CI61Q/CI71M PRINCIPIOS DE REMEDIACION Y RESTAURACION

PROCESOS DE INTERACCION
SUELO - AGUA - AIRE - CONTAMINANTE

SEMESTRE PRIMAVERA 2009







CI61Q

INTRODUCCION

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

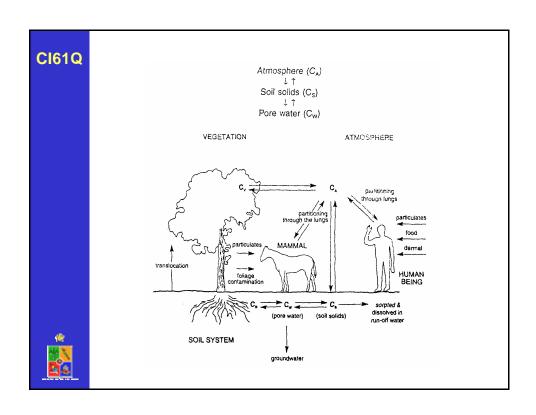


La distribución y concentración de contaminantes en el agua subterránea está fuertemente influenciada por procesos de interacción entre el contaminante y las componentes físicas, químicas y biológicas del suelo.

Algunos procesos de interés para nuestro análisis son:

ADSORCION Y DESORCION
PROCESOS ABIOTICOS
VOLATILIZACION
DISOLUCION
BIODEGRADACION





INTRODUCCION

ADSORCION Y DESORCION

ASPECTOS GENERALES

ISOTERMAS

ADSORCION DE COMPUESTOS ORGANICOS

PROCESOS ABIOTICOS

VOLATILIZACION

DISOLUCION

BIODEGRADACION

PROCESOS MAS COMPLEJOS

EVALUACION DE PROCESOS



CI61Q

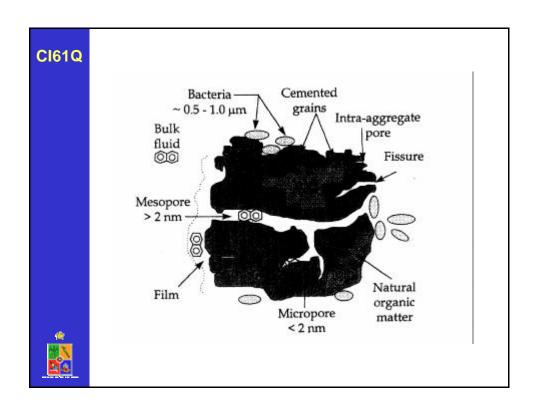
El concepto de **SORCION** se define como la asociación de una sustancia disuelta con un material sólido. El término **SORCION** incluye dos fenómenos complementarios: adsorción (superficie) y absorción (partícula). Generalmente es muy difícil diferenciar ambos efectos.

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.



INTRODUCCION

ADSORCION Y DESORCION

ASPECTOS GENERALES

ISOTERMAS

ADSORCION DE COMPUESTOS ORGANICOS

PROCESOS ABIOTICOS

VOLATILIZACION

DISOLUCION

BIODEGRADACION

PROCESOS MAS COMPLEJOS

EVALUACION DE PROCESOS

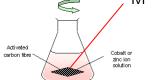


ISOTERMA DE ADSORCION

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



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











CI61Q

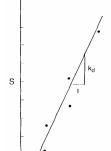
ISOTERMA DE ADSORCION LINEAL

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 linea recta.

