

FACULTAD DE INGENIERÍA

Escuela Académico Profesional de Ambiental

Trabajo de Investigación

Estudio teórico y modelamiento del proceso de oxidación avanzada (POA) aplicado a la remoción de sulfatos en el tratamiento de drenajes ácidos de mina (DAM)

Michelle Angely Mollehuara Huayas

Para optar el Grado Académico de
Bachiller en Ingeniería Ambiental

Huancayo, 2020

Repositorio Institucional Continental
Tesis digital



Esta obra está bajo una Licencia "Creative Commons Atribución 4.0 Internacional" .

AGRADECIMIENTOS

Agradezco al docente Anieval Peña Rojas por su orientación en este trabajo de investigación y brindarme el conocimiento significativo además de apoyarme en los pasos de análisis, agradezco todas sus sugerencias, opiniones y comentarios para una mejora de calidad de trabajo.

Por último, pero no menos importante agradezco a la Universidad Continental por brindarme las facilidades para obtener información relevante a mi tema de investigación.

DEDICATORIA

Este trabajo lo dedico a mis padres por su infinito amor, quiénes me han apoyado incondicionalmente. A mi hermana quien ha sido gran parte de mi felicidad. A ellos gracias por su amor tan enorme que me han dado en todos estos años y me han ayudado a que pueda lograr todas mis metas.

ÍNDICE GENERAL

CAPÍTULO I.....	1
PLANTEAMIENTO DEL ESTUDIO	1
1.1. Planteamiento y formulación del problema.....	1
1.1.1. Planteamiento del problema.....	1
1.1.2. Formulación del problema.....	2
1.2. Objetivos	2
1.2.1. Objetivo general.....	2
1.2.2. Objetivos específicos	2
1.3. Justificación e importancia	3
1.3.1. Social.....	3
1.3.2. Ambiental.....	3
1.3.3. Teórica.....	3
1.4. Hipótesis y descripción de variables.....	4
1.4.1. Hipótesis general	4
1.4.2. Hipótesis específicas	4
1.4.3. Operacionalización de variables.	4
CAPÍTULO II.....	4
MARCO TEÓRICO	5
2.1. Antecedentes del problema.....	5
2.1.1. Antecedentes internacionales	5
2.1.2. Antecedentes nacionales	8
2.2. Bases teóricas.....	11
2.2.1. Teoría química.....	11
2.2.2. Marco legal	23
2.3. Definición de términos básicos	24
CAPÍTULO III.....	25
METODOLOGÍA	25
3.1. Método y alcance de la investigación	25
3.1.1. Método.....	25
3.1.2. Nivel.....	25
3.2. Diseño de la Investigación.....	25
3.2.1. Diseño no experimental	25
3.3. Población y muestra	25

3.3.1. Población.....	25
3.3.2. Muestra.....	25
3.4. Técnica e instrumentos de recolección de datos	26
3.4.1. Técnicas	26
3.4.2. Instrumentos	26
CAPÍTULO IV	27
RESULTADOS Y DISCUSIÓN	27
4.1. Resultados del tratamiento y análisis de la información.....	27
4.1.1. Resultados del persulfato y su interacción con metales.	27
4.1.2. Resultado de persulfato en aguas ácidas.....	30
4.1.3. Descomposición de especies de sulfatos en radicales libres.	38
4.2. Prueba de Hipótesis	54
4.3. Discusión de resultados	57
REFERENCIAS	58
CONCLUSIONES.....	62
RECOMENDACIONES.....	64
ANEXOS.....	65
ANEXO 1: MODELADOR HSC (OUTOTEC).....	65
ANEXO 2: VALOR DE RADICAL SULFATO A BASE DE DATO.....	65
ANEXO 3: MATRIZ DE CONSISTENCIA	1

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1: Operacionalización de variables.....	4
Tabla 2: Especies oxidativas intermedias generadas por diferentes métodos de activación	14
Tabla 3: Clasificación de aguas residuales según el pH	17
Tabla 4: Los sulfuros metálicos responsables de la formación de DAM, durante actividades mineras	19
Tabla 5: Límites Máximos Permisibles para la Descarga de Efluentes Líquidos de actividades minero.....	23
Tabla 6: Reacción de la ecuación 1	27
Tabla 7: Datos de especies.....	30
Tabla 8: Reacción de la ecuación	31
Tabla 9: Datos de especie	34
Tabla 10: Reacción de la ecuación 3.	35
Tabla 11: Datos de especies.....	37
Tabla 12: Interacción de radicales libres en presencia de metales disueltos.....	39
Tabla 13: Ecuación (1) sin radical libre	39
Tabla 14: Datos de especie eq 1 sin radical.....	42
Tabla 15: Ecuación 1 con radical libre	42
Tabla 16: Datos de especie eq.1 con radical	46
Tabla 17: Ecuación 2 sin radical libre.....	46
Tabla 18: Datos de especie eq.2 sin radical.....	50
Tabla 19: Ecuación de la ecuación 2 con radical	50
Tabla 20: Datos de especie eq,2 con radical:	53
Tabla 21: Radical sulfato y muestra recolectado de sulfato	53
Tabla 22: Prueba de normalidad.....	55
Tabla 23: Prueba de correlación	56
Tabla 24: Resultados del índice de correlación.....	56
Tabla 25: Prueba de Anova	56

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1: Clasificación de procesos de oxidación avanzada	11
Figura 2: Estudio bibliométrico de Web of Science con los temas sobre la aplicación de persulfato en los últimos años: (a) degradación de contaminantes, (b) deshidratación de lodos y (C)	13
Figura 3: Componentes de un sistema termodinámico	16
Figura 4: Ciclo del agua	18
Figura 5: Diagrama de flujo de proceso combinado para eliminación de sulfatos	22
Figura 6: Reacción de la entalpía.....	28
Figura 7: Reacción de la entropía	28
Figura 8: Energía libre de Gibbs	29
Figura 9: Equilibrio constante.....	29
Figura 10: Masa molar de las sustancias	30
Figura 11: Reacción de la entalpía (Eq.2)	32
Figura 12: Reacción de entropía (Eq.2)	33
Figura 13: Energía libre de Gibbs (Eq.2).....	33
Figura 14: Equilibrio constante (Eq.2)	34
Figura 15: Masa molar de sustancias (Eq.2).....	35
Figura 16: Reacción de la entalpía.....	36
Figura 17: Reacción de entropía.....	37
Figura 18: Energía libre de Gibbs	37
Figura 19: Masa molar de la sustancia	38
Figura 20: Correlación polinómica entre la T° y entalpía	40
Figura 21: Correlación polinómica entre la T° y entropía.....	41
Figura 22: Correlación polinómica entre la T° y la energía libre de Gibbs	41
Figura 23: Correlación polinómica entre la T° y el equilibrio constante	42
Figura 24: Correlación polinómica entre la T° y entalpía	44
Figura 25: Correlación polinómica entre la T° y entropía.....	44
Figura 26: Correlación polinómica entre la T° y energía libre de Gibbs	45
Figura 27: Correlación polinómica entre la T° y equilibrio constante	45
Figura 28: Correlación polinómica entre la T° y entalpía	48
Figura 29: Correlación polinómica entre la T° y entropía.....	48
Figura 30: Correlación polinómica entre la T° y energía libre de Gibbs	49
Figura 31: Correlación polinómica entre T° y equilibrio constante	49
Figura 32: Correlación polinómica entre la T° y entalpía	51
Figura 33: Correlación polinómica entre la T° y entropía.....	52
Figura 34: Correlación polinómica entre la T° y energía libre de Gibbs	52
Figura 35: Correlación polinómica entre la T° y equilibrio constante.	53
Figura 36: Correlación logarítmica entre el radical sulfato y concentración de sulfato.....	55

RESUMEN

El presente trabajo de investigación está enfocado a un estudio de radicales libres operados por los POA y la interacción que tiene con el contenido de sulfatos en aguas de mina. **Objetivo:** Determinar la factibilidad de los Procesos de Oxidación Avanzada (POA) en los tratamientos de aguas de mina con contenidos de sulfato para su consecuente remoción de éstos. **Métodos:** Se realizó un enfoque cuantitativo ya que es secuencial, con un nivel descriptiva-correlacional empleando investigación bibliográfica y el modelo computacional HSC (OUTOTEC), software que permitió realizar los cálculos termodinámicos de una manera sencilla. **Resultado:** El método que se utilizó en el trabajo de investigación demostró que los radicales libres de sulfato de Procesos de oxidación avanzada no son significativamente factibles en los tratamientos de aguas con contenido de sulfatos ya que muestra la correlación de 0.469, correlación media. **Conclusiones:** Los sulfatos en aguas de mina no tiene una relación con los radicales sulfatos, sin embargo; debido a su gran potencial de oxidación puede influir en los metales pesados observándose en el simulador HSC - OUTOTEC, todavía existen varios desafíos para la activación del persulfato, aún se debe indagar más en literatura científica y se propone la próxima necesidad de un estudio para promover la implementación a una gran escala de estos enfoques.

Palabras Clave:

Procesos de oxidación avanzada (POA), radicales sulfatos, degradación de contaminantes, peroxidisulfato (PDS), peroximonosulfato (PMS).

ABSTRACT

This research work is focused on a study of free radicals operated by POAs and their interaction with the sulfate content in mine waters. **Objective:** To determine the feasibility of the Advanced Oxidation Processes (POA) in the treatment of mine waters with sulfate contents for its consequent elimination of income. **Methods:** A quantitative and sequential approach was carried out, with a descriptive-correlational level using bibliographic research and the HSC computational model (OUTOTEC), software that managed to perform thermodynamic calculations in a simple way. **Result:** The method that was used in the research work showed that sulfate free radicals from Advanced oxidation processes are not significantly feasible in water treatment with sulfate content and that it shows a correlation of 0.469, medium correlation. **Conclusions:** Sulfates in mine waters do not have a correlation with sulfate radicals, however; due to its great oxidation potential it can influence heavy metals observing in the HSC - OUTOTEC simulator, there are still several challenges for persulfate activation, it still needs to be further promoted in scientific literature and the next need for a study is proposed for large-scale implementation of these approaches.

Keywords:

Advanced oxidation processes (POA), sulfate radicals, degradation of pollutants, peroxydisulfate (PDS), peroxymonosulfate (PMS)

INTRODUCCIÓN

La industria minera es uno de los mayores consumidores del recurso hídrico en las zonas donde se operan. Las estrategias de gestión del agua en minería apuntan a optimizar los sistemas de tratamientos, el reúso y reciclamiento del agua para limitar los volúmenes de descarga de efluentes hacia el medio ambiente, pero en muchos casos no han sido suficientes para asegurar la calidad física, química y biológica del agua. Hay muchas causas para esto, siendo uno de los más importantes y a nivel global, la generación de drenajes ácidos de mina (DAM) y drenajes ácidos de roca (DAR) que ocurre de manera natural por las condiciones geológicas o por la misma actividad en extracción de minerales. Es así, que el tratamiento del DAM se realiza con bastante intensidad en sitios mineros para evitar que sus efluentes ocasionen contaminación física, química, biológica y bioquímica de los cuerpos hídricos receptores. La eficiencia de estos sistemas de DAM depende fundamentalmente a buen conocimiento y entendimiento de los mecanismos físico-químicos y de oxidación antes, durante y después de los procesos de tratamiento. El proceso de oxidación es por lo tanto fundamental en plantas de tratamiento de DAM.

En la presente investigación, se identificarán los fundamentos físico-químicos que se activan en un (POA) con orientación aplicada en el tratamiento de sulfatos en aguas de mina. Se estudiarán los mecanismos de generación de radicales libres y su interacción con los compuestos de sulfatos en el agua. El análisis y modelo computacional, hará uso de datos de calidad de agua de: drenaje ácido de mina y efluente planta tratamiento, ambos con contenido de sulfatos

La metodología que se empleará incluye investigación bibliográfica, recopilación de datos históricos de casos estudio, modelo computacional de interpretación del proceso de oxidación avanzada (POA), la generación de radicales libres e interacción con sulfatos presentes en el agua

En el capítulo I consiste en el planteamiento y formulación del problema del tema de investigación, en donde se dan a conocer los objetivos, además de la justificación para sacar adelante el proyecto de investigación y concluyendo con la formulación de las hipótesis y la respectiva identificación de variables.

En el capítulo II encontraremos el marco teórico, los antecedentes que preceden a la investigación respecto a los POA, con referencias al tema de estudio y la teoría que sostiene la investigación, y su definición de los términos básicos.

En el capítulo III está constituido por materiales y métodos donde se dan a conocer las características del trabajo de investigación, nivel y diseño del estudio, asimismo mencionando a la población y su muestra para el estudio concluyendo con una descripción de técnicas e instrumentos para la recolección de datos y su posterior análisis.

El capítulo IV está constituido por los resultados y discusiones producto del proyecto de investigación, que es sustentado por medio de revisión bibliográfica finalmente llegando a las conclusiones, recomendaciones y referencias bibliográficas.

CAPÍTULO I

PLANTEAMIENTO DEL ESTUDIO

1.1. Planteamiento y formulación del problema

1.1.1. Planteamiento del problema

Los sistemas de tratamiento en la minería peruana se han diseñado para cumplir con la calidad de agua que la normativa nacional exige para la descarga de efluentes mineros y metalúrgicos. Por ejemplo, los niveles permisibles establecidos por la legislación solo reglamentan el contenido metálico en efluentes mineros el cual está en el rango de partes por millón (ppm) y esto ha generado permisividad en el vertimiento de contaminantes a cuerpos hídricos con altos contenidos de sulfatos. Los estándares para la calidad de vertimientos hídricos están cambiando a nivel global y cada vez son más exigentes en relación a los niveles de sulfato y su efecto en el ecosistema acuático.

Existen diferentes tipos de proceso de oxidación avanzada en estudio y aplicación en la industria. Los procesos de oxidación avanzada (POA) han recibido bastante atención en el tratamiento de aguas municipales por su habilidad para la degradación y descomposición de compuestos orgánicos. La aplicación de POA ha demostrado efectividad en la degradación de aromáticos, como los compuestos fenólicos con la combinación de H_2O_2 Y Ozonización los cuales han tenido mayor éxito (1). Sin embargo, su estudio y aplicación en el tratamiento de aguas industriales aún no se ha extendido. Algunos estudios en este sentido indican que los POA pueden ser aplicados en residuos líquidos que son provenientes de extracción aurífera haciendo el uso de espectrofotometría UV. En el caso del tratamiento de aguas de mina, no existen indicios o referencias de estudios en POA, y este es un área que presenta oportunidades de aplicación. Las tecnologías de tratamientos de agua de mina son conocidos en la industria minera, siendo algunos de estos considerados el “estado del arte” para los objetivos con los que se ha diseñado (remoción de metales). Entre estos se encuentran los tratamientos que utilizan sustancias alcalinas con el propósito de neutralizar la acidez del agua de mina (DAM o DAR). Por ejemplo, la neutralización con hidróxido de calcio $Ca(OH)_2$, regula el pH del agua, reacciona con los metales disueltos formando hidróxidos e influye en su solubilidad para su eventual precipitación. El proceso es altamente efectivo para la remoción de acidez y metales, pero usa grandes cantidades de hidróxido de calcio y suministro de aire para los niveles de oxidación que el proceso requiere. Sin embargo, los niveles de concentración de sulfato disuelto en el agua no se pueden reducir, los mismos que afectan al ecosistema acuático en los cuerpos de agua receptores y consumidores del recurso hídrico. La presencia de sulfato en los efluentes mineros causa un problema de escala mundial para la industria minera y para los gobiernos donde la actividad se desarrolla (2). Muchos países están revisando y modificando sus reglamentos y leyes respecto a la

calidad de agua y niveles permisibles de sulfato en las descargas de efluentes mineros

1.1.2. Formulación del problema

1.1.2.1. Problema general

¿Existe factibilidad de aplicación de (POA) en el tratamiento de aguas de mina con contenido de sulfatos?

1.1.2.2. Problemas específicos

- ¿Cuál de los POA es de mayor eficiencia en los tratamientos de agua de mina con contenido de sulfato?
- ¿Cuáles son los mecanismos físico-químicos de POA que generan radicales libres para la alteración o remoción de sulfatos presentes en aguas de mina?
- ¿Es posible modelar computacionalmente los POA, radicales libres y su interacción con el sulfato presente en el agua de mina?

1.2. Objetivos

1.2.1. Objetivo general

Determinar la factibilidad de los POA en los tratamientos de agua de mina con contenidos de sulfatos.

1.2.2. Objetivos específicos

- Determinar el tipo de procesos más eficientes de los POA en tratamientos de aguas de mina con contenido de sulfatos.
- Determinar los mecanismos físico-químicos de POA que generan radicales libres para la alteración o remoción de sulfatos presentes en el agua de mina y efluentes.
- Proponer un modelo computacional para la interpretación del POA, radicales libres y su interacción con el sulfato presente en el agua de mina y efluentes.

1.3. Justificación e importancia

1.3.1. Social

En el trabajo de investigación permite brindar alternativas tecnológicas que permitan mejorar el resultado de las tecnologías para tratar aguas de mina y consecuentemente la calidad de agua en los vertimientos mineros que eventualmente son usados por comunidades en sus actividades productivas y de consumo

1.3.2. Ambiental

La investigación puede mitigar los impactos negativos que trae consigo los sulfatos de aguas de mina estos alteran la calidad de cuerpos hídricos si los efluentes de los sistemas de tratamiento contienen trazas o compuestos con carácter tóxico. El impacto en la calidad de agua del cuerpo receptor puede causar problemas en el desarrollo natural del ecosistema acuático. En efecto, la presencia de sulfatos en efluentes ha sido identificado tener impactos en el ecosistema acuático y el medio ambiente

1.3.3. Teórica

La investigación va a producir nuevos datos que permitan la utilización de POAs con remoción a sulfatos en aguas de mina, además investigará en la literatura científica los aspectos teóricos del proceso, los mecanismos de la procreación de los radicales libres de interés y su relación con sulfatos disueltos en el agua. De esta manera, se busca contribuir con conocimientos base de subsecuentes investigaciones la tecnología de tratamiento de aguas en general ha evolucionado con el tiempo y muchos procesos y métodos han mejorado a la par del desarrollo tecnológico, dando lugar a lo que se conoce como mejores tecnologías disponibles Al mismo tiempo, la aparición de tecnologías emergentes ocurre después de arduos procesos de investigación teórica y experimental

1.4. Hipótesis y descripción de variables

1.4.1. Hipótesis general

Los radicales libres de Procesos de Oxidación Avanzada son factibles en los tratamientos de aguas con contenidos de sulfatos.

1.4.2. Hipótesis específicas

- Los POAs son eficientes en tratamientos de aguas de mina con contenido de sulfatos.
- Los mecanismos físico-químicos de los POA pueden generar radicales libres y alterar los sulfatos presentes en el agua de mina
- El modelamiento computacional puede interpretar los POA, radicales libres y su interacción con el sulfato presente en el agua de mina y efluentes.

1.4.3. Operacionalización de variables.

Tabla 1: Operacionalización de variables

	Variable	Categorías	Definición conceptual	Indicadores
Variable Independiente	Mecanismos físico-químicos	Química Física	Cambios de la materia en su volumen o estado	<ul style="list-style-type: none">• Radicales libres de sulfato
Variable Dependiente	Concentración de metales	Química	Grupo de elementos químicos en el agua con densidad alta	<ul style="list-style-type: none">• Concentración de Fe• Concentración de Cu• Concentración de sulfatos

MARCO TEÓRICO

2.1. Antecedentes del problema

2.1.1. Antecedentes internacionales

- Umbarila (3) en un estudio realizado en Colombia, realizó el tratamiento a aguas residuales de curtiembres con el objetivo de reducir sus contaminantes utilizando los procesos de oxidación avanzada utilizando al ozono como un oxidante fuerte con función al pH del agua tratada, en su metodología se realizó varias muestras con solo 0.5g/h de ozono en un determinado tiempo de 3 horas, logrando la remoción de contaminantes un 77.78% , asimismo en este estudio se evaluó la cinética y la disminución de pH, formándose H_2SO_4 (ácido sulfúrico), concluyendo que la eliminación de sulfuros utilizando el ozono es muy eficiente para un pH alcalino siendo muy efectivo para tratar aguas de industrias de curtido de pieles. Los procesos de oxidación avanzada son altamente eficiente y reconocidos por su gran facilidad para degradar compuestos orgánicos, como en este caso al agente oxidante el ozono, altamente eficiente para la purificación del agua contaminada.
- Según Boonrattanakij (4) en su artículo estudió la etapa más adecuada para Fenton, donde identifica la implementación de tratamientos de agua en industria de fabricación de tornillos, estos efluentes fueron tratados por fenton de lecho fluidizado para poder reducir los niveles de DQO en la fabricación de tornillos ácidos efluentes de dicha industria, en su metodología usaron las muestras reales de estas aguas residuales logrando hasta un 80% de reducción de DQO en un tiempo estimado de 40 minutos con el tratamiento de fenton, con un contenido de 80mg de O_2L^{-1} asimismo logrando que este contenido se encuentre por debajo del máximo de 200mg de O_2L^{-1} que es un nivel definido por las agencias de protección ambiental. Fenton es uno de los procesos más ventajosos dentro de los POAs, aplicado generalmente para aguas industriales residuales, además de ser un proceso con muchas ventajas en cuanto a su operación y costos.
- Según Pambi (5) en su tesis presenta como objetivo determinar la remoción de Cianuro y de Tiourea de los residuos líquidos que provienen de procesos de extracción aurífera de una empresa llamada FRANROMEC, utilizando procesos físico-químico que está basado en el peróxido de hidrógeno, por ello realizó el método colorimétrico, haciendo el uso de espectrofotometría UV-visible obteniendo datos de degradación de estos contaminantes, para un análisis matemático utilizó representación gráfica como Origin y programas de cálculo matemático para poder determinar sus parámetros y ayuden a hacer una comparación de los datos experimentales y simulados, el agotamiento de estos compuestos contaminantes fue hecho en condiciones estequiométricas, subestequimétricas y sobreestequimétricas usando el peróxido de hidrógeno respecto a éstos, a diferentes temperaturas llegando a la conclusión que hubo remoción de Cianuro en un 96% y 89.44% en remoción de Tiourea. Los POA son utilizados como una operación prometedora y eficiente para los tratamientos de las aguas industriales, gran parte de éstos han resultado exitosos solo a pH ácidos o neutros.

- Según Cárdenas (6) en su estudio de investigación tuvo como objetivo reducir sus contaminantes como Cianuro, cobre, hierro, cromo hexavalente y más metales que pueden ser perjudiciales para el medio ambiente sino tiene un adecuado tratamiento, teniendo en cuenta los parámetros físicos y químicos del agua, logrando su la remoción del cianuro del 99.9%, DQO 94.62%, hierro 97.53%, cobre 58.70% y sólidos suspendidos 99%, demostrando su alta capacidad de remoción de contaminantes asimismo cumplir con la norma que establece. Los procesos de oxidación avanzada son eficientes y prometedores en el ámbito de tratamiento para aguas cianuradas, se ha demostrado con el paso de los años que es totalmente eficiente respecto a la remoción de cianuros reduciéndola hasta un 99.99%.
- Según Castro (7) en su trabajo de investigación realizado en Ecuador, nos dice que su objetivo es minimizar la concentración del contaminante cianuro a dichos valores que no excedan los límites máximos permisibles, es por ello que diseña una planta mediante la combinaciones de Ozono y Peróxido de hidrógeno, dos agentes oxidantes muy eficaces para tratamientos de aguas residuales, esta planta tiene una capacidad de descarga de $259.20m^3d^{-1}$ de un total de efluentes con cianuro que provienen de una industria minera que está ubicado en cantón Piñas, para su metodología se hizo pruebas de laboratorio y data proporcionada por la planta , la eliminación de cianuro fue dividida en 3 etapas las cuales fueron: pretratamiento con 2 tanques de estabilización de pH, 2 clarificadores primarias, también el tratamiento químico, donde se incluyen reactores y por último un sistema post con clarificadores secundarios obteniendo resultados muy óptimos de eliminación de efluentes con cianuro mediante el uso combinado de estos agentes oxidantes se alcanzó un alto porcentaje al remover cianuro el cual se obtuvo un 100% en veintiuno horas con 83 minutos. Es importante tratar los efluentes antes de ser vertidos a un cuerpo hídrico para evitar un incremento de contaminación, se ha demostrado que los agentes oxidantes como H_2O_2 Y O_3 son altamente eficientes para la degradación de contaminantes, tratando de una manera completa los efluentes contaminados.
- Según Zaw (8) en su artículo explica acerca del consumo de aguas subterráneas que contienen arsénico a varios cientos de g/l (ppb) en Bangladesh, este contaminante ha provocado enfermedades a personas como el aumento de varios tipos de cáncer, específicamente en piel y vejiga, mientras que en EE. UU y Australia respecto al impacto a la salud desconocido del agua potable que estos contienen aún más decenas de ppb de arsénico. Las condiciones anaerobias hacen que el arsénico este presente en una forma reducida y por ello es necesario el uso de un oxidante, para que el arsénico pueda eliminarse con éxito mediante métodos de oxidación avanzada que utiliza luz ultravioleta, el resultado con el proceso de fotoxidación a base de hierro tuvo más éxito para eliminar este contaminante del agua de la mina que drena.
- En el estudio realizado por Pinto (9) se tuvo como objetivo reducir la concentración de dichos contaminantes como cianuro y mercurio que se encontraba disuelto en los efluentes provenientes de una industria productiva de oro, en Colombia, como

una medida de minimización ante estos impactos de contaminación se hizo necesario hacer uso de los procesos de oxidación avanzada, que permiten una degradación de los contaminantes como, técnicas avanzadas las cuales son unidades fotocatalíticas, foto-fenton y el uso de fotocatalisis heterogénea, a través de esta investigación se evaluó y estas tecnologías y se obtuvo una remoción del 98.83% del cianuro y mercurio con fotocatalisis heterogénea y un 94.39% con foto-fenton que demostraron su nivel de eficiencia.

