se le agregó 1 ml de la solución de potasio sobresaturada y se aforó con agua destilada.
- f) Los estándares de sulfato sufren el mismo tratamiento que la muestra, así mismo, un blanco.
- g) Se prepara una curva de calibración con los estándares de bario, y se mide la concentración en las muestras, estándares y blanco.

### **Cálculos.**

Cantidad de sulfato en la muestra (mg) = mg de estándar de sulfato x factor de dilución.

Concentración de sulfato (mg/l) =  $\frac{\text{cantidad de sulfato (mg)}}{\text{volumen de la muestra}}$

Exceso de Bario (mg/l) = mg/l Ba x factor de dilución

Cantidad de sulfato (mg) = (80- conc. de bario en exceso (mg/l) ) x  $\frac{0.704 \times \text{vol. sol. (ml)}}{1000}$

Concentración de sulfato (mg/l) =  $\frac{\text{cantidad de sulfato}}{\text{volumen de la alícuota}}$

### 6.2.4.3 Determinación de Nitratos <sup>122</sup>

Existen varias técnicas para determinar nitratos y su uso depende de la concentración y de las interferencias de la muestra. El método empleado fue el de la brucina que determina concentraciones entre 0.1 y 2.0 mg/l de N en nitratos.

#### **Reactivos Utilizados:**

1. Solución stock de nitratos. Disolver 721.8 mg de  $\text{KNO}_3$  y aforar a un litro con agua destilada, 1 ml de esta solución contiene 0.1 mg de nitratos.
2. Solución estándar de nitratos. Diluir 10 ml de la solución stock de nitratos en agua destilada y aforar a un litro. Preparar inmediatamente antes de usar.
3. Solución de brucina-ácido sulfanílico. Disolver 1 g de sulfato de brucina y 0.1 g de ácido sulfanílico en aproximadamente 70 ml de agua destilada caliente. Añadir 3 ml de HCl concentrado. Enfriar la solución y aforar a 100 ml.
4. Solución de ácido sulfúrico. Añadir cuidadosamente 500 ml de  $\text{H}_2\text{SO}_4$  a 125 ml de agua destilada. Dejar enfriar a temperatura ambiente antes de usar y mantenerlo tapado herméticamente para evitar que absorba la humedad atmosférica.
5. Solución de NaCl. Disolver 300 g en agua destilada y aforar a un litro.

#### **Procedimiento.**

- a) Se prepararon 6 estándares de nitratos en un intervalo de concentración entre 0.1 y 1.0 mg / L .
- b) Se colocaron en cada tubo del espectrofotómetro UV-visible: los estándares, las muestras y el blanco.
- c) Se añadió a cada tubo 10 ml de muestra, estándar o blanco y se colocaron en baño de agua fría.
- d) Se agregó 2 ml de solución de cloruro de sodio a cada tubo, agitando vigorosamente y luego dejándolos enfriar en baño de agua fría.
- e) Posteriormente a cada tubo se le añadió 10 ml. de solución de ácido sulfúrico, agitándose vigorosamente y se dejan enfriar.
- f) Por último, se añadió 0.5 ml. del reactivo de ácido sulfanílico-brucina en cada tubo y se agitaron. Se colocaron los tubos en un baño maría a temperatura de 95 °C durante 20 min.
- g) Se enfriaron los tubos en el baño de agua fría hasta la temperatura ambiente, se recomienda secarlos al retirarlos del baño.
- h) Se preparó una curva de calibración a partir de los valores de absorbancia de los estándares menos la lectura del blanco. Se leyeron las concentraciones, referidas a nitrógeno (N) de los nitratos en la curva de calibración.

- i) Se leyeron las muestras de los tubos en el espectrofotómetro a una longitud de onda de 410 nm, cuidando de restar la lectura del blanco.
- j) Los resultados obtenidos, para ser reportados en equivalentes de  $\text{NO}_3^-$  se multiplicaron por el factor de 4.43.

**Cálculos.**

$$C_{\text{NO}_3^-} = (C_N)(f)$$

$$f = \text{PM}_{\text{NO}_3^-} / \text{PM}_N = 4.43$$

donde:  $C_{\text{NO}_3^-}$  = Concentración de nitratos en ppm.  
 $C_N$  = Concentración de nitrógeno en ppm

**6.2.4.4 Determinación de Nitritos <sup>122</sup>**

Para la determinación de nitrógeno de nitritos se utilizo el método de la diazotización en forma reducida .

**Reactivos utilizados.**

1. Reactivo de sulfanilamida. Disolver 2.5 g de sulfanilamida en una mezcla de 25 ml de HCl concentrado y 150 ml de agua destilada. Aforar a 250 ml.
2. Solución N-(i-naftil)-etilendiamina de hidrocioruro. Disolver 250 mg en 250 ml de agua destilada. Guardar en un frasco ámbar desechara cuando desarrolle un fuerte color café
3. Acido clorhídrico (1 : 3).
4. Solución madre de nitritos. Disolver 0.308 g de  $\text{NaNO}_2$  o de  $\text{KNO}_2$  en agua y diluir a 250 ml. Preservar con 3 gotas de cloroformo.
5. Solución intermedia de nitritos. Tomar 5 ml de solución madre y diluir a 25 ml con agua destilada. Preparar diariamente.
6. Solución patrón de nitritos. Diluir 2.5 ml de la solución intermedia a 250 ml. Preparar diariamente.

**Procedimiento.**

- a) A 50 ml de muestra clara neutralizada a un pH 7 se le añadió 1 ml de solución de sulfanilamida. Se dejó reaccionar por más de 2 min pero menos de 8 min. Se añadió 1 ml de solución de 1-naftiletildiamina y se mezcló inmediatamente.
- b) Entre 10 min y 2 horas después, se midió la absorbancia de la solución a una longitud de onda de 540 nm.

- c) Se midieron volúmenes entre 0 y 2.5 ml de la solución patrón de nitritos que es equivalente a concentración de 0 a 25 mg/l referidos a N y se diluyeron a 50 ml con agua destilada, sometiéndolos al mismo tratamiento que la muestra.
- d) Se preparó una curva de calibración a partir de los valores de absorbancia de los estándares menos la lectura del blanco. Se leyeron las concentraciones, referidas a nitrógeno (N) de los nitritos en la curva de calibración.
- i) Se leyeron las muestras de los tubos en el espectrofotómetro a una longitud de onda de 410 nm, cuidando de restar la lectura del blanco.
- j) Los resultados obtenidos, para ser reportados en equivalentes de  $\text{NO}_2^-$  se multiplicaron por el factor de 3.28.

**Cálculos.**

$$C_{\text{NO}_2^-} = (C_N)(f)$$

$$f = \text{PM}_{\text{NO}_2^-} / \text{PM}_N = 3.28$$

donde:  $C_{\text{NO}_2^-}$  = Concentración de nitritos en ppm.  
 $C_N$  = Concentración de nitrógeno en ppm

**6.2.4.5 Determinación de Cloruros<sup>122</sup>.**

Se utilizó el método argentométrico o de Mohr, el cual se aplica a aguas relativamente claras.

**Reactivos utilizados:**

1. Solución valorada de cloruro de sodio 0.0141 N. Se disuelven 0.206 g de NaCl previamente secado, en agua destilada y se diluye a 250 ml.
2. Solución valorada de nitrato de plata 0.0141N. Disolver 0.5988 g de  $\text{AgNO}_3$  en 250 ml de agua destilada
3. Indicador de cromato de potasio. Disolver 12.5 g de  $\text{K}_2\text{CrO}_4$  en 100 ml de agua destilada. Agregar gota a gota solución de nitrato de plata hasta la formación de un precipitado rojo definido. Se deja reposar por 12 horas, se filtra y se diluye el filtrado a 250 ml con agua destilada.
4. Solución de NaOH 1N.
5. Solución de  $\text{H}_2\text{SO}_4$  1 N.

**Procedimiento.**

- a) Se tomó una muestra de 100 ml o una porción alícuota apropiada, diluida a 100 ml. Se pueden titular directamente las muestras con un pH en un intervalo

de 7 a 10; las muestras que se encuentran fuera de estos límites se deben ajustar con NaOH 1N y /o H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> 1N.

- b) Se agregó 1.0 ml del indicador de K<sub>2</sub>CrO<sub>4</sub>.
- c) La muestra se tituló con la solución valorada de nitrato de plata hasta que la solución cambió a un color amarillo rojizo (punto final de la titulación), anotándose el volumen consumido.
- d) Se analizó un blanco de manera semejante que la muestra.

**Cálculos.**

$$C = \frac{(V_a - V_b) C_1 \times 35460}{V}$$

donde : C = concentración de Cl<sup>-</sup> en ppm

V<sub>a</sub> = ml. de solución de AgNO<sub>3</sub> gastados en la muestra.

V<sub>b</sub> = ml de sol de AgNO<sub>3</sub> gastados en el blanco.

V = ml de muestra.

C<sub>1</sub> = normalidad de la solución de AgNO<sub>3</sub>.

**6.2.4.6 Determinación de Cianuros<sup>40,126</sup>.**

**Reactivos utilizados**

1. Solución de hidróxido de sodio 1.25 N. Disolver 50 g de NaOH en agua y aforar a un litro con agua destilada.
2. Solución de hidróxido de sodio 0.25 N. Disolver 10 g de NaOH en agua y aforar a un litro con agua destilada.
3. Solución de cloruro de magnesio. Disolver 510 g de cloruro de magnesio hexahidratado en agua destilada y aforar a un litro.
4. Solución de ácido sulfúrico 1:1
5. Acido sulfámico
6. Solución reguladora de fosfatos. Disolver 138 g de fosfato monobásico de sodio monohidratado en un litro de agua destilada. Refrigerar.
7. Solución de cloramina T. Disolver 1 g de polvo blanco soluble en 100 ml de agua. Guardar en refrigeración
8. 7.Solución de ácido barbitúrico-piridina. Poner 15 g de ácido barbitúrico en un matraz volumétrico de 250 ml y adicionar el agua suficiente para lavar los lados del matraz y humedecer el ácido barbitúrico. Adicionar 75 ml de piridina y mezclar. Adicionar 15 ml de ácido clorhídrico concentrado, mezclar y enfriar a temperatura ambiente. Aforar con agua destilada y mezclar.

### Procedimiento

Se empleó un aparato especial para la destilación de cianuros, el cual consta de un matraz de destilación, un condensador, un tubo de entrada de aire, un lavador de gases y un matraz, ver figura 6.2.

- a) Se agregaron 500 ml. de muestra en el matraz de destilación. Posteriormente se añadieron 50 ml de una solución de NaOH 1.25 N, se cuidó de agregar un poco de agua destilada, 50 ml aproximadamente, con el objeto de cuidar el nivel del líquido.

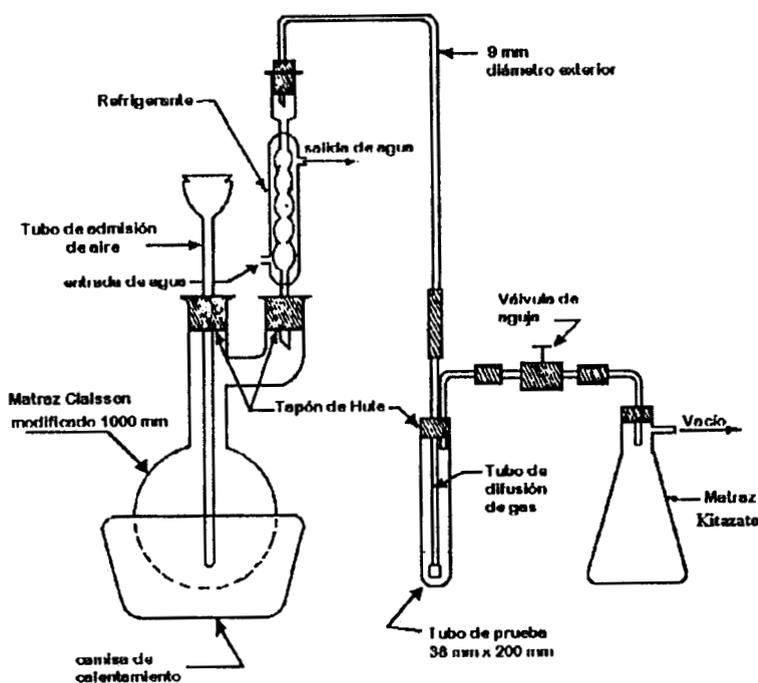


Figura 6.2. Equipo para la determinación de cianuros.

- b) Se agregaron 2 g de ácido sulfámico, para eliminar interferencias de nitritos, y 50 ml de ácido sulfúrico 1:1, cuidando que la mezcla se homogeneice, durante 3 minutos se mantiene en agitación.
- c) Se agregaron 20 ml. de solución de cloruro de magnesio al través del tubo de entrada, lavándose con agua destilada. El precipitado formado se redisolvió con el calentamiento.

- d) El calentamiento hasta ebullición fue rápido, cuidando que los vapores no se elevaran más allá del condensador, de manera, que se estableció un reflujo de 40 a 50 gotas por minuto durante una hora (aproximadamente 30 ml).
- e) Se eliminó el calentamiento continuándose con el flujo de aire. Se enfrió el sistema durante unos 15 minutos. Se desconectó el sistema, pero se tuvo el cuidado de lavar el tubo que conecta el condensador y el lavador de gases con agua destilada, recogiendo está también en el matríz donde que contenía el destilado.
- f) El destilado se pasó a un matríz aforado completándose el volumen a 500 ml con agua destilada.
- g) Previamente se preparó una curva de calibración con estándares que contenían desde 0.2 a 6  $\mu\text{g}$  de  $\text{CN}^-$  en 20 ml de solución empleando NaOH 0.25 N.
  - i) Los estándares se trataron de la misma manera que la muestra, tomando una porción del destilado tal que la concentración de cianuro entra en la curva de calibración, diluyéndose a 20 ml con NaOH.
  - ii) Se añadió 15 ml de solución reguladora de fosfatos, se cuidó que la mezcla fuera homogénea.
  - iii) Por último se añadió 2 ml de solución de cloramina-T.
- h) Después de realizado lo anterior y cuidando que esté perfectamente mezclado, se añadió 5 ml de solución de ácido barbitúrico-piridina. Se aforó a 50 ml con agua destilada
- i) Se dejó reposar 8 minutos para desarrollo del color y se midió la absorbancia a una longitud de onda de 578 nm dentro de los siguientes 15 minutos a partir del tiempo de reposo, cuidando que no exceda cada estándar este tiempo.
- j) Se construye la curva de calibración de absorbancia contra  $\mu\text{g}$  de cianuro de los estándares.

### **Cálculos.**

$$C = w / V$$

Donde: C = concentración de cianuro en ppm  
w =  $\mu\text{g}$  de cianuros de la curva de calibración  
V = volumen de la muestra en ml.

### **6.2.4.7 Determinación de Sulfuros<sup>122</sup>**

#### **Reactivos utilizados**

1. Solución de yodo 1 M acidificada. Se disolvieron 126.9045 g de yodo en agua. Después se le agregó con cuidado 5 ml de ácido clorhídrico concentrado con cuidado. y se diluyó a un litro.

2. Solución de tiosulfato de sodio. Disolver 6.205 g de tiosulfato de sodio pentahidratado ( $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ ) en agua destilada y hervida. Agregar 0.4 g de hidróxido de sodio ( $\text{NaOH}$ ) sólido y aforar a un litro.
3. Cinc en polvo
4. Solución de ácido clorhídrico 1:1

**Procedimiento**

- a) A 50 ml. de muestra se le agregó 0.1 g de cinc en polvo y se agitó.
- b) A la mezcla anterior se le añadieron 5 ml de solución de ácido clorhídrico 1:1, se calentó y el gas desprendido se recogió en una solución de yodo.
- c) Una vez efectuado lo anterior, se tituló la solución de yodo con solución de tiosulfato de sodio.
- d) Se siguió un procedimiento semejante con un blanco.

**Cálculos.**

$$C = \frac{(V_a - V_b)C_1 \times 32066}{V}$$

donde: C = concentración de sulfuros en ppm.

$V_a$  = ml. de solución de  $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$  gastados en la muestra

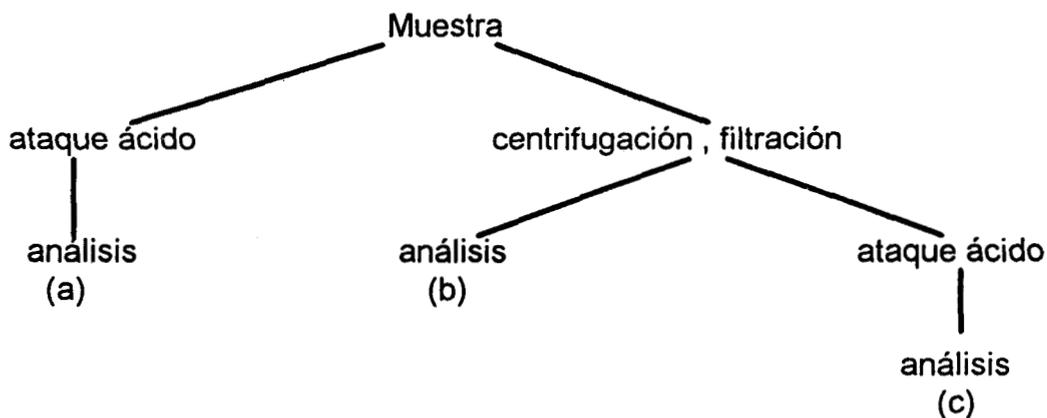
$V_b$  = ml. de solución de  $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$  gastados en el testigo

V = volumen de la muestra

$C_1$  = Normalidad de la solución de  $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$ .

**6.2.5 Metales totales y Metales totales disueltos.**

En la determinación de los metales totales, se utilizó el siguiente esquema:



En cada uno de los análisis, se obtiene un parámetro importante

- (a) Metales totales
- (b) Metales disueltos<sup>c</sup>
- (c) Metales totales disueltos

### 6.2.5.1 Metales totales

Para la determinación de la concentración de los metales totales de las muestras provenientes de la presa "José Antonio Alzate", se procedió con la metodología siguiente:

⇒ Digestión ácida por medio de microondas <sup>28,127,128,129</sup>

A 50 ml de cada muestra, colocada en un recipiente especial para microondas, se le añadió 5 ml. de HNO<sub>3</sub> y 2 ml de HF al 48% y se introdujeron en el horno de microondas, programando los parámetros indicados en la tabla 6.3; una vez procesada cada muestra, se aforó a un volumen de 100 ml.

**Tabla 6.3** Programas de digestión para muestras de agua de la Presa José Antonio Alzate, para el análisis de metales totales.

| Programa | Potencia (%) | Tiempo (min) |
|----------|--------------|--------------|
| 1        | 70           | 5            |
| 2        | 0            | 5            |
| 3        | 70           | 5            |
| 4        | 0            | 5            |
| 5        | 70           | 5            |
| 6        | 0            | 5            |
| 7        | 70           | 5            |
| 8        | 0            | 5            |

Este tratamiento fue previamente optimizado

Por cada profundidad en los diferentes sitios de cada zona, se trabajaron tres réplicas siguiendo el mismo procedimiento de preparación.

⇒ Una vez realizada la operación anterior, se efectuó el análisis de los diferentes metales mediante espectrofotometría de absorción atómica por flama o por horno de grafito, según la concentración y tipo de metal, cuidando de optimizar los parámetros de análisis como se indica en las tablas 6.4 y 6.5.

<sup>c</sup> Morrison indica que material filtrable es aquel que pasa por un filtro con poro 0.45 µm y material disuelto es aquel que pasa por materiales con poros más grandes.

Por medio de esta técnica analítica se obtuvo directamente la concentración del metal en la muestra; cada lectura se realizó por quintuplicado para obtener un valor promedio con una buena correlación estadística en cuanto a reproducibilidad y exactitud.

**Tabla 6.4.** Condiciones de trabajo del espectrofotómetro de absorción atómica mediante flama.

| Metal | Longitud de onda (nm) | Abertura de ventana (nm) | Soporte       | Estequiometría de la flama |
|-------|-----------------------|--------------------------|---------------|----------------------------|
| Ba    | 350.1                 | 0.5                      | óxido nitroso | reductora                  |
| Ca    | 239.9                 | 0.2                      | óxido nitroso | reductora                  |
| Cu    | 324.7                 | 0.5                      | aire          | oxidante                   |
| Fe    | 248.3                 | 0.2                      | aire          | oxidante                   |
| K     | 766.5                 | 1.0                      | aire          | oxidante                   |
| Mg    | 285.2                 | 0.5                      | aire          | oxidante                   |
| Mn    | 403.1                 | 0.2                      | aire          | oxidante                   |
| Na    | 589.0                 | 0.5                      | aire          | oxidante                   |
| Zn    | 213.6                 | 1.0                      | aire          | oxidante                   |

**Tabla 6.5.** Condiciones de trabajo del espectrofotómetro de absorción atómica mediante horno de grafito.

| Metal | Longitud de onda (nm) | Abertura de ventana (nm) | Corrector de fondo | Temperatura de atomización °C |
|-------|-----------------------|--------------------------|--------------------|-------------------------------|
| Cd    | 228.8                 | 0.5                      | no                 | 1800                          |
| Pb    | 283.3                 | 0.5                      | si                 | 2100                          |

### 6.2.5.2 Metales disueltos y metales totales disueltos<sup>5</sup>

Las muestras se trasvasaron a un cono Imhoff donde se dejaron sedimentar, durante 24 horas. Posteriormente cada muestra se centrifugó a 14,000 rpm y se filtró al vacío utilizando papel filtro Whatman no. 44 como medio de filtración.

#### 6.2.5.2.1 Metales disueltos

La muestra libre de partículas sedimentables, se analizó en el espectrofotómetro de absorción atómica, ya sea por flama o por horno de grafito, dependiendo de las concentraciones que presenta cada metal en cada muestra.

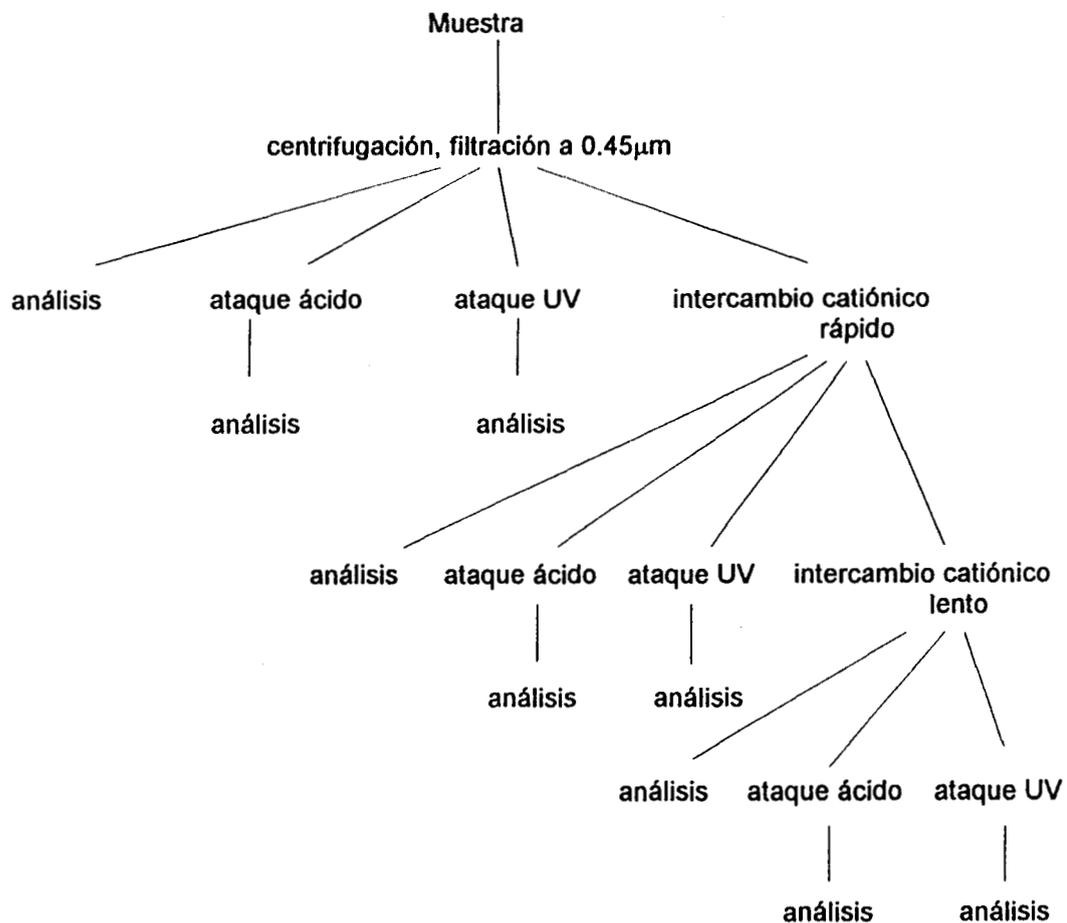
### 6.2.5.2 Metales totales disueltos.

Para la determinación de metales totales disueltos, se siguió el mismo tratamiento que para la determinación de metales totales, pero ahora con la muestra libre de partículas sedimentables.

### 6.2.6 Especiación

#### 6.2.6.1 Modelamiento experimental<sup>52,65,66,118,130</sup>

Para la determinación experimental de la concentración de las diferentes especies de cada metal presentes en el cuerpo de agua, de la presa "José Antonio Alzate", se diseñó el siguiente esquema:



Para la determinación de las especies metálicas, se procedió al tratamiento que a continuación se indica para cada muestra de agua de la presa:

- 1) Como primer paso, las muestras se centrifugaron a 25,000 rpm durante una hora por rampas de 20 min. y posteriormente se filtraron al través de membranas con diámetro de poro de  $0.45 \mu\text{m}^{47}$ . Cada muestra se dividió en cuatro porciones:
  - a) Una parte de la muestra (100 ml) se tomó para análisis directo por espectrofotometría de absorción atómica siguiendo las especificaciones que se muestran en la tabla 6.6

**Tabla 6.6.** Condiciones de trabajo del espectrofotómetro de absorción atómica mediante horno de grafito.

| Metal | Longitud de onda (nm) | Abertura de ventana (nm) | Corrector de fondo | Temperatura de atomización °C |
|-------|-----------------------|--------------------------|--------------------|-------------------------------|
| Cd    | 228.8                 | 0.5                      | no                 | 1800                          |
| Cu    | 324.8                 | 0.5                      | si                 | 2300                          |
| Fe    | 248.3                 | 0.2                      | no                 | 2300                          |
| Mn    | 285.2                 | 0.5                      | no                 | 2200                          |
| Pb    | 283.3                 | 0.5                      | si                 | 2100                          |

- b) A otra parte de esta muestra (50 ml) se le dio un tratamiento similar al de determinación de metales totales, agregándole 3 ml de  $\text{HNO}_3$  y 1 ml de HF al 48% y con el programa que se muestra en la tabla 6.7 para el horno de microondas. Después se analizó por espectrofotometría de absorción atómica siguiendo los parámetros que se indican en la tabla 6.6.

**Tabla 6.7.** Programa de digestión para el horno de microondas aplicado en el análisis de especies.

| Programa | Potencia (%) | Tiempo (min) |
|----------|--------------|--------------|
| 1        | 70           | 5            |
| 2        | 0            | 5            |
| 3        | 70           | 5            |
| 4        | 0            | 5            |

- c) A una tercera porción se le trató mediante radiación UV: se colocó 100 ml de muestra en un recipiente de plástico, y se mantuvo en agitación constante durante el tiempo de exposición. La radiación UV degrada la materia orgánica soluble (principalmente ácidos fúlvicos).

- d) Con la última porción (700 ml aproximadamente) se procedió al siguiente tratamiento: se le adicionaron 2 g de resina Chelex 100 preparada, manteniendo la muestra en agitación suave durante 30 seg., inmediatamente se repartió la muestra en cuatro porciones:
- i) A la primera porción (100 ml.) se le analizó conforme lo descrito en el inciso (a) de esta sección.
  - ii) A la segunda porción (50 ml.) se le dio el tratamiento ácido mediante horno de microondas que se describió en el inciso (b) de esta sección.
  - iii) En la tercera porción (100 ml.) se procedió a realizar el mismo tratamiento (ataque UV) que el explicado en el inciso (c) de esta sección.
  - iv) La cuarta porción se mantuvo en el recipiente con la resina Chelex 100, en agitación suave durante 24 horas, y posteriormente se dividió en tres porciones:
    - La primera porción fue analizada directamente en el espectrofotómetro de absorción atómica según los parámetros marcados en la tabla 4.5
    - La segunda porción sufrió el tratamiento de digestión ácida por microondas explicado en el inciso (a) de esta sección.
    - La última porción sufrió el ataque UV similar al descrito en el inciso (c) de esta sección.

#### Preparación de la Resina Chelex <sup>100 84,130,131,132</sup>

En la preparación de la resina se siguieron los pasos que a continuación se indican:

- A 10 g de resina Chelex 100, se le adicionaron 50 ml de agua deionizada y se mantuvo la resina en agitación suave por 48 horas.
- Se separó por decantación la resina y se le agregó 50 ml de HNO<sub>3</sub> 1M manteniendo esta nueva solución por 24 horas, con agitación suave.
- Se decantó y posteriormente se filtró la solución, lavando con agua deionizada hasta que el agua de lavado presentó un pH igual a 4.

- Se le agregaron 30 ml de una solución de NaOH 1M y se mantuvo en agitación suave por espacio de doce horas.
- Se decantó nuevamente y se filtró, lavando con agua deionizada, hasta un pH igual a 8.
- Se le agregó 15 ml. de una solución de CaCl<sub>2</sub> 2M, y se mantuvo en agitación suave por 24 horas.
- 
- Se filtró y se lavó 10 veces con agua deionizada (25 ml. en cada caso). En la penúltima vez que se le agregó el agua se separó del filtro, se vació en un recipiente y se decantó el agua. En la última vez que se agregó agua, se agitó suavemente para lavar y decantó, dejando una capa de agua por encima del nivel de la resina.

Una vez obtenidas las concentraciones, se efectuó el análisis para la determinación de la especie o especies presentes en cada paso del tratamiento señalado.

Considerando que los ligandos inorgánicos que pueden formar complejos divalentes en aguas naturales son:

a) los que se encuentran en mayor proporción, como: OH<sup>-</sup>, Cl<sup>-</sup>, SO<sub>4</sub><sup>2-</sup>, CO<sub>3</sub><sup>2-</sup>, HCO<sub>3</sub><sup>-</sup>, S<sub>2</sub><sup>-</sup> y HS<sup>-</sup>

b) los que en menor proporción: PO<sub>4</sub><sup>3-</sup>, CN<sup>-</sup>, NH<sub>3</sub>, Br<sup>-</sup>, F<sup>-</sup>

estos últimos a veces no se toman en cuenta debido a las concentraciones tan bajas que presentan.

#### 6.2.6.2 Modelamiento teórico.

El modelamiento teórico está basado en la determinación de las concentraciones de metales totales y aniones presentes en un sistema acuoso determinado.

De la literatura<sup>114,115</sup> se obtiene que los ligandos inorgánicos más importantes para formar complejos en sistemas acuáticos son OH<sup>-</sup>, Cl<sup>-</sup>, SO<sub>4</sub><sup>2-</sup>, CO<sub>3</sub><sup>2-</sup>, S<sub>2</sub><sup>-</sup>, PO<sub>4</sub><sup>3-</sup>, CN<sup>-</sup>, etc., por lo tanto, forman variados complejos con los metales pesados de los cuales, los predominantes se muestran en la tabla 6.8.

**Tabla 6.8** Especies inorgánicas predominantes para metales pesados seleccionados en sistemas acuosos.

| Metal | Especie inorgánica   |
|-------|--|
| Cd    | $Cd^{2+}$ , $CdCl^+$ , $CdCl_2$ , $CdCl_3^-$ , $CdOH^+$ , $CdS$ , $CdHS^+$ , $Cd(HS)_2$ , $Cd(HS)_3^-$ , $Cd(HS)_4^{2-}$ , $Cd(s)$ , $CdCO_3(s)$ , $Cd(OH)_2(s)$ |
| Cu    | $Cu^{2+}$ , $CuCO_3$ , $CuOH^+$ , $CuS(s)$ , $Cu_2CO_3(OH)_2(s)$ , $Cu_3(CO_3)_2(OH)_2(s)$ , $Cu(OH)_2(s)$   |
| Fe    | $Fe^{2+}$ , $FeCl^+$ , $FeSO_4$ , $Fe(OH)_2^+$ , $FeS(s)$ , $FeS_2(s)$ , $FeCO_3(s)$ , $Fe_3(PO_4)_2(s)$   |
| Mn    | $Mn^{2+}$ , $MnCl^+$ , $MnS(s)$ , $MnCO_3(s)$ , $Mn(OH)_2(s)$  |
| Pb    | $Pb^{2+}$ , $PbCl^+$ , $PbCl_2$ , $PbCl_3^-$ , $PbOH^+$ , $PbCO_3$ , $PbS(s)$ , $PbCO_3(s)$ , $Pb(OH)_2(s)$  |
| Zn    | $Zn^{2+}$ , $ZnCl^+$ , $ZnSO_4$ , $ZnOH^+$ , $ZnCO_3$ , $ZnS$ , $ZnS(s)$ , $ZnCO_3(s)$   |

De la tabla anterior, se puede observar que es necesario conocer la concentración de las especies  $HPO_4^{2-}$ ,  $HPO_4^-$ ,  $HS^-$  y  $CO_3^{2-}$  para lo cual se emplearon los diagramas de distribución, figuras 6.3, 6.4 y 6.5.

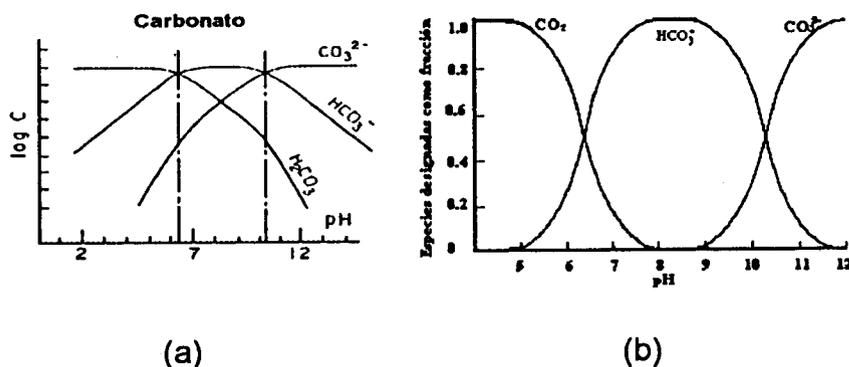


Figura 6.5 Sistema carbonato. (a) Diagrama logarítmico de concentraciones, (b) diagrama de distribución.

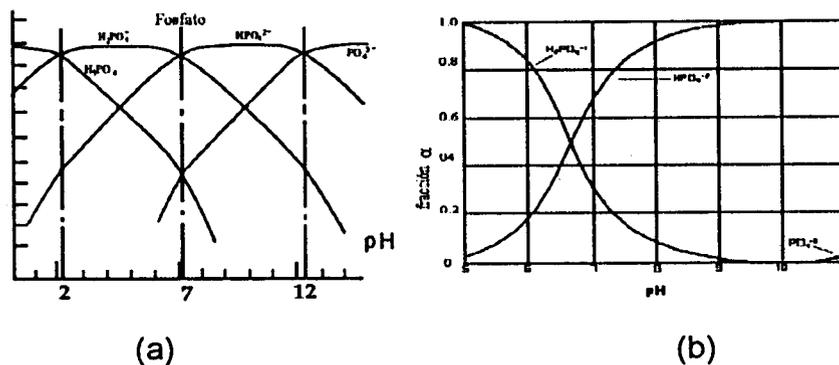


Figura 6.6 Sistema fosfato. (a) Diagrama logarítmico de concentraciones, (b) diagrama de distribución.

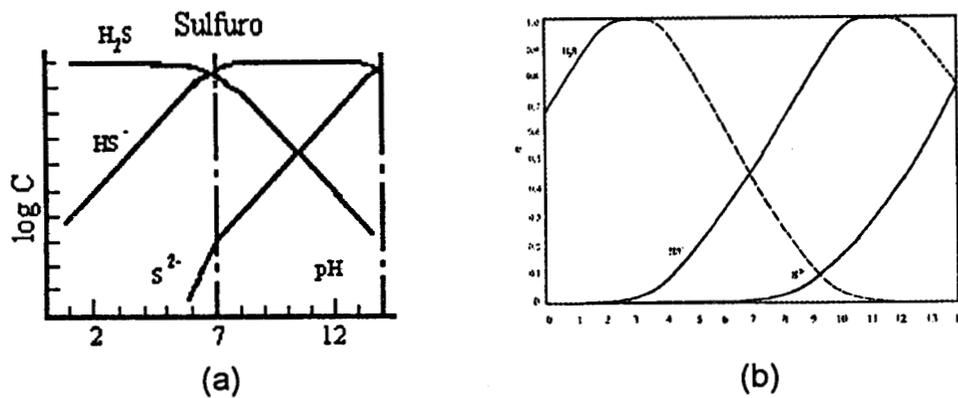


Figura 6.7 Sistema sulfuro. (a) Diagrama logarítmico de concentraciones, (b) diagrama de distribución.

Con estos diagramas, se obtiene fácilmente el valor de la fracción de un componente,  $\alpha$ , para cada componente de los sistemas:  $H_2CO_3-HCO_3^-CO_3^{2-}$ ,  $H_3PO_4-H_2PO_4^-HPO_4^{2-}-PO_4^{3-}$  y  $H_2S-HS^-S^{2-}$ , de la siguiente forma: conociendo la concentración de una de las especies del sistema y la  $\alpha$  correspondiente, se pueden obtener las demás concentraciones.

Ejemplo. Fosfato total (zona B, profundidad 0.2 m) = 0.0658 mol/l  
 del diagrama de distribución  $\alpha_{H_2PO_4^-} = 0.1428$   $\alpha_{HPO_4^{2-}} = 0.81429$   
 $\alpha_{PO_4^{3-}} = 0.04285$   $\alpha_{H_3PO_4} = 0.0$

entonces  $[H_2PO_4^-] = \alpha_{H_2PO_4^-}[\text{fosfato total}] = 0.0094 \text{ mol/l}$   
 $[HPO_4^{2-}] = \alpha_{HPO_4^{2-}}[\text{fosfato total}] = 0.05358 \text{ mol/l}$   
 $[PO_4^{3-}] = \alpha_{PO_4^{3-}}[\text{fosfato total}] = 0.00282 \text{ mol/l}$   
 $[H_3PO_4] = \alpha_{H_3PO_4}[\text{fosfato total}] = 0.0 \text{ mol/l}$

Por otro lado, de la literatura se obtienen los valores de las constantes de formación de complejos,  $\beta$ , los cuales están resumidos en la tabla 6.9 Con estos valores y las concentraciones de metales y ligandos se obtiene la concentración de un complejo.

Tabla 6.9 Constantes de estabilidad para la formación de complejos.

| Ion metálico     | Especies                        | Constantes de estabilidad $\beta$ |                               |                               |                       |                        |                               |                        |
|------------------|---------------------------------|-----------------------------------|-------------------------------|-------------------------------|-----------------------|------------------------|-------------------------------|------------------------|
|                  |                                 | OH <sup>-</sup>                   | CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup> | SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup> | Cl <sup>-</sup>       | S <sup>2-</sup>        | PO <sub>4</sub> <sup>3-</sup> | CN <sup>-</sup>        |
| Mn <sup>2+</sup> | MnL                             | 2.512x10 <sup>3</sup>             |                               | 1.995x10 <sup>2</sup>         | 3.981x10 <sup>0</sup> |                        |                               |                        |
|                  | MnL <sub>2</sub>                | 6.310x10 <sup>5</sup>             |                               |                               |                       |                        |                               |                        |
|                  | MnL <sub>3</sub>                | 1.585x10 <sup>7</sup>             |                               |                               |                       |                        |                               |                        |
|                  | MnL <sub>4</sub>                | 5.012x10 <sup>7</sup>             |                               |                               |                       |                        |                               |                        |
|                  | MnHL                            |                                   | 1.259x10 <sup>12</sup>        |                               |                       |                        |                               |                        |
| Fe <sup>2+</sup> | FeL                             | 3.162x10 <sup>4</sup>             |                               | 1.585x10 <sup>2</sup>         |                       |                        |                               |                        |
|                  | FeL <sub>2</sub>                | 2.512x10 <sup>7</sup>             |                               |                               |                       |                        |                               |                        |
|                  | FeL <sub>3</sub>                | 1.000x10 <sup>11</sup>            |                               |                               |                       |                        |                               | 2.512x10 <sup>35</sup> |
|                  | FeL <sub>6</sub>                |                                   |                               |                               |                       |                        | 1.000x10 <sup>16</sup>        |                        |
|                  | FeHL                            |                                   |                               |                               |                       |                        | 1.995x10 <sup>22</sup>        |                        |
|                  | FeH <sub>2</sub> L              |                                   |                               |                               |                       |                        |                               |                        |
| Cu <sup>2+</sup> | CuL                             | 1.995x10 <sup>6</sup>             | 5.012x10 <sup>6</sup>         | 2.512x10 <sup>2</sup>         | 3.162x10 <sup>0</sup> |                        |                               |                        |
|                  | CuL <sub>2</sub>                | 6.309x10 <sup>11</sup>            | 1.585x10 <sup>10</sup>        |                               |                       |                        |                               | 1.995x10 <sup>16</sup> |
|                  | CuL <sub>3</sub>                |                                   |                               |                               |                       |                        |                               | 3.981x10 <sup>21</sup> |
|                  | CuL <sub>4</sub>                | 2.512x10 <sup>16</sup>            |                               |                               |                       |                        |                               | 1.259x10 <sup>23</sup> |
|                  | CuHL                            |                                   |                               |                               |                       |                        | 3.162x10 <sup>16</sup>        |                        |
|                  | CuH <sub>2</sub> L              |                                   |                               |                               |                       |                        | 1.995x10 <sup>21</sup>        |                        |
| Pb <sup>2+</sup> | PbL                             | 1.995x10 <sup>6</sup>             |                               | 6.309x10 <sup>2</sup>         | 3.981x10 <sup>1</sup> |                        |                               |                        |
|                  | PbL <sub>2</sub>                | 7.943x10 <sup>10</sup>            |                               |                               | 6.309x10 <sup>1</sup> |                        |                               |                        |
|                  | PbL <sub>3</sub>                | 7.943x10 <sup>13</sup>            |                               |                               | 5.012x10 <sup>1</sup> |                        |                               |                        |
|                  | PbL <sub>4</sub>                |                                   |                               |                               | 2.512x10 <sup>1</sup> |                        |                               |                        |
|                  | PbHL                            |                                   |                               |                               |                       |                        | 3.162x10 <sup>15</sup>        |                        |
|                  | PbH <sub>2</sub> L              |                                   |                               |                               |                       |                        | 1.259x10 <sup>21</sup>        |                        |
| Cd <sup>2+</sup> | CdL                             | 7.943x10 <sup>3</sup>             |                               | 1.995x10 <sup>2</sup>         | 1.000x10 <sup>2</sup> | 3.162x10 <sup>19</sup> |                               | 1.000x10 <sup>6</sup>  |
|                  | CdL <sub>2</sub>                | 3.981x10 <sup>7</sup>             |                               | 1.585x10 <sup>3</sup>         | 3.981x10 <sup>2</sup> |                        |                               | 1.259x10 <sup>11</sup> |
|                  | CdL <sub>3</sub>                |                                   |                               | 5.012x10 <sup>2</sup>         | 2.512x10 <sup>2</sup> |                        |                               | 5.012x10 <sup>15</sup> |
|                  | CdL <sub>4</sub>                |                                   |                               |                               | 5.012x10 <sup>1</sup> |                        |                               | 7.943x10 <sup>17</sup> |
|                  | CdHL                            |                                   |                               |                               |                       | 1.259x10 <sup>22</sup> |                               |                        |
|                  | CdH <sub>2</sub> L <sub>2</sub> |                                   |                               |                               |                       | 1.585x10 <sup>43</sup> |                               |                        |
|                  | CdH <sub>3</sub> L <sub>3</sub> |                                   |                               |                               |                       | 1.000x10 <sup>59</sup> |                               |                        |
|                  | CdH <sub>4</sub> L <sub>4</sub> |                                   |                               |                               |                       | 1.259x10 <sup>75</sup> |                               |                        |

Ejemplo. Para Cu<sup>2+</sup> (zona B, profundidad 0.2 m)

Las especies de cobre que se pueden formar en un sistema acuoso, con sus respectivas  $\beta$ 's, están indicadas en la tabla 6.9. Con estos valores y con las concentraciones de los aniones, según la tabla 6.10, se puede obtener la concentración de cada especie.

Tabla 6.10 Concentración de aniones para la zona B, profundidad 0.2 m de la presa J. A. Alzate.

| Anión  | Concentración en mol/l    |
|--|---------------------------|
| [OH <sup>-</sup> ] = [H <sup>+</sup> ]         | 0.4202 x 10 <sup>-3</sup> |
| [CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup> ]               | 0.0046 x 10 <sup>-3</sup> |
| [SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup> ]               | 0.4601 x 10 <sup>-3</sup> |
| [Cl <sup>-</sup> ]                             | 3.6122 x 10 <sup>-3</sup> |
| [S <sup>2-</sup> ]                             | 0.4480 x 10 <sup>-3</sup> |
| [HPO <sub>4</sub> <sup>2-</sup> ]              | 5.3586 x 10 <sup>-5</sup> |
| [H <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> <sup>-</sup> ] | 9.4000 x 10 <sup>-5</sup> |
| [CN <sup>-</sup> ]                             | 9.0000 x 10 <sup>-7</sup> |

La ecuación de estabilidad para cada complejo es:

1) en el caso de un solo tipo de ligando unido al ion metálico:

$$\beta = \frac{[\text{Complejo}]}{[M^{2+}]^m [\text{ligando}]^n} \quad (6.1)$$

despejando se tiene

$$[\text{Complejo}] = \beta [M^{2+}]^m [\text{ligando}]^n \quad (6.2)$$

2) en el caso de dos o más complejos diferentes unidos al ion metálico

$$\beta = \frac{[\text{Complejo}]}{[M^{2+}]^m [\text{ligando}_1]^n [\text{ligando}_2]^p \dots} \quad (6.3)$$

despejando, se tiene:

$$[\text{Complejo}] = \beta [M^{2+}]^m [\text{ligando}_1]^n [\text{ligando}_2]^p \dots \quad (6.4)$$

y con la ecuación:  $Cu^{2+}_{TOT} = [Cu^{2+}] (1 + \beta_m [A^x]^m + \beta_n [B^y]^n + \dots)$  (6.5)

se obtiene la concentración del ion metálico libre, despejando de la ecuación anterior:

$$[Cu^{2+}] = \frac{Cu^{2+}_{TOT}}{(1 + \beta_m [A^x]^m + \beta_n [B^y]^n + \dots)} \quad (6.6)$$

una vez obtenida la concentración del ion metálico libre, se sustituye en las ecuaciones 6.2 o 6.4, según sea el caso, para obtener la concentración del complejo.

Ahora para una concentración de  $Cu^{2+}_{TOT}$  de  $1.8097 \times 10^{-8}$  mol/l, la concentración de los diferentes complejos se obtiene de la siguiente forma:

Aplicando la ecuación 6.6 a los valores antes dados:

$$[Cu^{2+}] = \frac{1.8097 \times 10^{-8}}{(1 + (1.995 \times 10^6)(0.4202 \times 10^{-3}) + (6.309 \times 10^{11})(0.4202 \times 10^{-3})^2 + \dots)}$$

de donde se obtiene :  $[Cu^{2+}] = 9.648000 \times 10^{-25}$

y utilizando la ecuación 6.2 para la determinación de la concentración de las diferentes especies:

$$[Cu(OH)^+] = (1.995 \times 10^6)(9.648000 \times 10^{-25})(0.4202 \times 10^{-3}) = 8.025500 \times 10^{-22}$$

$$[Cu(OH)_2] = (6.309 \times 10^{11})(9.648000 \times 10^{-25})(0.4202 \times 10^{-3})^2 = 1.058000 \times 10^{-19}$$

y así sucesivamente para cada especie. Los resultados se muestran en la siguiente tabla:

| Especie                         | $\beta$                | $\beta_{\text{m}} \text{A}^{\text{m}} \text{I}^{\text{m}}$ | cono. de la especie        |
|---------------------------------|------------------------|--|----------------------------|
| $\text{Cu}(\text{OH})^+$        | $1.995 \times 10^5$    | $8.318200 \times 10^2$                                     | $8.025500 \times 10^{-22}$ |
| $\text{Cu}(\text{OH})_2$        | $6.309 \times 10^{11}$ | $1.096600 \times 10^3$                                     | $1.058000 \times 10^{-19}$ |
| $\text{Cu}(\text{OH})_4^{2-}$   | $2.512 \times 10^{18}$ | $7.587980 \times 10^2$                                     | $7.320946 \times 10^{-22}$ |
| $\text{CuCO}_3$                 | $5.012 \times 10^5$    | $2.305460 \times 10^1$                                     | $2.224327 \times 10^{-23}$ |
| $\text{Cu}(\text{CO}_3)_2^{2-}$ | $1.585 \times 10^{10}$ | $3.353620 \times 10^1$                                     | $3.235600 \times 10^{-23}$ |
| $\text{CuSO}_4$                 | $2.512 \times 10^2$    | $1.155716 \times 10^{-1}$                                  | $1.115044 \times 10^{-25}$ |
| $\text{CuCl}^+$                 | $3.162 \times 10^0$    | $1.142275 \times 10^{-2}$                                  | $1.102077 \times 10^{-26}$ |
| $\text{CuHPO}_4$                | $3.162 \times 10^{18}$ | $1.694340 \times 10^{12}$                                  | $1.634713 \times 10^{-12}$ |
| $\text{CuH}_2\text{PO}_4^+$     | $1.995 \times 10^{21}$ | $1.875540 \times 10^{18}$                                  | $1.809537 \times 10^{-5}$  |
| $\text{Cu}(\text{CN})_2$        | $1.995 \times 10^{18}$ | $1.616160 \times 10^4$                                     | $1.559288 \times 10^{-24}$ |
| $\text{Cu}(\text{CN})_3^-$      | $3.981 \times 10^{21}$ | $2.902200 \times 10^3$                                     | $2.800067 \times 10^{-21}$ |
| $\text{Cu}(\text{CN})_4^{2-}$   | $1.259 \times 10^{23}$ | $8.259770 \times 10^{-2}$                                  | $7.969030 \times 10^{-28}$ |
| $\text{Cu}^{2+}$                |                        |  | $9.648000 \times 10^{-25}$ |

## RESULTADOS ANALÍTICOS

### 7.1 Trabajo de campo

Para este estudio se seleccionaron seis zonas en la presa, realizándose primero el trabajo de campo para medir los parámetros físicos. De cada zona se seleccionó un sitio de trabajo con el fin de realizar un barrido a diferentes alturas de las columnas de agua y a diferentes horas del día

La profundidad en la que se iban a tomar las muestra se determinó con este examen, siendo esta la superficial (tomada a 20 cm.) y la de fondo. Esta selección se efectuó considerando la máxima altura del agua en la presa, tomando como base la época, temperatura ambiente, sol, viento, actividades de riego, siembra, etc.

Para determinar el horario más adecuado de recolección de muestras para análisis de metales, se diseñó un plan experimental de medidas físicas de campo, con el siguiente horario: 8:00, 10:00, 13:00, 16:00 y 18:00 horas, con el objeto de evaluar el horario óptimo de mayor actividad biológica y química en el cuerpo de agua. Estas medidas físicas fueron: pH, temperatura, conductividad, turbidez y oxígeno disuelto, parámetros representativos de la actividad biológica y química, de manera que en la campaña de muestreo de agua, la recolección sea lo más acertado posible y los resultados analíticos sean los de mayor confiabilidad.

En el capítulo 4, se explicó el plan de trabajo de campo. Debido a que es muy grande el número de datos captados, en la tabla 7.1 se presenta un ejemplo del método seguido en un sitio de una zona.

Tabla 7.1. Parámetros fisicoquímicos, por hora y profundidad.  
Zona B de la presa J. A. Alzate

| MUESTREO DE CAMPO DEL SITIO "B" |                              |  |   |   |
|---------------------------------|------------------------------|--|---|---|
| HORARIO                         | PARAMETROS                   | PROFUNDIDAD  |   |   |
|                                 |                              | 20 cm  | 50 cm   | Fondo (150 cm)                                      |
| 8:15<br>A.M.                    | Conductividad<br>μS          | 692, 689, 690, 693<br>Prom=691<br>± 1.581            | 711, 715, 708, 713<br>Prom=712<br>± 2.5860          | 703, 705, 707, 704<br>Prom=705<br>± 1.4790          |
|                                 | Temperatura<br>°C            | 16.2, 16.2, 16.1, 16.3<br>Prom=16.2<br>± 0.0707      | 16.2, 16.1, 16.0, 16.0<br>Prom=16.1<br>± 0.0829     | 16.1, 16.1, 15.9, 16.0<br>Prom=16.0<br>± 0.0816     |
|                                 | pH                           | 7.15, 7.16, 7.11, 7.13<br>Prom=7.14<br>± 0.0192      | 7.43, 7.38, 7.36, 7.40<br>Prom=7.40<br>± 0.0258     | 7.51, 7.52, 7.51, 7.50<br>Prom=7.51<br>± 0.0071     |
|                                 | O <sub>2</sub> disuelto      | 0  | 0   | 0   |
|                                 | Turbidez (Seechi)            | 10 cm  |   |   |
| 10:15<br>A.M.                   | Conductividad<br>μS          | 1030, 1038, 1032, 1031<br>Prom=1033<br>± 3.1125      | 1102, 1109, 1110, 1105<br>Prom=1107<br>± 3.2016     | 1153, 1160, 1156, 1154<br>Prom=1156<br>± 2.6809     |
|                                 | Temperatura<br>°C            | 21.3, 21.2, 21.5, 21.3<br>Prom=21.3<br>± 0.1090      | 17.7, 18.0, 17.9, 17.6<br>Prom=17.8<br>± 0.1581     | 17.3, 17.0, 17.1, 17.0<br>Prom=17.1<br>± 0.1225     |
|                                 | pH                           | 7.02, 7.03, 7.03, 7.01<br>Prom=7.02<br>± 0.0083      | 7.24, 7.25, 7.26, 7.23<br>Prom=7.24<br>± 0.0112     | 7.45, 7.50, 7.46, 7.48<br>Prom=7.47<br>± 0.0192     |
|                                 | O <sub>2</sub> disuelto mg/l | 2.15   | 2.05  | 0.94  |
|                                 | Turbidez (Seechi)            | 25 cm  |   |   |
| 1:00<br>P.M.                    | Conductividad<br>μS          | 1132, 1135, 1136, 1130<br>Prom=1133<br>± 2.3848      | 1168, 1166, 1170, 1167<br>Prom=1168<br>± 1.4790     | 1172, 1176, 1173, 1178<br>Prom=1175<br>± 2.3848     |
|                                 | Temperatura<br>°C            | 24.9, 24.7, 24.8, 24.5<br>Prom=24.72<br>± 0.1479     | 18.2, 18.0, 18.0, 18.1<br>Prom=18.1<br>± 0.0829     | 17.5, 17.4, 17.4, 17.3<br>Prom=17.4<br>± 0.0707     |
|                                 | pH                           | 7.81, 7.79, 7.82, 7.78<br>Prom=7.80<br>± 0.0158      | 7.73, 7.74, 7.77, 7.75<br>Prom=7.75<br>± 0.0148     | 7.76, 7.78, 7.80, 7.82<br>Prom=7.79<br>± 0.0224     |
|                                 | O <sub>2</sub> disuelto      | 4.91   | 4.20  | 1.98  |
|                                 | Turbidez (Seechi)            | 10 cm  |   |   |
| 4:00<br>P.M.                    | Conductividad<br>μS          | 1143, 1141, 1144, 1148,<br>Prom=1144<br>± 2.5495     | 1241, 1242, 1238, 1240<br>Prom=1240<br>± 1.4790     | 1289, 1291, 1287, 1292<br>Prom=1290<br>± 1.9202     |
|                                 | Temperatura<br>°C            | 20.05, 19.50, 19.40, 19.62<br>Prom=19.64<br>± 0.2478 | 19.5, 19.4, 19.5, 19.4<br>Prom=19.5<br>± 0.0500     | 19.0, 19.0, 19.03, 19.07<br>Prom=19.00<br>± 0.1300  |
|                                 | pH                           | 7.66, 7.62, 7.65, 7.62<br>Prom=7.64<br>± 0.0178      | 7.34, 7.54, 7.34, 7.43<br>Prom=7.41<br>± 0.0823     | 7.23, 7.27, 7.32, 7.35<br>Prom=7.29<br>± 0.0460     |
|                                 | O <sub>2</sub> disuelto      | 2.80   | 1.90  | 0   |
|                                 | Turbidez (Seechi)            | 15 cm  |   |   |
| 6:00<br>P.M.                    | Conductividad<br>μS          | 1196, 1194, 1199, 1195<br>Prom=1196<br>± 1.8708      | 1289, 1287, 1290, 1292<br>Prom=1289<br>± 1.8028     | 1360, 1362, 1358, 1357<br>Prom=1359<br>± 1.9203     |
|                                 | Temperatura<br>°C            | 19.10, 18.80, 18.90, 19.02<br>Prom=18.95<br>± 0.1143 | 18.8, 18.90, 18.90, 18.83<br>Prom=18.86<br>± 0.0438 | 18.43, 18.5, 18.51, 18.47<br>Prom=18.48<br>± 0.3110 |
|                                 | pH                           | 7.10, 7.03, 7.09, 7.06<br>Prom=7.07<br>± 0.0274      | 6.85, 6.90, 7.03, 7.13<br>Prom=6.98<br>± 0.1098     | 7.03, 7.12, 7.07, 7.10<br>Prom=7.08<br>± 0.0339     |
|                                 | O <sub>2</sub> disuelto      | 1.20   | 0.50  | 0   |
|                                 | Turbidez (Seechi)            | 10 cm  |   |   |

Una vez procesados los resultados de este barrido, como se indican en las figuras 7.1 a 7.5, se planeó una semana después la recolección de las muestras para el análisis. A partir del estudio anterior, se fijó el horario para la recolección de las muestras de la columna de agua para los análisis químicos.

De las muestras recolectadas, se determinó la DBO y la DQO, con el fin de clasificar el tipo de agua "residual doméstica", "residual industrial" o ambos tipos. En la tabla 7.2 se indican los valores de la DQO, la DBO y su relación promedio medidos en muestras a 60 cm de profundidad. Estas medidas se realizaron durante el estiaje.

**Tabla 7.2.** Relación DBO/DQO para las muestras de la presa J. A. Alzate.

| Muestra | DQO (mg/l) | DBO (mg/l) | Relación DBO/DQO |
|---------|------------|------------|------------------|
| Zona A  | 242.42     | 41.7       | 0.1720           |
| Zona B  | 262.62     | 57.0       | 0.2170           |
| Zona C  | 202.02     | 41.3       | 0.2044           |
| Zona D  | 323.23     | 7.25       | 0.0224           |
| Zona E  | 200.60     | 11.3       | 0.1123           |
| Zona F  | 191.15     | 30.9       | 0.1616           |

La relación DBO/DQO es la que determina el tipo de contaminación: Como en los datos obtenidos en cada una de las zonas de la presa, se obtuvo un valor muy cercano a 0.1, para el cual, se considera que el mayor aporte es de contaminantes proviene de industrias del tipo químico y/o metal-mecánico, sin embargo, como esta relación es superior a 0.1, entonces hay un aporte significativo de contaminantes provenientes de industrias agroalimenticias o desechos urbanos.

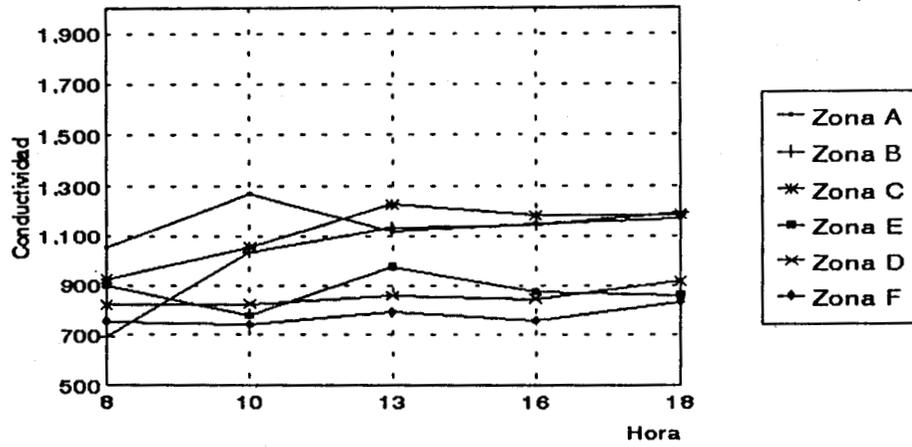
## 7.2 Alcalinidad de las muestra de agua en los diferentes sitios de la presa.

La concentración de bicarbonatos se calculó con la siguiente fórmula:

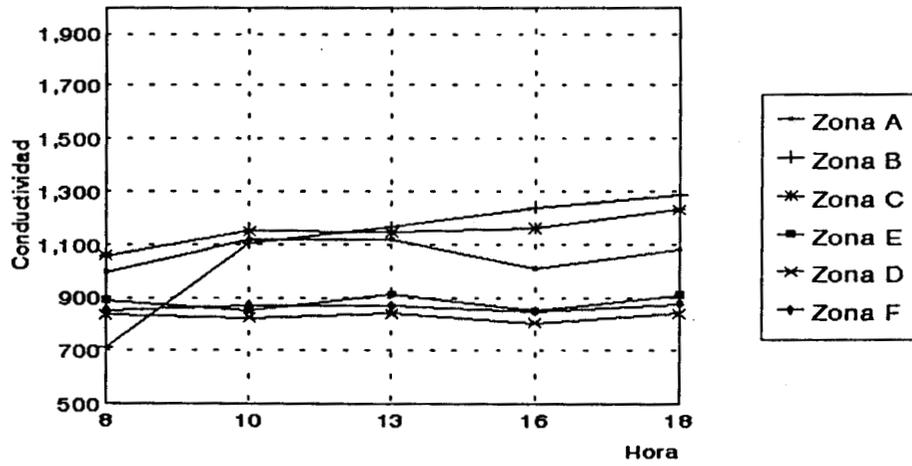
$$C_1V_1 = C_2V_2$$

- donde :
- $C_1$  = concentración del ácido sulfúrico (0.02 N)
  - $V_1$  = volumen del ácido sulfúrico gastado en la titulación.
  - $C_2$  = concentración de la muestra.
  - $V_2$  = volumen de la muestra (50 ml) ( $V_{nm}$ )
  - $V_{nm}$  = volumen con anaranjado de metilo.
  - $V_f$  = volumen con fenolftaleína.

**Conductividad a Diferentes Horas**  
Profundidad 0.20 m



**Conductividad a Diferentes Horas**  
Profundidad 0.50 m



**Conductividad a Diferentes Horas**  
Profundidad de 1 a 2 m

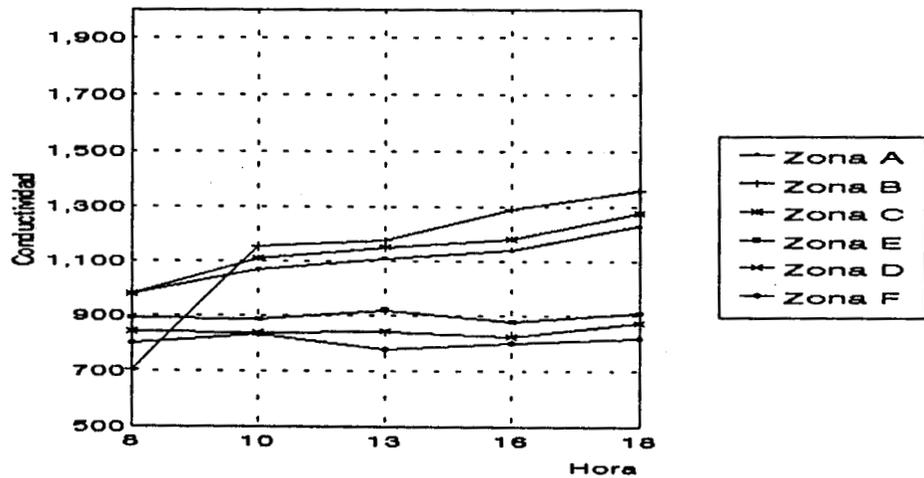
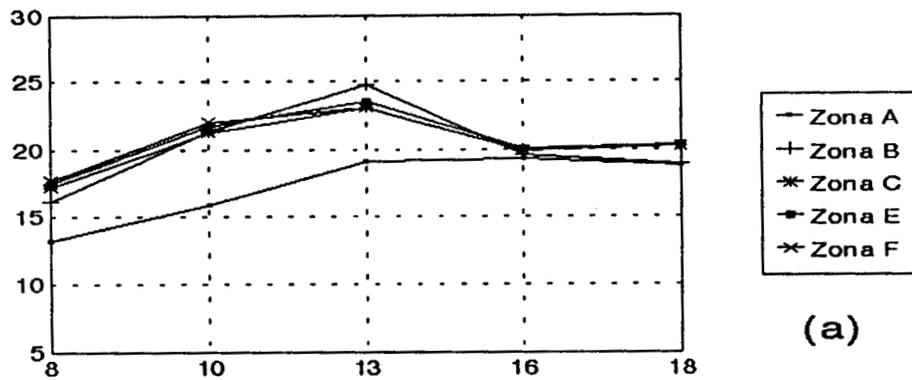


Figura 7.1. Variación de la conductividad a diferentes horas.

