

CI61Q

**CI61Q/CI71M  
PRINCIPIOS DE REMEDIACION Y  
RESTAURACION**

**PROCESOS DE INTERACCION  
SUELO - AGUA - AIRE - CONTAMINANTE**

SEMESTRE PRIMAVERA 2007



**UNIVERSIDAD DE CHILE**  
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS Y MATEMÁTICAS  
DEPARTAMENTO DE INGENIERIA CIVIL



CI61Q

**INTRODUCCION**

**ADSORCION Y DESORCION**

**PROCESOS ABIOTICOS**

**VOLATILIZACION**

**DISOLUCION**

**BIODEGRADACION**

**PROCESOS MAS COMPLEJOS**

**EVALUACION DE PROCESOS**



## CI61Q

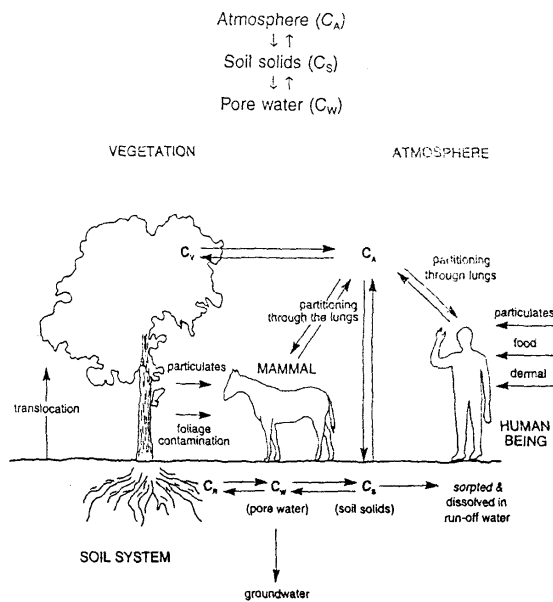
La distribución y concentración de contaminantes en el agua subterránea está fuertemente influenciada por procesos de interacción entre el contaminante y las componentes físicas, químicas y biológicas del suelo.

Algunos procesos de interés para nuestro análisis son:

ADSORCION Y DESORCION  
PROCESOS ABIOTICOS  
VOLATILIZACION  
DISOLUCION  
BIODEGRADACION



## CI61Q



CI61Q

## INTRODUCCION

### ADSORCION Y DESORCION

#### ASPECTOS GENERALES

#### ISOTERMAS

#### ADSORCION DE COMPUESTOS ORGANICOS

## PROCESOS ABIOTICOS

### VOLATILIZACION

### DISOLUCION

### BIODEGRADACION

### PROCESOS MAS COMPLEJOS

### EVALUACION DE PROCESOS



CI61Q

El concepto de **SORCION** se define como la asociación de una sustancia disuelta con un material sólido. El término **SORCION** incluye dos fenómenos complementarios: adsorción (superficie) y absorción (partícula). Generalmente es muy difícil diferenciar ambos efectos.

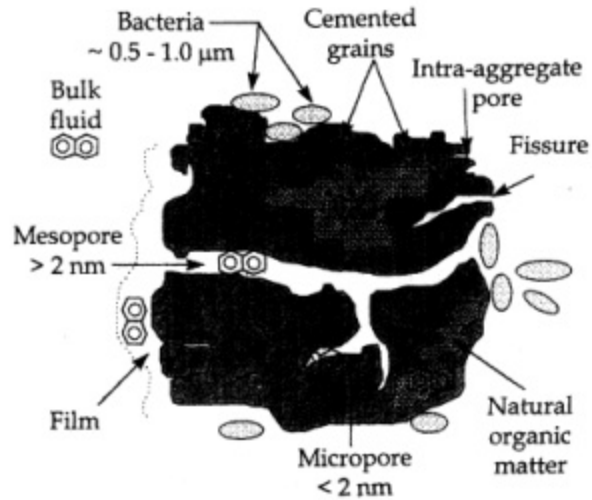
El proceso contrario a la **SORCION** es la **DESORCION**, un término que describe la disociación de una molécula adsorbida y su retorno a la fase acuosa o gaseosa.

En el proceso de **SORCION** elementos hidrofóbicos (que no gustan del agua) tienden a asociarse con materia orgánica (NAM) presente en el medio poroso, la que también es de naturaleza hidrofóbica.

Contaminantes comunes del agua subterránea son hidrofóbicos: TCE, PCE, Hidrocarburos, por ejemplo.



CI61Q



CI61Q

## INTRODUCCION

### ADSORCION Y DESORCION

ASPECTOS GENERALES

ISOTERMAS

ADSORCION DE COMPUESTOS ORGANICOS

PROCESOS ABIOTICOS

VOLATILIZACION

DISOLUCION

BIODEGRADACION

PROCESOS MAS COMPLEJOS

EVALUACION DE PROCESOS

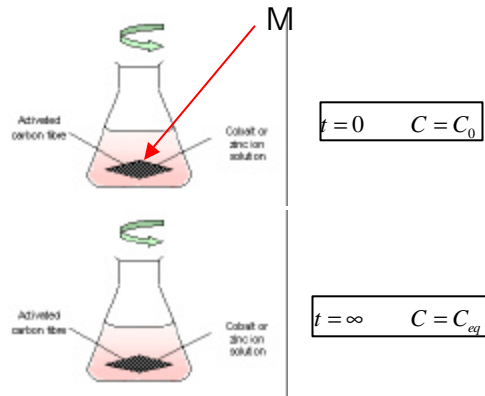
CI61Q

### ISOTERMA DE ADSORCION

Relación funcional entre la cantidad de soluto adsorbida o absorbida en el suelo y aquella fracción presente en la fase líquida.