- Según Barndok (10) estudió los POA como un tratamiento para aguas contaminadas con productos químicos recalcitrante tales como el 1,4-dioxano, estos métodos innovadores y sostenibles han sido capaces de degradar los contaminantes eficientemente, para ello utilizó el ozono como un agente oxidante, capaz de degradar dicho contaminante, en condiciones básicas con un pH mayor de 9, altamente alcalino para poder realizar dicho tratamiento, como resultado, Fenton-UV, foto fenton y foto fenton solar, de todas estas procesos utilizados para la biodegradabilidad de DQO, el más óptimo resultado ser foto fenton solar, pudo obtener una reducción mayor del 50% respecto a DQO, y a la vez teniendo desventaja como el costo operacional y el espacio requerido donde podría ser aplicado.
- Según Herrera (11) en su tesis comparó los métodos convenciones y los POA para tratar aguas residuales de bebidas carbonatadas y determinar cuál de estos era el más eficiente, estos efluentes son caracterizados por tener un alto contenido de carga orgánica, DQO y un color turbio, se utilizó a los POA por su gran reconocimiento al degradar compuestos orgánicos de manera eficiente, para ello utilizaron 5 tipos de tratamientos, coagulación-floculación, floculación/ozono, fenton con cloruro férrico, H_2O_2 a solo un 50%, fenton/coagulación-floculación y el final fenton con ozono, los distintos tratamientos tuvieron en cuenta los parámetros de la muestra como lo que es pH, DQO, color, turbidez a un determinado tiempo, llegando así a la conclusión que la mezcla de coagulación-floculación/ ozono tuvo un rendimiento óptimo ya que logró remover un 69% para DQO, 95,5% para el color.
- En la siguiente investigación de Ushani (12), se hizo una revisión de literatura respecto a los radicales sulfatos con el objetivo de determinar la influencia en contaminantes emergentes, iniciando desde su respectiva activación debido a sus interesantes características, para ello en su metodología hicieron una revisión de estos radicales de sulfato como podían ser utilizados para el tratamiento de agua y suelo, teniendo como resultados que los radicales sulfato pueden degradar diferentes contaminantes como lo que son pesticidas ,colorantes, sustancias orgánicas y además un nuevo tratamiento para lodos activados residuales, pero que aún se debe seguir con una investigación más profunda para promover esta implementación que es de gran escala.

2.1.2. Antecedentes nacionales

- Según Otiniano (13) en su tesis se propuso determinar el tiempo de agitación y el volumen óptimo del peróxido de hidrógeno a un 50% de PTAR de la empresa Consorcio Minero Horizonte que requiere para una alta y eficiente degradación de sus efluentes cianurados en su metodología utilizó 4 ensayos con diversos ml de peróxido de hidrógeno las cuales fueron 0.5, 1, 1.5 y 2 respectivamente a distintas condiciones, manteniendo un pH en un rango entre 10.5 a 11.5, pues estos efluentes, contienen elementos como cianuro de sodio, compuestos de cianuro de una alta solubilidad, tiocianatos que son potencialmente tóxicos y son persistentes, existen varias alternativas para tratar aguas cianuradas como el hipoclorito de sodio ($NaClO$), sin embargo, el uso de H_2O_2 acelera de una manera significativa la cinética de extracción, este gran agente oxidante y muy utilizado en los últimos años se le considera prometedor por su gran impacto de degradar contaminantes, es bastante utilizado en procesos heterogéneos para el tratamiento de aguas.
- Según Machaca (14) en su tesis estudió la factibilidad de la tecnología de oxidación avanzada y fotocátalisis solar como una solución alternativa para remoción de cianuro que se encuentra en aguas residuales a causa de una industria minera metalúrgica llamada Centro Minero Corporación Minera Ananea S.A que genera estos residuos del contaminante, en la Universidad Nacional de Altiplano ubicada en Puno, donde se trabajó con 3 métodos de tratamientos los cuales fueron como agente oxidante heterogénea peróxido de hidrógeno (H_2O_2), proceso de fotocátalisis radiación UV solar y sulfato ferroso ($FeSO_4$), y obtuvo resultados eficientes, se logró remover de una cantidad de 1806.60 mg/L hasta 266 mg/L, lo cual fue óptimo calculando un 85.28% utilizando a este agente oxidante heterogénea en un total aproximado de 120 minutos y en una segunda prueba se logró remover de 1806.60mg/L hasta 1265.45 mg/L, calculando un 29.95% utilizando a este agente oxidante solo sulfato ferroso, lo cual no fue tan eficaz en el mismo tiempo que la primera prueba, y finalmente en la tercera prueba se logró remover de la misma cantidad inicial hasta 1695.55%, un 6.15% se podría decir el menos eficiente de estos 3 métodos en el mismo tiempo establecido.
- Según Delgado (15) realizó un estudio de investigación donde busca determinar la el nivel de degradación de compuestos orgánica recalcitrante evaluando sus concentraciones (DQO) y la decoloración de tintes con los POA usando energía foto-fenton en función al pH y su temperatura con los oxidantes H_2O_2 y O_3 , obteniendo buenos resultados de remoción de DQO reduciéndola un 75.68% y regulando su pH, asimismo, un rendimiento de remoción eficiente para la remoción de la decoloración de tinte textil en un 95.44% concluyendo que los POA son tecnologías que ganan campo en los sistemas de tratamiento, los POA han sido utilizados como una opción muy eficiente para las aguas residuales industriales, enfocándose en compuestos no biodegradables, en un estudio de tratamiento de industria textil, la mezcla del peróxido de hidrogeno y el ozono son eficientes agentes oxidantes con altas capacidades de remover DQO además de tener la capacidad de regular el pH, altamente eficientes en aguas textiles.

- Según Garay (16) en su tesis de investigación realizada en Cajamarca, evaluó la remoción de cobre y cianuro de sodio con el agente oxidante peróxido de hidrógeno, sulfato de cobre, sulfhidrato de sodio de los efluentes que provenían de empresas mineras productores de oro y plata. Para el tratamiento de estos efluentes contaminados se implementó a la salida de poza donde hay más descarga, con una planta de tratamiento de capacidad de $120m^3/hora$, para la metodología se tomó muestras para realizar sus características química de estos efluentes de lixiviación, después de 75 horas de realizar el tratamiento en 8 días de un discontinuo tratamiento, evaluaron a los reactivos mencionados, calculando a cada uno de ellos su nivel de eficiencia, de la misma manera con la remoción de cianuro de sodio y cobre, y los resultado finalmente fueron muy eficaces y óptimos con un 99.9% de eficiencia en cuanto a la remoción de cianuro de sodio y un 89.97% de remoción a cobre.
- Según Eitelio (17) en su siguiente investigación tiene determinó el efecto del uso de ozono como agente oxidante en las concentraciones de los metales que se encuentran disueltos en el río Hualgayoc que se encuentra en el departamento de Cajamarca, que son provenientes de industrias mineras formales e informales, los llamados “pasivos ambientales” afectando a la población y cuerpos hídricos, haciendo un estudio de estos metales encontrados en el río Hualgayoc, , se obtuvo distintos tipos de metales como Mn, Fe y Zn con altas concentraciones y realizando una comparación con el ECA dichos contaminante sobrepasan la categoría 3 de aguas (bebida de animales y riego de vegetales), evaluando el efecto de la aplicación del ozono se determinó un pH óptimo de 8 en un tiempo de 11.6 minutos para disminuir desde 14.6 mg/L a 0.2 mg/L de Mn, disminuyendo sus concentraciones hasta que se llegue a cumplir con los estándares de calidad ambiental. El efecto de uso de ozono es altamente eficaz para reducción de contaminantes disueltos, que pueden brindar y asegurar la calidad del agua debido a sus grandes propiedades que lo permiten.
- Según Enrique (18) en su tesis realizado en Cajamarca, tuvo como objetivo evaluar que tanta es la optimización de la eliminación de los metales disueltos como el CN con el uso de tratamientos combinados de POAs como el H_2O_2 , en el tratamiento de planta metalúrgica, se realizó una comparación con los LMP para llegar a determinar la eficacia de remoción de estos metales pesados (arsénico, mercurio y cobre), se utilizó la metodología donde hubo una medición de la concentración de éstos de los efluentes contaminados antes de cualquier tratamiento y luego se hizo una comparación con los resultados obtenidos postratamiento mediante filtración de osmosis inversa, llegando así al resultado, se muestra que la combinación de ambos tratamientos se consigue una mejor eficiencia: 100% de remoción de CN y un 100% en mercurio, cobre y arsénico.
- Según Mendoza (19) utilizó uno de los POA la foto-degradación en aguas residuales con presencia de detergentes, utilizando 2 POA, un sistema de UV/TiO_2 en un reactor para la foto-degradación de un detergente comercial, con una concentración inicial de DQO 840mg/L , y dos sistemas de fotocatalisis $UV/TiO_2 /H_2O_2$, el dióxido

de titanio tiene un costo relativamente bajo y debe ser mencionado en la actividad catalítica Y UV/Fe (II) H_2O_2 , concluyendo así que éstos son capaces de degradar hasta un 99.87% y 99.77% correspondientemente al estudio de factibilidad de aplicación de POA como una alternativa de solución a la remoción de cianuro de aguas residuales en una industria minera metalúrgica que evaluó al agente oxidante – H_2O_2 Peróxido de hidrógeno, fotocátalisis / radiación UV solar y sulfato ferroso ($FeSO_4$) . La fotocátalisis como uno de los POA ganó una gran atención son más utilizados para la eliminación de contaminantes del ambiente acuoso bajo UV

- Según Farfán (20) realizó un estudio con el objetivo de tratar las aguas residuales de una empresa farmacéutica con los POA, utilizando el H_2O_2 y Ozono, teniendo en cuenta sus parámetros del efluente como DBO, DQO, aceites y grasas, SST, pH y su temperatura, aplicando diferentes ml de cada dosis, dejando que estos oxidantes puedan actuar en diferentes tiempos y ver de qué manera estaba influyendo además de temperaturas diferentes para determinar a cual de ellas es más factible de degradar dichos contaminantes, y puedan desecharse al alcantarillado y no exceder los valores máximos admisibles (VMA), los resultados fueron óptimos para reducir dichos contaminantes con la mezcla de ambos oxidantes.
- Según un estudio realizado por Anaya (21) utilizaron POA fenton y H_2O_2 /UV, para tratar AR con colorantes, provenientes de industria textil, pues se sabe que al utilizar fenton un proceso costoso pero altamente eficiente, realizando las dos pruebas se obtuvo los resultados que con el H_2O_2 /UV consiguió decolorar al 100% en un tiempo de 40 minutos con un pH bajo, sin embargo; en el caso de fenton, se logró decolorar un 100% en 30 minutos de exposición a UV. Estos procesos son muy prometedores en el ámbito de tratamiento de aguas, debido a que no se necesita de ningún otro tratamiento para lograr reducir sus contaminantes en su totalidad del agua residual.
- El siguiente trabajo realizado por Huanca (22) analizó los POA para tratar aguas residuales de origen industrial caracterizadas con distintos tipos de contaminantes a diferentes grados de concentración provenientes de una universidad utilizando fotocátalisis heterogénea, para su metodología tomaron una muestra de 24L, continuando a regular el pH para que el tratamiento fuera más eficiente, agregaron agentes oxidantes como el H_2O_2 , TiO_2 a dosis diferentes, tomando en cuenta sus parámetros como el DQO que fue evaluado antes y después del tratamiento para su análisis y un determinado tiempo, obteniendo como resultado que una degradación de 62.75% con H_2O_2 con fotocátalisis UV.

2.2. Bases teóricas

2.2.1. Teoría química

2.2.1.1. Procesos de Oxidación Avanzada

Los POA son técnicas prometedoras que se puede usar como procesos alternativos en el tratamiento de aguas residuales, éstos operan a través de los radicales libres, hay muchos tipos de radicales oxidantes, agentes emisores como ozono, ultravioleta (UV), productos químicos (persulfato, peróxido de hidrógeno, permanganato) se encuentran bajo un amplio interés de muchos investigadores, son nombradas por sus siglas en el idioma ingles AOPs (Advanced Oxidation Processes). Estos procesos de oxidación avanzada, llamados procesos físico-químicos que tienen la capacidad de llegar a realizar diversos cambios en la estructura de los contaminantes, son muy útiles para los desechos de alta toxicidad y contaminantes no biodegradables, se caracteriza por ser una tecnología emergente para tratamientos de aguas residuales (23)

Se pueden clasificar:

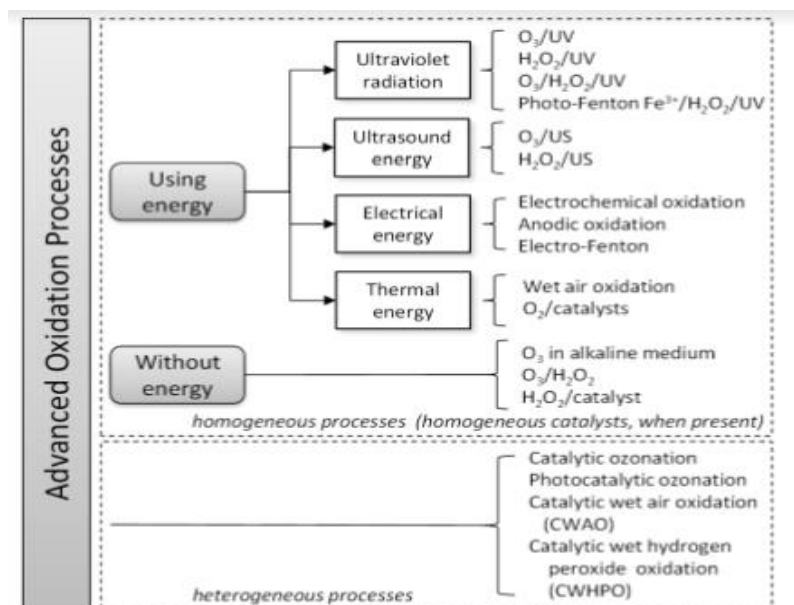
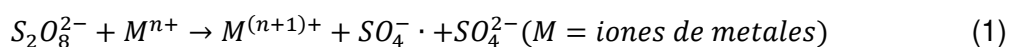


Figura 1: Clasificación de procesos de oxidación avanzada
Fuente: Duprez y Cavani (24)

2.2.1.2. Radicales Sulfato ($SO_4^- \cdot$)

El proceso de oxidación avanzada basado en radicales sulfatos (SR-AOP) se considera una tecnología prometedora para la remediación del agua y el suelo, donde los radicales sulfatos se generan principalmente in situ a partir de diversas sales de peroxidisulfato $S_2O_8^{2-}$ (PS) y peroximonosulfato HSO_5^- (PMS), además tiene una vida media de 30 a 40 μs , que es comparativamente más alto que el radical OH \cdot con una vida media de 1 μs , puede oxidar micro contaminantes en un rango de 106 a 109 m/s. (25). Los compuestos de persulfatos como (PMS), (PS) y sulfatos han captado interés por su capacidad altamente oxidante y ha captado interés para su aplicación en procesos de oxidación avanzada en tratamiento de aguas residuales (12). Los radicales libres de persulfato y sulfato han sido estudiados recientemente en aplicaciones de tratamiento de aguas residuales con compuestos orgánicos altamente resilientes. Se ha encontrado que por ejemplo pueden degradar efectivamente compuestos orgánicos como pesticidas (ej. Clorotriazina, atrazina, propazina, y terbutilazina) y otros altamente resilientes



La aplicación de $SO_4^- \cdot$ en el tratamiento de aguas residuales municipales data de los años 1980s (12). El $SO_4^- \cdot$ es altamente estable y su aplicación se expandió a tratamiento in-situ de aguas y suelos. En presencia de materia orgánica (RH) ocurren las siguientes reacciones (Eq. 2 y 3)



$SO_4^- \cdot$ reacciona con la materia orgánica RH y produce radicales orgánicos $RH \cdot$ el cual también acelera la descomposición del persulfato en más radicales $SO_4^- \cdot$.

El aumento de la temperatura es uno de los enfoques para aumentar la composición del persulfato, $SO_4^- \cdot$ reactivo, a temperaturas ambientes la cinética de radical sulfato se vuelve lenta mientras reacciona con varios orgánicos S_2O_8 , los radicales sulfatos pueden activarse fácilmente mediante calor, luz ultravioleta UV o algún metal de transición y el uso de Fe^{2+} como activador para descomponer persulfatos para $SO_4^- \cdot$, la oxidación es una técnica en perspectiva para la degradación de contaminantes orgánicos, tratamiento de lodos, lodos en términos de deshidratación y desintegración de lodo (26).

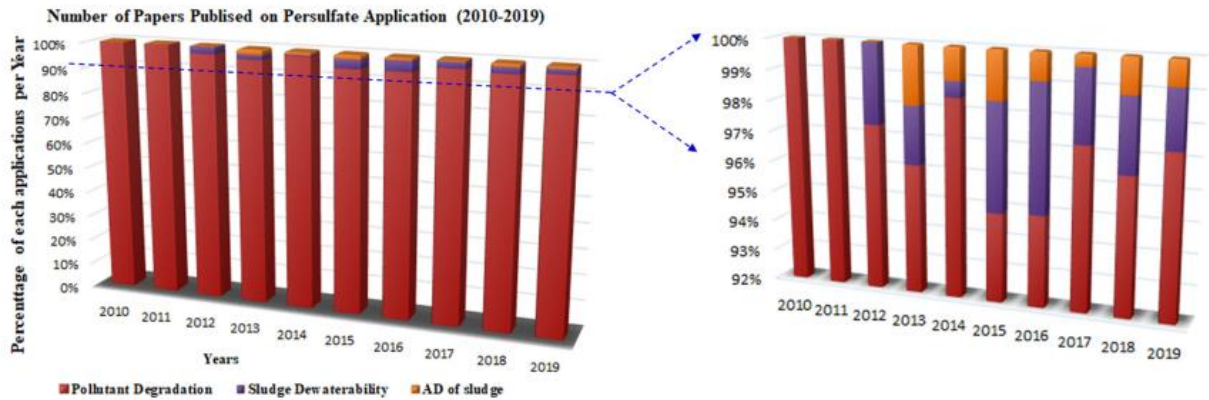
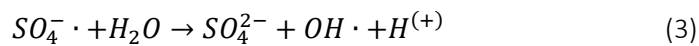
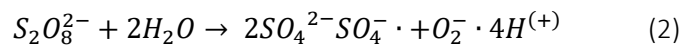


Figura 2: Estudio bibliométrico de Web of Science con los temas sobre la aplicación de persulfato en los últimos años: (a) degradación de contaminantes, (b) deshidratación de lodos y (c)

Fuente: Estudio bibliométrico de Web of Science

Como se puede observar en la figura 2, este proceso está tomando nuevos caminos en la remediación de nuestros ecosistemas, las técnicas de aplicación de $SO_4^- \cdot$ (radicales de sulfato) son eficientes, por ello es necesario indagar más acerca de este radical y su impacto para que pueda ser recomendado y comparado con análisis de costes como lo que es evaluar la accesibilidad de éste, y la práctica del proceso de oxidación de persulfato.

Los iones persulfato en condiciones ácidas tienen mayor efectividad oxidante. Además de generar radicales sulfatos, también liberan radicales de oxígeno $O_2^- \cdot$. La presencia de iones sulfatos implica un subsecuente proceso de oxidación y generación de radiales $OH \cdot$.



2.2.1.3. Los radicales de persulfato y sulfato en presencia de metales de transición

Los procesos de oxidación de persulfato son activados también por numerosos metales de transición como Cu^{2+} , Ni^{2+} , Co^{3+} , debido a que estas especies pueden actuar como donantes de electrones para generar radicales sulfato, basado en el mecanismo reducción, pues la activación de PDS Y PMS tiene relevancia con el potencial redox del metal, están clasificados como activador homogéneo y heterogéneo, para casos homogéneos se especifica el ion cobalto efectivo para la activación de peroximonosulfato PMS, el proceso de oxidación del persulfato tiene un impacto importante en la deshidratación del lodo en un amplio rango de pH de 3 – 8. , los radicales sulfatos pueden activarse fácilmente mediante calor, luz ultravioleta UV o algún metal de transición y el uso de Fe^{2+} como activador para descomponer persulfatos para $SO_4^- \cdot$, la oxidación es una técnica en perspectiva para la degradación de contaminantes orgánicos, tratamiento de lodos, lodos en términos de deshidratación y desintegración de lodo (12) El aumento de la temperatura es uno de los enfoques para aumentar la composición de persulfato en $SO_4^- \cdot$, reactivo

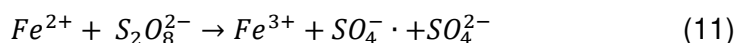
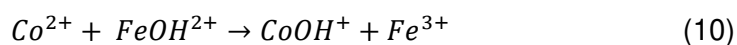
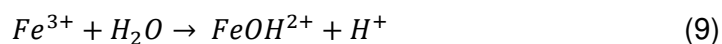
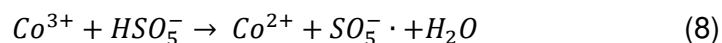
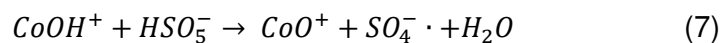
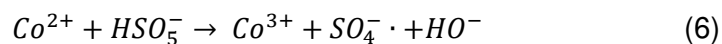
Activación del persulfato:

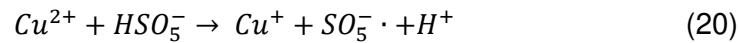
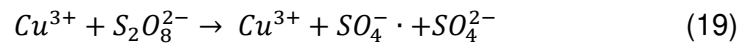
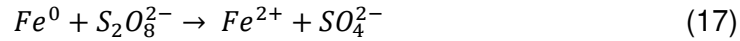
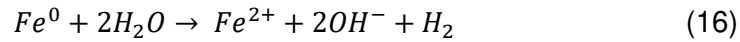
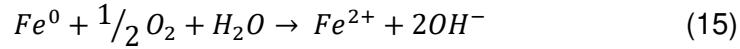
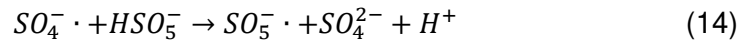
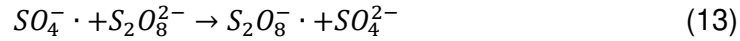
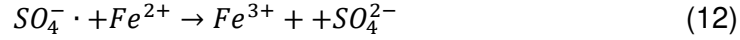
El PS y el PMS activados tienen el potencial de degradar los contaminantes emergentes en el suelo, las aguas subterráneas, el agua y las aguas residuales (27). Entre los diversos métodos de activación que se presentan a continuación:

Tabla 2: Especies oxidativas intermedias generadas por diferentes métodos de activación

Método activado	Especies oxidantes	
	PS ($S_2O_8^{2-}$)	PMS (HSO_5^-)
Calor	$SO_4^{\cdot -}$	$SO_4^{\cdot -}$, HO^{\cdot}
Álcali	$SO_4^{\cdot -}$	$O_2^{\cdot -}$, 1O_2
Radiación	$SO_4^{\cdot -}$	$SO_4^{\cdot -}$, HO^{\cdot}
Metal de transición	$SO_4^{\cdot -}$	$SO_4^{\cdot -}$, $SO_5^{\cdot -}$
Materiales carbonosos	$SO_4^{\cdot -}$	$SO_4^{\cdot -}$
Fenol / quinonas	$SO_4^{\cdot -}$	1O_2

Fuente: (Wang, 2008)





En caso de activadores metálicos homogéneos el ion cobalto se especifica como eficaz para la activación de PMS, La generación de $CoOH^+$ se considera la más activa especie para activar el PMS (Eq. 7), pero el paso de limitación de la velocidad es una formación de Co^{2+} mediante la reducción de Co^{3+} , el cual es una fase para retener las reacciones a una dosis baja de cobalto (Eq.8).