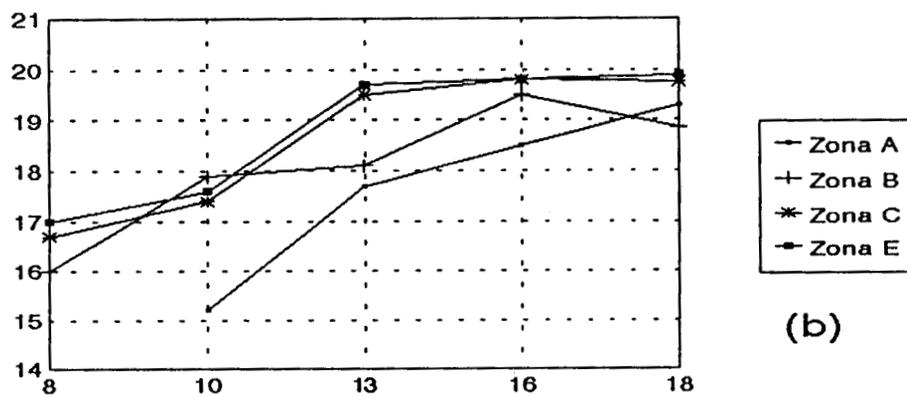
## Temperatura a Diferentes Horas

Profundidad 20 cm



## Temperatura a Diferentes Horas

Profundidad 50 cm



## Temperatura a Diferentes Horas

Profundidad 100 cm

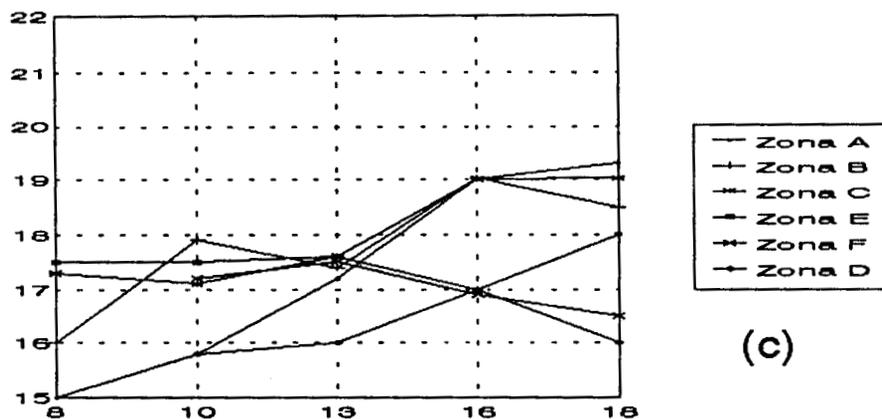


Figura 7.2. Perfiles de temperatura para la presa Alzate.

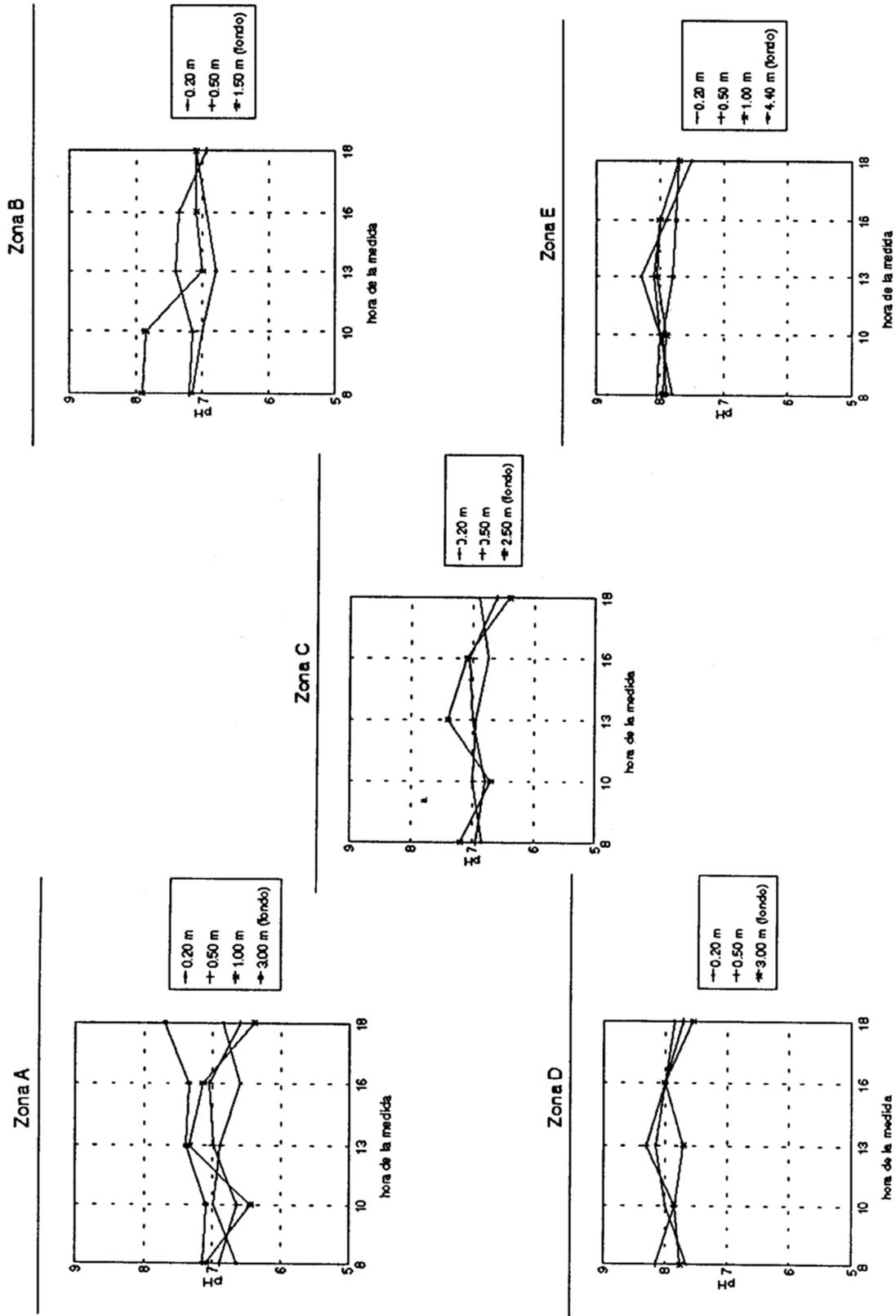


Figura 7.3. pH vs zona a diferentes horas.

Diagrama de Distribución de Oxígeno Disuelto  
Relación de Zonas y Profundidades a las 8 AM

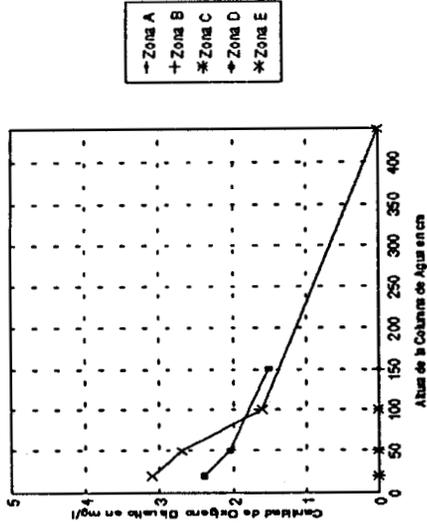


Diagrama de Distribución de Oxígeno Disuelto  
Relación de Zonas y Profundidades a la 1 PM

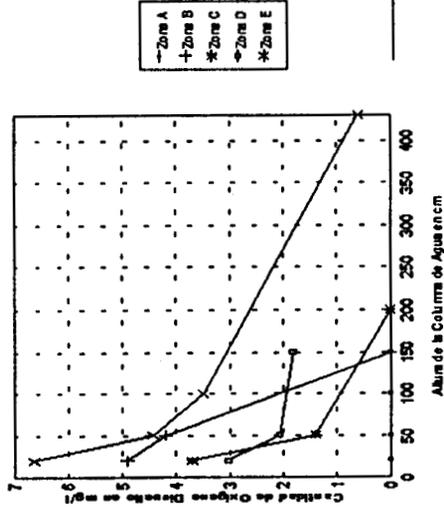


Diagrama de Distribución de Oxígeno Disuelto  
Relación de Zonas y Profundidades a las 4 PM

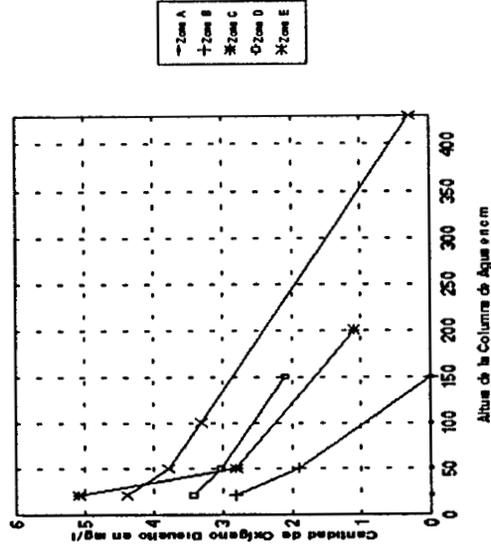


Diagrama de Distribución de Oxígeno Disuelto  
Relación de Zonas y Profundidades a las 10 AM

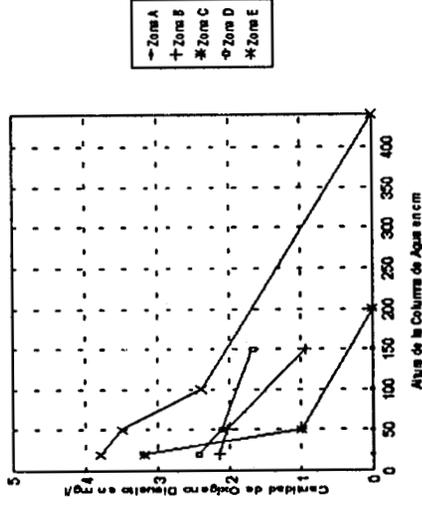


Diagrama de Distribución de Oxígeno Disuelto  
Relación de Zonas y Profundidades a las 6 PM

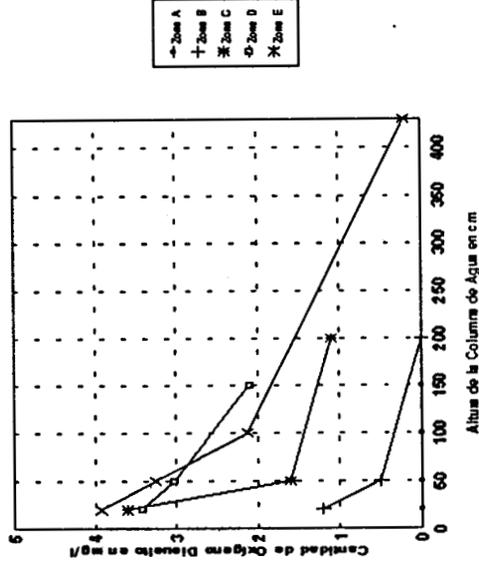


Figura 7.4. Perfiles de oxígeno disuelto a horas diferentes en un día de muestreo en la presa.

# Turbidez contra hora por zonas

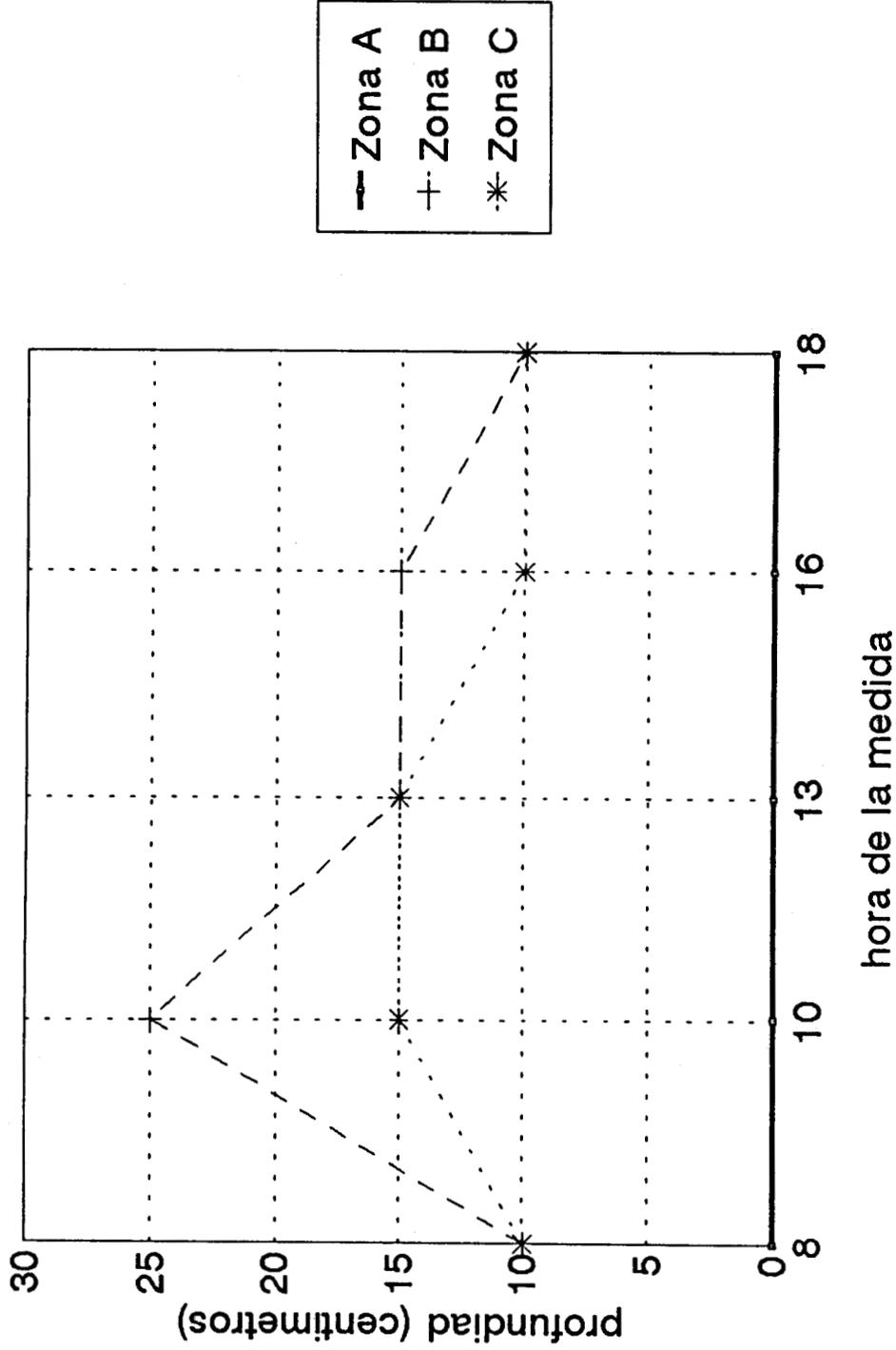


Figura 7.5. Variación de la Turbidez en diferentes zonas y horas..

Resultados Analíticos

Los análisis efectuados en el laboratorio, para cada profundidad en los diferentes sitios, se hicieron por triplicado obteniendo los resultados de la tabla 7.3

Tabla 7.3. Resultados de alcalinidad por sitio y profundidad, de muestras provenientes de la presa Alzate.

| SITIO A                        |    |     |       |          |  |                              |    |     |      |          |  |
|--------------------------------|----|-----|-------|----------|--|------------------------------|----|-----|------|----------|--|
| 0.2 m                          |    |     |       |          |  | 2.0m                         |    |     |      |          |  |
| pH inicial.                    | Vf | pH  | Vnm   | pH final | HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup> (mol/l) 10 <sup>-3</sup> | pH inicial.                  | Vf | pH  | Vnm  | pH final | HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup> (mol/l) 10 <sup>-3</sup> |
| 7.1                            | 0  | 7.2 | 10.65 | 4.3      | 4.24   | 7.3                          | 0  | 7.3 | 10.9 | 4.1      | 4.36   |
| 7.1                            | 0  | 7.1 | 10.65 | 4.2      | 4.26   | 7.2                          | 0  | 7.2 | 10.7 | 4.3      | 4.28   |
| 7.1                            | 0  | 7.1 | 10.60 | 4.3      | 4.24   | 7.2                          | 0  | 7.2 | 10.7 | 4.3      | 4.28   |
| Xmed= 4.236 x 10 <sup>-3</sup> |    |     |       |          |  | Xmed= 4.3 x 10 <sup>-3</sup> |    |     |      |          |  |
| σ = 4.714 x 10 <sup>-8</sup>   |    |     |       |          |  | σ = 3.464 x 10 <sup>-5</sup> |    |     |      |          |  |

| SITIO B                        |    |     |       |          |  |                                 |    |     |       |          |  |
|--------------------------------|----|-----|-------|----------|--|---------------------------------|----|-----|-------|----------|--|
| 0.2 m                          |    |     |       |          |  | 1.6m                            |    |     |       |          |  |
| pH inicial.                    | Vf | pH  | Vnm   | pH final | HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup> (mol/l) 10 <sup>-3</sup> | pH inicial.                     | Vf | pH  | Vnm   | pH final | HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup> (mol/l) 10 <sup>-3</sup> |
| 7.8                            | 0  | 7.8 | 12.70 | 4.3      | 5.08   | 7.8                             | 0  | 7.8 | 13.15 | 4.2      | 5.26   |
| 7.8                            | 0  | 7.8 | 12.70 | 4.3      | 5.08   | 7.8                             | 0  | 7.8 | 13.10 | 4.3      | 5.24   |
| 7.8                            | 0  | 7.8 | 12.68 | 4.3      | 5.07   | 7.8                             | 0  | 7.8 | 13.10 | 4.3      | 5.24   |
| Xmed= 5.077 x 10 <sup>-3</sup> |    |     |       |          |  | Xmed= 5.2466 x 10 <sup>-3</sup> |    |     |       |          |  |
| σ = 3.771 x 10 <sup>-8</sup>   |    |     |       |          |  | σ = 9.4280 x 10 <sup>-8</sup>   |    |     |       |          |  |

| SITIO C                       |    |      |       |          |  |                               |    |     |      |          |  |
|-------------------------------|----|------|-------|----------|--|-------------------------------|----|-----|------|----------|--|
| 0.2 m                         |    |      |       |          |  | 2.0m                          |    |     |      |          |  |
| pH inicial.                   | Vf | pH   | Vnm   | pH final | HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup> (mol/l) 10 <sup>-3</sup> | pH inicial.                   | Vf | pH  | Vnm  | pH final | HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup> (mol/l) 10 <sup>-3</sup> |
| 7.15                          | 0  | 7.15 | 10.80 | 4.3      | 4.32   | 6.9                           | 0  | 6.9 | 7.60 | 4.3      | 3.05   |
| 7.15                          | 0  | 7.15 | 10.80 | 4.3      | 4.32   | 6.9                           | 0  | 6.9 | 7.60 | 4.3      | 3.05   |
| 7.15                          | 0  | 7.15 | 10.81 | 4.3      | 4.32   | 6.9                           | 0  | 6.9 | 7.65 | 4.3      | 3.05   |
| Xmed= 4.32 x 10 <sup>-3</sup> |    |      |       |          |  | Xmed= 3.05 x 10 <sup>-3</sup> |    |     |      |          |  |
| σ = 0.0                       |    |      |       |          |  | σ = 0.0                       |    |     |      |          |  |

| SITIO D                        |    |     |       |          |  |                                |    |     |       |          |  |
|--------------------------------|----|-----|-------|----------|--|--------------------------------|----|-----|-------|----------|--|
| 0.2 m                          |    |     |       |          |  | 1.6m                           |    |     |       |          |  |
| pH inicial.                    | Vf | pH  | Vnm   | pH final | HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup> (mol/l) 10 <sup>-3</sup> | pH inicial.                    | Vf | pH  | Vnm   | pH final | HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup> (mol/l) 10 <sup>-3</sup> |
| 7.8                            | 0  | 7.8 | 16.20 | 4.3      | 6.491  | 7.8                            | 0  | 7.8 | 16.25 | 4.3      | 6.501  |
| 7.8                            | 0  | 7.8 | 16.20 | 4.3      | 6.491  | 7.8                            | 0  | 7.8 | 16.25 | 4.3      | 6.501  |
| 7.9                            | 0  | 7.9 | 16.22 | 4.3      | 6.490  | 7.8                            | 0  | 7.8 | 16.25 | 4.3      | 6.501  |
| Xmed= 6.491 x 10 <sup>-3</sup> |    |     |       |          |  | Xmed= 6.501 x 10 <sup>-3</sup> |    |     |       |          |  |
| σ = 4.715 x 10 <sup>-8</sup>   |    |     |       |          |  | σ = 0.0                        |    |     |       |          |  |

| SITIO E                       |    |     |      |          |  |                                 |    |     |       |          |  |
|-------------------------------|----|-----|------|----------|--|---------------------------------|----|-----|-------|----------|--|
| 0.2 m                         |    |     |      |          |  | 3.0m                            |    |     |       |          |  |
| pH inicial.                   | Vf | pH  | Vnm  | pH final | HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup> (mol/l) 10 <sup>-3</sup> | pH inicial.                     | Vf | pH  | Vnm   | pH final | HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup> (mol/l) 10 <sup>-3</sup> |
| 7.9                           | 0  | 7.9 | 12.8 | 4.30     | 5.12   | 7.9                             | 0  | 7.9 | 13.10 | 4.3      | 5.243  |
| 7.9                           | 0  | 7.9 | 12.8 | 4.30     | 5.12   | 7.9                             | 0  | 7.9 | 13.10 | 4.3      | 5.243  |
| 7.9                           | 0  | 7.9 | 12.8 | 4.29     | 5.12   | 7.9                             | 0  | 7.9 | 13.12 | 4.3      | 5.248  |
| Xmed= 5.12 x 10 <sup>-3</sup> |    |     |      |          |  | Xmed= 5.2446 x 10 <sup>-3</sup> |    |     |       |          |  |
| σ = 0.0                       |    |     |      |          |  | σ = 2.357 x 10 <sup>-8</sup>    |    |     |       |          |  |

**Tabla 7.3. Resultados de alcalinidad por sitio y profundidad, de muestra provenientes de la presa Alzate. Continuación.**

| SITIO F                        |    |     |      |          |  |                                |    |     |       |          |  |
|--------------------------------|----|-----|------|----------|--|--------------------------------|----|-----|-------|----------|--|
| 0.2 m                          |    |     |      |          |  | 4.0m                           |    |     |       |          |  |
| pH inicial.                    | Vf | pH  | Vnm  | pH final | HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup> (mol/l) 10 <sup>-3</sup> | pH inicial.                    | Vf | pH  | Vnm   | pH final | HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup> (mol/l) 10 <sup>-3</sup> |
| 7.1                            | 0  | 7.1 | 11.0 | 4.3      | 4.402  | 7.1                            | 0  | 7.1 | 13.10 | 4.3      | 4.425  |
| 7.1                            | 0  | 7.1 | 11.0 | 4.3      | 4.402  | 7.1                            | 0  | 7.1 | 13.10 | 4.3      | 4.425  |
| 7.1                            | 0  | 7.1 | 11.0 | 4.3      | 4.402  | 7.1                            | 0  | 7.1 | 13.12 | 4.3      | 4.425  |
| Xmed= 4.402 x 10 <sup>-3</sup> |    |     |      |          |  | Xmed= 4.425 x 10 <sup>-3</sup> |    |     |       |          |  |
| σ = 0.0                        |    |     |      |          |  | σ = 0.0                        |    |     |       |          |  |

Vf = volumen del ácido para alcanzar el punto de equivalencia con fenofaleína.

Vnm = volumen del ácido para alcanzar el punto de equivalencia con anaranjado de metilo

### 7.3 Resultados de las concentraciones de los diferentes aniones y de cationes monovalentes y divalentes.

En cuanto a los aniones, la concentración obtenida para cada uno de ellos se encuentran contenidas en la tabla 7.4.

**Tabla 7.4 Concentración de aniones para muestras en columna de agua provenientes de la presa Alzate.**

| ANIONES                                 |          |          |          |          |             |          |          |          |        |
|---|----------|----------|----------|----------|-------------|----------|----------|----------|--------|
| Concentración (mol/l x10 <sup>3</sup> ) |          |          |          |          |             |          |          |          |        |
| Muestra                                 | Fosfatos | Sulfatos | Nitratos | Nitritos | Bicarbonato | Cloruros | Sulfuros | Cianuros | Otros  |
| A <sub>20</sub>                         | 0.0645   | 0.3017   | 1.0217   | M.L.D.   | 4.237       | 2.5292   | 0.40845  | 0.0008   | 0.0116 |
| A <sub>f(2.0 m)</sub>                   | 0.0663   | 0.2967   | 1.5886   | M.L.D.   | 4.300       | 2.9892   | 0.37475  | 0.0007   | 0.0150 |
| B <sub>20</sub>                         | 0.0658   | 0.4601   | 0.4732   | M.L.D.   | 6.077       | 3.6122   | 0.55700  | 0.0009   | 0.1290 |
| B <sub>f(1.5 m)</sub>                   | 0.0659   | 0.3926   | 0.4040   | M.L.D.   | 6.247       | 2.6581   | 0.38960  | 0.0009   | 0.0102 |
| C <sub>20</sub>                         | 0.0363   | 0.3773   | 0.7543   | M.L.D.   | 4.320       | 4.4833   | 0.60670  | 0.0005   | 0.0238 |
| C <sub>f(2.0 m)</sub>                   | 0.0530   | 0.4309   | 0.5238   | M.L.D.   | 3.050       | 4.2469   | 0.75240  | 0.0005   | 0.0236 |
| D <sub>20</sub>                         | 0.0343   | 0.1464   | 0.0398   | M.L.C.   | 6.491       | 3.7058   | 0.60130  | 0.0011   | 0.0205 |
| D <sub>f(1.5 m)</sub>                   | 0.0531   | 0.0607   | 0.0537   | M.L.C.   | 6.501       | 3.4318   | 0.48430  | 0.0015   | 0.0119 |
| E <sub>20</sub>                         | 0.0441   | 1.9603   | 0.6853   | M.L.C.   | 5.120       | 4.0716   | 0.66890  | 0.0022   | 0.0294 |
| E <sub>f(3.0 m)</sub>                   | 0.0558   | 1.2331   | 0.9664   | M.L.C.   | 5.243       | 2.8641   | 0.29120  | 0.0001   | 0.0069 |
| F <sub>20</sub>                         | 0.0310   | 0.3929   | 0.3856   | M.L.D.   | 4.402       | 4.6704   | 0.62590  | 0.0018   | 0.0341 |
| F <sub>f(4.0 m)</sub>                   | 0.0443   | 0.2470   | 0.2519   | M.L.D.   | 4.425       | 4.5344   | 0.78560  | 0.0032   | 0.0311 |

M.L.D.: Menor al Limite Detectable M.L.C.: Menor al Limite Cuantificable X<sub>f</sub>: profundidad: fondo X<sub>20</sub>: profundidad: 20 cm.

y se puede observar su variación en la columna de agua para cada zona en las figuras 7.6 a 7.12.

Las concentraciones de los cationes monovalentes y divalentes se obtuvieron a partir de las lecturas con el espectrofotómetro de absorción atómica. Las curvas de calibración se elaboraron para cada catión. Los resultados analíticos y su

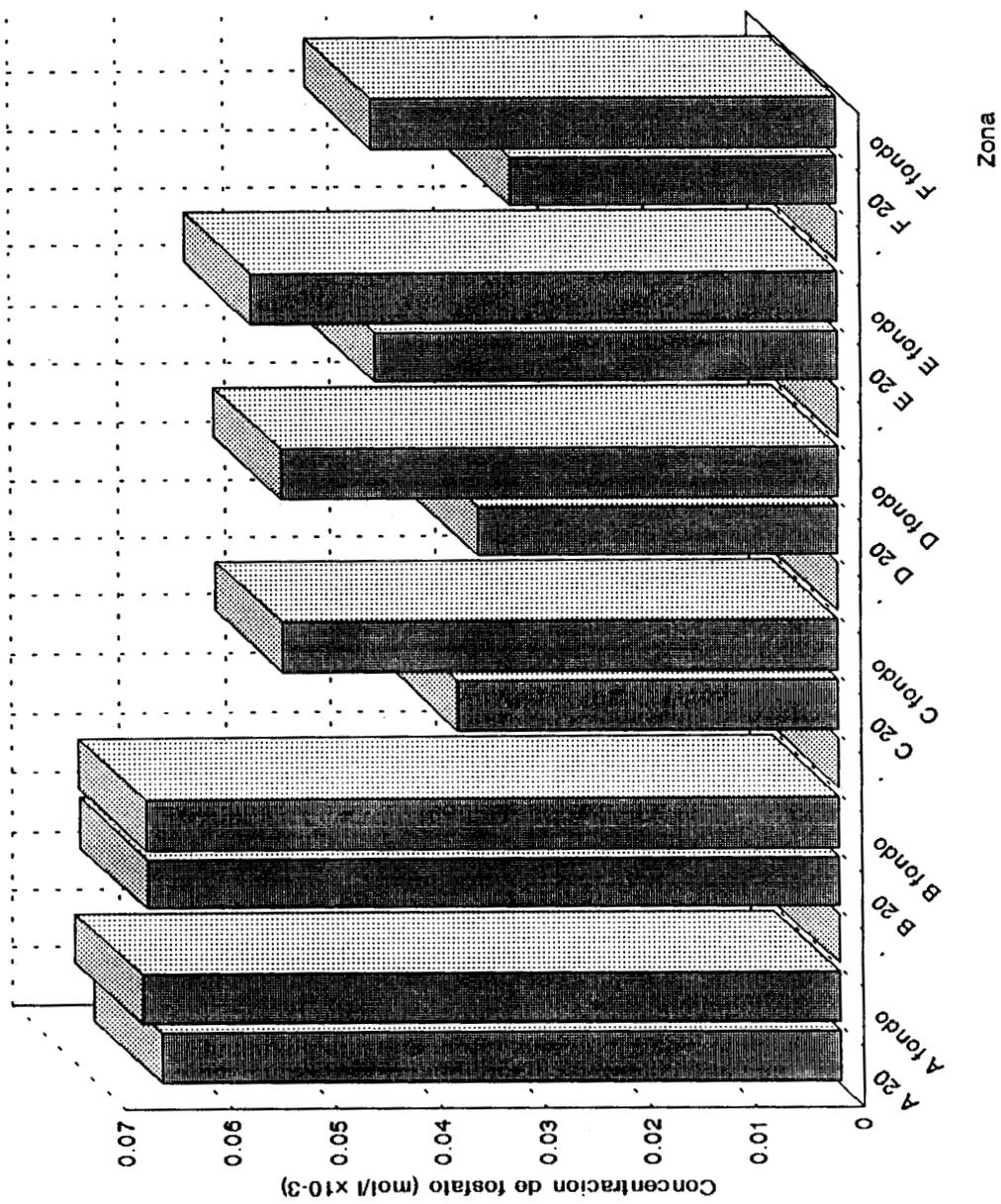


Figura 7.6 Variación de la concentración de fosfato en la columna de agua en cada zona.

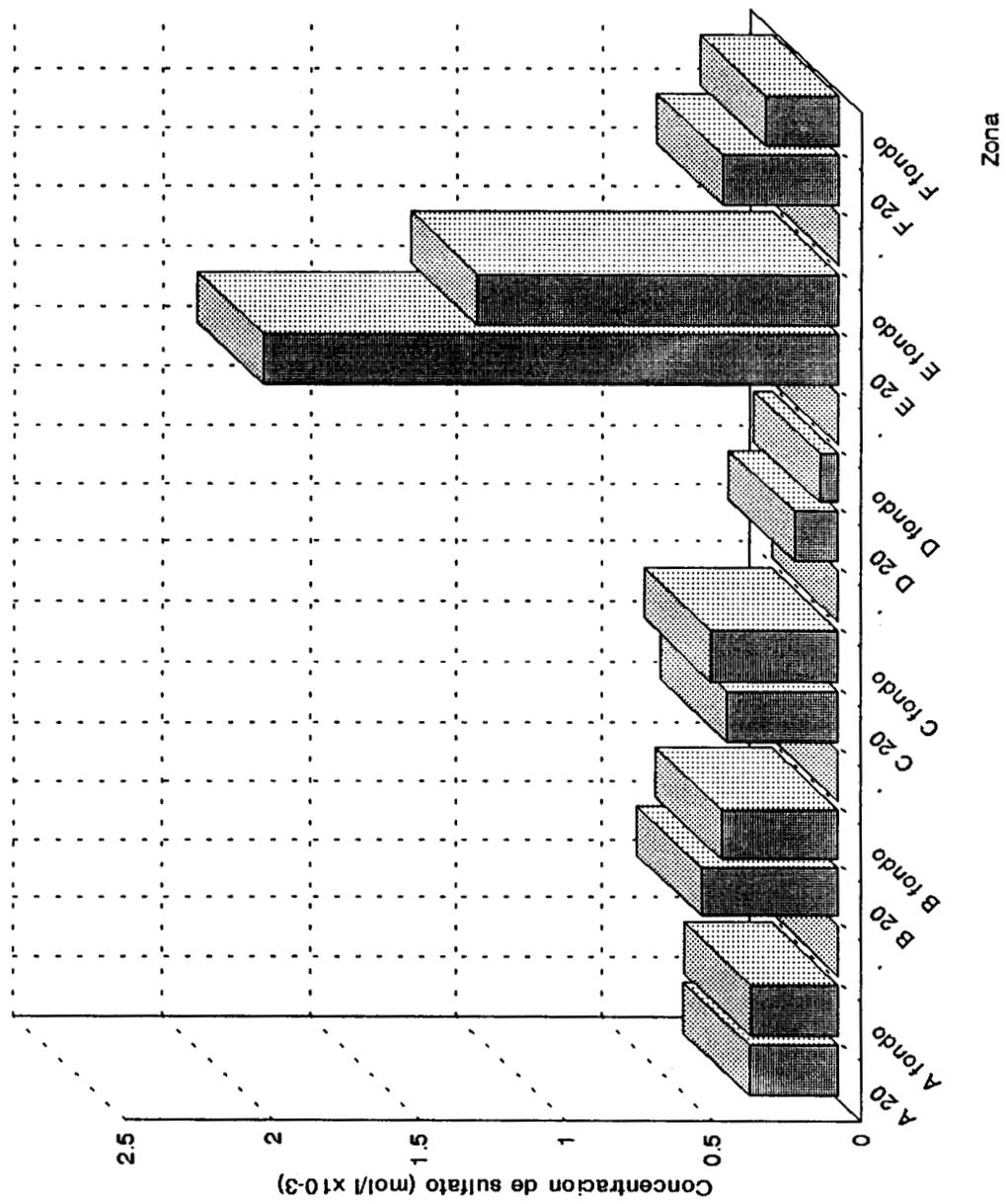


Figura 7.7 Variación de la concentración de sulfatos en la columna de agua en cada zona.

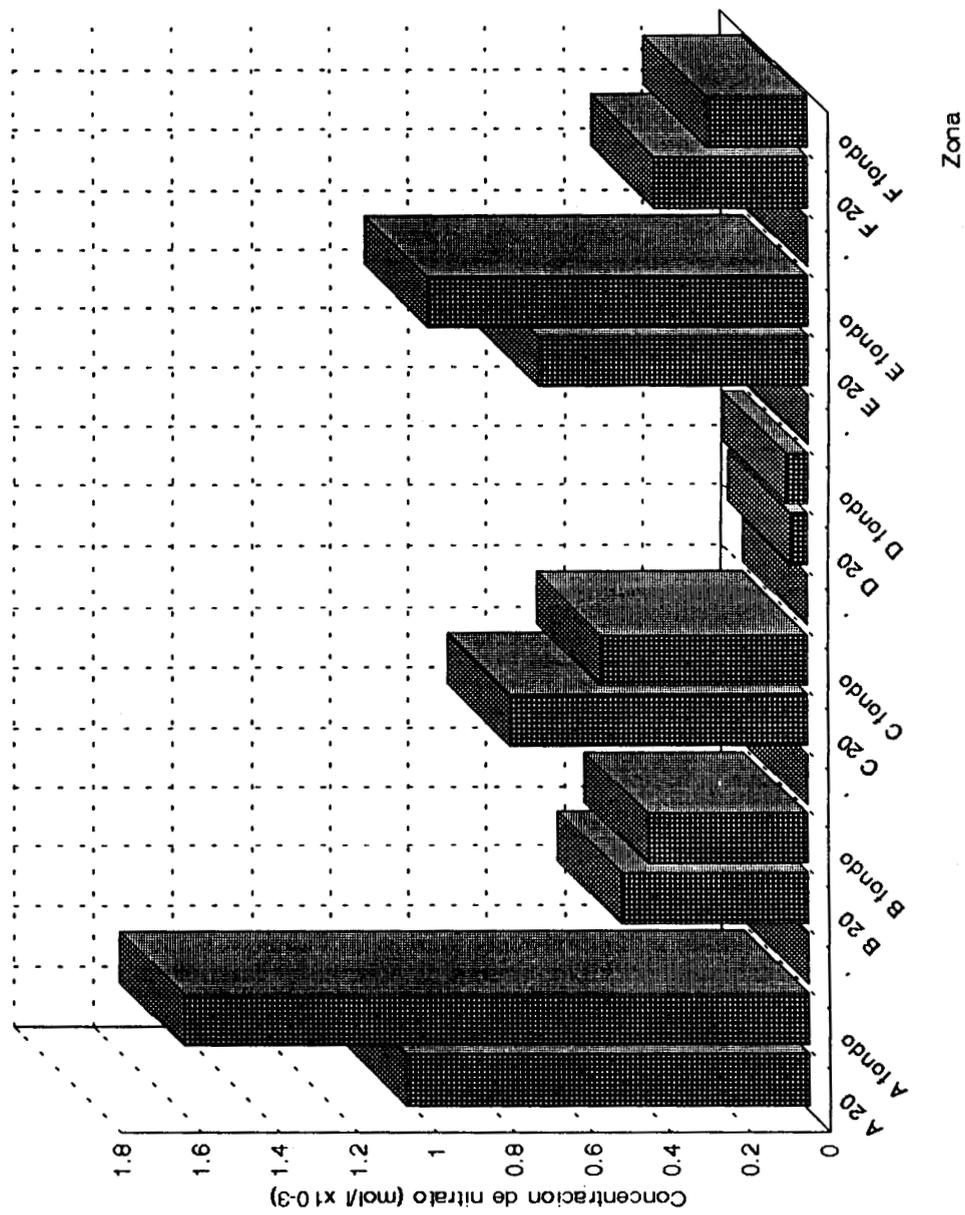


Figura 7.8 Variación de la concentración de nitrato en la columna de agua en cada zona.

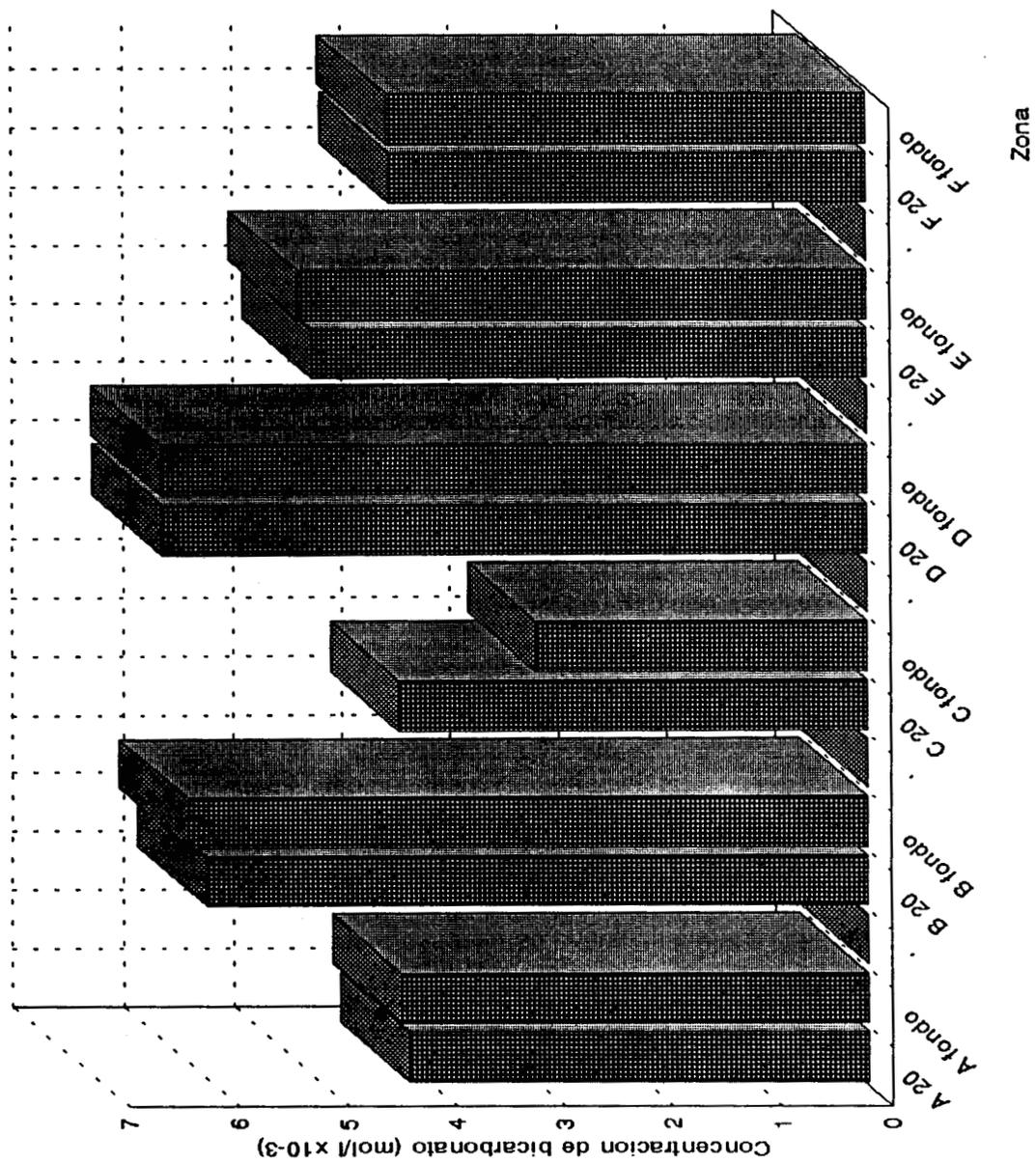


Figura 7.9 Variación de la concentración de bicarbonato en la columna de agua en cada zona.

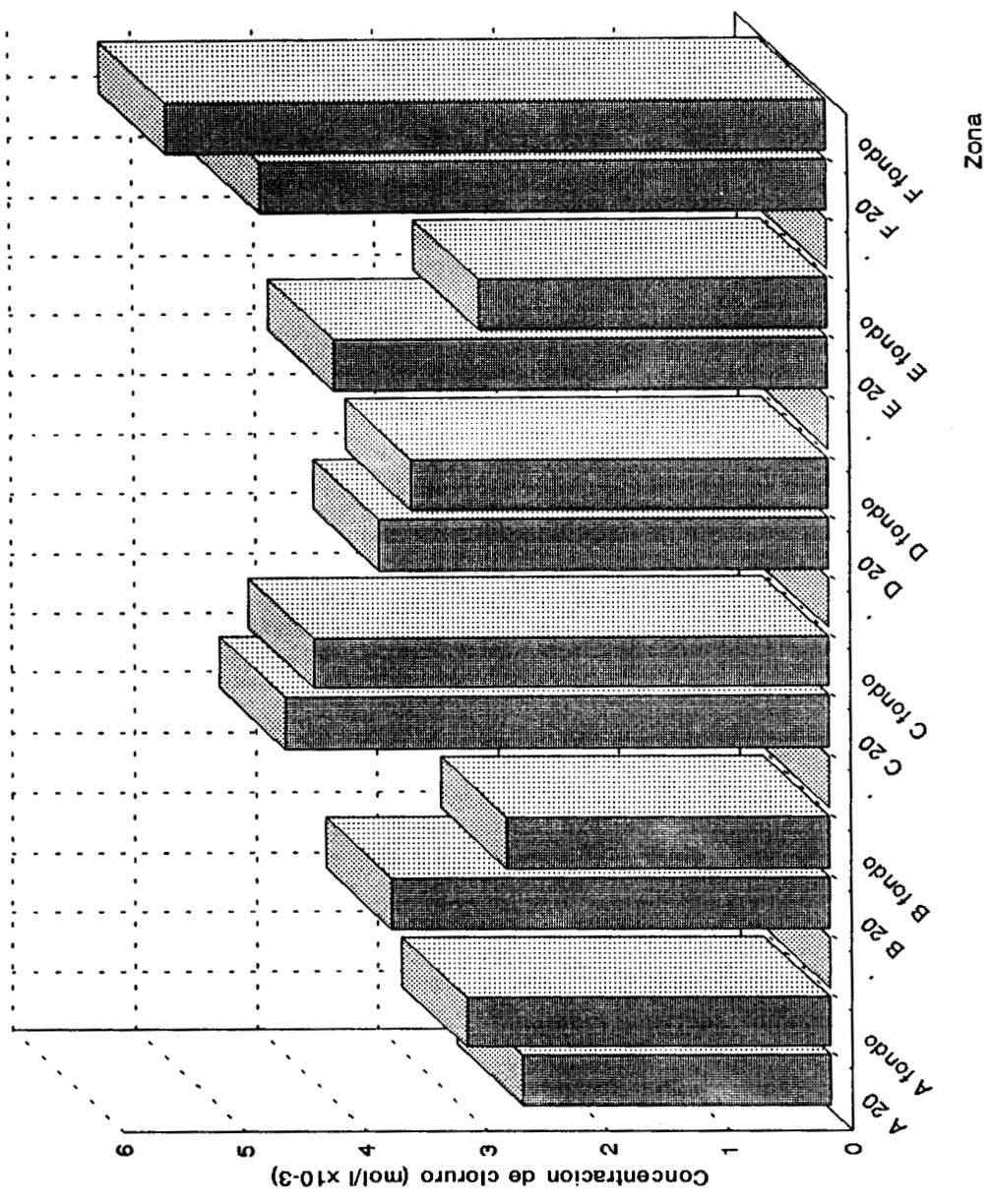


Figura 7.10 Variación de la concentración de cloruros en la columna de agua en cada zona.

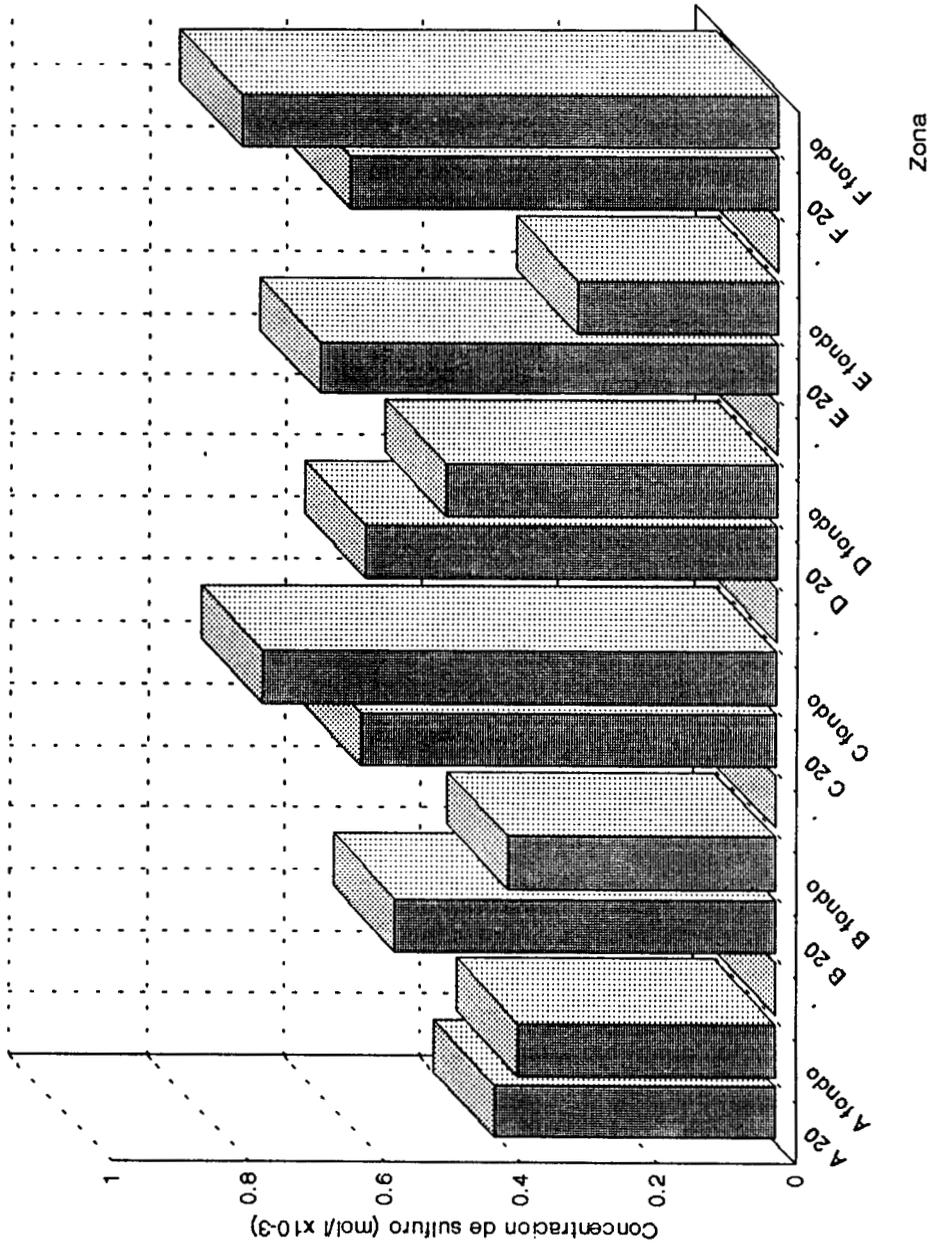


Figura 7.11 Variación de la concentración de sulfuros en la columna de agua en cada zona.

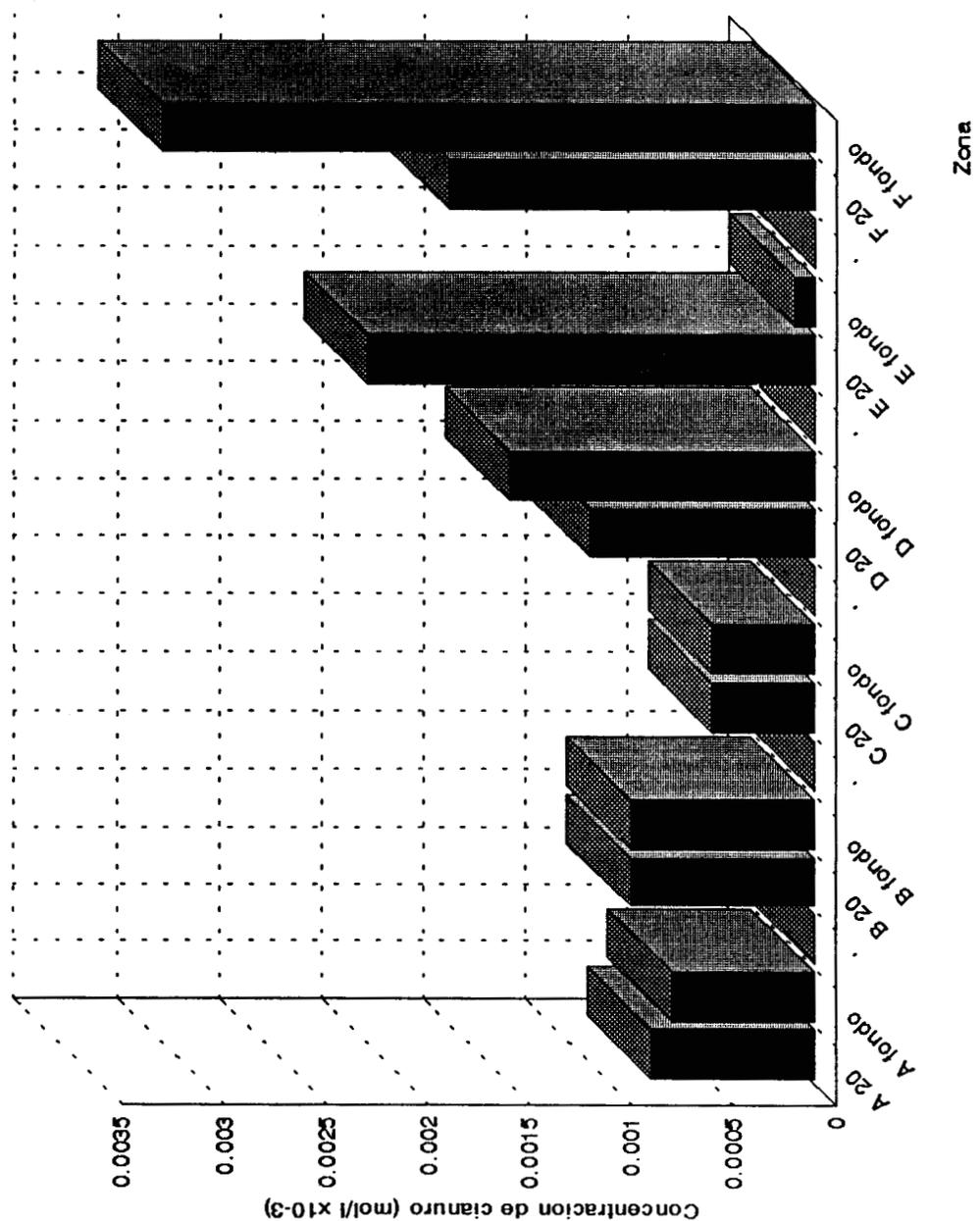


Figura 7.12 Variación de la concentración de cianuros en la columna de agua en cada zona.

Tabla 7.7. Concentración de cobre, por zona y profundidad de la presa Alzate.

| <b>Cu<sup>2+</sup></b> |                              |                                |                                |
|------------------------|------------------------------|--------------------------------|--------------------------------|
| Concentración en ppm   |                              |                                |                                |
| MUESTRA                | SIN FILTRACION<br>CON ATAQUE | CON FILTRACION Y CON<br>ATAQUE | CON FILTRACION Y<br>SIN ATAQUE |
| A <sub>20</sub>        | 0.0685 ± 0.001758            | 0.0347 ± 0.000649              | 0.0539 ± 0.000309              |
| A <sub>f</sub>         | 0.0530 ± 0.001521            | 0.0188 ± 0.000133              | 0.0227 ± 0.000826              |
| B <sup>20</sup>        | 0.0467 ± 0.001442            | 0.0365 ± 0.000106              | 0.0345 ± 0.000543              |
| B <sub>f</sub>         | 0.0301 ± 0.000000            | 0.0298 ± 0.000178              | 0.0315 ± 0.000125              |
| C <sub>20</sub>        | 0.0337 ± 0.001043            | 0.0188 ± 0.000139              | 0.0219 ± 0.000094              |
| C <sub>f</sub>         | 0.0226 ± 0.000694            | 0.0187 ± 0.000132              | 0.0180 ± 0.000216              |
| D <sub>20</sub>        | 0.0745 ± 0.000320            | 0.0126 ± 0.000944              | 0.0205 ± 0.000170              |
| D <sub>f</sub>         | 0.0482 ± 0.000762            | 0.0045 ± 0.000117              | 0.0194 ± 0.000184              |
| E <sub>20</sub>        | 0.0240 ± 0.000187            | 0.0154 ± 0.000142              | 0.0276 ± 0.000141              |
| E <sub>f</sub>         | 0.0161 ± 0.000222            | 0.0109 ± 0.000350              | 0.0456 ± 0.000245              |
| F <sub>20</sub>        | 0.0589 ± 0.001662            | 0.0248 ± 0.000117              | 0.0328 ± 0.000106              |
| F <sub>f</sub>         | 0.0317 ± 0.001382            | 0.0129 ± 0.000371              | 0.0287 ± 0.000094              |

Tabla 7.8. Concentración de hierro, por zona y profundidad de la presa Alzate.

| <b>Fe<sup>2+</sup></b> |                                |                                |                                |
|------------------------|--------------------------------|--------------------------------|--------------------------------|
| Concentración en ppm   |                                |                                |                                |
| MUESTRA                | SIN FILTRACION<br>Y CON ATAQUE | CON FILTRACION<br>Y CON ATAQUE | CON FILTRACION<br>Y SIN ATAQUE |
| A <sub>20</sub>        | 0.8987 ± 0.001414              | 0.2106 ± 0.005218              | 0.0315 ± 0.000697              |
| A <sub>f</sub>         | 0.5827 ± 0.007148              | 0.0930 ± 0.003566              | 0.0152 ± 0.000657              |
| B <sub>20</sub>        | 1.1093 ± 0.006584              | 0.5844 ± 0.002728              | 0.0775 ± 0.001043              |
| B <sub>f</sub>         | 0.9013 ± 0.003654              | 0.3310 ± 0.002428              | 0.0275 ± 0.000000              |
| C <sub>20</sub>        | 0.6453 ± 0.000908              | 0.1532 ± 0.002974              | 0.0830 ± 0.001043              |
| C <sub>f</sub>         | 0.3693 ± 0.000586              | 0.1236 ± 0.003081              | 0.0663 ± 0.000000              |
| D <sub>20</sub>        | 0.7125 ± 0.002436              | 0.8422 ± 0.002438              | 0.1453 ± 0.000657              |
| D <sub>f</sub>         | 0.3981 ± 0.001427              | 0.6894 ± 0.004528              | 0.0356 ± 0.001043              |
| E <sub>20</sub>        | 0.6375 ± 0.003114              | 0.4900 ± 0.003028              | 0.1708 ± 0.001334              |
| E <sub>f</sub>         | 0.6175 ± 0.007527              | 0.4830 ± 0.001314              | 0.0315 ± 0.000697              |
| F <sub>20</sub>        | 0.1483 ± 0.001904              | 0.1449 ± 0.002608              | 0.0942 ± 0.000000              |
| F <sub>f</sub>         | 0.1258 ± 0.001720              | 0.1588 ± 0.002728              | 0.0245 ± 0.001138              |

Tabla 7.9. Concentración de potasio, por zona y profundidad de la presa Alzate.

| K <sup>+</sup>       |                                |                                |                                |
|----------------------|--------------------------------|--------------------------------|--------------------------------|
| Concentración en ppm |                                |                                |                                |
| MUESTRA              | SIN FILTRACION<br>Y CON ATAQUE | CON FILTRACION<br>Y CON ATAQUE | CON FILTRACION<br>Y SIN ATAQUE |
| A <sub>20</sub>      | 41.3861 ± 0.7100               | 30.880 ± 0.96986               | 22.9335 ± 0.6565               |
| A <sub>f</sub>       | 45.7076 ± 0.2353               | 43.285 ± 1.97456               | 21.6280 ± 0.7148               |
| B <sub>20</sub>      | 62.5210 ± 0.9162               | 54.100 ± 1.12956               | 37.9587 ± 0.3254               |
| B <sub>f</sub>       | 59.8620 ± 0.6800               | 50.860 ± 1.22130               | 37.3105 ± 0.4136               |
| C <sub>20</sub>      | 52.1880 ± 0.6695               | 54.680 ± 1.22917               | 42.6839 ± 0.6205               |
| C <sub>f</sub>       | 48.3310 ± 0.2983               | 46.208 ± 0.98430               | 11.9478 ± 0.6479               |
| D <sub>20</sub>      | 45.3223 ± 0.9321               | 43.580 ± 0.97067               | 33.8875 ± 0.4503               |
| D <sub>f</sub>       | 44.9768 ± 0.4124               | 43.870 ± 0.98430               | 32.6774 ± 0.2574               |
| E <sub>20</sub>      | 64.0333 ± 0.3983               | 59.200 ± 1.86560               | 35.2566 ± 0.4680               |
| E <sub>f</sub>       | 61.3470 ± 0.2294               | 43.780 ± 1.08487               | 19.2398 ± 0.2251               |
| F <sub>20</sub>      | 54.9230 ± 0.1968               | 47.880 ± 0.96304               | 39.3234 ± 0.7091               |
| F <sub>f</sub>       | 50.0050 ± 0.1882               | 46.420 ± 0.97067               | 38.0270 ± 0.5515               |

Tabla 7.10. Concentración de magnesio, por zona y profundidad de la presa Alzate.

| Mg <sup>2+</sup>     |                                |                                |                                |
|----------------------|--------------------------------|--------------------------------|--------------------------------|
| Concentración en ppm |                                |                                |                                |
| MUESTRA              | SIN FILTRACION<br>Y CON ATAQUE | CON FILTRACION<br>Y CON ATAQUE | CON FILTRACION<br>Y SIN ATAQUE |
| A <sub>20</sub>      | 39.9014 ± 0.6049               | 37.9841 ± 0.1408               | 37.8413 ± 0.1465               |
| A <sub>f</sub>       | 36.8964 ± 0.3998               | 31.0300 ± 0.5295               | 29.7929 ± 0.1167               |
| B <sub>20</sub>      | 44.0932 ± 0.2099               | 39.8026 ± 0.3692               | 40.0663 ± 0.0152               |
| B <sub>f</sub>       | 31.1224 ± 0.2115               | 29.8624 ± 0.3175               | 28.9688 ± 0.0909               |
| C <sub>20</sub>      | 45.6699 ± 0.3997               | 41.2474 ± 1.1290               | 39.9344 ± 0.0454               |
| C <sub>f</sub>       | 36.5502 ± 0.0774               | 35.4844 ± 0.2655               | 34.1714 ± 0.0843               |
| D <sub>20</sub>      | 55.7291 ± 0.1139               | 45.9501 ± 0.3016               | 44.9118 ± 0.0265               |
| D <sub>f</sub>       | 47.0544 ± 0.0376               | 38.8082 ± 0.2440               | 36.0668 ± 0.1170               |
| E <sub>20</sub>      | 81.7807 ± 2.4689               | 68.9197 ± 0.7590               | 65.7333 ± 0.1170               |
| E <sub>f</sub>       | 61.7558 ± 1.9347               | 51.7351 ± 0.1670               | 48.2850 ± 0.0921               |
| F <sub>20</sub>      | 52.8284 ± 0.5045               | 42.9231 ± 0.2057               | 41.7694 ± 0.1561               |
| F <sub>f</sub>       | 50.3726 ± 0.2265               | 49.2299 ± 0.1331               | 40.3841 ± 0.0991               |

Tabla 7.11. Concentración de manganeso, por zona y profundidad de la presa Alzate.

| <b>Mn<sup>2+</sup></b>      |  |  |  |
|-----------------------------|--|--|--|
| <b>Concentración en ppm</b> |  |  |  |
| <b>MUESTRA</b>              | <b>SIN FILTRACION<br/>Y CON ATAQUE</b> | <b>CON FILTRACION<br/>Y CON ATAQUE</b> | <b>CON FILTRACION<br/>Y SIN ATAQUE</b> |
| A <sub>20</sub>             | 0.3258 ± 0.002580                      | 0.2886 ± 0.002860                      | 0.0937 ± 0.00089                       |
| A <sub>f</sub>              | 0.3088 ± 0.001472                      | 0.2700 ± 0.001760                      | 0.0777 ± 0.00025                       |
| B <sub>20</sub>             | 0.4304 ± 0.001188                      | 0.3304 ± 0.001720                      | 0.0878 ± 0.00063                       |
| B <sub>f</sub>              | 0.4128 ± 0.000604                      | 0.3118 ± 0.002120                      | 0.0816 ± 0.00045                       |
| C <sub>20</sub>             | 0.3558 ± 0.001260                      | 0.2802 ± 0.001322                      | 0.0853 ± 0.00000                       |
| C <sub>f</sub>              | 0.3466 ± 0.001050                      | 0.2228 ± 0.001828                      | 0.0806 ± 0.00048                       |
| D <sub>20</sub>             | 0.3986 ± 0.002342                      | 0.2180 ± 0.002974                      | 0.1281 ± 0.00081                       |
| D <sub>f</sub>              | 0.3314 ± 0.001620                      | 0.1940 ± 0.001878                      | 0.1089 ± 0.00123                       |
| E <sub>20</sub>             | 0.7216 ± 0.004236                      | 0.1850 ± 0.001430                      | 0.0791 ± 0.00018                       |
| E <sub>f</sub>              | 0.6262 ± 0.001596                      | 0.1806 ± 0.001650                      | 0.0797 ± 0.00019                       |
| F <sub>20</sub>             | 0.2498 ± 0.001114                      | 0.2250 ± 0.002140                      | 0.0866 ± 0.00035                       |
| F <sub>f</sub>              | 0.4464 ± 0.00896                       | 0.2754 ± 0.001180                      | 0.0843 ± 0.00038                       |

Tabla 7.12. Concentración de sodio, por zona y profundidad de la presa Alzate.

