



Universidad
del País Vasco

Euskal Herriko
Unibertsitatea

BASES DE INGENIERÍA AMBIENTAL

TEMA 2.- FUNDAMENTOS DE LA INGENIERÍA AMBIENTAL: REACCIÓN QUÍMICA Y EQUILIBRIO

Actividades prácticas resolución

Escuela de Ingeniería de Bilbao

Departamento de Ingeniería
Química y del Medio Ambiente

Maite de Blas Martín

Jose Antonio García Fernández

M^a Carmen Gómez Navazo



CONSIDERACIONES PREVIAS

Este documento recoge los enunciados, los cálculos numéricos y las explicaciones oportunas para la resolución de las actividades prácticas propuestas:

Recomendaciones

- Se recomienda resolver las actividades a medida que se revisan los materiales de estudio del Tema 2, ya que los enunciados de las actividades prácticas también se incluyen en los propios materiales, tras haber visto los conceptos teóricos necesarios para su resolución.
- Una vez resuelta la actividad práctica, comprobar que el procedimiento de cálculo es correcto consultando este documento.

Material y recursos

- **Calculadora.**
- **Datos:** todos los datos necesarios para la resolución se incluyen en los enunciados y/o en los materiales de estudio.

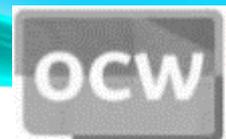
A continuación, se indican las actividades prácticas (incluidas en este documento) y a realizar en cada apartado del **Tema 2**:

Tema 2.- Contenido teórico		Actividades prácticas
2.1. Unidades en Ingeniería Ambiental		2.1, 2.2, 2.3, 2.4, 2.5, 2.6, 2.7, 2.8, 2.9, 2.10, 2.11
2.2. Reacción química		2.12, 2.13
2.3. Procesos de equilibrio	2.3.1. Equilibrio y cinética	2.14, 2.15, 2.16
	2.3.2. Equilibrio químico	2.17, 2.18, 2.19
	2.3.3. Actividad y concentración	2.20, 2.21
	2.3.4. Energía libre de Gibbs y constante de equilibrio	2.22, 2.23
2.4. Procesos de equilibrio en sistemas ambientales	2.4.1. Equilibrio gas-líquido	2.24, 2.25
	2.4.2. Equilibrio ácido-base	2.26, 2.27, 2.28
	2.4.3. Equilibrio de precipitación - disolución	2.29, 2.30



TEMA 2.- Fundamentos de la Ingeniería Ambiental: reacción química y equilibrio

2.1. Unidades en Ingeniería Ambiental



2.1. UNIDADES

Unidades de concentración en masa (masa / masa)

Actividad práctica 2.1. Se ha tomado una muestra de suelo de 100 g para determinar su concentración en TCE (tricloroetileno). El análisis ha proporcionado un resultado de 1,25 mg de TCE. Calcular la concentración del TCE en $\text{mg}\cdot\text{kg}^{-1}$, fracción en masa, ppm_m , y ppb_m .

Se procede al cálculo de la concentración de TCE, tricloroetileno (C_2HCl_3) en la muestra de suelo en las unidades indicadas:

- [TCE] en $\text{mg}\cdot\text{kg}^{-1}$: $[\text{TCE}] = \frac{1,25 \text{ mg TCE}}{100 \cdot 10^{-3} \text{ kg suelo}} = 12,5 \text{ mg}\cdot\text{kg}^{-1}$
- Fracción en masa: $w_{\text{TCE}} = \frac{m_{\text{TCE}}}{m_{\text{suelo}}} = \frac{1,25 \text{ mg TCE}}{100 \cdot 10^3 \text{ mg suelo}} = 1,25 \cdot 10^{-5}$
- ppm_m (en masa): $\text{ppm}_m = \frac{m_{\text{TCE}}}{m_{\text{suelo}}} \cdot 10^6 = w_{\text{TCE}} \cdot 10^6 = 1,25 \cdot 10^{-5} \cdot 10^6 = 12,5 \text{ ppm}_m$
- ppb_m (en masa): $\text{ppb}_m = \frac{m_{\text{TCE}}}{m_{\text{suelo}}} \cdot 10^9 = w_{\text{TCE}} \cdot 10^9 = 1,25 \cdot 10^{-5} \cdot 10^9 = 12500 \text{ ppb}_m$

*En una muestra de **suelo**: $\text{mg}\cdot\text{kg}^{-1} = \text{ppm}_m$

2.1. UNIDADES

Unidades de masa / volumen

Actividad práctica 2.2. Calcular la concentración de óxido nitroso expresada en $\text{mg}\cdot\text{m}^{-3}$, de una **muestra gaseosa** que tiene un volumen de 1 L y contiene 10^{-8} moles de óxido nitroso.