En la (Eq.9) se muestra una mezcla heterogénea cobalto-ferrita ($CoFe_2O_4$) es superior a otras formas como Co_3O_4 , el cobalto-ferrita es divalente y abruma significativamente la lixiviación del cobalto debido a la fuerte interacción que tiene $Fe - Co$, mientras que la formación de $CoOH^-$ es excelente en existencia de Fe , gran paso para la activación del PMS como se muestra en la (Eq.10)

2.2.1.4. Termodinámica y cinética

Es la energía interna de un sistema a la energía total que incluye la cinética y el potencial de las partículas que lo componen, estudiando los sistemas en situaciones de equilibrio, que tienden a evolucionar, intercambian energía ya sea en forma de calor o trabajo con el resto del universo (28), la energía no se puede crear ni destruir el cual es llamado como conservación de la energía, cuando un sistema intercambia calor, su energía interna no está siendo modificada. La energía interna de una sustancia dependerá siempre de su estado físico (sólido, gaseoso o líquido), temperatura y de la presión que está siendo experimentada.

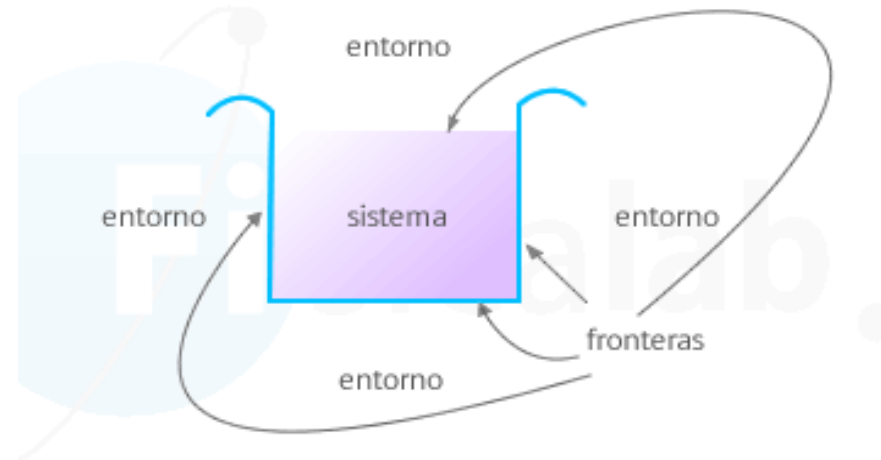


Figura 3: Componentes de un sistema termodinámico

Fuente: (29)

Entalpía: Es una propiedad de estado (ΔH), es la cantidad de calor que un sistema termodinámico puede liberar o absorber del entorno en el que se pueda encontrar, estando en una presión que no cambia, este proceso o transformación puede ser clasificado en dos tipos (30):

- Endotérmicos: Son aquellos que absorben el calor o energía del entorno en el que se encuentra ($\Delta H > 0$).
- Exotérmicos: Son aquellos que están liberando calor o energía, es decir la energía es expulsada del sistema hacia el entorno donde se encuentran ($\Delta H < 0$).

Entropía: Es una magnitud que tiene relación como la temperatura, volumen, masa siendo representado como (ΔS) para que se pueda explicar el porqué de procesos físicos están sucediendo de una manera determinada, son encargadas de medir el grado de orden de un sistema. (30).

- $\Delta S < 0$; Entonces el sistema se vuelve más ordenado
- $\Delta S > 0$; Entonces el sistema se vuelve desordenado

Energía libre de Gibbs: Este proceso solo sucede sin añadir energía, de manera espontánea, si aumenta la entropía del universo $\Delta S_{\text{universo}} = \Delta S_{\text{sistema}} + \Delta S_{\text{alrededores}} > 0$, dejándolo sin cambios siendo considerada como segunda ley de la termodinámica (30).

$$\Delta G^{\circ} = \Delta H^{\circ} - T\Delta S^{\circ}$$

2.2.1.5. Efluentes mineros y aguas de mina

La minería cumple un rol fundamental en todos los países del mundo, ya que constituyen un gran desarrollo económico, pero también es un generador de residuos, las cuales sino son adecuadamente tratadas pueden generar impactos negativos al medio ambiente, estos efluentes mineros son característicos de cada industria, estas son diferentes de acuerdo a las actividades que producen dichas industrias y este es uno de los motivos por la cual estas características de las AR están variando constantemente y varían los tratamientos para la purificación (31). El vertimiento de efluentes podría alterar el ecosistema de los cuerpos hídricos si éste tiene un valor muy alejado de lo natural.

Categorías de drenajes de mina:

Los desechos de minas tienen un peligro para el medio ambiente, el tipo de drenaje de mina es indispensable para realizar investigación detallada de acuerdo a condiciones del medio, una correcta caracterización de efluentes de mina, donde se puedan realizar muestreos de agua para su eventual análisis y llegar a las manifestaciones de metales pesados que contiene, recurriendo a sus parámetros físico-químicos. Pueden clasificarse en grandes grupos drenajes alcalinos o drenajes ácidos. White en 1968 clasificó las aguas de acuerdo al pH agrupándolos en seis clasificaciones:

Tabla 3: Clasificación de aguas residuales según el pH

CLASE	pH
Muy ácidas	1.4 - 4.5
Ligeramente ácidas	5.0 - 7.0
Neutras	7.0 - 8.5
Alcalinas	7.5 - 11.0
Muy salinas	6.0 - 9.0

Fuente: Delgado (32)

2.2.1.6. Ciclo de agua

El ciclo del agua es un movimiento continuo del agua sobre, arriba, y debajo de la superficie de la Tierra, el agua se va moviendo de los océanos a la atmósfera por medio de la evaporación, el proceso por el cual el agua cambia de un líquido a un gas, el agua regresa a la superficie terrestre a través de la lluvia y nieve; para luego sumergirse en el suelo o fluir hacia los arroyos y ríos. Finalmente, el agua regresa al océano donde el ciclo comienza de nuevo, durante su recorrido, el agua va cambiando de estado entre sólido (hielo), líquido (agua) y gas (vapor de agua) a este proceso se le es llamado como el ciclo hidrológico (33) , los conceptos básicos de hidrología, especialmente la hidrología del subsuelo, son la clave para el desarrollo modelos de flujo de agua subterránea y transporte de solutos, los cuales se ven profundamente afectados por cambios en los patrones de drenaje que surgen de la excavación de vacíos de minas.

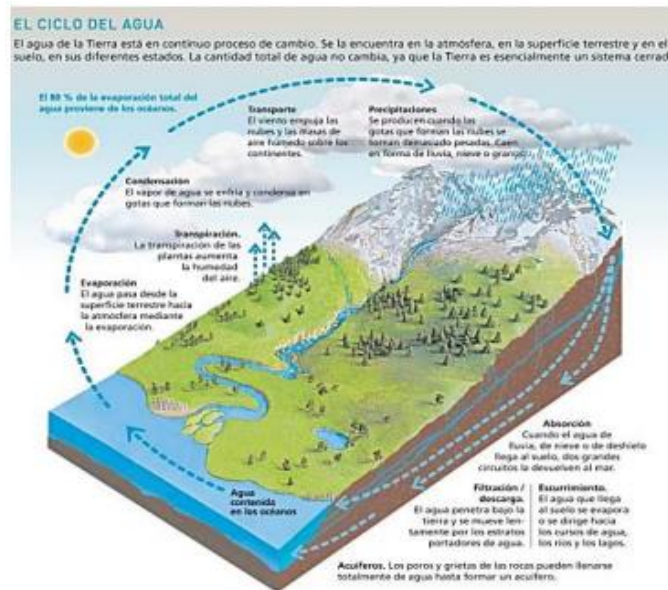


Figura 4: Ciclo del agua
Fuente: USGS, Servicio Geológico de Estados Unidos (34)

Aguas de mina

El proceso de minería implica extraer y recuperar minerales o metales de la tierra, la roca minada, contiene concentraciones económicas de minerales o metales que se conoce como mena, también se produce en explotaciones subterráneas los cuales son productos de aguas subterráneas que pasan por actividades mineras, obteniéndose con alta concentración en sulfatos, metales, con características de altos contenidos de sulfatos que llegan a afectar los cuerpos hídricos (35). El agua tiene un rol importante en las operaciones mineras, ya que está involucrado en numerosos pasos operativos, como tal, el agua puede servir como consumible en procesos mineros y pueden verse afectados cuando se generan corrientes de desechos, las siguientes operaciones tienen lugar en lugares como (36)

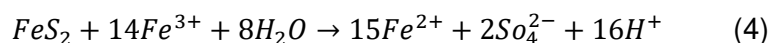
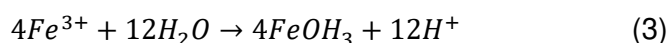
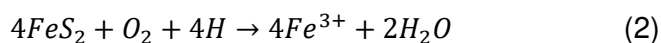
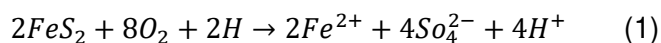
- **Operaciones mineras:** Las operaciones dentro de una mina implican la extracción de mineral mediante técnicas de minería superficial o subterránea.
- **Pasos de procesamiento:** Implica que el mineral tenga un tratamiento para recuperar minerales o metales valiosos.
- **Transporte y manipulación de minerales y productos:** Implica la deshidratación, almacenamiento y transporte de minerales y productos minerales o metálicos dentro de la mina y al mercado.
- **Transporte y eliminación de corrientes de desechos:** Transfiere las corrientes de desechos de la mina a ubicaciones de eliminación aprobadas.

2.2.1.7. Drenajes ácidos de mina:

La meteorización de los relaves de las minas de carbón, que contienen pirita de hierro (FeS_2) u otro sulfuro de minerales produce una escorrentía ácida que tiene un impacto adverso en el medio ambiente. Esta escorrentía ácida se conoce comúnmente como Drenaje ácido de minas (DAM) o drenaje ácido de rocas (DAR). A los efectos, esta escorrentía ácida de la mina se denomina DAM, debido a su naturaleza ácida, puede lixiviar metales como hierro, manganeso, aluminio, plomo, arsénico y zinc de la roca estéril. En áreas con un historial de minería de carbón, los famosos DAM pueden perjudicar la calidad de las aguas subterráneas y/o superficiales (37).

La formación de DAM es una consecuencia general de la exposición de pirita que contiene roca en oxígeno y agua, lo que lleva a la oxidación de la pirita. La química de la oxidación de la pirita, la producción de iones ferrosos (Fe^{2+}) y posteriormente iones férricos (Fe^{3+}), es muy complejo y esta complejidad dificulta el diseño de opciones de tratamiento de agua eficaces considerablemente. La acidez en DAM está compuesta por acidez mineral (hierro, aluminio, manganeso y otros metales según el entorno geológico específico y el sulfuro metálico) y acidez de iones de hidrógeno.

La formación de DAM durante las actividades mineras son las siguientes:



Estas reacciones revelan la cantidad de ácido (H^+ iones) son producidos durante la oxidación de pirita. La oxidación de sulfuro a sulfato solubiliza el hierro ferroso que conduce a la oxidación a hierro férrico aceleran esta reacción en condiciones para un pH bajo

2.2.1.8. Sulfatos en aguas de mina y efluentes mineros

Las aguas con concentración de sulfatos tienen un origen natural, las rocas que contienen minerales sulfatados suelen ser extraídos de minas subterráneas o a cielo abierto, éstos reaccionan con aire y agua para formar dicho ácido sulfúrico, los sulfatos son también un subproducto de la neutralización de aguas ácidas, pues el ácido H^+ reacciona con OH^- del reactivo alcalino, en cambio el So_4^{2-} del ácido sulfúrico queda en solución elevando la concentración de sulfatos en el agua neutra. Esta causa puede permanecer en el tiempo durante mucho tiempo, hasta que los sulfatos logren ser extraídos completamente (38). Antes de cualquier descarga de estos efluentes en cuerpos hídricos, deben someterse a un tratamiento adecuado y eficaz para la eventual eliminación de elementos que contaminan.

Tabla 4: Los sulfuros metálicos responsables de la formación de DAM, durante actividades mineras

FeS_2	Pirita
---------	--------

FeS_2	Marcasita
Fe_xS_x	Pirrotita
Cu_2S	Calcosita
CuS	Covellita
$CuFeS_2$	Calcopirita
MoS_2	Molibenito
NiS	Millerita
PbS	Galena
ZnS	Esfalerita

Fuente: Red internacional para la prevención del ácido, 2005

El contenido de sulfatos no presenta problema de potabilidad a las aguas de consumo, pero si hay contenidos mayores a 250 a 300mg/l estos pueden traer consigo efectos negativos para la salud humana, como los sulfatos de magnesio y sodio que actúa como un laxante para ello debe existir los tratamientos adecuados para éstos (39).

2.2.1.9. Características de los procesos de tratamiento para aguas con contenido de sulfatos:

Las características de los diferentes procesos de tratamiento de sulfatos se describen en términos de propiedades, el impacto que se genera en la calidad del agua. Además, el monitoreo y mantenimiento necesarios para sostener un buen desempeño del tratamiento con sulfato en aguas que se presentan en los procesos. Si es relevante, las modificaciones de diseño de los procesos de tratamiento son también incluido en su descripción (40)

- Tratamiento químico con precipitación mineral
- Membranas
- Intercambio de iones
- Eliminación biológica de sulfatos.

Variedades de investigaciones anteriores han demostrado que mientras que la piedra caliza ($CaCO_3$) y la $Cal(CaO)$ se utilizan para la neutralización y eliminación de metales de DAM, estos dos productos químicos también tienen un gran potencial para la eliminación de sulfatos del agua rica en sulfatos, a través del yeso ($CaSO_4$) cristalización. Sin embargo, una serie de inconvenientes, como la imposibilidad de eliminar el sulfato a niveles bajos sin la adición de un exceso de productos químicos ha llevado a la exploración de otras sustancias químicas para la posible eliminación de sulfatos de drenaje ácido de mina (DAM) como el Bario sales tales como $Ba(OH)_2$, BaS y $BaCO_3$ también se pueden emplear para estequiometría eliminando el sulfato del agua rica en sulfato, mediante precipitación con $BaSO_4$. El uso de estos

productos químicos ofrece una ventaja adicional de reciclabilidad, a través de la reducción térmica del $BaSO_4$ precipitado a BaS , en presencia de un reactivo reductor.

Tratamiento con sales de Bario

Se pueden usar varias sales de bario (Como, $BaCO_3$, $Ba(OH)_2$ y BaS) para eliminar sulfato disuelto del agua de la mina por precipitación como sulfato de bario. Comparado a las otras sales de bario, el sulfuro de bario tiene distintas ventajas (discutidas a continuación), lo que la convierte en la sal de bario más adecuada para eliminar el sulfato del agua de mina.

El proceso de tratamiento BaS (sulfuro de bario) optimiza el proceso y establece la viabilidad técnica y económica respecto a los tratamientos de aguas con alta concentración de sulfato disuelto, este proceso de tratamiento con sulfuro de bario consta de tres etapas:

1. La primera etapa que consta de la eliminación de sulfato
2. Una etapa de extracción de H_2S (ácido sulfhídrico) (g)
3. Un ablandamiento de agua.

La etapa de eliminación de sulfato implica la adición de BaS (sulfuro de bario) al agua de alimentación lo que resulta la precipitación de $BaSO_4$ (Sulfato de bario) (s); Se agrega un floculante sintético para mejorar la velocidad de sedimentación de $BaSO_4$ (s) en el sedimentador. Antes de la reducción de $BaSO_4$ (s) a BaS , se añade carbón al lodo de sulfato de bario en una proporción molar de 3: 1 (C: $BaSO_4$ = 3: 1) y el lodo se deshidrata hasta aproximadamente un 70% de sólidos.

Con una reducción térmica entre $1000^\circ C$ y $1100^\circ C$ en un horno rotatorio convierte el $BaSO_4$ (s) en BaS (s). El CO_2 (g) producido durante la reducción térmica se puede utilizar en la etapa de decapado de H_2S (g). La (s) BaS formada por reducción térmica es reciclado (después de disolución en agua) en la fase de eliminación de sulfato. En la etapa de extracción de H_2S (g), el desbordamiento del sedimentador de $BaSO_4$ (s), que es alto en calcio y sulfuro disueltos, se somete a remoción con CO_2 (g) en un reactor de lecho. Añadiendo CO_2 (g) a velocidades de flujo de 0.36-4.5 L / min durante 30 min, 85% -Se eliminan el 96% de los sulfuros. El H_2S (g) extraído del desbordamiento de los colonos se puede convertir a S (s) o $NaHS$.

-Membranas: La tecnología membrana incluye osmosis inversa el cual es un sistema que elimina una gran parte de sustancias disueltas en el agua, entre ellas el sulfato, forzándola a través de una hoja plástica, que alcanza a llegar a remover del 93% al 99% de contenido de sulfato en agua potable (29).

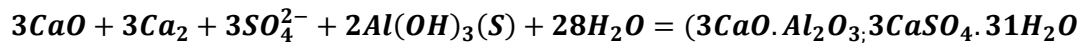
-Intercambio Iónico: Método usado y conocido para la remoción de contenido de sulfato en aguas industriales, proceso químico donde los iones disueltos del sulfato presente en el agua intercambian con otros iones como cloruro, que se encuentra la resina, y cuando ésta se encuentre llena de sulfato, deberá ser regenerada con soluciones salinas.

Los procesos de tratamiento que utilizan intercambio iónico son una buena alternativa para procesos de tratamiento de membranas si las aguas de la mina

de incrustación requieren tratamiento La frecuencia de la regeneración de resina de iones se puede reducir mediante el tratamiento previo del agua de la mina (Por ejemplo: proceso de la caliza / cal). Similar al agua producida en los procesos de tratamiento de membranas, el agua producida por el proceso puede venderse como agua potable

En la eliminación de contenido de sulfatos de aguas de mina ha surgido una nueva solución tecnológica que consta en la combinación la nanofiltración y precipitación química, el cual ha generado mayor interés en el mundo, fue desarrollado por Veolia Water Technologies (41) , permite una propuesta ante una la ley normativa que con el paso del tiempo cada vez es más estricta en otros países más no en el Perú, este proceso ha logrado reducir el contenido de sulfatos debajo de 50mg/L, lo cual es altamente eficiente y adecuado para un reuso o vertimiento adecuado.

Formación de la etringita:



Regeneración del hidróxido de aluminio y de la solución saturada de sulfato de calcio.

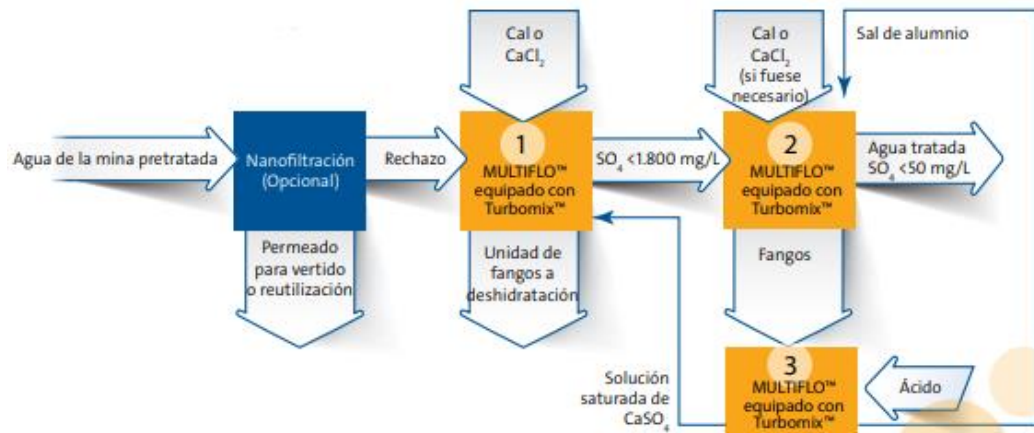
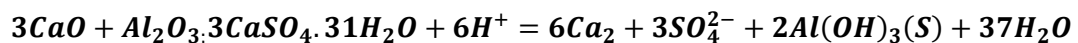


Figura 5: Diagrama de flujo de proceso combinado para eliminación de sulfatos Fuente: Veolia Water Technologie

2.2.2. Marco legal

En el año 2010 se aprobó los Límites Máximos Permisibles para la descarga de efluentes líquidos de actividades minero – metalúrgicos (LMP), en el cual se establece distintos parámetros que caracterizan a efluentes mineros, de tal modo que si son excedidas pueden llegar a causar daños a la salud pública y al medio ambiente

Tabla 5: Límites Máximos Permisibles para la Descarga de Efluentes Líquidos de actividades minero

Parámetro	Unidad	Límite en cualquier momento	Límite para el Promedio anual
pH		6 - 9	6 - 9
Sólidos Totales en Suspensión	mg/L	50	25
Aceites y Grasas	mg/L	20	16
Cianuro Total	mg/L	1	0,8
Arsénico Total	mg/L	0,1	0,08
Cadmio Total	mg/L	0,05	0,04
Cromo Hexavalente(*)	mg/L	0,1	0,08
Cobre Total	mg/L	0,5	0,4
Hierro (Disuelto)	mg/L	2	1,6
Plomo Total	mg/L	0,2	0,16
Mercurio Total	mg/L	0,002	0,0016
Zinc Total	mg/L	1,5	1,2

Fuente: Anexo N° 01 del D.S. N° 010-2010-MINAM (42)

Agencias ambientales en muchos países han limitado el SO_4^{2-} (sulfato) en concentraciones de efluentes industriales para controlar la contaminación del agua y proteger las tuberías de agua, sin embargo, como podemos observar en la tabla de LMP para efluentes líquidos de actividades minero actualmente no se tiene dentro de los parámetros la concentración de sulfatos.

- “Ley General del Ambiente (Ley N°28611 modificada por D.L N°1055)”
- “Estándares Nacionales de Calidad Ambiental para Agua (D.S. N°015-2015 MINAM)”
- “Ley General de Minería (D.S. N°014-92-EM).”