$$C^* = f(C)$$

$$C^* = \frac{C_0 - C_{eq}}{M} \cdot V$$



CI61Q

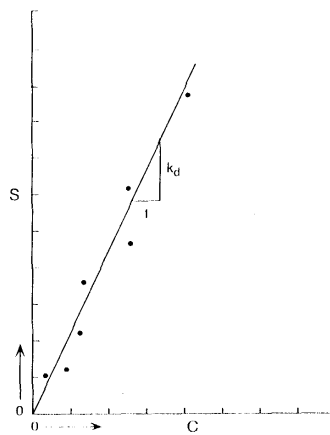
### ISOTERMA DE ADSORCION LINEAL

Si existe una relación directa entre la cantidad de soluto adsorbido en el sólido,  $C^*$ , y la concentración de soluto en la fase líquida,  $C$ , la isoterma de adsorción queda definida por una línea recta.

$$C^* = K_d \cdot C$$

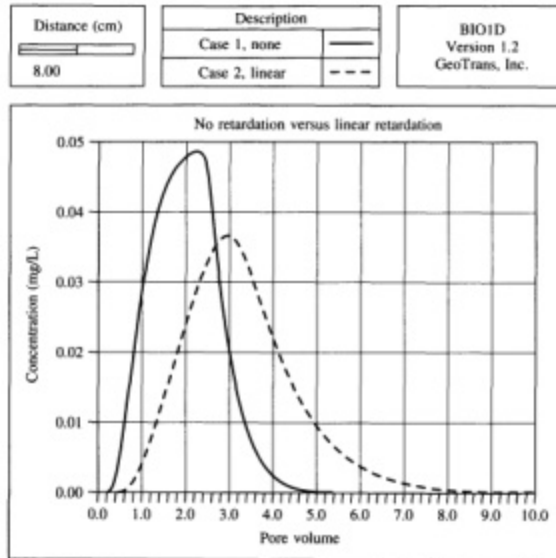
$$R = 1 + K_d \cdot r_s \cdot \frac{1-n}{n}$$

$$v_c = \frac{v}{R}$$



CI61Q

**ISOTERMA DE ADSORCION LINEAL**



CI61Q

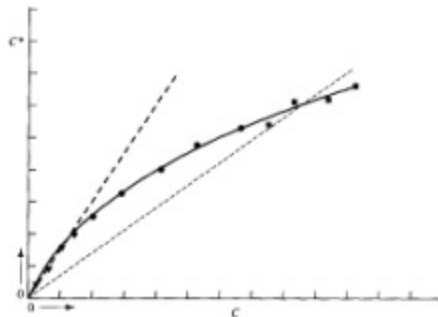
**ISOTERMA DE ADSORCION FREUNDLICH**

Si existe una relación no lineal entre la cantidad de soluto adsorbido en el sólido,  $C^*$ , y la concentración de soluto en la fase líquida,  $C$ , la isoterma de adsorción queda definida por la siguiente expresión.

$$C^* = K \cdot C^N$$

$$R = 1 + \frac{K \cdot r_s \cdot N \cdot (1-n)}{n} \cdot C^{N-1}$$

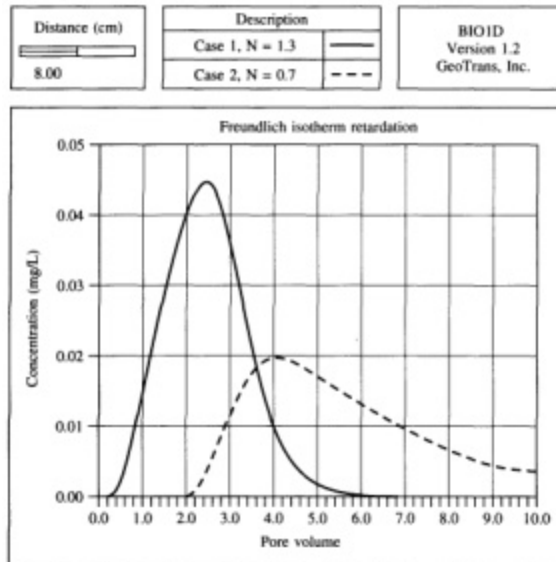
$$v_c = \frac{v}{R}$$



SO<sub>4</sub>, Cd, Cu, Zn, Mo, Pesticidas

CI61Q

### ISOTERMA DE ADSORCION FREUNDLICH



CI61Q

### ISOTERMA DE ADSORCION LANGMUIR

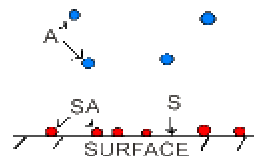
Si existe un número finito de sitios de adsorción sobre la superficie de un sedimento se tiene un límite máximo o capacidad de adsorción, más allá del cual la superficie no será capaz de tomar más soluto desde la fase líquida.

$$\frac{C}{C^*} = \frac{1}{a \cdot b} + \frac{C}{b}$$

$\alpha$ : constante de adsorción, relacionada con la energía de adsorción (L/mg).