| <b>Na<sup>+</sup></b>       |  |  |  |
|-----------------------------|--|--|--|
| <b>Concentración en ppm</b> |  |  |  |
| <b>MUESTRA</b>              | <b>SIN FILTRACION<br/>Y CON ATAQUE</b> | <b>CON FILTRACION<br/>Y CON ATAQUE</b> | <b>CON FILTRACION<br/>Y SIN ATAQUE</b> |
| A <sub>20</sub>             | 107.2886 ± 1.1093                      | 95.475 ± 0.8408                        | 92.474 ± 0.1466                        |
| A <sub>f</sub>              | 145.4132 ± 0.7125                      | 128.80 ± 0.2075                        | 83.070 ± 0.1362                        |
| B <sub>20</sub>             | 147.1401 ± 0.8422                      | 132.67 ± 0.1290                        | 118.166 ± 0.5152                       |
| B <sub>f</sub>              | 139.4138 ± 1.0670                      | 122.60 ± 0.8909                        | 138.315 ± 0.0000                       |
| C <sub>20</sub>             | 132.6933 ± 0.8933                      | 127.24 ± 0.6049                        | 124.611 ± 0.6337                       |
| C <sub>f</sub>              | 129.1588 ± 1.1615                      | 113.30 ± 0.9707                        | 36.500 ± 0.1588                        |
| D <sub>20</sub>             | 115.4838 ± 1.4934                      | 112.52 ± 1.0866                        | 111.531 ± 0.1092                       |
| D <sub>f</sub>              | 114.1236 ± 1.093                       | 113.30 ± 1.1391                        | 113.426 ± 0.1213                       |
| E <sub>20</sub>             | 152.1812 ± 1.2930                      | 144.30 ± 0.9279                        | 116.839 ± 0.2583                       |
| E <sub>f</sub>              | 137.2754 ± 0.7125                      | 115.62 ± 0.3747                        | 65.517 ± 0.0905                        |
| F <sub>20</sub>             | 140.1326 ± 0.9534                      | 126.47 ± 0.5263                        | 123.284 ± 0.0905                       |
| F <sub>f</sub>              | 138.1841 ± 0.9005                      | 120.27 ± 0.8949                        | 118.545 ± 0.0105                       |

Tabla 7.13. Concentración de plomo, por zona y profundidad de la presa Alzate.

| Pb <sup>2+</sup>     |                                |                                |                                |
|----------------------|--------------------------------|--------------------------------|--------------------------------|
| Concentración en ppb |                                |                                |                                |
| MUESTRA              | SIN FILTRACION<br>Y CON ATAQUE | CON FILTRACION<br>Y CON ATAQUE | CON FILTRACION<br>Y SIN ATAQUE |
| A <sub>20</sub>      | 42.433 ± 0.1837                | 41.32 ± 0.3374                 | 1.920 ± 0.00231                |
| A <sub>f</sub>       | 39.600 ± 0.1960                | 38.49 ± 0.3798                 | 1.340 ± 0.00197                |
| B <sub>20</sub>      | 71.867 ± 0.1185                | 34.73 ± 0.2060                 | 0.916 ± 0.00174                |
| B <sub>f</sub>       | 43.160 ± 0.1352                | 12.01 ± 0.2407                 | 0.812 ± 0.00237                |
| C <sub>20</sub>      | 40.250 ± 0.0950                | 12.53 ± 0.2729                 | 0.897 ± 0.00439                |
| C <sub>f</sub>       | 35.500 ± 0.2200                | 11.58 ± 0.3014                 | 0.743 ± 0.00147                |
| D <sub>20</sub>      | 12.533 ± 0.0047                | 6.23 ± 0.1155                  | 0.219 ± 0.00103                |
| D <sub>f</sub>       | 6.567 ± 0.1247                 | 5.85 ± 0.1438                  | 0.186 ± 0.00116                |
| E <sub>20</sub>      | 18.433 ± 0.1844                | 7.29 ± 0.0759                  | 0.114 ± 0.00214                |
| E <sub>f</sub>       | 8.330 ± 0.0356                 | 5.43 ± 0.1482                  | 0.095 ± 0.00116                |
| F <sub>20</sub>      | 25.800 ± 0.1070                | 17.75 ± 0.1922                 | 0.163 ± 0.00237                |
| F <sub>f</sub>       | 16.100 ± 0.2030                | 13.26 ± 0.1782                 | 0.125 ± 0.00345                |

Tabla 7.14. Concentración de cinc, por zona y profundidad de la presa Alzate.

| Zn <sup>2+</sup>     |                                |                                |                                |
|----------------------|--------------------------------|--------------------------------|--------------------------------|
| Concentración en ppm |                                |                                |                                |
| MUESTRA              | SIN FILTRACION<br>Y CON ATAQUE | CON FILTRACION<br>Y CON ATAQUE | CON FILTRACION<br>Y SIN ATAQUE |
| A <sub>20</sub>      | 0.2852 ± 0.00174               | 0.14014 ± 0.00840              | 0.072989 ± 0.00152             |
| A <sub>f</sub>       | 0.2649 ± 0.00120               | 0.11240 ± 0.00207              | 0.059972 ± 0.00135             |
| B <sub>20</sub>      | 0.1886 ± 0.00230               | 0.10148 ± 0.00153              | 0.025716 ± 0.00012             |
| B <sub>f</sub>       | 0.1460 ± 0.00175               | 0.01812 ± 0.00098              | 0.101616 ± 0.00182             |
| C <sub>20</sub>      | 0.1569 ± 0.00780               | 0.13640 ± 0.00146              | 0.038568 ± 0.00188             |
| C <sub>f</sub>       | 0.1471 ± 0.00610               | 0.12730 ± 0.00128              | 0.014755 ± 0.00000             |
| D <sub>20</sub>      | 0.1494 ± 0.00164               | 0.12940 ± 0.00201              | 0.018979 ± 0.00107             |
| D <sub>f</sub>       | 0.1362 ± 0.00132               | 0.07423 ± 0.00175              | 0.012604 ± 0.00104             |
| E <sub>20</sub>      | 0.1650 ± 0.00460               | 0.14400 ± 0.00193              | 0.002605 ± 0.00017             |
| E <sub>f</sub>       | 0.1278 ± 0.00460               | 0.10910 ± 0.00127              | 0.001393 ± 0.00008             |
| F <sub>20</sub>      | 0.0224 ± 0.00174               | 0.01050 ± 0.00162              | 0.009873 ± 0.00000             |
| F <sub>f</sub>       | 0.0310 ± 0.00143               | 0.01855 ± 0.00198              | 0.008644 ± 0.00011             |

**Tabla 7.15.** Concentración de metales en muestras filtradas y atacadas, provenientes de la presa Alzate, por zona y profundidad.

| Concentración de metales en ppm en muestras filtradas y atacadas |                  |                  |                  |                  |                  |                |
|--|------------------|------------------|------------------|------------------|------------------|----------------|
| Muestra  | Ca <sup>2+</sup> | Cd <sup>2+</sup> | Cu <sup>2+</sup> | Fe <sup>2+</sup> | Mg <sup>2+</sup> |                |
| A <sup>20</sup>  | 22.941           | 0.007560         | 0.0397           | 0.2106           | 37.984           |                |
| A <sup>I</sup>   | 19.680           | 0.005730         | 0.0188           | 0.0930           | 31.030           |                |
| B <sup>20</sup>  | 35.669           | 0.001160         | 0.0365           | 0.5844           | 39.803           |                |
| B <sup>I</sup>   | 36.271           | 0.000734         | 0.0298           | 0.3310           | 29.862           |                |
| C <sup>20</sup>  | 21.979           | 0.000773         | 0.0188           | 0.1532           | 41.247           |                |
| C <sup>I</sup>   | 20.279           | 0.000587         | 0.0187           | 0.1236           | 35.484           |                |
| D <sup>20</sup>  | 36.351           | 0.000880         | 0.0126           | 0.6422           | 45.950           |                |
| D <sup>I</sup>   | 35.950           | 0.000613         | 0.0045           | 0.5890           | 38.808           |                |
| E <sup>20</sup>  | 31.209           | 0.001493         | 0.0154           | 0.4900           | 68.920           |                |
| E <sup>I</sup>   | 34.587           | 0.000480         | 0.0109           | 0.4830           | 51.735           |                |
| F <sup>20</sup>  | 22.500           | 0.000693         | 0.0248           | 0.1449           | 42.923           |                |
| F <sup>I</sup>   | 22.080           | 0.000427         | 0.0129           | 0.1588           | 49.230           |                |
| Muestra  | Mn <sup>2+</sup> | Pb <sup>2+</sup> | Zn <sup>2+</sup> | K                | Na               | H <sup>+</sup> |
| A <sup>20</sup>  | 0.2886           | 0.04132          | 0.14014          | 30.880           | 95.475           | 1.4138         |
| A <sup>I</sup>   | 0.2700           | 0.00385          | 0.11240          | 43.285           | 128.80           | 0.9763         |
| B <sup>20</sup>  | 0.3304           | 0.03473          | 0.10148          | 54.100           | 132.67           | 0.4202         |
| B <sup>I</sup>   | 0.3118           | 0.01201          | 0.01812          | 50.860           | 122.60           | 0.4343         |
| C <sup>20</sup>  | 0.2802           | 0.01253          | 0.13640          | 54.680           | 127.24           | 1.2016         |
| C <sup>I</sup>   | 0.2228           | 0.01158          | 0.12730          | 46.208           | 113.30           | 1.1281         |
| D <sup>20</sup>  | 0.2180           | 0.00623          | 0.12940          | 43.580           | 112.52           | 0.5373         |
| D <sup>I</sup>   | 0.1940           | 0.00585          | 0.07423          | 43.870           | 113.30           | 0.5381         |
| E <sup>20</sup>  | 0.1850           | 0.00729          | 0.14400          | 59.200           | 144.30           | 0.2964         |
| E <sup>I</sup>   | 0.1806           | 0.00543          | 0.10910          | 43.780           | 115.62           | 0.3035         |
| F <sup>20</sup>  | 0.2250           | 0.01775          | 0.01050          | 47.880           | 126.47           | 1.3066         |
| F <sup>I</sup>   | 0.2754           | 0.01326          | 0.01855          | 46.420           | 120.27           | 1.3104         |

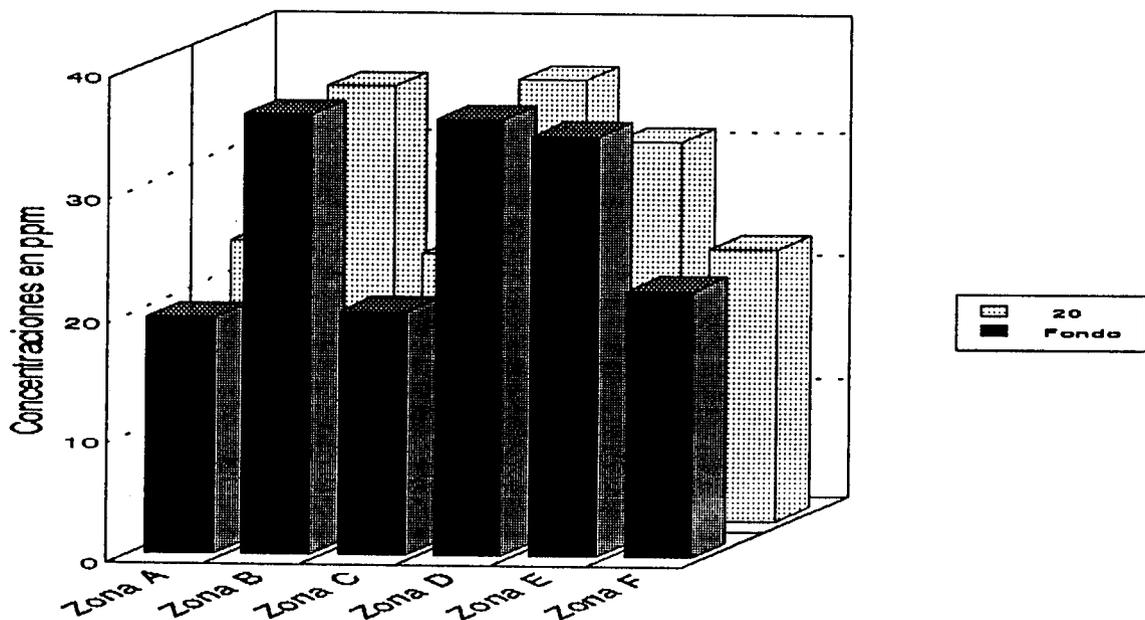


Figura 7.13. Distribución de Ca total en columnas de agua de la presa J. A. Alzate.

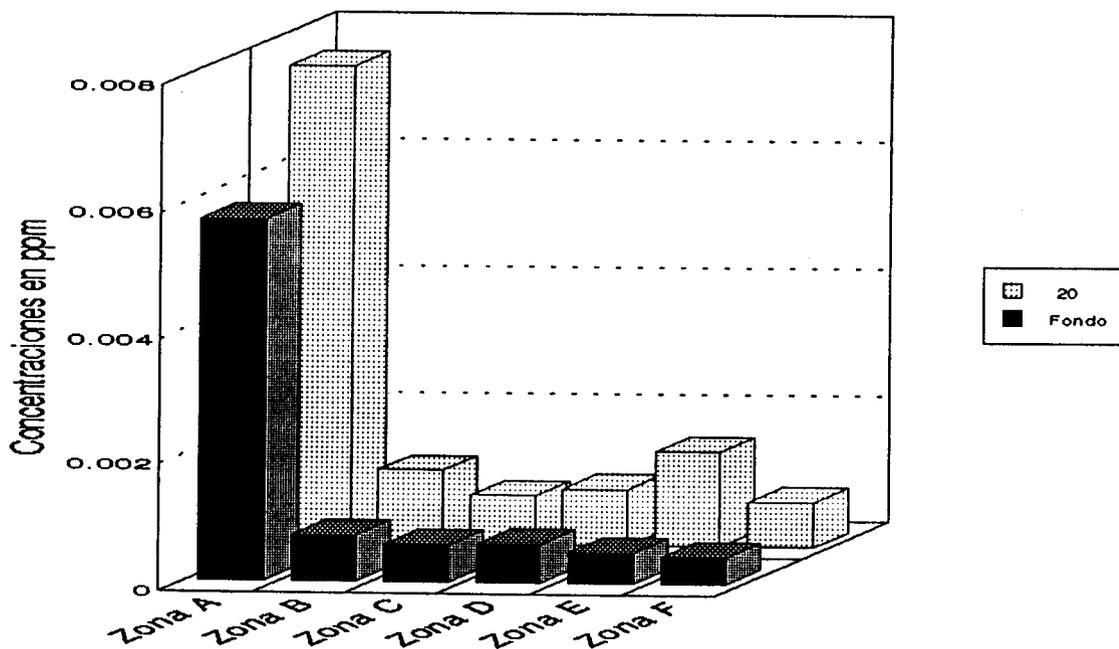


Figura 7.14. Distribución de Cd total en columnas de agua de la presa J. A. Alzate.

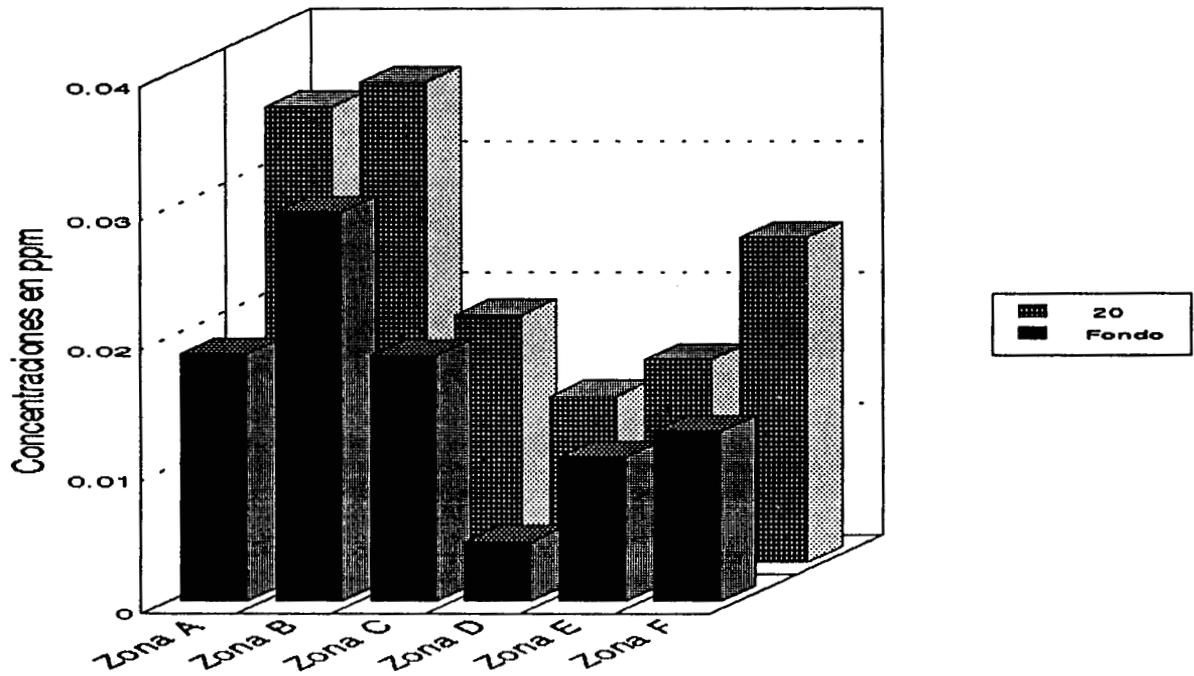


Figura 7.15 Distribución de Cu total en columnas de agua de la presa J.A. Alzate.

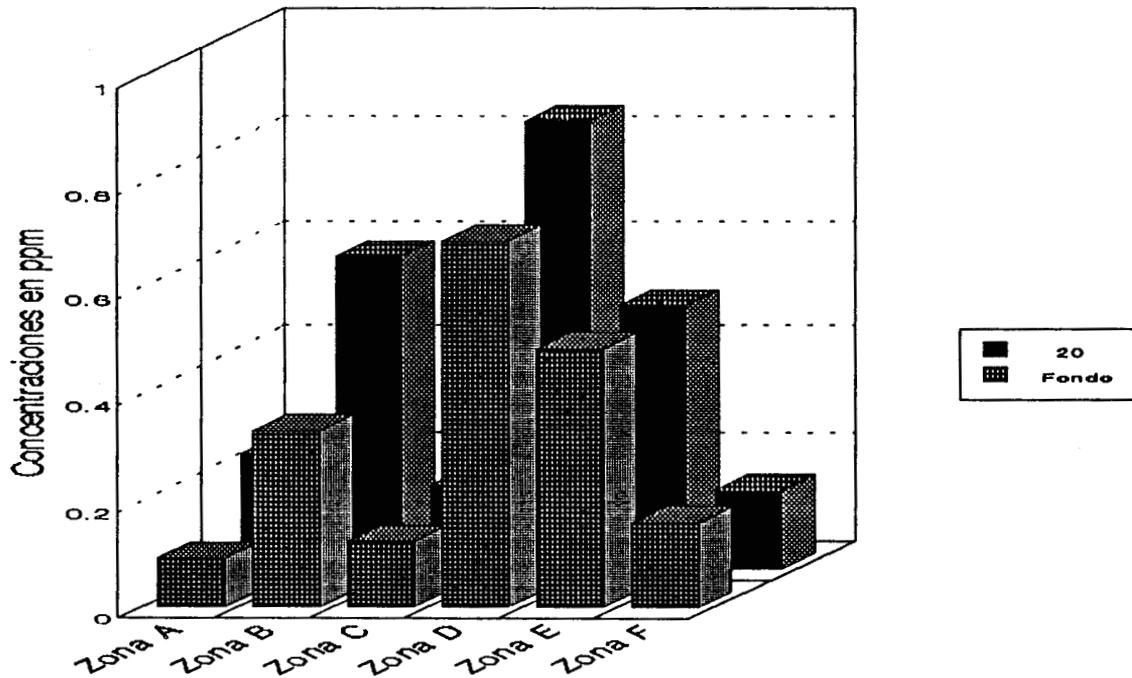


Figura 7.16. Distribución de Fe total en columnas de agua de la presa J. A. Alzate.

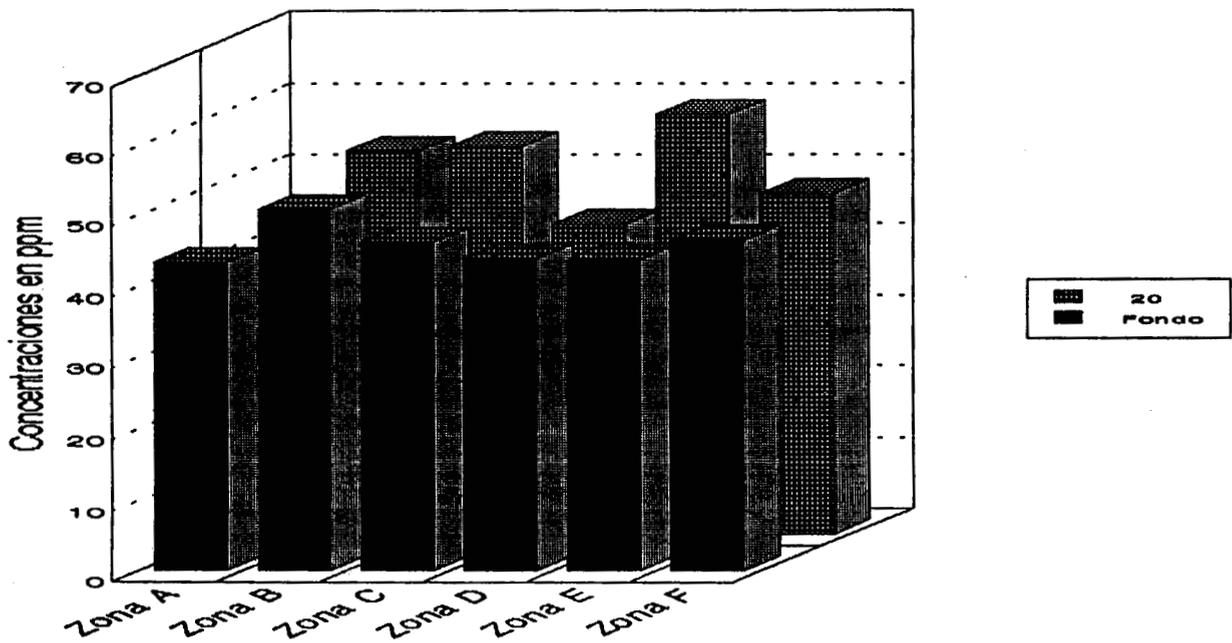


Figura 7.17. Distribución de K total en columnas de agua de la presa J. A. Alzate.

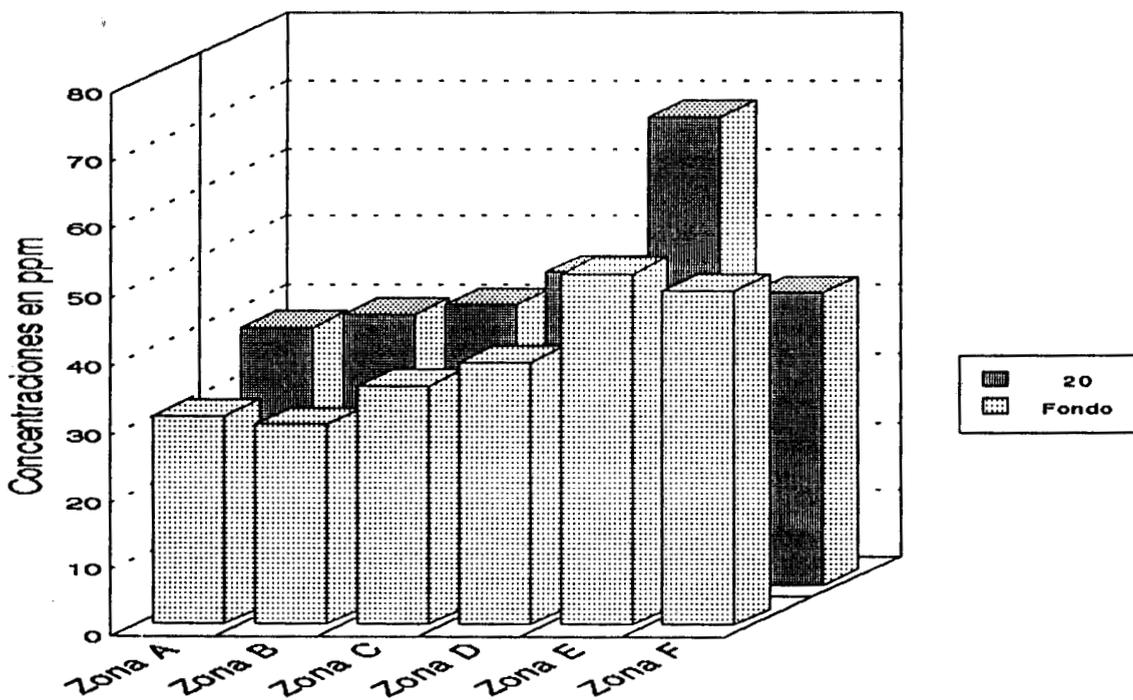


Figura 7.18. Distribución de Mg total en columnas de agua de la presa J. A. Alzate.

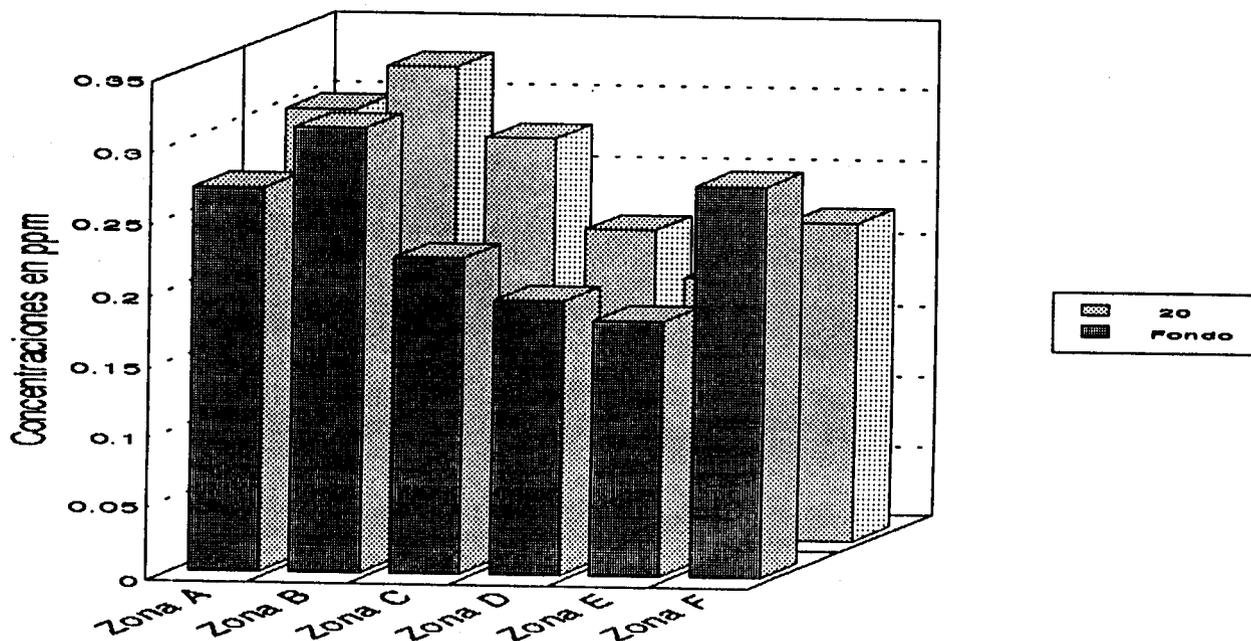


Figura 7.19. Distribución de Mn total en columnas de agua de la presa J. A. Alzate.

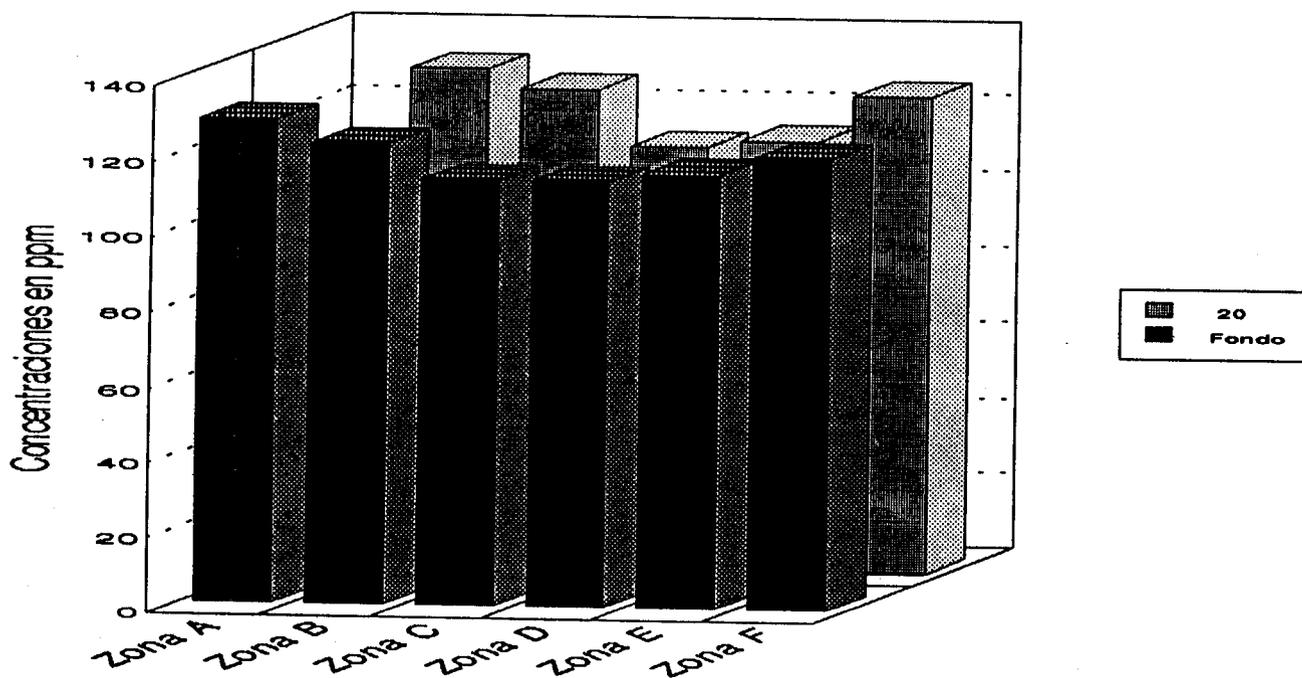


Figura 7.20. Distribución de Na total en columnas de agua de la presa J. A. Alzate.

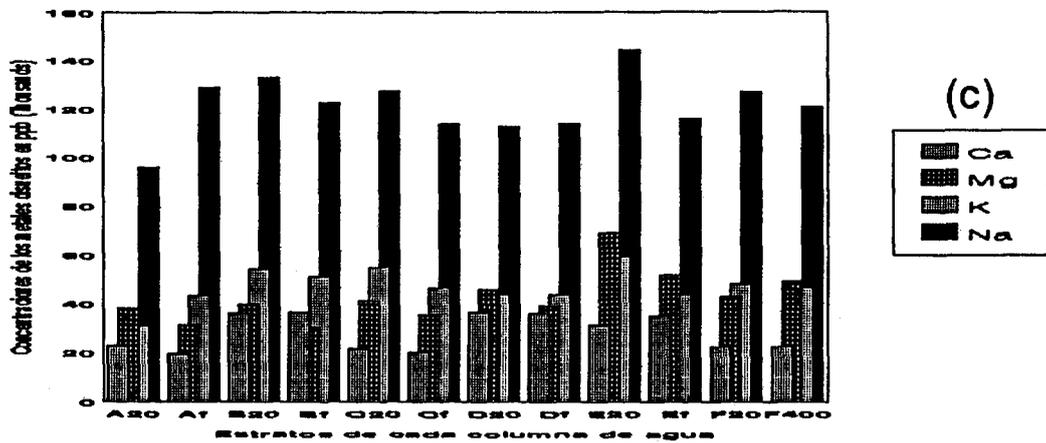
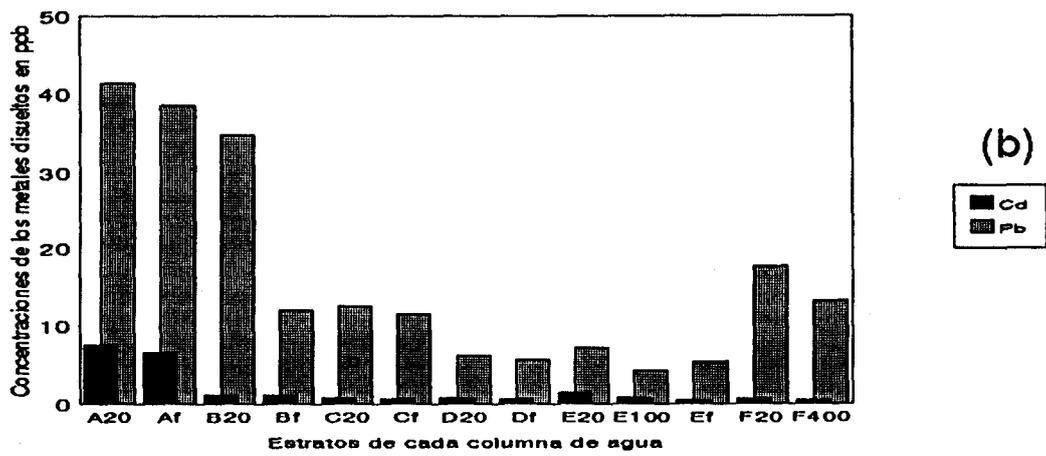
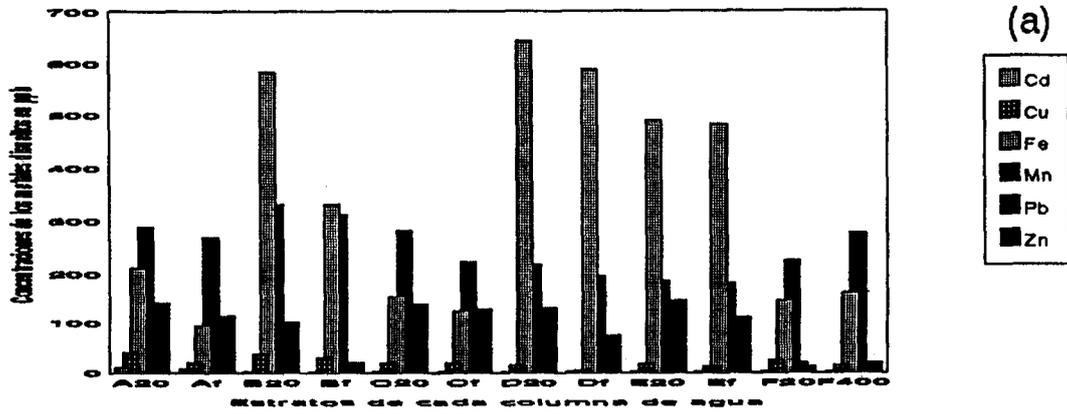


Figura 7.23 Distribución de metales en columnas de agua. (a) metales pesados (Cd, Cu, Fe, Mn, Pb, Zn), (b) Pb y Cd. (c) metales alcalinos y alcalinoterreos (Na, K, Ca, Mg).

#### 7.4 Obtención de los Índices de Saturación de Langelier para evaluar cualitativamente el agua.

El procedimiento para el cálculo del índice de saturación fue el siguiente:

1) Cálculo de la fuerza iónica mediante la ecuación:

$$\mu = 2 [ \text{Cat}^{2+} ] + \frac{1}{2} [ \text{Cat}^{+} ] + 2 [ \text{An}^{2-} ] + \frac{1}{2} [ \text{An}^{-1} ]$$

donde:  $\mu$  = Fortaleza iónica.

$[ \text{Cat}^{2+} ]$  = Concentración molar de cationes ajenos monovalentes.

$[ \text{Cat}^{+} ]$  = Concentración molar de cationes ajenos bivalentes.

$[ \text{An}^{2-} ]$  = Concentración molar de aniones ajenos monovalentes.

$[ \text{An}^{-1} ]$  = Concentración molar de aniones ajenos bivalentes.

2) En base al anterior valor obtenido, se calculó:

$$\xi = \mu^{1/2} / (1 + \mu^{1/2})$$

y

$$\text{pH}_s = 2.09 - \log [ \text{Ca}^{+2} ] - \log [ \text{HCO}_3^{-} ] + 2.5 \xi$$

donde:  $\text{pH}_s$  = pH de saturación.

$[ \text{Ca}^{+2} ]$  = Concentración molar de calcio.

$[ \text{HCO}_3^{-} ]$  = Concentración molar de bicarbonatos.

3) Con los datos obtenidos con las ecuaciones anteriores, se calculó el valor del índice de saturación (Is)

$$\text{Is} = \text{pH}_{\text{real}} - \text{pH}_s$$

recordando que:  $\text{Is} < 0 \Rightarrow$  el agua es agresiva.

$\text{Is} = 0 \Rightarrow$  el agua está en equilibrio.

$\text{Is} > 0 \Rightarrow$  el agua es incrustante.

Con todo lo anterior, finalmente se calculó el índice de saturación para cada zona y profundidad, de las muestras tomadas de la presa Alzate, ver tabla 7.16. En las figuras 7.24 a 7.35 se representa tanto el pH real como el de saturación calculado, finalmente en la figura 7.36 se muestran en un diagrama de equilibrio de Tillmans, la distribución del agua de cada zona en función del  $\text{CO}_2$  real disuelto ( $\text{H}_2\text{CO}_3$ ).

Zona A (0.20 m)

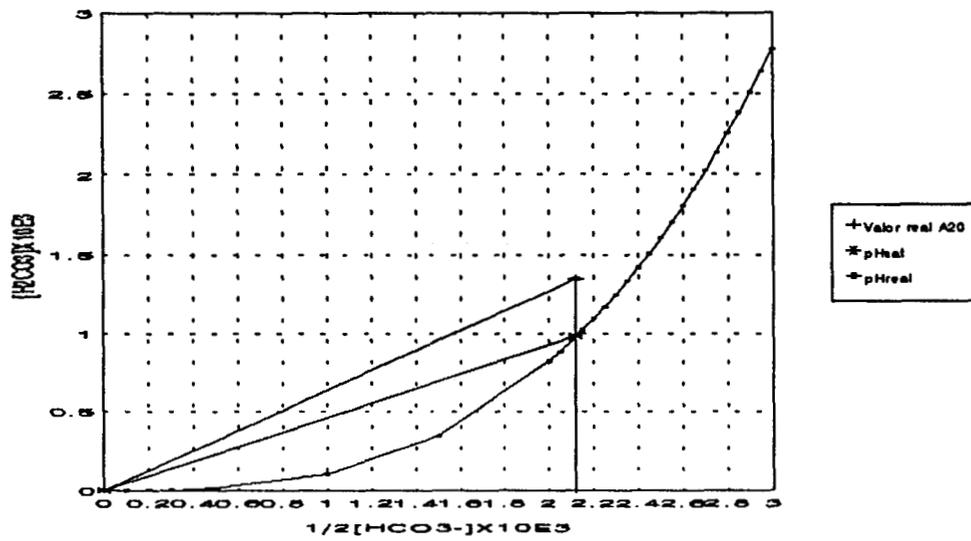


Figura 7.24. Diagrama de Tillmans con pH de saturación para la zona A, profundidad 0.2 m.

Zona A (2.0 m)

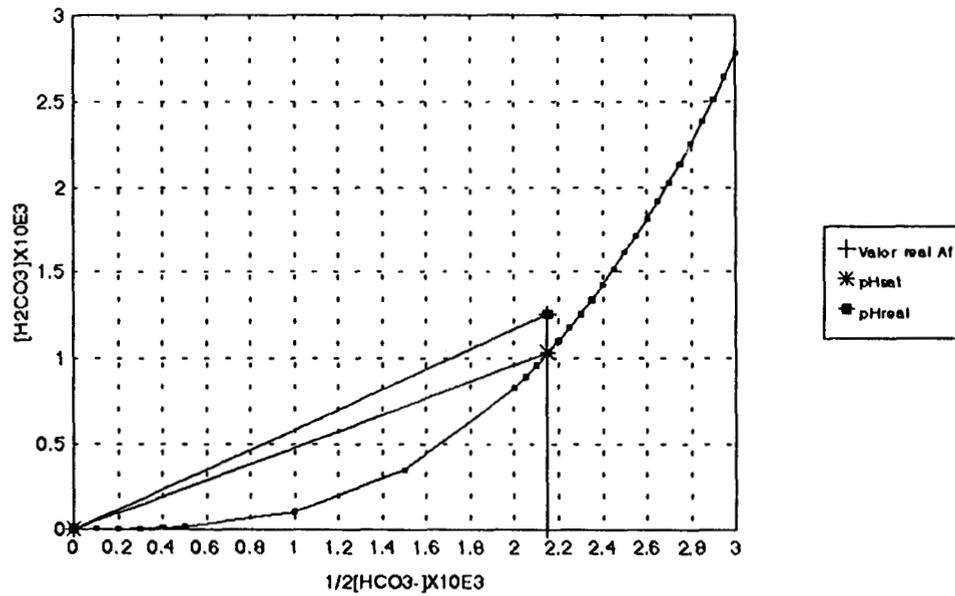


Figura 7.25. Diagrama de Tillmans con pH de saturación para la zona A, profundidad 2.0 m.

Zona B (0.20 m)

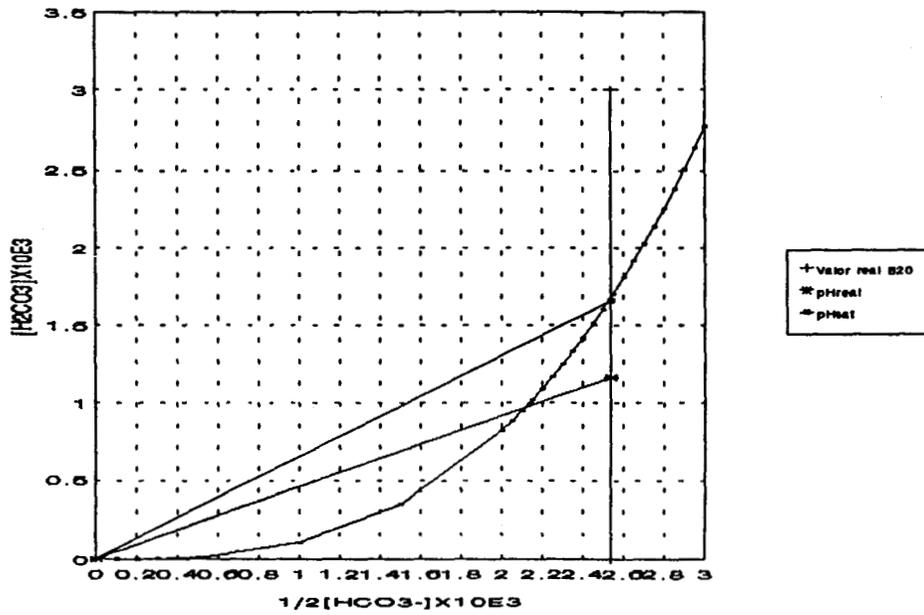


Figura 7.26. Diagrama de Tillmans con pH de saturación para la zona B, profundidad 0.2 m.

Zona B (1.5 m)

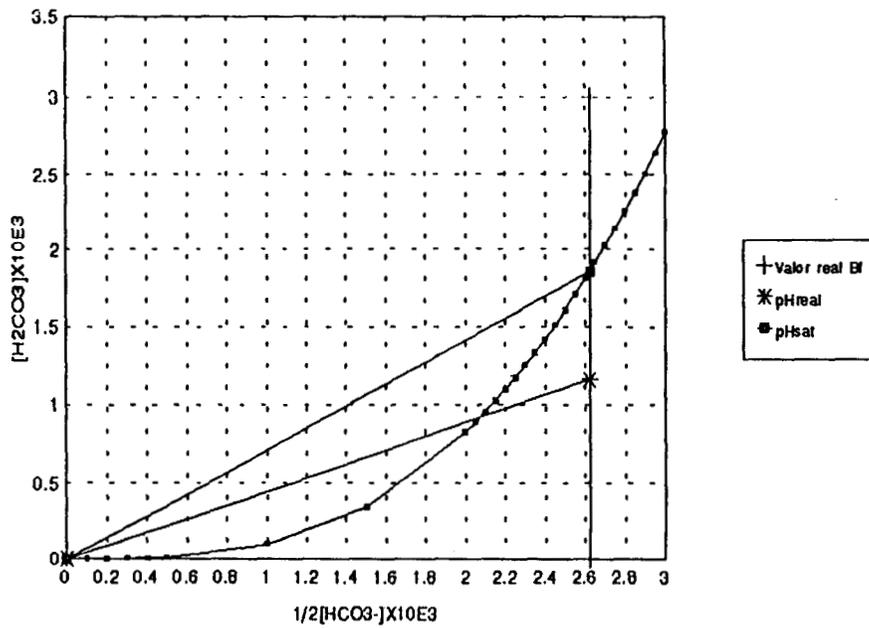


Figura 7.27. Diagrama de Tillmans con pH de saturación para la zona B, profundidad 1.5 m.

Zona C (0.20 m)

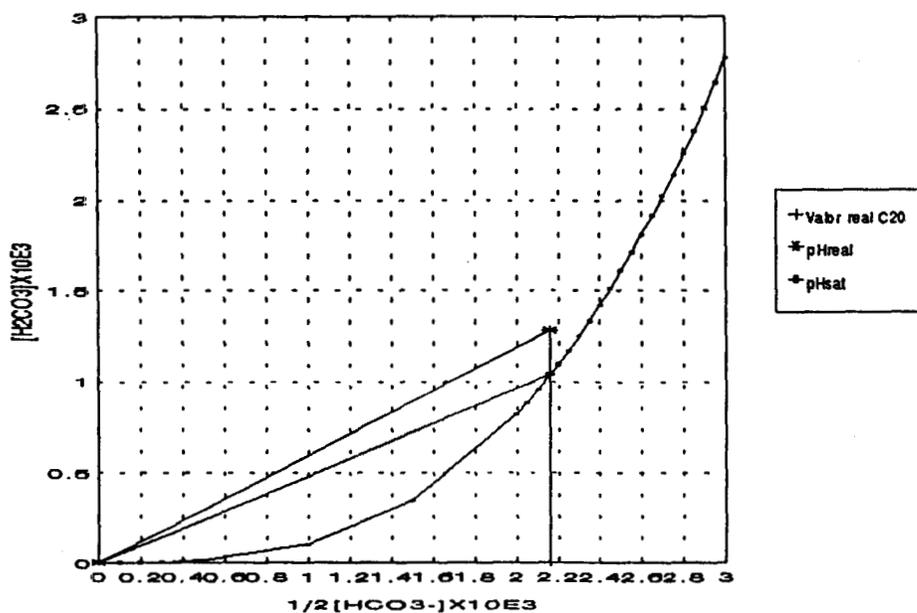


Figura 7.28. Diagrama de Tillmans con pH de saturación para la zona C, profundidad 0.2 m.

Zona C (2.00 m)

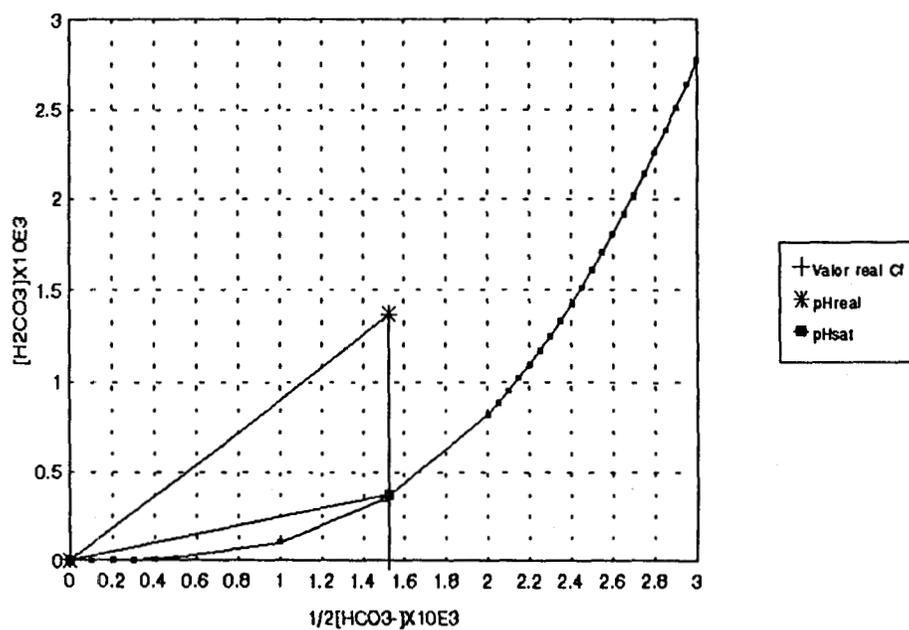


Figura 7.29. Diagrama de Tillmans con pH de saturación para la zona C, profundidad 2.0 m.

Zona D (0.20 m)

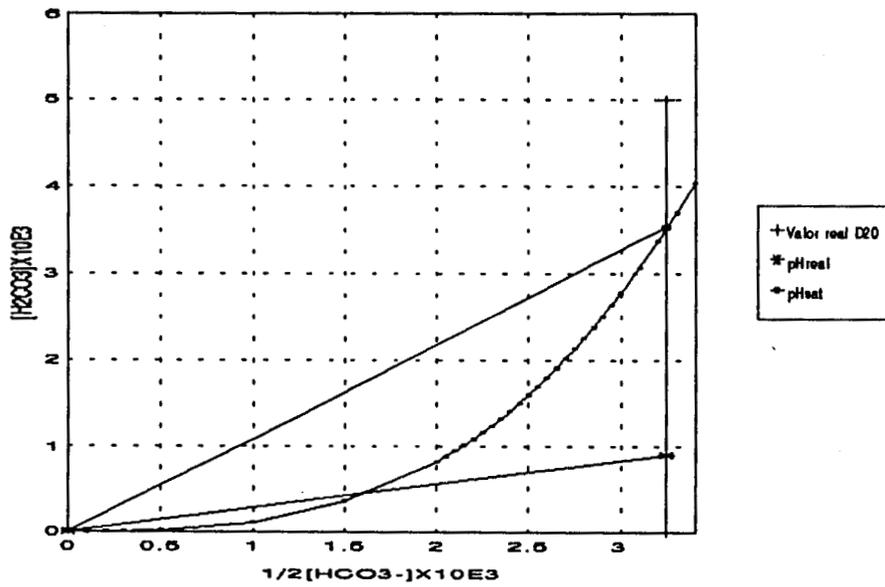


Figura 7.30. Diagrama de Tillmans con pH de saturación para la zona D, profundidad 0.2 m.

Zona D (1.50 m)

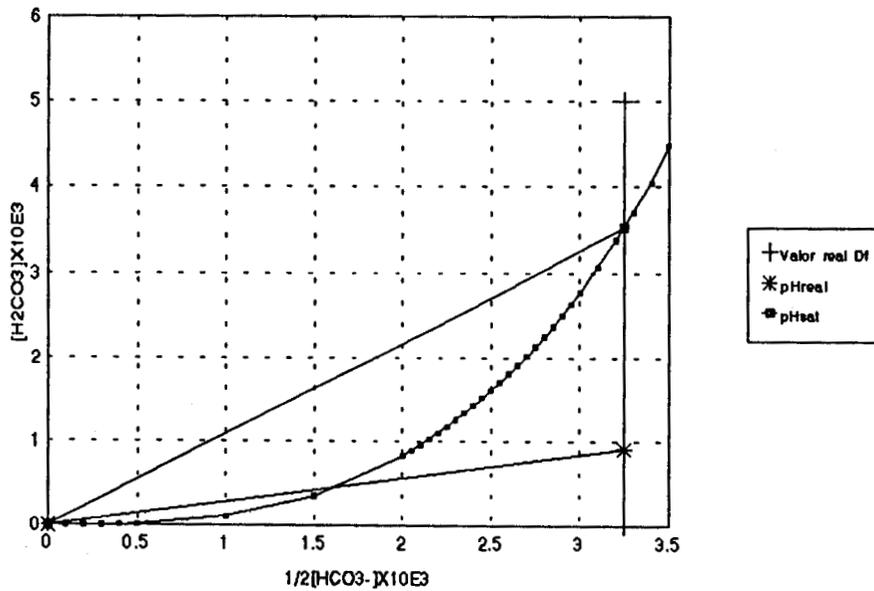


Figura 7.31. Diagrama de Tillmans con pH de saturación para zona D, profundidad 1.5 m.

Zona E (0.20 m)

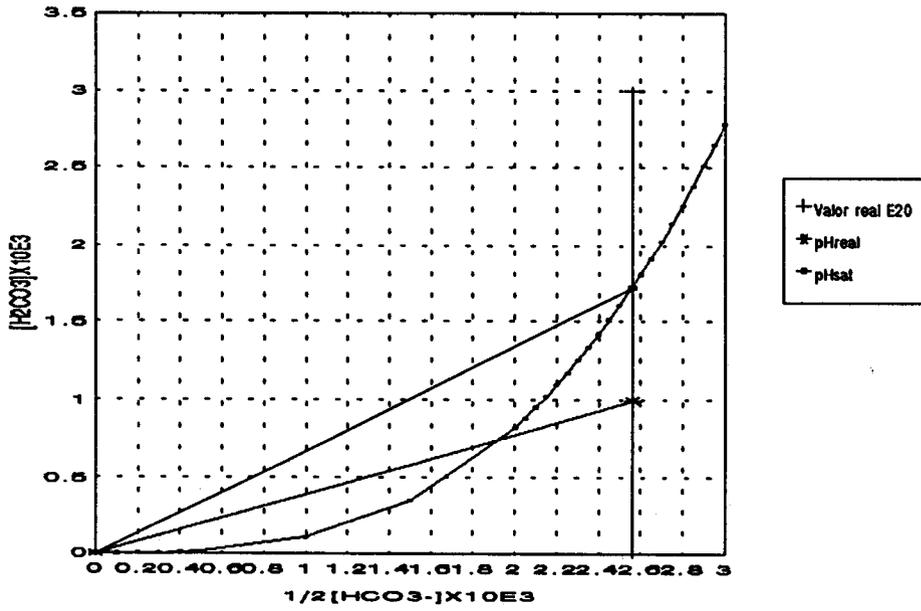


Figura 7.32. Diagrama de Tillmans con pH de saturación para la zona E, profundidad 0.2 m.

Zona E (3.0 m)

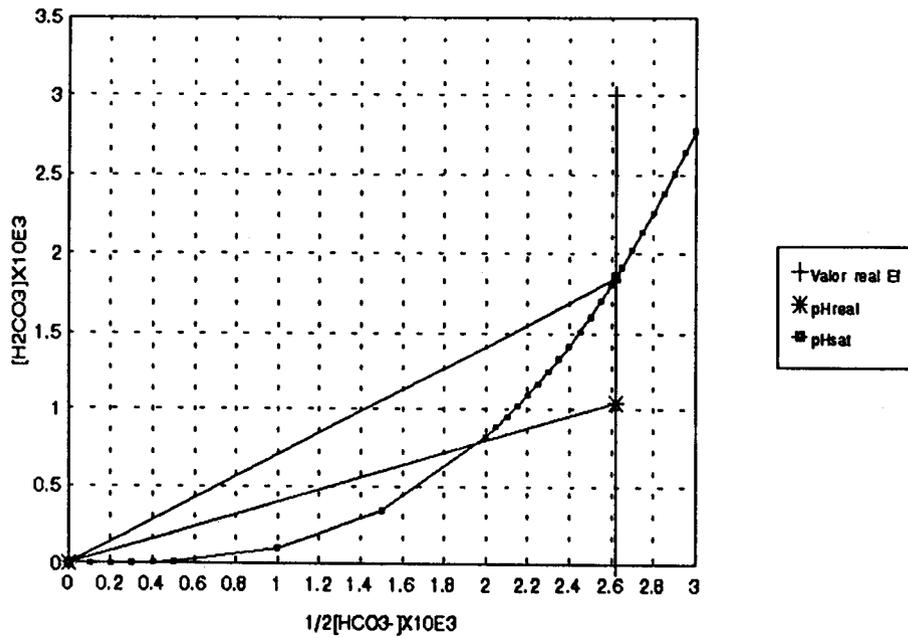


Figura 7.33. Diagrama de Tillmans con pH de saturación para la zona E, profundidad 3.0 m.

Zona F (0.20 m)

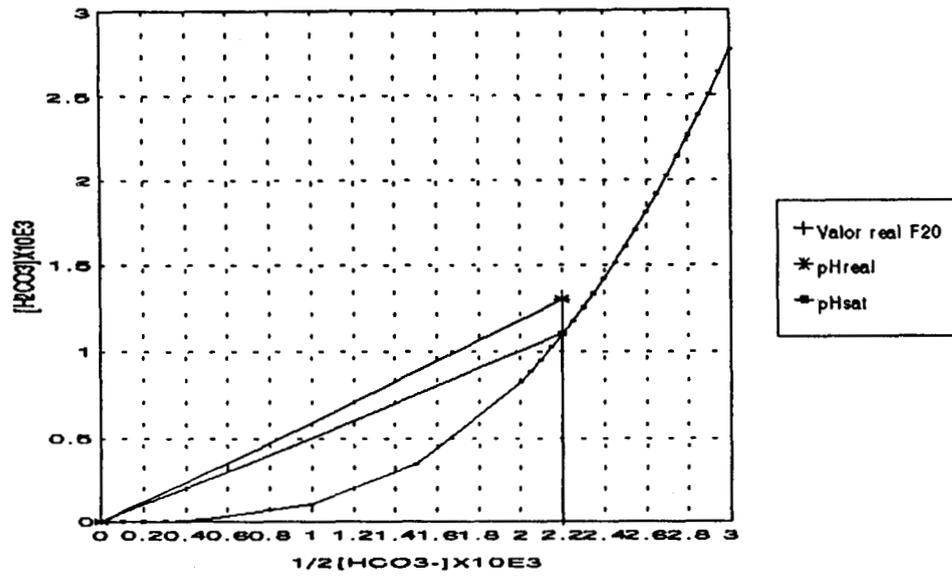


Figura 7.34. Diagrama de Tillmans con pH de saturación para la zona F, profundidad 0.2 m.

Zona F (4.0 m)

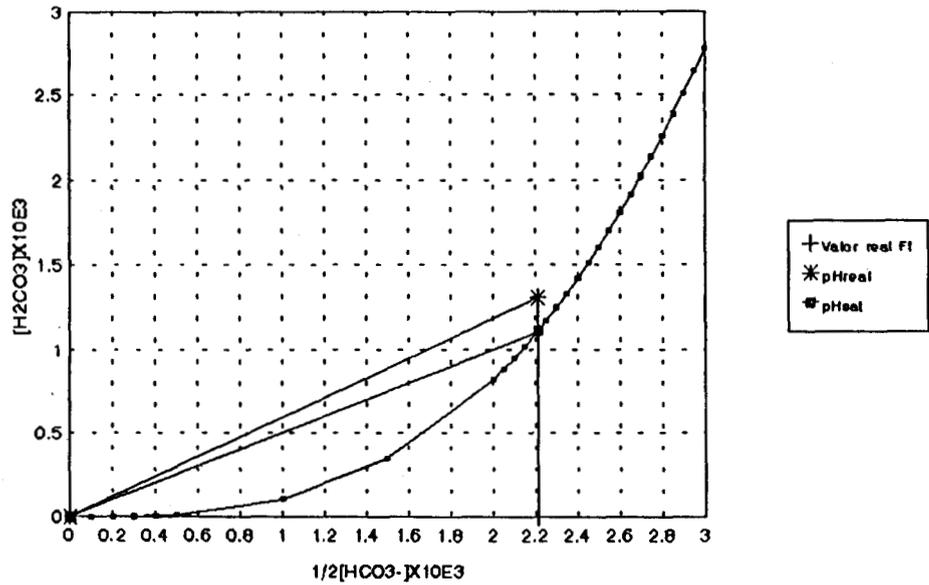
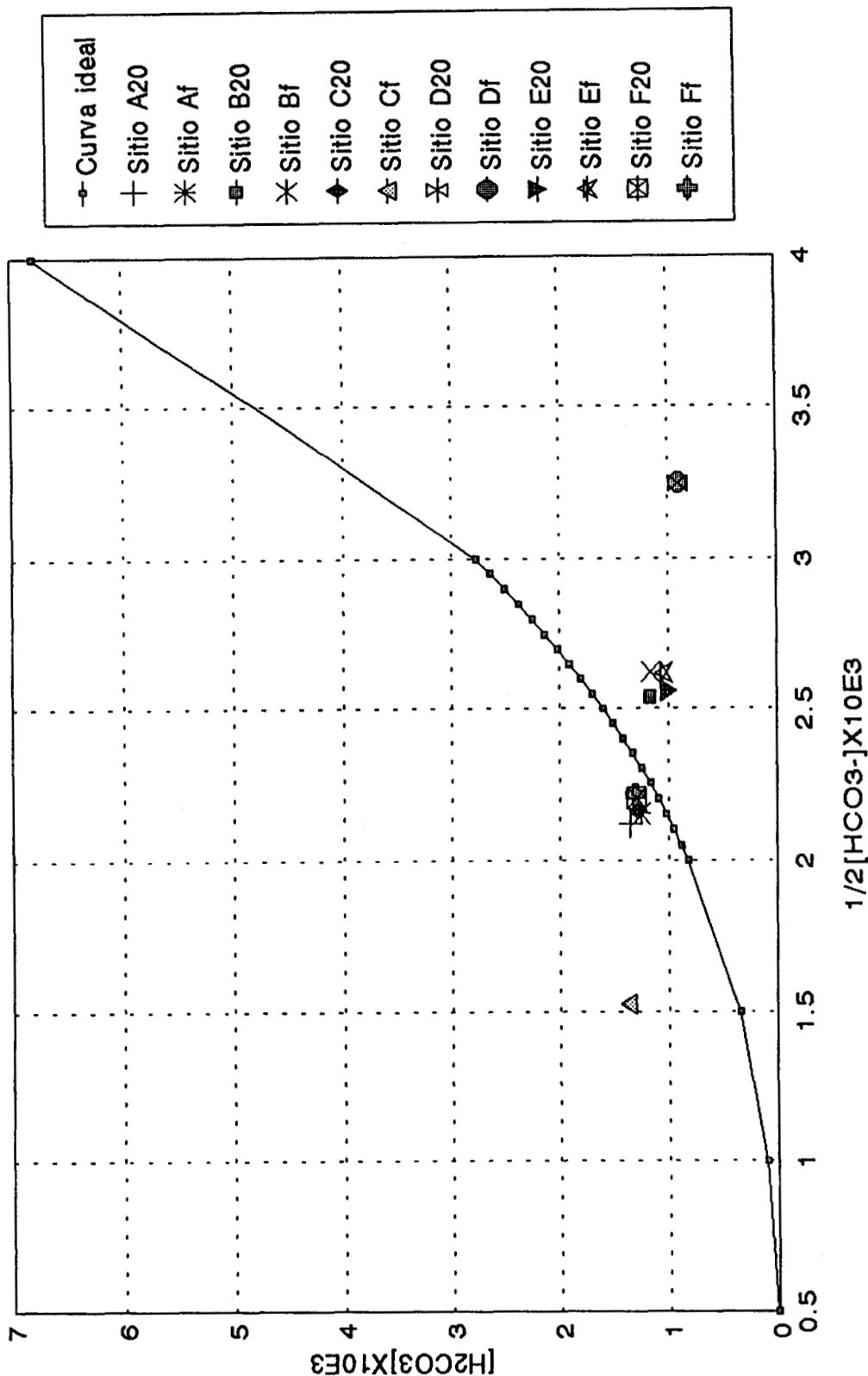


Figura 7.35. Diagrama de Tillmans con pH de saturación para la zona F, profundidad 4.0 m.



- Curva ideal
- + Sitio A20
- \* Sitio Af
- Sitio B20
- ✱ Sitio Bf
- ◆ Sitio C20
- ▲ Sitio Cf
- ⊠ Sitio D20
- Sitio Df
- ▼ Sitio E20
- ★ Sitio Ef
- ⊞ Sitio F20
- ⊣ Sitio Ff

Figura 7.36. Diagrama general de Tillmans con influencia de iones ajenos.

En la figura 7.37 se representa la variación del índice de Langelier en cada columna de agua de cada zona.