2.3. Definición de términos básicos

- a) **Drenajes ácidos de mina:** Las aguas ácidas de minas metalíferas, formas por aire, agua y metales sulfurosos como la pirita que es un sulfuro hierro, generan gran acidez. (43)
- b) **Efluentes:** Son descargas de un contaminante líquido de algún proceso industrial o una instalación también son llamados como residuos líquidos o desechos (43)
- c) **Procesos de Oxidación Avanzada:** Estos procesos son tecnologías prometedoras que usan agentes oxidantes, para que puedan minimizar los niveles de DQO, DBO y separa los materiales orgánicos e inorgánicos. Cumplen un gran rol en las aguas residuales que contienen contaminantes tóxicos o materiales no biodegradables (23)
- d) **Oxidación:** Proceso químico en el que un átomo o molécula pierde electrones, es un proceso natural de descomposición de minerales que se da en reacciones químicas en presencia de oxígeno, por lo tanto, el número de oxidación de este aumenta algebraicamente descompone también productos químicos tales como fenoles, cianuros (43)
- e) **Radical Libre:** Átomos que presentan un electrón desapareado o impar en el orbital externo, genera una alta inestabilidad, son moléculas inestables y oxida generando más radicales libres
- f) **Aguas de mina:** Las aguas de mina tienen concentraciones de sólidos suspendidos y metales que están disueltos como Zn, Cu, As, Ni, Cd, etc con un pH que puede estar por encima o debajo de lo exigido. (44)
- g) **Aguas residuales industriales:** Éstas proceden de procesos que vienen siendo realizados en industrias y fábricas que contienen diversos contaminantes, como aceites, ácidos, grasas además de otros productos que pueden ser de origen mineral, químico, animal o vegetal.(44)
- h) **pH:** La concentración de ion H es un parámetro muy importante para las aguas residuales y naturales, si el agua no cuenta con las concentraciones de iones adecuadas puede ser difícil de tratar con algún proceso biológico (45)
- i) **Aguas Sulfatadas:** Aniones presentes en el agua, están presentes de forma natural o como consecuencia de descargas de aguas industriales, es natural cuando las rocas que contienen minerales reaccionan con el agua o aire para así formar ácido sulfúrico. (46)
- j) **LMP:** Los “Límites máximos permisibles” son medidas de concentración de sustancias que caracterizan un efluente guardando coherencia con el nivel de protección ambiental establecido que tienen como función controlar los agentes que producen estos efluentes.

CAPÍTULO III

METODOLOGÍA

3.1. Método y alcance de la investigación

3.1.1. Método

Como fundamento metodológico científico teóricamente se consideró a Hernández (47), con un enfoque cuantitativo-inductivo ya que es secuencial, con un orden riguroso, midiéndose las variables en un determinado contexto así extrayendo una serie de conclusiones. .

La metodología que se empleará incluye investigación bibliográfica, recopilación de datos históricos de casos estudio, modelo computacional de interpretación del (POA) y el efecto de radicales libres generados por POA en sulfatos de agua de mina de acuerdo a modelo computacional

3.1.2. Nivel

La investigación es de nivel descriptiva-correlacional, porque permite categorizar las variables, debido a que se busca encontrar la relación entre los POAs, factibles de implementación en agua de mina, la generación de radicales y la interacción con el contenido sulfatos que se encuentran disueltos en el agua

3.2. Diseño de la Investigación

3.2.1. Diseño no experimental

3.2.1.1. Diseño no experimental - Transversal

El diseño es transversal- no experimental (47), descriptivo, debido a que no hay alguna manipulación de variables ya que solo se puede observar cual es dicho comportamiento de ambas variables que son encontradas; considera importante a las variables dependientes como sus parámetros y concentraciones con un análisis de los POAs existentes en las PTAR, el recojo de información es a través de revisiones bibliográficas en un único tiempo

3.3. Población y muestra

3.3.1. Población

La población está constituida por la data generada por el software computacional HCS(OUTOTEC) de la T° , ΔH , ΔS , ΔG .

3.3.2. Muestra

La muestra será los datos generados por el software computacional de la T° , ΔH , ΔS , ΔG por cada reacción insertada y datos de contenido de sulfato en aguas de mina ácida

3.4. Técnica e instrumentos de recolección de datos

3.4.1. Técnicas

Las técnicas empleadas en el proceso de investigación serán por observación y revisión bibliográfica, basado en ver la eficiencia los POA generando los radicales libres y su relación con el contenido de sulfatos.

3.4.2. Instrumentos

a) Análisis de contenido

Fundamentalmente de los informes obtenidos a base de revisión bibliográfica, recolección de información y datos que se constituyen en información acerca de base de investigación tales como:

- Informes
- Artículos y datos acerca de la eficiencia de Procesos de Oxidación Avanzada en aguas de mina, aguas residuales industriales, y otras publicaciones que permiten el conocimiento de este estudio
- Tesis.
- Libros acerca del tema

b)

- Hoja de cálculo Excel, el cual será utilizado para la elaboración de datos de los resultados de los análisis
- Software de simulación para el modelamiento computacional de interacción de radical libre respecto a la remoción de sulfatos HSC (OUTOTEC)

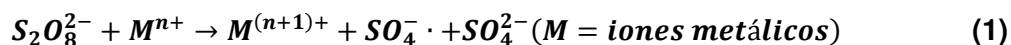
CAPÍTULO IV

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

4.1. Resultados del tratamiento y análisis de la información.

4.1.1. Resultados del persulfato y su interacción con metales.

Los radicales libres de persulfato, sulfato, su interacción con iones metálicos y metales de transición tiene relevancia para esta tesis de investigación, debido a que se busca establecer los principios de aplicación en procesos de oxidación avanzada (POA) para que pueda ser aplicado en el tratamiento de aguas de mina con contenidos metálicos (12). Los fundamentos físico-químicos que se establecen para el estudio de radicales libres de persulfatos y sulfatos en presencia de iones metálicos se describen en las siguientes reacciones:



En principio, la ecuación (1) describe la transformación de compuestos de persulfato en el agua en presencia de iones metálicos. Se observa que el ion metálico se oxida de M^{n+} a $M^{(n+1)+}$ y el persulfato se descompone en radicales libres de sulfato $SO_4^- \cdot$ y también en iones sulfatos.

Tabla 6: Reacción de la ecuación 1

S2O8(-2a) + 2Fe (+2a) = 2Fe (+3a) + 2SO4(-2a)					
Reaction Data					
T	ΔH	ΔS	ΔG	K	Log K
°C	kcal	cal/K	kcal		
0.000	-90.500	-102.095	-62.613	1.262E+050	50.101
100.000	-102.427	-139.926	-50.214	2.583E+029	29.412
200.000	-118.642	-177.814	-34.510	8.739E+015	15.941
300.000	-156.970	-250.345	-13.485	1.388E+005	5.142
400.000	-236.392	-376.977	17.370	2.291E-006	-5.640
500.000	-376.815	-570.335	64.139	7.378E-019	-18.132
600.000	-598.544	-838.906	133.947	2.953E-034	-33.530
700.000	-922.071	-1188.612	234.627	2.010E-053	-52.697
800.000	-1367.996	-1623.738	374.518	5.274E-077	-76.278
900.000	-1956.976	-2147.470	562.329	1.711E-105	-104.767
1000.000	-2709.702	-2762.242	807.047	2.820E-139	-138.550

La tabla N°6, muestra los datos de la reacción generada por el software HSC (OUTOTEC) dadas en el agua, en presencia de Fe^{2+} y la descomposición del persulfato mostrando, temperatura, entalpía, entropía y la energía de Gibbs.

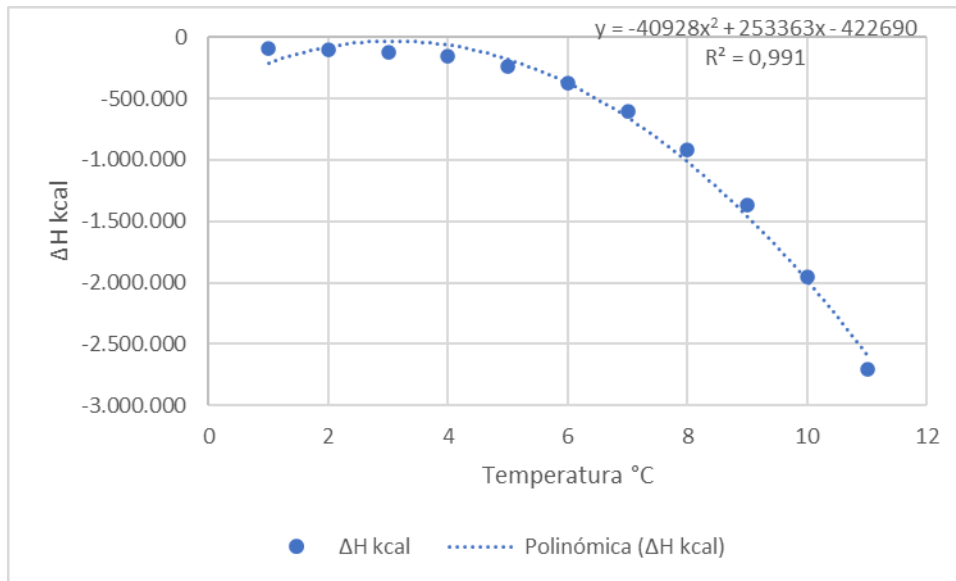


Figura 6: Reacción de la entalpía

En la figura 6, se observa los datos de la entalpía - temperatura, representando el calor liberado de la reacción (reactivos a productos), el coeficiente de correlación R^2 presenta un grado de asociación de 0.991

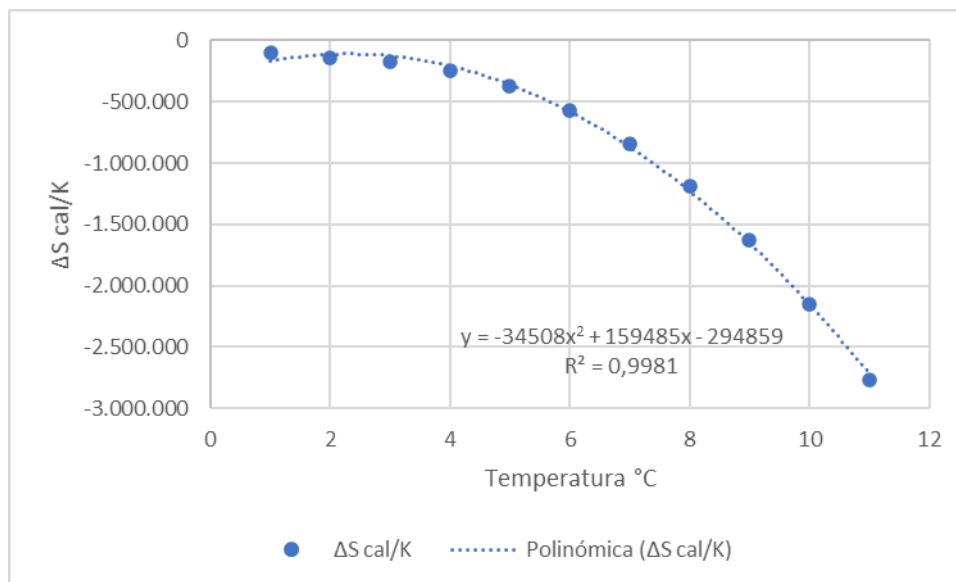


Figura 7: Reacción de la entropía

En la figura 7, se observa la reacción de la entropía, el que muestra un ΔS Cal/K negativo, indicando que el sistema es más ordenado, además se logra interpretar que a mayor temperatura tiene mayor impacto en la entalpía, respecto a la ecuación polinómica el coeficiente R^2 presenta un grado de asociación de 0.9981

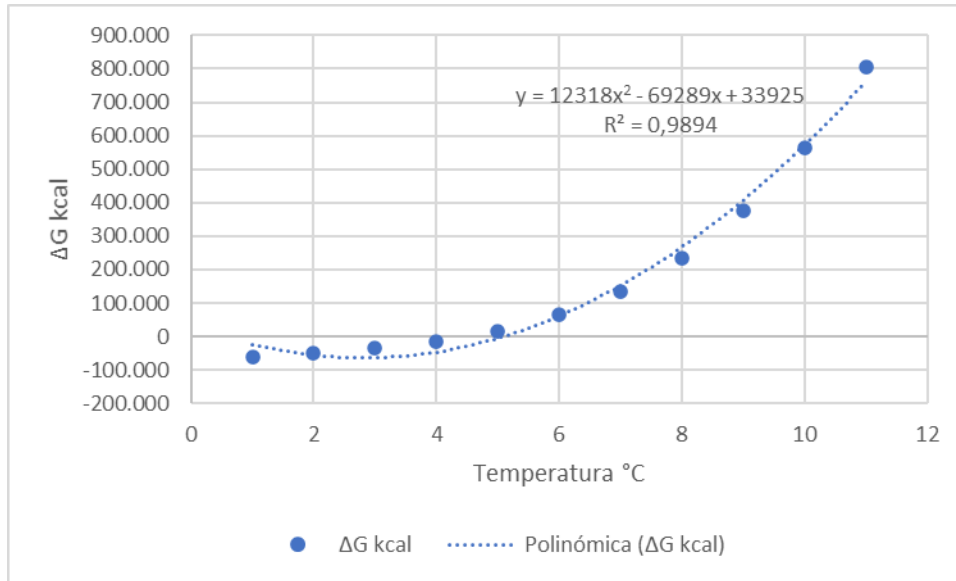


Figura 8: Energía libre de Gibbs

En la figura 8, se observa la energía libre de Gibbs, donde da a conocer que se libera energía por que $\Delta G < 0$, el cual quiere decir que la reacción exergónica y espontánea a una temperatura de 0° a 300° , respecto a la ecuación polinómica el coeficiente R^2 presenta un grado de asociación de 0.9894

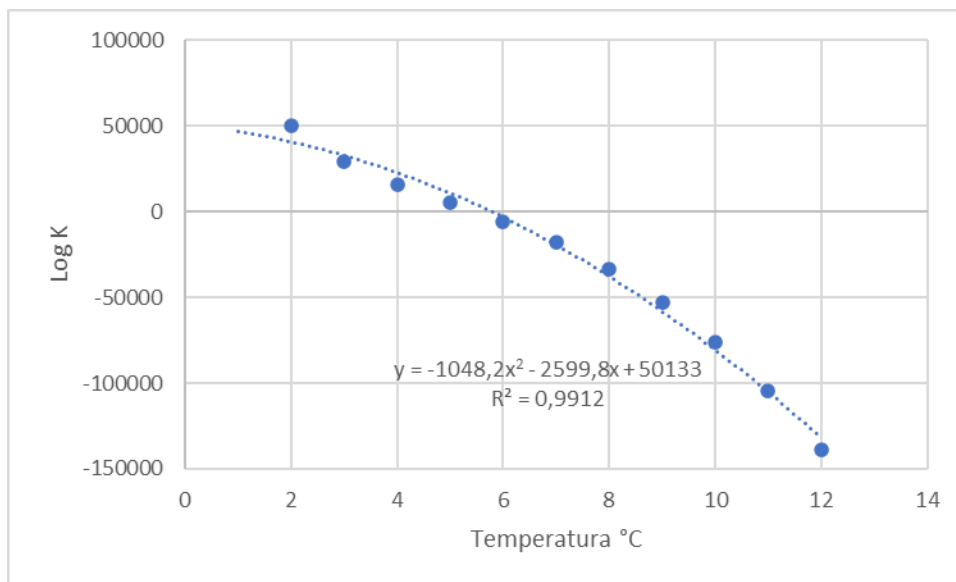


Figura 9: Equilibrio constante

En la figura 9, se puede observar el equilibrio constante a una temperatura de 0°C a 300°C , el cual significa que se encuentra en un estado de energía baja, es decir; se encuentra estable, respecto a la ecuación polinómica el coeficiente de correlación R^2 presenta un grado de asociación de 0.9912.

b)

Tabla 7: Datos de especies

Formula	M	Conc.	Input Amounts			
	g/mol	wt-%	mol	g	Volume	Unit
S2O8(-2a)	192.125	63.238	1.000	192.125	0.000	ml
Fe (+2a)	55.845	36.762	2.000	111.690	0.000	ml
Fe (+3a)	55.845	36.762	2.000	111.690	0.000	ml
SO4(-2a)	96.063	63.238	2.000	192.125	0.000	ml

En la tabla 7, se observa los datos de las especies de la ecuación presentada, donde se da a conocer, la masa molar, concentración, cantidades de entrada respecto a cada fórmula que fue ingresado en el modelador HCS (OUTOTEC).

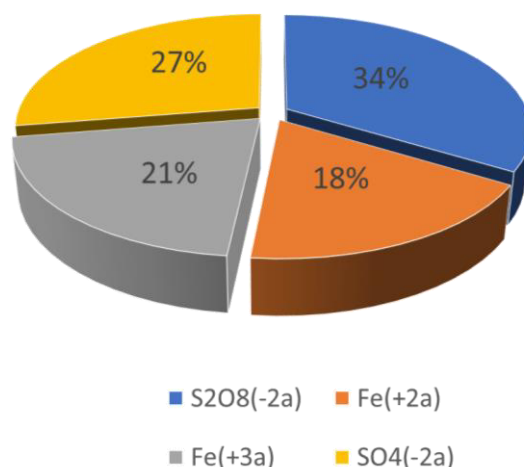
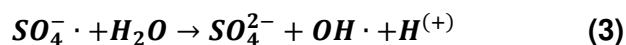
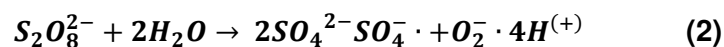


Figura 10: Masa molar de las sustancias

En la figura 10, se puede observar la cantidad de masa molar de cada una de las sustancias obtenidas en porcentaje que fue ingresada al modelador.

4.1.2. Resultado de persulfato en aguas ácidas

Los iones persulfato en condiciones ácidas tienen una mayor efectividad oxidante. Además de generar radicales sulfatos, también liberan radicales de oxígeno $O_2^- \cdot$. La presencia de iones sulfatos implica un subsecuente proceso de oxidación y generación de radiales $OH \cdot$.



La ecuación (2) y la ecuación (3) son muy importantes para entender el mecanismo que se generaría en el tratamiento de aguas de mina. Por un lado, las condiciones acídicas del agua de mina contribuyen a la efectividad de la actividad oxidante liberando radicales oxígeno adicionales.

Por otro lado, la generación de radicales OH· es de alta relevancia para la precipitación de hidróxidos metálicos en condiciones de pH de medio ácido.

Tabla 8: Reacción de la ecuación
 $1.5S_2O_8^{2-} + 2H_2O = 3SO_4^{2-} + O_2 + 4H^+$

Reaction Data					
T	ΔH	ΔS	ΔG	K	Log K
°C	kcal	cal/K	kcal		
0	-14.631	-76.117	6.160	1,18E-02	-4.929
25	-20.743	-97.602	8.357	7,47E-04	-6.126
50	-25.233	-112.077	10.985	3,72E-05	-7.430
75	-29.343	-124.332	13.943	1,77E-06	-8.753
100	-33.482	-135.810	17.195	8,47E-08	-10.072
125	-37.903	-147.273	20.733	4,15E-09	-11.382
150	-42.857	-159.331	24.564	2,05E-10	-12.688
175	-48.603	-172.515	28.709	9,96E-12	-14.002
200	-55.410	-187.283	33.203	4,59E-13	-15.338
225	-63.551	-204.037	38.090	1,94E-14	-16.712
250	-73.309	-223.135	43.424	7,21E-16	-18.142
275	-84.973	-244.901	49.269	2,26E-17	-19.645
300	-98.839	-269.621	55.694	5,77E-19	-21.239
325	-115.242	-297.617	62.777	1,15E-20	-22.939
350	-134.456	-329.070	70.604	1,72E-22	-24.764
375	-156.640	-363.957	79.259	1,87E-24	-26.728
400	-182.076	-402.447	88.832	1,44E-26	-28.843
425	-211.047	-444.690	99.413	7,53E-29	-31.123
450	-243.838	-490.820	111.099	2,64E-31	-33.579
475	-280.733	-540.962	123.987	5,99E-34	-36.222
500	-322.017	-595.224	138.181	8,64E-37	-39.064
525	-367.975	-653.710	153.784	7,72E-40	-42.113
550	-418.893	-716.510	170.903	4,18E-43	-45.379
575	-475.057	-783.709	189.646	1,34E-46	-48.872
600	-536.753	-855.383	210.125	2,52E-50	-52.599
625	-604.268	-931.605	232.453	2,70E-54	-56.568

650	-677.888	-1.012.437	256.744	1,63E-58	-60.788
675	-757.900	-1.097.942	283.114	5,45E-63	-65.264
700	-844.591	-1.188.174	311.680	9,93E-68	-70.003
725	-938.249	-1.283.185	342.562	9,73E-73	-75.012
750	-1.039.159	-1.383.022	375.880	5,05E-78	-80.296
775	-1.147.610	-1.487.730	411.754	1,37E-83	-85.862
800	-1.263.890	-1.597.351	450.307	1,93E-89	-91.714
825	-1.388.284	-1.711.922	491.663	1,39E-95	-97.857
850	-1.521.081	-1.831.479	535.945	5,06E-102	-104.296
875	-1.662.568	-1.956.057	583.279	9,20E-109	-111.036
900	-1.813.034	-2.085.687	633.790	8,31E-116	-118.081
925	-1.972.764	-2.220.398	687.605	3,68E-123	-125.434
950	-2.142.048	-2.360.218	744.852	7,95E-131	-133.100
975	-2.321.173	-2.505.174	805.659	8,28E-139	-141.082
1.000	-2.510.427	-2.655.289	870.154	4,13E-147	-149.384

La tabla N°8, muestra los datos de la reacción generada por el software HCS (OUTOTEC) dadas en agua ácida, mostrando, temperatura, entalpía, entropía y la energía libre de Gibbs

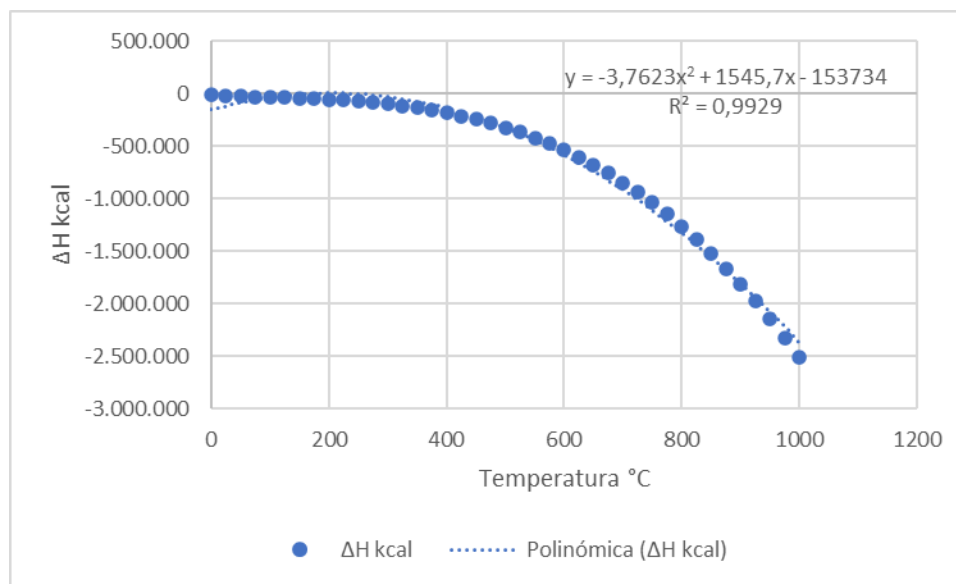


Figura 11: Reacción de la entalpía (Eq.2)

En la figura 11, se observa los datos de la entalpía - temperatura, representando el calor liberado de la reacción (reactivos a productos), el coeficiente R^2 presenta un grado de correlación de 0.9929, acercándose a "1".

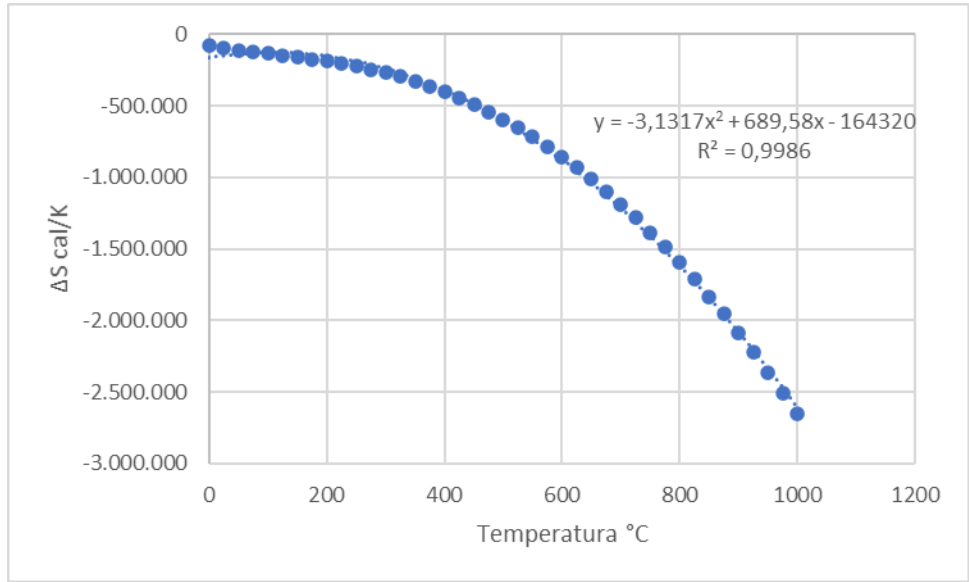


Figura 12: Reacción de entropía (Eq.2)

En la figura 12, se observa la reacción de la entropía, el cual muestra un ΔS Cal/K negativo, indicando que el sistema es más ordenado, además se logra interpretar que a mayor temperatura tiene mayor impacto en la entalpía, respecto a la ecuación polinómica el coeficiente de correlación R^2 presenta un grado de asociación de 0.9986, acercándose significativamente a "1".