$\beta$ : máxima cantidad de soluto que puede ser adsorbida por una partícula sólida (mg/kg)

$$C^* = \frac{a \cdot b \cdot C}{1 + a \cdot C}$$



CI61Q

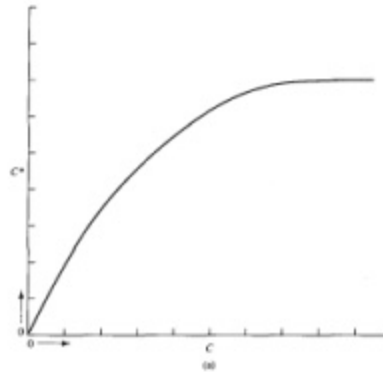
### ISOTERMA DE ADSORCION LANGMUIR

Si existe un número finito de sitios de adsorción sobre la superficie de un sedimento se tiene un límite máximo o capacidad de adsorción, más allá del cual la superficie no será capaz de tomar más soluto desde la fase líquida.

$$C^* = \frac{a \cdot b \cdot C}{1 + a \cdot C}$$

$$R = 1 + \frac{r_s \cdot (1-n)}{n} \cdot \frac{a \cdot b}{(1 + a \cdot C)^2}$$

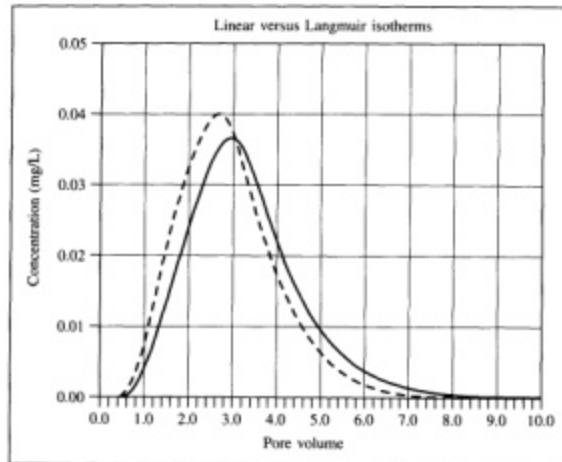
$$v_c = \frac{v}{R}$$



CI61Q

### ISOTERMA DE ADSORCION LANGMUIR

Distance (cm)	Description	BIOID Version 1.2 GeoTrans, Inc.
8.00	Case 1, linear	—
	Case 2, langmuir	- - -

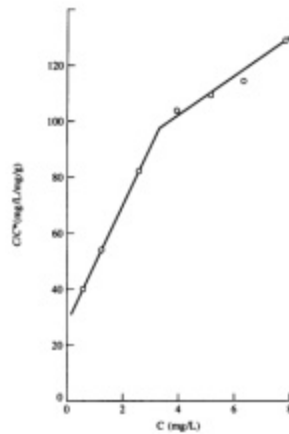




CI61Q

### ISOTERMA DE ADSORCION LANGMUIR (DOS SITIOS)

En este caso se ha identificado la presencia de dos tipos de sitios de adsorción, los que poseen distintas energía de enlace.



$$\frac{C^*}{C} = \frac{a \cdot b_1}{1 + a \cdot C} + \frac{a_2 \cdot b_2}{1 + a_2 \cdot C}$$



CI61Q

### INTRODUCCION

### ADSORCION Y DESORCION

ASPECTOS GENERALES

ISOTERMAS

ADSORCION DE COMPUESTOS ORGANICOS

PROCESOS ABIOTICOS

VOLATILIZACION

DISOLUCION

BIODEGRADACION

PROCESOS MAS COMPLEJOS

EVALUACION DE PROCESOS



CI61Q

### ADSORCION DE COMPUESTOS ORGANICOS

Muchos compuestos orgánicos disueltos en agua subterránea pueden ser absorbidos sobre la superficie de los sedimentos, lo que se denomina “efecto hidrofóbico”.

La solubilidad de los compuestos orgánicos dependerá de la polaridad de la molécula orgánica.

Asociar capacidad de adsorción de compuestos orgánicos con el  $K_d$  de la isoterma lineal.

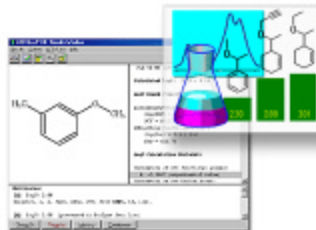


CI61Q

### PARTICION OCTANOL - AGUA ( $k_{ow}$ )

Para evaluar cuan hidrofóbico es un compuesto contaminante se utiliza la prueba de PARTICION OCTANOL - AGUA. En esta prueba se agrega una cantidad conocida del compuesto contaminante a un tubo que contiene OCTANOL y AGUA. El OCTANOL es un compuesto que “suplanta” a la materia orgánica.

$$k_{ow} = \frac{C_{OCTANOL}}{C_{AGUA}}$$



Si  $k_{ow}$  es menor que 1 el compuesto prefiere la fase acuosa. Si el  $k_{ow}$  es mayor que 1 el compuesto se asociará en forma importante con la materia orgánica.