Datos: pesos atómicos N (14), O (16).

Para expresar la concentración de óxido nitroso (N_2O), en $\text{mg}\cdot\text{m}^{-3}$, primeramente es necesario calcular la masa de 10^{-8} moles de N_2O en mg. Teniendo en cuenta que el peso molecular del N_2O es $44 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1}$:

$$10^{-8} \text{ moles } \text{N}_2\text{O} \cdot \frac{44 \text{ g } \text{N}_2\text{O}}{1 \text{ mol } \text{N}_2\text{O}} \cdot \frac{1000 \text{ mg } \text{N}_2\text{O}}{1 \text{ g } \text{N}_2\text{O}} = 4,4 \cdot 10^{-4} \text{ mg } \text{N}_2\text{O}$$

Para calcular la concentración, se divide la masa de N_2O en mg por el volumen de la muestra gaseosa en m^3 (1 L = $0,001 \text{ m}^3$):

$$[\text{N}_2\text{O}] = \frac{4,4 \cdot 10^{-4} \text{ mg } \text{N}_2\text{O}}{0,001 \text{ m}^3 \text{ muestra gaseosa}} = 0,44 \text{ mg } \text{N}_2\text{O}\cdot\text{m}^{-3}$$

2.1. UNIDADES

Unidades de masa / volumen

Actividad práctica 2.3. En el análisis de una muestra de 1 L de agua se ha obtenido 3,5 mg de TCE (tricloroetileno). Calcular la concentración de TCE en $\text{mg}\cdot\text{L}^{-1}$ y en ppm_m .

Se procede al cálculo de la concentración de tricloroetileno (C_2HCl_3) en la muestra de agua en las unidades indicadas:

- [TCE] en $\text{mg}\cdot\text{L}^{-1}$:
$$[\text{TCE}] = \frac{3,5 \text{ mg TCE}}{1 \text{ L agua}} = 3,5 \text{ mg}\cdot\text{L}^{-1}$$
- ppm_m (en masa):
$$\text{ppm}_m = \frac{m_{\text{TCE}}}{m_{\text{agua}}} \cdot 10^6 = \frac{3,5 \text{ mg TCE}}{10^6 \text{ mg agua}} \cdot 10^6 = 3,5 \text{ ppm}_m$$

Para hacer el cálculo se debe tener en cuenta que, en **disoluciones acuosas muy diluidas**, la densidad de la disolución es igual a la del agua: $\sim 1 \text{ kg}\cdot\text{L}^{-1}$

*En la muestra de **agua**, al ser una disolución muy diluida: $\text{mg}\cdot\text{L}^{-1} = \text{ppm}_m$

2.1. UNIDADES

Unidades de volumen / volumen y mol / mol

Actividad práctica 2.4. Un determinado volumen de gas contiene 0,04 moles de dióxido de carbono (CO_2) y 0,96 moles de aire. Calcular la concentración del CO_2 expresada en ppm_v .

Datos: pesos atómicos C (12), O (16).

Para calcular la concentración de dióxido de carbono (CO_2) en la mezcla gaseosa (CO_2 y aire) en las unidades indicadas:

$$\text{ppm}_v = \frac{V_{\text{CO}_2}}{V_{\text{mezcla gaseosa}}} \cdot 10^6 = \frac{\frac{n_{\text{CO}_2} RT}{P}}{\frac{n_t RT}{P}} \cdot 10^6 = \frac{n_{\text{CO}_2}}{n_{\text{total}}} \cdot 10^6$$