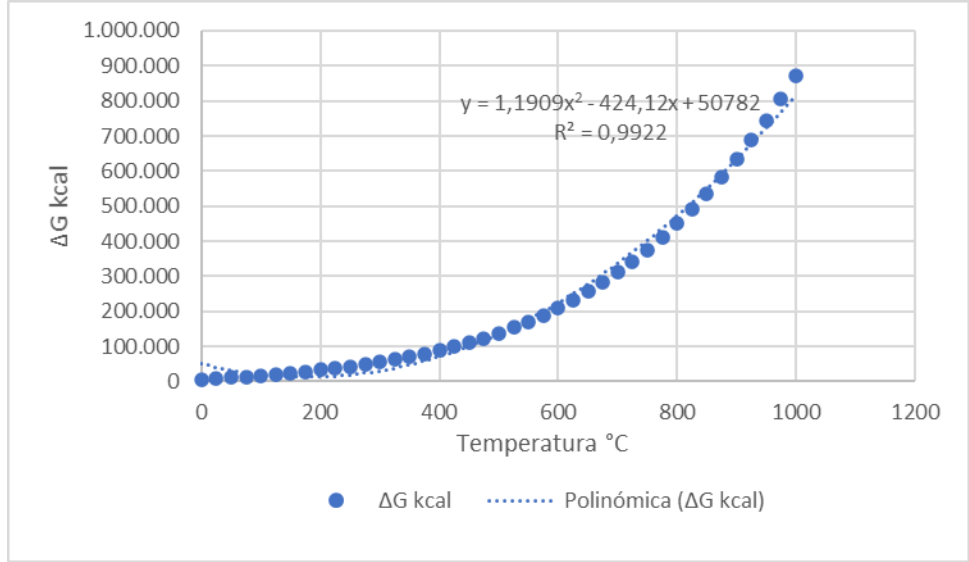


Figura 13: Energía libre de Gibbs (Eq.2)

En la figura 13, se observa la energía libre de Gibbs, donde da a conocer que se absorbe energía por que $\Delta G > 0$, el cual quiere decir que la reacción endergónica y no es espontánea..

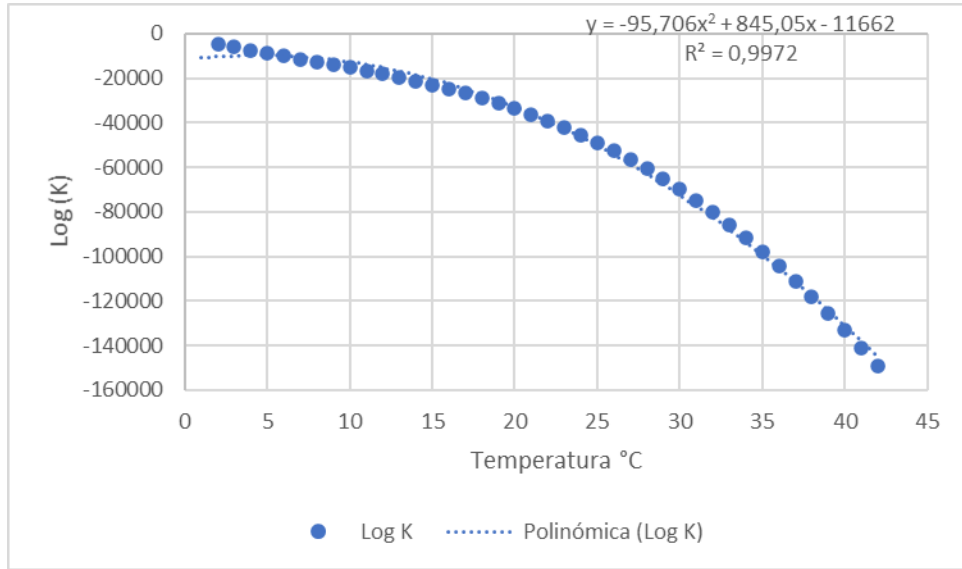


Figura 14: Equilibrio constante (Eq.2)

En la figura 14, se observa que el equilibrio no es constante a ninguna temperatura, el cual significa que se encuentra en un estado de energía alta, es decir; no se encuentra estable, respecto a la ecuación polinómica el coeficiente R^2 presenta un grado de correlación de 0.9972, acercándose significativamente a “1”.

b) Datos – Eq (2).

Tabla 9: Datos de especie

Formula	M	Conc.	Input Amounts			
	g/mol	wt-%	mol	g	Volume	Unit
S2O8(-2a)	192.125	88.887	1.500	288.188	0.000	ml
H2O	18.015	11.113	2.000	36.031	39.292	ml
SO4(-2a)	96.063	88.887	3.000	288.188	0.000	ml
O2(-a)	31.999	9.870	1.000	31.999	0.000	ml
H(+a)	1.008	1.244	4.000	4.032	0.000	ml

En la tabla 9, se observa los datos de las especies de la ecuación presentada, donde se da a conocer, la masa molar, concentración, cantidades de entrada respecto a cada fórmula que fue ingresado en el modelador HCS (OUTOTEC)

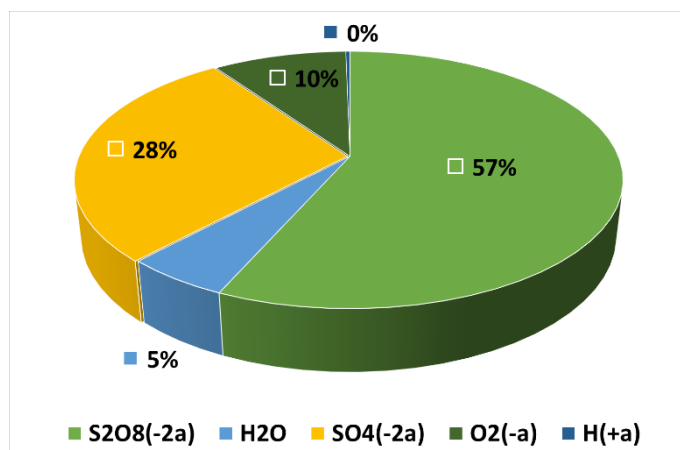


Figura 15: Masa molar de sustancias (Eq.2)

En la figura 15, se puede observar la cantidad de masa molar de cada una de las sustancias obtenidas en porcentaje que fue ingresada al modelador.



Tabla 10: Reacción de la ecuación 3.
 $SO_4(-2a) + H_2O = SO_4(-2a) + OH(-a) + H(+a)$

Reaction Data					
T	ΔH	ΔS	ΔG	K	Log K
°C	kcal	cal/K	kcal		
0.000	14.894	-13.808	18.666	1.159E-015	-14.936
25.000	13.338	-19.278	19.086	1.020E-014	-13.991
50.000	12.182	-23.006	19.616	5.399E-014	-13.268
75.000	11.112	-26.194	20.232	1.989E-013	-12.701
100.000	10.026	-29.208	20.924	5.544E-013	-12.256
125.000	8.853	-32.249	21.692	1.235E-012	-11.908
150.000	7.523	-35.484	22.538	2.282E-012	-11.642
175.000	5.963	-39.065	23.469	3.578E-012	-11.446
200.000	4.093	-43.122	24.496	4.835E-012	-11.316
225.000	1.832	-47.773	25.631	5.680E-012	-11.246
250.000	-0.903	-53.127	26.890	5.828E-012	-11.235
275.000	-4.202	-59.283	28.294	5.228E-012	-11.282
300.000	-8.157	-66.332	29.862	4.096E-012	-11.388
325.000	-12.876	-74.387	31.619	2.795E-012	-11.554
350.000	-18.442	-83.498	33.590	1.653E-012	-11.782
375.000	-24.876	-93.617	35.802	8.452E-013	-12.073
400.000	-32.263	-104.795	38.280	3.722E-013	-12.429
425.000	-40.688	-117.079	41.051	1.407E-013	-12.852
450.000	-50.235	-130.510	44.143	4.550E-014	-13.342
475.000	-60.990	-145.126	47.586	1.253E-014	-13.902

500.000	-73.038	-160.962	51.410	2.928E-015	-14.533
525.000	-86.465	-178.049	55.645	5.782E-016	-15.238
550.000	-101.357	-196.416	60.323	9.610E-017	-16.017
575.000	-117.799	-216.089	65.476	1.339E-017	-16.873
600.000	-135.878	-237.091	71.138	1.558E-018	-17.807
625.000	-155.679	-259.446	77.342	1.508E-019	-18.821
650.000	-177.290	-283.174	84.122	1.211E-020	-19.917
675.000	-200.795	-308.293	91.512	8.026E-022	-21.095
700.000	-226.282	-334.820	99.548	4.381E-023	-22.358
725.000	-253.837	-362.773	108.265	1.962E-024	-23.707
750.000	-283.546	-392.166	117.699	7.191E-026	-25.143
775.000	-315.495	-423.013	127.886	2.149E-027	-26.668
800.000	-349.772	-455.327	138.862	5.225E-029	-28.282
825.000	-386.462	-489.120	150.664	1.030E-030	-29.987
850.000	-425.653	-524.403	163.330	1.642E-032	-31.785
875.000	-467.430	-561.188	176.897	2.113E-034	-33.675
900.000	-511.881	-599.483	191.402	2.188E-036	-35.660
925.000	-559.092	-639.299	206.884	1.820E-038	-37.740
950.000	-609.150	-680.644	223.380	1.212E-040	-39.916
975.000	-662.141	-723.527	240.929	6.458E-043	-42.190
1000.000	-718.153	-767.955	259.569	2.744E-045	-44.562

La tabla N°10, muestra los datos de la reacción generada por el software HCS (OUTOTEC) mostrando, temperatura, entalpía, entropía y la energía libe de Gibbs.

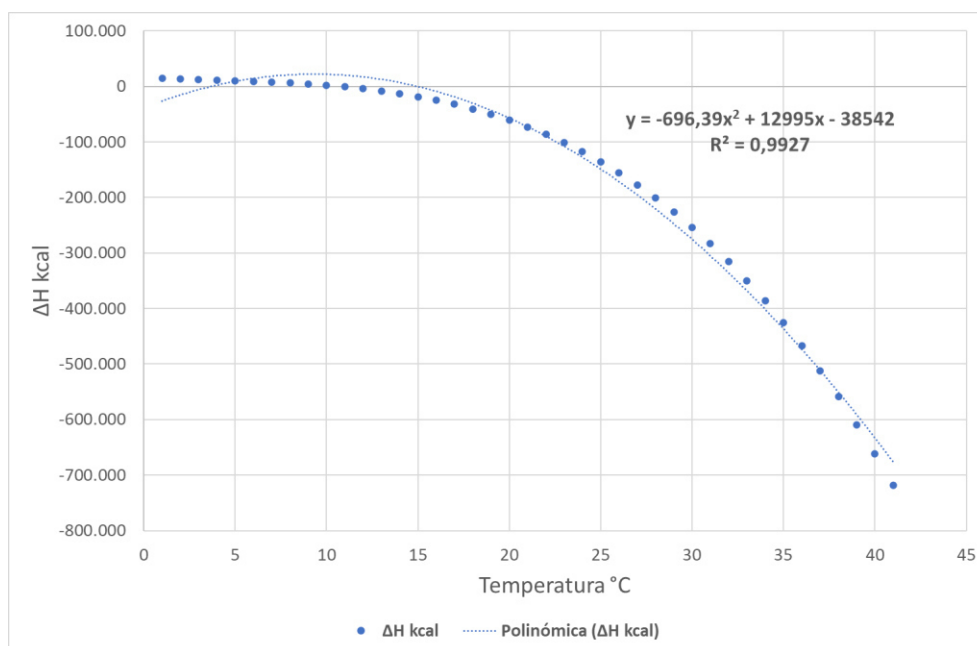


Figura 16: Reacción de la entalpía

En la figura 16, se observa los datos de la entalpía - temperatura, representando el calor liberado de la reacción (reactivos a productos), el coeficiente R^2 presenta un grado de asociación de 0.8237.

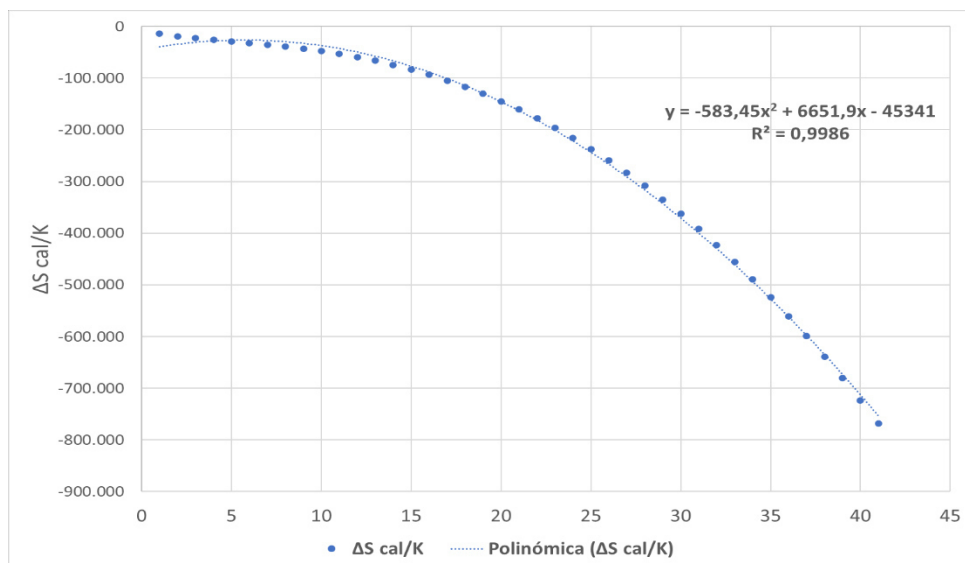


Figura 17: Reacción de entropía

En la figura 17, se observa la reacción de la entropía, el cual muestra un ΔS Cal/K negativo, indicando que el sistema es más ordenado, además se logra interpretar que a mayor temperatura tiene mayor impacto en la entalpía, respecto a la ecuación polinómica el coeficiente R^2 presenta un grado de asociación de 0.9986.

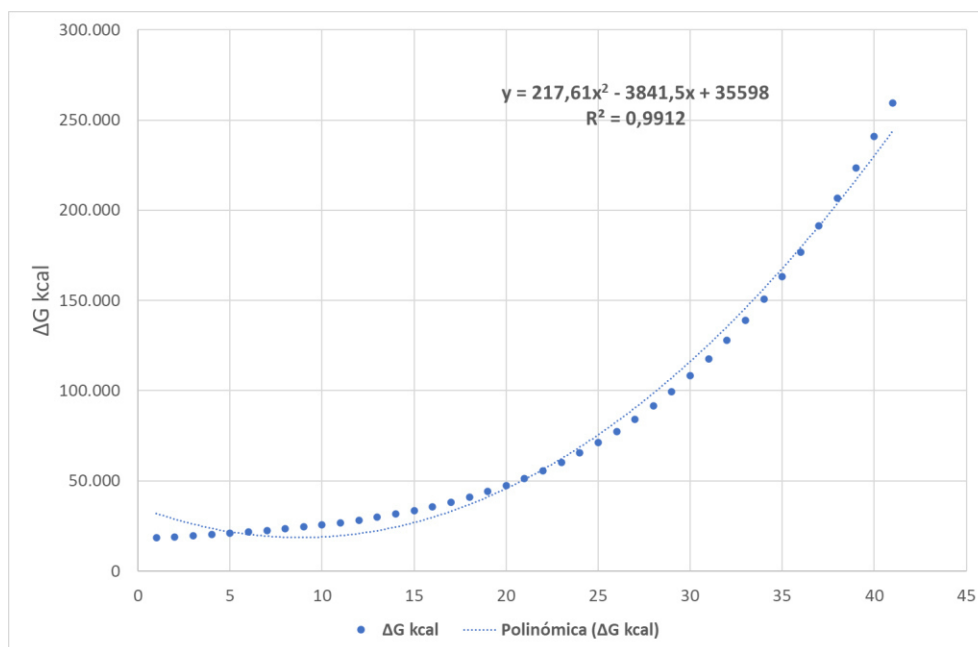


Figura 18: Energía libre de Gibbs

En la figura 18, se observa la energía libre de Gibbs, donde da a conocer que se absorbe energía por que $\Delta G > 0$, el cual quiere decir que la reacción endergónica y no es espontánea.

Tabla 11: Datos de especies

Formula	M	Conc.	Input Amounts
---------	---	-------	---------------

	g/mol	wt-%	mol	g	Volume	Unit
SO4(-2a)	96.063	84.208	1.000	96.063	0.000	ml
H2O	18.015	15.792	1.000	18.015	19.646	ml
SO4(-2a)	96.063	84.208	1.000	96.063	0.000	ml
OH(-a)	17.007	14.909	1.000	17.007	0.000	ml
H(+a)	1.008	0.884	1.000	1.008	0.000	ml

En la tabla 11, se observa los datos de las especies de la ecuación presentada, donde se da a conocer, la masa molar, concentración, cantidades de entrada respecto a cada fórmula que fue ingresado en el modelador HCS (OUTOTEC).

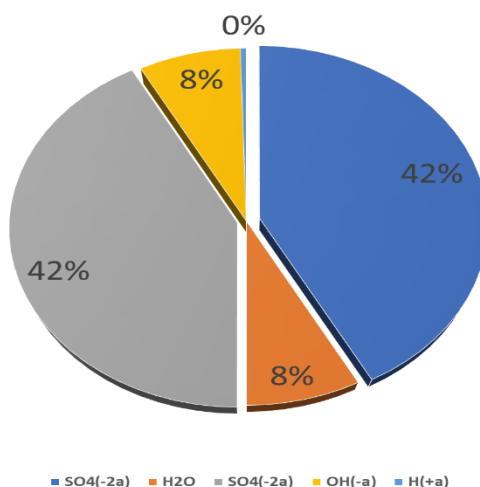
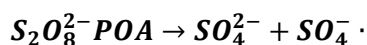
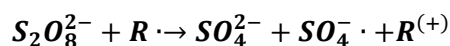


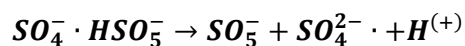
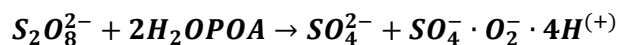
Figura 19: Masa molar de la sustancia

En la figura 19, se puede observar la cantidad de masa molar de cada una de las sustancias obtenidas en porcentaje que fue ingresada al modelador.

4.1.3. Descomposición de especies de sulfatos en radicales libres.



Generación de radicales por medios de los Procesos de oxidación avanzada y reacciones relevantes:



Acción del radical $SO_4^- \cdot$ en la disociación del agua para la generación de radicales OH-iones OH.

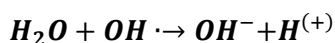
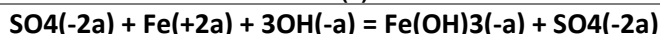


Tabla 12: Interacción de radicales libres en presencia de metales disueltos

Sin radical libre	Con radical libre
$SO_4^- + Fe^{2+} + OH^- \rightarrow Fe^{3+} + SO_4^{2-}$	$SO_4^- \cdot + Fe^{2+} + OH^- \rightarrow Fe^{3+} + SO_4^{2-}$
$SO_4^- + Cu^{2+} + OH^- \rightarrow Cu^{3+} + SO_4^{2-}$	$SO_4^- \cdot + Cu^{2+} + OH^- \rightarrow Cu^{3+} + SO_4^{2-}$

Las reacciones han sido insertadas y modeladas en el modelado HCS (OUTOTEC) utilizando base de datos termodinámicos.

Tabla 13: Ecuación (1) sin radical libre



Reaction Data					
T	ΔH	ΔS	ΔG	K	Log K
°C	kcal	cal/K	kcal		
0.000	-9.022	24.858	-15.811	4.487E+012	12.652
25.000	-6.508	33.732	-16.565	1.391E+012	12.143
50.000	-5.467	37.097	-17.455	6.397E+011	11.806
75.000	-4.802	39.084	-18.409	3.605E+011	11.557
100.000	-4.144	40.905	-19.408	2.333E+011	11.368
125.000	-3.251	43.218	-20.458	1.700E+011	11.231
150.000	-1.867	46.581	-21.578	1.398E+011	11.145
175.000	0.281	51.503	-22.800	1.318E+011	11.120
200.000	3.480	58.438	-24.170	1.462E+011	11.165
225.000	8.029	67.792	-25.742	1.970E+011	11.295
250.000	14.233	79.930	-27.582	3.340E+011	11.524
275.000	22.405	95.173	-29.764	7.382E+011	11.868
300.000	32.862	113.813	-32.369	2.208E+012	12.344
325.000	45.926	136.106	-35.486	9.261E+012	12.967
350.000	61.921	162.286	-39.207	5.646E+013	13.752
375.000	81.174	192.560	-43.634	5.178E+014	14.714
400.000	104.012	227.116	-48.871	7.380E+015	15.868
425.000	130.767	266.124	-55.027	1.687E+017	17.227
450.000	161.771	309.737	-62.215	6.371E+018	18.804
475.000	197.356	358.096	-70.553	4.090E+020	20.612
500.000	237.857	411.327	-80.161	4.584E+022	22.661
525.000	283.607	469.547	-91.161	9.202E+024	24.964
550.000	334.943	532.860	-103.681	3.388E+027	27.530
575.000	392.201	601.366	-117.847	2.340E+030	30.369
600.000	455.716	675.152	-133.793	3.099E+033	33.491
625.000	525.826	754.302	-151.650	8.026E+036	36.904
650.000	602.869	838.891	-171.553	4.145E+040	40.617

675.000	687.181	928.989	-193.640	4.345E+044	44.638
700.000	779.101	1024.662	-218.049	9.408E+048	48.973
725.000	878.966	1125.969	-244.920	4.275E+053	53.631
750.000	987.116	1232.968	-274.395	4.140E+058	58.617
775.000	1103.888	1345.709	-306.617	8.668E+063	63.938
800.000	1229.622	1464.242	-341.729	3.979E+069	69.600
825.000	1364.657	1588.612	-379.877	4.056E+075	75.608
850.000	1509.330	1718.861	-421.208	9.295E+081	81.968
875.000	1663.982	1855.029	-465.870	4.846E+088	88.685
900.000	1828.952	1997.154	-514.009	5.813E+095	95.764
925.000	2004.579	2145.271	-565.777	1.621E+103	103.210
950.000	2191.202	2299.412	-621.323	1.061E+111	111.026
975.000	2389.161	2459.608	-680.798	1.648E+119	119.217
1000.000	2598.796	2625.889	-744.354	6.123E+127	127.787

La tabla N°13, muestra los datos de la reacción generada por el software HCS (OUTOTEC) mostrando, temperatura, entalpía, entropía y la energía libe de Gibbs.