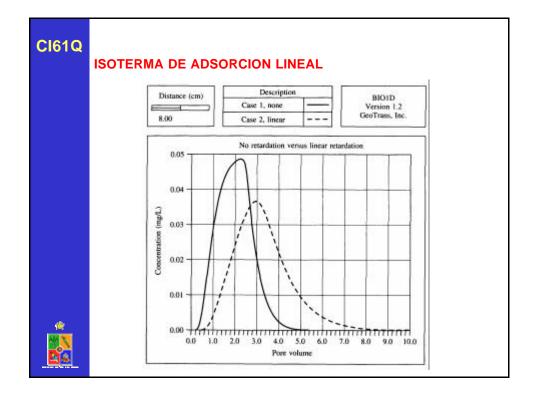
$$C^* = K_d \cdot C$$

$$R = 1 + K_d \cdot \mathbf{r}_S \cdot \frac{1 - n}{n}$$

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

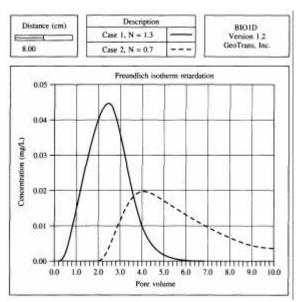






Si existe una relación no lineal entre la cantidad de soluto adsorbido en el sólido, C^* , y la concentración de soluto en la fase líquida, C, la isoterma de adsorción queda definida por la siguiente expresión. $C^* = K \cdot C^N$ $R = 1 + \frac{K \cdot \mathbf{r}_s \cdot N \cdot (1-n)}{n} \cdot C^{N-1}$ SO4, Cd, Cu, Zn, Mo, Pesticidas

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.

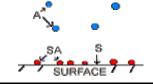
$$\frac{C}{C^*} = \frac{1}{\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{b}} + \frac{C}{\boldsymbol{b}}$$

 α : constante de adsorción, relacionada con la energía de adsorción (L/mg).

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

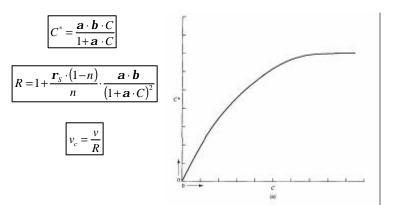






ISOTERMA DE ADSORCION LANGMUIR

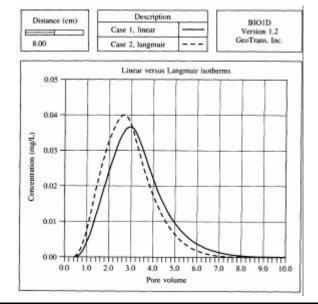
Si existe un número finito de sitios de adsorción sobre la superficie de un sedimento se tiene un límite máximo o capacidad de adsorción, más allá del cual la superficie no será capaz de tomar más soluto desde la fase líquida.





CI61Q

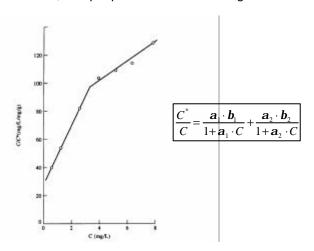
ISOTERMA DE ADSORCION LANGMUIR





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.





CI61Q

INTRODUCCION

ADSORCION Y DESORCION

ASPECTOS GENERALES ISOTERMAS

ADSORCION DE COMPUESTOS ORGANICOS

PROCESOS ABIOTICOS

VOLATILIZACION

DISOLUCION

BIODEGRADACION

PROCESOS MAS COMPLEJOS

EVALUACION DE PROCESOS



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 ${\rm K_d}$ de la isoterma lineal.

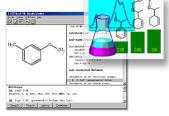


CI61Q

PARTICION OCTANOL - AGUA (kow)

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.







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.

PARTICION OCTANOL - AGUA (k_{ow})

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

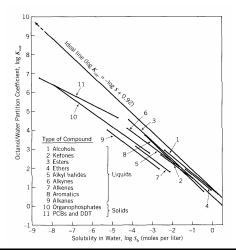
| Compuesto | Kow | log(Kow) | |
|-----------------|--------|----------|--|
| Dicloroetano | 62 | 1.79 | |
| Benceno | 135 | 2.13 | |
| Tricloroetileno | 195 | 2.29 | |
| Percloroetileno | 760 | 2.88 | |
| Naftaleno | 2350 | 3.37 | |
| Pireno | 209000 | 5.32 | |



CI61Q

PARTICION OCTANOL - AGUA (k_{ow})

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





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 (koc)

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}).