CI61Q

**PARTICION OCTANOL - AGUA ( $k_{ow}$ )**

Compuestos comunes en agua subterránea son altamente hidrofóbicos con valores de  $k_{ow}$  muy superiores a 1.

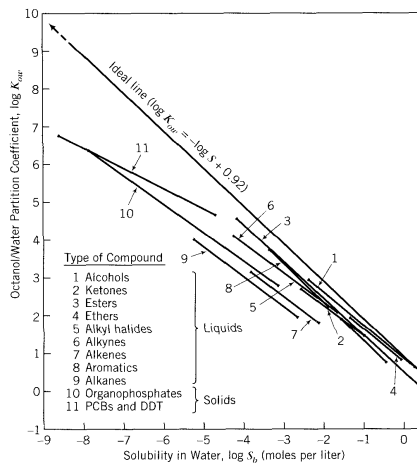
Compuesto	Kow	log(Kow)
Dicloroetano	62	1.79
Benceno	135	2.13
Tricloroetileno	195	2.29
Percloroetileno	760	2.88
Naftaleno	2350	3.37
Pireno	209000	5.32



CI61Q

**PARTICION OCTANOL - AGUA ( $k_{ow}$ )**

Estudios han demostrado que existe una correlación entre el comportamiento del  $k_{ow}$  y la solubilidad del compuesto en agua.



## CI61Q

### PARTICION EN CARBONO ORGANICO DEL SUELO ( $k_{oc}$ )

El valor de  $K_d$  para el caso de compuestos orgánicos puede ser obtenido a partir experiencias de laboratorio. En este caso se tiene que  $K_d$  se relaciona directamente con la cantidad de materia orgánica natural en el suelo y cuán hidrofóbico es el compuesto mismo.

El coeficiente de partición o distribución,  $K_d$ , se puede determinar como:

$$K_d = f_{oc} \cdot k_{oc}$$

donde  $f_{oc}$ , fracción de carbono orgánico, es una medida de la cantidad de materia orgánica en un suelo y  $k_{oc}$  es el coeficiente de partición del contaminante entre el agua y la materia orgánica natural.



## CI61Q

### PARTICION EN CARBONO ORGANICO DEL SUELO ( $k_{oc}$ )

Estudios han demostrado que existe una correlación entre el comportamiento del  $k_{oc}$  y del  $k_{ow}$ .

Además se utiliza un coeficiente de adsorción basado en el contenido de materia orgánica en el suelo ( $k_{om}$ ).

$$k_{oc} = 1.724 \cdot k_{om}$$

$$k_{oc} = f(k_{ow})$$

$$k_{om} = f(k_{ow})$$

$$K_d = f_{oc} \cdot k_{oc}$$



CI61Q

PARTICION EN CARBONO ORGANICO DEL SUELO ( $k_{oc}$ )

Equation Number	Equation	Chemicals Used	Reference
(T1)	$\log K_{oc} = 0.52 \log K_{ow} + 0.62$	72 substituted benzene pesticides	Briggs, 1981
(T2)	$\log K_{oc} = 1.00 \log K_{ow} - 0.21$	10 polyaromatic hydrocarbons	Karickhoff, Brown, and Scott 1979
(T3)	$K_{oc} = 0.63 K_{ow}$	Miscellaneous organics	Karickhoff, Brown, and Scott 1979
(T4)	$\log K_{oc} = 0.544 \log K_{ow} + 1.377$	45 organics, mostly pesticides	Kenaga and Goring 1980
(T5)	$\log K_{oc} = 1.029 \log K_{ow} - 0.18$ $r^2 = 0.91; n = 13$	13 pesticides	Rao and Davidson 1980
(T6)	$\log K_{oc} = 0.94 \log K_{ow} + 0.22$	s-triazines and dihydroanilines	Rao and Davidson 1980
(T7)	$\log K_{oc} = 0.989 \log K_{ow} - 0.346$ $r^2 = 0.991; n = 5$	5 polyaromatic hydrocarbons	Karickhoff 1981
(T8)	$\log K_{oc} = 0.937 \log K_{ow} - 0.006$	Aromatics, polyaromatics, triazines	Lyman 1982
(T9)	$\ln K_{oc} = \ln K_{ow} - 0.7301$	DDT, tetrachlorobiphenyl, lindane, 2,4-D, and dichloropropane	McCall, Swann, and Laskowski 1983
(T10)	$\log K_{oc} = 0.904 \log K_{ow} - 0.779$ $r^2 = 0.989; n = 12$	Benzene, chlorinated benzenes, PCBs	Chiou, Porter, and Schmedding 1983
(T11)	$\log K_{oc} = 0.72 \log K_{ow} + 0.49$ $r^2 = 0.95; n = 13$	Methylated and chlorinated benzenes	Schwarzenbach and Westall 1981
(T12)	$\log K_{oc} = 1.00 \log K_{ow} - 0.317$ $r^2 = 0.98; n = 22$	22 polynuclear aromatics	Hossett et al. 1980