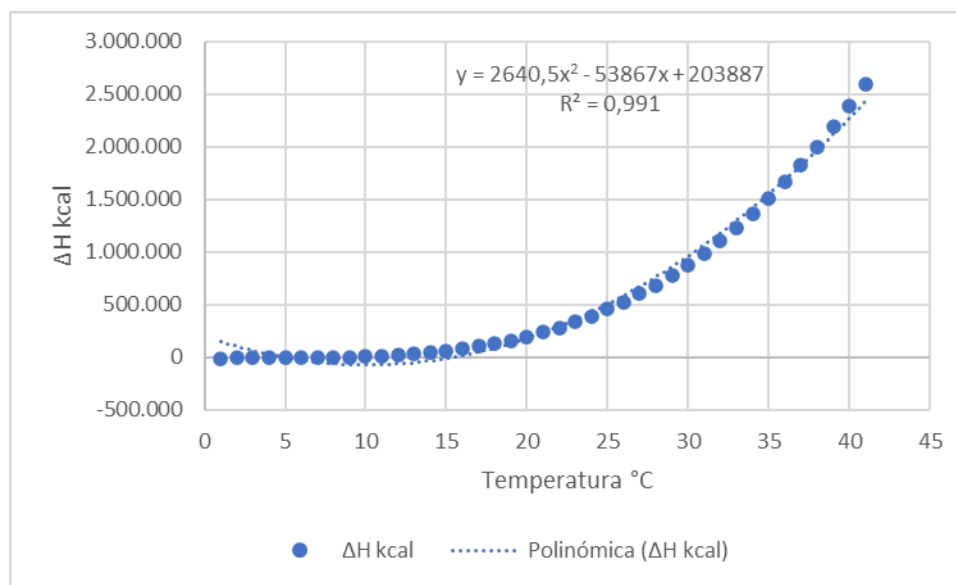


Figura 20: Correlación polinómica entre la T° y entalpía

En la figura 20, se observa los datos de la entalpía - temperatura, representando el calor liberado de la reacción (reactivos a productos) el coeficiente R^2 presenta un grado de asociación de 0.991, acercándose a "1".

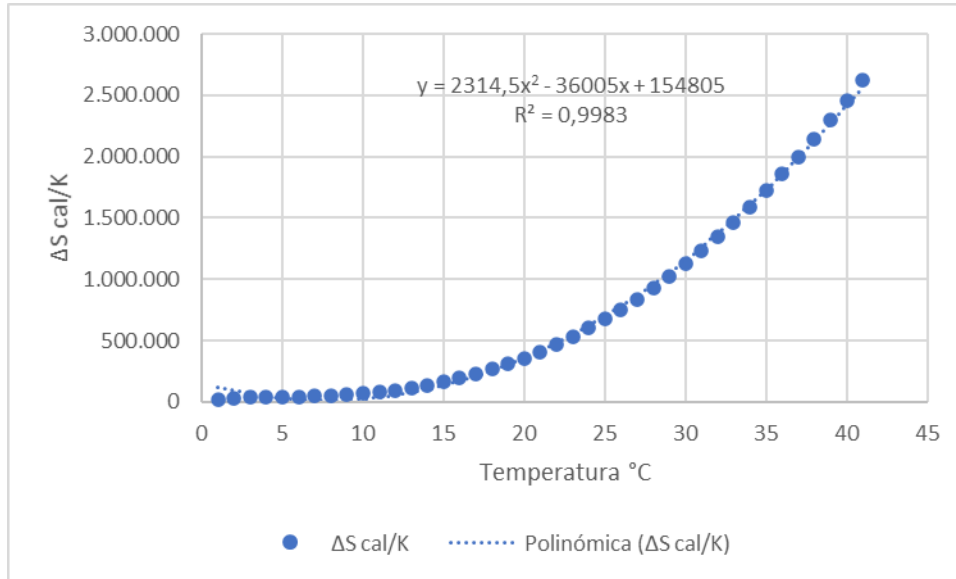


Figura 21: Correlación polinómica entre la T° y entropía

En la figura 17, se observa la reacción de la entropía, el cual muestra un ΔS Cal/K negativo, indicando que el sistema es más ordenado, además se logra interpretar que a mayor temperatura tiene mayor impacto en la entalpía, respecto a la ecuación polinómica el coeficiente de correlación R^2 presenta un grado de asociación de 0.9983, acercándose a "1".

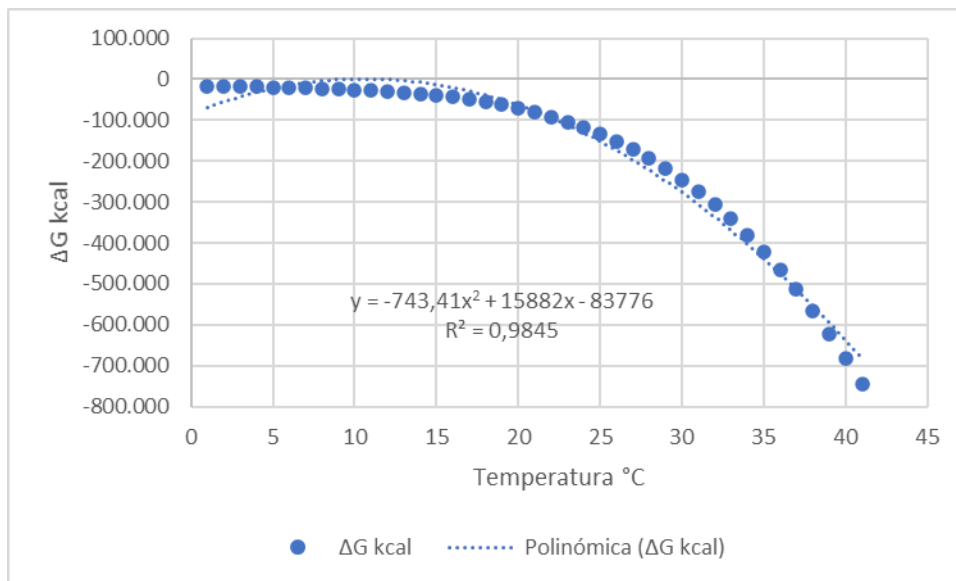


Figura 22: Correlación polinómica entre la T° y la energía libre de Gibbs

En la figura 22, se observa la energía libre de Gibbs, donde da a conocer que se libera energía por que $\Delta G < 0$, el cual quiere decir que la reacción exergónica.

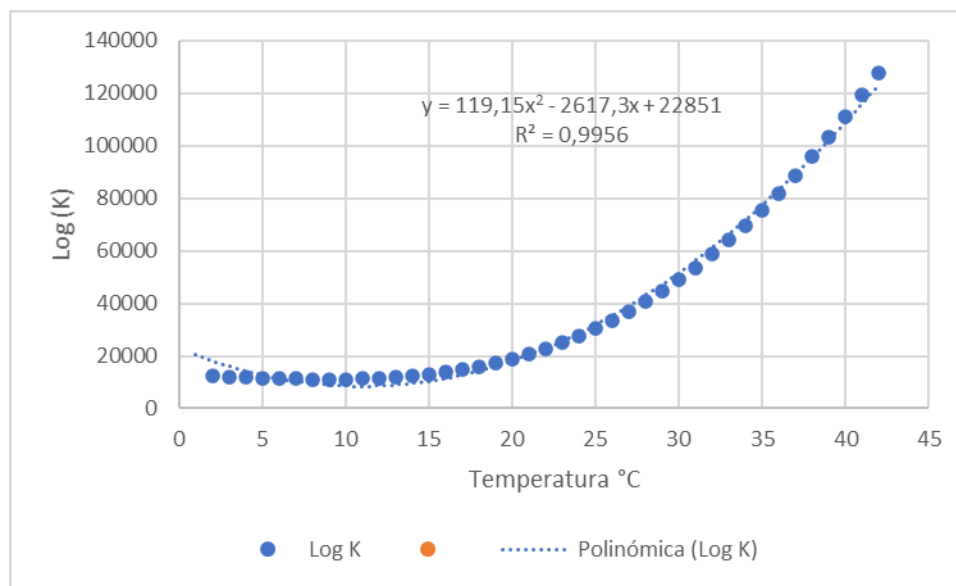


Figura 23: Correlación polinómica entre la T° y el equilibrio constante

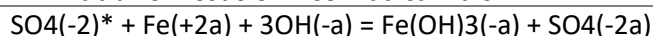
En la figura 23, se puede observar el equilibrio constante con un grado de asociación entre ambas variables de 0.9956, es decir tiene la menor energía posible, es estable.

Tabla 14: Datos de especie eq. 1 sin radical

Formula	M	Conc.	Input Amounts			
	g/mol	wt-%	mol	g	Volume	Unit
SO4(-2a)	96.063	47.338	1.000	96.063	0.000	ml
Fe(+2a)	55.845	27.519	1.000	55.845	0.000	ml
OH(-a)	17.007	25.143	3.000	51.022	0.000	ml
Fe(OH)3(-a)	106.867	52.662	1.000	106.867	0.000	ml
SO4(-2a)	96.063	47.338	1.000	96.063	0.000	ml

En la tabla 14, se observa los datos de las especies de la ecuación presentada, donde se da a conocer, la masa molar, concentración, cantidades de entrada respecto a cada fórmula que fue ingresado en el modelador HCS (OUTOTEC).

Tabla 15: Ecuación 1 con radical libre



Reaction Data					
T	ΔH	ΔS	ΔG	K	Log K
°C	kcal	cal/K	kcal		
0.000	-46.962	-24.997	-40.134	1,30E+35	32.115
25.000	-46.908	-24.770	-39.523	9,40E+31	28.973
50.000	-47.654	-27.166	-38.875	1,97E+29	26.294

75.000	-48.650	-30.131	-38.160	9,05E+26	23.957
100.000	-49.707	-33.064	-37.369	7,74E+24	21.889
125.000	-50.699	-35.640	-36.509	1,10E+23	20.042
150.000	-51.494	-37.578	-35.593	2,42E+21	18.384
175.000	-51.947	-38.623	-34.638	7,82E+19	16.893
200.000	-51.907	-38.541	-33.671	3,58E+18	15.554
225.000	-51.216	-37.126	-32.722	2,28E+17	14.357
250.000	-49.714	-34.190	-31.827	1,98E+16	13.297
275.000	-47.234	-29.567	-31.027	2,35E+15	12.371
300.000	-43.609	-23.109	-30.364	3,80E+14	11.579
325.000	-38.669	-14.681	-29.888	8,34E+13	10.921
350.000	-32.242	-4.163	-29.648	2,51E+13	10.399
375.000	-24.155	8.551	-29.698	1,03E+13	10.015
400.000	-14.234	23.561	-30.094	5,91E+12	9.771
425.000	-2.304	40.954	-30.896	4,70E+12	9.672
450.000	11.812	60.809	-32.162	5,26E+12	9.721
475.000	28.289	83.200	-33.957	8,33E+12	9.920
500.000	47.305	108.192	-36.344	1,88E+13	10.274
525.000	69.037	135.847	-39.389	6,12E+13	10.786
550.000	93.663	166.218	-43.159	2,88E+14	11.460
575.000	121.362	199.357	-47.723	1,99E+15	12.298
600.000	152.311	235.310	-53.150	2,02E+16	13.305
625.000	186.689	274.121	-59.512	3,04E+17	14.483
650.000	224.676	315.828	-66.881	6,84E+18	15.835
675.000	266.451	360.469	-75.328	2,32E+20	17.365
700.000	312.192	408.077	-84.929	1,19E+22	19.075
725.000	362.079	458.685	-95.757	9,29E+23	20.968
750.000	416.292	512.320	-107.888	1,12E+26	23.047
775.000	475.010	569.010	-121.398	2,07E+28	25.315
800.000	538.413	628.782	-136.364	5,93E+30	27.773
825.000	606.680	691.657	-152.863	2,66E+33	30.425
850.000	679.992	757.660	-170.973	1,87E+36	33.272
875.000	758.529	826.810	-190.773	2,07E+39	36.316
900.000	842.470	899.126	-212.340	3,64E+42	39.561
925.000	931.995	974.628	-235.756	1,02E+46	43.007
950.000	1.027.286	1.053.333	-261.098	4,53E+49	46.656
975.000	1.128.520	1.135.256	-288.449	3,25E+53	50.511
1.000.000	1.235.880	1.220.412	-317.888	3,75E+57	54.573

La tabla N°15, muestra los datos de la reacción generada por el software HCS (OUTOTEC) mostrando, temperatura, entalpía, entropía y la energía libe de Gibbs.

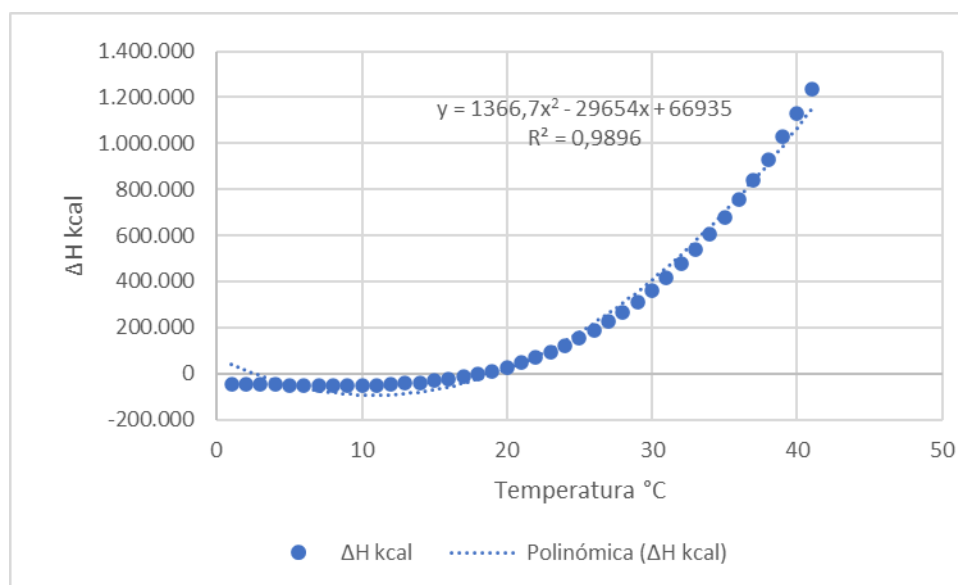


Figura 24: Correlación polinómica entre la T° y entalpía

En la figura 24, se observa los datos de la entalpía - temperatura, representando el calor liberado de la reacción (reactivos a productos) de 0° a 425°, el coeficiente R^2 presenta un grado de asociación de 0.9896.

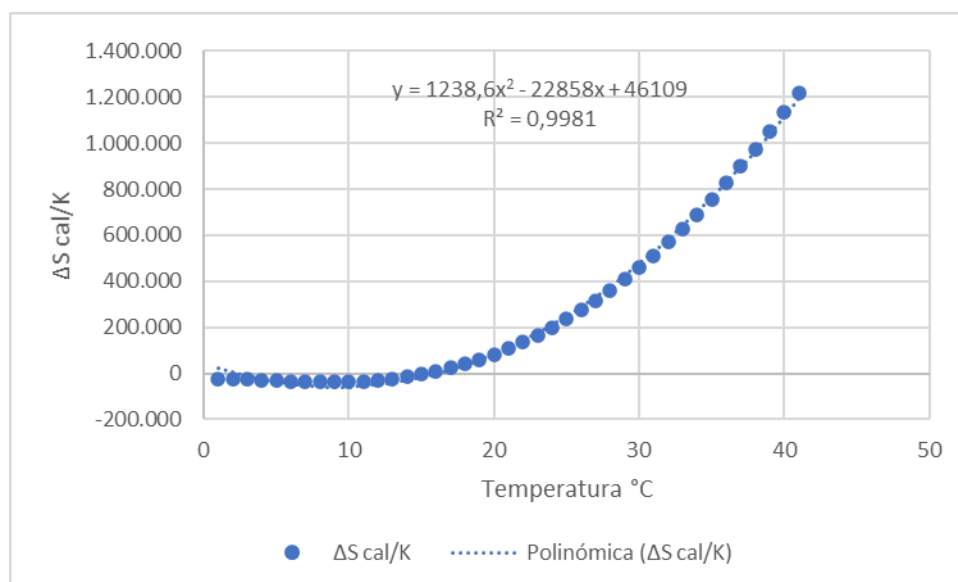


Figura 25: Correlación polinómica entre la T° y entropía

En la figura 25, se observa la reacción de la entropía, el cual muestra un ΔS Cal/K negativo, indicando que el sistema es más ordenado solo a temperatura de 0° a 425°, además se

logra interpretar que a mayor temperatura tiene mayor impacto en la entalpia, respecto a la ecuación polinómica el coeficiente R^2 presenta un grado de asociación de 0.9981.

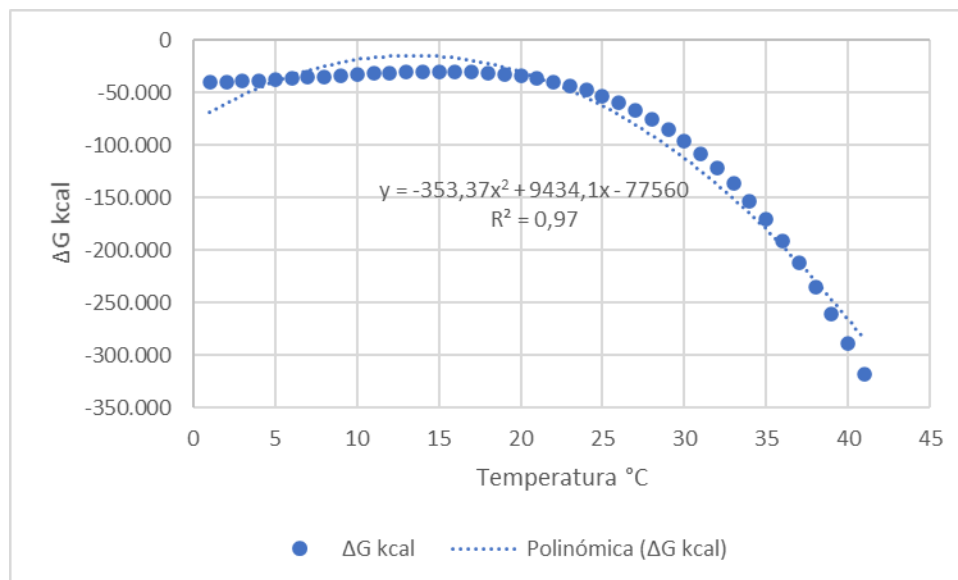


Figura 26: Correlación polinómica entre la T° y energía libre de Gibbs

En la figura 26, se observa la energía libre de Gibbs, donde da a conocer que se libera energía por que $\Delta G < 0$, el cual quiere decir que la reacción exérgica y espontánea

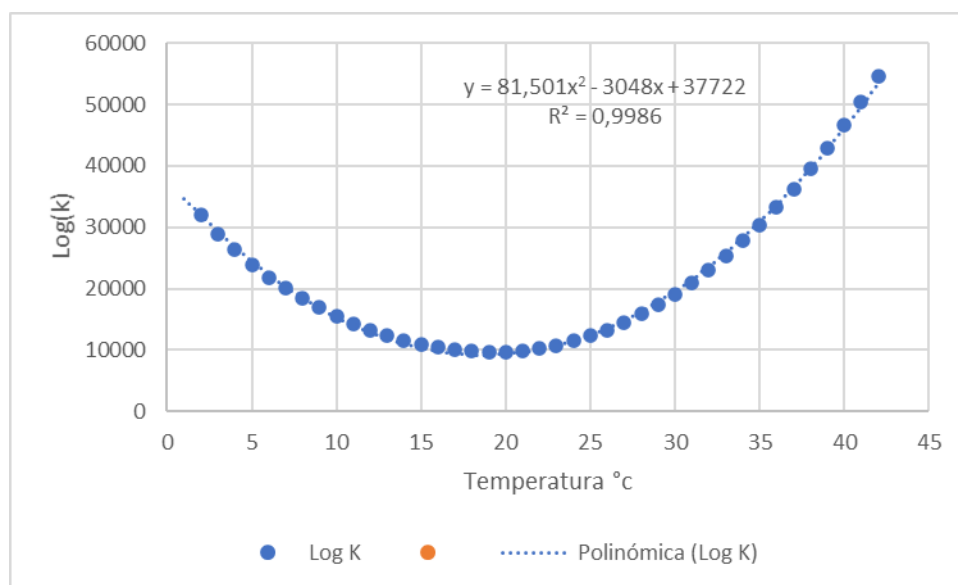


Figura 27: Correlación polinómica entre la T° y equilibrio constante

En la figura 23, se puede observar el equilibrio constante, es decir tiene la menor energía posible, es estable. Con una ecuación polinómica el coeficiente R^2 presenta un grado de asociación 0.9986.

Tabla 16: Datos de especie eq.1 con radical

Formula	M	Conc.	Input Amounts			
	g/mol	wt-%	mol	g	Volume	Unit
SO4(-2)*	96.063	47.338	1.000	96.063	22.414	l
Fe(+2a)	55.845	27.519	1.000	55.845	0.000	ml
OH(-a)	17.007	25.143	3.000	51.022	0.000	ml
Fe(OH)3(-a)	106.867	52.662	1.000	106.867	0.000	ml
SO4(-2a)	96.063	47.338	1.000	96.063	0.000	ml

En la tabla 16, se observa los datos de las especies de la ecuación presentada, donde se da a conocer, la masa molar, concentración, cantidades de entrada respecto a cada fórmula que fue ingresado en el modelador HCS (OUTOTEC).

Tabla 17: Ecuación 2 sin radical libre
SO4(-2a) + Cu(+2a) + 3OH(-a) = Cu(OH)3(-a) + SO4(-2a)

Reaction Data					
T	ΔH	ΔS	ΔG	K	Log K
°C	kcal	cal/K	kcal		
0.000	-12.557	33.099	-21.598	1,91E+20	17.282
25.000	-8.280	48.142	-22.634	3,91E+19	16.592
50.000	-5.299	57.755	-23.962	1,61E+19	16.207
75.000	-2.520	66.038	-25.511	1,04E+19	16.016
100.000	0.423	74.195	-27.263	9,31E+18	15.969
125.000	3.773	82.877	-29.225	1,11E+19	16.043
150.000	7.785	92.641	-31.416	1,69E+19	16.227
175.000	12.734	103.992	-33.870	3,30E+19	16.519
200.000	18.909	117.387	-36.633	8,36E+19	16.922
225.000	26.610	133.232	-39.760	2,79E+20	17.445
250.000	36.144	151.892	-43.318	1,25E+21	18.098
275.000	47.828	173.691	-47.381	7,81E+21	18.893
300.000	61.979	198.919	-52.031	6,95E+22	19.842
325.000	78.922	227.835	-57.357	9,10E+23	20.959
350.000	98.984	260.674	-63.455	1,81E+25	22.257
375.000	122.493	297.644	-70.426	5,61E+26	23.749
400.000	149.781	338.935	-78.374	2,80E+28	25.447
425.000	181.180	384.717	-87.410	2,32E+30	27.365
450.000	217.026	435.144	-97.648	3,26E+32	29.514
475.000	257.654	490.358	-109.207	8,02E+34	31.904
500.000	303.401	550.486	-122.207	3,53E+37	34.548

525.000	354.604	615.645	-136.773	2,85E+40	37.454
550.000	411.600	685.941	-153.032	4,31E+43	40.634
575.000	474.730	761.473	-171.114	1,25E+47	44.096
600.000	544.331	842.331	-191.150	7,06E+50	47.849
625.000	620.744	928.597	-213.275	7,97E+54	51.901
650.000	704.309	1.020.349	-237.626	1,82E+59	56.261
675.000	795.366	1.117.656	-264.339	8,62E+63	60.936
700.000	894.256	1.220.585	-293.555	8,55E+68	65.932
725.000	1.001.320	1.329.195	-325.416	1,81E+74	71.257
750.000	1.116.899	1.443.544	-360.063	8,27E+79	76.918
775.000	1.241.334	1.563.684	-397.641	8,30E+85	82.919
800.000	1.374.967	1.689.664	-438.296	1,85E+92	89.268
825.000	1.518.140	1.821.530	-482.174	9,30E+98	95.968
850.000	1.671.194	1.959.325	-529.422	1,06E+106	103.027
875.000	1.834.471	2.103.088	-580.190	2,81E+113	110.448
900.000	2.008.314	2.252.858	-634.626	1,72E+121	118.236
925.000	2.193.064	2.408.669	-692.883	2,49E+129	126.396
950.000	2.389.064	2.570.555	-755.110	8,56E+137	134.933
975.000	2.596.656	2.738.547	-821.461	7,06E+146	143.849
1.000.000	2.816.183	2.912.674	-892.089	1,41E+156	153.149

La tabla N°17, muestra los datos de la reacción generada por el software HCS (OUTOTEC) mostrando, temperatura y la relación que tiene con la entalpía, entropía y la energía libre de Gibbs.