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

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

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



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

| Equation Number | Equation | Chemicals Used | Reference | |
|--|---|--|------------------------------------|--|
| (T1) $\log K_{pe} = 0.52 \log K_{ew} + 0.62$ | | 72 substituted benzene pesticides | Briggs, 1981 | |
| (72) | $\log K_{\rm w} = 1.00 \log K_{\rm sw} - 0.21$ | 10 polyaromatic hydrocarbans | Karickhaff, Brown, and Scott 1979 | |
| (T3) | K 0.63K. | Miscellaneous organics | Karickhoff, Brown, and Scott 1979 | |
| (T4) | $\log K_{\infty} = 0.544 \log K_{\rm pe} + 1.377$ | 45 organics, mostly pesticides | Kenaga and Goring 1980 | |
| (T5) | $\log K_{ee} = 1.029 \log K_{ee} - 0.18$ $r^2 = 0.91; n = 13$ | 13 pesticides | Roo and Davidson 1980 | |
| (16) | $\log K_{\rm w} = 0.94 \log K_{\rm ow} + 0.22$ | s-trizines and dinitrognalines | Rao and Davidson 1980 | |
| (17) | $\log K_{\infty} = 0.989 \log K_{\infty} = 0.346$ $e^2 = 0.991; n = 5$ | 5 polyaromatic hydrocarbans | Karickhoff 1981 | |
| (TB) | $\log \mathrm{K_{ec}} = 0.937 \log \mathrm{K_{ev}} - 0.006$ | Aromatics, polyaromat- ics, triazines | Lyman 1982 | |
| (19) | In $K_{\rm ex} = \ln K_{\rm ex} - 0.7301$ | DDT, retrachlorabi- phenyl, lindane, 2,4-D, and dichloropropane | McCall, Swann, and Laskowski 19 | |
| (T10) | $\log K_{co} = 0.904 \log K_{co} - 0.779$ $r^2 = 0.989; n = 12$ | Benzene, chlorinated benzenes, PCBs | Chiou, Parter, and Schmedding 1983 | |
| (111) | $\log K_{ec} = 0.72 \log K_{ew} + 0.49$ $r^2 = 0.95$; $n = 13$ | Methylated and chlori- nated benzenes | Schwarzenbach and Westall 1981 | |
| (112) | $\log K_{ee} = 1.00 \log K_{oe} - 0.317$ $r^2 = 0.98; n = 22$ | 22 polynuclear aromatics | Hassett et al. 1980 | |