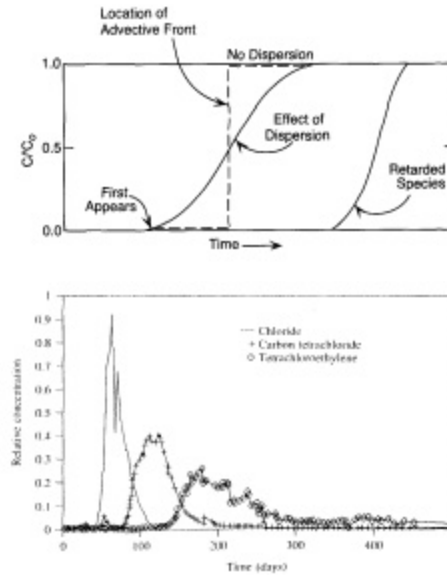
CI61Q

PARTICION EN CARBONO ORGANICO DEL SUELO ( $k_{oc}$ )

Log $K_{ow}$	Dichloromethane	Benzene	Trichloromethane	Ethyl Benzene	Tetrachloromethane	Naphthalene	2,3-Dichlorobiphenyl	Pyrene
Equation Number	1.79	2.13	3.29	3.14	3.40	3.37	4.80	5.32
	Estimated $K_{oc}$							
(T1)	1.79	1.96	2.05	2.49	2.62	2.61	3.35	3.62
(T2)	1.88	1.92	2.10	2.93	3.19	3.16	4.59	5.11
(T3)	1.13	1.34	1.44	1.98	2.14	2.16	3.07	3.35
(T4)	2.35	2.54	2.62	3.09	3.23	3.21	3.99	4.37
(T5)	1.66	2.01	2.18	3.05	3.32	3.29	4.76	5.29
(T6)	1.90	2.22	2.37	3.17	3.42	3.39	4.73	5.22
(T7)	1.42	1.76	1.82	2.76	3.02	2.99	4.40	4.92
(T8)	1.67	1.99	2.14	2.94	3.18	3.15	4.49	4.98
(T9)	1.06	1.40	1.56	2.41	2.67	2.64	4.07	4.59
(T10)	1.08	1.39	1.53	2.06	2.30	2.51	3.80	4.37
(T11)	1.78	2.02	2.14	2.75	2.94	2.92	3.95	4.30
(T12)	1.47	1.81	1.97	2.82	3.08	3.05	4.48	5.00
Range	1.06-2.35	1.34-2.54	1.44-2.62	1.98-3.17	2.14-3.42	2.16-3.39	3.07-4.76	3.35-5.29
Mean	1.57	1.86	2.00	2.70	2.93	2.92	4.14	4.58
St. dev.	0.38	0.35	0.33	0.39	0.41	0.37	0.54	0.63
Coef. var.	0.24	0.19	0.17	0.14	0.15	0.13	0.13	0.14



## CI61Q



## CI61Q

### MOVILIDAD DE UN COMPUESTO ORGANICO (MI)

A menudo es importante estimar la **movilidad de un compuesto orgánico** en el suelo. Esto puede ser utilizado para estimar la posible pérdida de un compuesto por volatilización y lavado del suelo. Una manera simple de medir esta tendencia es a través de un **Índice de Movilidad (MI)**:

$$MI = \log \left( \frac{S \cdot V}{k_{oc}} \right)$$

donde  $S$  es la solubilidad del compuesto en agua (mg/L),  $V$  es la presión de vapor a temperatura ambiente (mm) y  $k_{oc}$  es el coeficiente de partición en materia orgánica.

CI61Q

### MOVILIDAD DE UN COMPUESTO ORGANICO ( $M$ )

Mobility index	Description
>5.00	Extremely mobile
5.00 to 0.00	Very mobile
0.00 to -5.00	Slightly mobile
-5.00 to -10.00	Immobile
<-10.00	Very immobile



CI61Q

### FRACCION DE CONTAMINANTE ( $f_w$ )

Más allá de utilizar  $K_d$  para evaluar la concentración de un compuesto en el suelo o en el agua, este valor sirve además para evaluar la **fracción de contaminante** que se encuentra en cada fase.

Por ejemplo, la fracción de contaminante en la fase líquida se expresa matemáticamente como:

$$f_w = \frac{C_{AGUA} \cdot V_{AGUA}}{C_{AGUA} \cdot V_{AGUA} + C_{SUELO} \cdot V_{SUELO}}$$

Esta última expresión puede ser descrita en forma más simple como:

$$f_w = \frac{1}{1 + \left(\frac{1}{n} - 1\right) \cdot K_d}$$



CI61Q

### LAVADO DE SUELO ( $R$ )

En muchas situaciones un compuesto químico puede ser removido por **lavado de suelo** (soil leaching). En este proceso, el agua en los poros es removida por el movimiento del agua y a su vez el compuesto es removido del suelo.

Una medida simple de la capacidad de lavado de un compuesto contaminante desde un suelo,  $R$ , se puede escribir como:

$$R = \frac{1}{K_d \cdot (1 - n^{2/3}) \cdot r_s}$$

donde  $n$  es la porosidad del suelo y  $r_s$  es la densidad de las partículas sólidas del suelo.



CI61Q

INTRODUCCION  
ADSORCION Y DESORCION  
**PROCESOS ABIOTICOS**  
VOLATILIZACION  
DISOLUCION  
BIODEGRADACION  
PROCESOS MAS COMPLEJOS  
EVALUACION DE PROCESOS





## CI61Q

Una serie de reacciones químicas han sido seleccionadas debido a su impacto sobre compuestos orgánicos en aguas subterráneas.