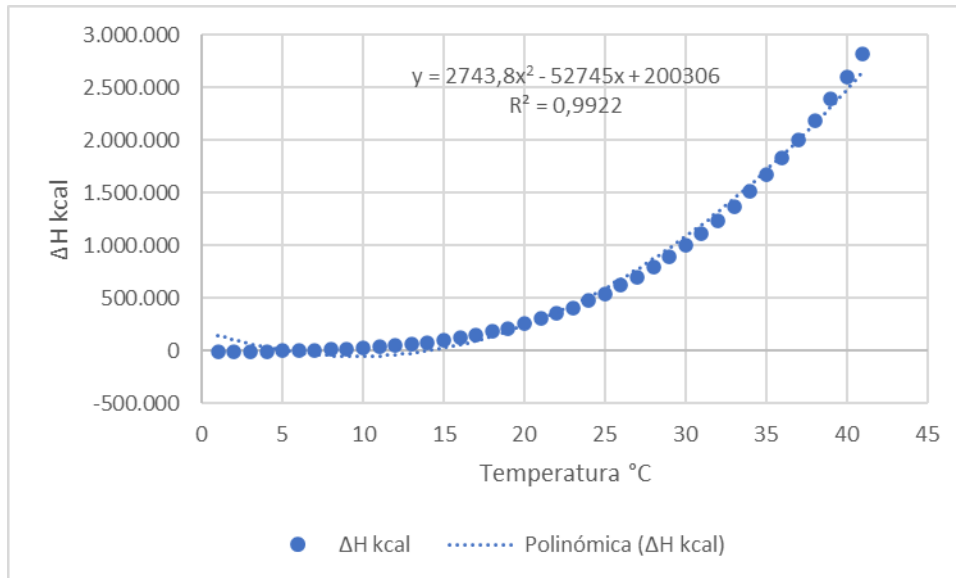


Figura 28: Correlación polinómica entre la T° y entalpía

En la figura 28, se observa los datos de la entalpía - temperatura, representando el calor liberado de la reacción (reactivos a productos) la proporción de ambas variables R^2 presenta un grado de asociación de 0.9922.

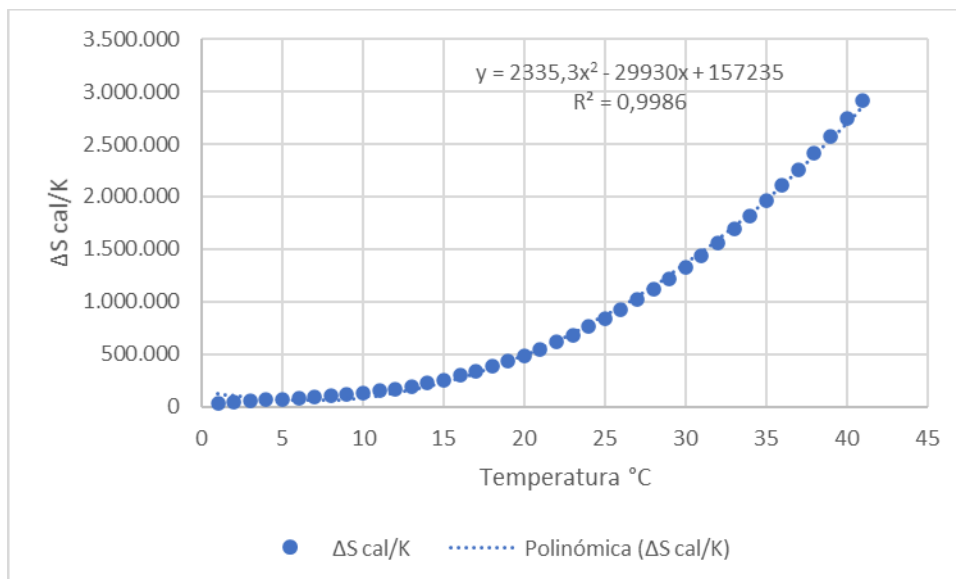


Figura 29: Correlación polinómica entre la T° y entropía

En la figura 29, se observa la reacción de la entropía, el cual muestra un ΔS Cal/K positivo, indicando que el sistema es desordenado, respecto a la ecuación polinómica el coeficiente R^2 mide la proporción de ambas variables presenta un grado de asociación de 0.9986.

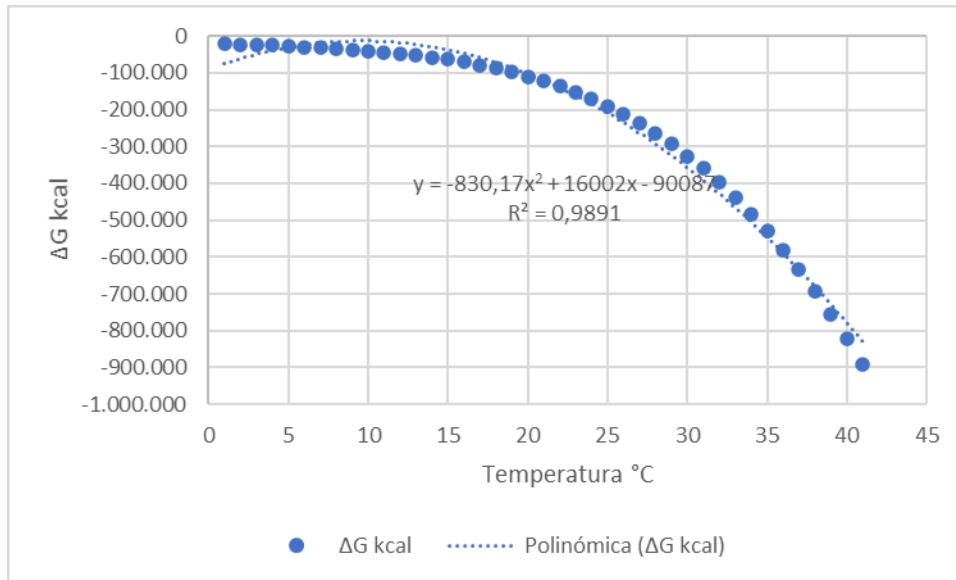


Figura 30: Correlación polinómica entre la T° y energía libre de Gibbs

En la figura 30, se observa la energía libre de Gibbs, donde da a conocer que se libera energía por que $\Delta G < 0$, el cual quiere decir que la reacción exergónica y espontánea

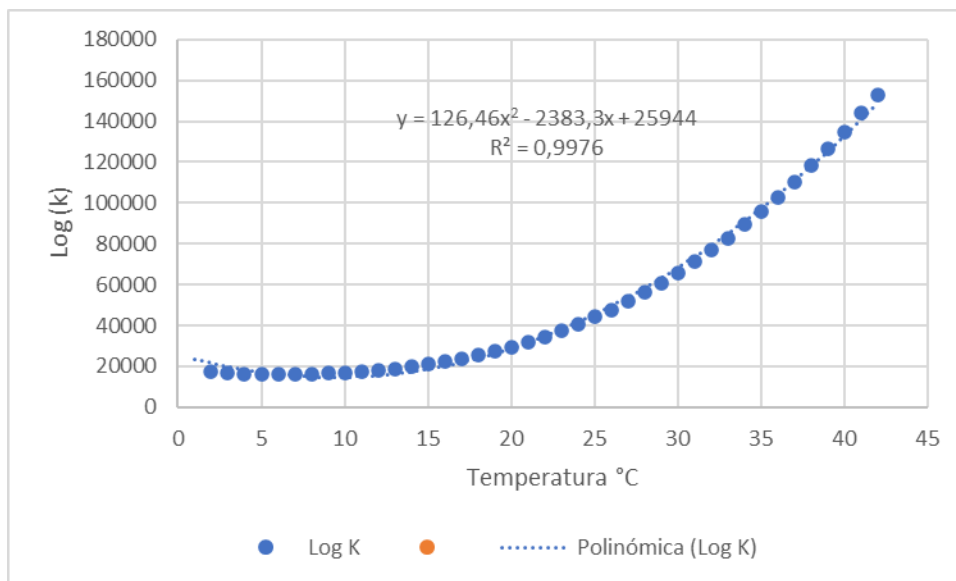


Figura 31: Correlación polinómica entre T° y equilibrio constante

En la figura 31, se puede observar el equilibrio constante, es decir tiene la menor energía posible, es estable. Con una ecuación polinómica el coeficiente de relación R^2 presenta un grado de correlación 0.9976.

Tabla 18: Datos de especie eq.2 sin radical

Formula	M	Conc.	Input Amounts			
	g/mol	wt-%	mol	g	Volume	Unit
SO4(-2a)	96.063	45.607	1.000	96.063	0.000	ml
Cu(+2a)	63.546	30.169	1.000	63.546	0.000	ml
OH(-a)	17.007	24.223	3.000	51.022	0.000	ml
Cu(OH)3(-a)	114.568	54.393	1.000	114.568	0.000	ml
SO4(-2a)	96.063	45.607	1.000	96.063	0.000	ml

En la tabla 18, se observa los datos de las especies de la ecuación presentada sin radical, donde se da a conocer, la masa molar, concentración, cantidades de entrada respecto a cada fórmula que fue ingresado en el modelador HCS (OUTOTEC).

Tabla 19: Ecuación de la ecuación 2 con radical
 $SO_4(-2)^* + Cu(+2a) + 3OH(-a) = Cu(OH)_3(-a) + SO_4(-2a)$

Reaction Data					
T	ΔH	ΔS	ΔG	K	Log K
°C	kcal	cal/K	kcal		
0.000	-50.497	-16.756	-45.920	5.551E+036	36.744
25.000	-48.680	-10.360	-45.591	2.644E+033	33.422
50.000	-47.486	-6.509	-45.383	4.958E+030	30.695
75.000	-46.368	-3.176	-45.262	2.602E+028	28.415
100.000	-45.140	0.227	-45.225	3.088E+026	26.490
125.000	-43.676	4.020	-45.276	7.160E+024	24.855
150.000	-41.842	8.481	-45.431	2.926E+023	23.466
175.000	-39.494	13.867	-45.708	1.961E+022	22.292
200.000	-36.478	20.408	-46.134	2.048E+021	21.311
225.000	-32.635	28.314	-46.740	3.218E+020	20.508
250.000	-27.802	37.772	-47.563	7.436E+019	19.871
275.000	-21.811	48.950	-48.643	2.488E+019	19.396
300.000	-14.492	61.997	-50.026	1.194E+019	19.077
325.000	-5.673	77.048	-51.760	8.190E+018	18.913
350.000	4.820	94.225	-53.896	8.013E+018	18.904
375.000	17.164	113.636	-56.489	1.120E+019	19.049
400.000	31.534	135.381	-59.597	2.243E+019	19.351
425.000	48.109	159.547	-63.279	6.463E+019	19.810
450.000	67.067	186.216	-67.595	2.693E+020	20.430
475.000	88.587	215.462	-72.611	1.633E+021	21.213
500.000	112.849	247.351	-78.391	1.448E+022	22.161
525.000	140.033	281.945	-85.001	1.892E+023	23.277
550.000	170.320	319.299	-92.511	3.665E+024	24.564

575.000	203.890	359.464	-100.989	1.059E+026	26.025
600.000	240.926	402.489	-110.508	4.597E+027	27.662
625.000	281.607	448.416	-121.138	3.016E+029	29.479
650.000	326.117	497.286	-132.953	3.009E+031	31.478
675.000	374.636	549.136	-146.027	4.595E+033	33.662
700.000	427.348	604.000	-160.435	1.080E+036	36.033
725.000	484.433	661.910	-176.253	3.932E+038	38.595
750.000	546.075	722.896	-193.556	2.228E+041	41.348
775.000	612.456	786.986	-212.423	1.977E+044	44.296
800.000	683.758	854.204	-232.932	2.761E+047	47.441
825.000	760.164	924.576	-255.160	6.098E+050	50.785
850.000	841.856	998.124	-279.187	2.140E+054	54.330
875.000	929.018	1074.869	-305.093	1.200E+058	58.079
900.000	1021.832	1154.830	-332.957	1.078E+062	62.033
925.000	1120.481	1238.027	-362.861	1.561E+066	66.194
950.000	1225.147	1324.476	-394.886	3.657E+070	70.563
975.000	1336.015	1414.195	-429.112	1.391E+075	75.143
1000.000	1453.266	1507.198	-465.623	8.624E+079	79.936

La tabla N°19, muestra los datos de la reacción generada por el software HCS (OUTOTEC) mostrando, temperatura, entalpía, entropía y la energía libre de Gibbs.

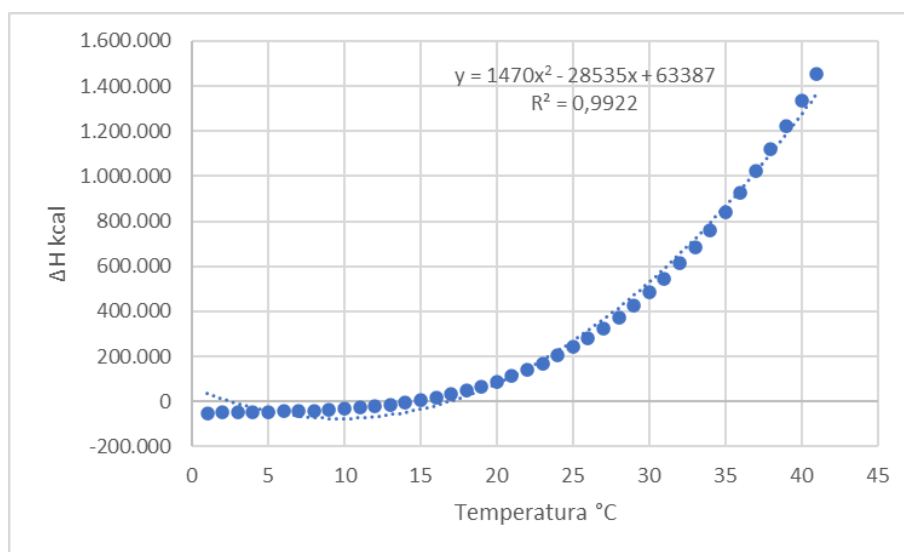


Figura 32: Correlación polinómica entre la T° y entalpía

En la figura 32, se observa los datos de la entalpía - temperatura, representando el calor liberado de la reacción (reactivos a productos) el coeficiente de correlación R^2 presenta un grado de asociación de 0.9922

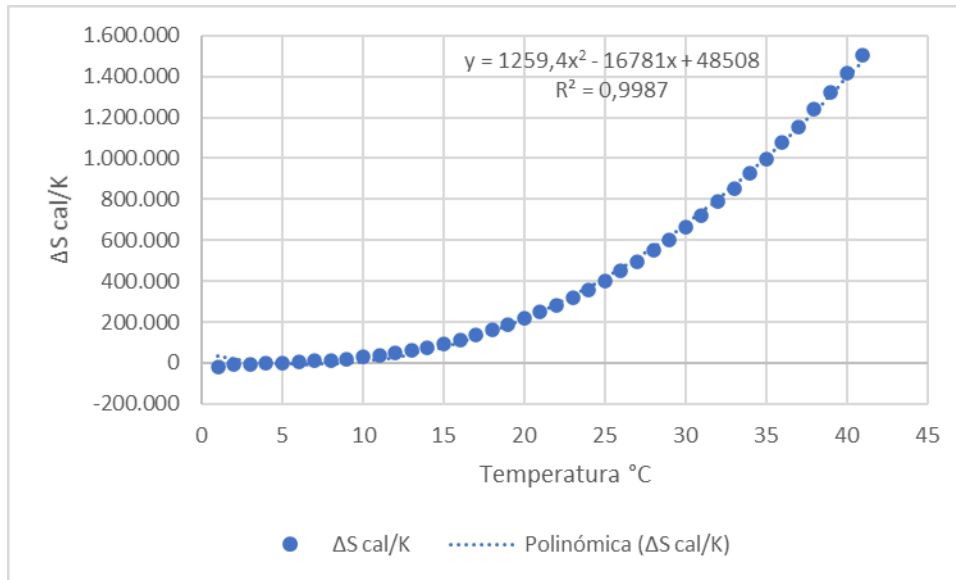


Figura 33: Correlación polinómica entre la T° y entropía

En la figura 33, se observa la reacción de la entropía, el cual muestra un ΔS Cal/K negativo, indicando que el sistema es más ordenado, además se logra interpretar que a mayor temperatura tiene mayor impacto en la entalpía, respecto a la ecuación polinómica el coeficiente de correlación R^2 presenta un grado de correlación de 0.9987.

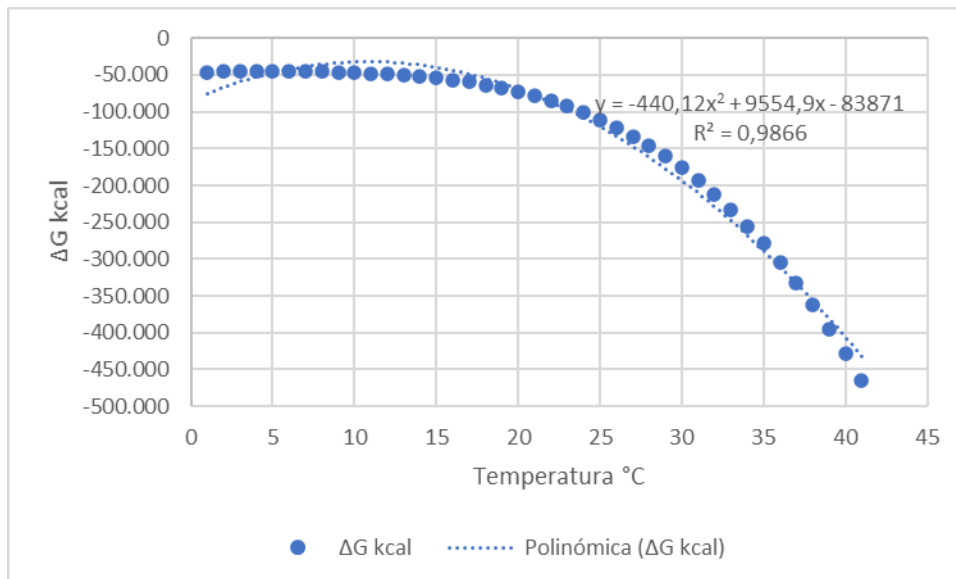


Figura 34: Correlación polinómica entre la T° y energía libre de Gibbs

En la figura 34, se observa la energía libre de Gibbs, donde da a conocer que se libera energía por que $\Delta G < 0$, el cual quiere decir que la reacción exergónica y espontánea

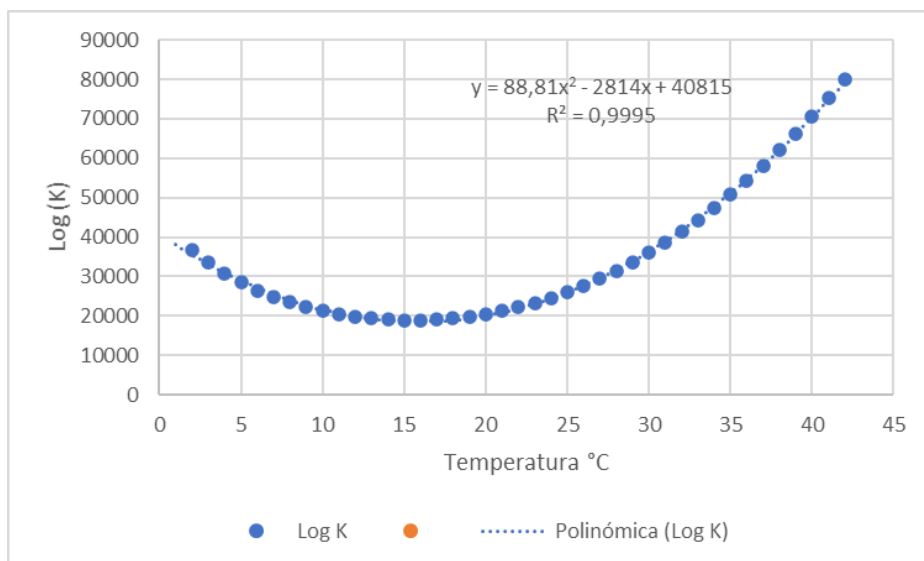


Figura 35: Correlación polinómica entre la T° y equilibrio constante.

En la figura 31, se puede observar el equilibrio constante, es decir tiene la menor energía posible, es estable. Con una ecuación polinómica el coeficiente de relación R^2 presenta un grado de asociación 0.9995.

Tabla 20: Datos de especie eq,2 con radical:

Formula	M	Conc.	Input Amounts			
	g/mol	wt-%	mol	g	Volume	Unit
SO4(-2)*	96.063	45.607	1.000	96.063	22.414	l
Cu(+2a)	63.546	30.169	1.000	63.546	0.000	ml
OH(-a)	17.007	24.223	3.000	51.022	0.000	ml
Cu(OH)3(-a)	114.568	54.393	1.000	114.568	0.000	ml
SO4(-2a)	96.063	45.607	1.000	96.063	0.000	ml

En la tabla 20, se observa los datos de las especies de la ecuación presentada con radical, donde se da a conocer, la masa molar, concentración, cantidades de entrada respecto a cada fórmula que fue ingresado en el modelador HCS (OUTOTEC).

Tabla 21: Radical sulfato y muestra recolectado de sulfato

Log K	SO4-2
33.662	143
36.033	189
38.595	195
41.348	195
44.296	116
47.441	142
50.785	111
54.330	196
58.079	143
62.033	125
66.194	130
70.563	111
75.143	104
79.936	164

Como se puede observar en la tabla 21, se tiene los datos del equilibrio constante a diferentes temperaturas de la ecuación con radical sulfato y diferentes muestras de concentración de iones sulfatos en aguas ácidas de mina obtenidas de bibliografía (48)

4.2. Prueba de Hipótesis

A. HIPÓTESIS INVESTIGACIÓN

H1: Los radicales libres de Procesos de Oxidación Avanzada son factibles en los tratamientos de aguas con contenidos de sulfatos.

H0: Los radicales libres de Procesos de Oxidación Avanzada NO son significativamente factibles en los tratamientos de aguas con contenidos de sulfatos.

B. HIPÓTESIS ESTADÍSTICA

H₀: $\rho = 0$ (No hay correlación)

H₁: $\rho \neq 0$ (Si hay correlación)

C. SIGNIFICANCIA

$\alpha =$ Error tipo I = 0.05

D. DIAGRAMA DE DISPERSIÓN

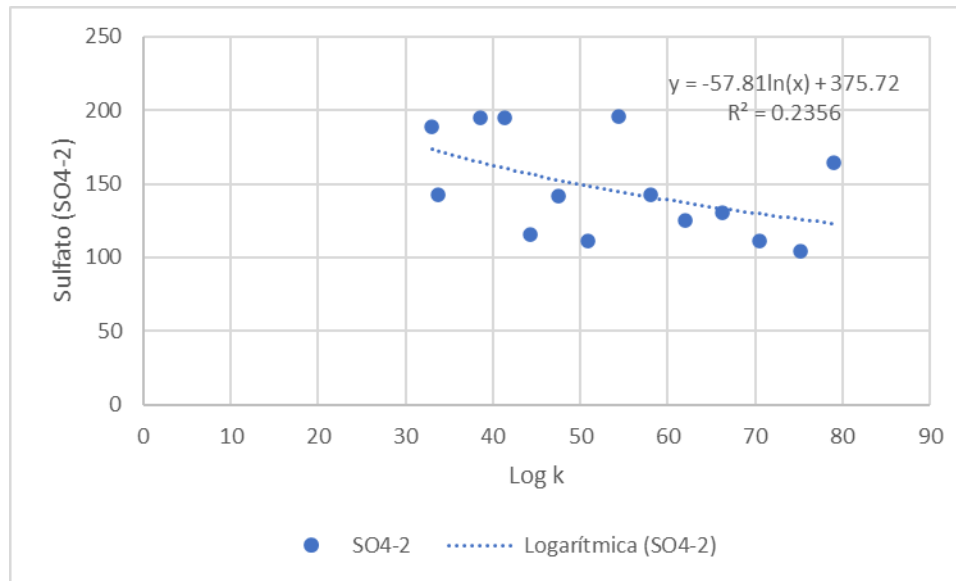


Figura 36: Correlación logarítmica entre el radical sulfato y concentración de sulfato

E. PRUEBA DE NORMALIDAD:

Se hace la prueba de normalidad de Shapiro Wilk por tener menos de 50 datos en ambas variables de estudio mediante SPSS, el cual se obtuvo resultados donde se presentan:

Tabla 22: Prueba de normalidad

	Kolmogórov-Smirnov			Shapiro-Wilk		
	Estadístico	gl	Sig.	Estadístico	gl	Sig.
Sulfato	,194	14	,160	,877	14	,052
Log (k)	,094	14	,200*	,955	14	,642

H0: La distribución de los datos es normal

H1: La distribución de los datos no es normal

Se observa en la tabla 22 que el Sig. que es la probabilidad de la prueba de ambas variables superan a la significancia de la prueba de 0.05 por lo que ambas distribuciones son normales. Por lo que se desarrolla una prueba paramétrica de ANOVA para validar la hipótesis de correlación.