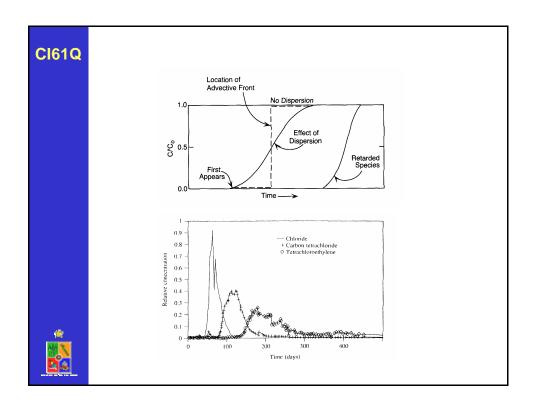


CI61Q

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

| - Vie | Dichloroethene | Benzene | Tricklorouthens | Bhyl Benzene | Tetrochloroethene | Noptholene | 2.2'-Dichlorobiphenyl | Pyrene | |
|------------|--------------------------|-----------|-----------------|--------------|-------------------|------------|-----------------------|--------|--|
| Log K. | 1.79 | 2.13 | 2.29 | 3.14 | 3.40 | 3.37 | 4.80 | 5.32 | |
| Equation | | | | | | | | | |
| Humber' - | Editested K _a | | | | | | | | |
| OTI) | 1,79 | 1.96 | 2.06 | 2.49 | 2.62 | 2.61 | 3.35 | 3.62 | |
| 02 | 1.58 | 1.92 | 2.10 | 2.93 | 3.19 | 3.16 | 4.59 | 5.11 | |
| (7.3) | 1.13 | 1.34 | 1.44 | 1.96 | 2.14 | 2.16 | 3.07 | 3.35 | |
| 0.4 | 2.35 | 2.54 | 2.62 | 3.09 | 3.73 | 3.21 | 3.99 | 4.27 | |
| 0.60 | 1.66 | 2.01 | 2.18 | 3.05 | 3.32 | 3.29 | 4.76 | 5.27 | |
| (76) | 1.90 | 2.32 | 2.37 | 3.17 | 3.42 | 3.39 | 4.73 | 5.22 | |
| מח | 1.42 | 1.76 | 1.92 | 2.76 | 3.02 | 2.99 | 4.40 | 4.92 | |
| (T40) | 1.67 | 1.99 | 2.14 | 2.94 | 3.18 | 3.15 | 4,49 | 4.98 | |
| (F9) | 1.06 | 1.40 | 1.56 | 2.41 | 2.67 | 2.64 | 4.07 | 4.59 | |
| 07106 | 1.08 | 1.39 | 1.53 | 2.06 | 2.30 | 2.51 | 3.80 | 4.27 | |
| (*11) | 1.78 | 2.00 | 2.14 | 2.75 | 2.94 | 2.92 | 3.95 | 4.32 | |
| (712) | 1.47 | 1.61 | 1.97 | 2.82 | 3.08 | 3.05 | 4.48 | 5.00 | |
| Ronge | 1.06-2.35 | 1.34-2.54 | 1.44-2.42 | 1.96-3.17 | 214-342 | 2.16-3.39 | 3.07-4.76 | 335-52 | |
| Mean | 1.57 | 1.86 | 2.00 | 2.70 | 2.93 | 2.92 | 4.14 | 4.58 | |
| 52. day. | 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 | |





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 Indice 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_{∞} es el coeficiente de partición en materia orgánica.



MOVILIDAD DE UN COMPUESTO ORGANICO (MI)

| 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 (fw)

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:



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:

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

donde n es la porosidad del suelo y $r_{\mathcal{S}}$ 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



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:

$$CH_3CH_2CH_2Br + H_2O \rightarrow CH_3CH_2CH_2OH + H^+ + Br^-$$

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

$$\left| \frac{dC}{dt} = -k_{HIDROLISIS} \cdot C \right|$$



REACCIONES OXIDO REDUCCION

Estas reacciones se relacionan con la transferencia de electrones entre una molécula y otra especie química. Si el compuesto pierde electrones se dice que se oxida. Si al contrario, este gana electrones, se reduce.

Generalmente el mecanismo de reacción oxido-reducción de tipo abiótico es menos importante que aquel de origen biológico, por lo que generalmente no se considera o utiliza en problemas típicos.

En aquellos casos en los cuales este tipo de reacción es importante se modela con una cinética de primer orden:

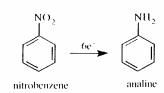


$$\frac{dC}{dt} = -k_{OXIDO-REDUCCION} \cdot C$$

CI61Q

REACCIONES OXIDO REDUCCION

Dos casos de reacciones oxido reducción se muestran en esta sección:



$$CH_3CH_2Cl \xrightarrow{-2e^-} CH_3CH_3 + Cl^-$$

Cloroetano etano + cloruro



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 dicloroeteno:



CI61Q

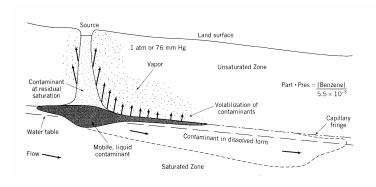
INTRODUCCION ADSORCION Y DESORCION PROCESOS ABIOTICOS

VOLATILIZACION

DISOLUCION
BIODEGRADACION
PROCESOS MAS COMPLEJOS
EVALUACION DE PROCESOS



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 12.3 Vapor Pressure Data for a Selected Group of Organic Contaminants

| | | | Henry's Law | |
|--------------------------|--|----------------------|--------------------------------|--|
| Compound | Formula | V.P." | Constant | |
| Halogenated hydrocarbons | | | | |
| Dichloromethane | CH ₂ Cl ₂ | 349 | 3×10^{-3} | |
| Trichloromethane | CHCl ₃ | 160 | 4.8×10^{-3} | |
| Tetrachloromethane | CCl_4 | 90 | 2.3×10^{-2} | |
| Bromoform | CHBr ₃ | 5.6 (25°C) | 5.8 × 10 ^{−4} c | |
| 1,1-Dichloroethane | CHCl ₂ CH ₃ | 180 | $4.3 \times 10^{-3} \text{ c}$ | |
| 1,2-Dichloroethane | CH ₂ ClCH ₂ Cl | 61 | 9.1 × 10 ⁻⁴ c | |
| 1,1-Dichloroethene | $H_2C = CCl_2$ | 500 | _ | |
| Trans-1,2-dichloroethene | CHCI=CHCI | 200 (14°C) | $4.2 \times 10^{-2} \text{ c}$ | |
| 1,1,1-Trichloroethane | CCI ₅ CH ₅ | 100 | 1.8×10^{-2} | |
| Trichloroethene | Cl ₂ C=CHCl | 60 | 1×10^{-2} | |
| 1,1,2-Trichloroethane | CH2CICHCI2 | 19 | $7.4 \times 10^{-4} \text{ c}$ | |
| Tetrachloroethane | $Cl_2C = CCl_2$ | 14 | 8.3×10^{-5} | |
| Aromatic hydrocarbons | | | | |
| Benzene | C_6H_6 | 76 | 5.5×10^{-3} | |
| Phenol | C ₆ H ₅ OH | 0.2 | $3.0 \times 10^{-7} \text{ c}$ | |
| Chlorobenzene | C ₆ H ₅ Cl | 8.8 | $2.6 \times 10^{-3} \text{ c}$ | |
| Ethylenebenzene | $C_6H_5C_2H_5$ | 7 | 8.7×10^{-5} | |
| Toluene | $C_6H_5CH_5$ | 22 | 5.7×10^{-3} | |
| o-Xyiene | $C_6H_4(CH_3)_2$ | 5 | 5.3×10^{-3} | |
| Other organic solvents | | | | |
| Acetone | CH ₅ -CO-CH ₅ | 89 (5°C) | _ | |
| Diethyl ether | $C_2H_5OC_2H_5$ | 442 | 5.1 × 10 ⁻⁴ c | |
| Tetrahydrofuran | C ₆ H ₈ O | | - | |
| 1,4-Dioxane | $O(CH_2-CH_2)_2O$ | 30 | _ | |
| Biocides | | | | |
| Pentachlorophenol | C₀Cl₅OH | 1.1×10^{-4} | 3.4×10^{-6} | |
| DDT | (ClC ₆ H ₄) ₂ CHCCl ₅ | 1×10^{-7} | 3.8×10^{-5} | |
| Lindane | C ₆ H ₆ Cl ₆ | 9.4×10^{-6} | 4.8×10^{-7} | |



Vapor pressure in mm Hg at 20°C; 1 atm = 760 mm Hg.

*atm-m/mole; c indicates values calculated from vapor pressure and solubility data.