Entre otros mecanismos que afectan a compuestos orgánicos en el agua subterránea se encuentran:

HIDRÓLISIS

REACCIONES OXIDO REDUCCION

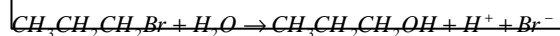
ELIMINACION



## CI61Q

### HIDRÓLISIS

Esta reacción corresponde a la interacción química entre una molécula contaminante y el agua. Un ejemplo de este tipo de reacción es la siguiente, donde 1 mol de bromopropano reacciona con agua para formar 1 mol de propanol y 1 mol de ión bromuro:



La tasa a la cual ocurre esta reacción está influenciada por el *pH* y la temperatura. Un modelo típico para hidrólisis es el siguiente:

$$\frac{dC}{dt} = -k_{\text{HIDROLISIS}} \cdot C$$





CI61Q

### ELIMINACION

Estas reacciones son características de un grupo de contaminantes en agua subterránea, etanos halogenados y propanos. En esta reacción se produce la liberación de un grupo halogenado y un protón.

Un ejemplo típico es la de cloruro y un protón en la transformación de 1,1,1-tricloroetano en 1,1 dicloroetano:



CI61Q

INTRODUCCION

ADSORCION Y DESORCION

PROCESOS ABIOTICOS

**VOLATILIZACION**

DISOLUCION

BIODEGRADACION

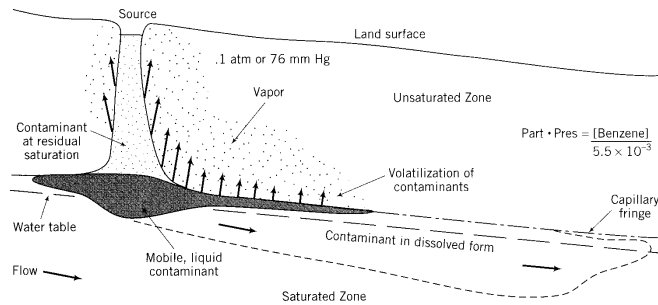
PROCESOS MAS COMPLEJOS

EVALUACION DE PROCESOS



## CI61Q

La transferencia o traspaso de un contaminante desde la fase disuelta o acuosa, la fase no acuosa (NAPL) o aquella adsorbida, directamente a la fase gaseosa se conoce como **volatilización**.



## CI61Q

En una forma muy simple es posible ilustrar el proceso de **volatilización** en una forma análoga al coeficiente de partición octanol-agua. Si un contaminante es introducido a un recipiente cerrado, conteniendo agua y aire, al cabo de un tiempo en el cual se alcance equilibrio, el compuesto se distribuirá entre el aire y el agua (en forma más general entre el gas y el líquido).

La distribución de equilibrio para un compuesto químico entre estas dos fases se describe mediante la **Ley de Henry**:

$$H_g = \frac{P_g}{[C_{aq}]}$$

donde  $H_g$  es la constante de Henry,  $P_g$  es la presión parcial del compuesto y  $[C_{aq}]$  es la concentración del compuesto en la fase líquida.

Table J2.3 Vapor Pressure Data for a Selected Group of Organic Contaminants

Compound	Formula	V.P. <sup>a</sup>	Henry's Law <sup>b</sup> Constant
<b>Halogenated hydrocarbons</b>			
Dichloromethane	CH <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub>	349	$3 \times 10^{-3}$
Trichloromethane	CHCl <sub>3</sub>	160	$4.8 \times 10^{-3}$
Tetrachloromethane	CCl <sub>4</sub>	90	$2.3 \times 10^{-3}$
Bromoform	CHBr <sub>3</sub>	5.6 (25°C)	$5.8 \times 10^{-3}$ c
1,1-Dichloroethane	CH <sub>3</sub> CHCl <sub>2</sub>	189	$4.3 \times 10^{-3}$ c
1,2-Dichloroethane	CH <sub>2</sub> ClCH <sub>2</sub> Cl	61	$9.1 \times 10^{-3}$ c
1,1-Dichloroethene	H <sub>2</sub> C=CCl <sub>2</sub>	500	—
Trans-1,2-dichloroethene	CHCl=CHCl	200 (14°C)	$4.2 \times 10^{-2}$ c
1,1,1-Trichloroethane	CCl <sub>3</sub> CH <sub>3</sub>	100	$1.8 \times 10^{-2}$
Trichloroethene	C <sub>2</sub> Cl <sub>3</sub> =CHCl	60	$1 \times 10^{-2}$
1,1,2-Trichloroethane	CH <sub>2</sub> ClCHCl <sub>2</sub>	19	$7.4 \times 10^{-3}$ c
Tetrachloroethane	C <sub>2</sub> Cl <sub>4</sub> =CCl <sub>2</sub>	14	$8.3 \times 10^{-3}$
<b>Aromatic hydrocarbons</b>			
Benzene	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>	76	$5.5 \times 10^{-3}$
Phenol	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> OH	0.2	$3.0 \times 10^{-7}$ c
Chlorobenzene	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> Cl	8.8	$2.6 \times 10^{-3}$ c
Ethylbenzene	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	7	$8.7 \times 10^{-3}$
Toluene	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> CH <sub>3</sub>	22	$5.7 \times 10^{-3}$
o-Xylene	C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> (CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	5	$5.3 \times 10^{-3}$
<b>Other organic solvents</b>			
Acetone	CH <sub>3</sub> -CO-CH <sub>3</sub>	89 (5°C)	—
Diethyl ether	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OCC <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	442	$5.1 \times 10^{-3}$ c
Tetrahydrofuran	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> O	—	—
1,4-Dioxane	OC <sub>2</sub> H <sub>4</sub> -CH <sub>2</sub> O	30	—
<b>Biocides</b>			
Pentachlorophenol	C <sub>6</sub> Cl <sub>5</sub> OH	$1.1 \times 10^{-3}$	$3.4 \times 10^{-8}$
DDT	(C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> CHCl <sub>2</sub>	$1 \times 10^{-7}$	$3.8 \times 10^{-8}$
Lindane	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> Cl <sub>6</sub>	$9.4 \times 10^{-9}$	$4.8 \times 10^{-7}$