Tabla 7.16. Índices de Langelier para muestras de la presa J. A. Alzate.

| SITIO                 | $\mu \times 10^{-3}$ | $\epsilon$ | pHs    | pH <sub>real</sub> | Is      |
|-----------------------|----------------------|------------|--------|--------------------|---------|
| A <sub>20</sub>       | 11.7483              | 0.0874     | 7.9257 | 7.10               | -0.8237 |
| A <sub>F(2.0 m)</sub> | 12.3995              | 0.1002     | 8.0159 | 7.30               | -0.7159 |
| B <sub>20</sub>       | 15.3049              | 0.1101     | 7.6300 | 7.80               | 0.1700  |
| B <sub>F(1.5 m)</sub> | 13.5270              | 0.1042     | 7.5980 | 7.80               | 0.2020  |
| C <sub>20</sub>       | 14.1043              | 0.1061     | 7.9811 | 7.15               | -0.8311 |
| C <sub>F(2.0 m)</sub> | 12.5154              | 0.1006     | 8.1530 | 6.90               | -1.2530 |
| D <sub>20</sub>       | 14.6424              | 0.1079     | 7.5899 | 7.80               | 0.2100  |
| D <sub>F(1.5 m)</sub> | 13.6963              | 0.1048     | 7.5861 | 7.80               | 0.2139  |
| E <sub>20</sub>       | 20.6654              | 0.1257     | 7.7837 | 7.90               | 0.0963  |
| E <sub>F(3.0 m)</sub> | 16.4501              | 0.1137     | 7.7186 | 7.90               | 0.1814  |
| F <sub>20</sub>       | 13.5147              | 0.1041     | 7.9577 | 7.10               | -0.8577 |
| F <sub>F(4.0 m)</sub> | 14.4613              | 0.1073     | 7.9713 | 7.10               | -0.8713 |

### 7.5 Resultados de la agresividad en cada sitio de la presa J. A. Alzate, por medio de fuerza iónica.

Para determinar la agresividad del agua en cada sitio de la presa, se siguieron los pasos que a continuación se indican:

#### 1) Obtención de la fuerza iónica real por sitio.

La fuerza iónica real se calculó con las siguientes fórmulas :

$$\mu = 3 [Ca^{2+}] + A + [CO_3]$$

donde :  $\mu$  = Fortaleza iónica real  
 $[Ca^{2+}]$  = Concentración de calcio (mol/lit)  
 $[CO_3]$  = Concentración de carbonatos.

y

$$A = 3 [Cat^{2+}] + [Cat^+] + [An^{2-}]$$

Nota: no tomar en cuenta la concentración de calcio en los cationes divalentes  $[Cat^{2+}]$

## 2) Obtención de los valores correspondientes al Acido Carbónico ( $\text{H}_2\text{CO}_3$ ) y Bicarbonato ( $\text{HCO}_3^-$ ) en equilibrio.

Las fórmulas utilizadas para calcular la concentración del ácido carbónico y bicarbonatos fueron:

### a) Concentración del ácido carbónico en equilibrio (mol/l).

$$[\text{H}_2\text{CO}_3] = K' (\mu - D)^2 (\mu - A)$$

$$\log K' = 3.59 - 3 \xi$$

$$\xi = \mu^{1/2} / (1 + 0.9 \mu^{1/2})$$

$$D = 4[\text{An}^{2-}] - 1/2[\text{Cat}^+] + 3/2[\text{An}^-]$$

### b) Concentración del bicarbonato en equilibrio (mol/l).

$$[\text{HCO}_3^-] = 2/3 (\mu - D)$$

## 3) Obtención de los valores de la Fortaleza Iónica en equilibrio ( $\mu_{\text{eq}}$ ).

Para calcular las  $\mu_{\text{eq}}$  se recomienda adoptar valores cercanos, un poco más grandes que el valor de  $\mu_{\text{real}}$ , calculado con el agua agresiva, a estos valores se les denominará  $\mu_{\text{prop}}$  (fuerza iónica propuesta).

Los valores de  $\mu_{\text{prop}}$  deben encontrarse tan cerca uno del otro, que nos permita trazar una recta en ese tramo (independientemente de la forma de la curva) sin incurrir en errores apreciables.

Con las  $\mu_{\text{prop}}$  se obtuvieron valores de concentración del ácido carbónico y del bicarbonato propuestos, los cuales se utilizaron para la determinación de la fuerza iónica en equilibrio.

## 4) Obtención del valor de la agresividad.

- $\text{Agr} = 1/3 (\mu_{\text{eq}} - \mu)$
- $\text{Agr} = [\text{Ca}^{2+}]_{\text{eq}} - [\text{Ca}^{2+}]$
- $\text{Agr} = 1/2 ([\text{HCO}_3^-]_{\text{eq}} - [\text{HCO}_3^-])$

Empleando las ecuaciones citadas para procesar los datos mostrados en las tablas 7.4 a la 7.15 se tienen los siguientes resultados:

### Sitio A

Profundidad 0.20 m

| Fuerza iónica real                  |                    |  |
|-------------------------------------|--------------------|--|
| $[\text{Ca}^{2+}]$<br>$\times 10^3$ | A<br>$\times 10^3$ | $\mu$ (fuerza iónica)<br>$\times 10^3$ |
| 0.5724                              | 10.03              | 11.7472                                |

| Concentración de ácido carbónico |                    |                        |                            |         |                       |                            |                                |  |
|----------------------------------|--------------------|------------------------|----------------------------|---------|-----------------------|----------------------------|--------------------------------|--|
| A<br>$\times 10^3$               | D<br>$\times 10^3$ | $\mu$<br>$\times 10^3$ | $\mu - D$<br>$\times 10^3$ | $\xi$   | $K'$<br>$\times 10^3$ | $\mu - A$<br>$\times 10^3$ | $(\mu - D)^2$<br>$\times 10^6$ | $[\text{H}_2\text{CO}_3]$<br>$\times 10^3$ |
| 10.03                            | 5.3912             | 11.7472                | 6.356                      | 0.09875 | 1.9667                | 1.7172                     | 29.065                         | 0.9816                                     |

| Concentración de bicarbonato |                        |                            |                                     |
|------------------------------|------------------------|----------------------------|-------------------------------------|
| D<br>$\times 10^3$           | $\mu$<br>$\times 10^3$ | $\mu - D$<br>$\times 10^3$ | $[\text{HCO}_3^-]$<br>$\times 10^3$ |
| 5.3912                       | 12.3925                | 6.356                      | 4.2373                              |

| Valores de la fortaleza iónica propuestos. | Valores de ácido carbónico obtenidos a partir de $\mu_{\text{prop}}$ . | Valores de bicarbonatos obtenidos a partir de $\mu_{\text{prop}}$ . |
|--|--|---|
| $\mu_{\text{prog}}$<br>$\times 10^3$       | $[\text{H}_2\text{CO}_3]$<br>$\times 10^3$                             | $[\text{HCO}_3^-]$<br>$\times 10^3$                                 |
| 14.0                                       | 0.5470   | 5.7392  |
| 15.0                                       | 0.8333   | 6.4059  |

| Fuerza iónica en equilibrio                |                                     |   |                                     |                               |                               |                    |                        |                          |
|--|-------------------------------------|---|-------------------------------------|-------------------------------|-------------------------------|--------------------|------------------------|--------------------------|
| $[\text{H}_2\text{CO}_3]$<br>$\times 10^3$ | $[\text{HCO}_3^-]$<br>$\times 10^3$ | $y_p$<br>$([\text{HCO}_3^-] + \frac{1}{2}[\text{H}_2\text{CO}_3])$<br>$\times 10^3$ | $x_p$<br>$(\mu_p)$<br>$\times 10^3$ | $\Delta y_p$<br>$\times 10^3$ | $\Delta x_p$<br>$\times 10^3$ | b<br>$\times 10^3$ | $y_r$<br>$\times 10^3$ | $\mu_e$<br>$\times 10^3$ |
| 0.5470                                     | 5.7392                              | 3.4166  | 14.0                                | 0.6196                        | 1.0                           | -5.2578            | 3.4685                 | 14.083                   |
| 0.8333                                     | 6.4059                              | 4.0362  | 15.0                                |                               |                               |                    |                        |                          |

| Agresividad                    |   |  |  |  |   |
|--------------------------------|---|--|--|--|---|
| Agresividad a la fuerza iónica |   | Agresividad al calcio                              |  | Agresividad al bicarbonato                         |   |
| $\mu_e$<br>$\times 10^3$       | $\frac{1}{3}(\mu_e - \mu)$<br>agresividad | $[\text{Ca}^{2+}]_e$<br>$(\frac{1}{3}(\mu_e - A))$ | $[\text{Ca}^{2+}]_e - [\text{Ca}^{2+}]$<br>agresividad | $[\text{HCO}_3^-]_e$<br>$(\frac{2}{3}(\mu_e - D))$ | $\frac{1}{2}([\text{HCO}_3^-]_e - [\text{HCO}_3^-])$<br>agresividad |
| 14.083                         | 0.7786                                    | 1.351  | 0.7786   | 5.7945   | 0.7787  |

Profundidad 2.0 m

| Fuerza iónica real                  |                    |  |
|-------------------------------------|--------------------|--|
| $[\text{Ca}^{2+}]$<br>$\times 10^3$ | A<br>$\times 10^3$ | $\mu$ (fuerza iónica)<br>$\times 10^3$ |
| 0.491                               | 10.9195            | 12.3925                                |

| Concentración de ácido carbónico |                    |                        |                            |        |                       |                            |                                |  |
|----------------------------------|--------------------|------------------------|----------------------------|--------|-----------------------|----------------------------|--------------------------------|--|
| A<br>$\times 10^3$               | D<br>$\times 10^3$ | $\mu$<br>$\times 10^3$ | $\mu - D$<br>$\times 10^3$ | $\xi$  | $K'$<br>$\times 10^3$ | $\mu - A$<br>$\times 10^3$ | $(\mu - D)^2$<br>$\times 10^6$ | $[\text{H}_2\text{CO}_3]$<br>$\times 10^3$ |
| 10.9195                          | 5.953              | 12.3925                | 6.4395                     | 0.1012 | 1.9337                | 1.473                      | 41.467                         | 0.1181                                     |

| Concentración de bicarbonato |                        |                            |                                     |
|------------------------------|------------------------|----------------------------|-------------------------------------|
| D<br>$\times 10^3$           | $\mu$<br>$\times 10^3$ | $\mu - D$<br>$\times 10^3$ | $[\text{HCO}_3^-]$<br>$\times 10^3$ |
| 5.953                        | 12.3925                | 6.4395                     | 4.293                               |

| Valores de la fortaleza iónica propuestos. | Valores de ácido carbónico obtenidos a partir de $\mu_{\text{prop}}$ . | Valores de bicarbonatos obtenidos a partir de $\mu_{\text{prop}}$ . |
|--|--|---|
| $\mu_{\text{prog}}$<br>$\times 10^3$       | $[\text{H}_2\text{CO}_3]$<br>$\times 10^3$                             | $[\text{HCO}_3^-]$<br>$\times 10^3$                                 |
| 15.0                                       | 0.6065   | 6.0313  |
| 16.0                                       | 0.9105   | 6.6980  |

| Fuerza iónica en equilibrio                |                                     |   |                                     |                               |                               |                    |                        |                          |
|--|-------------------------------------|---|-------------------------------------|-------------------------------|-------------------------------|--------------------|------------------------|--------------------------|
| $[\text{H}_2\text{CO}_3]$<br>$\times 10^3$ | $[\text{HCO}_3^-]$<br>$\times 10^3$ | $y_p$<br>$([\text{HCO}_3^-] + \frac{1}{2}[\text{H}_2\text{CO}_3])$<br>$\times 10^3$ | $x_p$<br>$(\mu_p)$<br>$\times 10^3$ | $\Delta y_p$<br>$\times 10^3$ | $\Delta x_p$<br>$\times 10^3$ | b<br>$\times 10^3$ | $y_r$<br>$\times 10^3$ | $\mu_e$<br>$\times 10^3$ |
| 0.6065                                     | 6.0313                              | 3.62215   | 15.0                                |                               |                               |                    |                        |                          |
| 0.9105                                     | 6.698                               | 4.25950   | 16.0                                | 0.6373                        | 1.0                           | -5.9381            | 3.801                  | 15.28                    |

| Agresividad                    |   |  |  |  |   |
|--------------------------------|---|--|--|--|---|
| Agresividad a la fuerza iónica | Agresividad al calcio                     |  | Agresividad al bicarbonato                             |  |   |
| $\mu_e$<br>$\times 10^3$       | $\frac{1}{3}(\mu_e - \mu)$<br>agresividad | $[\text{Ca}^{2+}]_e$<br>$(\frac{1}{3}(\mu_e - A))$ | $[\text{Ca}^{2+}]_e - [\text{Ca}^{2+}]$<br>agresividad | $[\text{HCO}_3^-]_e$<br>$(\frac{2}{3}(\mu_e - D))$ | $\frac{1}{2}([\text{HCO}_3^-]_e - [\text{HCO}_3^-])$<br>agresividad |
| 15.2806                        | 0.9627                                    | 1.4537   | 0.9627   | 6.2184   | 0.9592  |

## Sitio B

Profundidad 0.20 m

| Fuerza iónica real                  |                    |  |
|-------------------------------------|--------------------|--|
| $[\text{Ca}^{2+}]$<br>$\times 10^3$ | A<br>$\times 10^3$ | $\mu$ (fuerza iónica)<br>$\times 10^3$ |
| 0.890                               | 12.6347            | 15.3047                                |

| Concentración de ácido carbónico |                    |                        |                            |        |                       |                            |                                |  |
|----------------------------------|--------------------|------------------------|----------------------------|--------|-----------------------|----------------------------|--------------------------------|--|
| A<br>$\times 10^3$               | D<br>$\times 10^3$ | $\mu$<br>$\times 10^3$ | $\mu - D$<br>$\times 10^3$ | $\xi$  | $K'$<br>$\times 10^3$ | $\mu - A$<br>$\times 10^3$ | $(\mu - D)^2$<br>$\times 10^6$ | $[\text{H}_2\text{CO}_3]$<br>$\times 10^3$ |
| 12.6347                          | 6.1898             | 15.3047                | 9.1149                     | 0.1113 | 1803.2                | 2.670                      | 83.0814                        | 0.400                                      |

| Concentración de bicarbonato |                        |                            |                                     |
|------------------------------|------------------------|----------------------------|-------------------------------------|
| D<br>$\times 10^3$           | $\mu$<br>$\times 10^3$ | $\mu - D$<br>$\times 10^3$ | $[\text{HCO}_3^-]$<br>$\times 10^3$ |
| 6.1898                       | 15.3047                | 9.1149                     | 6.0766                              |

| Valores de la fortaleza iónica propuestos. | Valores de ácido carbónico obtenidos a partir de $\mu_{\text{prop}}$ . | Valores de bicarbonatos obtenidos a partir de $\mu_{\text{prop}}$ . |
|--|--|---|
| $\mu_{\text{prog}}$<br>$\times 10^3$       | $[\text{H}_2\text{CO}_3]$<br>$\times 10^3$                             | $[\text{HCO}_3^-]$<br>$\times 10^3$                                 |
| 16.0                                       | 0.5750   | 6.5400  |
| 17.0                                       | 0.8863   | 7.2068  |

| Fuerza iónica en equilibrio                |                                     |   |                                     |                               |                               |                    |                        |                          |
|--|-------------------------------------|---|-------------------------------------|-------------------------------|-------------------------------|--------------------|------------------------|--------------------------|
| $[\text{H}_2\text{CO}_3]$<br>$\times 10^3$ | $[\text{HCO}_3^-]$<br>$\times 10^3$ | $y_p$<br>$([\text{HCO}_3^-] + \frac{1}{2}[\text{H}_2\text{CO}_3])$<br>$\times 10^3$ | $x_p$<br>$(\mu_p)$<br>$\times 10^3$ | $\Delta y_p$<br>$\times 10^3$ | $\Delta x_p$<br>$\times 10^3$ | b<br>$\times 10^3$ | $y_r$<br>$\times 10^3$ | $\mu_e$<br>$\times 10^3$ |
| 0.5750                                     | 6.5400                              | 3.8450  | 16.0                                | 0.6447                        | 1.0                           | -6.4702            | 4.1065                 | 16.4056                  |
| 0.8863                                     | 7.2068                              | 4.4897  | 17.0                                |                               |                               |                    |                        |                          |

| Agresividad                    |   |  |  |  |   |
|--------------------------------|---|--|--|--|---|
| Agresividad a la fuerza iónica |   | Agresividad al calcio                              |  | Agresividad al bicarbonato                         |   |
| $\mu_e$<br>$\times 10^3$       | $\frac{1}{3}(\mu_e - \mu)$<br>agresividad | $[\text{Ca}^{2+}]_e$<br>$(\frac{1}{3}(\mu_e - A))$ | $[\text{Ca}^{2+}]_e - [\text{Ca}^{2+}]$<br>agresividad | $[\text{HCO}_3^-]_e$<br>$(\frac{2}{3}(\mu_e - D))$ | $\frac{1}{2}([\text{HCO}_3^-]_e - [\text{HCO}_3^-])$<br>agresividad |
| 16.4056                        | 0.3669                                    | 1.25695  | 0.3669   | 6.8105   | 0.3668  |

Profundidad 1.5 m

| Fuerza iónica real                  |                    |  |
|-------------------------------------|--------------------|--|
| $[\text{Ca}^{2+}]$<br>$\times 10^3$ | A<br>$\times 10^3$ | $\mu$ (fuerza iónica)<br>$\times 10^3$ |
| 0.905                               | 10.8120            | 13.5270                                |

| Concentración de ácido carbónico |                    |                        |                            |        |                       |                            |                                |  |
|----------------------------------|--------------------|------------------------|----------------------------|--------|-----------------------|----------------------------|--------------------------------|--|
| A<br>$\times 10^3$               | D<br>$\times 10^3$ | $\mu$<br>$\times 10^3$ | $\mu - D$<br>$\times 10^3$ | $\xi$  | $K'$<br>$\times 10^3$ | $\mu - A$<br>$\times 10^3$ | $(\mu - D)^2$<br>$\times 10^6$ | $[\text{H}_2\text{CO}_3]$<br>$\times 10^3$ |
| 10.8120                          | 4.1565             | 13.5270                | 9.3705                     | 0.1053 | 1879.8                | 2.7150                     | 87.8063                        | 0.4481                                     |

| Concentración de bicarbonato |                        |                            |                                     |
|------------------------------|------------------------|----------------------------|-------------------------------------|
| D<br>$\times 10^3$           | $\mu$<br>$\times 10^3$ | $\mu - D$<br>$\times 10^3$ | $[\text{HCO}_3^-]$<br>$\times 10^3$ |
| 4.1565                       | 13.5270                | 9.3705                     | 6.2470                              |

| Valores de la fortaleza iónica propuestos. | Valores de ácido carbónico obtenidos a partir de $\mu_{\text{prop.}}$ | Valores de bicarbonatos obtenidos a partir de $\mu_{\text{prop.}}$ |
|--|---|--|
| $\mu_{\text{prop}}$<br>$\times 10^3$       | $[\text{H}_2\text{CO}_3]$<br>$\times 10^3$                            | $[\text{HCO}_3^-]$<br>$\times 10^3$                                |
| 14.0                                       | 0.5741  | 6.5632   |
| 15.0                                       | 0.8942  | 7.2290   |

| Fuerza iónica en equilibrio                |                                     |   |                                     |                               |                               |                    |                        |                          |
|--|-------------------------------------|---|-------------------------------------|-------------------------------|-------------------------------|--------------------|------------------------|--------------------------|
| $[\text{H}_2\text{CO}_3]$<br>$\times 10^3$ | $[\text{HCO}_3^-]$<br>$\times 10^3$ | $y_p$<br>$([\text{HCO}_3^-] + \frac{1}{2}[\text{H}_2\text{CO}_3])$<br>$\times 10^3$ | $x_p$<br>$(\mu_p)$<br>$\times 10^3$ | $\Delta y_p$<br>$\times 10^3$ | $\Delta x_p$<br>$\times 10^3$ | b<br>$\times 10^3$ | $y_r$<br>$\times 10^3$ | $\mu_e$<br>$\times 10^3$ |
| 0.5741                                     | 6.5632                              | 3.8557  | 14.0                                | 0.6530                        | 1.0                           | -5.2863            | 4.1825                 | 14.5005                  |
| 0.8942                                     | 7.2290                              | 4.5087  | 15.0                                |                               |                               |                    |                        |                          |

| Agresividad                    |   |  |  |  |   |
|--------------------------------|---|--|--|--|---|
| Agresividad a la fuerza iónica |   | Agresividad al calcio                              |  | Agresividad al bicarbonato                         |   |
| $\mu_e$<br>$\times 10^3$       | $\frac{1}{3}(\mu_e - \mu)$<br>agresividad | $[\text{Ca}^{2+}]_e$<br>$(\frac{1}{3}(\mu_e - A))$ | $[\text{Ca}^{2+}]_e - [\text{Ca}^{2+}]$<br>agresividad | $[\text{HCO}_3^-]_e$<br>$(\frac{2}{3}(\mu_e - D))$ | $\frac{1}{6}([\text{HCO}_3^-]_e - [\text{HCO}_3^-])$<br>agresividad |
| 14.5005                        | 0.3245                                    | 1.2295   | 0.3245   | 6.895973   | 0.3245  |

## SITIO C

Profundidad 0.2 m

| Fuerza iónica                       |                    |  |
|-------------------------------------|--------------------|--|
| $[\text{Ca}^{2+}]$<br>$\times 10^3$ | A<br>$\times 10^3$ | $\mu$ (fuerza iónica)<br>$\times 10^3$ |
| 0.548                               | 12.4602            | 14.1042                                |

| Concentración de ácido carbónico |                    |                        |                            |        |                       |                            |                                |  |
|----------------------------------|--------------------|------------------------|----------------------------|--------|-----------------------|----------------------------|--------------------------------|--|
| A<br>$\times 10^3$               | D<br>$\times 10^3$ | $\mu$<br>$\times 10^3$ | $\mu - D$<br>$\times 10^3$ | $\xi$  | $K'$<br>$\times 10^3$ | $\mu - A$<br>$\times 10^3$ | $(\mu - D)^2$<br>$\times 10^6$ | $[\text{H}_2\text{CO}_3]$<br>$\times 10^3$ |
| 12.4602                          | 7.6243             | 14.1042                | 6.4799                     | 0.1073 | 1.854                 | 1.644                      | 41.989                         | 0.128                                      |

| Concentración de bicarbonato |                        |                            |                                     |
|------------------------------|------------------------|----------------------------|-------------------------------------|
| D<br>$\times 10^3$           | $\mu$<br>$\times 10^3$ | $\mu - D$<br>$\times 10^3$ | $[\text{HCO}_3^-]$<br>$\times 10^3$ |
| 7.6243                       | 14.1042                | 6.4799                     | 4.3199                              |

| Valores de la fortaleza iónica propuestos. | Valores de ácido carbónico obtenidos a partir de $\mu_{\text{prop}}$ . | Valores de bicarbonatos obtenidos a partir de $\mu_{\text{prop}}$ . |
|--|--|---|
| $\mu_{\text{prop}}$<br>$\times 10^3$       | $[\text{H}_2\text{CO}_3]$<br>$\times 10^3$                             | $[\text{HCO}_3^-]$<br>$\times 10^3$                                 |
| 16.0                                       | 0.4409   | 5.5838  |
| 17.0                                       | 0.6933   | 6.2505  |

| Fuerza iónica en equilibrio                |                                     |   |                                     |                               |                               |                    |                        |                          |
|--|-------------------------------------|---|-------------------------------------|-------------------------------|-------------------------------|--------------------|------------------------|--------------------------|
| $[\text{H}_2\text{CO}_3]$<br>$\times 10^3$ | $[\text{HCO}_3^-]$<br>$\times 10^3$ | $y_p$<br>$([\text{HCO}_3^-] + \frac{1}{2}[\text{H}_2\text{CO}_3])$<br>$\times 10^3$ | $x_p$<br>$(\mu_p)$<br>$\times 10^3$ | $\Delta y_p$<br>$\times 10^3$ | $\Delta x_p$<br>$\times 10^3$ | b<br>$\times 10^3$ | $y_r$<br>$\times 10^3$ | $\mu_e$<br>$\times 10^3$ |
| 0.4409                                     | 5.5838                              | 3.23280   | 16.0                                | 0.5857                        | 1.0                           | -6.1392            | 3.445                  | 16.362                   |
| 0.6933                                     | 6.2505                              | 3.81855   | 17.0                                |                               |                               |                    |                        |                          |

| Agresividad                    |   |  |  |  |   |
|--------------------------------|---|--|--|--|---|
| Agresividad a la fuerza iónica |   | Agresividad al calcio                              |  | Agresividad al bicarbonato                         |   |
| $\mu_e$<br>$\times 10^3$       | $\frac{1}{3}(\mu_e - \mu)$<br>agresividad | $[\text{Ca}^{2+}]_e$<br>$(\frac{1}{3}(\mu_e - A))$ | $[\text{Ca}^{2+}]_e - [\text{Ca}^{2+}]$<br>agresividad | $[\text{HCO}_3^-]_e$<br>$(\frac{2}{3}(\mu_e - D))$ | $\frac{1}{2}([\text{HCO}_3^-]_e - [\text{HCO}_3^-])$<br>agresividad |
| 16.3623                        | 0.7527                                    | 1.3007   | 0.7527   | 5.8253   | 0.75267   |

## Profundidad 2.0 m

| Fuerza iónica                |                    |  |
|------------------------------|--------------------|--|
| $[Ca^{2+}]$<br>$\times 10^3$ | A<br>$\times 10^3$ | $\mu$ (fuerza iónica)<br>$\times 10^3$ |
| 0.506                        | 10.9974            | 12.5154                                |

| Concentración de ácido carbónico |                    |                        |                            |        |                       |                            |                                |                              |
|----------------------------------|--------------------|------------------------|----------------------------|--------|-----------------------|----------------------------|--------------------------------|------------------------------|
| A<br>$\times 10^3$               | D<br>$\times 10^3$ | $\mu$<br>$\times 10^3$ | $\mu - D$<br>$\times 10^3$ | $\xi$  | $K'$<br>$\times 10^3$ | $\mu - A$<br>$\times 10^3$ | $(\mu - D)^2$<br>$\times 10^6$ | $[H_2CO_3]$<br>$\times 10^3$ |
| 10.9974                          | 7.9404             | 12.5154                | 4.575                      | 0.1016 | 1.9359                | 1.518                      | 20.931                         | 0.0615                       |

| Concentración de bicarbonato |                        |                            |                              |
|------------------------------|------------------------|----------------------------|------------------------------|
| D<br>$\times 10^3$           | $\mu$<br>$\times 10^3$ | $\mu - D$<br>$\times 10^3$ | $[HCO_3^-]$<br>$\times 10^3$ |
| 7.9404                       | 12.5154                | 4.575                      | 3.05                         |

| Valores de la fortaleza iónica propuestos. | Valores de ácido carbónico obtenidos a partir de $\mu_{prop}$ . | Valores de bicarbonatos obtenidos a partir de $\mu_{prop}$ . |
|--|---|--|
| $\mu_{prop}$<br>$\times 10^3$              | $[H_2CO_3]$<br>$\times 10^3$                                    | $[HCO_3^-]$<br>$\times 10^3$                                 |
| 15.0                                       | 0.3623  | 4.7064   |
| 16.0                                       | 0.5769  | 5.3730   |

| Fuerza iónica en equilibrio  |                              |  |                                     |                                  |                                  |                    |                        |                          |
|------------------------------|------------------------------|--|-------------------------------------|----------------------------------|----------------------------------|--------------------|------------------------|--------------------------|
| $[H_2CO_3]$<br>$\times 10^3$ | $[HCO_3^-]$<br>$\times 10^3$ | $y_p$<br>$([HCO_3^-] + \frac{1}{2}[H_2CO_3])$<br>$\times 10^3$ | $x_p$<br>$(\mu_p)$<br>$\times 10^3$ | $\Delta y_{p3}$<br>$\times 10^3$ | $\Delta x_{p3}$<br>$\times 10^3$ | b<br>$\times 10^3$ | $y_r$<br>$\times 10^3$ | $\mu_e$<br>$\times 10^3$ |
| 0.3623                       | 4.7064                       | 2.7155   | 15.0                                | 0.5479                           | 1.0                              | -5.503             | 2.846                  | 15.238                   |
| 0.5769                       | 5.3730                       | 3.2634   | 16.0                                |                                  |                                  |                    |                        |                          |

| Agresividad                    |   |   |  |   |   |
|--------------------------------|---|---|--|---|---|
| Agresividad a la fuerza iónica |   | Agresividad al calcio                       |  | Agresividad al bicarbonato                  |   |
| $\mu_e$<br>$\times 10^3$       | $\frac{1}{3}(\mu_e - \mu)$<br>agresividad | $[Ca^{2+}]_e$<br>$(\frac{1}{3}(\mu_e - A))$ | $[Ca^{2+}]_e - [Ca^{2+}]$<br>agresividad | $[HCO_3^-]_e$<br>$(\frac{2}{3}(\mu_e - D))$ | $\frac{1}{2}([HCO_3^-]_e - [HCO_3^-])$<br>agresividad |
| 15.238                         | 0.9076                                    | 1.4135                                      | 0.90753                                  | 4.8651                                      | 0.90755   |

## SITIO D

Profundidad 0.2 m

| Fuerza iónica                       |                    |  |
|-------------------------------------|--------------------|--|
| $[\text{Ca}^{2+}]$<br>$\times 10^3$ | A<br>$\times 10^3$ | $\mu$ (fuerza iónica)<br>$\times 10^3$ |
| 0.907                               | 11.9214            | 14.6424                                |

| Concentración de ácido carbónico |                    |                        |                            |        |                       |                            |                                |  |
|----------------------------------|--------------------|------------------------|----------------------------|--------|-----------------------|----------------------------|--------------------------------|--|
| A<br>$\times 10^3$               | D<br>$\times 10^3$ | $\mu$<br>$\times 10^3$ | $\mu - D$<br>$\times 10^3$ | $\xi$  | $K'$<br>$\times 10^3$ | $\mu - A$<br>$\times 10^3$ | $(\mu - D)^2$<br>$\times 10^6$ | $[\text{H}_2\text{CO}_3]$<br>$\times 10^3$ |
| 11.9214                          | 4.9055             | 14.6424                | 9.7369                     | 0.1091 | 1830.8                | 2.7210                     | 94.8080                        | 0.4723                                     |

| Concentración de bicarbonato |                        |                            |                                     |
|------------------------------|------------------------|----------------------------|-------------------------------------|
| D<br>$\times 10^3$           | $\mu$<br>$\times 10^3$ | $\mu - D$<br>$\times 10^3$ | $[\text{HCO}_3^-]$<br>$\times 10^3$ |
| 4.9055                       | 14.6424                | 9.7369                     | 6.49192                             |

| Valores de la fortaleza iónica propuestos. | Valores de ácido carbónico obtenidos a partir de $\mu_{\text{prop}}$ . | Valores de bicarbonatos obtenidos a partir de $\mu_{\text{prop}}$ . |
|--|--|---|
| $\mu_{\text{prop}}$<br>$\times 10^3$       | $[\text{H}_2\text{CO}_3]$<br>$\times 10^3$                             | $[\text{HCO}_3^-]$<br>$\times 10^3$                                 |
| 15.0                                       | 0.56968  | 6.72967   |
| 16.0                                       | 0.89129  | 7.39633   |

| Fuerza iónica en equilibrio                |                                     |   |                                     |                               |                               |                    |                        |                          |
|--|-------------------------------------|---|-------------------------------------|-------------------------------|-------------------------------|--------------------|------------------------|--------------------------|
| $[\text{H}_2\text{CO}_3]$<br>$\times 10^3$ | $[\text{HCO}_3^-]$<br>$\times 10^3$ | $y_p$<br>$([\text{HCO}_3^-] + \frac{1}{4}[\text{H}_2\text{CO}_3])$<br>$\times 10^3$ | $x_p$<br>$(\mu_p)$<br>$\times 10^3$ | $\Delta y_p$<br>$\times 10^3$ | $\Delta x_p$<br>$\times 10^3$ | b<br>$\times 10^3$ | $y_r$<br>$\times 10^3$ | $\mu_e$<br>$\times 10^3$ |
| 0.56968                                    | 6.7297                              | 3.9345  | 15.0                                |                               |                               |                    |                        |                          |
| 0.89129                                    | 7.3963                              | 4.5894  | 16.0                                | 0.6549                        | 1.0                           | -5.8896            | 4.1486                 | 15.3269                  |

| Agresividad                    |   |  |  |  |   |
|--------------------------------|---|--|--|--|---|
| Agresividad a la fuerza iónica |   | Agresividad al calcio                              |  | Agresividad al bicarbonato                         |   |
| $\mu_e$<br>$\times 10^3$       | $\frac{1}{3}(\mu_e - \mu)$<br>agresividad | $[\text{Ca}^{2+}]_e$<br>$(\frac{1}{3}(\mu_e - A))$ | $[\text{Ca}^{2+}]_e - [\text{Ca}^{2+}]$<br>agresividad | $[\text{HCO}_3^-]_e$<br>$(\frac{2}{3}(\mu_e - D))$ | $\frac{1}{2}([\text{HCO}_3^-]_e - [\text{HCO}_3^-])$<br>agresividad |
| 15.3269                        | 0.2281                                    | 1.1352   | 0.2281   | 6.9476   | 0.2281  |

## Profundidad 1.5 m

| Fuerza iónica                       |                    |  |
|-------------------------------------|--------------------|--|
| $[\text{Ca}^{2+}]$<br>$\times 10^3$ | A<br>$\times 10^3$ | $\mu$ (fuerza iónica)<br>$\times 10^3$ |
| 0.897                               | 11.0051            | 13.6961                                |

| Concentración de ácido carbónico |                    |                        |                            |        |                     |                            |                                |  |
|----------------------------------|--------------------|------------------------|----------------------------|--------|---------------------|----------------------------|--------------------------------|--|
| A<br>$\times 10^3$               | D<br>$\times 10^3$ | $\mu$<br>$\times 10^3$ | $\mu - D$<br>$\times 10^3$ | $\xi$  | K'<br>$\times 10^3$ | $\mu - A$<br>$\times 10^3$ | $(\mu - D)^2$<br>$\times 10^6$ | $[\text{H}_2\text{CO}_3]$<br>$\times 10^3$ |
| 11.0051                          | 3.9446             | 13.6961                | 9.5715                     | 0.1059 | 1872.2              | 2.691                      | 95.0913                        | 0.4790                                     |

| Concentración de bicarbonato |                        |                            |                                     |
|------------------------------|------------------------|----------------------------|-------------------------------------|
| D<br>$\times 10^3$           | $\mu$<br>$\times 10^3$ | $\mu - D$<br>$\times 10^3$ | $[\text{HCO}_3^-]$<br>$\times 10^3$ |
| 3.9446                       | 13.6961                | 9.5715                     | 6.50098                             |

| Valores de la fortaleza iónica propuestos. | Valores de ácido carbónico obtenidos a partir de $\mu_{\text{prop}}$ . | Valores de bicarbonatos obtenidos a partir de $\mu_{\text{prop}}$ . |
|--|--|---|
| $\mu_{\text{prop}}$<br>$\times 10^3$       | $[\text{H}_2\text{CO}_3]$<br>$\times 10^3$                             | $[\text{HCO}_3^-]$<br>$\times 10^3$                                 |
| 14.0                                       | 0.5629   | 6.7034  |
| 15.0                                       | 0.8867   | 7.3702  |

| Fuerza iónica en equilibrio                |                                     |   |                                     |                               |                               |                    |                        |                          |
|--|-------------------------------------|---|-------------------------------------|-------------------------------|-------------------------------|--------------------|------------------------|--------------------------|
| $[\text{H}_2\text{CO}_3]$<br>$\times 10^3$ | $[\text{HCO}_3^-]$<br>$\times 10^3$ | $y_p$<br>$([\text{HCO}_3^-] + \frac{1}{2}[\text{H}_2\text{CO}_3])$<br>$\times 10^3$ | $x_p$<br>$(\mu_p)$<br>$\times 10^3$ | $\Delta y_p$<br>$\times 10^3$ | $\Delta x_p$<br>$\times 10^3$ | b<br>$\times 10^3$ | $y_r$<br>$\times 10^3$ | $\mu_e$<br>$\times 10^3$ |
| 0.5629                                     | 6.7034                              | 3.9147  | 14.0                                | 0.6508                        | 1.0                           | -5.2844            | 4.1555                 | 14.3664                  |
| 0.8867                                     | 7.3702                              | 4.5718  | 15.0                                |                               |                               |                    |                        |                          |

| Agresividad                    |   |  |  |  |   |
|--------------------------------|---|--|--|--|---|
| Agresividad a la fuerza iónica |   | Agresividad al calcio                              |  | Agresividad al bicarbonato                         |   |
| $\mu_e$<br>$\times 10^3$       | $\frac{1}{3}(\mu_e - \mu)$<br>agresividad | $[\text{Ca}^{2+}]_e$<br>$(\frac{1}{3}(\mu_e - A))$ | $[\text{Ca}^{2+}]_e - [\text{Ca}^{2+}]$<br>agresividad | $[\text{HCO}_3^-]_e$<br>$(\frac{2}{3}(\mu_e - D))$ | $\frac{1}{2}([\text{HCO}_3^-]_e - [\text{HCO}_3^-])$<br>agresividad |
| 14.3664                        | 0.22344                                   | 1.1204   | 0.22344  | 60.947869  | 0.22343   |

## SITIO E

Profundidad 0.2 m

| Fuerza iónica                |                    |  |
|------------------------------|--------------------|--|
| $[Ca^{2+}]$<br>$\times 10^3$ | A<br>$\times 10^3$ | $\mu$ (fuerza iónica)<br>$\times 10^3$ |
| 0.7785                       | 18.3301            | 20.6656                                |

| Concentración de ácido carbónico |                    |                        |                            |        |                     |                            |                                |                              |
|----------------------------------|--------------------|------------------------|----------------------------|--------|---------------------|----------------------------|--------------------------------|------------------------------|
| A<br>$\times 10^3$               | D<br>$\times 10^3$ | $\mu$<br>$\times 10^3$ | $\mu - D$<br>$\times 10^3$ | $\xi$  | K'<br>$\times 10^3$ | $\mu - A$<br>$\times 10^3$ | $(\mu - D)^2$<br>$\times 10^6$ | $[H_2CO_3]$<br>$\times 10^3$ |
| 18.3301                          | 12.9855            | 20.6656                | 7.6801                     | 0.1273 | 1614.9              | 2.3355                     | 58.9836                        | 0.2225                       |

| Concentración de bicarbonato |                        |                            |                              |
|------------------------------|------------------------|----------------------------|------------------------------|
| D<br>$\times 10^3$           | $\mu$<br>$\times 10^3$ | $\mu - D$<br>$\times 10^3$ | $[HCO_3^-]$<br>$\times 10^3$ |
| 12.9855                      | 20.6656                | 7.6801                     | 5.1200                       |

| Valores de la fortaleza iónica propuestos. | Valores de ácido carbónico obtenidos a partir de $\mu_{prop}$ . | Valores de bicarbonatos obtenidos a partir de $\mu_{prop}$ . |
|--|---|--|
| $\mu_{prop}$<br>$\times 10^3$              | $[H_2CO_3]$<br>$\times 10^3$                                    | $[HCO_3^-]$<br>$\times 10^3$                                 |
| 22.0                                       | 0.4698  | 6.0096   |
| 23.0                                       | 0.7248  | 6.6762   |

| Fuerza iónica en equilibrio  |                              |  |                                     |                               |                               |                    |                        |                          |
|------------------------------|------------------------------|--|-------------------------------------|-------------------------------|-------------------------------|--------------------|------------------------|--------------------------|
| $[H_2CO_3]$<br>$\times 10^3$ | $[HCO_3^-]$<br>$\times 10^3$ | $y_p$<br>$([HCO_3^-] + \frac{1}{2}[H_2CO_3])$<br>$\times 10^3$ | $x_p$<br>$(\mu_p)$<br>$\times 10^3$ | $\Delta y_p$<br>$\times 10^3$ | $\Delta x_p$<br>$\times 10^3$ | b<br>$\times 10^3$ | $y_r$<br>$\times 10^3$ | $\mu_e$<br>$\times 10^3$ |
| 0.4698                       | 6.0096                       | 3.4747   | 22.0                                | 0.5883                        | 1.0                           | -9.4679            | 3.5560                 | 22.1382                  |
| 0.7248                       | 6.6762                       | 4.0630   | 23.0                                |                               |                               |                    |                        |                          |

| Agresividad                    |   |   |  |   |   |
|--------------------------------|---|---|--|---|---|
| Agresividad a la fuerza iónica |   | Agresividad al calcio                       |  | Agresividad al bicarbonato                  |   |
| $\mu_e$<br>$\times 10^3$       | $\frac{1}{3}(\mu_e - \mu)$<br>agresividad | $[Ca^{2+}]_e$<br>$(\frac{1}{3}(\mu_e - A))$ | $[Ca^{2+}]_e - [Ca^{2+}]$<br>agresividad | $[HCO_3^-]_e$<br>$(\frac{2}{3}(\mu_e - D))$ | $\frac{1}{6}([HCO_3^-]_e - [HCO_3^-])$<br>agresividad |
| 22.1382                        | 0.49087                                   | 1.26937                                     | 0.49087                                  | 6.101797                                    | 0.49089   |

## Profundidad 3.0 m

| Fuerza iónica                |                    |  |
|------------------------------|--------------------|--|
| $[Ca^{2+}]$<br>$\times 10^3$ | A<br>$\times 10^3$ | $\mu$ (fuerza iónica)<br>$\times 10^3$ |
| 0.863                        | 13.8611            | 16.4501                                |

| Concentración de ácido carbónico |                    |                        |                            |        |                     |                            |                                |                              |
|----------------------------------|--------------------|------------------------|----------------------------|--------|---------------------|----------------------------|--------------------------------|------------------------------|
| A<br>$\times 10^3$               | D<br>$\times 10^3$ | $\mu$<br>$\times 10^3$ | $\mu - D$<br>$\times 10^3$ | $\xi$  | K'<br>$\times 10^3$ | $\mu - A$<br>$\times 10^3$ | $(\mu - D)^2$<br>$\times 10^6$ | $[H_2CO_3]$<br>$\times 10^3$ |
| 13.8611                          | 8.5855             | 16.4501                | 7.86458                    | 0.1150 | 1758.1              | 2.5890                     | 61.8516                        | 0.2815                       |

| Concentración de bicarbonato |                        |                            |                              |
|------------------------------|------------------------|----------------------------|------------------------------|
| D<br>$\times 10^3$           | $\mu$<br>$\times 10^3$ | $\mu - D$<br>$\times 10^3$ | $[HCO_3^-]$<br>$\times 10^3$ |
| 8.5855                       | 16.4501                | 7.86458                    | 5.2430                       |

| Valores de la fortaleza iónica propuestos. | Valores de ácido carbónico obtenidos a partir de $\mu_{prop}$ . | Valores de bicarbonatos obtenidos a partir de $\mu_{prop}$ . |
|--|---|--|
| $\mu_{prop}$<br>$\times 10^3$              | $[H_2CO_3]$<br>$\times 10^3$                                    | $[HCO_3^-]$<br>$\times 10^3$                                 |
| 17.0                                       | 0.3861  | 5.6096   |
| 18.0                                       | 0.6243  | 6.2762   |

| Fuerza iónica en equilibrio  |                              |  |                                     |                               |                               |                    |                        |                          |
|------------------------------|------------------------------|--|-------------------------------------|-------------------------------|-------------------------------|--------------------|------------------------|--------------------------|
| $[H_2CO_3]$<br>$\times 10^3$ | $[HCO_3^-]$<br>$\times 10^3$ | $y_p$<br>$([HCO_3^-] + \frac{1}{2}[H_2CO_3])$<br>$\times 10^3$ | $x_p$<br>$(\mu_p)$<br>$\times 10^3$ | $\Delta y_p$<br>$\times 10^3$ | $\Delta x_p$<br>$\times 10^3$ | b<br>$\times 10^3$ | $y_r$<br>$\times 10^3$ | $\mu_e$<br>$\times 10^3$ |
| 0.3861                       | 5.6096                       | 3.1909   | 17.0                                |                               |                               |                    |                        |                          |
| 0.6243                       | 6.2762                       | 3.7624   | 18.0                                | 0.57149                       | 1.0                           | -6.5244            | 3.6645                 | 17.8286                  |

| Agresividad                    |   |   |  |   |   |
|--------------------------------|---|---|--|---|---|
| Agresividad a la fuerza iónica |   | Agresividad al calcio                       |  | Agresividad al bicarbonato                  |   |
| $\mu_e$<br>$\times 10^3$       | $\frac{1}{3}(\mu_e - \mu)$<br>agresividad | $[Ca^{2+}]_e$<br>$(\frac{1}{3}(\mu_e - A))$ | $[Ca^{2+}]_e - [Ca^{2+}]$<br>agresividad | $[HCO_3^-]_e$<br>$(\frac{2}{3}(\mu_e - D))$ | $\frac{1}{6}([HCO_3^-]_e - [HCO_3^-])$<br>agresividad |
| 17.8286                        | 0.4595                                    | 1.3225                                      | 0.4595                                   | 6.1620599                                   | 0.45952   |

## SITIO F

Profundidad 0.2 m

| Fuerza iónica                |                    |  |
|------------------------------|--------------------|--|
| $[Ca^{2+}]$<br>$\times 10^3$ | A<br>$\times 10^3$ | $\mu$ (fuerza iónica)<br>$\times 10^3$ |
| 0.561                        | 12.4596            | 14.1426                                |

| Concentración de ácido carbónico |                    |                        |                            |        |                       |                            |                                |                              |
|----------------------------------|--------------------|------------------------|----------------------------|--------|-----------------------|----------------------------|--------------------------------|------------------------------|
| A<br>$\times 10^3$               | D<br>$\times 10^3$ | $\mu$<br>$\times 10^3$ | $\mu - D$<br>$\times 10^3$ | $\xi$  | $K'$<br>$\times 10^3$ | $\mu - A$<br>$\times 10^3$ | $(\mu - D)^2$<br>$\times 10^6$ | $[H_2CO_3]$<br>$\times 10^3$ |
| 12.4596                          | 7.5634             | 14.1426                | 6.5796                     | 0.1074 | 1.853                 | 1.683                      | 43.287                         | 0.135                        |

| Concentración de bicarbonato |                        |                            |                              |
|------------------------------|------------------------|----------------------------|------------------------------|
| D<br>$\times 10^3$           | $\mu$<br>$\times 10^3$ | $\mu - D$<br>$\times 10^3$ | $[HCO_3^-]$<br>$\times 10^3$ |
| 7.56335                      | 14.1426                | 6.5796                     | 4.3864                       |

| Valores de la fortaleza iónica propuestos. | Valores de ácido carbónico obtenidos a partir de $\mu_{prop.}$ | Valores de bicarbonatos obtenidos a partir de $\mu_{prop.}$ |
|--|--|---|
| $\mu_{prop}$<br>$\times 10^3$              | $[H_2CO_3]$<br>$\times 10^3$                                   | $[HCO_3^-]$<br>$\times 10^3$                                |
| 16.0                                       | 0.4474   | 5.6249  |
| 17.0                                       | 0.7025   | 6.2911  |

| Fuerza iónica en equilibrio  |                              |  |                                     |                               |                               |                    |                        |                          |
|------------------------------|------------------------------|--|-------------------------------------|-------------------------------|-------------------------------|--------------------|------------------------|--------------------------|
| $[H_2CO_3]$<br>$\times 10^3$ | $[HCO_3^-]$<br>$\times 10^3$ | $y_p$<br>$([HCO_3^-] + \frac{1}{2}[H_2CO_3])$<br>$\times 10^3$ | $x_p$<br>$(\mu_p)$<br>$\times 10^3$ | $\Delta y_p$<br>$\times 10^3$ | $\Delta x_p$<br>$\times 10^3$ | b<br>$\times 10^3$ | $y_r$<br>$\times 10^3$ | $\mu_e$<br>$\times 10^3$ |
| 0.4474                       | 5.6249                       | 3.2596   | 16.0                                | 0.5885                        | 1.0                           | -6.1564            | 3.501                  | 16.41                    |
| 0.7025                       | 6.2911                       | 3.8481   | 17.0                                |                               |                               |                    |                        |                          |

| Agresividad                    |   |   |  |   |   |
|--------------------------------|---|---|--|---|---|
| Agresividad a la fuerza iónica |   | Agresividad al calcio                       |  | Agresividad al bicarbonato                  |   |
| $\mu_e$<br>$\times 10^3$       | $\frac{1}{3}(\mu_e - \mu)$<br>agresividad | $[Ca^{2+}]_e$<br>$(\frac{1}{3}(\mu_e - A))$ | $[Ca^{2+}]_e - [Ca^{2+}]$<br>agresividad | $[HCO_3^-]_e$<br>$(\frac{2}{3}(\mu_e - D))$ | $\frac{1}{2}([HCO_3^-]_e - [HCO_3^-])$<br>agresividad |
| 16.4102                        | 0.7559                                    | 1.31687                                     | 0.7559                                   | 5.8979                                      | 0.7549  |

## Profundidad 4.0 m

| Fuerza iónica                       |                    |  |
|-------------------------------------|--------------------|--|
| $[\text{Ca}^{2+}]$<br>$\times 10^3$ | A<br>$\times 10^3$ | $\mu$ (fuerza iónica)<br>$\times 10^3$ |
| 0.551                               | 12.8082            | 14.4612                                |

| Concentración de ácido carbónico |                    |                        |                            |        |                       |                            |                                |  |
|----------------------------------|--------------------|------------------------|----------------------------|--------|-----------------------|----------------------------|--------------------------------|--|
| A<br>$\times 10^3$               | D<br>$\times 10^3$ | $\mu$<br>$\times 10^3$ | $\mu - D$<br>$\times 10^3$ | $\xi$  | $K'$<br>$\times 10^3$ | $\mu - A$<br>$\times 10^3$ | $(\mu - D)^2$<br>$\times 10^6$ | $[\text{H}_2\text{CO}_3]$<br>$\times 10^3$ |
| 12.8082                          | 7.824              | 14.4612                | 6.6372                     | 0.1085 | 1.839                 | 1.653                      | 44.052                         | 0.1339                                     |

| Concentración de bicarbonato |                        |                            |                                     |
|------------------------------|------------------------|----------------------------|-------------------------------------|
| D<br>$\times 10^3$           | $\mu$<br>$\times 10^3$ | $\mu - D$<br>$\times 10^3$ | $[\text{HCO}_3^-]$<br>$\times 10^3$ |
| 7.824                        | 14.4612                | 6.6372                     | 4.4248                              |

| Valores de la fortaleza iónica propuestos. | Valores de ácido carbónico obtenidos a partir de $\mu_{\text{prop}}$ . | Valores de bicarbonatos obtenidos a partir de $\mu_{\text{prop}}$ . |
|--|--|---|
| $\mu_{\text{prop}}$<br>$\times 10^3$       | $[\text{H}_2\text{CO}_3]$<br>$\times 10^3$                             | $[\text{HCO}_3^-]$<br>$\times 10^3$                                 |
| 16.0                                       | 0.3788   | 5.4507  |
| 17.0                                       | 0.6132   | 6.1173  |

| Fuerza iónica en equilibrio                |                                     |   |                                     |                                   |                                   |                    |                        |                          |
|--|-------------------------------------|---|-------------------------------------|-----------------------------------|-----------------------------------|--------------------|------------------------|--------------------------|
| $[\text{H}_2\text{CO}_3]$<br>$\times 10^3$ | $[\text{HCO}_3^-]$<br>$\times 10^3$ | $y_p$<br>$([\text{HCO}_3^-] + \frac{1}{2}[\text{H}_2\text{CO}_3])$<br>$\times 10^3$ | $x_p$<br>$(\mu_p)$<br>$\times 10^3$ | $\Delta y_{p_3}$<br>$\times 10^3$ | $\Delta x_{p_3}$<br>$\times 10^3$ | b<br>$\times 10^3$ | $y_r$<br>$\times 10^3$ | $\mu_e$<br>$\times 10^3$ |
| 0.3788                                     | 5.4507                              | 3.1041  | 16.0                                | 0.5677                            | 1.0                               | -5.9791            | 3.5225                 | 16.737                   |
| 0.6132                                     | 6.1173                              | 3.6718  | 17.0                                |                                   |                                   |                    |                        |                          |

| Agresividad                    |   |  |  |  |   |
|--------------------------------|---|--|--|--|---|
| Agresividad a la fuerza iónica |   | Agresividad al calcio                              |  | Agresividad al bicarbonato                         |   |
| $\mu_e$<br>$\times 10^3$       | $\frac{1}{3}(\mu_e - \mu)$<br>agresividad | $[\text{Ca}^{2+}]_e$<br>$(\frac{1}{3}(\mu_e - A))$ | $[\text{Ca}^{2+}]_e - [\text{Ca}^{2+}]$<br>agresividad | $[\text{HCO}_3^-]_e$<br>$(\frac{2}{3}(\mu_e - D))$ | $\frac{1}{6}([\text{HCO}_3^-]_e - [\text{HCO}_3^-])$<br>agresividad |
| 16.737                         | 0.7586                                    | 1.3096   | 0.7586   | 5.942  | 0.7585  |

En las figuras 7.38 a 7.49 se representan los diagramas de Mojmir Mach obtenidos para cada columna de agua; en las figuras 7.50 y 7.51 se representa en conjunto la variación de la agresividad del agua en la columna de agua de cada zona de la presa.

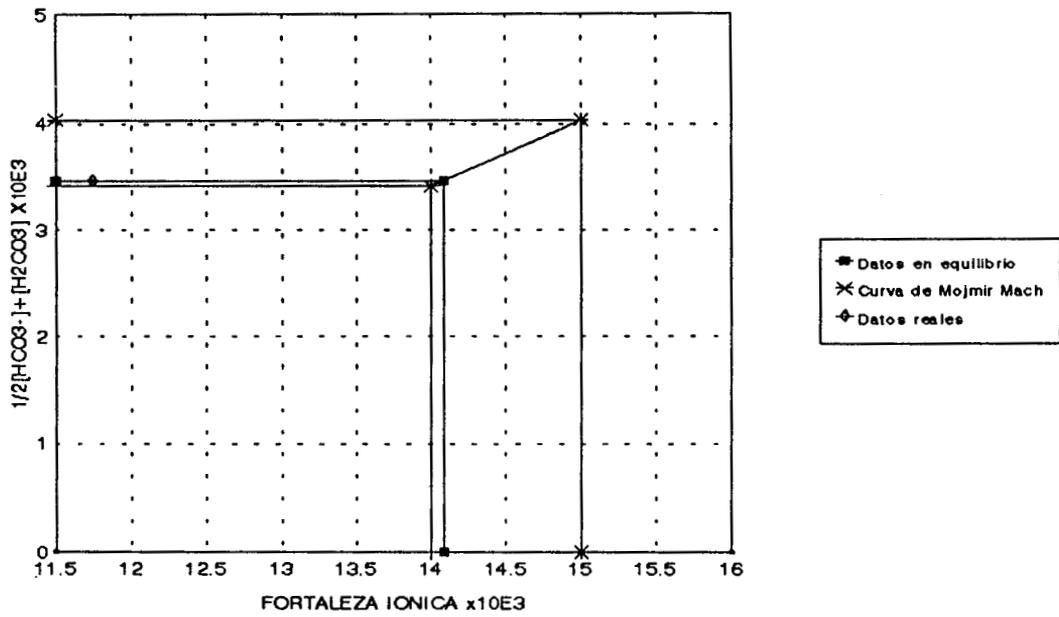


Figura 7.38. Diagrama de Mojmir Mach para la zona A, profundidad 0.2 m.

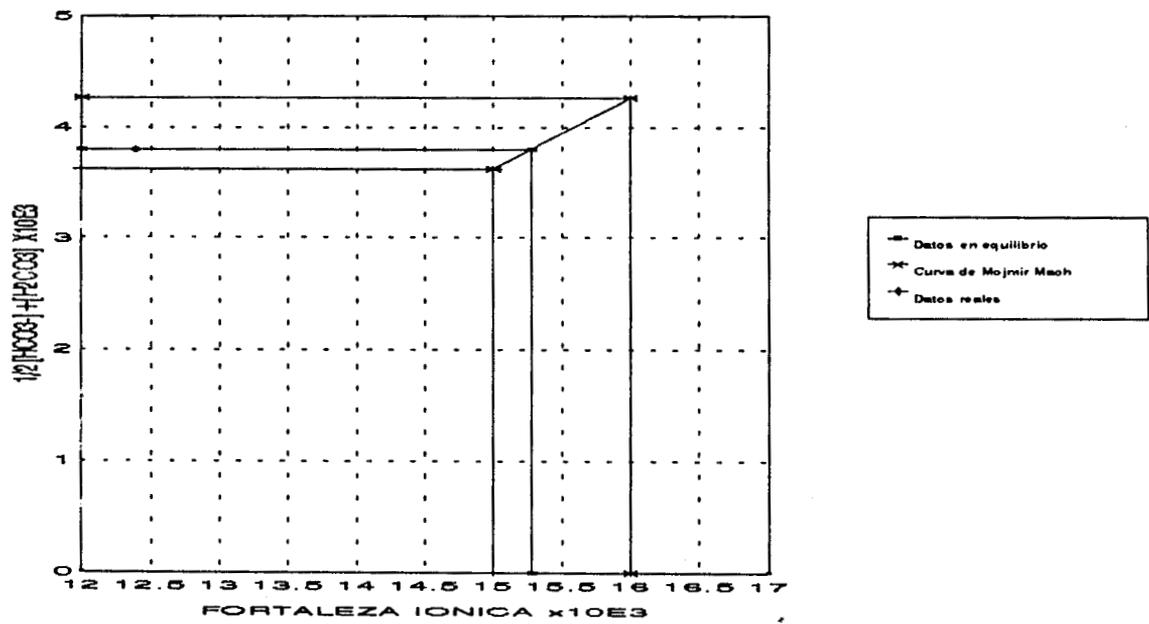


Figura 7.39. Diagrama de Mojmir Mach para la zona A, profundidad 2.0 m.

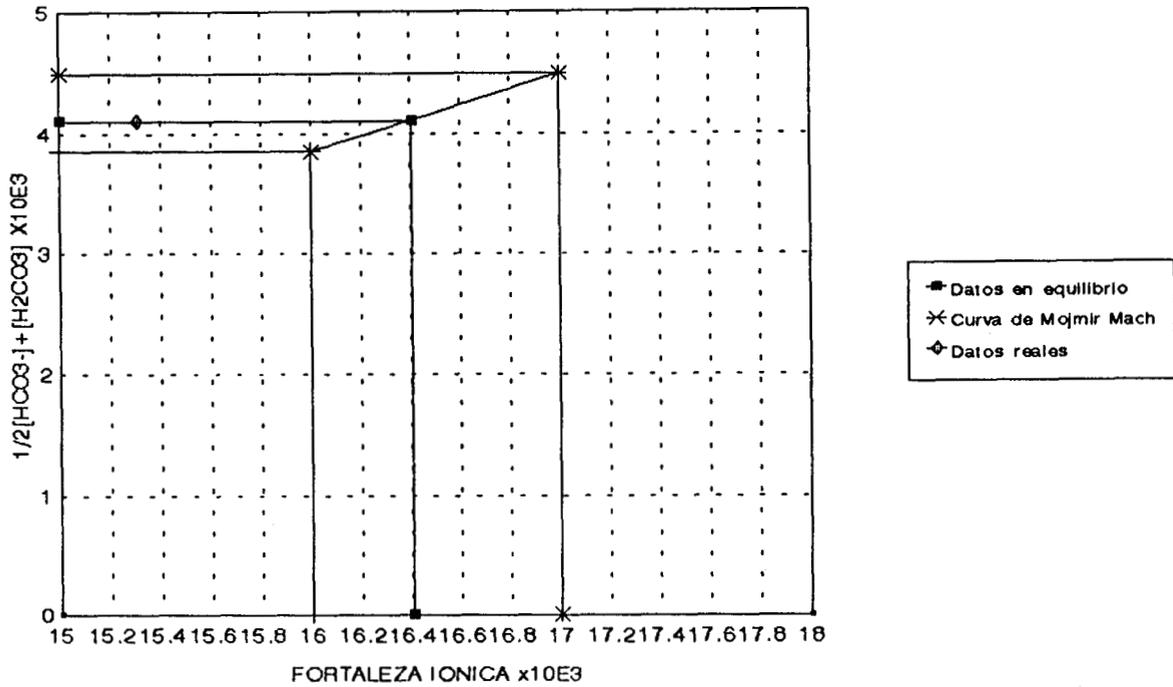


Figura 7.40. Diagrama de Mojmir Mach para la zona B, profundidad 0.2 m.

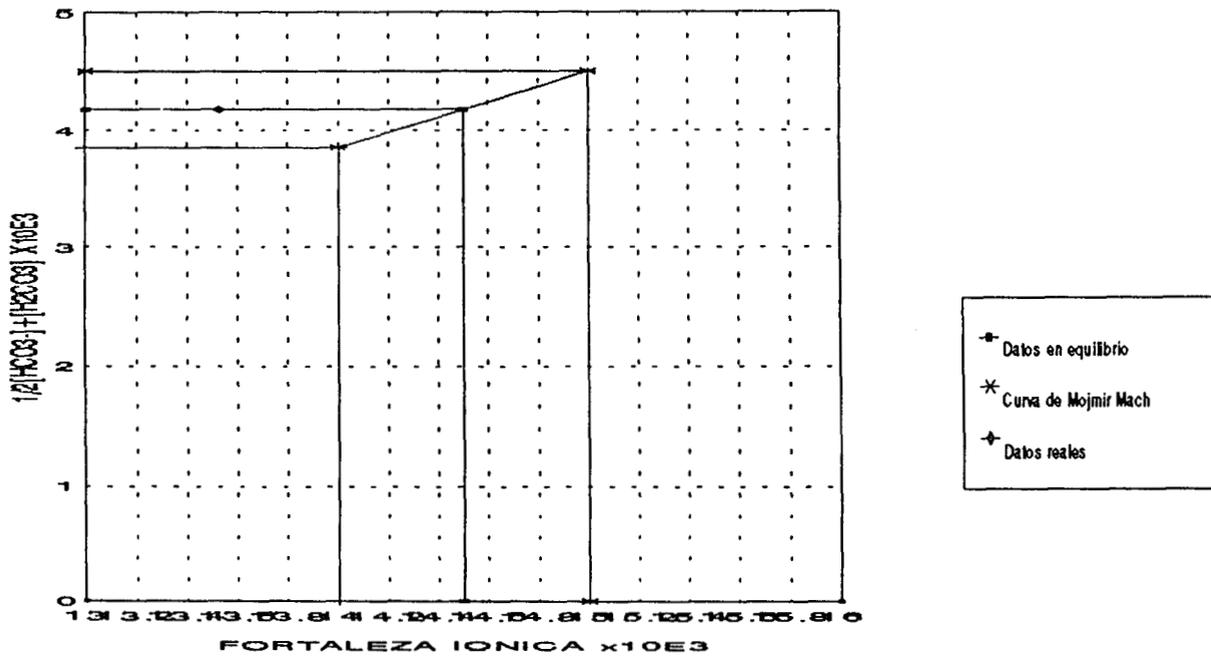


Figura 7.41. Diagrama de Mojmir Mach para la zona B, profundidad 1.5 m.

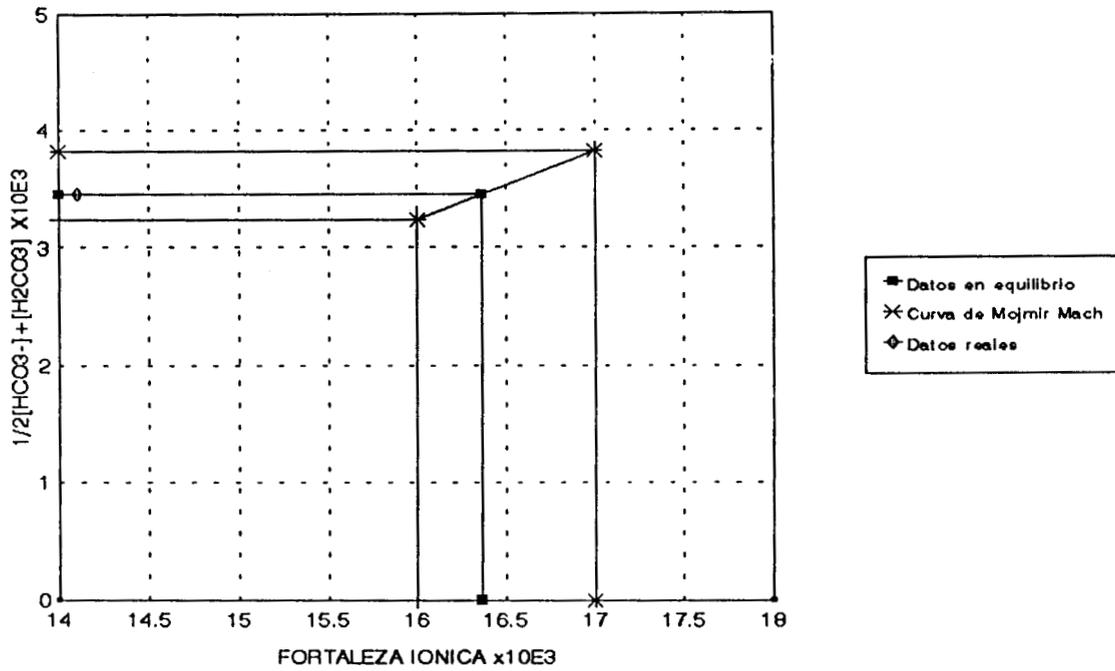


Figura 7.42. Diagrama de Mojmir Mach para la zona C, profundidad 0.2 m.