*atm-m/mole and others, 1985, Contaminant Hydrogeology of Toxic Organic Chemicals at a Bisposal Site, Golucester, Onation. 1. Chemical Concepts and Site Assessment, MVD Scientific Series 141, Environment Canada, 114 p. Reproduced with the permission of Environment Canada.

CI61Q

INTRODUCCION ADSORCION Y DESORCION PROCESOS ABIOTICOS VOLATILIZACION

DISOLUCION

BIODEGRADACION PROCESOS MAS COMPLEJOS EVALUACION DE PROCESOS



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



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 procesoso de biodegradación son estimadas mediante modelos tipo **Monod**.

Este modelo está basado en el concepto que la tasa de degradación de 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.

$$r = k_1 \cdot C \cdot \frac{X}{K_X + X} \cdot \frac{O}{K_O + O}$$



BIODEGRADACIÓN AERÓBICA DE HIDROCARBUROS

$$\boxed{\frac{dH}{dt} = -M_{t} \cdot b_{u} \cdot \left(\frac{H}{K_{H} + H}\right) \cdot \left(\frac{O}{K_{O} + O}\right)}$$

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

$$\frac{dM_{t}}{dt} = M_{t} \cdot b_{u} \cdot Y \cdot \left(\frac{H}{K_{H} + H}\right) \cdot \left(\frac{O}{K_{O} + O}\right) + k_{c} \cdot Y \cdot C_{oc} - b \cdot M_{t}$$



CI61Q

BIODEGRADACION DE COMPUESTOS ORGANICOS

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

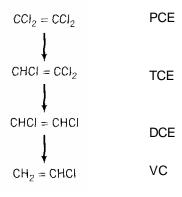
En este tipo de reacciones un compuesto es adherido mediante enzimas extracelulares y transportado a través de la membrana celular. Una serie de transformaciones permiten que los electrones presentes en el compuestos sean traspasados a la célula y los átomos de carbono son oxidados.

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.



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.

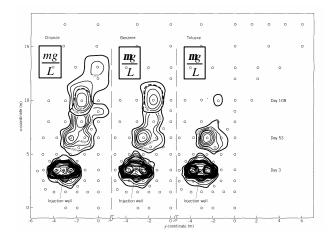




CI61Q

BIODEGRADACION DE COMPUESTOS ORGANICOS

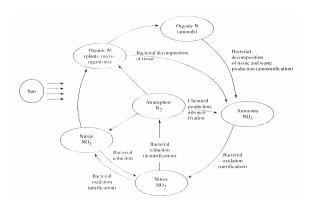
Biodegradación de hidrocarburos en el agua subterránea (Borden, Canada).





BIODEGRADACION DE COMPUESTOS INORGANICOS

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



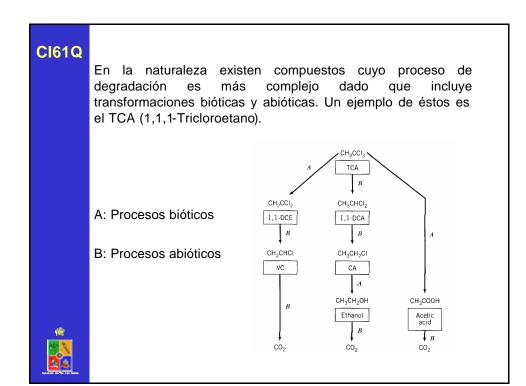


CI61Q

INTRODUCCION
ADSORCION Y DESORCION
PROCESOS ABIOTICOS
VOLATILIZACION
DISOLUCION
BIODEGRADACION
PROCESOS MAS COMPLEJOS

EVALUACION DE PROCESOS





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



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



EVALUACION DE MICROCOSMOS Sampling value Some value To mothering pump Sampling value Sampling value (fool blabentury Batch Microcosm (from Nielsen and Ofristensen, 1994)