<sup>a</sup>Vapor pressure in mm Hg at 20°C. 1 atm = 760 mm Hg.

<sup>b</sup>Units/mole; c indicates values calculated from vapor pressure and solubility data.

Modified from Jackson and others, 1985, Contaminant Hydrogeology of Toxic Organic Chemicals at a Deposition Site, Gloucester, Ontario. 1. Chemical Concepts and Site Assessment, IRD Scientific Series 141, Environment Canada, 114 p. Reproduced with the permission of Environment Canada.



- INTRODUCCION
- ADSORCION Y DESORCION
- PROCESOS ABIOTICOS
- VOLATILIZACION
- DISOLUCION**
- BIODEGRADACION
- PROCESOS MAS COMPLEJOS
- EVALUACION DE PROCESOS



## CI61Q

Producto puro en contacto con el agua se disolverá hasta que sea limitado por la solubilidad del compuesto. La tasa de disolución se modela de acuerdo a dos situaciones:

- la tasa depende de la diferencia entre la solubilidad del compuesto y la concentración del mismo.
- La tasa es proporcional al área interfacial.

De acuerdo a estos dos criterios se obtiene el siguiente modelo:

$$r = K_L \cdot a \cdot (C_s - C)$$

donde  $C_s$  es la solubilidad del compuesto en agua (mg/L),  $C$  es la concentración medida (mg/L),  $K_L$  es el coeficiente de transferencia, y  $a$  es el área interfacial.



## CI61Q

**INTRODUCCION**  
**ADSORCION Y DESORCION**  
**PROCESOS ABIOTICOS**  
**VOLATILIZACION**  
**DISOLUCION**  
**BIODEGRADACION**  
**PROCESOS MAS COMPLEJOS**  
**EVALUACION DE PROCESOS**



## CI61Q

La **biodegradación** de un contaminante se refiere a la conversión de éste en compuestos finales mineralizados (por ejemplo  $CO_2$ ,  $H_2O$  y sales) a través del metabolismo de organismos vivos.

En sistemas de agua subterránea este proceso se lleva a cabo por bacterias indígenas, propias del acuífero.

En algunos casos, los procesos metabólicos cambian la forma química del compuesto pero no se termina en mineralización del mismo. En estos casos se habla de **biotransformación**.

Este proceso es muy importante en aguas subterráneas debido al potencial de tratamiento y remediación de **compuestos peligrosos**, los que en algunos casos se transforman mediante este proceso en **compuestos no peligrosos**.



## CI61Q

La tasa a la cual ocurren procesos de biodegradación son estimadas mediante modelos tipo **Monod**.

Este modelo está basado en el concepto que la tasa de degradación debe exceder un cierto límite.

$$r = k_1 \cdot C \cdot \frac{X}{K_x + X}$$

En algunos casos se incluye la idea de factores limitantes a la reacción inicial, lo que se modela mediante un esquema multiplicativo en el cual se pueden agregar limitaciones a la tasa de crecimiento original.

$$r = k_1 \cdot C \cdot \frac{X}{K_x + X} \cdot \frac{O}{K_o + O}$$



CI61Q

### BIODEGRADACIÓN AERÓBICA DE HIDROCARBUROS

$$\frac{dH}{dt} = -M_i \cdot b_u \cdot \left( \frac{H}{K_H + H} \right) \cdot \left( \frac{O}{K_O + O} \right)$$

$$\frac{dO}{dt} = -M_i \cdot b_u \cdot G \cdot \left( \frac{H}{K_H + H} \right) \cdot \left( \frac{O}{K_O + O} \right)$$

$$\frac{dM_i}{dt} = M_i \cdot b_u \cdot Y \cdot \left( \frac{H}{K_H + H} \right) \cdot \left( \frac{O}{K_O + O} \right) + k_c \cdot Y \cdot C_{oc} - b \cdot M_i$$



CI61Q

### BIODEGRADACION DE COMPUESTOS ORGANICOS

Los procesos de bioremediación más interesantes incluyen la biooxidación ( $O_2$  como aceptador de electrones) de compuestos orgánicos.