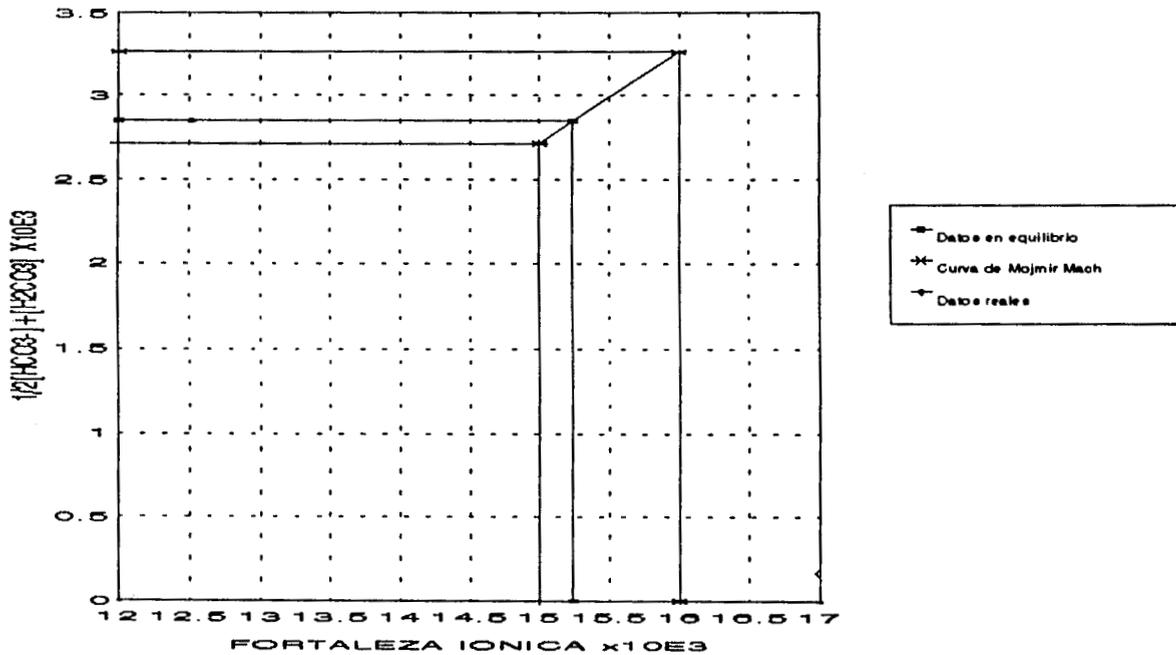


Figura 7.43. Diagrama de Mojmir Mach para la zona C, profundidad 2.0 m.

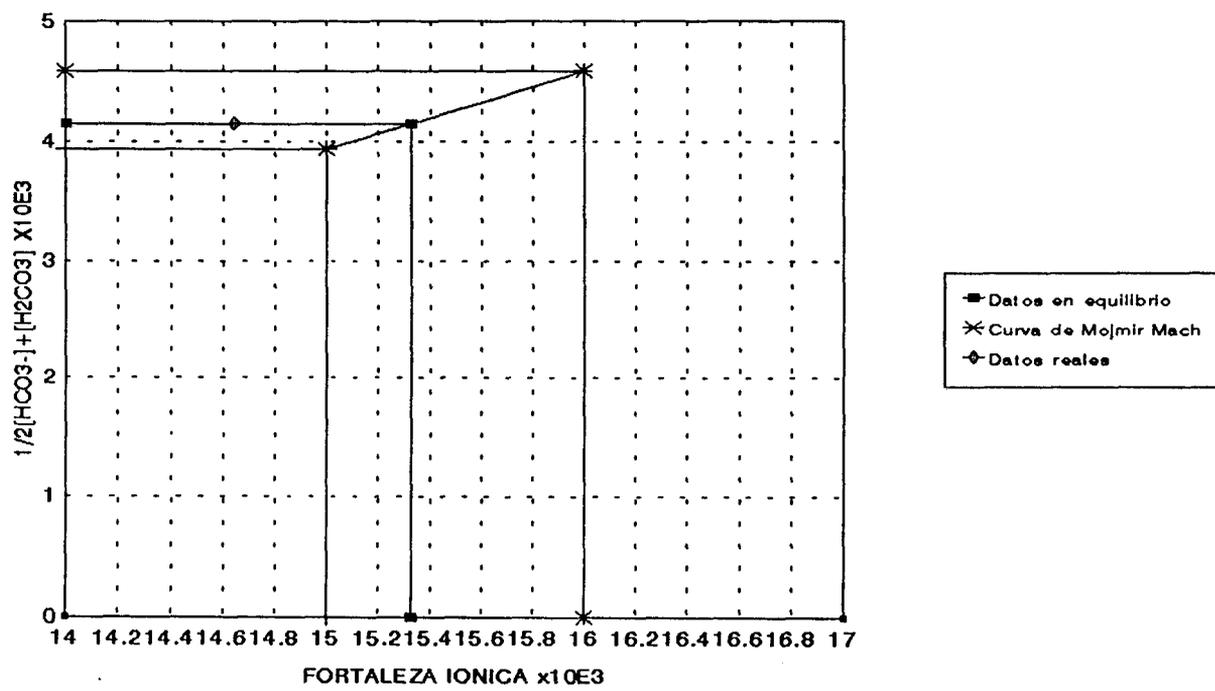


Figura 7.44. Diagrama de Mojmir Mach para la zona D, profundidad 0.2 m.

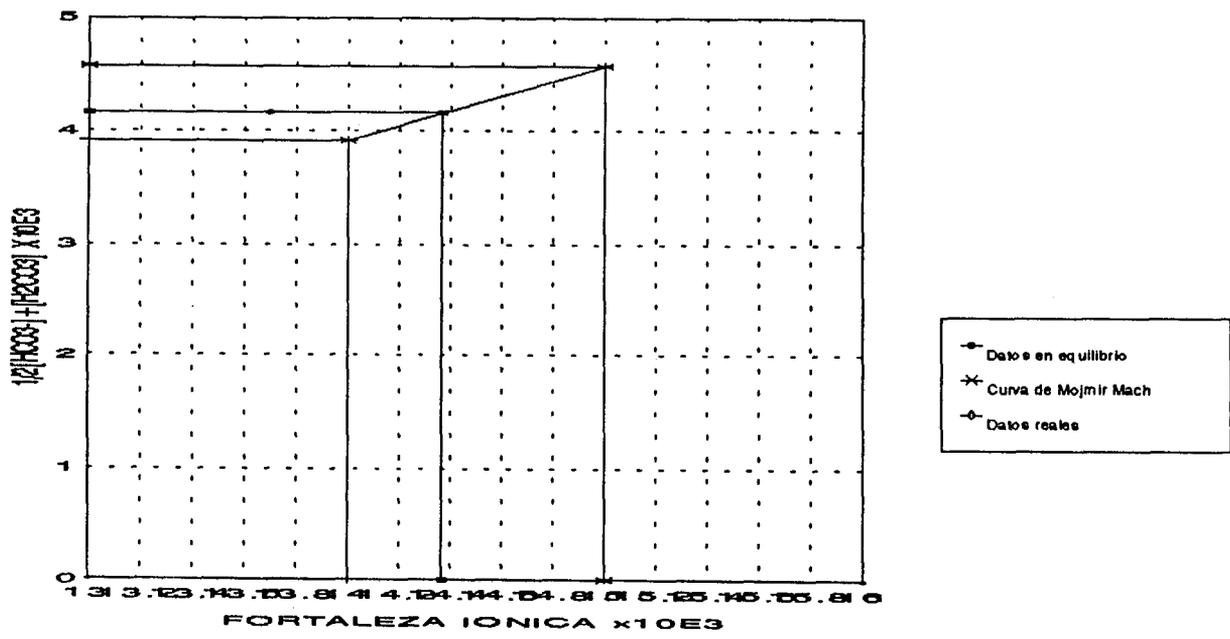


Figura 7.45. Diagrama de Mojmir Mach para la zona D, profundidad 1.5 m.

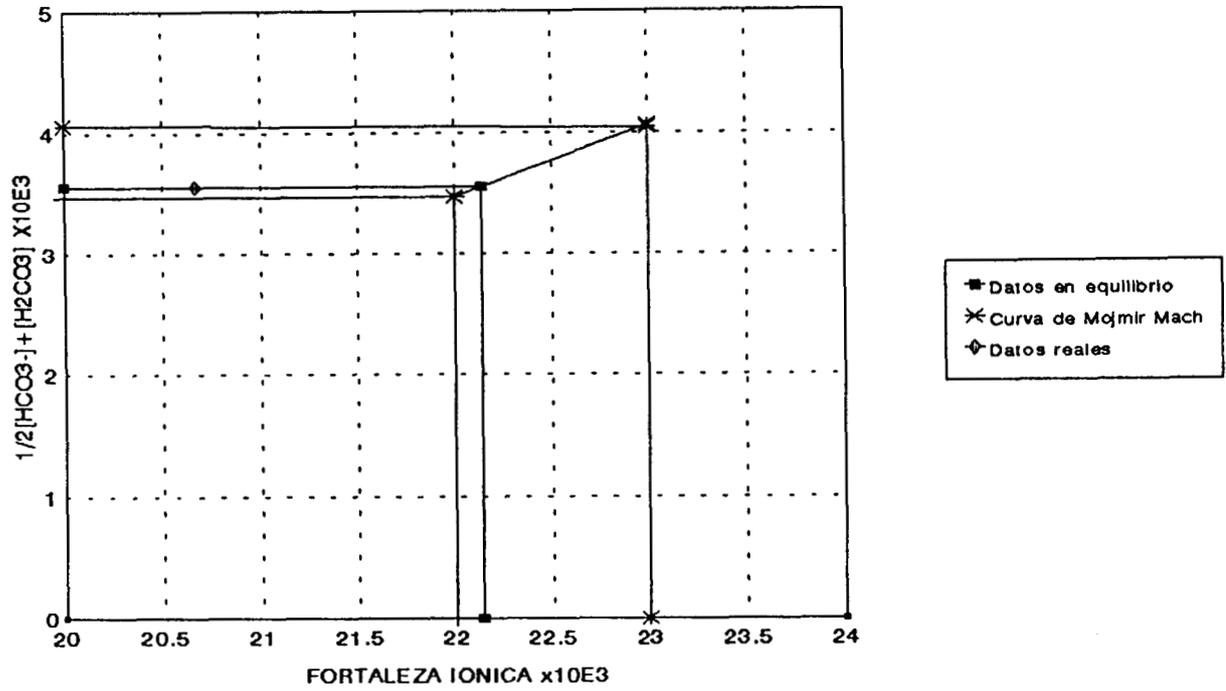


Figura 7.46. Diagrama de Mojmir Mach para la zona E, profundidad 0.2 m.

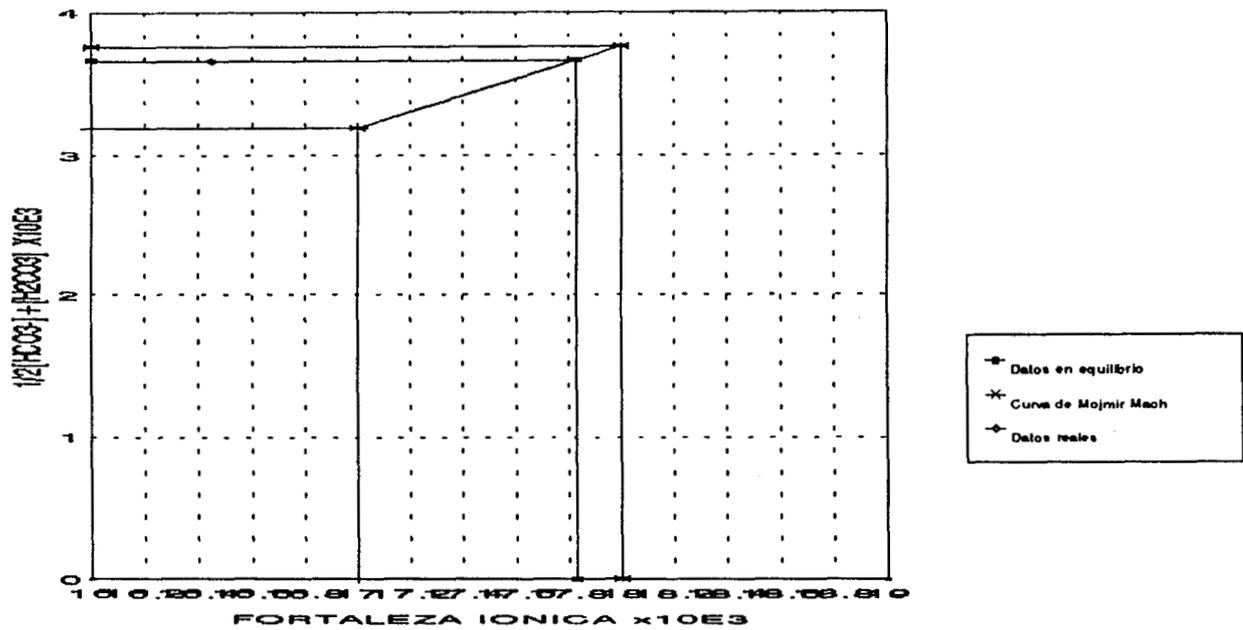


Figura 7.47. Diagrama de Mojmir Mach para la zona E, profundidad 3.0 m.

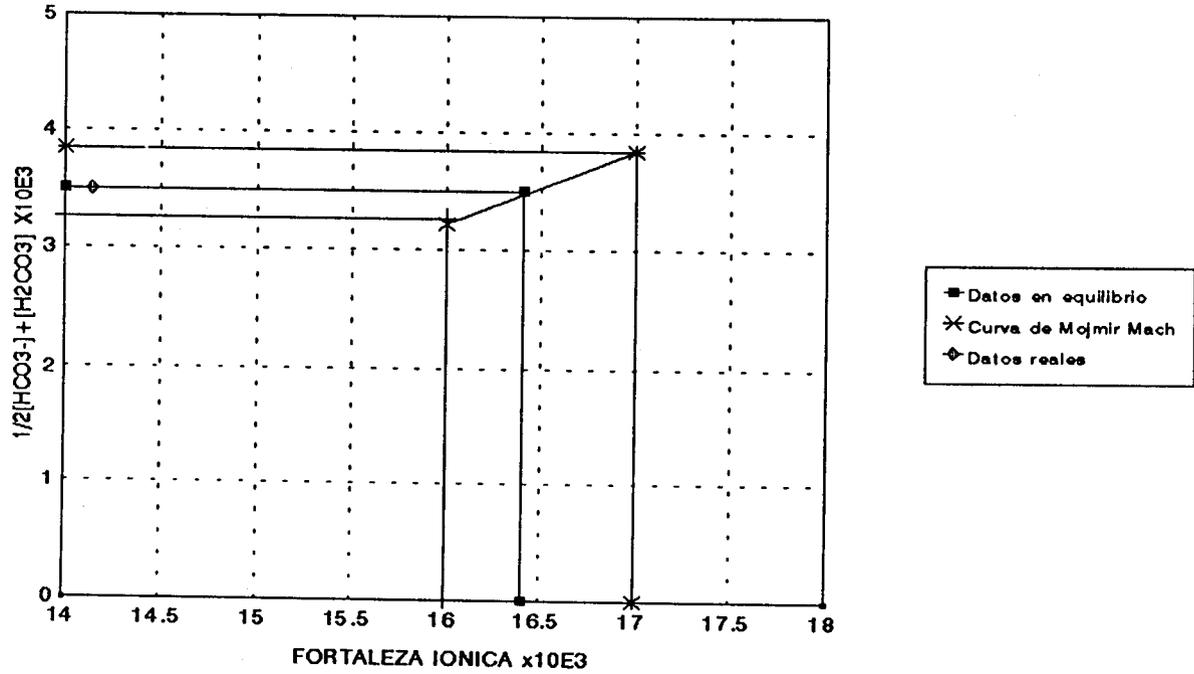


Figura 7.48. Diagrama de Mojmir Mach para la zona F, profundidad 0.2 m.

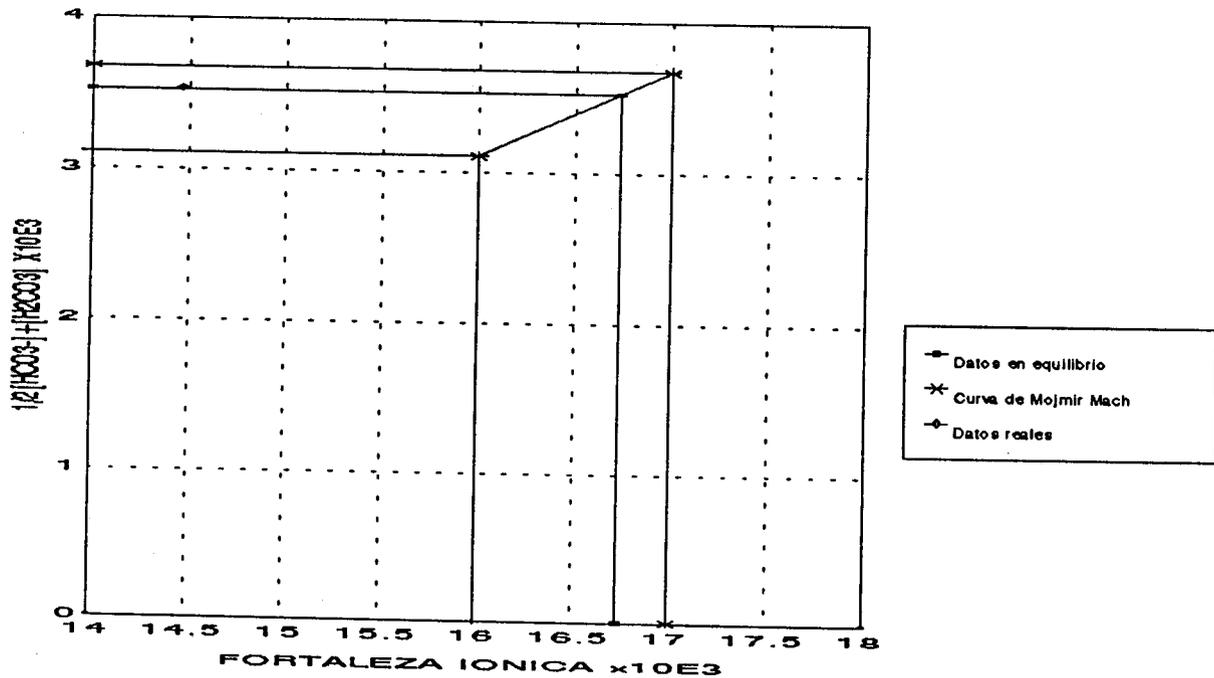


Figura 7.49. Diagrama de Mojmir Mach para la zona F, profundidad 4.0 m.

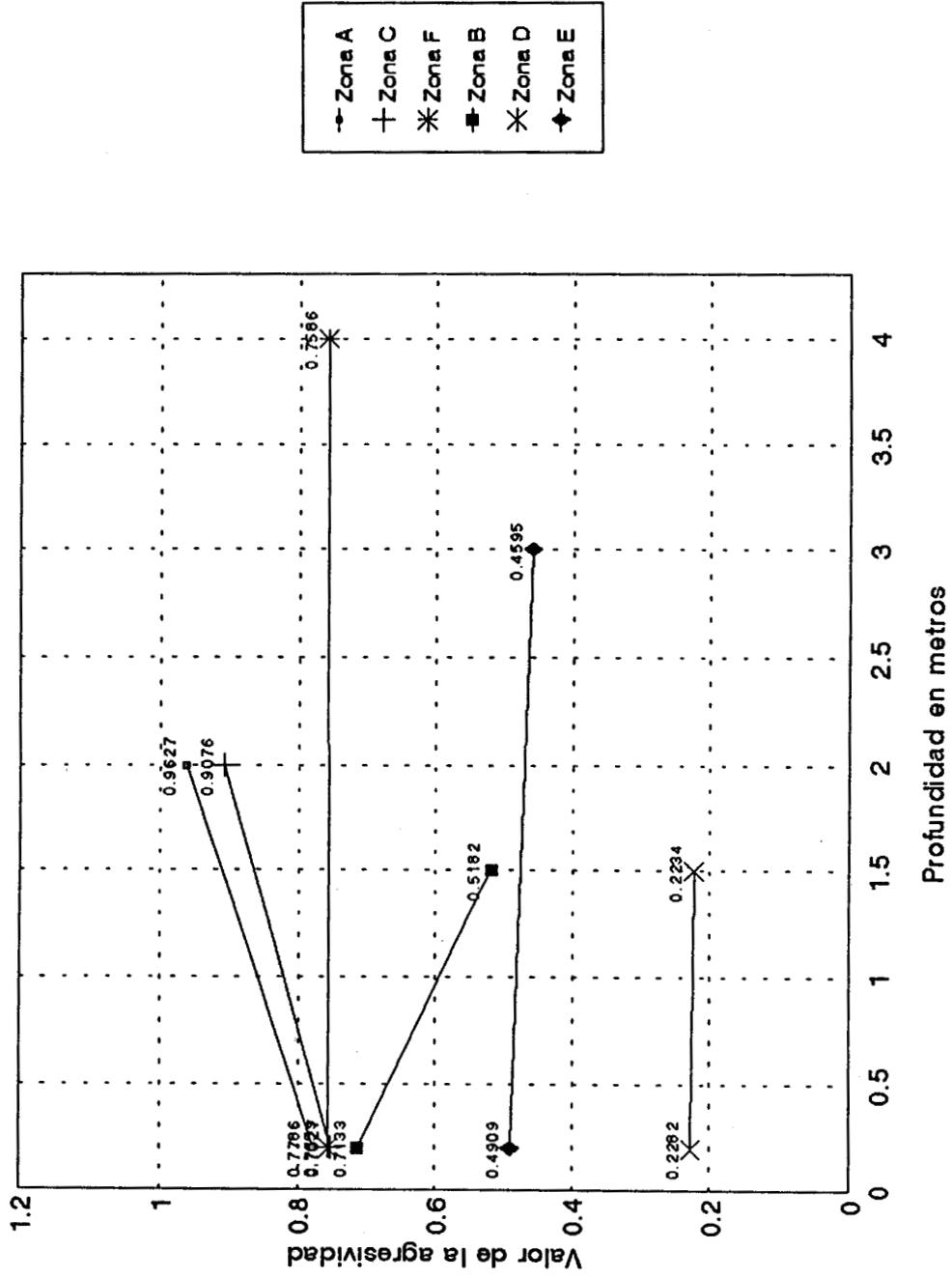


Figura 7.50. Variación de la agresividad del agua en diferentes zonas de la presa J. A. Alzate.

## 7.6 ESPECIACION

### 7.6.1 Modelamiento experimental.

Los resultados de la especiación experimental se muestran en las siguientes tablas, 7.17 a 7.21, donde la nomenclatura utilizada es la siguiente:

C = muestra centrifugada y pasada por poro 0.45 $\mu$ m

A = muestra atacada con ácido

UV = muestra atacada mediante radiación UV

Rr = muestra tratada mediante un intercambio catiónico rápido

RI = muestra tratada mediante un intercambio catiónico rápido seguido de uno lento

#### Significado de cada análisis:

**C:** Al centrifugar y medir, se obtienen la concentración de todas las especies electroactivas presentes en la solución acuosa.

**C A:** Al centrifugar y atacar la muestra con ácidos, se obtiene la concentración total del metal soluble, esto es, la concentración de las especies electroactivas y de las especies enlazadas.

**C UV:** Al centrifugar y atacar la muestra mediante radiación UV, se obtiene la cantidad de metal unido a materia orgánica más la concentración de las especies electroactivas.

**C Rr:** Al tratar la muestra con un intercambio catiónico rápido, después de centrifugarla, nos da como resultado las especies electroactivas muy lábiles.

**C Rr A:** La cantidad de metal que se mide en esta sección corresponde a las especies electroactivas muy lábiles y materia soluble.

**C Rr UV:** Aquí se obtiene la concentración de las especies electroactivas muy lábiles y la concentración de los metales unidos a materia orgánica que no fue retenida por la resina.

**C RI:** En esta sección la concentración del metal medida corresponde a las especies electroactivas extremadamente lábiles

**C RI A:** esta corresponde a la concentración de metales en materia inerte

**C RI UV:** la concentración del metal corresponde a materia orgánica.

Tabla 7.17 Especiación experimental de Cu<sup>2+</sup>

| Especiación de Cu <sup>2+</sup> |        |        |        |        |        |        |        |        |        |
|---------------------------------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|
| ppb                             |        |        |        |        |        |        |        |        |        |
| Muestra                         | C      | CA     | CUV    | CRr    | CRrA   | CRrUV  | CRI    | CRIA   | CRIUV  |
| B <sub>20</sub>                 | 1.1500 | 9.1780 | 4.9520 | 0.3093 | 6.4360 | 2.4812 | 0.2154 | 2.6202 | 1.3313 |
| B <sub>f(1.5 m)</sub>           | 0.4366 | 6.5432 | 1.6960 | 0.0355 | 3.7516 | 0.4265 | 0.0185 | 1.2500 | 0.0432 |
| C <sub>20</sub>                 | 1.0767 | 4.3956 | 1.8276 | 0.3093 | 3.2282 | 0.6646 | 0.1923 | 2.5640 | 0.3729 |
| C <sub>f (2.0 m)</sub>          | 0.5368 | 3.4100 | 1.4376 | 0.1995 | 1.9860 | 0.7140 | 0.1520 | 1.3140 | 0.3240 |
| D <sub>20</sub>                 | 0.5568 | 5.7240 | 4.8620 | 0.2556 | 3.0200 | 2.2100 | 0.1736 | 1.3550 | 0.9991 |
| D <sub>f (1.5 m)</sub>          | 0.3170 | 2.7894 | 1.0056 | 0.1550 | 1.5720 | 0.7980 | 0.0827 | 0.4680 | 0.1260 |
| E <sub>20</sub>                 | 2.5943 | 8.6520 | 6.1860 | 0.3093 | 5.9600 | 3.5208 | 0.1319 | 1.2050 | 0.2514 |
| E <sub>f (3.0 m)</sub>          | 2.0845 | 8.1860 | 3.1000 | 0.0162 | 2.0720 | 0.7090 | 0.0077 | 0.2244 | 0.0972 |

Tabla 7.18 Especiación experimental de Cd<sup>2+</sup>

| Especiación de Cd <sup>2+</sup> |        |        |        |        |        |        |        |        |        |
|---------------------------------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|
| ppb                             |        |        |        |        |        |        |        |        |        |
| Muestra                         | C      | CA     | CUV    | CRr    | CRrA   | CRrUV  | CRI    | CRIA   | CRIUV  |
| B <sub>20</sub>                 | 0.0800 | 0.3007 | 0.2001 | 0.0600 | 0.1060 | 0.0813 | 0.0525 | 0.0743 | 0.0667 |
| B <sub>f(1.5 m)</sub>           | 0.0324 | 0.2884 | 0.2315 | 0.0281 | 0.0886 | 0.0324 | 0.0237 | 0.0420 | 0.0275 |
| C <sub>20</sub>                 | 0.1752 | 0.3310 | 0.2791 | 0.1265 | 0.2068 | 0.1838 | 0.0930 | 0.1292 | 0.1089 |
| C <sub>f (2.0 m)</sub>          | 0.0627 | 0.3093 | 0.2617 | 0.0391 | 0.0783 | 0.0510 | 0.0381 | 0.0627 | 0.0397 |
| D <sub>20</sub>                 | 0.9730 | 0.5695 | 0.2704 | 0.0757 | 0.2680 | 0.1103 | 0.0412 | 0.0820 | 0.0475 |
| D <sub>f (1.5 m)</sub>          | 0.0540 | 0.4872 | 0.2444 | 0.0497 | 0.2401 | 0.0754 | 0.0291 | 0.0757 | 0.0347 |
| E <sub>20</sub>                 | 0.1490 | 0.5223 | 0.3223 | 0.0800 | 0.2747 | 0.1533 | 0.0569 | 0.1530 | 0.0717 |
| E <sub>f (3.0 m)</sub>          | 0.0444 | 0.4377 | 0.2531 | 0.0324 | 0.1800 | 0.0570 | 0.0194 | 0.1150 | 0.0324 |

Tabla 7.19 Especiación experimental de Fe<sup>2+</sup>

| Especiación de Fe <sup>2+</sup> |        |        |        |        |        |        |        |        |        |
|---------------------------------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|
| ppm                             |        |        |        |        |        |        |        |        |        |
| Muestra                         | C      | CA     | CUV    | CRr    | CRrA   | CRrUV  | CRI    | CRIA   | CRIUV  |
| B <sub>20</sub>                 | 0.0529 | 0.1634 | 0.0880 | 0.0325 | 0.1081 | 0.0468 | 0.0245 | 0.0718 | 0.0336 |
| B <sub>f(1.5 m)</sub>           | 0.0418 | 0.1515 | 0.0718 | 0.0260 | 0.0880 | 0.0406 | 0.0164 | 0.0507 | 0.0276 |
| C <sub>20</sub>                 | 0.0171 | 0.1048 | 0.0284 | 0.0141 | 0.0801 | 0.0235 | 0.0134 | 0.0368 | 0.0227 |
| C <sub>f (2.0 m)</sub>          | 0.0102 | 0.1028 | 0.0243 | 0.0087 | 0.0595 | 0.0226 | 0.0087 | 0.0346 | 0.0146 |
| D <sub>20</sub>                 | 0.0195 | 0.1717 | 0.0720 | 0.0123 | 0.1180 | 0.0227 | 0.0117 | 0.0682 | 0.0152 |
| D <sub>f (1.5 m)</sub>          | 0.0135 | 0.1114 | 0.0249 | 0.0088 | 0.0984 | 0.0173 | 0.0081 | 0.0433 | 0.0141 |
| E <sub>20</sub>                 | 0.0195 | 0.1492 | 0.1038 | 0.0123 | 0.0665 | 0.0226 | 0.0108 | 0.0332 | 0.0133 |
| E <sub>f (3.0 m)</sub>          | 0.0119 | 0.1256 | 0.0556 | 0.0116 | 0.0831 | 0.0159 | 0.0087 | 0.0303 | 0.0127 |

Tabla 7.20 Especiación experimental de Mn<sup>2+</sup>

| Especiación de Mn <sup>2+</sup> |       |        |        |       |        |        |       |       |       |
|---------------------------------|-------|--------|--------|-------|--------|--------|-------|-------|-------|
| ppb                             |       |        |        |       |        |        |       |       |       |
| Muestra                         | C     | CA     | CUV    | CRr   | CRrA   | CRrUV  | CRI   | CRIA  | CRIUV |
| B <sub>20</sub>                 | 2.875 | 41.165 | 31.080 | 2.272 | 12.142 | 6.450  | 1.168 | 7.361 | 1.984 |
| B <sub>f(1.5 m)</sub>           | 0.701 | 36.647 | 14.020 | 0.542 | 7.512  | 2.557  | 0.464 | 3.774 | 0.884 |
| C <sub>20</sub>                 | 5.300 | 27.878 | 15.060 | 3.610 | 15.642 | 7.064  | 1.884 | 8.878 | 3.134 |
| C <sub>f(2.0 m)</sub>           | 1.102 | 21.340 | 7.378  | 0.808 | 6.938  | 0.926  | 0.418 | 1.717 | 0.432 |
| D <sub>20</sub>                 | 4.781 | 40.658 | 24.881 | 3.112 | 20.146 | 12.400 | 1.832 | 8.565 | 2.094 |
| D <sub>f(1.5 m)</sub>           | 0.525 | 35.142 | 9.340  | 0.498 | 16.170 | 3.036  | 0.365 | 4.100 | 0.383 |
| E <sub>20</sub>                 | 2.248 | 38.478 | 19.860 | 1.836 | 23.762 | 14.520 | 1.119 | 3.849 | 2.890 |
| E <sub>f(3.0 m)</sub>           | 0.793 | 27.980 | 9.018  | 0.582 | 14.018 | 4.980  | 0.559 | 0.942 | 0.700 |

Tabla 7.21 Especiación experimental de Pb<sup>2+</sup>

| Especiación de Pb <sup>2+</sup> |      |      |      |      |      |       |      |      |       |
|---------------------------------|------|------|------|------|------|-------|------|------|-------|
| ppb                             |      |      |      |      |      |       |      |      |       |
| Muestra                         | C    | CA   | CUV  | CRr  | CRrA | CRrUV | CRI  | CRIA | CRIUV |
| B <sub>20</sub>                 | 1.16 | 4.75 | 1.45 | 0.40 | 3.53 | 0.66  | <LMD | 1.95 | <LMD  |
| B <sub>f(1.5 m)</sub>           | 1.08 | 2.84 | 1.16 | 0.33 | 1.32 | 0.39  | <LMD | 0.68 | <LMD  |
| C <sub>20</sub>                 | 1.22 | 2.62 | 1.76 | 0.39 | 1.40 | 0.74  | <LMD | 0.62 | <LMD  |
| C <sub>f(2.0 m)</sub>           | 1.03 | 2.11 | 1.38 | 0.31 | 0.69 | 0.65  | <LMD | <LMD | <LMD  |
| D <sub>20</sub>                 | 1.13 | 4.01 | 1.68 | 0.55 | 2.36 | 1.01  | <LMD | 0.41 | <LMD  |
| D <sub>f(1.5 m)</sub>           | 1.13 | 3.46 | 1.39 | 0.55 | 1.83 | 0.80  | <LMD | 0.12 | <LMD  |
| E <sub>20</sub>                 | 1.58 | 3.87 | 2.40 | 0.59 | 1.97 | 1.04  | <LMD | 0.89 | <LMD  |
| E <sub>f(3.0 m)</sub>           | 1.15 | 2.22 | 1.62 | 0.49 | 0.97 | 0.93  | <LMD | <LMD | <LMD  |

En las figuras 7.52 a 7.56 se representa la variación de los metales por fracción en la especiación experimental.

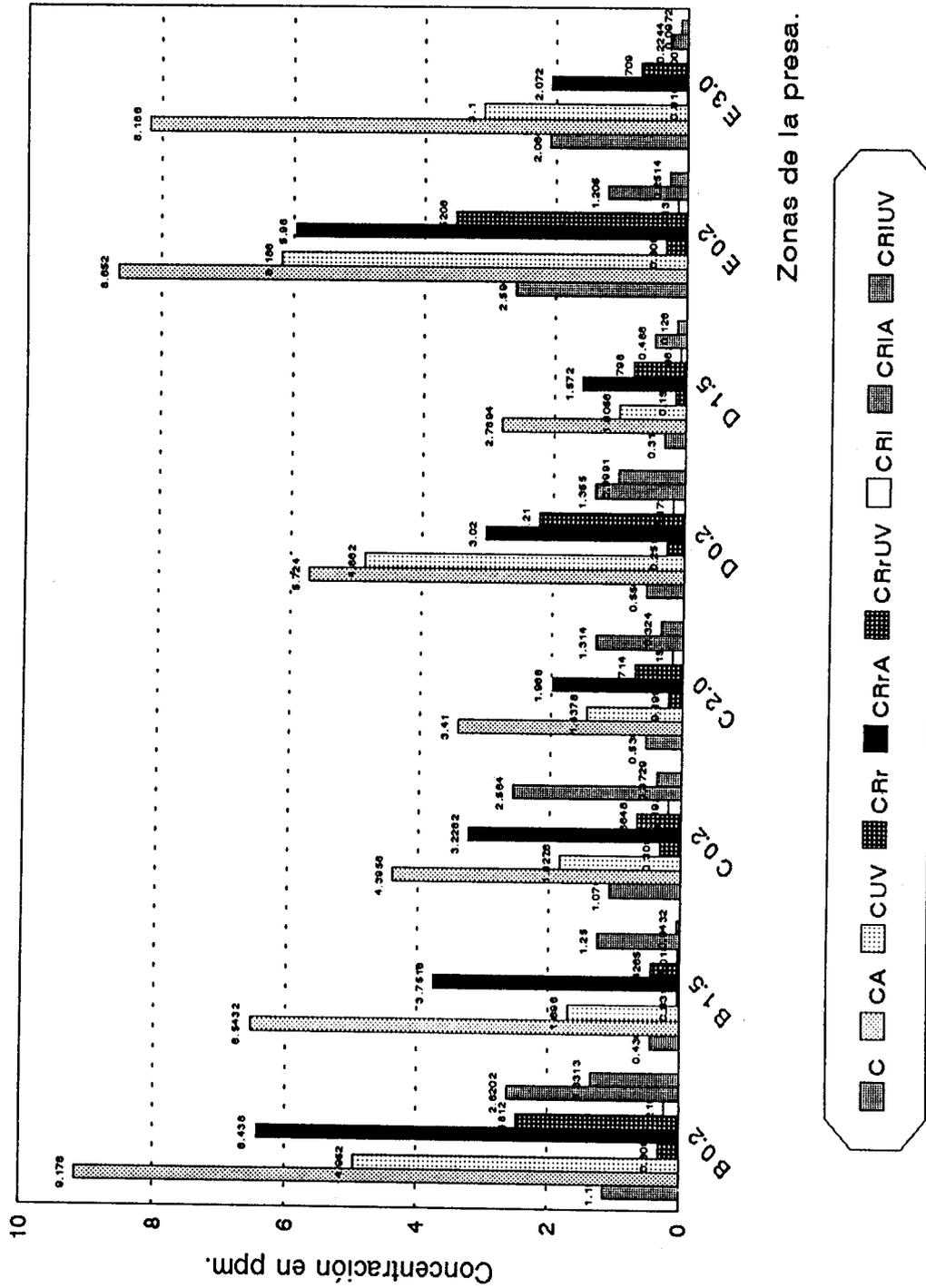


Figura 7.52 Especiación experimental de Cu<sup>2+</sup> para el cuerpo de agua denominado presa J. A. Alzate.

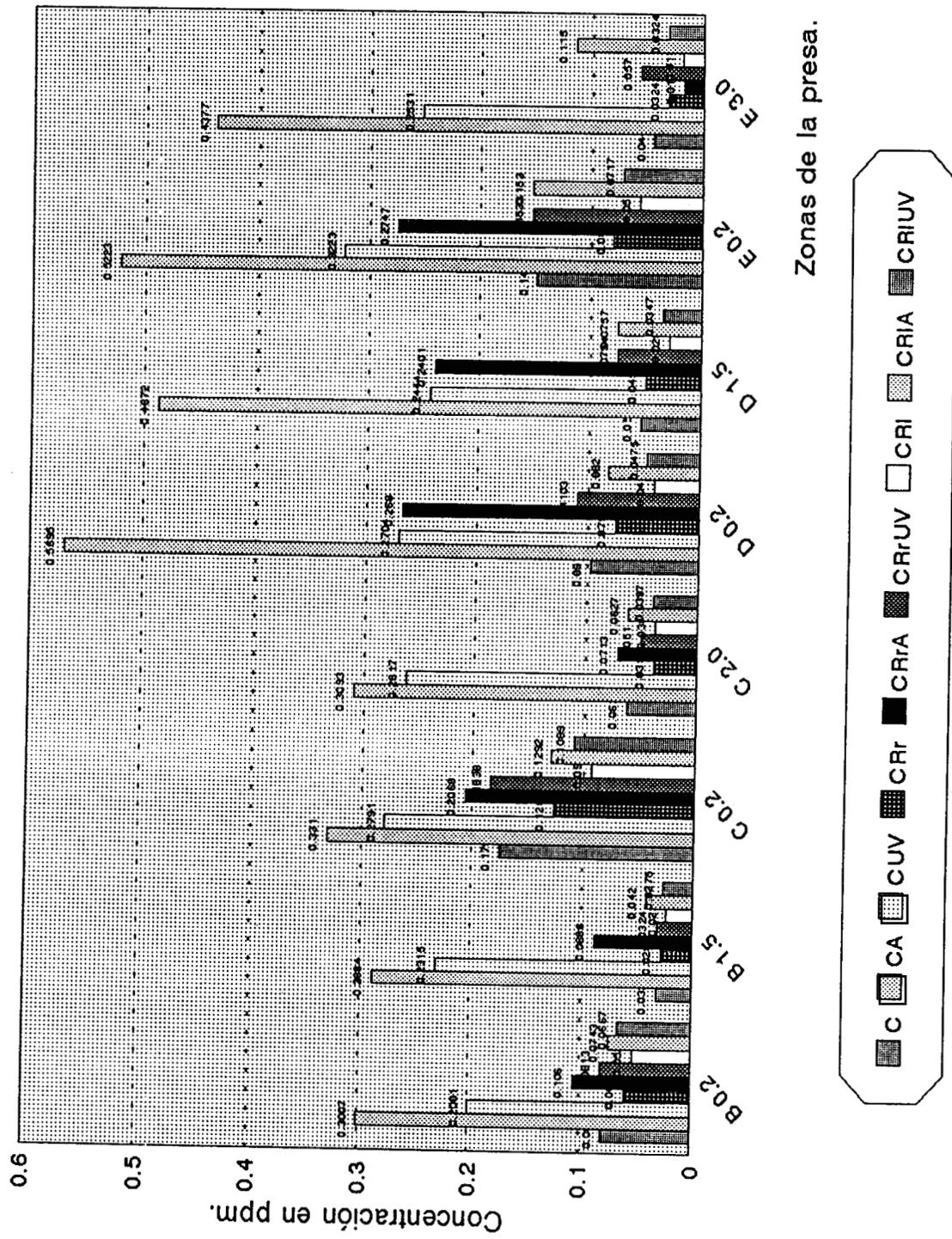


Figura 7.53 Especiación experimental de Cd<sup>2+</sup> para el cuerpo de agua denominado presa J. A. Alzate

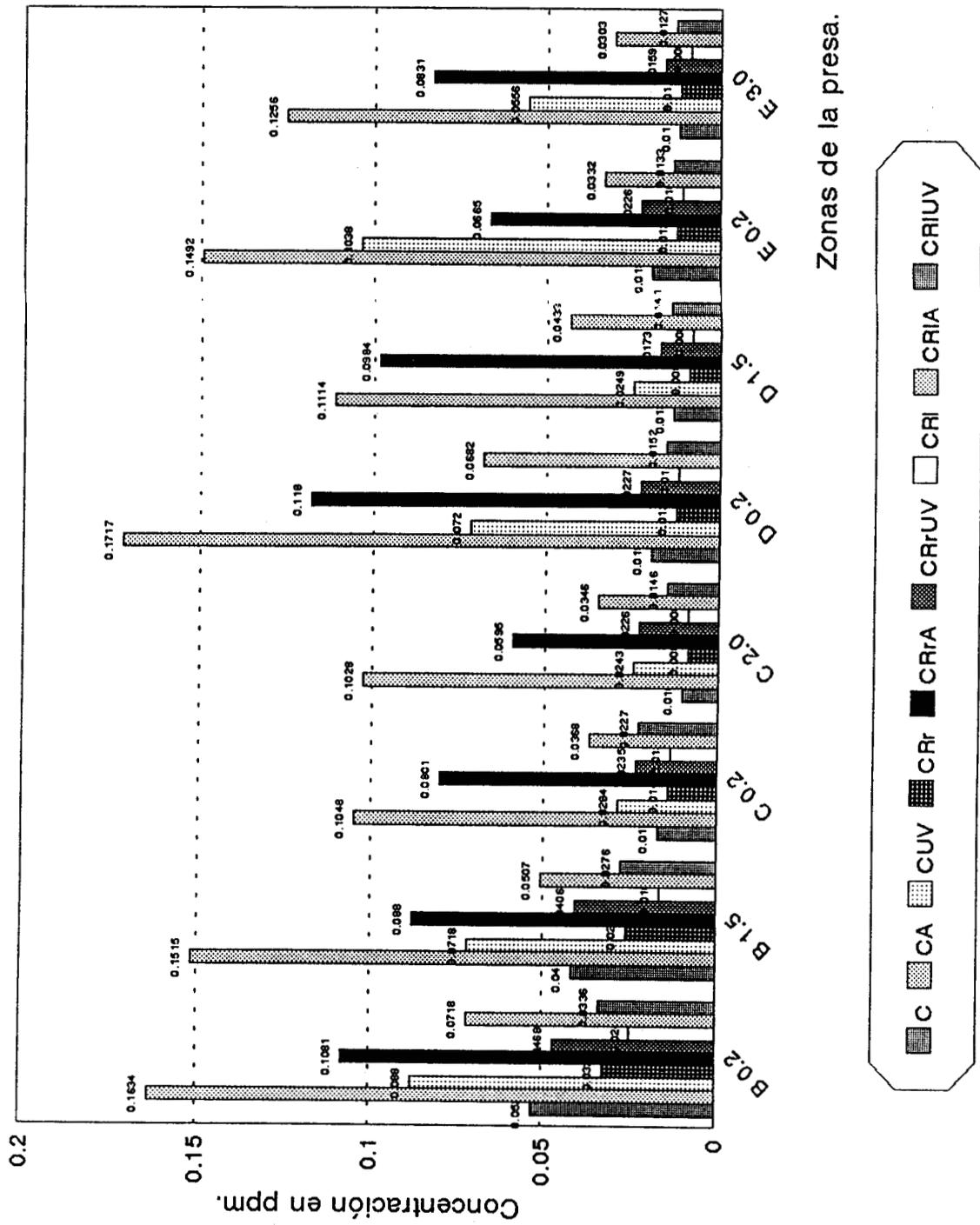


Figura 7.54 Especiación experimental de Fe<sup>2+</sup> para el cuerpo de agua denominado presa J. A. Alzate.

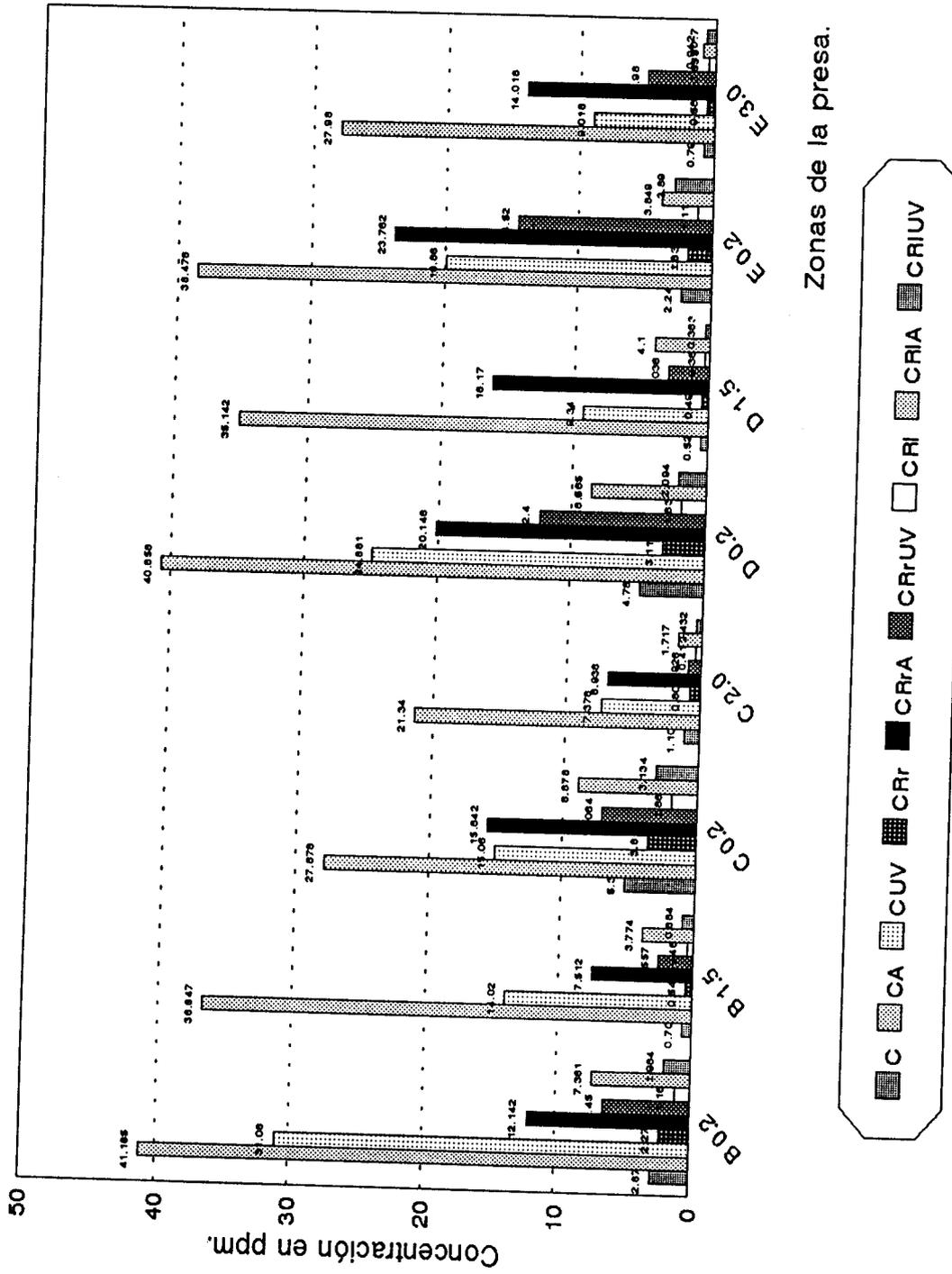


Figura 7.55 Especiación experimental de Mn<sup>2+</sup> para el cuerpo de agua denominado presa J. A. Alzate.

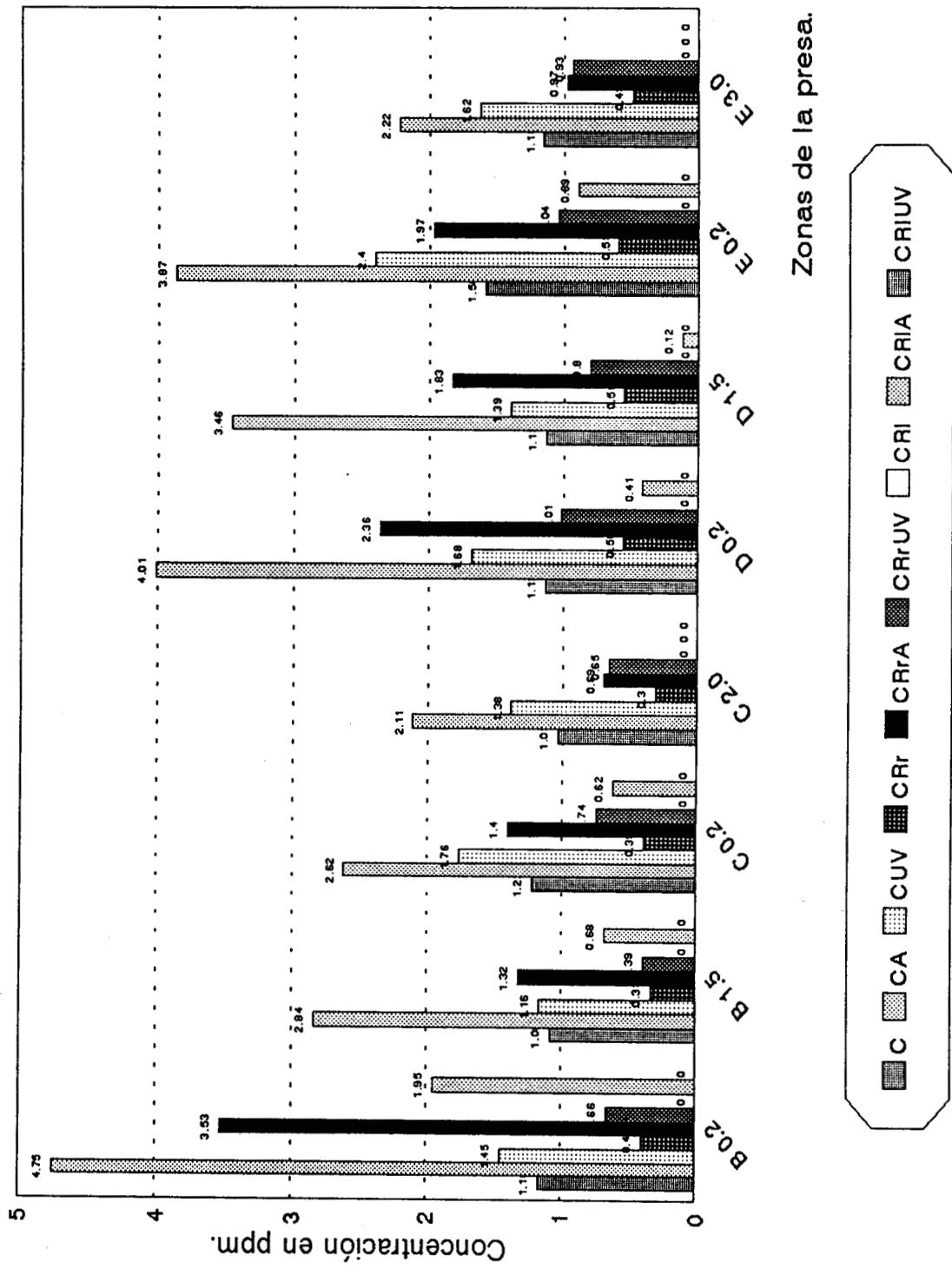


Figura 7.56 Especiación experimental de Pb<sup>2+</sup> para el cuerpo de agua denominado presa J. A. Alzate.

## 7.6.2 Modelamiento teórico.

Las especies que se forman con sus respectivas concentraciones obtenidas a partir de la ecuaciones 6.1 a 6.6, se muestran en las siguientes tablas, las cuales están divididas por metal, zona y profundidad.

**Zona B**  
**0.2 m profundidad**

| Anión  | Concentración en mol/l  |
|--|-------------------------|
| [OH <sup>-</sup> ]                             | $0.4202 \times 10^{-3}$ |
| [HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup> ]               | $6.0770 \times 10^{-3}$ |
| [CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup> ]               | $4.6060 \times 10^{-6}$ |
| [SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup> ]               | $0.4601 \times 10^{-3}$ |
| [Cl <sup>-</sup> ]                             | $3.6122 \times 10^{-3}$ |
| [HS <sup>-</sup> ]                             | $3.7000 \times 10^{-4}$ |
| [S <sup>2-</sup> ]                             | $3.9770 \times 10^{-6}$ |
| [HPO <sub>4</sub> <sup>2-</sup> ]              | $5.3586 \times 10^{-5}$ |
| [H <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> <sup>-</sup> ] | $9.4000 \times 10^{-6}$ |
| [CN <sup>-</sup> ]                             | $9.0000 \times 10^{-7}$ |

| Cu <sup>2+</sup> (concentración total = $1.8097 \times 10^{-4}$ mol/l) |                        |                           |                            |
|--|------------------------|---------------------------|----------------------------|
| Especie  | $\beta$                | $\beta_m [A^x]^m$         | conc. de la especie        |
| Cu(OH) <sup>+</sup>  | $1.995 \times 10^5$    | $8.38698 \times 10^2$     | $8.092863 \times 10^{-22}$ |
| Cu(OH) <sub>2</sub>  | $6.309 \times 10^{11}$ | $1.115028 \times 10^5$    | $1.075926 \times 10^{-19}$ |
| Cu(OH) <sub>4</sub> <sup>2-</sup>                                      | $2.512 \times 10^{16}$ | $7.846400 \times 10^2$    | $7.571240 \times 10^{-22}$ |
| CuCO <sub>3</sub>  | $5.012 \times 10^5$    | $2.308527 \times 10^1$    | $2.227571 \times 10^{-23}$ |
| Cu(CO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> <sup>2-</sup>                        | $1.585 \times 10^{10}$ | $3.362615 \times 10^{-1}$ | $3.244694 \times 10^{-25}$ |
| CuSO <sub>4</sub>  | $2.512 \times 10^2$    | $1.155716 \times 10^{-1}$ | $1.115187 \times 10^{-25}$ |
| CuCl <sup>+</sup>  | $3.162 \times 10^0$    | $1.142178 \times 10^{-2}$ | $1.102124 \times 10^{-26}$ |
| CuHPO <sub>4</sub>   | $3.162 \times 10^{16}$ | $1.694389 \times 10^{12}$ | $1.634970 \times 10^{-12}$ |
| CuH <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> <sup>+</sup>                          | $1.995 \times 10^{21}$ | $1.875300 \times 10^{16}$ | $1.809537 \times 10^{-8}$  |
| Cu(CN) <sub>2</sub>  | $1.995 \times 10^{16}$ | $1.615950 \times 10^4$    | $1.559281 \times 10^{-20}$ |
| Cu(CN) <sub>3</sub> <sup>-</sup>                                       | $3.981 \times 10^{21}$ | $2.902149 \times 10^3$    | $2.800376 \times 10^{-21}$ |
| Cu(CN) <sub>4</sub> <sup>2-</sup>                                      | $1.259 \times 10^{23}$ | $8.260299 \times 10^{-2}$ | $7.970625 \times 10^{-26}$ |
| Cu <sup>2+</sup>   |                        |                           | $9.649317 \times 10^{-25}$ |

## Resultados Analíticos

| <b>Cd<sup>+2</sup> (concentración total = 0.71174x10<sup>-9</sup> mol/l)</b> |                        |                           |                            |
|--|------------------------|---------------------------|----------------------------|
| Especie  | $\beta$                | $\beta_m[A^+ ]^m$         | conc. de la especie        |
| CdOH <sup>+</sup>  | 7.943x10 <sup>3</sup>  | 3.339237x10 <sup>7</sup>  | 1.007247x10 <sup>-63</sup> |
| Cd(OH) <sub>2</sub>  | 3.981x10 <sup>7</sup>  | 7.035867x10 <sup>0</sup>  | 2.122298x10 <sup>-70</sup> |
| CdSO <sub>4</sub>  | 1.995x10 <sup>2</sup>  | 9.178995x10 <sup>-2</sup> | 2.768751x10 <sup>-72</sup> |
| Cd(SO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> <sup>2-</sup>                              | 1.585x10 <sup>3</sup>  | 3.355318x10 <sup>-4</sup> | 1.012098x10 <sup>-74</sup> |
| Cd(SO <sub>4</sub> ) <sub>3</sub> <sup>4-</sup>                              | 5.012x10 <sup>2</sup>  | 4.881663x10 <sup>-8</sup> | 1.472504x10 <sup>-78</sup> |
| CdCl <sup>+</sup>  | 1.000x10 <sup>2</sup>  | 3.612200x10 <sup>-1</sup> | 1.089583x10 <sup>-71</sup> |
| CdCl <sub>2</sub>  | 3.981x10 <sup>2</sup>  | 5.194404x10 <sup>-3</sup> | 1.566839x10 <sup>-73</sup> |
| CdCl <sub>3</sub> <sup>-</sup>   | 2.512x10 <sup>2</sup>  | 1.183954x10 <sup>-5</sup> | 3.571277x10 <sup>-76</sup> |
| CdCl <sub>4</sub> <sup>2-</sup>  | 5.012x10 <sup>1</sup>  | 8.532931x10 <sup>-9</sup> | 2.573872x10 <sup>-79</sup> |
| CdS  | 3.162x10 <sup>19</sup> | 1.257527x10 <sup>14</sup> | 3.793202x10 <sup>-57</sup> |
| CdHS <sup>+</sup>  | 1.259x10 <sup>22</sup> | 4.658300x10 <sup>18</sup> | 1.405129x10 <sup>-52</sup> |
| Cd(HS) <sub>2</sub>  | 1.585x10 <sup>43</sup> | 2.169865x10 <sup>36</sup> | 6.545177x10 <sup>-35</sup> |
| Cd(HS) <sub>3</sub> <sup>-</sup>   | 1.000x10 <sup>59</sup> | 5.065300x10 <sup>48</sup> | 1.527896x10 <sup>-22</sup> |
| Cd(HS) <sub>4</sub> <sup>2-</sup>  | 1.259x10 <sup>75</sup> | 2.359569x10 <sup>61</sup> | 7.117400x10 <sup>-10</sup> |
| Cd(CN) <sup>+</sup>  | 1.000x10 <sup>6</sup>  | 9.000000x10 <sup>-1</sup> | 2.714759x10 <sup>-71</sup> |
| Cd(CN) <sub>2</sub>  | 1.259x10 <sup>11</sup> | 1.019790x10 <sup>-1</sup> | 3.076093x10 <sup>-72</sup> |
| Cd(CN) <sub>3</sub> <sup>-</sup>   | 5.012x10 <sup>15</sup> | 3.653748x10 <sup>-3</sup> | 1.102116x10 <sup>-73</sup> |
| Cd(CN) <sub>4</sub> <sup>2-</sup>  | 7.943x10 <sup>17</sup> | 5.211402x10 <sup>-7</sup> | 1.571966x10 <sup>-77</sup> |
| Cd <sup>2+</sup>   |                        |                           | 3.016398x10 <sup>-71</sup> |

| <b>Mn<sup>+2</sup> (concentración total = 5.2332x10<sup>-8</sup> mol/l)</b> |                        |                           |                            |
|---|------------------------|---------------------------|----------------------------|
| Especie   | $\beta$                | $\beta_m[A^+ ]^m$         | conc. de la especie        |
| MnOH <sup>+</sup>   | 2.512x10 <sup>3</sup>  | 1.056045x10 <sup>0</sup>  | 7.223286x10 <sup>-18</sup> |
| Mn(OH) <sub>2</sub>   | 6.310x10 <sup>5</sup>  | 1.115205x10 <sup>-1</sup> | 7.627937x10 <sup>-19</sup> |
| Mn(OH) <sub>3</sub> <sup>-</sup>  | 1.585x10 <sup>7</sup>  | 1.177653x10 <sup>-3</sup> | 8.055077x10 <sup>-21</sup> |
| Mn(OH) <sub>4</sub> <sup>2-</sup>   | 5.012x10 <sup>7</sup>  | 1.565532x10 <sup>-6</sup> | 1.070815x10 <sup>-23</sup> |
| MnHCO <sub>3</sub> <sup>+</sup>   | 1.259x10 <sup>12</sup> | 7.650943x10 <sup>9</sup>  | 5.233200x10 <sup>-8</sup>  |
| MnSO <sub>4</sub>   | 1.995x10 <sup>2</sup>  | 9.178995x10 <sup>-2</sup> | 6.278379x10 <sup>-19</sup> |
| MnCl <sup>+</sup>   | 3.981x10 <sup>0</sup>  | 1.438017x10 <sup>-2</sup> | 9.835952x10 <sup>-20</sup> |
| Mn <sup>+2</sup>  |                        |                           | 6.839941x10 <sup>-18</sup> |

## Resultados Analíticos

| <b>Fe<sup>2+</sup> (concentración total = 9.4723x10<sup>-7</sup> mol/l)</b> |                        |                           |                            |
|---|------------------------|---------------------------|----------------------------|
| Especie   | $\beta$                | $\beta_m[A^x]^m$          | conc. de la especie        |
| FeOH <sup>+</sup>   | 3.162x10 <sup>4</sup>  | 1.329305x10 <sup>1</sup>  | 6.714424x10 <sup>-23</sup> |
| Fe(OH) <sub>2</sub>   | 2.512x10 <sup>7</sup>  | 4.439612x10 <sup>0</sup>  | 2.242483x10 <sup>-23</sup> |
| Fe(OH) <sub>3</sub> <sup>-</sup>  | 1.000x10 <sup>11</sup> | 7.429988x10 <sup>0</sup>  | 3.752945x10 <sup>-23</sup> |
| FeSO <sub>4</sub>   | 1.585x10 <sup>2</sup>  | 7.292585x10 <sup>-2</sup> | 3.683542x10 <sup>-25</sup> |
| FeHPO <sub>4</sub>  | 1.000x10 <sup>16</sup> | 2.358600x10 <sup>11</sup> | 1.191347x10 <sup>-12</sup> |
| FeH <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> <sup>+</sup>                               | 1.995x10 <sup>22</sup> | 1.875300x10 <sup>17</sup> | 9.472288x10 <sup>-7</sup>  |
| Fe(CN) <sub>6</sub> <sup>4-</sup>   | 2.512x10 <sup>35</sup> | 1.334980x10 <sup>-1</sup> | 6.743089x10 <sup>-25</sup> |
| Fe <sup>2+</sup>  |                        |                           | 5.051079x10 <sup>-24</sup> |

| <b>Pb<sup>2+</sup> (concentración total = 5.5984x10<sup>-9</sup> mol/l)</b> |                        |                           |                            |
|---|------------------------|---------------------------|----------------------------|
| Especie   | $\beta$                | $\beta_m[A^x]^m$          | conc. de la especie        |
| PbOH <sup>+</sup>   | 1.995x10 <sup>6</sup>  | 8.386980x10 <sup>2</sup>  | 3.967434x10 <sup>-22</sup> |
| Pb(OH) <sub>2</sub>   | 7.943x10 <sup>10</sup> | 1.403815x10 <sup>4</sup>  | 6.640702x10 <sup>-21</sup> |
| Pb(OH) <sub>3</sub> <sup>-</sup>  | 7.943x10 <sup>13</sup> | 5.901640x10 <sup>3</sup>  | 2.791752x10 <sup>-21</sup> |
| PbSO <sub>4</sub>   | 6.309x10 <sup>2</sup>  | 2.902771x10 <sup>-1</sup> | 1.373147x10 <sup>-25</sup> |
| PbCl <sup>+</sup>   | 3.981x10 <sup>1</sup>  | 1.438017x10 <sup>-1</sup> | 6.802494x10 <sup>-26</sup> |
| PbCl <sub>2</sub>   | 6.309x10 <sup>1</sup>  | 8.231976x10 <sup>-4</sup> | 3.894110x10 <sup>-28</sup> |
| PbCl <sub>3</sub> <sup>-</sup>  | 5.012x10 <sup>1</sup>  | 2.362253x10 <sup>-6</sup> | 1.117456x10 <sup>-30</sup> |
| PbCl <sub>4</sub> <sup>2-</sup>   | 2.512x10 <sup>1</sup>  | 4.276680x10 <sup>-9</sup> | 2.023070x10 <sup>-33</sup> |
| PbHPO <sub>4</sub>  | 3.162x10 <sup>15</sup> | 1.694389x10 <sup>11</sup> | 8.015253x10 <sup>-14</sup> |
| PbH <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> <sup>+</sup>                               | 1.259x10 <sup>21</sup> | 1.183460x10 <sup>16</sup> | 5.598320x10 <sup>-9</sup>  |
| Pb <sup>2+</sup>  |                        |                           | 4.730468x10 <sup>-25</sup> |