F. PRUEBA DE CORRELACIÓN:

Tabla 23: Prueba de correlación

		Sulfato	Log (k)
Sulfato	Correlación de Pearson	1	-,469
	Sig. (bilateral)		,091
	N	14	14
Log (k)	Correlación de Pearson	-,469	1
	Sig. (bilateral)	,091	
	N	14	14

En la tabla 23 se puede observar la prueba de correlación que se ajusta de una mejor manera, cuyos resultados fueron obtenidos mediante SPSS.

Tabla 24: Resultados del índice de correlación

Modelo	R	R cuadrado	R cuadrado ajustado	Error estándar de la estimación
1	,469 ^a	,230	,155	31,534

En la tabla 24 se puede observar la el índice $r=0.469$ el cual está indicando una correlación media, con un grado de relación media con la prueba de ANOVA.

G. PRUEBA DE ANOVA

Tabla 25: Prueba de Anova

Modelo		Suma de cuadrados	gl	Media cuadrática	F	Sig.
1	Regresión	3358,502	1	3358,502	3,377	,091
	Residuo	11932,927	12	994,411		
	Total	15291,429	13			

En la tabla 25 se puede observar el Sig. es 0.091; es decir es mayor a 0.05 por lo que se acepta la hipótesis nula y se rechaza la hipótesis alterna propuesta en el trabajo de investigación.

H. CONCLUSIÓN

Los radicales libres de Procesos de Oxidación Avanzada NO son significativamente factibles en los tratamientos de aguas con contenidos de sulfatos.

4.3. Discusión de resultados

En general el radical libre de sulfato contribuye de una manera media prospectivamente a las reacciones de transferencia de electrones, mucho más que los radicales OH^- debido a su extrema potencial de oxidación, $SO_4^- \cdot$ tiene capacidad para oxidar contaminantes orgánicos a CO_2 y H_2O , además de que estos radicales sulfato tienen una vida media de 30 a 40 μs , que es comparativamente más alto que el radical OH^- con una vida media de 1 μs , puede oxidar micro contaminantes en un rango de 10^6 a 10^9 m/s. La vida media permite una tremenda interacción y transferencia de masa entre el micro contaminante y este radical $SO_4^- \cdot$ es virtualmente inerte y considerado como no contaminante.

El proceso de oxidación del persulfato tiene un impacto importante en un amplio rango de pH de 3 a 8, los radicales sulfatos pueden activarse fácilmente mediante la luz UV, calor o algún metal de transición, además del Fe^{2+} que también es un gran agente activador para la descomposición de persulfatos y se dé la generación de $SO_4^- \cdot$, la oxidación es una técnica perspectiva para la degradación de contaminantes emergentes orgánicos, mientras haya más aumento de la temperatura es mejor, pues es un gran enfoque para aumentar la composición de persulfato en radicales sulfato.

Tomando en cuenta las reacciones de las ecuaciones encontradas en el trabajo de investigación de Ushani (12), concuerda con sus investigaciones, pues coinciden con que el radical sulfato es altamente oxidante para contaminantes orgánicos, muy eficiente para tratamientos de aguas municipales y suelos, en el caso de tratar los contaminantes emergentes, como Fe, Co, Zinc es eficiente en su degradación. Como se ha podido observar en las ecuaciones, el persulfato activa los radicales sulfatos, a través de su descomposición.

REFERENCIAS

1. FORERO, Jorge-Enrique and ORTIZ, Olga-Patricia. Aplicación de procesos de oxidación avanzada como tratamiento de fenol en aguas residuales industriales de refinería. . 2005. Vol. 3, p. 14.
2. SEVERICHE, Carlos A. and GONZÁLEZ, Humberto. Evaluación analítica para la determinación de sulfatos en aguas por método turbidimétrico modificado. Ingenierías USBMed. 21 December 2012. Vol. 3, no. 2, p. 6–11. DOI 10.21500/20275846.269.
3. UMBARILA-ORTEGA, María Fernanda, PRADO-RODRÍGUEZ, Juan Sebastián and AGUDELO-VALENCIA, Rafael Nikolay. Remoción de sulfuro empleando ozono como agente oxidante en aguas residuales de curtiembres. Revista Facultad de Ingeniería. 1 April 2019. Vol. 28, no. 51, p. 25–38. DOI 10.19053/01211129.v28.n51.2019.9081.
4. BOONRATTANAKIJ, Nonglak, SAKUL, Witchaya, GARCIA-SEGURA, Sergi and LU, Ming-Chun. Implementation of fluidized-bed Fenton as pre-treatment to reduce chemical oxygen demand of wastewater from screw manufacture: Influence of reagents feeding mode. Separation and Purification Technology. August 2018. Vol. 202, p. 275–280. DOI 10.1016/j.seppur.2018.03.075.
5. PAMBI, Betsy Beatriz Olarte. Tratamiento de residuos líquidos mineros, aplicando peróxido de hidrógeno en la empresa minera franromec. . 2015. P. 56.
6. CÁRDENAS, José Guillermo. Estudio del proceso de oxidación avanzada por medio de la reacción fenton en aguas residuales provenientes de plantas extractoras de oro. Guayaquil-Ecuador : Universidad de Guayaquil, 2017.
7. CASTRO, Sofia. Diseño de una planta industrial para el tratamiento de efluentes cianurados mediante la combinación de ozono con peróxido de hidrógeno. 2015.
8. ZAW, Myint and EMETT, Maree T. Arsenic removal from water using advanced oxidation processes. Toxicology Letters. July 2002. Vol. 133, no. 1, p. 113–118. DOI 10.1016/S0378-4274(02)00081-4.
9. PINTO, Mauricio José Rosso. Tratamiento fotocatalítico de aguas de cianuración provenientes del proceso de beneficio del oro en una zona minera del sur de Bolívar - Colombia. . 2016. P. 78.
10. BARNDOK, Helen. Procesos de Oxidación Avanzada para el tratamiento de aguas residuales industriales contaminadas con 1,4 dioxano [online]. Madrid : Universidad Complutense de Madrid, 2017. [Accessed 9 October 2020]. Available from: <https://eprints.ucm.es/42691/1/T38784.pdf>
11. HERRERA, Betsabe and VERA, Sara. Aplicación de métodos convencionales y procesos de oxidación avanzada para el tratamiento de aguas residuales de bebidas carbonatas. Guayaquil-Ecuador : Universidad de Guayaquil, 2019.

12. USHANI, Uthirakrishnan, LU, Xueqin, WANG, Jianhui, ZHANG, Zhongyi, DAI, Jinjin, TAN, Yujie, WANG, Shasha, LI, Wanjiang, NIU, Chengxin, CAI, Teng, WANG, Na and ZHEN, Guangyin. Sulfate radicals-based advanced oxidation technology in various environmental remediation: A state-of-the-art review. *Chemical Engineering Journal*. December 2020. Vol. 402, p. 126232. DOI 10.1016/j.cej.2020.126232.
13. OTINIANO, Br LOPEZ and JOEL, Carlos. Determinación del tiempo de agitación y volumen óptimo del peróxido de hidrógeno en la degradación del efluente cianurado de la planta de tratamiento de aguas de la empresa “Consortio Minero Horizonte.” . 2018. P. 68.
14. MACHACA, David Eloy. Remoción de cianuro de aguas residuales minero metalúrgicos por proceso de oxidación avanzada y fotocátalisis solar. 2017.
15. DELGADO, Daniel and SANTANDER, Pacoricona. Remoción de coloración de tintes de teñido en aguas residuales de la industria textil, utilizando procesos de oxidación avanzada (POA). Puno- Perú : Universidad Nacional del Altiplano, 2017.
16. GARAY, Josue. Remoción de cianuro de sodio y cobre con peróxido de hidrógeno, sulfato de cobre y sulfhidrato de sodio de los efluentes de lixiviación en empresas mineras productoras de oro y plata. . 2019. P. 69.
17. EVITELIO, Cieza Cueva. Efecto de la aplicación del ozono en la concentración de metales en solución en el agua del río Hualgayoc – 2018. . P. 122.
18. ENRIQUE, Estela. Evaluación de la oxidación química con peróxido de hidrógeno y ósmosis inversa en el tratamiento de efluentes de minera Coimolache. 2016.
19. MENDOZA, Wilson. Fotocatálisis para la degradación de detergentes en aguas residuales. Lambayeque : Universidad Nacional Pedro Ruiz Gallo, 2019.
20. FARFÁN, Aura Sara. Tratamiento de aguas residuales de una empresa farmacéutica por oxidación avanzada-Lima 2017. . 2017. P. 108.
21. ANAYA, Meléndez. Tratamiento de aguas residuales con colorantes y reactivos mediante proceso de oxidación avanzada Fenton y variantes. . 2019. P. 7.
22. HUANCA, Yanett. Tratamiento de aguas residuales de la Universidad Nacional del Centro del Perú por fotocátalisis heterogénea [online]. Perú : Universidad Nacional del Centro del Perú, 2019. [Accessed 11 October 2020]. Available from: http://181.65.200.104/bitstream/handle/UNCP/5197/T%20010_41662828_M.pdf?sequence=1&isAllowed=y
23. SILLANPA, Mika. *Advanced Water Treatment-Advanced Oxidation Processes*. Elsevier, 2020. ISBN 978-0-12-819225-2.
24. DUPREZ, Daniel and CAVANI, Fabrizio. *Handbook of advanced methods and processes in oxidation catalysis: from laboratory to industry*. London ; Hackensack, NJ : Imperial College Press, 2014. 1. ISBN 978-1-84816-750-6. QD281.O9 D87 2014

25. STANISLAW, Waclawek. Advanced oxidation processes based on sulfate radicals. [online]. 2018. [Accessed 9 November 2020]. Available from: <https://www.journals.elsevier.com/chemical-engineering-journal/articles-collection/sulfate-radical-based-advanced-oxidation-processes>
26. PADMAJA, S., ALFASSI, Z. B., NETA, P. and HUJE, R. E. Rate constants for reactions of SO₄⁻²radicals in acetonitrile. International Journal of Chemical Kinetics. March 1993. Vol. 25, no. 3, p. 193–198. DOI 10.1002/kin.550250307.
27. WANG, Jianlong and WANG, Shizong. Activation of persulfate (PS) and peroxymonosulfate (PMS) and application for the degradation of emerging contaminants. Chemical Engineering Journal. February 2018. Vol. 334, p. 1502–1517. DOI 10.1016/j.cej.2017.11.059.
28. UNIVERSIDAD DE ALCALÁ, UAH. Termodinámica y cinética. In : Termodinámica química [online]. Madrid, [no date]. [Accessed 22 November 2020]. Available from: <http://www3.uah.es/edejesus/resumenes/QB/Tema3.pdf>
29. FÍSICALAB. ¿Qué es la Termodinámica? [online]. [Accessed 22 November 2020]. Available from: <https://www.fisicalab.com/apartado/termodinamica-concepto>
30. KHAN ACADEMY. Termodinámica | Lecciones de química | Ciencia. Khan Academy [online]. [Accessed 22 November 2020]. Available from: <https://es.khanacademy.org/science/chemistry/thermodynamics-chemistry>
31. MONJE, Concha. Estudio del tratamiento de aguas residuales industriales de bocaminas de la mediana minería. . 2015. P. 98.
32. DELGADO, Yaceli. Diseño de un humedal como técnica de remediación para las aguas ácidas del pasivo ambiental el dorado Hualgayoc. Cajamarca-Perú : Universidad Privada del Norte, 2020.
33. KROGERUS, Kirsti and PASANEN, Antti. Management of water balance in mining areas - WaterSmart. . P. 69.
34. SERVICIO GEOLÓGICO DE ESTADOS UNIDOS, USGS. El Ciclo del Agua. [online]. [Accessed 21 November 2020]. Available from: https://www.usgs.gov/special-topic/water-science-school/science/el-ciclo-del-agua-water-cycle-spanish?qt-science_center_objects=0#qt-science_center_objects
35. ECOPRENEUR. Aguas de mina y de proceso. Ecopreneur [online]. [Accessed 21 November 2020]. Available from: <https://www.ecopreneur.cl>
36. LOLA AROWOSHOLA and GASSON, Christopher. Water for Mining: Opportunities in scarcity and environmental regulation. Oxford, UK : Global Water Intelligence; Media Analytics, Inc., 2012. ISBN 978-1-907467-16-5.
37. ADUVIRE, Osvaldo. 1: Drenaje ácido de mina. España : Instituto Geológico y Minero de España, 2006.

38. CAMPOS-SÁNCHEZ, Alan and ULLOA-CARCASSÉS, Mayda. Tratamiento de aguas sulfatadas de origen superficial producidas por una mina de carbón a cielo abierto. . 1993. P. 13.
39. CASTILLO, Victor and CHÁVEZ, Rafael. Influencia del pH y dosis de hidróxido de aluminio sobre el porcentaje de eliminación de sulfatos en agua de mina artificial mediante tratamiento por precipitación mineral. Trujillo-Perú : Universidad Nacional de Trujillo, 2016.
40. INTERNATIONAL NETWORK FOR ACID PREVENTION, INAP. Treatment of sulphate in mine effluents. 2003.
41. VEOLIA WATER TECHNOLOGIES. Eliminación de sulfatos [online]. Available from: <http://www.veoliawatertechnologies.es/vwst-iberica/ressources/files/1/39553,Veolia-Sulfate-Brochure-FinalSP.pdf>
42. SISTEMA NACIONAL DE INFORMACIÓN AMBIENTAL, SINIA. Límites Máximos Permisibles para la descarga de efluentes líquidos de actividades minero-metalúrgicas. 21 August 2010.
43. CAMACHO BARREIRO, Aurora M. and ARIOSA ROCHE, Liliana. Diccionario de términos ambientales. La Habana : Centro Félix Varela, 2000. ISBN 978-959-7071-16-7. QH540.4 .C36 2000
44. DEFENSA AMBIENTAL DE NOROESTE, DAN. Glosario de términos técnicos minería [online]. 2015. Available from: <http://defiendelasierra.org/wp-content/uploads/Glosario-terminos-t%C3%A9cnicos-miner%C3%ADa-espa%C3%B1ol-ingl%C3%A9s.pdf>
45. MINISTERIO DEL AMBIENTE, MINAM. Glosario de términos. [online]. 2016. [Accessed 8 October 2020]. Available from: <http://www.minam.gob.pe/calidadambiental/wp-content/uploads/sites/22/2015/02/2016-05-30-Conceptos-propuesta-Glosario.pdf>
46. PRADO, Carolina Mónica Pinell. Glosario de términos ambientales. Ministerio de Desarrollo Sostenible, 2003. Google-Books-ID: xVNgAAAAMAAJ
47. HERNÁNDEZ SAMPIERI, Roberto, FERNÁNDEZ COLLADO, Carlos and BAPTISTA LUCIO, Pilar. Metodología de la investigación. México, D.F. : McGraw-Hill Education, 2014. ISBN 978-1-4562-2396-0.
48. CADORIN, Luciana. Avances en el tratamiento de aguas ácidas de minas. . Setiembre de 2007.

CONCLUSIONES

1. En conclusión, se ha determinado que no influye significativamente los procesos de oxidación avanzada en el tratamiento de aguas de mina con contenido de sulfatos, encontrando a su principal radical libre, el radical de sulfato siendo éste altamente oxidante contribuye mucho más a las reacciones de transferencia que los radicales hidroxilo además de ser eficiente para tratamiento de suelos y aguas municipales degradando contaminantes emergentes orgánicos, éstos pueden ser generados a través de sonoquímica o cavitación hidráulica aún se debe indagar más en literatura científica y deliberar sobre este desafío y problemas prácticos que se están enfrentando en el curso del uso de los radicales sulfatos por ello se propone la próxima necesidad de un estudio para promover la implementación a una gran escala de estos enfoques.
2. Se determinó también los mecanismos físico-químicos y el grado de influencia del equilibrio de constante de una ecuación con presencia de radicales sulfatos, teniendo en cuenta, su entalpía, entropía y energía libre de Gibbs a diferentes temperaturas, son productos intermedios de reacciones químicas, pueden ser generados a través de los POA (Procesos de oxidación avanzada) respecto a la concentración de sulfatos que fueron obtenidos de fuente bibliográfica, obteniendo una correlación media entre éstos, es necesario hacer un buen uso de estos radicales sulfatos y puedan tener más enfoque en tratamiento de aguas, en el Perú dentro de su normatividad de LMP para efluentes metalúrgicos no se encuentra dentro de sus parámetros la concentración de sulfato, pero en cualquier momento se activa y se debe contar con un tratamiento eficiente tanto a nivel de costos y operación.
3. Se insertó las ecuaciones de fuentes bibliográficas, como es el origen del radical libre sulfato y se insertó diversas ecuaciones con persulfato al modelador llamado HSC (OUTOTEC), programa que realiza cálculos termodinámicos y de procesamiento de minerales en una computadora de una manera rápida y fácil con el objetivo de desarrollar nuevos procesos.
4. Se determinó que los POA tienen relación con los metales disueltos en aguas de mina, hasta cierta temperatura, pues al operar a través del radical sulfato siendo éste altamente oxidante logra a degradar contaminantes recalcitrantes como lo que vendría a ser Cu, Zn, y Fe, que podrían operar en el área industrial con procesos fotoquímicos, como radiación UV, cavitación, energía de ultrasonido, energía térmica que permiten el desarrollo de este poderoso radical sulfato.

5. Finalmente, en conclusión el presente trabajo de investigación recopiló información y data de revisiones bibliográficas, describiendo como se origina los famosos DAM, y que mecanismos físico-químicos están relacionados con éste, teniendo en cuenta uno de los tratamientos de agua, los POA ya que éstos han recibido mucha atención en los últimos años debido a su gran efectividad en degradar contaminantes orgánicos y altamente eficiente en remoción de cianuros, operando a través de radicales libres, y cuál de éstos puede ser el más oxidante y tener interacción con los elementos que se encuentran dispersos en el agua de mina, además de contenidos de sulfato, los resultados son significativos para la aplicación detallada de muchos conceptos científicos, y las técnicas que han sido utilizadas en este trabajo de investigación permiten dar una noción de la interacción de radicales sulfato y elementos del agua de mina.

RECOMENDACIONES

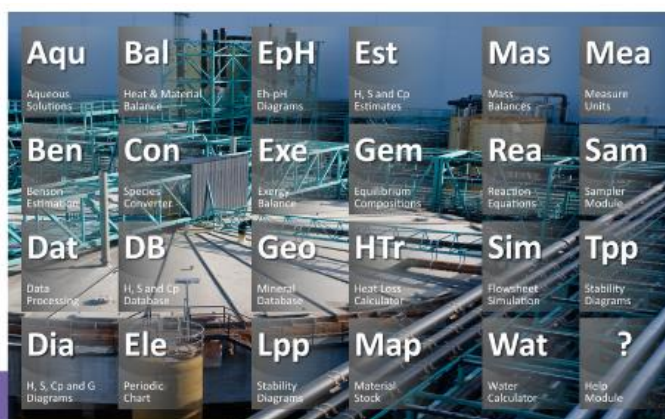
1. Se debe realizar estudios más profundos en trabajos de investigación enfocándose al análisis del parámetro estudiado, y abundar más en literatura científica, pues el radical sulfato es altamente oxidante que es muy eficiente para la degradación de contaminantes emergentes orgánicos y tiene cierta influencia en oxidación de metales pesados que se encuentran en aguas de mina.
2. Se recomienda obtener rangos en parámetros de agua de mina, respecto a sus parámetros físicos-químicos para que se pueda evidenciar de una manera más completa la influencia de los radicales libres de sulfato generados por POA (procesos de oxidación avanzada), ya que las sales de persulfato al descomponerse generan radicales sulfato altamente oxidantes mucho más que los radicales hidróxilo, necesitando de calor o luz, para que pueda ser aplicado con mejores costos a nivel de operación e implementación respecto a los POA fotoquímicos.
3. Se recomienda indagar acerca de otros radicales libres que son generados por los POA que tengan alto potencial de oxidación para que puedan ser aplicados como tratamientos eficientes en aguas de mina con contenido de sulfatos abriéndose así un tratamiento adicional en el campo de industria minera.

ANEXOS

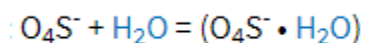
ANEXO 1: MODELADOR HSC (OUTOTEC)

El software permite realizar cálculos termodinámicos y de procesamientos de minerales en cualquier computadora estándar de una manera fácil y sencilla, permite desarrollar nuevos procesos y mejora los que ya existen mediante la modelación y la simulación, también permite desarrollar diversos modelos de diagramas de flujos de procesos y probar nuevas ideas antes que puedan ser aplicados en laboratorio

HSC Chemistry 9



ANEXO 2: VALOR DE RADICAL SULFATO A BASE DE DATO



Quantity	Value	Units	Method	Reference	Comment
$\Delta_r G^\circ$	24.7 ± 0.84	kJ/mol	IMRE	Möhler, Reiner, et al., 1992	gas phase; B

By formula: $(O_4S^- \cdot 4294967295O_3S) + O_3S = O_4S^-$

Quantity	Value	Units	Method	Reference	Comment
$\Delta_r H^\circ$	$450. \pm 22.$	kJ/mol	N/A	Wang, Nicholas, et al., 2000	gas phase; B

ANEXO 3: MATRIZ DE CONSISTENCIA

PROBLEMA	OBJETIVO	HIPÓTESIS	VARIABLES	DIMENSIONES	INDICADORES
¿Existe factibilidad de aplicación de (POA) en el tratamiento de aguas de mina con contenido de sulfatos?	Determinar la factibilidad de los POA en los tratamientos de agua en los contenidos de sulfatos.	Los radicales libres de Procesos de Oxidación Avanzada son factibles en los tratamientos de aguas con contenidos de sulfatos.	Independiente: Mecanismos físico-químicos	Química	<ul style="list-style-type: none"> • Radicales de sulfato
<ul style="list-style-type: none"> • ¿Cuál de los POA es de mayor eficiencia en los tratamientos de agua de mina con contenido de sulfato? • ¿Cuáles son los mecanismos físico-químicos de POA que generan radicales libres para la alteración o remoción de sulfatos presentes en aguas de mina? • ¿Es posible modelar computacionalmente los POA, radicales libres y su interacción con el sulfato presente en el agua de mina? 	<ul style="list-style-type: none"> • Determinar el tipo de procesos más eficientes de los POA en tratamientos de aguas de mina con contenido de sulfatos. • Determinar los mecanismos físico-químicos de POA que generan radicales libres para la alteración o remoción de sulfatos presentes en el agua de mina y efluentes. • Proponer un modelo computacional para la interpretación del POA, radicales libres y su interacción con el sulfato presente en el agua de mina y efluentes. 	<ul style="list-style-type: none"> • Los POAs son eficientes en tratamientos de aguas de mina • Los mecanismos físico-químicos de los POA pueden generar radicales libres y alterar los sulfatos presentes en el agua de mina • El modelamiento computacional puede interpretar los POA, radicales libres y su interacción con el sulfato presente en el agua de mina y efluentes. 	Dependiente: Concentración de metales	Química	<ul style="list-style-type: none"> • Concentración de Fe • Concentración de Cu • Concentración de sulfatos