$p V = n R T$

Sustituyendo los valores del número de moles de CO_2 ($n_{\text{CO}_2} = 0,04$ mol) y el número de moles totales de la mezcla gaseosa ($n_t = 0,04 + 0,96 = 1$ mol):

$$\text{ppm}_v = \frac{0,04 \text{ mol } \text{CO}_2}{1 \text{ mol gas}} \cdot 10^6 = 40.000 \text{ ppm}_v$$

2.1. UNIDADES

Unidades de volumen / volumen y mol / mol

Las ppm_v son unidades adecuadas para expresar concentraciones bajas. Para altas concentraciones, como en este caso, es más recomendable utilizar el porcentaje en volumen:

$$\% \text{CO}_2 = \frac{0,04 \text{ mol CO}_2}{1 \text{ mol gas}} \cdot 100 = 4 \%$$

En el gráfico 2.1 se recoge la concentración de la mezcla de concentración 4% de CO₂ (izquierda) y otra mezcla con una concentración de CO₂ 10000 veces inferior (derecha), cuya concentración es 4·10⁻⁶ % de CO₂ o 4 ppm_v de CO₂.

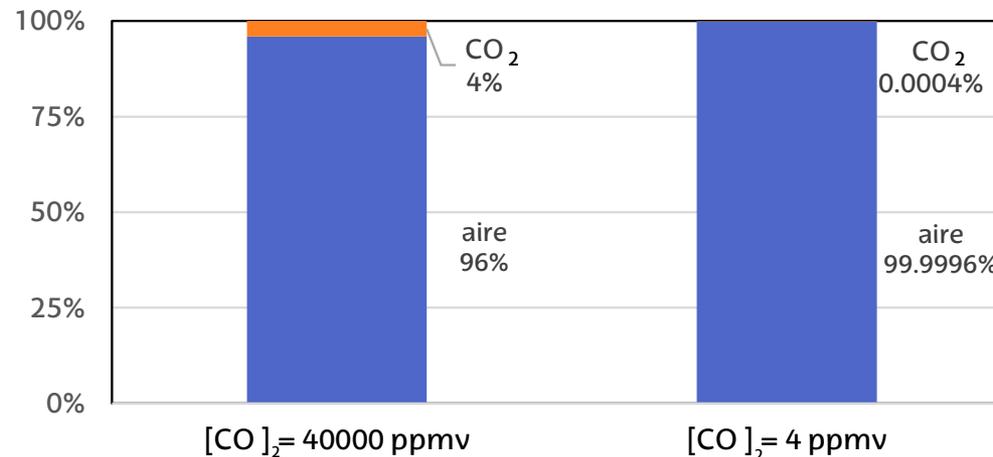


Gráfico 2.1. Concentración en porcentaje en volumen de dos mezclas gaseosas: 4 % de CO₂ (izquierda) y 4 ppm_v (derecha). Elaboración propia

2.1. UNIDADES

Unidades de volumen / volumen y mol / mol

Actividad práctica 2.5. En una Estación de Vigilancia de la Contaminación Atmosférica urbana se dispone de un equipo de medida en continuo de NO₂ para el control de la calidad del aire. En un determinado momento se ha medido un valor de 30 ppb_v cuando la temperatura era 18 °C y la presión 0,97 atmósferas. Calcular su equivalencia en μg·m⁻³.

Datos: pesos atómicos N (14), O (16).

Existen varias posibilidades de cálculo. Una primera consiste en aplicar directamente la ecuación que se recoge a modo de información adicional para resolver la actividad práctica 2.5:

$$[i (\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3})] = [i (\text{ppb}_v)] PM \frac{P}{R T}$$

$$[\text{NO}_2] = 30 \text{ ppb}_v \cdot 46 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1} \frac{0,97 \text{ atm}}{0,082 \text{ atm}\cdot\text{L}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot(18+273)\text{K}} = 56,1 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$$

* Tener en cuenta que si la concentración se expresa en relaciones en volumen (ppb_v) no hace falta especificar P y T, pero con unidades de masa entre volumen (μg·m⁻³) hay que especificar la T y P del cálculo

2.1. UNIDADES

Unidades de volumen / volumen y mol / mol

Otra posibilidad de cálculo parte de que las unidades ppb_v corresponden a:

$$\text{ppb}_v = \frac{V_{\text{NO}_2} (\mu\text{L})}{V_{\text{aire ambiente}} (\text{m}^3)}$$

Por tanto:

$$30 \text{ ppb}_v = \frac{30 \mu\text{L NO}_2}{\text{m}^3 \text{ aire ambiente}}$$

Para pasar de $\mu\text{L NO}_2$ a $\mu\text{g NO}_2$, primeramente es necesario conocer el volumen que ocupa 1 mol de NO_2 en las condiciones dadas: 18 °C y 0,97 atm.