**Zona B**  
**1.5 m de profundidad**

| Anión  | Concentración en mol/l  |
|--|-------------------------|
| [OH <sup>-</sup> ]                             | 0.4343x10 <sup>-3</sup> |
| [HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup> ]               | 6.2470x10 <sup>-3</sup> |
| [CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup> ]               | 4.7348x10 <sup>-6</sup> |
| [SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup> ]               | 0.3926x10 <sup>-3</sup> |
| [Cl <sup>-</sup> ]                             | 2.6581x10 <sup>-3</sup> |
| [HS <sup>-</sup> ]                             | 2.5880x10 <sup>-4</sup> |
| [S <sup>2-</sup> ]                             | 2.7817x10 <sup>-6</sup> |
| [HPO <sub>4</sub> <sup>2-</sup> ]              | 5.3661x10 <sup>-5</sup> |
| [H <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> <sup>-</sup> ] | 9.4144x10 <sup>-6</sup> |
| [CN <sup>-</sup> ]                             | 9.0000x10 <sup>-7</sup> |

| Cu <sup>+2</sup> (concentración total = 0.68706x10 <sup>-8</sup> mol/l) |                        |                           |                            |
|---|------------------------|---------------------------|----------------------------|
| Especie   | $\beta$                | $\beta_m[A^x]^m$          | conc. de la especie        |
| Cu(OH) <sup>+</sup>   | 1.995x10 <sup>6</sup>  | 8.664285x10 <sup>2</sup>  | 3.169221x10 <sup>-22</sup> |
| Cu(OH) <sub>2</sub>   | 6.309x10 <sup>11</sup> | 1.189981x10 <sup>5</sup>  | 4.352711x10 <sup>-20</sup> |
| Cu(OH) <sub>4</sub> <sup>2-</sup>                                       | 2.512x10 <sup>16</sup> | 8.936736x10 <sup>2</sup>  | 3.268878x10 <sup>-22</sup> |
| CuCO <sub>3</sub>   | 5.012x10 <sup>6</sup>  | 2.373082x10 <sup>1</sup>  | 8.680257x10 <sup>-24</sup> |
| Cu(CO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> <sup>2-</sup>                         | 1.585x10 <sup>10</sup> | 3.553305x10 <sup>-1</sup> | 1.299728x10 <sup>-25</sup> |
| CuSO <sub>4</sub>   | 2.512x10 <sup>2</sup>  | 9.862112x10 <sup>-2</sup> | 3.607362x10 <sup>-26</sup> |
| CuCl <sup>+</sup>   | 3.162x10 <sup>0</sup>  | 8.404912x10 <sup>-3</sup> | 3.074348x10 <sup>-27</sup> |
| CuHPO <sub>4</sub>  | 3.162x10 <sup>16</sup> | 1.696761x10 <sup>12</sup> | 6.206411x10 <sup>-13</sup> |
| CuH <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> <sup>+</sup>                           | 1.995x10 <sup>21</sup> | 1.878173x10 <sup>16</sup> | 6.869979x10 <sup>-9</sup>  |
| Cu(CN) <sub>2</sub>   | 1.995x10 <sup>16</sup> | 1.615950x10 <sup>4</sup>  | 5.910820x10 <sup>-21</sup> |
| Cu(CN) <sub>3</sub> <sup>-</sup>  | 3.981x10 <sup>21</sup> | 2.902150x10 <sup>3</sup>  | 1.061548x10 <sup>-21</sup> |
| Cu(CN) <sub>4</sub> <sup>2-</sup>                                       | 1.259x10 <sup>23</sup> | 8.260299x10 <sup>-2</sup> | 3.021451x10 <sup>-26</sup> |
| Cu <sup>2+</sup>  |                        |                           | 3.657799x10 <sup>-25</sup> |

## Resultados Analíticos

| <b>Cd<sup>2+</sup> (concentración total = 0.28825x10<sup>-9</sup> mol/l)</b> |                        |                           |                             |
|--|------------------------|---------------------------|-----------------------------|
| Especie  | $\beta$                | $\beta_m[A^*]^m$          | conc. de la especie         |
| CdOH <sup>+</sup>  | 7.943x10 <sup>3</sup>  | 3.449645x10 <sup>0</sup>  | 1.760601x10 <sup>-70</sup>  |
| Cd(OH) <sub>2</sub>  | 3.981x10 <sup>7</sup>  | 7.508822x10 <sup>0</sup>  | 3.832289x10 <sup>-70</sup>  |
| CdSO <sub>4</sub>  | 1.995x10 <sup>2</sup>  | 7.832370x10 <sup>-2</sup> | 3.997419x10 <sup>-72</sup>  |
| Cd(SO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> <sup>2-</sup>                              | 1.585x10 <sup>3</sup>  | 2.443036x10 <sup>-4</sup> | 1.246856x10 <sup>-74</sup>  |
| Cd(SO <sub>4</sub> ) <sub>3</sub> <sup>4-</sup>                              | 5.012x10 <sup>2</sup>  | 3.032927x10 <sup>-8</sup> | 1.547920x10 <sup>-78</sup>  |
| CdCl <sup>+</sup>  | 1.000x10 <sup>2</sup>  | 2.658100x10 <sup>-1</sup> | 1.356619x10 <sup>-71</sup>  |
| CdCl <sub>2</sub>  | 3.981x10 <sup>2</sup>  | 2.812774x10 <sup>-3</sup> | 1.435560x10 <sup>-73</sup>  |
| CdCl <sub>3</sub> <sup>-</sup>   | 2.512x10 <sup>2</sup>  | 4.717735x10 <sup>-6</sup> | 2.407798x10 <sup>-76</sup>  |
| CdCl <sub>4</sub> <sup>2-</sup>  | 5.012x10 <sup>1</sup>  | 2.502052x10 <sup>-9</sup> | 1.276976x10 <sup>-79</sup>  |
| CdS  | 3.162x10 <sup>19</sup> | 8.795735x10 <sup>13</sup> | 4.489093x10 <sup>-57</sup>  |
| CdHS <sup>+</sup>  | 1.259x10 <sup>22</sup> | 2.258292x10 <sup>18</sup> | 1.152568x10 <sup>-52</sup>  |
| Cd(HS) <sub>2</sub>  | 1.585x10 <sup>43</sup> | 1.061592x10 <sup>36</sup> | 5.418064x10 <sup>-35</sup>  |
| Cd(HS) <sub>3</sub> <sup>-</sup>   | 1.000x10 <sup>59</sup> | 1.733376x10 <sup>48</sup> | 8.846658x10 <sup>-23</sup>  |
| Cd(HS) <sub>4</sub> <sup>2-</sup>  | 1.259x10 <sup>75</sup> | 5.647846x10 <sup>60</sup> | 2.882500x10 <sup>-10</sup>  |
| Cd(CN) <sup>+</sup>  | 1.000x10 <sup>6</sup>  | 9.000000x10 <sup>-1</sup> | 4.593344x10 <sup>-71</sup>  |
| Cd(CN) <sub>2</sub>  | 1.259x10 <sup>11</sup> | 1.019790x10 <sup>-1</sup> | 5.204718x10 <sup>-72</sup>  |
| Cd(CN) <sub>3</sub> <sup>-</sup>   | 5.012x10 <sup>15</sup> | 3.653748x10 <sup>-3</sup> | 1.864769x10 <sup>-73</sup>  |
| Cd(CN) <sub>4</sub> <sup>2-</sup>  | 7.943x10 <sup>17</sup> | 5.211402x10 <sup>-7</sup> | 2.659751x10 <sup>-77</sup>  |
| Cd <sup>2+</sup>   |                        |                           | 5.0103716x10 <sup>-71</sup> |

| <b>Mn<sup>2+</sup> (concentración total = 1.2759x10<sup>-8</sup> mol/l)</b> |                        |                           |                            |
|---|------------------------|---------------------------|----------------------------|
| Especie   | $\beta$                | $\beta_m[A^*]^m$          | conc. de la especie        |
| MnOH <sup>+</sup>   | 2.512x10 <sup>3</sup>  | 1.090962x10 <sup>0</sup>  | 1.769820x10 <sup>-18</sup> |
| Mn(OH) <sub>2</sub>   | 6.310x10 <sup>5</sup>  | 1.190170x10 <sup>-1</sup> | 1.930760x10 <sup>-19</sup> |
| Mn(OH) <sub>3</sub> <sup>-</sup>  | 1.585x10 <sup>7</sup>  | 1.298371x10 <sup>-3</sup> | 2.106290x10 <sup>-21</sup> |
| Mn(OH) <sub>4</sub> <sup>2-</sup>   | 5.012x10 <sup>7</sup>  | 1.783078x10 <sup>-6</sup> | 2.892609x10 <sup>-24</sup> |
| MnHCO <sub>3</sub> <sup>+</sup>   | 1.259x10 <sup>12</sup> | 7.864973x10 <sup>9</sup>  | 1.275900x10 <sup>-8</sup>  |
| MnSO <sub>4</sub>   | 1.995x10 <sup>2</sup>  | 7.832370x10 <sup>-2</sup> | 1.270611x10 <sup>-19</sup> |
| MnCl <sup>+</sup>   | 3.981x10 <sup>0</sup>  | 1.058190x10 <sup>-2</sup> | 1.716655x10 <sup>-20</sup> |
| Mn <sup>2+</sup>  |                        |                           | 1.622256x10 <sup>-18</sup> |

## Resultados Analíticos

| <b>Fe<sup>2+</sup> (concentración total = 7.4847x10<sup>-7</sup> mol/l)</b> |                        |                           |                            |
|---|------------------------|---------------------------|----------------------------|
| Especie   | $\beta$                | $\beta_m[A^x]^m$          | conc. de la especie        |
| FeOH <sup>+</sup>   | 3.162x10 <sup>4</sup>  | 1.373257x10 <sup>1</sup>  | 5.472546x10 <sup>-23</sup> |
| Fe(OH) <sub>2</sub>   | 2.512x10 <sup>7</sup>  | 4.738046x10 <sup>0</sup>  | 1.888151x10 <sup>-23</sup> |
| Fe(OH) <sub>3</sub> <sup>-</sup>  | 1.000x10 <sup>11</sup> | 8.191614x10 <sup>0</sup>  | 3.264428x10 <sup>-23</sup> |
| FeSO <sub>4</sub>   | 1.585x10 <sup>2</sup>  | 6.222710x10 <sup>-2</sup> | 2.479803x10 <sup>-25</sup> |
| FeHPO <sub>4</sub>  | 1.000x10 <sup>16</sup> | 5.366100x10 <sup>11</sup> | 2.138436x10 <sup>-12</sup> |
| FeH <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> <sup>+</sup>                               | 1.995x10 <sup>22</sup> | 1.878173x10 <sup>17</sup> | 7.484679x10 <sup>-7</sup>  |
| Fe(CN) <sub>6</sub> <sup>4-</sup>   | 2.512x10 <sup>35</sup> | 1.334980x10 <sup>-1</sup> | 5.320008x10 <sup>-25</sup> |
| Fe <sup>2+</sup>  |                        |                           | 3.985085x10 <sup>-24</sup> |

| <b>Pb<sup>2+</sup> (concentración total = 5.2123x10<sup>-9</sup> mol/l)</b> |                        |                           |                            |
|---|------------------------|---------------------------|----------------------------|
| Especie   | $\beta$                | $\beta_m[A^x]^m$          | conc. de la especie        |
| PbOH <sup>+</sup>   | 1.995x10 <sup>6</sup>  | 8.664285x10 <sup>2</sup>  | 3.810110x10 <sup>-22</sup> |
| Pb(OH) <sub>2</sub>   | 7.943x10 <sup>10</sup> | 1.498181x10 <sup>4</sup>  | 6.588235x10 <sup>-21</sup> |
| Pb(OH) <sub>3</sub> <sup>-</sup>  | 7.943x10 <sup>13</sup> | 6.506599x10 <sup>3</sup>  | 2.861270x10 <sup>-21</sup> |
| PbSO <sub>4</sub>   | 6.309x10 <sup>2</sup>  | 2.476913x10 <sup>-1</sup> | 1.089220x10 <sup>-25</sup> |
| PbCl <sup>+</sup>   | 3.981x10 <sup>1</sup>  | 1.058190x10 <sup>-1</sup> | 4.653379x10 <sup>-26</sup> |
| PbCl <sub>2</sub>   | 6.309x10 <sup>1</sup>  | 4.457621x10 <sup>-4</sup> | 1.960234x10 <sup>-28</sup> |
| PbCl <sub>3</sub> <sup>-</sup>  | 5.012x10 <sup>1</sup>  | 9.412934x10 <sup>-7</sup> | 4.139328x10 <sup>-31</sup> |
| PbCl <sub>4</sub> <sup>2-</sup>   | 2.512x10 <sup>1</sup>  | 1.254021x10 <sup>-9</sup> | 5.514544x10 <sup>-34</sup> |
| PbHPO <sub>4</sub>  | 3.162x10 <sup>15</sup> | 1.696761x10 <sup>11</sup> | 7.461488x10 <sup>-14</sup> |
| PbH <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> <sup>+</sup>                               | 1.259x10 <sup>21</sup> | 1.185273x10 <sup>16</sup> | 5.212225x10 <sup>-9</sup>  |
| Pb <sup>2+</sup>  |                        |                           | 4.397489x10 <sup>-25</sup> |

**Zona C**  
**0.2 m de profundidad**

| Anión  | Concentración en mol/l  |
|--|-------------------------|
| [OH <sup>-</sup> ]                             | 1.2016x10 <sup>-3</sup> |
| [HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup> ]               | 4.3200x10 <sup>-3</sup> |
| [CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup> ]               | 2.0540x10 <sup>-6</sup> |
| [SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup> ]               | 0.3773x10 <sup>-3</sup> |
| [Cl <sup>-</sup> ]                             | 4.4833x10 <sup>-3</sup> |
| [HS <sup>-</sup> ]                             | 2.6868x10 <sup>-4</sup> |
| [S <sup>2-</sup> ]                             | 0.0000                  |
| [HPO <sub>4</sub> <sup>2-</sup> ]              | 2.4094x10 <sup>-5</sup> |
| [H <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> <sup>-</sup> ] | 8.2982x10 <sup>-6</sup> |
| [CN <sup>-</sup> ]                             | 5.0000x10 <sup>-7</sup> |

| Cu <sup>2+</sup> (concentración total = 1.694363x10 <sup>-3</sup> mol/l) |                        |                           |                            |
|--|------------------------|---------------------------|----------------------------|
| Especie  | $\beta$                | $\beta_m[A^{\pm}]^m$      | conc. de la especie        |
| Cu(OH) <sup>+</sup>  | 1.995x10 <sup>6</sup>  | 2.397192x10 <sup>3</sup>  | 2.453367x10 <sup>-21</sup> |
| Cu(OH) <sub>2</sub>  | 6.309x10 <sup>11</sup> | 9.109203x10 <sup>5</sup>  | 9.322664x10 <sup>-19</sup> |
| Cu(OH) <sub>4</sub> <sup>2-</sup>  | 2.512x10 <sup>16</sup> | 5.236720x10 <sup>4</sup>  | 5.359435x10 <sup>-20</sup> |
| CuCO <sub>3</sub>  | 5.012x10 <sup>6</sup>  | 1.029465x10 <sup>1</sup>  | 1.053589x10 <sup>-23</sup> |
| Cu(CO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> <sup>2-</sup>                          | 1.585x10 <sup>10</sup> | 6.686982x10 <sup>-2</sup> | 6.843682x10 <sup>-26</sup> |
| CuSO <sub>4</sub>  | 2.512x10 <sup>2</sup>  | 9.477776x10 <sup>-2</sup> | 9.699874x10 <sup>-26</sup> |
| CuCl <sup>+</sup>  | 3.162x10 <sup>0</sup>  | 1.417619x10 <sup>-2</sup> | 1.450839x10 <sup>-26</sup> |
| CuHPO <sub>4</sub>   | 3.162x10 <sup>16</sup> | 7.618523x10 <sup>11</sup> | 7.797052x10 <sup>-13</sup> |
| CuH <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> <sup>+</sup>                            | 1.995x10 <sup>21</sup> | 1.655491x10 <sup>16</sup> | 1.694285x10 <sup>-8</sup>  |
| Cu(CN) <sub>2</sub>  | 1.995x10 <sup>16</sup> | 4.981500x10 <sup>3</sup>  | 5.098234x10 <sup>-21</sup> |
| Cu(CN) <sub>3</sub> <sup>-</sup>   | 3.981x10 <sup>21</sup> | 4.976250x10 <sup>2</sup>  | 5.092861x10 <sup>-22</sup> |
| Cu(CN) <sub>4</sub> <sup>2-</sup>  | 1.259x10 <sup>23</sup> | 7.868750x10 <sup>-3</sup> | 8.053143x10 <sup>-27</sup> |
| Cu <sup>2+</sup>   |                        |                           | 1.023434x10 <sup>-24</sup> |

| <b>Cd<sup>2+</sup> (concentración total = 1.5587x10<sup>-3</sup> mol/l)</b> |                        |                           |                            |
|---|------------------------|---------------------------|----------------------------|
| Especie   | $\beta$                | $\beta_m [A^x]^{-n}$      | conc. de la especie        |
| CdOH <sup>+</sup>   | 7.943x10 <sup>3</sup>  | 9.544309x10 <sup>0</sup>  | 2.267462x10 <sup>-69</sup> |
| Cd(OH) <sub>2</sub>   | 3.981x10 <sup>7</sup>  | 5.747937x10 <sup>1</sup>  | 1.365550x10 <sup>-68</sup> |
| CdSO <sub>4</sub>   | 1.995x10 <sup>2</sup>  | 7.527135x10 <sup>-2</sup> | 1.788237x10 <sup>-71</sup> |
| Cd(SO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> <sup>2-</sup>                             | 1.585x10 <sup>3</sup>  | 2.256331x10 <sup>-4</sup> | 5.360413x10 <sup>-74</sup> |
| Cd(SO <sub>4</sub> ) <sub>3</sub> <sup>4-</sup>                             | 5.012x10 <sup>2</sup>  | 2.691978x10 <sup>-8</sup> | 6.395389x10 <sup>-78</sup> |
| CdCl <sup>+</sup>   | 1.000x10 <sup>2</sup>  | 4.483300x10 <sup>-1</sup> | 1.065107x10 <sup>-70</sup> |
| CdCl <sub>2</sub>   | 3.981x10 <sup>2</sup>  | 8.001802x10 <sup>-3</sup> | 1.901005x10 <sup>-72</sup> |
| CdCl <sub>3</sub> <sup>-</sup>  | 2.512x10 <sup>2</sup>  | 2.263670x10 <sup>-5</sup> | 5.377849x10 <sup>-75</sup> |
| CdCl <sub>4</sub> <sup>2-</sup>   | 5.012x10 <sup>1</sup>  | 2.024894x10 <sup>-8</sup> | 4.810584x10 <sup>-78</sup> |
| CdS   | 3.162x10 <sup>19</sup> | 0.00000000                | 0.000000000                |
| CdHS <sup>+</sup>   | 1.259x10 <sup>22</sup> | 3.382681x10 <sup>18</sup> | 8.036307x10 <sup>-52</sup> |
| Cd(HS) <sub>2</sub>   | 1.585x10 <sup>43</sup> | 1.144195x10 <sup>36</sup> | 2.718288x10 <sup>-34</sup> |
| Cd(HS) <sub>3</sub> <sup>-</sup>  | 1.000x10 <sup>59</sup> | 1.939573x10 <sup>48</sup> | 4.607885x10 <sup>-22</sup> |
| Cd(HS) <sub>4</sub> <sup>2-</sup>   | 1.259x10 <sup>75</sup> | 6.560955x10 <sup>60</sup> | 1.558700x10 <sup>-9</sup>  |
| Cd(CN) <sup>+</sup>   | 1.000x10 <sup>6</sup>  | 5.000000x10 <sup>-1</sup> | 1.187861x10 <sup>-70</sup> |
| Cd(CN) <sub>2</sub>   | 1.259x10 <sup>11</sup> | 3.147500x10 <sup>-2</sup> | 7.477583x10 <sup>-72</sup> |
| Cd(CN) <sub>3</sub> <sup>-</sup>  | 5.012x10 <sup>15</sup> | 6.265000x10 <sup>-4</sup> | 1.488389x10 <sup>-73</sup> |
| Cd(CN) <sub>4</sub> <sup>2-</sup>   | 7.943x10 <sup>17</sup> | 4.964375x10 <sup>-8</sup> | 1.179397x10 <sup>-77</sup> |
| Cd <sup>2+</sup>  |                        |                           | 2.375721x10 <sup>-70</sup> |

| <b>Mn<sup>2+</sup> (concentración total = 9.6472x10<sup>-8</sup> mol/l)</b> |                        |                           |                            |
|---|------------------------|---------------------------|----------------------------|
| Especie   | $\beta$                | $\beta_m [A^x]^{-m}$      | conc. de la especie        |
| MnOH <sup>+</sup>   | 2.512x10 <sup>3</sup>  | 3.018419x10 <sup>0</sup>  | 5.353913x10 <sup>-17</sup> |
| Mn(OH) <sub>2</sub>   | 6.310x10 <sup>5</sup>  | 9.110647x10 <sup>-1</sup> | 1.615999x10 <sup>-17</sup> |
| Mn(OH) <sub>3</sub> <sup>-</sup>  | 1.585x10 <sup>7</sup>  | 2.749850x10 <sup>-2</sup> | 4.877540x10 <sup>-19</sup> |
| Mn(OH) <sub>4</sub> <sup>2-</sup>   | 5.012x10 <sup>7</sup>  | 1.044842x10 <sup>-4</sup> | 1.853286x10 <sup>-21</sup> |
| MnHCO <sub>3</sub> <sup>+</sup>   | 1.259x10 <sup>12</sup> | 5.438880x10 <sup>9</sup>  | 9.647200x10 <sup>-8</sup>  |
| MnSO <sub>4</sub>   | 1.995x10 <sup>2</sup>  | 7.527135x10 <sup>-2</sup> | 1.335124x10 <sup>-18</sup> |
| MnCl <sup>+</sup>   | 3.981x10 <sup>0</sup>  | 1.784802x10 <sup>-2</sup> | 3.165788x10 <sup>-19</sup> |
| Mn <sup>2+</sup>  |                        |                           | 1.773748x10 <sup>-17</sup> |

## Resultados Analíticos

| <b>Fe<sup>2+</sup> (concentración total = 3.0619x10<sup>-7</sup> mol/l)</b> |                        |                           |                            |
|---|------------------------|---------------------------|----------------------------|
| Especie   | $\beta$                | $\beta_m[A^*]^m$          | conc. de la especie        |
| FeOH <sup>+</sup>   | 3.162x10 <sup>4</sup>  | 3.799459x10 <sup>1</sup>  | 7.027248x10 <sup>-23</sup> |
| Fe(OH) <sub>2</sub>   | 2.512x10 <sup>7</sup>  | 3.626933x10 <sup>1</sup>  | 6.708155x10 <sup>-23</sup> |
| Fe(OH) <sub>3</sub> <sup>-</sup>  | 1.000x10 <sup>11</sup> | 1.734921x10 <sup>2</sup>  | 3.208804x10 <sup>-22</sup> |
| FeSO <sub>4</sub>   | 1.585x10 <sup>2</sup>  | 5.980205x10 <sup>-2</sup> | 1.106062x10 <sup>-25</sup> |
| FeHPO <sub>4</sub>  | 1.000x10 <sup>16</sup> | 2.409400x10 <sup>11</sup> | 4.456280x10 <sup>-13</sup> |
| FeH <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> <sup>+</sup>                               | 1.995x10 <sup>22</sup> | 1.655491x10 <sup>17</sup> | 3.061896x10 <sup>-7</sup>  |
| Fe(CN) <sub>6</sub> <sup>4-</sup>   | 2.512x10 <sup>35</sup> | 3.925000x10 <sup>-3</sup> | 7.259441x10 <sup>-27</sup> |
| Fe <sup>2+</sup>  |                        |                           | 1.849539x10 <sup>-24</sup> |

| <b>Pb<sup>2+</sup> (concentración total = 5.8880x10<sup>-9</sup> mol/l)</b> |                        |                           |                            |
|---|------------------------|---------------------------|----------------------------|
| Especie   | $\beta$                | $\beta_m[A^*]^m$          | conc. de la especie        |
| PbOH <sup>+</sup>   | 1.995x10 <sup>6</sup>  | 2.397192x10 <sup>3</sup>  | 1.351008x10 <sup>-21</sup> |
| Pb(OH) <sub>2</sub>   | 7.943x10 <sup>10</sup> | 1.146844x10 <sup>5</sup>  | 6.463377x10 <sup>-20</sup> |
| Pb(OH) <sub>3</sub> <sup>-</sup>  | 7.943x10 <sup>13</sup> | 1.378048x10 <sup>5</sup>  | 7.766396x10 <sup>-20</sup> |
| PbSO <sub>4</sub>   | 6.309x10 <sup>2</sup>  | 2.380386x10 <sup>-2</sup> | 1.341537x10 <sup>-26</sup> |
| PbCl <sup>+</sup>   | 3.981x10 <sup>1</sup>  | 1.784802x10 <sup>-1</sup> | 1.005878x10 <sup>-25</sup> |
| PbCl <sub>2</sub>   | 6.309x10 <sup>1</sup>  | 1.268108x10 <sup>-3</sup> | 7.146796x10 <sup>-28</sup> |
| PbCl <sub>3</sub> <sup>-</sup>  | 5.012x10 <sup>1</sup>  | 4.516525x10 <sup>-6</sup> | 2.545421x10 <sup>-30</sup> |
| PbCl <sub>4</sub> <sup>2-</sup>   | 2.512x10 <sup>1</sup>  | 1.014871x10 <sup>-8</sup> | 5.719605x10 <sup>-33</sup> |
| PbHPO <sub>4</sub>  | 3.162x10 <sup>15</sup> | 7.618523x10 <sup>10</sup> | 4.293643x10 <sup>-14</sup> |
| PbH <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> <sup>+</sup>                               | 1.259x10 <sup>21</sup> | 1.044743x10 <sup>16</sup> | 5.887957x10 <sup>-9</sup>  |
| Pb <sup>2+</sup>  |                        |                           | 5.635795x10 <sup>-25</sup> |

**Zona C**  
**2.0 de profundidad**

| Anión  | Concentración en mol/l  |
|--|-------------------------|
| [OH <sup>-</sup> ]                             | 1.1281x10 <sup>-3</sup> |
| [HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup> ]               | 3.0500x10 <sup>-3</sup> |
| [CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup> ]               | 1.0423x10 <sup>-6</sup> |
| [SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup> ]               | 0.4309x10 <sup>-3</sup> |
| [Cl <sup>-</sup> ]                             | 4.2469x10 <sup>-3</sup> |
| [HS <sup>-</sup> ]                             | 3.8696x10 <sup>-4</sup> |
| [S <sup>2-</sup> ]                             | 0.0000                  |
| [HPO <sub>4</sub> <sup>2-</sup> ]              | 3.7478x10 <sup>-5</sup> |
| [H <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> <sup>-</sup> ] | 1.4764x10 <sup>-5</sup> |
| [CN <sup>-</sup> ]                             | 5.0000x10 <sup>-7</sup> |

| Cu <sup>2+</sup> (concentración total = 0.844742x10 <sup>-3</sup> mol/l) |                        |                           |                            |
|--|------------------------|---------------------------|----------------------------|
| Especie  | $\beta$                | $\beta_m [A^{+}]^m$       | conc. de la especie        |
| Cu(OH) <sup>+</sup>  | 1.995x10 <sup>6</sup>  | 2.250560x10 <sup>3</sup>  | 6.454316x10 <sup>-22</sup> |
| Cu(OH) <sub>2</sub>  | 6.309x10 <sup>11</sup> | 8.028894x10 <sup>5</sup>  | 2.302583x10 <sup>-19</sup> |
| Cu(OH) <sub>4</sub> <sup>2-</sup>  | 2.512x10 <sup>16</sup> | 4.068272x10 <sup>4</sup>  | 1.166728x10 <sup>-20</sup> |
| CuCO <sub>3</sub>  | 5.012x10 <sup>6</sup>  | 5.224008x10 <sup>0</sup>  | 1.498178x10 <sup>-24</sup> |
| Cu(CO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> <sup>2-</sup>                          | 1.585x10 <sup>10</sup> | 1.721927x10 <sup>-2</sup> | 4.938265x10 <sup>-27</sup> |
| CuSO <sub>4</sub>  | 2.512x10 <sup>2</sup>  | 1.082421x10 <sup>-1</sup> | 3.104244x10 <sup>-26</sup> |
| CuCl <sup>+</sup>  | 3.162x10 <sup>0</sup>  | 1.342870x10 <sup>-2</sup> | 3.851178x10 <sup>-27</sup> |
| CuHPO <sub>4</sub>   | 3.162x10 <sup>16</sup> | 1.185054x10 <sup>12</sup> | 3.398582x10 <sup>-13</sup> |
| CuH <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> <sup>+</sup>                            | 1.995x10 <sup>21</sup> | 2.945418x10 <sup>16</sup> | 8.447079x10 <sup>-9</sup>  |
| Cu(CN) <sub>2</sub>  | 1.995x10 <sup>16</sup> | 4.987500x10 <sup>3</sup>  | 1.430351x10 <sup>-21</sup> |
| Cu(CN) <sub>3</sub> <sup>-</sup>   | 3.981x10 <sup>21</sup> | 4.976250x10 <sup>2</sup>  | 1.427124x10 <sup>-22</sup> |
| Cu(CN) <sub>4</sub> <sup>2-</sup>  | 1.259x10 <sup>23</sup> | 7.868750x10 <sup>-3</sup> | 2.256656x10 <sup>-27</sup> |
| Cu <sup>2+</sup>   |                        |                           | 2.867871x10 <sup>-25</sup> |

## Resultados Analíticos

| <b>Cd<sup>2+</sup> (concentración total = 5.57746x10<sup>-10</sup> mol/l)</b> |                        |                           |                            |
|---|------------------------|---------------------------|----------------------------|
| Especie   | $\beta$                | $\beta_m[A^*]^m$          | conc. de la especie        |
| CdOH <sup>+</sup>   | 7.943x10 <sup>3</sup>  | 8.960498x10 <sup>0</sup>  | 1.770520x10 <sup>-70</sup> |
| Cd(OH) <sub>2</sub>   | 3.981x10 <sup>7</sup>  | 5.066259x10 <sup>1</sup>  | 1.001051x10 <sup>-69</sup> |
| CdSO <sub>4</sub>   | 1.995x10 <sup>2</sup>  | 8.596455x10 <sup>-2</sup> | 1.698588x10 <sup>-72</sup> |
| Cd(SO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> <sup>2-</sup>                               | 1.585x10 <sup>3</sup>  | 2.942946x10 <sup>-4</sup> | 5.815018x10 <sup>-71</sup> |
| Cd(SO <sub>4</sub> ) <sub>3</sub> <sup>4-</sup>                               | 5.012x10 <sup>2</sup>  | 4.009965x10 <sup>-8</sup> | 7.923359x10 <sup>-74</sup> |
| CdCl <sup>+</sup>   | 1.000x10 <sup>2</sup>  | 4.246900x10 <sup>-1</sup> | 8.391523x10 <sup>-72</sup> |
| CdCl <sub>2</sub>   | 3.981x10 <sup>2</sup>  | 7.180195x10 <sup>-3</sup> | 1.418747x10 <sup>-73</sup> |
| CdCl <sub>3</sub> <sup>-</sup>  | 2.512x10 <sup>2</sup>  | 1.924136x10 <sup>-5</sup> | 3.801934x10 <sup>-76</sup> |
| CdCl <sub>4</sub> <sup>2-</sup>   | 5.012x10 <sup>1</sup>  | 1.630419x10 <sup>-8</sup> | 3.221573x10 <sup>-79</sup> |
| CdS   | 3.162x10 <sup>19</sup> | 0.000000                  | 0.00000000                 |
| CdHS <sup>+</sup>   | 1.259x10 <sup>22</sup> | 4.871826x10 <sup>18</sup> | 9.626326x10 <sup>-53</sup> |
| Cd(HS) <sub>2</sub>   | 1.585x10 <sup>43</sup> | 2.373348x10 <sup>36</sup> | 4.689540x10 <sup>-35</sup> |
| Cd(HS) <sub>3</sub> <sup>-</sup>  | 1.000x10 <sup>59</sup> | 5.794263x10 <sup>48</sup> | 1.144898x10 <sup>-22</sup> |
| Cd(HS) <sub>4</sub> <sup>2-</sup>   | 1.259x10 <sup>75</sup> | 2.822864x10 <sup>61</sup> | 5.577746x10 <sup>-10</sup> |
| Cd(CN) <sup>+</sup>   | 1.000x10 <sup>6</sup>  | 5.000000x10 <sup>-1</sup> | 9.879587x10 <sup>-72</sup> |
| Cd(CN) <sub>2</sub>   | 1.259x10 <sup>11</sup> | 3.147500x10 <sup>-2</sup> | 6.219200x10 <sup>-73</sup> |
| Cd(CN) <sub>3</sub> <sup>-</sup>  | 5.012x10 <sup>15</sup> | 6.265000x10 <sup>-4</sup> | 1.237912x10 <sup>-74</sup> |
| Cd(CN) <sub>4</sub> <sup>2-</sup>   | 7.943x10 <sup>17</sup> | 4.964375x10 <sup>-8</sup> | 9.809195x10 <sup>-79</sup> |
| Cd <sup>2+</sup>  |                        |                           | 1.975917x10 <sup>-71</sup> |

| <b>Mn<sup>2+</sup> (concentración total = 2.0059x10<sup>-8</sup> mol/l)</b> |                        |                           |                            |
|---|------------------------|---------------------------|----------------------------|
| Especie   | $\beta$                | $\beta_m[A^*]^m$          | conc. de la especie        |
| MnOH <sup>+</sup>   | 2.512x10 <sup>3</sup>  | 2.833787x10 <sup>0</sup>  | 1.480304x10 <sup>-17</sup> |
| Mn(OH) <sub>2</sub>   | 6.310x10 <sup>5</sup>  | 8.030167x10 <sup>-1</sup> | 4.194771x10 <sup>-18</sup> |
| Mn(OH) <sub>3</sub> <sup>-</sup>  | 1.585x10 <sup>7</sup>  | 2.275475x10 <sup>-2</sup> | 1.188655x10 <sup>-19</sup> |
| Mn(OH) <sub>4</sub> <sup>2-</sup>   | 5.012x10 <sup>7</sup>  | 8.117111x10 <sup>-5</sup> | 4.240189x10 <sup>-22</sup> |
| MnHCO <sub>3</sub> <sup>+</sup>   | 1.259x10 <sup>12</sup> | 3.839950x10 <sup>9</sup>  | 2.005900x10 <sup>-8</sup>  |
| MnSO <sub>4</sub>   | 1.995x10 <sup>2</sup>  | 8.596455x10 <sup>-2</sup> | 4.490587x10 <sup>-19</sup> |
| MnCl <sup>+</sup>   | 3.981x10 <sup>0</sup>  | 1.690691x10 <sup>-2</sup> | 8.831774x10 <sup>-20</sup> |
| Mn <sup>2+</sup>  |                        |                           | 5.223766x10 <sup>-18</sup> |

## Resultados Analíticos

| <b>Fe<sup>2+</sup> (concentración total = 1.8264x10<sup>-7</sup> mol/l)</b> |                        |                           |                            |
|---|------------------------|---------------------------|----------------------------|
| Especie   | $\beta$                | $\beta_m [A^x]^m$         | conc. de la especie        |
| FeOH <sup>+</sup>   | 3.162x10 <sup>4</sup>  | 3.567052x10 <sup>1</sup>  | 2.211861x10 <sup>-23</sup> |
| Fe(OH) <sub>2</sub>   | 2.512x10 <sup>7</sup>  | 3.196795x10 <sup>1</sup>  | 1.982272x10 <sup>-23</sup> |
| Fe(OH) <sub>3</sub> <sup>-</sup>  | 1.000x10 <sup>11</sup> | 1.435631x10 <sup>2</sup>  | 8.902075x10 <sup>-23</sup> |
| FeSO <sub>4</sub>   | 1.585x10 <sup>2</sup>  | 6.829765x10 <sup>-2</sup> | 4.235007x10 <sup>-26</sup> |
| FeHPO <sub>4</sub>  | 1.000x10 <sup>16</sup> | 3.747800x10 <sup>11</sup> | 2.323939x10 <sup>-13</sup> |
| FeH <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> <sup>+</sup>                               | 1.995x10 <sup>22</sup> | 2.945418x10 <sup>17</sup> | 1.826398x10 <sup>-7</sup>  |
| Fe(CN) <sub>6</sub> <sup>4-</sup>   | 2.512x10 <sup>35</sup> | 3.925000x10 <sup>-3</sup> | 2.433818x10 <sup>-27</sup> |
| Fe <sup>2+</sup>  |                        |                           | 6.20081x10 <sup>-25</sup>  |

| <b>Pb<sup>2+</sup> (concentración total = 4.9710x10<sup>-9</sup> mol/l)</b> |                        |                           |                            |
|---|------------------------|---------------------------|----------------------------|
| Especie   | $\beta$                | $\beta_m [A^x]^m$         | conc. de la especie        |
| PbOH <sup>+</sup>   | 1.995x10 <sup>6</sup>  | 2.250560x10 <sup>3</sup>  | 6.018687x10 <sup>-22</sup> |
| Pb(OH) <sub>2</sub>   | 7.943x10 <sup>10</sup> | 1.010834x10 <sup>5</sup>  | 2.703280x10 <sup>-20</sup> |
| Pb(OH) <sub>3</sub> <sup>-</sup>  | 7.943x10 <sup>13</sup> | 1.140322x10 <sup>5</sup>  | 3.049570x10 <sup>-20</sup> |
| PbSO <sub>4</sub>   | 6.309x10 <sup>2</sup>  | 2.718548x10 <sup>-1</sup> | 7.270230x10 <sup>-26</sup> |
| PbCl <sup>+</sup>   | 3.981x10 <sup>1</sup>  | 1.690691x10 <sup>-1</sup> | 4.521425x10 <sup>-26</sup> |
| PbCl <sub>2</sub>   | 6.309x10 <sup>1</sup>  | 1.137901x10 <sup>-3</sup> | 3.043096x10 <sup>-28</sup> |
| PbCl <sub>3</sub> <sup>-</sup>  | 5.012x10 <sup>1</sup>  | 3.839080x10 <sup>-6</sup> | 1.026688x10 <sup>-30</sup> |
| PbCl <sub>4</sub> <sup>2-</sup>   | 2.512x10 <sup>1</sup>  | 8.171613x10 <sup>-9</sup> | 2.185340x10 <sup>-33</sup> |
| PbHPO <sub>4</sub>  | 3.162x10 <sup>15</sup> | 1.185054x10 <sup>11</sup> | 3.169197x10 <sup>-14</sup> |
| PbH <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> <sup>+</sup>                               | 1.259x10 <sup>21</sup> | 1.858788x10 <sup>16</sup> | 4.970968x10 <sup>-9</sup>  |
| Pb <sup>2+</sup>  |                        |                           | 2.674306x10 <sup>-25</sup> |

**Zona D**  
**0.2 m de profundidad**

| Anión  | Concentración en mol/l  |
|--|-------------------------|
| [OH <sup>-</sup> ]                             | 0.5373x10 <sup>-3</sup> |
| [HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup> ]               | 6.4910x10 <sup>-3</sup> |
| [CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup> ]               | 4.9198x10 <sup>-6</sup> |
| [SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup> ]               | 0.1464x10 <sup>-3</sup> |
| [Cl <sup>-</sup> ]                             | 3.7058x10 <sup>-3</sup> |
| [HS <sup>-</sup> ]                             | 3.9943x10 <sup>-4</sup> |
| [S <sup>2-</sup> ]                             | 4.2933x10 <sup>-6</sup> |
| [HPO <sub>4</sub> <sup>2-</sup> ]              | 2.7930x10 <sup>-5</sup> |
| [H <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> <sup>-</sup> ] | 4.9000x10 <sup>-6</sup> |
| [CN <sup>-</sup> ]                             | 1.1000x10 <sup>-6</sup> |

| Cu <sup>2+</sup> (concentración total = 0.8762157x10 <sup>-8</sup> mol/l) |                        |                           |                            |
|---|------------------------|---------------------------|----------------------------|
| Especie   | $\beta$                | $\beta_m[A^+ ]^m$         | conc. de la especie        |
| Cu(OH) <sup>+</sup>   | 1.995x10 <sup>6</sup>  | 1.071914x10 <sup>3</sup>  | 9.607110x10 <sup>-22</sup> |
| Cu(OH) <sub>2</sub>   | 6.309x10 <sup>11</sup> | 1.821353x10 <sup>5</sup>  | 1.632401x10 <sup>-19</sup> |
| Cu(OH) <sub>4</sub> <sup>2-</sup>   | 2.512x10 <sup>16</sup> | 2.093568x10 <sup>3</sup>  | 1.876376x10 <sup>-21</sup> |
| CuCO <sub>3</sub>   | 5.012x10 <sup>6</sup>  | 2.465804x10 <sup>1</sup>  | 2.209995x10 <sup>-23</sup> |
| Cu(CO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> <sup>2-</sup>                           | 1.585x10 <sup>10</sup> | 3.836402x10 <sup>-1</sup> | 3.438404x10 <sup>-25</sup> |
| CuSO <sub>4</sub>   | 2.512x10 <sup>2</sup>  | 3.677568x10 <sup>-2</sup> | 3.296048x10 <sup>-26</sup> |
| CuCl <sup>+</sup>   | 3.162x10 <sup>0</sup>  | 1.171774x10 <sup>-2</sup> | 1.050211x10 <sup>-26</sup> |
| CuHPO <sub>4</sub>  | 3.162x10 <sup>16</sup> | 8.831466x10 <sup>11</sup> | 7.915268x10 <sup>-13</sup> |
| CuH <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> <sup>+</sup>                             | 1.995x10 <sup>21</sup> | 9.775500x10 <sup>15</sup> | 8.761365x10 <sup>-9</sup>  |
| Cu(CN) <sub>2</sub>   | 1.995x10 <sup>16</sup> | 2.413950x10 <sup>4</sup>  | 2.163521x10 <sup>-20</sup> |
| Cu(CN) <sub>3</sub> <sup>-</sup>  | 3.981x10 <sup>21</sup> | 5.298711x10 <sup>3</sup>  | 4.749010x10 <sup>-21</sup> |
| Cu(CN) <sub>4</sub> <sup>2-</sup>   | 1.259x10 <sup>23</sup> | 1.843302x10 <sup>-1</sup> | 1.652073x10 <sup>-25</sup> |
| Cu <sup>2+</sup>  |                        |                           | 8.962575x10 <sup>-25</sup> |

## Resultados Analíticos

| <b>Cd<sup>2+</sup> (concentración total = 8.6566x10<sup>-9</sup> mol/l)</b> |                        |                           |                            |
|---|------------------------|---------------------------|----------------------------|
| Especie   | $\beta$                | $\beta_m[A^+ ]^m$         | conc. de la especie        |
| CdOH <sup>+</sup>   | 7.943x10 <sup>3</sup>  | 4.267774x10 <sup>0</sup>  | 1.152817x10 <sup>-69</sup> |
| Cd(OH) <sub>2</sub>   | 3.981x10 <sup>7</sup>  | 1.149280x10 <sup>1</sup>  | 3.104450x10 <sup>-69</sup> |
| CdSO <sub>4</sub>   | 1.995x10 <sup>2</sup>  | 2.920680x10 <sup>-2</sup> | 7.889380x10 <sup>-72</sup> |
| Cd(SO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> <sup>2-</sup>                             | 1.585x10 <sup>3</sup>  | 3.397124x10 <sup>-5</sup> | 9.176357x10 <sup>-75</sup> |
| Cd(SO <sub>4</sub> ) <sub>3</sub> <sup>4-</sup>                             | 5.012x10 <sup>2</sup>  | 1.572658x10 <sup>-9</sup> | 4.248085x10 <sup>-79</sup> |
| CdCl <sup>+</sup>   | 1.000x10 <sup>2</sup>  | 3.705800x10 <sup>-1</sup> | 1.001016x10 <sup>-70</sup> |
| CdCl <sub>2</sub>   | 3.981x10 <sup>2</sup>  | 5.467089x10 <sup>-3</sup> | 1.476777x10 <sup>-72</sup> |
| CdCl <sub>3</sub> <sup>-</sup>  | 2.512x10 <sup>2</sup>  | 1.278396x10 <sup>-5</sup> | 3.453220x10 <sup>-75</sup> |
| CdCl <sub>4</sub> <sup>2-</sup>   | 5.012x10 <sup>1</sup>  | 9.452332x10 <sup>-9</sup> | 2.553277x10 <sup>-78</sup> |
| CdS   | 3.162x10 <sup>19</sup> | 4.293300x10 <sup>-6</sup> | 1.159712x10 <sup>-75</sup> |
| CdHS <sup>+</sup>   | 1.259x10 <sup>22</sup> | 5.028824x10 <sup>18</sup> | 1.358393x10 <sup>-51</sup> |
| Cd(HS) <sub>2</sub>   | 1.585x10 <sup>43</sup> | 2.528778x10 <sup>36</sup> | 6.830769x10 <sup>-34</sup> |
| Cd(HS) <sub>3</sub> <sup>-</sup>  | 1.000x10 <sup>59</sup> | 6.372679x10 <sup>48</sup> | 1.721397x10 <sup>-21</sup> |
| Cd(HS) <sub>4</sub> <sup>2-</sup>   | 1.259x10 <sup>75</sup> | 3.204708x10 <sup>61</sup> | 8.656600x10 <sup>-9</sup>  |
| Cd(CN) <sup>+</sup>   | 1.000x10 <sup>6</sup>  | 1.100000x10 <sup>0</sup>  | 2.971335x10 <sup>-70</sup> |
| Cd(CN) <sub>2</sub>   | 1.259x10 <sup>11</sup> | 1.523390x10 <sup>-1</sup> | 4.115001x10 <sup>-71</sup> |
| Cd(CN) <sub>3</sub> <sup>-</sup>  | 5.012x10 <sup>15</sup> | 6.670972x10 <sup>-3</sup> | 1.801972x10 <sup>-72</sup> |
| Cd(CN) <sub>4</sub> <sup>2-</sup>   | 7.943x10 <sup>17</sup> | 1.162935x10 <sup>-6</sup> | 3.141336x10 <sup>-76</sup> |
| Cd <sup>2+</sup>  |                        |                           | 2.701213x10 <sup>-70</sup> |

| <b>Mn<sup>2+</sup> (concentración total = 6.3557x10<sup>-8</sup> mol/l)</b> |                        |                           |                            |
|---|------------------------|---------------------------|----------------------------|
| Especie   | $\beta$                | $\beta_m[A^+ ]^m$         | conc. de la especie        |
| MnOH <sup>+</sup>   | 2.512x10 <sup>3</sup>  | 1.346980x10 <sup>0</sup>  | 1.047580x10 <sup>-17</sup> |
| Mn(OH) <sub>2</sub>   | 6.310x10 <sup>5</sup>  | 1.821642x10 <sup>-1</sup> | 1.416736x10 <sup>-18</sup> |
| Mn(OH) <sub>3</sub> <sup>-</sup>  | 1.585x10 <sup>7</sup>  | 2.458554x10 <sup>-3</sup> | 1.912079x10 <sup>-20</sup> |
| Mn(OH) <sub>4</sub> <sup>2-</sup>   | 5.012x10 <sup>7</sup>  | 4.177134x10 <sup>-6</sup> | 3.248661x10 <sup>-23</sup> |
| MnHCO <sub>3</sub> <sup>+</sup>   | 1.259x10 <sup>12</sup> | 8.172169x10 <sup>9</sup>  | 6.355700x10 <sup>-8</sup>  |
| MnSO <sub>4</sub>   | 1.995x10 <sup>2</sup>  | 2.920680x10 <sup>-2</sup> | 2.271486x10 <sup>-19</sup> |
| MnCl <sup>+</sup>   | 3.981x10 <sup>0</sup>  | 1.475279x10 <sup>-2</sup> | 1.147361x10 <sup>-19</sup> |
| Mn <sup>2+</sup>  |                        |                           | 7.777250x10 <sup>-18</sup> |

## Resultados Analíticos

| <b>Fe<sup>2+</sup> (concentración total = 3.4917x10<sup>-7</sup> mol/l)</b> |                        |                           |                            |
|---|------------------------|---------------------------|----------------------------|
| Especie   | $\beta$                | $\beta_m[A^{\pm}]^m$      | conc. de la especie        |
| FeOH <sup>+</sup>   | 3.162x10 <sup>4</sup>  | 1.698943x10 <sup>1</sup>  | 6.068418x10 <sup>-23</sup> |
| Fe(OH) <sub>2</sub>   | 2.512x10 <sup>7</sup>  | 7.251925x10 <sup>0</sup>  | 2.590300x10 <sup>-23</sup> |
| Fe(OH) <sub>3</sub> <sup>-</sup>  | 1.000x10 <sup>11</sup> | 1.551138x10 <sup>1</sup>  | 5.540477x10 <sup>-23</sup> |
| FeSO <sub>4</sub>   | 1.585x10 <sup>2</sup>  | 2.320440x10 <sup>-2</sup> | 8.288330x10 <sup>-26</sup> |
| FeHPO <sub>4</sub>  | 1.000x10 <sup>16</sup> | 2.793000x10 <sup>11</sup> | 9.976257x10 <sup>-13</sup> |
| FeH <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> <sup>+</sup>                               | 1.995x10 <sup>22</sup> | 9.775500x10 <sup>16</sup> | 3.491690x10 <sup>-7</sup>  |
| Fe(CN) <sub>6</sub> <sup>4-</sup>   | 2.512x10 <sup>35</sup> | 4.450161x10 <sup>-1</sup> | 1.589544x10 <sup>-24</sup> |
| Fe <sup>2+</sup>  |                        |                           | 3.571879x10 <sup>-24</sup> |

| <b>Pb<sup>2+</sup> (concentración total = 5.4537x10<sup>-9</sup> mol/l)</b> |                        |                           |                            |
|---|------------------------|---------------------------|----------------------------|
| Especie   | $\beta$                | $\beta_m[A^{\pm}]^m$      | conc. de la especie        |
| PbOH <sup>+</sup>   | 1.995x10 <sup>6</sup>  | 1.071914x10 <sup>3</sup>  | 9.475959x10 <sup>-22</sup> |
| Pb(OH) <sub>2</sub>   | 7.943x10 <sup>10</sup> | 2.293075x10 <sup>4</sup>  | 2.027129x10 <sup>-20</sup> |
| Pb(OH) <sub>3</sub> <sup>-</sup>  | 7.943x10 <sup>13</sup> | 1.232069x10 <sup>4</sup>  | 1.089176x10 <sup>-20</sup> |
| PbSO <sub>4</sub>   | 6.309x10 <sup>2</sup>  | 9.236376x10 <sup>-2</sup> | 8.165165x10 <sup>-26</sup> |
| PbCl <sup>+</sup>   | 3.981x10 <sup>1</sup>  | 1.475279x10 <sup>-1</sup> | 1.304180x10 <sup>-25</sup> |
| PbCl <sub>2</sub>   | 6.309x10 <sup>1</sup>  | 8.664120x10 <sup>-4</sup> | 7.659275x10 <sup>-28</sup> |
| PbCl <sub>3</sub> <sup>-</sup>  | 5.012x10 <sup>1</sup>  | 2.550686x10 <sup>-6</sup> | 2.254863x10 <sup>-30</sup> |
| PbCl <sub>4</sub> <sup>2-</sup>   | 2.512x10 <sup>1</sup>  | 4.737482x10 <sup>-9</sup> | 4.188040x10 <sup>-33</sup> |
| PbHPO <sub>4</sub>  | 3.162x10 <sup>15</sup> | 8.831466x10 <sup>10</sup> | 7.807213x10 <sup>-14</sup> |
| PbH <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> <sup>+</sup>                               | 1.259x10 <sup>21</sup> | 6.169100x10 <sup>15</sup> | 5.453622x10 <sup>-9</sup>  |
| Pb <sup>2+</sup>  |                        |                           | 8.840223x10 <sup>-25</sup> |

**Zona D**  
**1.5 m de profundidad**

| Anión  | Concentración en mol/l  |
|--|-------------------------|
| [OH <sup>-</sup> ]                             | 0.5381x10 <sup>-3</sup> |
| [HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup> ]               | 6.5010x10 <sup>-3</sup> |
| [CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup> ]               | 4.9273x10 <sup>-6</sup> |
| [SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup> ]               | 0.0607x10 <sup>-3</sup> |
| [Cl <sup>-</sup> ]                             | 3.4318x10 <sup>-3</sup> |
| [HS <sup>-</sup> ]                             | 3.2171x10 <sup>-4</sup> |
| [S <sup>2-</sup> ]                             | 3.4579x10 <sup>-6</sup> |
| [HPO <sub>4</sub> <sup>2-</sup> ]              | 4.3239x10 <sup>-5</sup> |
| [H <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> <sup>-</sup> ] | 7.5858x10 <sup>-6</sup> |
| [CN <sup>-</sup> ]                             | 1.5000x10 <sup>-6</sup> |

| Cu <sup>2+</sup> (concentración total = 0.4988512x10 <sup>-9</sup> mol/l) |                        |                           |                            |
|---|------------------------|---------------------------|----------------------------|
| Especie   | $\beta$                | $\beta_m[A^{\cdot-}]^m$   | conc. de la especie        |
| Cu(OH) <sup>+</sup>   | 1.995x10 <sup>6</sup>  | 1.073510x10 <sup>3</sup>  | 3.538292x10 <sup>-22</sup> |
| Cu(OH) <sub>2</sub>   | 6.309x10 <sup>11</sup> | 1.826781x10 <sup>5</sup>  | 6.021075x10 <sup>-20</sup> |
| Cu(OH) <sub>4</sub> <sup>2-</sup>   | 2.512x10 <sup>16</sup> | 2.106064x10 <sup>3</sup>  | 6.941592x10 <sup>-22</sup> |
| CuCO <sub>3</sub>   | 5.012x10 <sup>6</sup>  | 2.469563x10 <sup>1</sup>  | 8.139686x10 <sup>-24</sup> |
| Cu(CO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> <sup>2-</sup>                           | 1.585x10 <sup>10</sup> | 3.848108x10 <sup>-1</sup> | 1.268337x10 <sup>-25</sup> |
| CuSO <sub>4</sub>   | 2.512x10 <sup>2</sup>  | 1.524784x10 <sup>-2</sup> | 5.025692x10 <sup>-27</sup> |
| CuCl <sup>+</sup>   | 3.162x10 <sup>0</sup>  | 1.085135x10 <sup>-2</sup> | 3.576608x10 <sup>-27</sup> |
| CuHPO <sub>4</sub>  | 3.162x10 <sup>16</sup> | 1.367217x10 <sup>12</sup> | 4.506351x10 <sup>-13</sup> |
| CuH <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> <sup>+</sup>                             | 1.995x10 <sup>21</sup> | 1.513367x10 <sup>16</sup> | 4.988061x10 <sup>-9</sup>  |
| Cu(CN) <sub>2</sub>   | 1.995x10 <sup>16</sup> | 4.488750x10 <sup>4</sup>  | 1.479493x10 <sup>-20</sup> |
| Cu(CN) <sub>3</sub> <sup>-</sup>  | 3.981x10 <sup>21</sup> | 1.343588x10 <sup>4</sup>  | 4.428469x10 <sup>-21</sup> |
| Cu(CN) <sub>4</sub> <sup>2-</sup>   | 1.259x10 <sup>23</sup> | 6.373688x10 <sup>-1</sup> | 2.100769x10 <sup>-25</sup> |
| Cu <sup>2+</sup>  |                        |                           | 3.296002x10 <sup>-25</sup> |

| <b>Cd<sup>2+</sup> (concentración total = 0.480427x10<sup>-9</sup> mol/l)</b> |                        |                            |                            |
|---|------------------------|----------------------------|----------------------------|
| Especie   | $\beta$                | $\beta_m[A^*]^m$           | conc. de la especie        |
| CdOH <sup>+</sup>   | 7.943x10 <sup>3</sup>  | 4.274128x10 <sup>0</sup>   | 1.522617x10 <sup>-70</sup> |
| Cd(OH) <sub>2</sub>   | 3.981x10 <sup>7</sup>  | 1.152705x10 <sup>1</sup>   | 4.106402x10 <sup>-70</sup> |
| CdSO <sub>4</sub>   | 1.995x10 <sup>2</sup>  | 1.210965x10 <sup>-2</sup>  | 4.313948x10 <sup>-73</sup> |
| Cd(SO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> <sup>2-</sup>                               | 1.585x10 <sup>3</sup>  | 5.839917x10 <sup>-6</sup>  | 2.080415x10 <sup>-76</sup> |
| Cd(SO <sub>4</sub> ) <sub>3</sub> <sup>4-</sup>                               | 5.012x10 <sup>2</sup>  | 1.120926x10 <sup>-10</sup> | 3.993192x10 <sup>-81</sup> |
| CdCl <sup>+</sup>   | 1.000x10 <sup>2</sup>  | 3.431800x10 <sup>-1</sup>  | 1.222546x10 <sup>-71</sup> |
| CdCl <sub>2</sub>   | 3.981x10 <sup>2</sup>  | 4.688524x10 <sup>-3</sup>  | 1.670242x10 <sup>-73</sup> |
| CdCl <sub>3</sub> <sup>-</sup>  | 2.512x10 <sup>2</sup>  | 1.015279x10 <sup>-5</sup>  | 3.616835x10 <sup>-76</sup> |
| CdCl <sub>4</sub> <sup>2-</sup>   | 5.012x10 <sup>1</sup>  | 6.951827x10 <sup>-9</sup>  | 2.476522x10 <sup>-79</sup> |
| CdS   | 3.162x10 <sup>19</sup> | 1.093388x10 <sup>14</sup>  | 3.895091x10 <sup>-57</sup> |
| CdHS <sup>+</sup>   | 1.259x10 <sup>22</sup> | 4.050329x10 <sup>18</sup>  | 1.442891x10 <sup>-52</sup> |
| Cd(HS) <sub>2</sub>   | 1.585x10 <sup>43</sup> | 1.640433x10 <sup>36</sup>  | 5.843887x10 <sup>-35</sup> |
| Cd(HS) <sub>3</sub> <sup>-</sup>  | 1.000x10 <sup>59</sup> | 3.329612x10 <sup>48</sup>  | 1.186143x10 <sup>-22</sup> |
| Cd(HS) <sub>4</sub> <sup>2-</sup>   | 1.259x10 <sup>75</sup> | 1.348603x10 <sup>61</sup>  | 4.80427x10 <sup>-10</sup>  |
| Cd(CN) <sup>+</sup>   | 1.000x10 <sup>6</sup>  | 1.500000x10 <sup>0</sup>   | 5.343607x10 <sup>-71</sup> |
| Cd(CN) <sub>2</sub>   | 1.259x10 <sup>11</sup> | 2.832750x10 <sup>-1</sup>  | 1.009140x10 <sup>-71</sup> |
| Cd(CN) <sub>3</sub> <sup>-</sup>  | 5.012x10 <sup>15</sup> | 1.691550x10 <sup>-2</sup>  | 6.025986x10 <sup>-73</sup> |
| Cd(CN) <sub>4</sub> <sup>2-</sup>   | 7.943x10 <sup>17</sup> | 4.021144x10 <sup>-6</sup>  | 1.432494x10 <sup>-76</sup> |
| Cd <sup>2+</sup>  |                        |                            | 3.562405x10 <sup>-71</sup> |

| <b>Mn<sup>2+</sup> (concentración total = 0.95562x10<sup>-8</sup> mol/l)</b> |                        |                           |                            |
|--|------------------------|---------------------------|----------------------------|
| Especie  | $\beta$                | $\beta_m[A^*]^m$          | conc. de la especie        |
| MnOH <sup>+</sup>  | 2.512x10 <sup>3</sup>  | 1.351707x10 <sup>0</sup>  | 1.578199x10 <sup>-18</sup> |
| Mn(OH) <sub>2</sub>  | 6.310x10 <sup>5</sup>  | 1.827071x10 <sup>-1</sup> | 2.133216x10 <sup>-19</sup> |
| Mn(OH) <sub>3</sub> <sup>-</sup>   | 1.585x10 <sup>7</sup>  | 2.469552x10 <sup>-3</sup> | 2.883351x10 <sup>-21</sup> |
| Mn(OH) <sub>4</sub> <sup>2-</sup>  | 5.012x10 <sup>7</sup>  | 4.202068x10 <sup>-6</sup> | 4.906168x10 <sup>-24</sup> |
| MnHCO <sub>3</sub> <sup>+</sup>  | 1.259x10 <sup>12</sup> | 8.184759x10 <sup>9</sup>  | 9.556200x10 <sup>-9</sup>  |
| MnSO <sub>4</sub>  | 1.995x10 <sup>2</sup>  | 1.210965x10 <sup>-2</sup> | 1.413875x10 <sup>-20</sup> |
| MnCl <sup>+</sup>  | 3.981x10 <sup>0</sup>  | 1.366200x10 <sup>-2</sup> | 1.595121x10 <sup>-20</sup> |
| Mn <sup>2+</sup>   |                        |                           | 1.16756x10 <sup>-18</sup>  |

| <b>Fe<sup>2+</sup> (concentración total = 2.4173x10<sup>-7</sup> mol/l)</b> |                        |                           |                            |
|---|------------------------|---------------------------|----------------------------|
| Especie   | $\beta$                | $\beta_m[A^{\times}]^m$   | conc. de la especie        |
| FeOH <sup>+</sup>   | 3.162x10 <sup>4</sup>  | 1.701472x10 <sup>1</sup>  | 2.717752x10 <sup>-23</sup> |
| Fe(OH) <sub>2</sub>   | 2.512x10 <sup>7</sup>  | 7.273536x10 <sup>0</sup>  | 1.161798x10 <sup>-23</sup> |
| Fe(OH) <sub>3</sub> <sup>-</sup>  | 1.000x10 <sup>11</sup> | 1.558077x10 <sup>1</sup>  | 2.488708x10 <sup>-23</sup> |
| FeSO <sub>4</sub>   | 1.585x10 <sup>2</sup>  | 9.620950x10 <sup>-3</sup> | 1.536749x10 <sup>-26</sup> |
| FeHPO <sub>4</sub>  | 1.000x10 <sup>16</sup> | 4.323900x10 <sup>11</sup> | 6.906543x10 <sup>-13</sup> |
| FeH <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> <sup>+</sup>                               | 1.995x10 <sup>22</sup> | 1.513367x10 <sup>17</sup> | 2.417282x10 <sup>-7</sup>  |
| Fe(CN) <sub>6</sub> <sup>4-</sup>   | 2.512x10 <sup>35</sup> | 2.861325x10 <sup>0</sup>  | 4.570379x10 <sup>-24</sup> |
| Fe <sup>2+</sup>  |                        |                           | 1.597295x10 <sup>-24</sup> |

| <b>Pb<sup>2+</sup> (concentración total = 5.4537x10<sup>-9</sup> mol/l)</b> |                        |                           |                             |
|---|------------------------|---------------------------|-----------------------------|
| Especie   | $\beta$                | $\beta_m[A^{\times}]^m$   | conc. de la especie         |
| PbOH <sup>+</sup>   | 1.995x10 <sup>6</sup>  | 1.073510x10 <sup>3</sup>  | 6.130050x10 <sup>-22</sup>  |
| Pb(OH) <sub>2</sub>   | 7.943x10 <sup>10</sup> | 2.299908x10 <sup>4</sup>  | 1.313313x10 <sup>-20</sup>  |
| Pb(OH) <sub>3</sub> <sup>-</sup>  | 7.943x10 <sup>13</sup> | 1.237581x10 <sup>4</sup>  | 7.066943x10 <sup>-21</sup>  |
| PbSO <sub>4</sub>   | 6.309x10 <sup>2</sup>  | 3.829563x10 <sup>-2</sup> | 2.186790x10 <sup>-26</sup>  |
| PbCl <sup>+</sup>   | 3.981x10 <sup>1</sup>  | 1.366200x10 <sup>-1</sup> | 7.801394x10 <sup>-26</sup>  |
| PbCl <sub>2</sub>   | 6.309x10 <sup>1</sup>  | 7.430268x10 <sup>-4</sup> | 4.242896x10 <sup>-28</sup>  |
| PbCl <sub>3</sub> <sup>-</sup>  | 5.012x10 <sup>1</sup>  | 2.025709x10 <sup>-6</sup> | 1.156738x10 <sup>-30</sup>  |
| PbCl <sub>4</sub> <sup>2-</sup>   | 2.512x10 <sup>1</sup>  | 3.484236x10 <sup>-9</sup> | 1.989599x10 <sup>-33</sup>  |
| PbHPO <sub>4</sub>  | 3.162x10 <sup>15</sup> | 1.367217x10 <sup>11</sup> | 7.807201x10 <sup>-14</sup>  |
| PbH <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> <sup>+</sup>                               | 1.259x10 <sup>21</sup> | 9.550522x10 <sup>15</sup> | 5.453622x10 <sup>-9</sup>   |
| Pb <sup>2+</sup>  |                        |                           | 5.7102870x10 <sup>-25</sup> |