En este tipo de reacciones un compuesto es adherido mediante enzimas extracelulares y transportado a través de la membrana celular. Una serie de transformaciones permiten que los electrones presentes en el compuestos sean traspasados a la célula y los átomos de carbono son oxidados.

La energía liberada por estas reacciones es utilizada por los microorganismos para sintetizar nuevo material celular, reparar células dañadas, transportar compuestos dentro de la célula, y a veces para su movimiento.

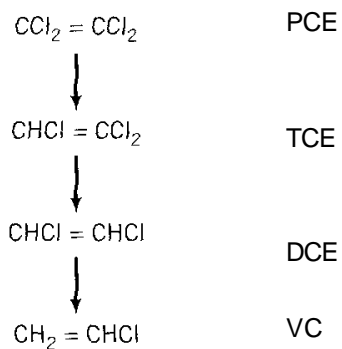




CI61Q

### BIODEGRADACION DE COMPUESTOS ORGANICOS

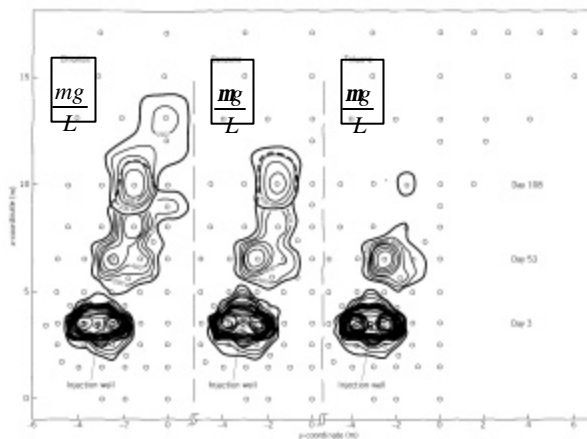
Procesos tales como **Dehalogenación Reductiva** ocurren en el suelo. En este caso, en un proceso anaeróbico, los compuestos PCE, TCE, DCE y VC (Halogenados Aromáticos) son secuencialmente reducidos por procesos biológicos.



CI61Q

### BIODEGRADACION DE COMPUESTOS ORGANICOS

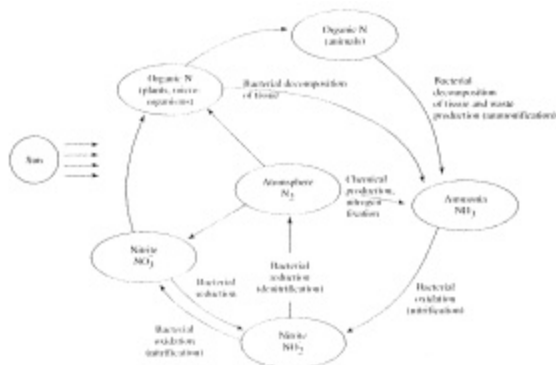
Biodegradación de hidrocarburos en el agua subterránea (Borden, Canada).



CI61Q

## BIODEGRADACION DE COMPUESTOS INORGANICOS

Las reacciones más comunes en este caso incluyen la transformación de nitrógeno. De particular importancia son la **Nitrificación y Denitrificación**.

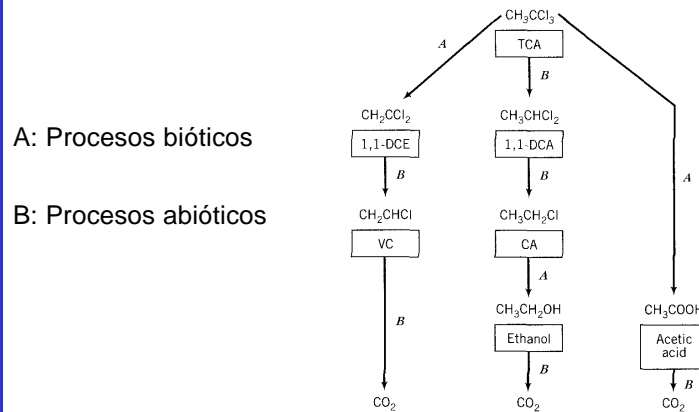


CI61Q

- INTRODUCCION
- ADSORCION Y DESORCION
- PROCESOS ABIOTICOS
- VOLATILIZACION
- DISOLUCION
- BIODEGRADACION
- PROCESOS MAS COMPLEJOS**
- EVALUACION DE PROCESOS

## CI61Q

En la naturaleza existen compuestos cuyo proceso de degradación es más complejo dado que incluye transformaciones bióticas y abióticas. Un ejemplo de éstos es el TCA (1,1,1-Tricloroetano).



## CI61Q

**INTRODUCCION**  
**ADSORCION Y DESORCION**  
**PROCESOS ABIOTICOS**  
**VOLATILIZACION**  
**DISOLUCION**  
**BIODEGRADACION**  
**PROCESOS MAS COMPLEJOS**  
**EVALUACION DE PROCESOS**

## CI61Q

El trasladar los procesos que ocurren a nivel molecular hasta una escala de sitio es una tarea difícil pero importante.

Algunas herramientas han sido desarrolladas para asistir en estas evaluaciones.

### CARACTERIZACION DE SITIO

### ESTUDIOS DE MICROCOSMOS

### MODELACION



## CI61Q

### EVALUACION DE MICROCOSMOS