**Zona E**  
**0.2 m de profundidad**

| Anión  | Concentración en mol/l  |
|--|-------------------------|
| [OH <sup>-</sup> ]                             | 0.2964x10 <sup>-3</sup> |
| [HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup> ]               | 5.1200x10 <sup>-3</sup> |
| [CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup> ]               | 4.0623x10 <sup>-6</sup> |
| [SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup> ]               | 1.9603x10 <sup>-3</sup> |
| [Cl <sup>-</sup> ]                             | 4.0716x10 <sup>-3</sup> |
| [HS <sup>-</sup> ]                             | 4.5867x10 <sup>-4</sup> |
| [S <sup>2-</sup> ]                             | 9.5586x10 <sup>-6</sup> |
| [HPO <sub>4</sub> <sup>2-</sup> ]              | 3.5910x10 <sup>-5</sup> |
| [H <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> <sup>-</sup> ] | 5.6699x10 <sup>-6</sup> |
| [CN <sup>-</sup> ]                             | 2.2000x10 <sup>-6</sup> |

| Cu <sup>+2</sup> (concentración total = 4.082554x10 <sup>-8</sup> mol/l) |                        |                           |                            |
|--|------------------------|---------------------------|----------------------------|
| Especie  | $\beta$                | $\beta_m[A^+ ]^m$         | conc. de la especie        |
| Cu(OH) <sup>+</sup>  | 1.995x10 <sup>6</sup>  | 5.913180x10 <sup>2</sup>  | 2.133984x10 <sup>-21</sup> |
| Cu(OH) <sub>2</sub>  | 6.309x10 <sup>11</sup> | 5.542643x10 <sup>4</sup>  | 2.000262x10 <sup>-19</sup> |
| Cu(OH) <sub>4</sub> <sup>2-</sup>  | 2.512x10 <sup>16</sup> | 1.938797x10 <sup>2</sup>  | 6.996847x10 <sup>-22</sup> |
| CuCO <sub>3</sub>  | 5.012x10 <sup>6</sup>  | 2.036025x10 <sup>1</sup>  | 7.347730x10 <sup>-23</sup> |
| Cu(CO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> <sup>2-</sup>                          | 1.585x10 <sup>10</sup> | 2.615612x10 <sup>-1</sup> | 9.439378x10 <sup>-25</sup> |
| CuSO <sub>4</sub>  | 2.512x10 <sup>2</sup>  | 4.924274x10 <sup>-1</sup> | 1.777102x10 <sup>-24</sup> |
| CuCl <sup>+</sup>  | 3.162x10 <sup>0</sup>  | 1.288831x10 <sup>-2</sup> | 4.651211x10 <sup>-26</sup> |
| CuHPO <sub>4</sub>   | 3.162x10 <sup>16</sup> | 1.135474x10 <sup>12</sup> | 4.097767x10 <sup>-12</sup> |
| CuH <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> <sup>+</sup>                            | 1.995x10 <sup>21</sup> | 1.131145x10 <sup>16</sup> | 4.082144x10 <sup>-8</sup>  |
| Cu(CN) <sub>2</sub>  | 1.995x10 <sup>16</sup> | 9.655800x10 <sup>4</sup>  | 3.484643x10 <sup>-19</sup> |
| Cu(CN) <sub>3</sub> <sup>-</sup>   | 3.981x10 <sup>21</sup> | 4.238969x10 <sup>4</sup>  | 1.529785x10 <sup>-19</sup> |
| Cu(CN) <sub>4</sub> <sup>2-</sup>  | 1.259x10 <sup>23</sup> | 2.949283x10 <sup>0</sup>  | 1.064355x10 <sup>-23</sup> |
| Cu <sup>2+</sup>   |                        |                           | 3.608860x10 <sup>-24</sup> |

## Resultados Analíticos

| <b>Cd<sup>2+</sup> (concentración total = 1.3256x10<sup>-9</sup> mol/l)</b> |                        |                           |                            |
|---|------------------------|---------------------------|----------------------------|
| Especie   | $\beta$                | $\beta_m[A^x]^{-m}$       | conc. de la especie        |
| CdOH <sup>+</sup>   | 7.943x10 <sup>3</sup>  | 2.354305x10 <sup>0</sup>  | 5.600775x10 <sup>-71</sup> |
| Cd(OH) <sub>2</sub>   | 3.981x10 <sup>7</sup>  | 3.497426x10 <sup>0</sup>  | 8.320203x10 <sup>-71</sup> |
| CdSO <sub>4</sub>   | 1.995x10 <sup>2</sup>  | 3.910799x10 <sup>-1</sup> | 9.303597x10 <sup>-72</sup> |
| Cd(SO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> <sup>2-</sup>                             | 1.585x10 <sup>3</sup>  | 6.090800x10 <sup>-3</sup> | 1.448971x10 <sup>-73</sup> |
| Cd(SO <sub>4</sub> ) <sub>3</sub> <sup>4-</sup>                             | 5.012x10 <sup>2</sup>  | 3.775537x10 <sup>-6</sup> | 8.981816x10 <sup>-77</sup> |
| CdCl <sup>+</sup>   | 1.000x10 <sup>2</sup>  | 4.076000x10 <sup>-1</sup> | 9.696602x10 <sup>-72</sup> |
| CdCl <sub>2</sub>   | 3.981x10 <sup>2</sup>  | 6.613944x10 <sup>-3</sup> | 1.573425x10 <sup>-73</sup> |
| CdCl <sub>3</sub> <sup>-</sup>  | 2.512x10 <sup>2</sup>  | 1.701070x10 <sup>-5</sup> | 4.046761x10 <sup>-76</sup> |
| CdCl <sub>4</sub> <sup>2-</sup>   | 5.012x10 <sup>1</sup>  | 1.383400x10 <sup>-8</sup> | 3.291040x10 <sup>-79</sup> |
| CdS   | 3.162x10 <sup>19</sup> | 3.022429x10 <sup>14</sup> | 7.190209x10 <sup>-57</sup> |
| CdHS <sup>+</sup>   | 1.259x10 <sup>22</sup> | 5.774655x10 <sup>18</sup> | 1.373762x10 <sup>-52</sup> |
| Cd(HS) <sub>2</sub>   | 1.585x10 <sup>43</sup> | 3.334494x10 <sup>36</sup> | 7.932596x10 <sup>-35</sup> |
| Cd(HS) <sub>3</sub> <sup>-</sup>  | 1.000x10 <sup>59</sup> | 9.649415x10 <sup>48</sup> | 2.295548x10 <sup>-22</sup> |
| Cd(HS) <sub>4</sub> <sup>2-</sup>   | 1.259x10 <sup>75</sup> | 5.572205x10 <sup>61</sup> | 1.325600x10 <sup>-9</sup>  |
| Cd(CN) <sup>+</sup>   | 1.000x10 <sup>6</sup>  | 2.200000x10 <sup>0</sup>  | 5.233691x10 <sup>-71</sup> |
| Cd(CN) <sub>2</sub>   | 1.259x10 <sup>11</sup> | 6.093560x10 <sup>-1</sup> | 1.449628x10 <sup>-71</sup> |
| Cd(CN) <sub>3</sub> <sup>-</sup>  | 5.012x10 <sup>15</sup> | 5.336778x10 <sup>-2</sup> | 1.269593x10 <sup>-72</sup> |
| Cd(CN) <sub>4</sub> <sup>2-</sup>   | 7.943x10 <sup>17</sup> | 1.860695x10 <sup>-5</sup> | 4.426501x10 <sup>-76</sup> |
| Cd <sup>2+</sup>  |                        |                           | 2.378951x10 <sup>-71</sup> |

| <b>Mn<sup>2+</sup> (concentración total = 4.0919x10<sup>-8</sup> mol/l)</b> |                        |                           |                            |
|---|------------------------|---------------------------|----------------------------|
| Especie   | $\beta$                | $\beta_m[A^x]^{-m}$       | conc. de la especie        |
| MnOH <sup>+</sup>   | 2.512x10 <sup>3</sup>  | 7.445568x10 <sup>-1</sup> | 4.726364x10 <sup>-18</sup> |
| Mn(OH) <sub>2</sub>   | 6.310x10 <sup>5</sup>  | 5.543522x10 <sup>-2</sup> | 3.518966x10 <sup>-19</sup> |
| Mn(OH) <sub>3</sub> <sup>-</sup>  | 1.585x10 <sup>7</sup>  | 4.127279x10 <sup>-4</sup> | 2.619951x10 <sup>-21</sup> |
| Mn(OH) <sub>4</sub> <sup>2-</sup>   | 5.012x10 <sup>7</sup>  | 3.868333x10 <sup>-7</sup> | 2.455575x10 <sup>-24</sup> |
| MnHCO <sub>3</sub> <sup>+</sup>   | 1.259x10 <sup>12</sup> | 6.446080x10 <sup>9</sup>  | 4.091900x10 <sup>-8</sup>  |
| MnSO <sub>4</sub>   | 1.995x10 <sup>2</sup>  | 3.910799x10 <sup>-1</sup> | 2.482532x10 <sup>-18</sup> |
| MnCl <sup>+</sup>   | 3.981x10 <sup>0</sup>  | 1.622656x10 <sup>-2</sup> | 1.030044x10 <sup>-19</sup> |
| Mn <sup>2+</sup>  |                        |                           | 6.347889x10 <sup>-18</sup> |

| <b>Fe<sup>2+</sup> (concentración total = 3.4917x10<sup>-7</sup> mol/l)</b> |                        |                           |                            |
|---|------------------------|---------------------------|----------------------------|
| Especie   | $\beta$                | $\beta_m[A^x]^m$          | conc. de la especie        |
| FeOH <sup>+</sup>   | 3.162x10 <sup>4</sup>  | 9.372168x10 <sup>0</sup>  | 2.893059x10 <sup>-23</sup> |
| Fe(OH) <sub>2</sub>   | 2.512x10 <sup>7</sup>  | 2.206866x10 <sup>0</sup>  | 6.812292x10 <sup>-24</sup> |
| Fe(OH) <sub>3</sub> <sup>-</sup>  | 1.000x10 <sup>11</sup> | 2.603962x10 <sup>0</sup>  | 8.038072x10 <sup>-24</sup> |
| FeSO <sub>4</sub>   | 1.585x10 <sup>2</sup>  | 3.107076x10 <sup>-1</sup> | 9.591116x10 <sup>-25</sup> |
| FeHPO <sub>4</sub>  | 1.000x10 <sup>16</sup> | 3.591000x10 <sup>11</sup> | 1.108492x10 <sup>-12</sup> |
| FeH <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> <sup>+</sup>                               | 1.995x10 <sup>22</sup> | 1.131145x10 <sup>17</sup> | 3.491689x10 <sup>-7</sup>  |
| Fe(CN) <sub>6</sub> <sup>4-</sup>   | 2.512x10 <sup>35</sup> | 2.848103x10 <sup>1</sup>  | 8.791702x10 <sup>-23</sup> |
| Fe <sup>2+</sup>  |                        |                           | 3.086862x10 <sup>-24</sup> |

| <b>Pb<sup>2+</sup> (concentración total = 7.625483 x10<sup>-9</sup> mol/l)</b> |                        |                           |                            |
|--|------------------------|---------------------------|----------------------------|
| Especie  | $\beta$                | $\beta_m[A^x]^m$          | conc. de la especie        |
| PbOH <sup>+</sup>  | 1.995x10 <sup>6</sup>  | 5.913180x10 <sup>2</sup>  | 6.316557x10 <sup>-22</sup> |
| Pb(OH) <sub>2</sub>  | 7.943x10 <sup>10</sup> | 6.978161x10 <sup>3</sup>  | 7.454187x10 <sup>-21</sup> |
| Pb(OH) <sub>3</sub> <sup>-</sup>   | 7.943x10 <sup>13</sup> | 2.068327x10 <sup>3</sup>  | 2.209421x10 <sup>-21</sup> |
| PbSO <sub>4</sub>  | 6.309x10 <sup>2</sup>  | 1.236753x10 <sup>0</sup>  | 1.321120x10 <sup>-24</sup> |
| PbCl <sup>+</sup>  | 3.981x10 <sup>1</sup>  | 1.622656x10 <sup>-1</sup> | 1.733348x10 <sup>-25</sup> |
| PbCl <sub>2</sub>  | 6.309x10 <sup>1</sup>  | 1.048163x10 <sup>-3</sup> | 1.119665x10 <sup>-27</sup> |
| PbCl <sub>3</sub> <sup>-</sup>   | 5.012x10 <sup>1</sup>  | 3.394014x10 <sup>-6</sup> | 3.625542x10 <sup>-30</sup> |
| PbCl <sub>4</sub> <sup>2-</sup>  | 2.512x10 <sup>1</sup>  | 6.933561x10 <sup>-9</sup> | 7.406545x10 <sup>-33</sup> |
| PbHPO <sub>4</sub>   | 3.162x10 <sup>15</sup> | 1.135474x10 <sup>11</sup> | 1.212932x10 <sup>-13</sup> |
| PbH <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> <sup>+</sup>                                  | 1.259x10 <sup>21</sup> | 7.138404x10 <sup>15</sup> | 7.625362x10 <sup>-9</sup>  |
| Pb <sup>2+</sup>   |                        |                           | 1.068217x10 <sup>-24</sup> |

**Zona E**  
**3.0 m de profundidad**

| Anión  | Concentración en mol/l  |
|--|-------------------------|
| [OH <sup>-</sup> ]                             | 0.3035x10 <sup>-3</sup> |
| [HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup> ]               | 5.2430x10 <sup>-3</sup> |
| [CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup> ]               | 4.1599x10 <sup>-6</sup> |
| [SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup> ]               | 1.2331x10 <sup>-3</sup> |
| [Cl <sup>-</sup> ]                             | 2.8641x10 <sup>-3</sup> |
| [HS <sup>-</sup> ]                             | 1.9908x10 <sup>-4</sup> |
| [S <sup>2-</sup> ]                             | 4.1612x10 <sup>-6</sup> |
| [HPO <sub>4</sub> <sup>2-</sup> ]              | 4.5137x10 <sup>-5</sup> |
| [H <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> <sup>-</sup> ] | 7.1742x10 <sup>-6</sup> |
| [CN <sup>-</sup> ]                             | 1.0000x10 <sup>-7</sup> |

| Cu <sup>+2</sup> (concentración total = 3.2803x10 <sup>-8</sup> mol/l) |                        |                           |                            |
|--|------------------------|---------------------------|----------------------------|
| Especie  | $\beta$                | $\beta_m [A^x]^m$         | conc. de la especie        |
| Cu(OH) <sup>+</sup>  | 1.995x10 <sup>6</sup>  | 6.054825x10 <sup>2</sup>  | 1.387572x10 <sup>-21</sup> |
| Cu(OH) <sub>2</sub>  | 6.309x10 <sup>11</sup> | 5.811362x10 <sup>4</sup>  | 1.331778x10 <sup>-19</sup> |
| Cu(OH) <sub>4</sub> <sup>2-</sup>                                      | 2.512x10 <sup>16</sup> | 2.131348x10 <sup>2</sup>  | 4.884366x10 <sup>-22</sup> |
| CuCO <sub>3</sub>  | 5.012x10 <sup>6</sup>  | 2.084942x10 <sup>1</sup>  | 4.778018x10 <sup>-23</sup> |
| Cu(CO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> <sup>2-</sup>                        | 1.585x10 <sup>10</sup> | 2.742806x10 <sup>-1</sup> | 6.285632x10 <sup>-25</sup> |
| CuSO <sub>4</sub>  | 2.512x10 <sup>2</sup>  | 3.097547x10 <sup>-1</sup> | 7.098584x10 <sup>-25</sup> |
| CuCl <sup>+</sup>  | 3.162x10 <sup>0</sup>  | 9.056284x10 <sup>-3</sup> | 2.075410x10 <sup>-26</sup> |
| CuHPO <sub>4</sub>   | 3.162x10 <sup>16</sup> | 1.427232x10 <sup>12</sup> | 3.270758x10 <sup>-12</sup> |
| CuH <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> <sup>+</sup>                          | 1.995x10 <sup>21</sup> | 1.431253x10 <sup>16</sup> | 3.279973x10 <sup>-8</sup>  |
| Cu(CN) <sub>2</sub>  | 1.995x10 <sup>16</sup> | 1.995000x10 <sup>2</sup>  | 4.571900x10 <sup>-22</sup> |
| Cu(CN) <sub>3</sub> <sup>-</sup>                                       | 3.981x10 <sup>21</sup> | 3.981000x10 <sup>0</sup>  | 9.123175x10 <sup>-24</sup> |
| Cu(CN) <sub>4</sub> <sup>2-</sup>                                      | 1.259x10 <sup>23</sup> | 1.259000x10 <sup>-5</sup> | 2.885224x10 <sup>-29</sup> |
| Cu <sup>2+</sup>   |                        |                           | 2.291679x10 <sup>-24</sup> |

## Resultados Analíticos

| <b>Cd<sup>+2</sup> (concentración total = 0.39502x10<sup>-9</sup> mol/l)</b> |                        |                            |                            |
|--|------------------------|----------------------------|----------------------------|
| Especie  | $\beta$                | $\beta_m[A^*]^m$           | conc. de la especie        |
| CdOH <sup>+</sup>  | 7.943x10 <sup>3</sup>  | 2.410701x10 <sup>0</sup>   | 4.815331x10 <sup>-70</sup> |
| Cd(OH) <sub>2</sub>  | 3.981x10 <sup>7</sup>  | 3.666989x10 <sup>0</sup>   | 7.324744x10 <sup>-70</sup> |
| CdSO <sub>4</sub>  | 1.995x10 <sup>2</sup>  | 2.400350x10 <sup>-1</sup>  | 4.794655x10 <sup>-71</sup> |
| Cd(SO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> <sup>2-</sup>                              | 1.585x10 <sup>3</sup>  | 2.410049x10 <sup>-3</sup>  | 4.814029x10 <sup>-73</sup> |
| Cd(SO <sub>4</sub> ) <sub>3</sub> <sup>4-</sup>                              | 5.012x10 <sup>2</sup>  | 9.397362x10 <sup>-7</sup>  | 1.877106x10 <sup>-76</sup> |
| CdCl <sup>+</sup>  | 1.000x10 <sup>2</sup>  | 2.864100x10 <sup>-1</sup>  | 5.720988x10 <sup>-71</sup> |
| CdCl <sub>2</sub>  | 3.981x10 <sup>2</sup>  | 3.265642x10 <sup>-3</sup>  | 6.523060x10 <sup>-73</sup> |
| CdCl <sub>3</sub> <sup>-</sup>   | 2.512x10 <sup>2</sup>  | 5.901796x10 <sup>-6</sup>  | 1.178873x10 <sup>-75</sup> |
| CdCl <sub>4</sub> <sup>2-</sup>  | 5.012x10 <sup>1</sup>  | 3.372592x10 <sup>-9</sup>  | 6.736691x10 <sup>-79</sup> |
| CdS  | 3.162x10 <sup>19</sup> | 1.315771x10 <sup>14</sup>  | 2.628229x10 <sup>-56</sup> |
| CdHS <sup>+</sup>  | 1.259x10 <sup>22</sup> | 2.506417x10 <sup>18</sup>  | 5.006522x10 <sup>-52</sup> |
| Cd(HS) <sub>2</sub>  | 1.585x10 <sup>43</sup> | 6.281806x10 <sup>35</sup>  | 1.254779x10 <sup>-34</sup> |
| Cd(HS) <sub>3</sub> <sup>-</sup>   | 1.000x10 <sup>59</sup> | 7.890107x10 <sup>47</sup>  | 1.576034x10 <sup>-22</sup> |
| Cd(HS) <sub>4</sub> <sup>2-</sup>  | 1.259x10 <sup>75</sup> | 1.977590x10 <sup>60</sup>  | 3.950200x10 <sup>-10</sup> |
| Cd(CN) <sup>+</sup>  | 1.000x10 <sup>6</sup>  | 1.000000x10 <sup>-1</sup>  | 1.997482x10 <sup>-71</sup> |
| Cd(CN) <sub>2</sub>  | 1.259x10 <sup>11</sup> | 1.259000x10 <sup>-3</sup>  | 2.514830x10 <sup>-73</sup> |
| Cd(CN) <sub>3</sub> <sup>-</sup>   | 5.012x10 <sup>15</sup> | 5.012000x10 <sup>-6</sup>  | 1.001138x10 <sup>-75</sup> |
| Cd(CN) <sub>4</sub> <sup>2-</sup>  | 7.943x10 <sup>17</sup> | 7.943000x10 <sup>-11</sup> | 1.586600x10 <sup>-80</sup> |
| Cd <sup>2+</sup>   |                        |                            | 1.997482x10 <sup>-70</sup> |

| <b>Mn<sup>+2</sup> (concentración total = 1.4434x10<sup>-8</sup> mol/l)</b> |                        |                           |                            |
|---|------------------------|---------------------------|----------------------------|
| Especie   | $\beta$                | $\beta_m[A^*]^m$          | conc. de la especie        |
| MnOH <sup>+</sup>   | 2.512x10 <sup>3</sup>  | 7.623920x10 <sup>-1</sup> | 1.667092x10 <sup>-18</sup> |
| Mn(OH) <sub>2</sub>   | 6.310x10 <sup>5</sup>  | 5.812283x10 <sup>-2</sup> | 1.270948x10 <sup>-19</sup> |
| Mn(OH) <sub>3</sub> <sup>-</sup>  | 1.585x10 <sup>7</sup>  | 4.431037x10 <sup>-4</sup> | 9.689168x10 <sup>-22</sup> |
| Mn(OH) <sub>4</sub> <sup>2-</sup>   | 5.012x10 <sup>7</sup>  | 4.252515x10 <sup>-7</sup> | 9.298801x10 <sup>-25</sup> |
| MnHCO <sub>3</sub> <sup>+</sup>   | 1.259x10 <sup>12</sup> | 6.600937x10 <sup>9</sup>  | 1.443400x10 <sup>-8</sup>  |
| MnSO <sub>4</sub>   | 1.995x10 <sup>2</sup>  | 2.460035x10 <sup>-1</sup> | 5.379258x10 <sup>-19</sup> |
| MnCl <sup>+</sup>   | 3.981x10 <sup>0</sup>  | 1.140198x10 <sup>-2</sup> | 2.493225x10 <sup>-20</sup> |
| Mn <sup>2+</sup>  |                        |                           | 2.186659x10 <sup>-18</sup> |

| <b>Fe<sup>+2</sup> (concentración total = 2.1308x10<sup>-7</sup> mol/l)</b> |                        |                           |                            |
|---|------------------------|---------------------------|----------------------------|
| Especie   | $\beta$                | $\beta_m[A^{\times}]^m$   | conc. de la especie        |
| FeOH <sup>+</sup>   | 3.162x10 <sup>4</sup>  | 9.596670x10 <sup>0</sup>  | 1.428715x10 <sup>-23</sup> |
| Fe(OH) <sub>2</sub>   | 2.512x10 <sup>7</sup>  | 2.313860x10 <sup>0</sup>  | 3.444785x10 <sup>-24</sup> |
| Fe(OH) <sub>3</sub> <sup>-</sup>  | 1.000x10 <sup>11</sup> | 2.795607x10 <sup>0</sup>  | 4.464991x10 <sup>-24</sup> |
| FeSO <sub>4</sub>   | 1.585x10 <sup>2</sup>  | 1.954464x10 <sup>-1</sup> | 2.909730x10 <sup>-25</sup> |
| FeHPO <sub>4</sub>  | 1.000x10 <sup>16</sup> | 4.513700x10 <sup>11</sup> | 6.719821x10 <sup>-13</sup> |
| FeH <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> <sup>+</sup>                               | 1.995x10 <sup>22</sup> | 1.431253x10 <sup>17</sup> | 2.130794x10 <sup>-7</sup>  |
| Fe(CN) <sub>6</sub> <sup>4-</sup>   | 2.512x10 <sup>35</sup> | 2.512000x10 <sup>-7</sup> | 3.739768x10 <sup>-31</sup> |
| Fe <sup>2+</sup>  |                        |                           | 1.488761x10 <sup>-24</sup> |

| <b>Pb<sup>+2</sup> (concentración total = 5.5702x10<sup>-9</sup> mol/l)</b> |                        |                           |                            |
|---|------------------------|---------------------------|----------------------------|
| Especie   | $\beta$                | $\beta_m[A^{\times}]^m$   | conc. de la especie        |
| PbOH <sup>+</sup>   | 1.995x10 <sup>6</sup>  | 6.054825x10 <sup>2</sup>  | 3.733931x10 <sup>-22</sup> |
| Pb(OH) <sub>2</sub>   | 7.943x10 <sup>10</sup> | 7.316476x10 <sup>3</sup>  | 4.511975x10 <sup>-21</sup> |
| Pb(OH) <sub>3</sub> <sup>-</sup>  | 7.943x10 <sup>13</sup> | 2.220550x10 <sup>3</sup>  | 1.369384x10 <sup>-21</sup> |
| PbSO <sub>4</sub>   | 6.309x10 <sup>2</sup>  | 7.779628x10 <sup>-1</sup> | 4.797595x10 <sup>-25</sup> |
| PbCl <sup>+</sup>   | 3.981x10 <sup>1</sup>  | 1.140198x10 <sup>-1</sup> | 7.031451x10 <sup>-26</sup> |
| PbCl <sub>2</sub>   | 6.309x10 <sup>1</sup>  | 5.175316x10 <sup>-4</sup> | 3.191549x10 <sup>-28</sup> |
| PbCl <sub>3</sub> <sup>-</sup>  | 5.012x10 <sup>1</sup>  | 1.177540x10 <sup>-6</sup> | 7.261735x10 <sup>-31</sup> |
| PbCl <sub>4</sub> <sup>2-</sup>   | 2.512x10 <sup>1</sup>  | 1.690333x10 <sup>-9</sup> | 1.042406x10 <sup>-33</sup> |
| PbHPO <sub>4</sub>  | 3.162x10 <sup>15</sup> | 1.427232x10 <sup>11</sup> | 8.801552x10 <sup>-14</sup> |
| PbH <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> <sup>+</sup>                               | 1.259x10 <sup>21</sup> | 9.032318x10 <sup>15</sup> | 5.570112x10 <sup>-9</sup>  |
| Pb <sup>2+</sup>  |                        |                           | 6.166869x10 <sup>-25</sup> |

Las siguientes tablas, muestran los resultados concentrados de las especies anionicas para cada catión, zona y profundidad:

| Zona B  |                           |                           |                           |                           |                           |
|---|---------------------------|---------------------------|---------------------------|---------------------------|---------------------------|
| 0.2 m de profundidad  |                           |                           |                           |                           |                           |
| Aniones   | Cu <sup>2+</sup>          | Cd <sup>2+</sup>          | Fe <sup>2+</sup>          | Mn <sup>2+</sup>          | Pb <sup>2+</sup>          |
| oxidrilos   | 1.09159x10 <sup>-19</sup> | 1.00724x10 <sup>-63</sup> | 1.27098x10 <sup>-22</sup> | 7.99414x10 <sup>-18</sup> | 9.82919x10 <sup>-21</sup> |
| monohidrogen carbonatos   | 0.0                       | 0.0                       | 0.0                       | 5.23320x10 <sup>-8</sup>  | 0.0                       |
| carbonatos  | 2.25691x10 <sup>-23</sup> | 0.0                       | 0.0                       | 0.0                       | 0.0                       |
| sulfatos  | 1.11518x10 <sup>-25</sup> | 2.77887x10 <sup>-72</sup> | 3.68354x10 <sup>-25</sup> | 6.27837x10 <sup>-19</sup> | 1.37314x10 <sup>-25</sup> |
| cloruros  | 1.10212x10 <sup>-26</sup> | 1.10528x10 <sup>-71</sup> | 0.0                       | 9.83595x10 <sup>-20</sup> | 6.84154x10 <sup>-26</sup> |
| monohidrogen sulfuros   | 0.0                       | 7.11740x10 <sup>-10</sup> | 0.0                       | 0.0                       | 0.0                       |
| sulfuros  | 0.0                       | 3.79320x10 <sup>-57</sup> | 0.0                       | 0.0                       | 0.0                       |
| monohidrogen fosfato (HPO <sub>4</sub> <sup>2-</sup> )            | 1.63497x10 <sup>-12</sup> | 0.0                       | 1.19134x10 <sup>-12</sup> | 0.0                       | 8.01525x10 <sup>-14</sup> |
| dihidrogen fosfato (H <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> <sup>-</sup> ) | 1.80953x10 <sup>-9</sup>  | 0.0                       | 9.47228x10 <sup>-7</sup>  | 0.0                       | 5.59832x10 <sup>-9</sup>  |
| cianuros  | 1.50932x10 <sup>-20</sup> | 3.03339x10 <sup>-71</sup> | 6.74308x10 <sup>-25</sup> | 0.0                       | 0.0                       |
| ion metálico  | 9.64931x10 <sup>-25</sup> | 3.01639x10 <sup>-71</sup> | 5.05107x10 <sup>-24</sup> | 6.83994x10 <sup>-18</sup> | 4.73046x10 <sup>-25</sup> |

| Zona B  |                           |                           |                           |                           |                           |
|---|---------------------------|---------------------------|---------------------------|---------------------------|---------------------------|
| 1.5 m de profundidad  |                           |                           |                           |                           |                           |
| Aniones   | Cu <sup>2+</sup>          | Cd <sup>2+</sup>          | Fe <sup>2+</sup>          | Mn <sup>2+</sup>          | Pb <sup>2+</sup>          |
| oxidrilos   | 4.41709x10 <sup>-20</sup> | 5.59289x10 <sup>-70</sup> | 1.06250x10 <sup>-22</sup> | 1.96500x10 <sup>-18</sup> | 3.81000x10 <sup>-22</sup> |
| monohidrogen carbonatos   | 0.0                       | 0.0                       | 0.0                       | 1.27590x10 <sup>-9</sup>  | 0.0                       |
| carbonatos  | 8.81023x10 <sup>-24</sup> | 0.0                       | 0.0                       | 0.0                       | 0.0                       |
| sulfatos  | 3.60736x10 <sup>-26</sup> | 4.00989x10 <sup>-72</sup> | 2.47980x10 <sup>-25</sup> | 1.27061x10 <sup>-19</sup> | 1.08922x10 <sup>-25</sup> |
| cloruros  | 3.07434x10 <sup>-27</sup> | 1.37099x10 <sup>-71</sup> | 0.0                       | 1.71665x10 <sup>-20</sup> | 4.67302x10 <sup>-26</sup> |
| monohidrogen sulfuros   | 0.0                       | 2.88250x10 <sup>-10</sup> | 0.0                       | 0.0                       | 0.0                       |
| sulfuros  | 0.0                       | 4.48909x10 <sup>-57</sup> | 0.0                       | 0.0                       | 0.0                       |
| monohidrogen fosfato (HPO <sub>4</sub> <sup>2-</sup> )            | 6.20641x10 <sup>-13</sup> | 0.0                       | 2.13844x10 <sup>-12</sup> | 0.0                       | 7.46149x10 <sup>-14</sup> |
| dihidrogen fosfato (H <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> <sup>-</sup> ) | 6.86997x10 <sup>-9</sup>  | 0.0                       | 7.48468x10 <sup>-7</sup>  | 0.0                       | 5.21223x10 <sup>-9</sup>  |
| cianuros  | 6.97239x10 <sup>-21</sup> | 5.13247x10 <sup>-71</sup> | 5.32000x10 <sup>-25</sup> | 0.0                       | 0.0                       |
| ion metálico  |                           | 5.01037x10 <sup>-71</sup> | 3.98500x10 <sup>-24</sup> | 1.62226x10 <sup>-18</sup> | 4.39749x10 <sup>-25</sup> |

| Zona C   |                           |                           |                           |                           |                           |
|--|---------------------------|---------------------------|---------------------------|---------------------------|---------------------------|
| 0.2 m de profundidad                                   |                           |                           |                           |                           |                           |
| Aniones  | Cu <sup>2+</sup>          | Cd <sup>2+</sup>          | Fe <sup>2+</sup>          | Mn <sup>2+</sup>          | Pb <sup>2+</sup>          |
| oxidrilos  | 9.88314x10 <sup>-19</sup> | 1.59229x10 <sup>-68</sup> | 4.58234x10 <sup>-22</sup> | 7.01887x10 <sup>-17</sup> | 1.43649x10 <sup>-19</sup> |
| monohidrogen carbonatos                                | 0.0                       | 0.0                       | 0.0                       | 9.64720x10 <sup>-8</sup>  | 0.0                       |
| carbonatos   | 1.06043x10 <sup>-23</sup> | 0.0                       | 0.0                       | 0.0                       | 0.0                       |
| sulfatos   | 9.69987x10 <sup>-26</sup> | 5.36040x10 <sup>-74</sup> | 1.10606x10 <sup>-25</sup> | 1.33512x10 <sup>-18</sup> | 1.34153x10 <sup>-26</sup> |
| cloruros   | 1.45084x10 <sup>-26</sup> | 1.08417x10 <sup>-70</sup> | 0.0                       | 3.16579x10 <sup>-19</sup> | 1.01305x10 <sup>-25</sup> |
| monohidrogen sulfuros                                  | 0.0                       | 1.55870x10 <sup>-9</sup>  | 0.0                       | 0.0                       | 0.0                       |
| sulfuros   | 0.0                       | 0.0                       | 0.0                       | 0.0                       | 0.0                       |
| monohidrogen fosfato (HPO <sub>4</sub> <sup>2-</sup> ) | 7.79705x10 <sup>-13</sup> | 0.0                       | 4.45628x10 <sup>-13</sup> | 0.0                       | 4.29364x10 <sup>-14</sup> |
| dihidrogen fosfato (H <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> )   | 1.69428x10 <sup>-8</sup>  | 0.0                       | 3.06189x10 <sup>-7</sup>  | 0.0                       | 5.88796x10 <sup>-9</sup>  |
| cianuros   | 5.60753x10 <sup>-21</sup> | 1.26413x10 <sup>-70</sup> | 7.25944x10 <sup>-24</sup> | 0.0                       | 0.0                       |
| ion metálico   | 1.02343x10 <sup>-24</sup> | 2.37572x10 <sup>-70</sup> | 1.84954x10 <sup>-24</sup> | 1.77375x10 <sup>-17</sup> | 5.63579x10 <sup>-25</sup> |

| Zona C   |                           |                           |                           |                           |                           |
|--|---------------------------|---------------------------|---------------------------|---------------------------|---------------------------|
| 2.0 m de profundidad                                   |                           |                           |                           |                           |                           |
| Aniones  | Cu <sup>2+</sup>          | Cd <sup>2+</sup>          | Fe <sup>2+</sup>          | Mn <sup>2+</sup>          | Pb <sup>2+</sup>          |
| oxidrilos  | 2.42571x10 <sup>-19</sup> | 1.1781x10 <sup>-69</sup>  | 1.30962x10 <sup>-22</sup> | 1.91171x10 <sup>-17</sup> | 5.81304x10 <sup>-20</sup> |
| monohidrogen carbonatos                                | 0.0                       | 0.0                       | 0.0                       | 2.00590x10 <sup>-9</sup>  | 0.0                       |
| carbonatos   | 1.50312x10 <sup>-24</sup> | 0.0                       | 0.0                       | 0.0                       | 0.0                       |
| sulfatos   | 3.10424x10 <sup>-26</sup> | 5.99280x10 <sup>-71</sup> | 4.23500x10 <sup>-26</sup> | 4.49059x10 <sup>-19</sup> | 7.27023x10 <sup>-26</sup> |
| cloruros   | 3.85118x10 <sup>-27</sup> | 8.53377x10 <sup>-72</sup> | 0.0                       | 8.83177x10 <sup>-20</sup> | 4.55196x10 <sup>-26</sup> |
| monohidrogen sulfuros                                  | 0.0                       | 5.57774x10 <sup>-10</sup> | 0.0                       | 0.0                       | 0.0                       |
| sulfuros   | 0.0                       | 0.0                       | 0.0                       | 0.0                       | 0.0                       |
| monohidrogen fosfato (HPO <sub>4</sub> <sup>2-</sup> ) | 3.39858x10 <sup>-13</sup> | 0.0                       | 2.32394x10 <sup>-13</sup> | 0.0                       | 3.16920x10 <sup>-14</sup> |
| dihidrogen fosfato (H <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> )   | 8.447079x10 <sup>-9</sup> | 0.0                       | 1.82640x10 <sup>-7</sup>  | 0.0                       | 4.97097x10 <sup>-9</sup>  |
| cianuros   | 1.57306x10 <sup>-21</sup> | 1.05139x10 <sup>-71</sup> | 2.43382x10 <sup>-27</sup> | 0.0                       | 0.0                       |
| ion metálico   | 2.86787x10 <sup>-25</sup> | 1.97592x10 <sup>-71</sup> | 6.20081x10 <sup>-25</sup> | 5.22377x10 <sup>-18</sup> | 2.67430x10 <sup>-25</sup> |

| Zona D  |                           |                           |                           |                           |                           |
|---|---------------------------|---------------------------|---------------------------|---------------------------|---------------------------|
| 0.2 m de profundidad  |                           |                           |                           |                           |                           |
| Aniones   | Cu <sup>2+</sup>          | Cd <sup>2+</sup>          | Fe <sup>2+</sup>          | Mn <sup>2+</sup>          | Pb <sup>2+</sup>          |
| oxidrilos   | 1.66077x10 <sup>-19</sup> | 4.25726x10 <sup>-69</sup> | 1.41992x10 <sup>-22</sup> | 1.19066x10 <sup>-17</sup> | 3.21106x10 <sup>-20</sup> |
| monohidrogen carbonatos   | 0.0                       | 0.0                       | 0.0                       | 6.35570x10 <sup>-9</sup>  | 0.0                       |
| carbonatos  | 2.24438x10 <sup>-23</sup> | 0.0                       | 0.0                       | 0.0                       | 0.0                       |
| sulfatos  | 3.29605x10 <sup>-26</sup> | 7.89856x10 <sup>-72</sup> | 8.28833x10 <sup>-26</sup> | 2.27148x10 <sup>-19</sup> | 8.16516x10 <sup>-26</sup> |
| cloruros  | 1.05021x10 <sup>-26</sup> | 1.01582x10 <sup>-70</sup> | 0.0                       | 1.14736x10 <sup>-19</sup> | 1.31186x10 <sup>-25</sup> |
| monohidrogen sulfuros   | 0.0                       | 8.65860x10 <sup>-9</sup>  | 0.0                       | 0.0                       | 0.0                       |
| sulfuros  | 0.0                       | 1.15971x10 <sup>-75</sup> | 0.0                       | 0.0                       | 0.0                       |
| monohidrogen fosfato (HPO <sub>4</sub> <sup>2-</sup> )            | 7.91527x10 <sup>-13</sup> | 0.0                       | 9.97626x10 <sup>-13</sup> | 0.0                       | 7.80721x10 <sup>-14</sup> |
| dihidrogen fosfato (H <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> <sup>-</sup> ) | 8.76136x10 <sup>-9</sup>  | 0.0                       | 3.49169x10 <sup>-7</sup>  | 0.0                       | 5.45362x10 <sup>-9</sup>  |
| cianuros  | 2.63844x10 <sup>-20</sup> | 3.40086x10 <sup>-70</sup> | 1.58954x10 <sup>-24</sup> | 0.0                       | 0.0                       |
| ion metálico  | 8.96257x10 <sup>-25</sup> | 2.70121x10 <sup>-70</sup> | 3.57188x10 <sup>-24</sup> | 7.77725x10 <sup>-18</sup> | 8.84022x10 <sup>-25</sup> |

| Zona D  |                           |                           |                           |                           |                           |
|---|---------------------------|---------------------------|---------------------------|---------------------------|---------------------------|
| 1.5 m de profundidad  |                           |                           |                           |                           |                           |
| Aniones   | Cu <sup>2+</sup>          | Cd <sup>2+</sup>          | Fe <sup>2+</sup>          | Mn <sup>2+</sup>          | Pb <sup>2+</sup>          |
| oxidrilos   | 6.12587x10 <sup>-20</sup> | 5.62902x10 <sup>-70</sup> | 6.36826x10 <sup>-23</sup> | 1.79441x10 <sup>-18</sup> | 2.08131x10 <sup>-20</sup> |
| monohidrogen carbonatos   | 0.0                       | 0.0                       | 0.0                       | 9.55620x10 <sup>-9</sup>  | 0.0                       |
| carbonatos  | 8.26652x10 <sup>-24</sup> | 0.0                       | 0.0                       | 0.0                       | 0.0                       |
| sulfatos  | 5.02569x10 <sup>-27</sup> | 4.31603x10 <sup>-73</sup> | 1.53675x10 <sup>-26</sup> | 1.41387x10 <sup>-20</sup> | 2.18679x10 <sup>-26</sup> |
| cloruros  | 3.57661x10 <sup>-27</sup> | 1.23928x10 <sup>-71</sup> | 0.0                       | 1.59512x10 <sup>-20</sup> | 7.84394x10 <sup>-26</sup> |
| monohidrogen sulfuros   | 0.0                       | 4.80427x10 <sup>-10</sup> | 0.0                       | 0.0                       | 0.0                       |
| sulfuros  | 0.0                       | 3.89509x10 <sup>-57</sup> | 0.0                       | 0.0                       | 0.0                       |
| monohidrogen fosfato (HPO <sub>4</sub> <sup>2-</sup> )            | 4.50635x10 <sup>-13</sup> | 0.0                       | 6.90654x10 <sup>-13</sup> | 0.0                       | 7.80720x10 <sup>-14</sup> |
| dihidrogen fosfato (H <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> <sup>-</sup> ) | 4.98806x10 <sup>-9</sup>  | 0.0                       | 2.41728x10 <sup>-7</sup>  | 0.0                       | 5.45362x10 <sup>-9</sup>  |
| cianuros  | 1.92236x10 <sup>-20</sup> | 1.06941x10 <sup>-71</sup> | 4.57038x10 <sup>-24</sup> | 0.0                       | 0.0                       |
| ion metálico  | 3.29600x10 <sup>-25</sup> | 3.56240x10 <sup>-71</sup> | 1.59729x10 <sup>-24</sup> | 1.16756x10 <sup>-18</sup> | 5.71029x10 <sup>-25</sup> |

| Zona E   |                            |                           |                           |                           |                           |
|--|----------------------------|---------------------------|---------------------------|---------------------------|---------------------------|
| 0.2 m de profundidad                                   |                            |                           |                           |                           |                           |
| Aniones  | Cu <sup>2+</sup>           | Cd <sup>2+</sup>          | Fe <sup>2+</sup>          | Mn <sup>2+</sup>          | Pb <sup>2+</sup>          |
| oxidrilos  | 2.028599x10 <sup>-19</sup> | 1.39210x10 <sup>-10</sup> | 4.37809x10 <sup>-23</sup> | 5.08088x10 <sup>-18</sup> | 1.02953x10 <sup>-20</sup> |
| monohidrogen carbonatos                                | 0.0                        | 0.0                       | 0.0                       | 4.09190x10 <sup>-9</sup>  | 0.0                       |
| carbonatos   | 7.442124x10 <sup>-23</sup> | 0.0                       | 0.0                       | 0.0                       | 0.0                       |
| sulfatos   | 1.777102x10 <sup>-24</sup> | 9.44858x10 <sup>-12</sup> | 9.59112x10 <sup>-25</sup> | 2.48253x10 <sup>-18</sup> | 1.32112x10 <sup>-24</sup> |
| cloruros   | 4.651211x10 <sup>-26</sup> | 9.85435x10 <sup>-12</sup> | 0.0                       | 1.03004x10 <sup>-19</sup> | 1.74458x10 <sup>-25</sup> |
| monohidrogen sulfuros                                  | 0.0                        | 1.32580x10 <sup>-9</sup>  | 0.0                       | 0.0                       | 0.0                       |
| sulfuros   | 0.0                        | 7.19021x10 <sup>-57</sup> | 0.0                       | 0.0                       | 0.0                       |
| monohidrogen fosfato (HPO <sub>4</sub> <sup>2-</sup> ) | 4.097767x10 <sup>-12</sup> | 0.0                       | 1.10849x10 <sup>-12</sup> | 0.0                       | 1.21293x10 <sup>-13</sup> |
| dihidrogen fosfato (H <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> )   | 4.082144x10 <sup>-9</sup>  | 0.0                       | 3.49169x10 <sup>-7</sup>  | 0.0                       | 7.62536x10 <sup>-9</sup>  |
| cianuros   | 5.014534x10 <sup>-19</sup> | 6.81032x10 <sup>-71</sup> | 8.79170x10 <sup>-23</sup> | 0.0                       | 0.0                       |
| ion metálico   | 3.608860x10 <sup>-24</sup> | 2.37895x10 <sup>-71</sup> | 3.08686x10 <sup>-24</sup> | 6.34789x10 <sup>-18</sup> | 1.06852x10 <sup>-24</sup> |

| Zona E   |                            |                           |                           |                           |                           |
|--|----------------------------|---------------------------|---------------------------|---------------------------|---------------------------|
| 3.0 m de profundidad                                   |                            |                           |                           |                           |                           |
| Aniones  | Cu <sup>2+</sup>           | Cd <sup>2+</sup>          | Fe <sup>2+</sup>          | Mn <sup>2+</sup>          | Pb <sup>2+</sup>          |
| oxidrilos  | 1.35054x10 <sup>-19</sup>  | 1.21401x10 <sup>-69</sup> | 2.21969x10 <sup>-23</sup> | 1.79516x10 <sup>-18</sup> | 6.25475x10 <sup>-21</sup> |
| monohidrogen carbonatos                                | 0.0                        | 0.0                       | 0.0                       | 1.44340x10 <sup>-8</sup>  | 0.0                       |
| carbonatos   | 4.84087x10 <sup>-23</sup>  | 0.0                       | 0.0                       | 0.0                       | 0.0                       |
| sulfatos   | 7.098584x10 <sup>-25</sup> | 4.84281x10 <sup>-71</sup> | 2.90973x10 <sup>-25</sup> | 5.37926x10 <sup>-19</sup> | 4.79759x10 <sup>-25</sup> |
| cloruros   | 2.07541x10 <sup>-26</sup>  | 5.78633x10 <sup>-71</sup> | 0.0                       | 2.49322x10 <sup>-20</sup> | 7.06344x10 <sup>-26</sup> |
| monohidrogen sulfuros                                  | 0.0                        | 3.95020x10 <sup>-10</sup> | 0.0                       | 0.0                       | 0.0                       |
| sulfuros   | 0.0                        | 2.62823x10 <sup>-56</sup> | 0.0                       | 0.0                       | 0.0                       |
| monohidrogen fosfato (HPO <sub>4</sub> <sup>2-</sup> ) | 3.27076x10 <sup>-12</sup>  | 0.0                       | 6.71982x10 <sup>-13</sup> | 0.0                       | 8.80155x10 <sup>-14</sup> |
| dihidrogen fosfato (H <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> )   | 3.27997x10 <sup>-9</sup>   | 0.0                       | 2.13079x10 <sup>-7</sup>  | 0.0                       | 5.57011x10 <sup>-9</sup>  |
| cianuros   | 4.66313x10 <sup>-22</sup>  | 2.02273x10 <sup>-71</sup> | 3.73977x10 <sup>-31</sup> | 0.0                       | 0.0                       |
| ion metálico   | 2.29168x10 <sup>-24</sup>  | 1.99748x10 <sup>-70</sup> | 1.48876x10 <sup>-24</sup> | 2.18666x10 <sup>-18</sup> | 6.16687x10 <sup>-25</sup> |

En las figuras 7.57 a 7.64 se representa la variación de los metales, por anión en la especiación teórica.

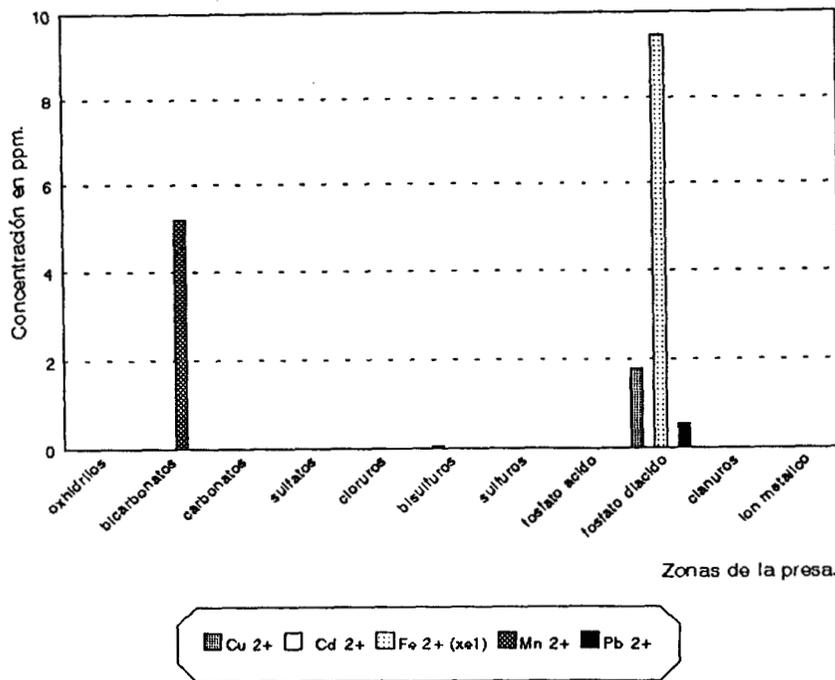


Figura 7.57. Predominio de especies teóricas en zona B, profundidad 0.2 m.

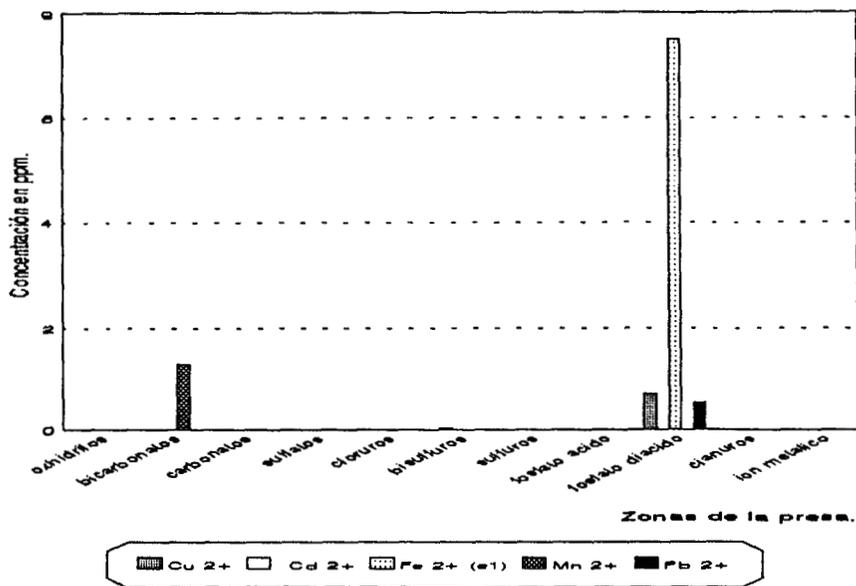


Figura 7.58. Predominio de especies teóricas en zona B, profundidad 1.5 m.

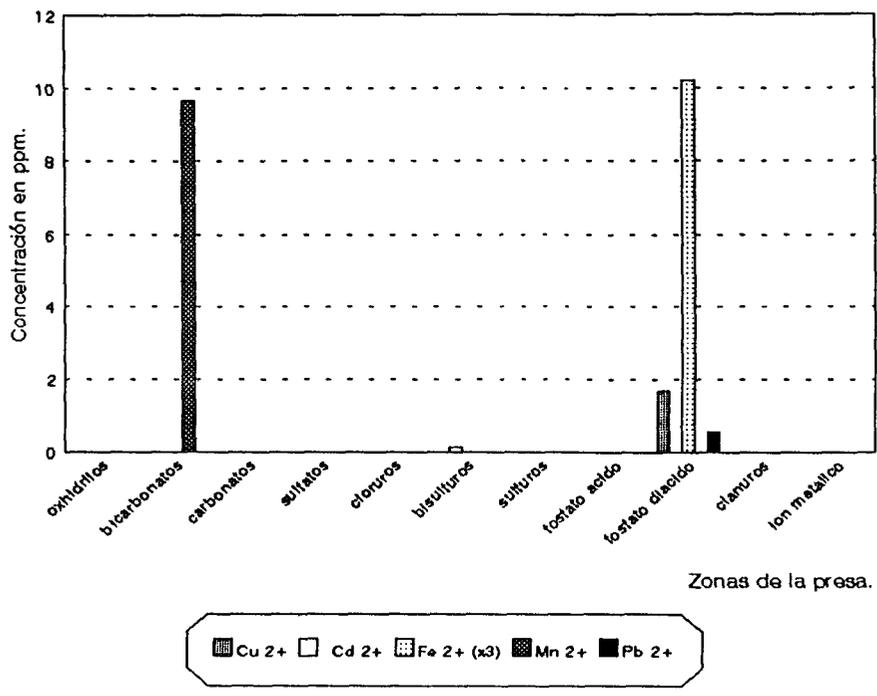


Figura 7.59. Predominio de especies teóricas en zona C, profundidad 0.2 m.

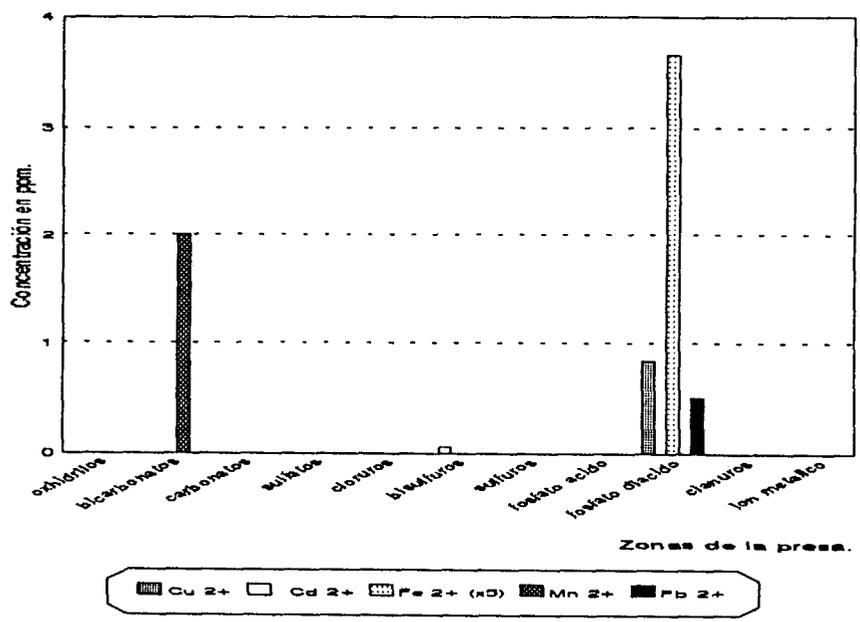


Figura 7.60. Predominio de especies teóricas en zona C, profundidad 2.0 m.

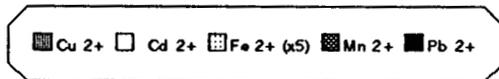
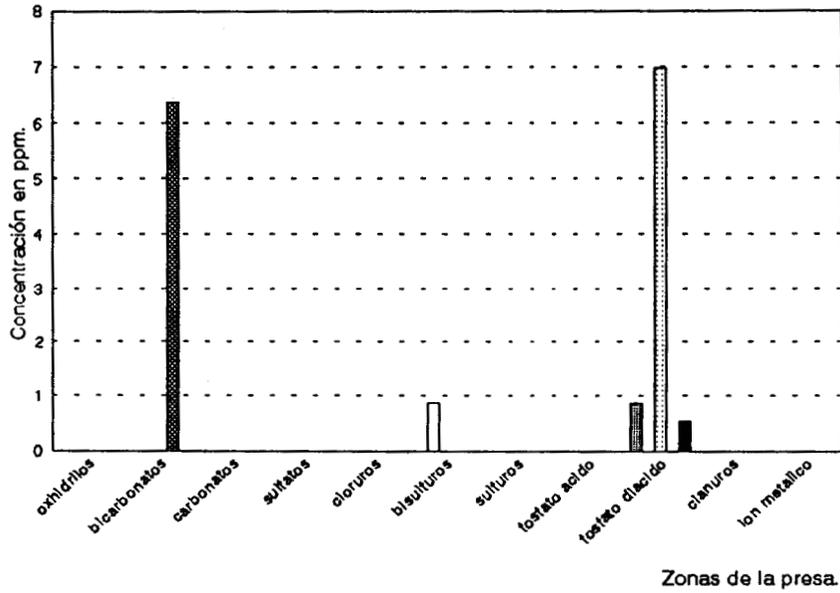


Figura 7.61. Predominio de especies teóricas en zona D, profundidad 0.2 m.

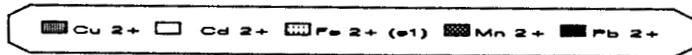
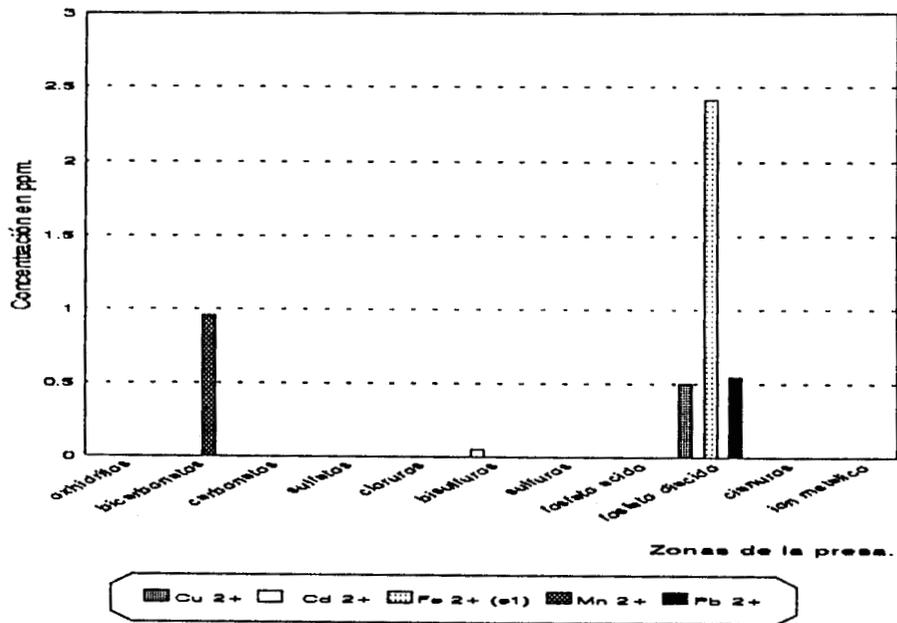


Figura 7.62. Predominio de especies teóricas en zona D, profundidad 1.5 m.

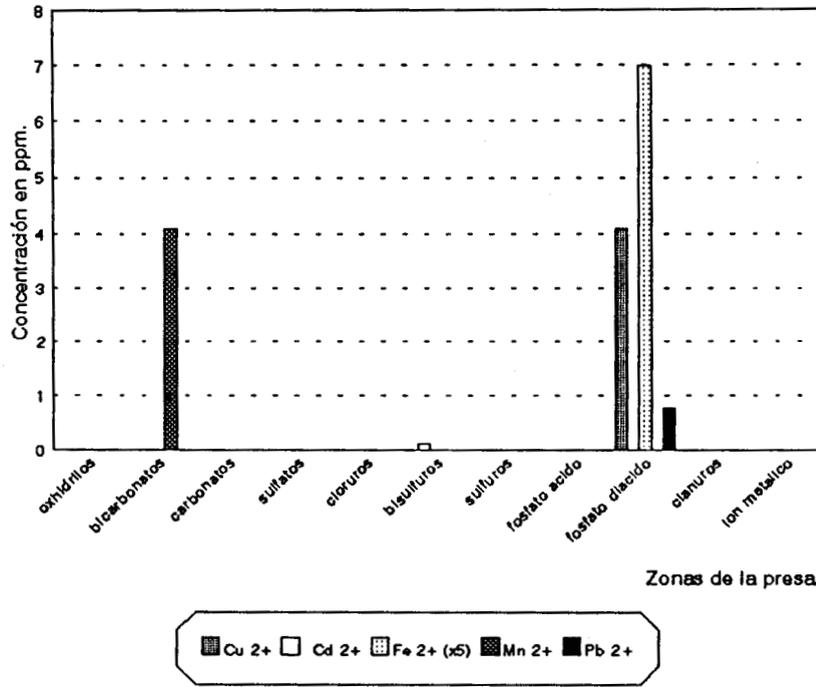


Figura 7.63. Predominio de especies teóricas en zona E, profundidad 0.2 m.

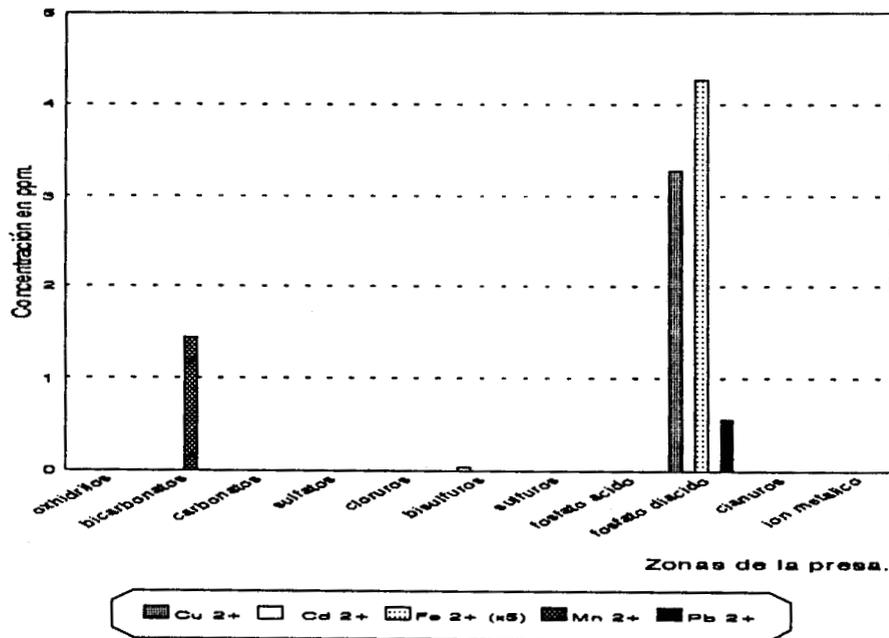


Figura 7.64. Predominio de especies teóricas en zona E, profundidad 3.0 m.

## ANALISIS DE RESULTADOS Y CONCLUSIONES

Una vez realizados los diferentes análisis y la obtención de los distintos resultados respecto a la caracterización del agua en diferentes zonas y profundidades de la presa Alzate, tomando en cuenta los valores de oxígeno disuelto monitoreados durante unas 10 horas (figura 7.1); analizando los resultados y considerando los diferentes procesos en la presa como se indica en el siguiente diagrama, se ha observado que:

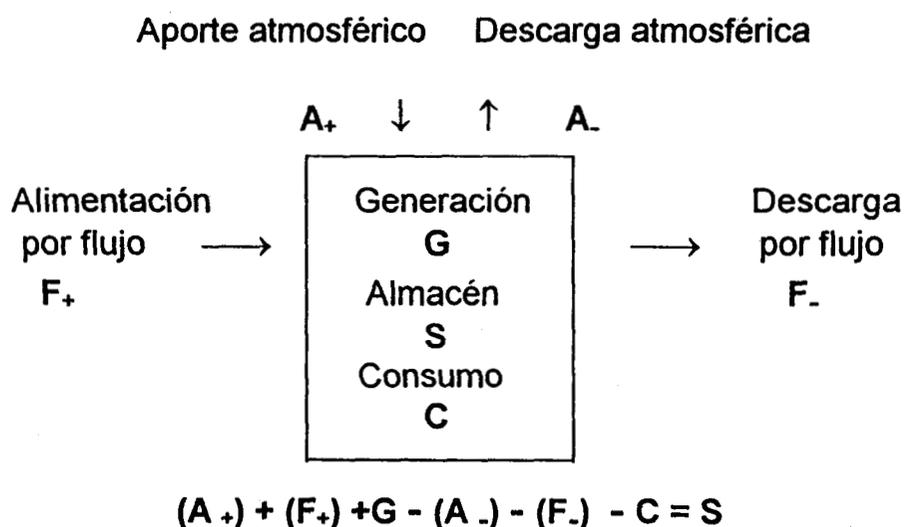


Figura 8.1.- Balance de oxígeno en un elemento de volumen de un cuerpo de agua.

1. La tendencia de los valores de la concentración del O<sub>2</sub> disuelto en función de la profundidad es monotonamente decreciente. Esto implica que los términos (A<sub>+</sub>)+(G) (donde la generación G puede ser inducida por 2 efectos probables: temperatura e insolación sobre la biota, que deben ser dominantes en la superficie. En cambio en la profundidad debe ser dominante el término de consumo, consistente con los altos valores de DQO (ver la tabla 7.2 ) determinados.
2. En la zona A es dominante el término de consumo C, puesto que a ninguna hora y ninguna profundidad se logró detectar oxígeno disuelto.
3. La zona B es tranquila, casi sin perturbaciones, a las 8 a.m. que fue la hora de menor insolación y temperatura, no hay O<sub>2</sub> disuelto, esto se puede deber a que el consumo (C) cancela la generación (G) biológica y el aporte atmosférico (A<sub>+</sub>); sin embargo, a nivel superficial el O<sub>2</sub> crece junto con la temperatura e insolación. Las demás zonas debieran comportarse de igual manera si sólo los términos G(generación) vs C(consumo) fueran los dominantes.
4. Sin embargo en la zona C se observa que el O<sub>2</sub> superficial es mayor que lo esperado según la tendencia de los valores en la zona B. Se debe de atribuir el crecimiento (en esta zona C) de la concentración del O<sub>2</sub> en la superficie (de 0 a 1m de profundidad) por el efecto de la turbulencia, con dispersión de aire en el agua, generada por los motores que impulsan las lanchas en esta zona, pues es precisamente el paso constante de un lado al otro del poblado ribereño en esta presa. Notar (figura 7.4c) que este efecto se observa incluso a las 18:00 hrs, cuando la generación biológica de O<sub>2</sub> ya ha decaído en prácticamente todos los sitios a las mismas profundidades.
5. La zona E manifiesta una ecología muy diferente de la zona B, pues es el lugar donde se detectó la mayor concentración de O<sub>2</sub> disuelto durante todo el horario de medición y se observó la presencia de mayor actividad biológica (esto se comprobó por la presencia de especies como la *Daphnia pulex*, que en esta zona se encontró abundante).

Como se ha indicado en el capítulo 3: **el CO<sub>2</sub> de equilibrio es la cantidad de dióxido de carbono, que tiene que estar presente en un cuerpo de agua para poder mantener en solución al bicarbonato que se encuentra en dicha agua.** Se puede representar mediante la ecuación de equilibrio:



Teniendo en cuenta el principio de Le Chatelier, si se presentase la mayor concentración de  $\text{CO}_2$  libre, para mantener el equilibrio, este  $\text{CO}_2$  tendría que atacar al  $\text{CaCO}_3$ , para aumentar la concentración del bicarbonato, obligando al equilibrio a desplazarse hacia la derecha y, por el contrario, si existe una deficiencia de  $\text{CO}_2$ , para restablecer el equilibrio será necesario que la concentración de bicarbonato disminuya para aumentar la concentración del  $\text{CO}_2$ , obligando a que el  $\text{CaCO}_3$  precipite.

Si el  $\text{CO}_2$  libre es mayor que el  $\text{CO}_2$  de equilibrio:

$$\text{CO}_2 (\text{libre}) - \text{CO}_2 (\text{en equilibrio}) = \text{CO}_2 (\text{exceso})$$

el  $\text{CO}_2$  en exceso, como se indicó antes, recibe el nombre de  **$\text{CO}_2$  agresivo potencial y una parte de él será  $\text{CO}_2$  agresivo real**, dependiendo del material con el que se ponga en contacto. Así, las aguas con estas características se les denomina aguas agresivas. **Si por el contrario el  $\text{CO}_2$  se encuentra en defecto y se produce precipitación**, se denomina incrustación, las aguas con esta propiedad se les denomina aguas incrustantes.

Para poder caracterizar un agua se pueden construir **curvas de equilibrio**. En el capítulo 3 se representaron las diferentes curvas de equilibrio construidas para cada zona de la presa y a diferentes profundidades por el método de **Tillmans**, pero el problema es que por este camino no se tomaron en cuenta los iones diferentes al Ca ("iones ajenos") y se supone la fortaleza iónica constante, esto conduce a que todas las aguas tendrían la misma curva de equilibrio, situación errónea, y en el caso de cuerpos de agua con aportes residuales municipales e industriales, se cometerían serios errores al caracterizarlas o diseñar un posible tratamiento.

Las relaciones de concentración de  $\text{CO}_3^{2-}$ ,  $\text{CO}_2$  y  $\text{HCO}_3^-$  en el equilibrio y basados en la solubilidad teórica del  $\text{CaCO}_3$  a diferentes temperaturas, están íntimamente relacionadas con la salinidad del agua, la cual se debe no sólo al calcio sino a los diferentes iones positivos y negativos disueltos.

**Langelier** desarrolló, como también fue explicado ampliamente en el capítulo 3, un método para relacionar los conceptos de agresividad e incrustación, definiendo el concepto de **pH de saturación (pHs)** de cualquier agua. Si el **pH real del agua está por debajo del pH de saturación, el índice de Langelier es positivo**, entonces el equilibrio de la ecuación 8.1 se desplazará hacia la izquierda precipitando al  $\text{CaCO}_3$ , máxime si el agua está saturada de  $\text{CaCO}_3$ ; **cuanto**

**mayor sea la desviación del pH real del de saturación (pHs), más pronunciada será la inestabilidad del agua.**

El índice de Langelier como se ha explicado es un **método cualitativo**, ya que expresa la alcalinidad como: **la diferencia entre la suma de todos los cationes excepto el H<sup>+</sup> y la suma de todos los aniones procedentes de ácidos minerales**. Tomando en cuenta el desarrollo de las ecuaciones implicadas (capítulo 3), el uso de este modelo se limita a los **pH entre 5 y 9** (ecuación 3.43), donde se eliminan los términos:

$[H]_s^+ - K'w/[H]_s^+$  (Valor que se considera muy pequeño con respecto a la alcalinidad)

$2K'_2/[H]_s^+$  ( Valor muy pequeño con respecto a la unidad)

limitándose el uso para  $pH < 8.3$ , lo que implica el no considerar la concentración de los carbonatos, ya que en la ecuación del cálculo del pHs se desprecian estos términos.

Si el agua está en equilibrio químico cumple con la ecuación de Langelier y si no está en equilibrio no se cumple y el pHs calculado con la ecuación 3.47, es el pH que tendría el agua si estuviera en equilibrio con el contenido de  $Ca^{2+}$  y  $HCO_3^-$  dadas, sin cambios en estos y en la fortaleza iónica.

Un agua que no está en equilibrio para lograrlo mediante el aire o el  $CaCO_3$ , cambia las concentraciones de  $Ca^{2+}$  y  $HCO_3^-$ , así como, de la fortaleza iónica. Como no se puede predecir cuales serán los valores de esas concentraciones en el estado de equilibrio, es imposible determinar por la ecuación de Langelier el **pH real** que se obtiene con un agua, por ejemplo agresiva por contacto con: aire o con  $CaCO_3$  o con  $Ca(OH)_2$ . Por ello el pHs de Langelier es un **pH ficticio** y su valor no permite juzgar sobre la determinación cuantitativa de la agresividad real y que un mayor valor del índice de Langelier no coincide necesariamente con una mayor agresividad. Dos aguas con la misma agresividad pueden tener distinto índice de saturación y, viceversa, dos aguas con el mismo índice de saturación pueden tener diferentes agresividades.

Sin embargo el índice de Langelier es útil para una evaluación cualitativa de un agua: "si es agresiva", "está en equilibrio" o "es incrustante".

En el caso del agua de la presa aplicando primero el modelo de Tillmans figura 7.36 y el índice de Langelier figura 7.37, se observa que:

1. El pH en todas las zonas y en cada columna de agua no fue mayor de 8, lo que indica que las especies predominante son el  $\text{HCO}_3^-$  y el  $\text{CO}_2$ .
2. La alcalinidad se debe al  $\text{HCO}_3^-$ , ya que en la región de estos pH prácticamente no se detectó  $\text{CO}_3^{2-}$ .
3. Según el diagrama de la figura 7.50 y la gráfica de la figura 7.51, existen tres zonas con naturaleza agresiva que son: la A, la C y la F (cause del río).
4. Según los mismos diagramas, las zonas B, D y E, se encuentran debajo de la curva de equilibrio (Tillmans), pero no muy alejados de la misma, señal que son ligeramente incrustantes, en donde se pudiera presentar una tendencia a la precipitación del  $\text{CaCO}_3$ , esto es consistente con los valores de pH, pues son las zonas que presentaron los valores más altos, entre 7.8 y 7.9
5. El hecho de que los valores de los índices de Langelier se encuentren cerca de la curva de equilibrio, se puede deber a que la presa es un sistema abierto y expuesta a la atmósfera y a la producción de  $\text{CO}_2$  de la biota, por un lado; pero por otro no es un sistema totalmente en equilibrio, es decir presenta algo de inestabilidad por tener poco intercambio de oxígeno, según los valores obtenidos de oxígeno disuelto, como se observa en la gráfica 7.1 y poco movimiento hidrológico. La zona B es poco profunda, entre 1.5 y 2 metros, la D es una zona de transición donde se mezclan las aguas pluviales y el agua del río Lerma, pero es importante aclarar que en esta zona, el río no se mezcla en forma plena con el agua pluvial, aunque sí existe un efecto difusivo. En lo que respecta a la zona E, es una parte que se encuentra rodeada por una isleta como se indica en el mapa de la figura 6.1, la cual protege a esta zona de la contaminación del río y únicamente se tiene la influencia del aporte pluvial.

Debido a la explicación anterior en cuanto a la obtención de la curva de equilibrio y los índices de Langelier, para tener una justificación más cuantitativa se aplicó el método diseñado por Mojmir Mach en sus trabajos en Checoslovaquia y en Cuba<sup>26</sup>. El método está basado principalmente en el cálculo de la fuerza iónica, donde se consideran la influencia de las concentraciones de los distintos cationes y aniones. Como se explicó en el capítulo 3, en donde se desarrolló el mecanismo matemático para la obtención de las ecuaciones que relacionan la determinación

de las concentraciones de las diferentes especies iónicas además de:  $\text{Ca}^{2+}$ ,  $\text{CO}_3^{2-}$ ,  $\text{HCO}_3^-$ ,  $\text{H}^+$  y  $\text{H}_2\text{CO}_3$ , con las cuales se establece la curva de equilibrio mediante los valores de la fortaleza iónica y conociendo el material con el que está en contacto el agua, como por ejemplo, el aire en el caso de la presa.

Aplicando el modelo de Mach, es posible obtener los pH de saturación reales y obtener valores cuantitativos de agresividad. En la figura 7.51 se construyó la gráfica: **1/3 (fuerza iónica en equilibrio - fuerza iónica real) vs pHreal**, se observa que cuando los valores de 1/3(fuerza iónica en equilibrio - fuerza iónica real), al cual se denominará índice de agresividad, son menores de 0.5 resultan aguas incrustantes, pero para valores mayores resultan aguas agresivas, esto también se observa en la figura 8.2, índice de saturación vs índice de agresividad, en el cual el cero de Langelier se relaciona con un valor alrededor de 0.5 en el índice de agresividad de Mach.

Si se comparan todos los puntos con índices de saturación positivos, que según el modelo de Langelier corresponden a aguas incrustantes con los valores de índices de agresividad menores de 0.5, éstos corresponden a los puntos de los mismos sitios que se encuentran por debajo de la curva de equilibrio de Tillmans. Se hace notar que los puntos más alejados de la curva de equilibrio en el diagrama de Tillmans, figura 7.36, son los que tienen índices de agresividad extremos o sea el sitio C, para las aguas agresivas y el sitio D, para las incrustantes.

Para una caracterización más estricta fue necesario complementar el trabajo con estudios de especiación para precisar no sólo el comportamiento de  $\text{Ca}^{2+}$  y derivados inorgánicos del carbono, sino de otros cationes y aniones que intervienen en la salinidad, alcalinidad, etc. de esta presa.

Para estos estudios se obtuvieron los siguientes resultados finales del análisis de los diferentes datos experimentales de la especiación a través del manejo de las siguientes relaciones:

La muestra inicialmente contiene:

$$\text{Fracciones totales} = f + l + an + \text{Lif} + \text{Lil} + \text{Lan} + \text{Lof} + \text{Lol} + \text{Lon}$$

donde :

f= fracción electroactiva fija (retenido por intercambio lento)

l= fracción electroactiva lábil (retenido por intercambio rápido)

an= fracción electroactiva que no se retiene (no se fija en ningún caso)

Lif= fracción relacionada a materia inorgánica (retenido por intercambio lento)

Lil= fracción relacionada a materia inorgánica (retenido por intercambio rápido)

Lan= fracción relacionada a materia inorgánica (pasa por intercambio lento)

Lof= fracción relacionada a materia orgánica (retenido por intercambio lento)

Lol= fracción relacionada a materia orgánica (retenido por intercambio rápido)

Lon= fracción relacionada a materia orgánica (pasa por intercambio lento)

Se dividió este análisis en tres partes:

1.- Cuando se analiza sin pasar el material por resina Chelex-100:

|   |  |     |
|---|--|-----|
| Contenido inicial= $f + l + an + Lif + Lil + Lan + Lof + Lol + Lon$ |  |     |
| C   | = $f + l + an$   | (1) |
| CA  | = $f + l + an + Lif + Lil + Lan + Lof + Lol + Lon$     | (2) |
| CUV   | = $f + l + an + Lof + Lol + Lon$                       | (3) |
| CA-CUV  | = $Lif + Lil + Lan$ (sólo los asociados a inorgánicos) | (4) |
| CUV-C   | = $Lof + Lol + Lon$ (sólo los asociados a orgánicos)   | (5) |

2.- Cuando la muestra es pasada a través de la resina Chelex-100 y la elución es en forma rápida, los lábiles se retienen:

|   |  |      |
|---|--|------|
| Material no retenido = $f + an + Lif + Lan + Lof + Lon$ |  |      |
|   | CRr = $f + an$   | (6)  |
|   | CRrA = $f + an + Lif + Lan + Lof + Lon$                        | (7)  |
|   | CRrUV = $f + an + Lof + Lon$                                   | (8)  |
| (7-8)   | CRrA-CRrUV = $Lif + Lan$ (sólo los inorgánicos fijos)          | (9)  |
| (8-6)   | CRrUV-CRr = $Lof + Lon$ (sólo los asociados a orgánicos fijos) | (10) |
| (1-6)   | C-CRr = $l$  | (11) |
| (3-8)   | CUV-CRrUV = $l + Lol$  | (12) |
| (2-7)   | CA-CRrA = $l + Lil + Lol$                                      | (13) |
| (12-11)   | (CUV-CRrUV)-(C-CRr) = $Lol$                                    | (14) |
| 13-12)  | (CA-CRrA)-(CUV-CRrUV) = $Lil$                                  | (15) |

3.- Cuando la elución es en forma lenta al pasar la muestra a través de la resina:

|  |                                   |      |
|--|-----------------------------------|------|
| Material no retenido= $an + Lan + Lon$ |                                   |      |
|  | CRI= $an$                         | (16) |
|  | CRIA= $an + Lan + Lon$            | (17) |
|  | CRIUV= $an + Lon$                 | (18) |
| (19-17)                                | CRIUV-CRI= $Lon$                  | (19) |
| (18-19)                                | CRIA-CRIUV= $Lan$                 | (20) |
| (6-17)                                 | CRr-CRI= $f$                      | (21) |
| (7-18)                                 | CRrA-CRIA= $f + Lif + Lof$        | (22) |
| (8-19)                                 | CRrUV-CRIUV= $f + Lof$            | (23) |
| (23-24)                                | (CRrA-CRIA)-(CRrUV-CRIUV) = $Lif$ | (24) |

Del análisis de las ecuaciones se tiene:

CA < CUV < C  
 CRrA < CRrUV < CRr  
 CRIA < CRIUV < CRI  
 C < CRr < CRI  
 CA < CRrA < CRIA  
 CUV < CRrUV < CRIUV

En función de este análisis se puede concluir para los iones:

1.- Cadmio en ppb (partes por billón):

**Tabla 8.1.** Concentración de Cd<sup>2+</sup> en las distintas fracciones determinadas en la especiación experimental.

| Cd <sup>2+</sup>      |        |        |        |        |        |        |        |        |        |
|-----------------------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|
| Profundidad en metros | f      | l      | an     | Lif    | Lil    | Lan    | Lof    | Lol    | Lon    |
| Zona B                |        |        |        |        |        |        |        |        |        |
| 0.2                   | 0.0075 | 0.02   | 0.0525 | 0.0171 | 0.0759 | 0.0076 | 0.0071 | 0.0988 | 0.0142 |
| 1.5                   | 0.0044 | 0.0043 | 0.0237 | 0.0417 | 0.0007 | 0.0145 | 0.0005 | 0.1948 | 0.0038 |
| Zona C                |        |        |        |        |        |        |        |        |        |
| 0.2                   | 0.0335 | 0.0487 | 0.093  | 0.0027 | 0.0289 | 0.0203 | 0.0414 | 0.0466 | 0.0159 |
| 2.0                   | 0.001  | 0.0236 | 0.0381 | 0.0043 | 0.0203 | 0.023  | 0.0103 | 0.1871 | 0.0016 |
| Zona D                |        |        |        |        |        |        |        |        |        |
| 0.2                   | 0.0345 | 0.0216 | 0.0412 | 0.1232 | 0.1414 | 0.0345 | 0.0283 | 0.1385 | 0.0063 |
| 1.5                   | 0.0206 | 0.0042 | 0.0291 | 0.1237 | 0.0181 | 0.041  | 0.0201 | 0.1647 | 0.0056 |
| Zona E                |        |        |        |        |        |        |        |        |        |
| 0.2                   | 0.0231 | 0.069  | 0.0569 | 0.0401 | 0.0786 | 0.0813 | 0.0585 | 0.10   | 0.0148 |
| 3.0                   | 0.013  | 0.012  | 0.0194 | 0.0404 | 0.0616 | 0.0826 | 0.0116 | 0.1841 | 0.013  |

Este ion, se observa que aparece en todas las fracciones, lo que significa que es muy móvil, acepta intercambiar con cualquier especie. Esto implica que sea un elemento de alto riesgo, los procesos naturales no tienden a concentrarlo en alguna fracción específica, y por lo tanto, el proceso de tratamiento debe darse para todas las especies.

$Cd^{2+}$  presenta una afinidad intermedia hacia la resina según los órdenes de afinidad característicos en resinas sintéticas de intercambio catiónico, como en la Chelex-100 (capítulo 7, página 87).

La tendencia de la fracción fija en inorgánicos (Lif) se presenta en mayor concentración hacia el fondo, lo que puede significar alguna relación de equilibrio adsorción-desorción con las especies presentes en el sedimento superficial.

Tomando en cuenta la literatura y los resultados analíticos, se consideran las siguientes especies con el cadmio:

| OH <sup>-</sup>                               | Cl <sup>-</sup>   | SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup>  | CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup> | S <sup>2-</sup>  | HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup> | PO <sub>4</sub> <sup>3-</sup> | CN <sup>-</sup>   |
|---|---|--|-------------------------------|--|-------------------------------|-------------------------------|---|
| [CdOH] <sup>+</sup><br>[Cd(OH) <sub>2</sub> ] | [CdCl] <sup>+</sup><br>[CdCl <sub>2</sub> ]<br>[CdCl <sub>3</sub> ]<br>[CdCl <sub>4</sub> ] <sup>2-</sup> | [CdSO <sub>4</sub> ]<br>[Cd(SO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> ] <sup>2-</sup><br>[Cd(SO <sub>4</sub> ) <sub>3</sub> ] <sup>4-</sup> | CdCO <sub>3</sub> (↓)         | [CdS]<br>[CdHS] <sup>+</sup><br>[Cd(HS) <sub>2</sub> ]<br>[Cd(HS) <sub>3</sub> ]<br>[Cd(HS) <sub>4</sub> ] <sup>2-</sup> | No forma fácilmente complejos | No forma complejos            | [CdCN] <sup>+</sup><br>[Cd(CN) <sub>2</sub> ]<br>[Cd(CN) <sub>3</sub> ]<br>[Cd(CN) <sub>4</sub> ] <sup>2-</sup> |

Considerando las experiencias de autores como Morel<sup>114</sup>, Florence<sup>51</sup>, entre otros y aplicando criterios de Pearson<sup>97,98,99,100,104</sup> de dureza y suavidad, si se considera la resina Chelex-100 como un ligando intermedio, podría decirse con cierta aproximación, que en las especies: [CdOH]<sup>+</sup>, [Cd(OH)<sub>2</sub>], [CdCl]<sup>+</sup>, [CdCl<sub>2</sub>] y [CdSO<sub>4</sub>], cada ligando que acompaña al cadmio son bases duras y siendo el Cd<sup>2+</sup> un ácido suave, se consideran lábiles ya que el cadmio preferirá intercambiar los ligandos de cada caso con la resina. Según Arheland<sup>116</sup> y Schwarzenbach<sup>103</sup> en los compuestos donde se encuentran presentes tanto un ácido como una base duros, existe un predominio de carácter iónico en el enlace, por el contrario si un ácido y una base suaves son los que están presentes, el carácter predominante en el enlace es el covalente. Esto explicaría una mejor afinidad entre el cadmio (ácido suave) y la resina (base intermedia).

Las especies sulfuros y cianuros al ser ligandos suaves estabilizan al cadmio por lo que estas especies no sufren intercambio con la resina y se consideran las de mayor elución.

2.- Cobre en ppb (partes por billón):

**Tabla 8.2.** Concentración de  $\text{Cu}^{2+}$  en las distintas fracciones determinadas en la especiación experimental.

| $\text{Cu}^{2+}$      |        |        |        |        |        |        |        |        |        |
|-----------------------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|
| Profundidad en metros | f      | l      | an     | Lif    | Lil    | Lan    | Lof    | Lol    | Lon    |
| Zona B                |        |        |        |        |        |        |        |        |        |
| 0.2                   | 0.939  | 0.8407 | 0.2154 | 2.6659 | 0.2712 | 1.2889 | 1.056  | 1.6301 | 1.1159 |
| 1.5                   | 0.017  | 0.4011 | 0.0185 | 2.1183 | 1.5221 | 1.2068 | 0.3663 | 0.8684 | 0.0247 |
| Zona C                |        |        |        |        |        |        |        |        |        |
| 0.2                   | 0.117  | 0.7674 | 0.1923 | 0.3725 | 0.0044 | 2.1911 | 0.1747 | 0.3956 | 0.1806 |
| 2.0                   | 0.0475 | 0.3373 | 0.152  | 0.282  | 0.7004 | 0.99   | 0.3425 | 0.3863 | 0.172  |
| Zona D                |        |        |        |        |        |        |        |        |        |
| 0.2                   | 0.082  | 0.3012 | 0.1736 | 0.4541 | 0.052  | 0.3559 | 1.1289 | 2.3508 | 0.7855 |
| 1.5                   | 0.0723 | 0.162  | 0.0827 | 0.432  | 1.0098 | 0.342  | 0.5997 | 0.0456 | 0.0433 |
| Zona E                |        |        |        |        |        |        |        |        |        |
| 0.2                   | 0.1774 | 2.285  | 0.1319 | 1.4856 | 0.0268 | 0.9536 | 3.092  | 0.3802 | 0.1195 |
| 3.0                   | 0.0085 | 2.0683 | 0.0077 | 1.2358 | 3.723  | 0.1272 | 0.6033 | 0.3227 | 0.0895 |

Tomando en cuenta los resultados de la tabla anterior, este ion presenta una gran movilidad, ya que abunda en todas las fracciones; en las fracciones inorgánicas lábiles (Lil), se observa una tendencia a aumentar la concentración en el fondo en mayor proporción que en el cadmio, esto resulta quizá también en un equilibrio adsorción-desorción (más pronunciado que en el cadmio) con las especies que se encuentran en el sedimento superficial .

En cuanto al comportamiento con respecto a la resina, se parece también a la del cadmio, tal como está predicho en los órdenes de afinidad citada en el capítulo 5.

Considerando lo propuesto por Morel y otros investigadores se tiene:

| $\text{OH}^-$   | $\text{Cl}^-$     | $\text{SO}_4^{2-}$ | $\text{CO}_3^{2-}$                                     | $\text{S}^{2-}$            | $\text{HCO}_3^-$              | $\text{PO}_4^{3-}$                                  | $\text{CN}^-$   |
|---|-------------------|--------------------|--|----------------------------|-------------------------------|---|---|
| $[\text{CuOH}]^+$<br>$[\text{Cu}(\text{OH})_2]$<br>$[\text{Cu}(\text{OH})_4]^{2-}$<br>$[\text{Cu}_2(\text{OH})_2]^{2+}$ | $[\text{CuCl}]^+$ | $[\text{CuSO}_4]$  | $[\text{CuCO}_3]$<br>$[\text{Cu}(\text{CO}_3)_2]^{2-}$ | $[\text{CuS}](\downarrow)$ | No forma fácilmente complejos | $[\text{CuHPO}_4]$<br>$[\text{CuH}_2\text{PO}_4]^+$ | $[\text{Cu}(\text{CN})_2]$<br>$[\text{Cu}(\text{CN})_3]^-$<br>$[\text{Cu}(\text{CN})_4]^{2-}$ |

Las especies consideradas empleando los tratamientos de Pearson son:  $[\text{CuOH}]^+$ ,  $[\text{Cu}(\text{OH})_2]^{2+}$  y  $[\text{CuCl}]^+$  se consideran especies lábiles,  $[\text{CuSO}_4]$ ,  $[\text{CuHPO}_4]$ ,  $[\text{CuH}_2\text{PO}_4]^+$  se consideran fijas. Las especies posibles de eluir son  $[\text{CuCO}_3]$  y  $[\text{Cu}(\text{CO}_3)_2]^{2-}$ .

### 3.- Plomo en ppb (partes por billón):

**Tabla 8.3.** Concentración de  $\text{Pb}^{2+}$  en las distintas fracciones determinadas en la especiación experimental.

| $\text{Pb}^{2+}$      |      |      |      |      |      |      |      |      |     |
|-----------------------|------|------|------|------|------|------|------|------|-----|
| Profundidad en metros | f    | l    | an   | Lif  | Lil  | Lan  | Lof  | Lol  | Lon |
| Zona B                |      |      |      |      |      |      |      |      |     |
| 0.2                   | 0.40 | 0.76 | <LMD | 0.92 | 0.43 | 1.95 | 0.26 | 0.03 | 0.0 |
| 1.5                   | 0.33 | 0.75 | <LMD | 0.25 | 0.75 | 0.68 | 0.06 | 0.02 | 0.0 |
| Zona C                |      |      |      |      |      |      |      |      |     |
| .2                    | 0.39 | 0.83 | <LMD | 0.04 | 0.19 | 0.62 | 0.35 | 0.02 | 0.0 |
| 2.0                   | 0.31 | 0.72 | <LMD | 0.04 | 0.69 | 0.0  | 0.34 | 0.01 | 0.0 |
| Zona D                |      |      |      |      |      |      |      |      |     |
| 0.2                   | 0.55 | 0.58 | <LMD | 0.94 | 0.98 | 0.41 | 0.46 | 0.09 | 0.0 |
| 1.5                   | 0.55 | 0.58 | <LMD | 0.91 | 1.04 | 0.12 | 0.25 | 0.01 | 0.0 |
| Zona E                |      |      |      |      |      |      |      |      |     |
| 0.2                   | 0.59 | 0.99 | <LMD | 0.04 | 0.54 | 0.89 | 0.45 | 0.37 | 0.0 |
| 3.0                   | 0.49 | 0.66 | <LMD | 0.04 | 0.56 | 0.0  | 0.44 | 0.03 | 0.0 |

<LMD = Menor L Límite Mínimo Disponible.

En cuanto al  $\text{Pb}^{2+}$  en general, para los electroactivos se observa siempre una tendencia de concentración mayor en la superficie, también se observa que los lábiles son los que más se retienen en la resina, esto es congruente con la relación citada en el capítulo 5 en la que el plomo presenta la mayor afinidad. Esto mismo explica que la concentración de los an (materia soluble no quelatable, no adsorbible) es cero en todos los sitios.

En las especies relacionadas a la materia inorgánica (Lif) y los que no se retienen en ningún caso (Lan) también se concentran en la superficie, en cambio los lábiles (Lif) de esta fracción se concentran en el fondo; esto concuerda con la tendencia de estas especies a sedimentar.

Para las especies relacionadas a materia orgánica, la tendencia de los fijos (Lof) y los lábiles (Lol) es concentrarse en la superficie, y de nuevo para la materia soluble que no forma quelatos la concentración es <LMD.

Parece ser que el plomo es el que tiene la mayor afinidad hacia la resina.

| OH <sup>-</sup>   | Cl <sup>-</sup>   | SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup> | CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup> | S <sup>2-</sup> | HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup> | PO <sub>4</sub> <sup>3-</sup>   | CN <sup>-</sup>    |
|---|---|-------------------------------|-------------------------------|-----------------|-------------------------------|---|--------------------|
| [PbOH] <sup>+</sup><br>[PbOH <sub>2</sub> ]<br>[PbOH <sub>3</sub> ] | [PbCl] <sup>+</sup><br>[PbCl <sub>2</sub> ]<br>[PbCl <sub>3</sub> ]<br>[PbCl <sub>4</sub> ] <sup>2-</sup> | [PbSO <sub>4</sub> ]          | [PbCO <sub>3</sub> ](↓)       | [PbS](↓)        | No forma fácilmente complejos | [PbHPO <sub>4</sub> ]<br>[PbH <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> ] <sup>+</sup> | No forma complejos |

De nuevo considerando los criterios de Pearson, Arheland y Schwarzenbach se pueden considerar a las especies [PbOH]<sup>+</sup>, [PbOH<sub>2</sub>], [PbCl]<sup>+</sup>, [PbCl<sub>2</sub>] y [PbSO<sub>4</sub>] como lábiles, pues en cada uno se tiene un ligando base dura y siendo el Pb<sup>2+</sup> un ácido intermedio tirando a suave, es natural pensar que intercambie rápidamente hacia la resina, lo cual parece ser coherente con los resultados experimentales. En cambio con los ligandos fosfato ([PbHPO<sub>4</sub>] y [PbH<sub>2</sub>PO<sub>4</sub>]<sup>+</sup>) parece que la tendencia podría ser hacia las especies fijas.

#### 4.- Hierro en ppb (partes por billón):

**Tabla 8.4.** Concentración de Fe<sup>2+</sup> en las distintas fracciones determinadas en la especiación experimental.

| Fe <sup>2+</sup>      |     |      |      |      |      |      |     |      |      |
|-----------------------|-----|------|------|------|------|------|-----|------|------|
| Profundidad en metros | f   | l    | an   | Lif  | Lil  | Lan  | Lof | Lol  | Lon  |
| Zona B                |     |      |      |      |      |      |     |      |      |
| 0.2                   | 8.0 | 20.4 | 24.5 | 23.1 | 14.1 | 38.2 | 5.2 | 20.8 | 9.1  |
| 1.5                   | 9.6 | 15.8 | 16.4 | 24.3 | 32.3 | 23.1 | 3.4 | 15.4 | 11.2 |
| Zona C                |     |      |      |      |      |      |     |      |      |
| .2                    | 7.0 | 3.0  | 13.4 | 42.5 | 19.8 | 14.1 | 0.1 | 1.9  | 9.3  |
| 2.0                   | 0.0 | 1.5  | 8.7  | 16.9 | 41.6 | 20.0 | 8.0 | 2.0  | 5.9  |
| Zona D                |     |      |      |      |      |      |     |      |      |
| 0.2                   | 0.6 | 7.2  | 11.7 | 42.3 | 4.4  | 53.0 | 6.9 | 42.1 | 3.5  |
| 1.5                   | 0.7 | 4.7  | 8.1  | 51.9 | 5.4  | 29.2 | 2.5 | 2.9  | 6.0  |
| Zona E                |     |      |      |      |      |      |     |      |      |
| 0.2                   | 1.5 | 7.2  | 10.8 | 24.0 | 1.5  | 19.9 | 7.8 | 74.0 | 2.5  |
| 3.0                   | 2.9 | 0.3  | 8.7  | 49.6 | 2.8  | 17.6 | 0.3 | 39.4 | 4.0  |

Lo primero que se observa es que las concentraciones de  $Fe^{2+}$  disueltas están en cantidades bajas en cualesquiera de las nueve fracciones estudiadas. Esto es porque prácticamente todos los aniones presentes en el cuerpo de agua tienden a dar precipitados con los iones de  $Fe^{2+}$  y las únicas formas solubles serían los cloruros y sulfatos, los cuales no se presentan porque las concentraciones de estos iones en la presa son más bajas que las necesarias para la producción de las formas solubles.

En la escala de la página 94, capítulo 5 el  $Fe^{2+}$  presenta menor afinidad hacia la resina con respecto a los iones anteriores. Para este ion, eliminando la zona C, se detecta por lo general una tendencia a aumentar la concentración en las muestras del fondo, también se observa, como en el caso del  $Cu^{2+}$ , que se encuentra distribuido en todas las fracciones, lo cual puede significar que también es altamente móvil, relacionado en una mayor proporción con especies inorgánicas.

| OH <sup>-</sup>        | Cl <sup>-</sup> | SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup> | CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup> | S <sup>2-</sup> | HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup> | PO <sub>4</sub> <sup>3-</sup>                    | CN <sup>-</sup>                      |
|------------------------|-----------------|-------------------------------|-------------------------------|-----------------|-------------------------------|--|--------------------------------------|
| [FeOH] <sup>+</sup>    | No forma        | [FeSO <sub>4</sub> ]          | [FeCO <sub>3</sub> ](↓)       | [FeS](↓)        | No forma                      | [FeHPO <sub>4</sub> ]                            | [Fe(CN) <sub>6</sub> ] <sup>4-</sup> |
| [Fe(OH) <sub>2</sub> ] | complejos       |                               |                               |                 | fácilmente                    | [FeH <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> ] <sup>+</sup> |                                      |
| [Fe(OH) <sub>3</sub> ] |                 |                               |                               |                 | complejos                     |  |                                      |

Según la literatura (Tessier<sup>131</sup> y Forstner<sup>134</sup>) el  $Fe^{2+}$  y el  $Fe^{3+}$  tienden generalmente a formar oxihidróxidos coloidales que al crecer, floculan y precipitan, esto puede ser la causa del porqué se hallaron concentraciones muy elevadas, del orden de los 50,000 ppm, en los sedimentos de la presa<sup>133,135</sup>.

En cuanto a la zona C, no existe ninguna tendencia específica en las concentraciones, parece que el movimiento constante del agua por el tránsito de lanchas en esta zona podría ser un factor que quizá afecte esta distribución.

#### 5.- Manganeso en ppb (partes por billón):

En este ion se puede ver que la mayor concentración se presenta en general en las fracciones relacionadas a inorgánicos y orgánicos. En los inorgánicos las concentraciones más altas se encuentran principalmente en el fondo y en las fracciones inorgánicas lábiles, las concentraciones más elevadas son en las zonas B y D, ambas en el fondo, sin embargo en la fracción relacionada a materia inorgánica que no se retiene ni por intercambio lento (Lan), la mayor concentración se halla en la superficie, principalmente en las zonas B, C y D.

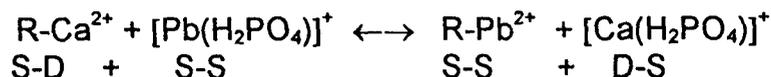
Tabla 8.5. Concentración de  $Mn^{2+}$  en las distintas fracciones determinadas en la especiación experimental.

| Mn <sup>2+</sup>      |       |       |       |       |        |       |        |        |       |
|-----------------------|-------|-------|-------|-------|--------|-------|--------|--------|-------|
| Profundidad en metros | f     | l     | an    | Lif   | Lil    | Lan   | Lof    | Lol    | Lon   |
| Zona B                |       |       |       |       |        |       |        |        |       |
| 0.2                   | 1.104 | 0.603 | 1.168 | 0.315 | 4.393  | 5.377 | 3.362  | 24.027 | 0.816 |
| 1.5                   | 0.078 | 0.159 | 0.464 | 2.065 | 17.672 | 2.89  | 1.595  | 11.304 | 0.42  |
| Zona C                |       |       |       |       |        |       |        |        |       |
| .2                    | 1.726 | 1.69  | 1.884 | 2.834 | 4.24   | 5.744 | 2.204  | 6.306  | 1.25  |
| 2.0                   | .039  | 0.294 | 0.418 | 4.727 | 7.95   | 1.285 | 0.104  | 6.158  | 0.014 |
| Zona D                |       |       |       |       |        |       |        |        |       |
| 0.2                   | 1.28  | 1.669 | 1.832 | 1.275 | 8.031  | 6.471 | 9.026  | 10.812 | 0.262 |
| 1.5                   | 0.133 | 0.027 | 0.365 | 90417 | 1.668  | 3.717 | 2.52   | 6.277  | 0.018 |
| Zona E                |       |       |       |       |        |       |        |        |       |
| 0.2                   | 0.717 | 0.412 | 1.119 | 8.283 | 9.376  | 0.959 | 10.913 | 4.928  | 1.771 |
| 3.0                   | 0.023 | 0.211 | 0.559 | 8.796 | 9.924  | 0.242 | 4.257  | .0827  | 0.141 |

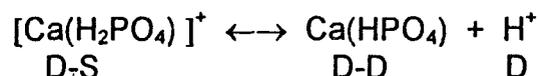
Parece ser que la zona B actúa como un cuerpo de agua estabilizante, puesto que de B a C, las concentraciones Lil de fondo pasan de 17 a 7 ppb y luego no vuelve a crecer significativamente. El valor de 17 ppb contiene seguramente una aportación geoquímica más otra antropogénica. La geoquímica, por la naturaleza geológica de la zona debe dar una contribución contante a cualquiera de los Lil y Lol de fondo, por lo que los valores superiores a los que se observan en el punto C deben ser contribuciones antropogénicas.

| OH <sup>-</sup>                      | Cl <sup>-</sup>     | SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup> | CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup> | S <sup>2-</sup>        | HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup>      | PO <sub>4</sub> <sup>3-</sup> | CN <sup>-</sup>    |
|--------------------------------------|---------------------|-------------------------------|-------------------------------|------------------------|------------------------------------|-------------------------------|--------------------|
| [MnOH] <sup>+</sup>                  | [MnCl] <sup>+</sup> | [MnSO <sub>4</sub> ]          | [MnCO <sub>3</sub> ](↓)       | [MnS <sub>2</sub> ](↓) | [MnHCO <sub>3</sub> ] <sup>+</sup> | No forma complejos            | No forma complejos |
| [MnOH <sub>2</sub> ]                 |                     |                               |                               |                        |                                    |                               |                    |
| [MnOH <sub>3</sub> ]                 |                     |                               |                               |                        |                                    |                               |                    |
| [Mn(OH) <sub>4</sub> ] <sup>2-</sup> |                     |                               |                               |                        |                                    |                               |                    |

También, como se indicó en el capítulo 7, se obtuvieron las especies de cada catión con respecto a cada anión. Si bien se le denominó "especiación teórica", no obstante se relacionaron los valores de las concentraciones reales totales de los cationes y aniones; la restricción para este estudio fue que se consideró exclusivamente la relación de especies inorgánicas, despreciándose: la interacción con la materia orgánica soluble, la interacción con coloides y entre las especies inorgánicas (que forman complejos catiónicos y aniónicos).



El  $\text{Ca}^{2+}$  puede endurecer al  $\text{H}_2\text{PO}_4^-$  por eliminación del  $\text{H}^+$ :



y, sumando ambas reacciones:

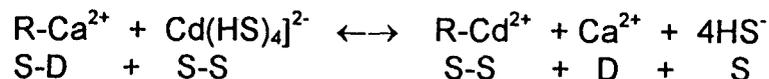


Por lo que el  $\text{Pb}^{2+}$  debe de encontrarse en el grupo de los compuestos intercambiables lábiles (los que intercambian rápido con la resina). Observando la distribución experimental, el  $\text{Pb}^{2+}$  aparece cuatro veces como un máximo en las formas I, que es probablemente la del ion hidratado; tal que:



tres veces como Lil (o sea, el  $[\text{Pb}(\text{H}_2\text{PO}_4)]^+$ ) y una vez como forma estable, cuyas especies probables son el  $[\text{Pb}(\text{OH})_2]$ , el  $[\text{Pb}(\text{OH})_3]$ , el  $[\text{PbCl}_2]$ , el  $[\text{PbCl}_3]$  o el  $[\text{PbCl}_4]$ . La inconsistencia es que las especies Lan anteriores aparecen en la especiación teórica en cantidades exiguas, y en la experimental como el valor máximo de los máximos encontrados.

El caso del  $\text{Cd}^{2+}$  es muy singular, de sus formas preferenciales en la especiación teórica se presentan los compuestos ligados a  $\text{HS}^-$ . En la especiación experimental aparece dos veces, con un máximo de concentración, en los grupos an, Lif, Lil y Lan, pero es en el Lil donde se tiene el máximo de los máximos de concentración, tal como se espera para la especie  $[\text{Cd}(\text{HS})_4]^{2-}$ :



La competencia del  $\text{Cd}^{2+}$  entre la resina y los ligantes  $\text{HS}^-$  que no se asocian al  $\text{Ca}^{2+}$  puede inhibir la velocidad de intercambio. La aparición de las especies **an** y **Lan** se debe a la estabilidad suave-suave de la especies  $[\text{Cd}(\text{HS})_2]$ ,  $[\text{Cd}(\text{HS})_3]^-$  y  $[\text{Cd}(\text{HS})_4]^{2-}$ .

El  $\text{Cu}^{2+}$  debiera comportarse como el  $\text{Pb}^{2+}$ , dando la especie  $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{PO}_4)]^+$  como la más abundante y de mayor intercambiabilidad, pero, debido al aumento de dureza del  $\text{Cu}^{2+}$  respecto a la del  $\text{H}_2\text{PO}_4^-$  y a la de la resina, el intercambio debe ocurrir en forma más lenta (como las especies del grupo **Lif**). Realmente así ocurre, en la especiación experimental el  $\text{Cu}^{2+}$  aparece como máximo en concentración, tres veces en el grupo **Lif** y dos veces en el grupo **Lil**, aunque en éste aparece como el máximo maximorum. Se presenta una vez en el grupo **l** (quizá como la especie  $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_4]^{2+}$ ) y dos veces en el grupo **Lan** (no fue posible elucidar la especie exacta). Las especies relacionadas con este último grupo (**Lan**) pudieran quizá ser: el  $[\text{Cu}(\text{OH})_2]$ , el  $[\text{CuSO}_4]$ , el  $[\text{CuCO}_3]$  y el  $[\text{CuHPO}_4]$ .

El  $\text{Fe}^{2+}$ , al igual que el  $\text{Cu}^{2+}$ , tiene como ligando preferente al  $\text{H}_2\text{PO}_4^-$ . Se espera que, por ser ligeramente más duro, sea de intercambio más lento. Esto aparece en la especiación experimental pues se presenta como máximo cuatro veces en el grupo **Lif** y dos veces en el **Lil**. Sin embargo, en forma consistente con el aumento de dureza, aparece con el máximo de las concentraciones en el grupo **Lan**, del cual la especie  $[\text{Fe}(\text{H}_2\text{O})_6]^{2+}$  debe ser la predominante junto con el  $[\text{FeHPO}_4]$ ,  $[\text{FeSO}_4]$  e inclusive, el  $[\text{Fe}(\text{OH})_2]$ .

Sorprende que el  $\text{Mn}^{2+}$  aparezca en la especiación experimental como **Lil** (especie de intercambio rápido), ya que su especie más estable es el  $[\text{MnHCO}_3]^+$  (D-D) y también en este grupo se encuentra en el máximo de los máximos de concentración. Pudiera ser que el compuesto citado sea tan estable que se adsorba en la resina sin pérdida del ligando, en cuyo caso la especie  $[\text{MnHCO}_3]^+$  es suave según la relación carga/radio:



El  $\text{Mn}^{2+}$  se encuentra una vez como máximo en el grupo **Lif** que es el esperado para el  $[\text{Mn}(\text{HCO}_3)]^+$ , pero en el grupo **f** o **an** como  $[\text{Mn}(\text{H}_2\text{O})_6]^{2+}$  no aparece ni una sola vez. En el grupo **Lan**, asignable también al  $[\text{MnCO}_3]$  por la reacción de deshidrogenación de la especie mayoritaria:



aparece dos veces. Otras especies predecibles para el grupo **Lan** serían:  $[\text{Mn(OH)}_2]$ ,  $[\text{MnSO}_4]$  y  $[\text{MnCl}_2]$ .

Este ha sido un trabajo complicado, costoso y de muchas horas de dedicación, sin embargo fue necesario, ya que es parte básica e importante de un macroproyecto de estudio cuyo objetivo final es el llegar en un futuro no lejano a la remediación (de ser posible restauración) de este cuerpo de agua tan importante por formar parte del curso de Lerma, vena de agua trascendental para la vida biológica, ecológica, económica, etc., no sólo de los pueblos ribereños, sino de otros estados por los cuales pasa el Lerma.

## Bibliografía

1. Presas de México, Comisión Nacional del Agua. Gerencia de Información y Participación Ciudadana, Grupo Impergraf S.A. de C.V. Marzo, Vol. V, 1993.
2. Gobierno del Estado de México. Secretaría de Ecología. Febrero 1993.
3. Secretaría de Recursos Hidráulicos (S.R.H.), 1963.
4. Solís M.C.; Lagunas de estabilización modificadas modelo UAEM. Informe Técnico. CONACyT 316/89 459/90. CIAITC, pp. 16-25, 1994.
5. Snoeyink, V.L., Jenkin, D.; Química del agua. Edit. Limusa, Noriega, pp. 13-36, 1990.
6. Chang, R.; Química. 4ª. Edición. Edit. Mc Graw Hill. 1992
7. Brown, T., LeMay, E., Burnsten B.; Química. La ciencia central. Edit. Prentice Hall, 1993.
8. Lagowski, J., Sorum, C.; Semimicro qualitative analysis. Edit. Prentice Hall, pp. 33-118, 1991
9. Horne, A.; The chemistry of our environment. A.. Wiley-Interscience Publication, 1978.
10. Manahan, S.; Environmental chemistry. 4ª. Edición. Lewis Publishers. 1991.
11. Gymer, R.G.; Chemistry and ecological approach. Harper & Row Publisher, 1973.
12. Kemmer F.N., Mc Callion, J.; Manual del agua. Nalco Chemical Company. Edit. Mc Graw Hill.
13. Sly G. Sediments and water interactions. Tomo 1. Edit. Springer-Verlag, 1984.
14. Liptrot, G.F.; Química inorgánica moderna. Edit. Continental S.A., 1980.
15. Ramalho, R.S.; Tratamiento de aguas residuales. Edit. Reverté S.A., 1991.
16. Maskew, G., Geyer, J., Okun D.; Ingeniería sanitaria y de aguas residuales. Vol. 1, Edit. Limusa, S.A. de C.V., Grupo Noriega Editores, 1992.
17. Odum E.; Ecología. Serie Biología Moderna. Compañía Editorial Continental, S.A. 1975.
18. Flores J.; Contaminación ambiental. CECODES Ambiental. Programa Control, 1993.
19. Kemmer. F.; Distribution of potentially hazardous trace metals, in metal ion in biological systems. Vol. 20, H. Siegel Ed., 1979.
20. Flores R.J.; Les Metaux toxiques dans les eaux pluviales in milieu urbain: caractéristique physico-chimiques. Tesis Doctoral. Université Paris XII, Val de Marne, Francia, 1992.
21. Maskew, G., Geyer, J., Okun D.; Ingeniería sanitaria y de aguas residuales. Vol. 3, Edit. Limusa, S.A. de C.V., Grupo Noriega Editores, 1992.

22. Buflé, D., Deladoey, P., Haerdi, W.; The use of ultrafiltration for the separation and fractionation of organic ligands freshwaters. *Anal. Chim. Acta.* pp 301-339, 1978
23. Métodos estandarizados para análisis del agua y agua residual. 17ª. Edición. Ediciones Díaz de Santos, S.A. 1992.
24. Culp, L.G., Mack, W.G., Culp, L.R.; Handbook of advanced wastewater treatment. Second Edition. Van Nostrand Reinhold Environmental Engineering Series. August 11, 1976.
25. Myrroussef N.; DBO Conceptos y metodología. Instituto de Ingeniería. 1984.
26. Allende, I., Barceló, I.; Química del agua. En proceso de edición.
27. Araneo, A.; Química analítica cualitativa. Edit. Mc Graw Hill, 1972.
28. Skoog, D.A., West, D.M., Holler, F.; Química analítica, 6ª. Edición. Edit. Mc Graw Hill, 1995.
29. Brescia, J.E., Arents, J., Meislich, H., Turk, A.; Fundamentos de química. Compañía Editorial Continental, S.A., 1980.
30. Christian, G.D.; Química analítica. Edit. Limusa, 1968.
31. Miyamoto H.K., Silver, M.D.; A new approach to the Langelier stability index. *Materials Engineering Chem.* April 28, pp 89-92, 1986.
32. Ryznar, J.W.; A new index for determining the amount of calcium carbonate scale formed by a water. *J. Am. Water Works Assn.*, Vol 34, No. 11, p. 472, 1944.
33. Maron S., Lando, J.; Fisicoquímica fundamental. Edit. Limusa, 1978.
34. Glasstone, S.; Tratado de química física. 4ª. Edición. Edit. Aguilar, Colección Ciencia y Técnica. 1961.
35. Largon, T.E., Buswell. A.M.; Calcium carbonate saturation index and alkalinity interpretations. *J. Am. Water Works Assn.*, Vol. 34, No. 11, p 1667, 1942.
36. Caldwell, D.H., Lawrence, W.B.; Water softening and conditioning problems. *Ind. Eng. Chem.*, Vol. 45, No. 3, p 535, March 1953.
37. Feitler, H.; The scale meter: new method for determining the critical pH of scaling, *Mater. Protection and Perf.*, Vol. 11, No. 1, p 31, January 1975.
38. Florence, T.M., Batley, G.E.; Chemical speciation in natural water. 1980.
39. Eckenfelder W.W., Ford, D.D.; Water pollution control. The Pemberton Press, Senkins Publishing Co. 1970.
40. Muestreo y análisis fisicoquímicos, bacteriológicos de aguas residuales. Laboratorios Nacionales de Fomento Industrial. 1991.
41. Environmental Protection Agency (EPA). Manual of methods for chemical analysis of water and wastes office of technology transfer. 1972.
42. Jenkins, D.; Química del agua. Manual de laboratorio. Edit. Limusa, 1983.

43. Barceló, I, Solís H., Flores J.; Especiación química de Pb y Cd durante 1992 y 1993 en el lago del parque Tezozomoc en la Ciudad de México. Reporte de Investigación No. 330. ISBN-620-432-6.
44. Manku, G.S.; Principios de química inorgánica. Edit. Mc Graw Hill, 1989.
45. Demitras, G.C. Russ, C., Salmon, J., Weber J., Weiss G.; Química inorgánica. Edit. Prentice Hall International. 1973.
46. Huheey, J.E.; Química inorgánica. Principios de estructura y reactividad. 2ª. Edición. Edit. Harla. 1981.
47. Morrison G.M.P.; Metal speciation in urban runoff. PhD Thesis. Middlesex polytechnic, Enfield, U.K. 1985.
48. Stumm, W., Brauner, P.A.; Chemical speciation in chemical oceanography. Second Edition. Edit. Riley J.P. and Skirrow, G. Vol. 1 Chapter 3, Academic Press, 1975.
49. Batley, G.E.; The current status of trace element speciation studies in natural waters, in trace element speciation in surface waters in ecological implications. Edit. Lepperd, G.G. Plenum Press, NATO Conf. Series. Vol. 6, 1983.
50. Revit, D.M., Ellis, J.B., Rain water leachates of heavy metals in road surface sediments. Water Research, Vol. 14, pp 1403-1407, 1980.
51. Florence T.M.; Trace element speciation and aquatic toxicology. Trends Anal. Chem., Vol. 2, 1983.
52. Florence T.M.; Trace metal species in fresh waters. Water Res., Vol. 11, 1977.
53. Buffle, J., Parthasarathy, N., Haerdi, W.; Importance of speciation methods in analytical control of water treatment process with application to fluoride removal from waste waters. Water Res., Vol. 19, No. 1, pp 7-23, 1985.
54. Barceló I. Flores J., Solís H., Thévenot D., González C., Cid A.; La importancia de la especiación química en el estudio de la contaminación en aguas. Reporte de Investigación No. 267, ISBN 968-840-976-6. 1991.
55. Wittman, G.T.; In Metal pollution in aquatic environment. V Forstner and G.T.W. Wittman, Springer-Verlag, 1983.
56. Martín, R.B.; Bioinorganic chemistry of metal ion toxicity in metal ions in biological systems. Vol. 20 (H. Siegel Ed.) Marcel Dekker, 1980.
57. Florence T.M.; The especiation of trace metals in waters. Trend. Anal. Chem., Vol. 2, pp. 162-166, 1983.
58. Florence T.M.; Development of physico-chemical speciation procedures to investigate the toxicity of copper, lead, cadmium and zinc towards aquatic biota. Anal. Chim. Acta. Vol. 141, pp 73-94, 1982b.

59. Patterson J.W.; Passino R.; Metals speciation separation and recovery. Lewis Publishers Inc, Vol. I, 1986.
60. Chakrabarti, C.L., Yanjia Lu, Cheng J.; Studies on metal speciation in the natural environment. *Anal. Chim. Acta*, Vol. 267, p 47-64, 1993.
61. Florence T.M., Batley, G.E.; Chemical speciation in natural waters. *Analyt. Chem. Aug.* Pp. 219-296. 1980.
62. Gadh R., Tandon, S.N., Mathur, R.P., Sing, O.V.; Speciation of metals in Yamamura Rivers sediments. *Sci. Total Environ.* Vol. 136, No. 3, pp. 229-242, 1993.
63. Florence, T.M., Batley, G.E.; Trace metal species in seawater. *Talanta*, Vol. 23, pp. 179-186, 1976.
64. Armstrong, F.A., Williams, P.M., Strickland, J.D.; Photo-oxidation of organic matter in seawater by ultraviolet radiation. analytical and other applications. *Nature*, Vol. 211, pp. 483-484, 1996.
65. Florence, T.M., Batley G.E.; Determination of the chemical forms of trace metals in the natural waters with special reference to copper, lead, cadmium and zinc. *Talanta*, Vol. 24, pp. 151-158, 1977.
66. Laxen, P.H.D., Harrison, R.M.; A scheme for the physico-chemical speciation of trace metals in freshwater samples. *Sci. Total Environm.* Vol. 19, pp. 59-82, 1981a.
67. Chau, Y.K., Garcher, R., Lum-Shue-Chank. Determination of the apparent complexing capacity of lake waters. *J. Fish. Res. Bd Can.* Vol. 312, pp. 1515-1519, 1974.
68. Revit, D.M., Ellis, J.B., Oldfield, F.; Variation in heavy metals of stormwater suspended solids in a separate sower system. 2<sup>nd</sup>. *Int. Conf. On Urban Storm Drainage.* Illinois, 1981.
69. Benes, P., Steines, E.; Migration forms of trace elements in natural freshwaters and the effect of water storage. *Water Research*, Vol. 9, pp. 741-749, 1975.
70. Buffle, J., Deladoey, P., Haerdi. W.; The use of ultrafiltration for the separation and fractionation of organic ligands in fresh waters. *Anal. Chim. Acta.* Vol. 101, pp. 339-357, 1978.
71. Buffle, J.; Speciation of Trace elements in natural waters. *Trends Anal. Chem.* Vol. 1, pp. 90-95, 1981.
72. Guy, R.D., Chakrabarti, D.L.; Analytical techniques for speciation of heavy metal ions in the aquatic environment. *Chem. Can.*, Vol. 54, pp. 26-29, 1976.
73. Hart, B.T., Davies, S.H.R.; Trace metal speciation in the freshwater and estuarines regions of the Yarra River, Victoria. *Est. Coast. And Sherf Sci.*, Vol. 12, pp. 353-374, 1981.

74. De Mora, S.J., Harrison, R.M.; A review paper. The use of physical separation techniques in trace metal speciation studies. *Water Res.*, Vol. 17, pp. 723-733, 1983.
75. Benes, P., Steinnes, E.; In situ dialysis for the determination of the state of trace elements in natural waters. *Water Res.*, Vol. 8, pp. 947-953, 1974.
76. Hoffman, M.R., Yost, E.C., Einsenreich, S.J., Maier, W.J.; Characterization of soluble and colloidal-phase metal complexes in river water by ultrafiltration. A mass-balance approach. *Environ. Sci. And Tech.*, Vol. 15, pp. 655-661, 1981.
77. Mottola, H.A., Haro, M.S., Freiser, H.; Use of metal ion catalysis in detection and determination of microamounts of complexing agents. *Analyt. Chem.*, Vol. 40, pp. 1263-1265, 1986.
78. Ferrer-Herranz, J.L., Perez-Bendito, D.; Kinetic determination on traces of copper (II) by its catalytic effect on the oxidation of 4,4'-dihydroxybenzophenona thiosemicarbazone by hydrogen peroxide. *Analyt. Chim. Acta*, Vol. 132, pp. 157-164, 1981.
79. Nakano, S., Kuramoto, K., Kawashima, T.; Determination ultratrace amounts of copper by the catalytic oxidation of variamine blue leuco base analog in the presence of hydrogen peroxides. *Nippon Kagaku Kaishi*, Vol. 1, pp. 91-97, 1981.
80. Benes, P., Steinnes, E.; On the use of radionuclides in the study of the behaviour and physico-chemical state of trace elements in the natural waters. *Intern. J. Environ. Anal. Chem.*, Vol. 4, pp. 263-274, 1976.
81. Bowen, H.J.M., Pge, E., Valente, I., Wade, R.J.; Radio-tracer methods for studying speciation in natural waters. *J. Radioanalyt. Chem.*, Vol. 48, pp. 9-16, 1979.
82. Riley, J.P., Taylor, D.; Chealting resins for the concentration of trace elements from seawater and their analytical use in conjunction with atomic absorption spectrophotometry. *Analyt. Chim. Acta*, Vol. 40, pp. 479-485, 1968.
83. Florence, T.M., Batley, G.E.; Removal of trace metals from seawater by chelating resin. *Talanta*, Vol. 22, pp 201-204, 1975.
84. Figura, P., McDuffie, B.; Use of Chelex resin for determination of labile trace metal fractions in aqueous ligand media and comparison on the method with anodic stripping voltammetry. *Analyt. Chem.*, Vol. 51, pp. 120-125, 1979.
85. Batley, G.E., Florence, T.M.; Determination of the chemical forms of dissolved cadmium, lead and copper in seawater. *Mar. Chem.*, Vol. 4, pp. 347-363, 1976b.

86. Batley, G.E., Florence, T.M.; A novel scheme for the classification of Heavy metal species in natural waters. *Anal. Lett.*, Vol. 2, pp. 379-388, 1976a.
87. Hart, B.T., Davies, S.H.R.; A batch method for the determination on ion-exchangeable trace metals in natural waters. *Aust. J. Freshwaters Res.*, Vol. 28, pp. 397-402, 1977.
88. Figura, P., McDuffie, B.; Determination of labilities of soluble trace metal species in aqueous environmental samples by anodic stripping voltammetry and chelex column and batch methods. *Analyt. Chem.*, Vol. 52, pp. 1433-1439, 1980.
89. Astruc, M., Lecomte, J., Mericam, P.; Evaluation of methods for speciation of heavy metals in water. *Environ. Tech. Lettr.*, Vol. 2 pp. 1-8, 1981.
90. Figura, P., McDuffie, B.; Characterization of the calcium from of the chelex-100 for trace metal studies. *Analyt. Chem.*, Vol. 51, pp. 120-125, 1979.
91. Blaedel, W.J., Dinwiddie, D.E.; Study of the behaviour of copper ion-selective electrodes at submicromolar concentration levels. *Analyt. Chem.*, Vol. 46, pp. 873-877, 1974.
92. Jasinski, R., Trachtenberg, I., Andrychuk, D.; Potentiometric measurement of copper in seawater with ion selective electrodes. *Analyt. Chem.*, Vol. 46, pp. 364-369, 1974.
93. Duinker, J.C., Kramer, C.J.; An Experimental study on the speciation of dissolved zinc, cadmium, lead and copper in river Rhine and North Sea water by differential pulse anodic stripping voltammetry. *Marine Chemistry*, Vol. 5, pp. 207-228, 1977.
94. Pinta, M.; Modern methods of trace element analysis. *Ann Arbor Science*, pp. 51-56, 1978.
95. Fernández, F.J.; Metal speciation using atomic absorption as a chromatography detector: A Review. *At. Abs. Newsletter*, Vol. 16, pp. 33-36, 1977.
96. Pik, A.J., Eckert, J.M., Williams, K.L.; Speciation of iron, copper and zinc in the Hawkesbury river. *Aust. J. Mar. Freshwater Res.*, Vol. 33, pp. 971-977, 1982.
97. Pearson R.G.; Hard and soft acids and bases. *J. Am. Chem. Soc.*, Vol. 85, p. 3533, 1963.
98. Pearson R.G.; Hard and soft acids and bases II. *J. Chem. Educ.*, Vol. 85, p. 581, 1963.
99. Pearson R.G.; Hard and soft acids and bases III. *J. Chem. Educ.*, Vol. 85, p. 643, 1963.
100. Pearson R.G.; Hard and soft acids and bases. *Inorg. Chem.*, Vol. 11, p. 3146, 1972.

101. Barceló, I., Solís, H., González, C.; Diferentes enfoques de la teoría ácido-base. Cuaderno Universitario No. 36. UAMA, 1991.
102. Arhland, S., Chatt, J., Davies, N.R.; The relative affinities of ligand atoms for acceptor molecules and ions. 1958.
103. Schwarzenbach, G.; The General, Selective and specific. formation of complexes by metal cations. *Advan. Inorg. Chem. RadioChem.*, Vol. 3, p 257, 1961.
104. Pearson, R.G.; Acids and bases. *Science*, Vol. 151, pp. 172-177, 1966.
105. Jensen, W.B.; The Lewis acid-base concepts. An overview. Wiley, New York, 364 p., 1980.
106. Schwarz, K.; Clinical chemistry and chemical toxicology of metals. S.S. Brown (ed.), Elsevier, New York, 1978.
107. Williams, R.P.J., Hale, J.D.; The classification of acceptors and donors in inorganic reactions. *Struct. Bonding (Berlin)*, Vol. 1, p 249, 1966.
108. Stumm, W., Morgan, J.J.; *Aquatic chemistry*. 2<sup>nd</sup> Ed., Wiley, New York, 1981.
109. Ringbom, A.; Formación de complejos en química analítica. Edit. Alhambra. Colección Ciencia, Técnica, Ingeniería. Sección I, Química. 1979.
110. Laitinen, H., Harris, W.; *Análisis químico. Texto avanzado y de referencia*. Edit. Reverté, S.A., 1982.
111. Brady, J., Humiston, G.; *Química básica. Principios y estructura*. Edit. Limusa, 1988.
112. Sylva, R.N.; The environmental chemistry of copper(II) in aquatic systems. *Water Research*, Vol. 10, pp. 789-792, 1976.
113. Vuceta, J., Morgan, J.; Chemical modeling of trace metals in fresh waters: role of complexation and adsorption. *Environ. Sci. and Tech.*, Vol. 12, No. 12, pp. 1302-1309, November 1978.
114. Morel F., Hering, G; Principles and applications of aquatic chemistry. Edit. Wiley Interscience Publication. 1983.
115. Morel, F., Morgan, J.; A numerical method for computing equilibria in aqueous chemical systems. *Environ. Sci. & Tech.*, Vol. 6, No. 1, pp. 58-67, January 1972.
116. Patterson, C.C.; Sette, D.M.; Accuracy in trace analysis: sampling, sample, itandling, analysis. *N.B.S. Spec. Publ.*, Vol. 1, No. 422, P.D. Le Fleur, p. 321, 1976.
117. Abu-Samra, A.; Morris J. S.; KOIRT Yohann, S.R.R.; *Analytica chemistry*, Vol. 47, pp. 1475-1477, 1975.
118. Barceló I.D.; La importancia de la especiación química en el estudio de la contaminación en aguas. Reporte de Investigación No. 267. ISBN 968-840-976-6. UAMA, 1991.

119. NOM-AA-3. Aguas residuales - Muestreo. Secretaria de Comercio y Fomento Industrial. Norma Oficial Mexicana. 1981.
120. Batley, G.E.; Gardiner, D.; Sampling and cleaning of plastic containers for storage of trace element samples. *Anal. Chem.*, Vol. 49, pp. 2264-2267, 1977
121. NOM-AA-14. Cuerpos receptores - muestreo. NOM-BB-14. Clasificación y tamaños nominales para utensilios de vidrio usados en el laboratorio. 1981.
122. Environmental Protection Agency (EPA). Manual of water and wastes office of technology transfer. Ohio. USA. 1972.
123. Manual de absorción atómica. Varian S.A.
124. Watty M.; Química analítica. Edit. Alhambra. 1982.
125. Barceló I.D.; Solís, H.C., Flores, J.; Importancia del uso de la técnica por microondas en el tratamiento de muestras ambientales y de desecho. Reporte de Laboratorio No. 334. UAM. 1993.
126. Keith, L.; E.P.As sampling and analysis methods. Lewis Publishers, Inc, 1992
127. Collins, M.J.; Harget, WPUS Patent 4565669. 1986.
128. General guidelines for microwave sample. preparation CEM Corporation P.O. Smith Farm Road, Mathews, N.C. 28106. 1988.
129. Bock, R.A. Handbook of descomposition methods in analytical chemistry. Wiley and Sons. Cap. 4, 1979.
130. Yan Liu, Ingle J.D.; Automated two-column ion exchange system for determination of the speciation of trace metals in natural waters. *Anal. Chem.*, Vol. 61, pp. 525-529, 1989.
131. Tessier, A.; Campbell, P.G.; Bisson, M.; Sequential extraction procedure for the speciation of particulate trace metals. *Anal. Chem.*, Vol.. 51, No. 7, pp. 844-851, june 1979.
132. Tanizaki, Y.; Shimokawa T.; Yamazaki, M; Physico-chemical speciation of trace elements in urban streams by size fractionation. *Wat. Res.*, Vol. 26, No. 1, pp. 55-63, 1992.
133. Barceló I.; Avila, P.; Solis, H.; Rodríguez, J.; Movilidad de metales pesados en lodos de la presa J. A. Alzate en el Estado de México. Memorias del X Congreso Nacional de Ingeniería Sanitaria y Ambiental. Toluca, febrero de 1996.
134. Forstner U.; Pachineelam, S.R.; Chemical association of heavy metals in polluted sediments from Lower Rhine river. ACS Symposium Serie No. 189, Amer. Chem. Soc., 1980.
135. Avila, P.P.; Evaluación de los metales pesados Cr, Fe, Ni, Cu, Cd, Pb y Hg en agua, sedimentos y lirio acuático (*Eichhornia crassipes*) de la Presa José Antonio Alzate, Edo. de México. Tesis de Maestría en Ecología, Facultad de Química, UAEM, 1995.