Ley de los Gases Ideales: $P V = n R T$

$$V (\text{NO}_2) = \frac{1 \text{ mol NO}_2 \cdot 0,082 \text{ atm} \cdot \text{L} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot (18+273)\text{K}}{0,97 \text{ atm}} = 24,6 \text{ L}$$

Aplicando los siguientes factores de conversión se obtiene el mismo resultado que mediante el anterior procedimiento:

$$\frac{30 \mu\text{L NO}_2}{\text{m}^3 \text{ aire ambiente}} \cdot \frac{1 \text{ L NO}_2}{10^9 \mu\text{L NO}_2} \cdot \frac{1 \text{ mol NO}_2}{24,6 \text{ L NO}_2} \cdot \frac{46 \text{ g NO}_2}{1 \text{ mol NO}_2} \cdot \frac{10^9 \mu\text{g NO}_2}{1 \text{ g NO}_2} = 56,1 \mu\text{g} \cdot \text{m}^{-3}$$

* Si cambia la T y/o P, no cambian las ppb_v pero sí cambian los $\mu\text{g} \cdot \text{m}^{-3}$

2.1. UNIDADES

Unidades de presión parcial (gases)

Actividad práctica 2.6. Se ha medido una concentración de $12 \text{ ng}\cdot\text{m}^{-3}$ de benzo(a)pireno (BaP) en una determinada zona industrial. Calcular su presión parcial expresada en atmósferas. La temperatura es $20 \text{ }^\circ\text{C}$ y la presión $0,98 \text{ atm}$.
 Datos: pesos atómicos C (12), H (1).

Para calcular la presión parcial de BaP: $p_{\text{BaP}} = y_{\text{BaP}} \cdot p$ [1]

La presión total es $p=0,98 \text{ atm}$. La fracción molar de BaP (fórmula molecular $\text{C}_{20}\text{H}_{12}$) debe calcularse a partir de su concentración, pero primeramente se debe calcular el volumen que ocupa 1 mol de BaP a $20 \text{ }^\circ\text{C}$ y $0,98 \text{ atm}$:

$$V_{\text{BaP}} = \frac{1 \text{ mol BaP } 0,082 \text{ atm}\cdot\text{L}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot(20+273)\text{K}}{0,98 \text{ atm}} = 24,5 \text{ L}$$

Aplicando los siguientes factores de conversión y volviendo a la expresión [1]:

$$\frac{12 \text{ ng BaP}}{\text{m}^3 \text{ aire}} \cdot \frac{1 \text{ g BaP}}{10^9 \text{ ng BaP}} \cdot \frac{1 \text{ mol BaP}}{252 \text{ g BaP}} \cdot \frac{1 \text{ m}^3 \text{ aire}}{1000 \text{ L aire}} \cdot \frac{24,5 \text{ L BaP}}{1 \text{ mol BaP}} = 1,17 \cdot 10^{-12} = y_{\text{BaP}}$$

$$p_{\text{BaP}} = y_{\text{BaP}} \cdot p = 1,17 \cdot 10^{-12} \cdot 0,98 \text{ atm} = 1,14 \cdot 10^{-12} \text{ atm}$$

2.1. UNIDADES

Densidad de moléculas (gases)

Actividad práctica 2.7. Calcular la densidad de la atmósfera (expresada en moléculas·m⁻³) en las siguientes condiciones:

- a) A nivel del mar, condiciones normales de temperatura y presión (0 °C, 1 atm)
- b) En la ozonfera a 17 mmHg y -30°C
- c) En la ionosfera a 1,9 10⁻⁶ mmHg y 210°C

Partiendo de la siguiente expresión (ver Materiales de Estudio):

$$\rho' \text{ (moléculas} \cdot \text{L}^{-1}) = \frac{p \text{ (atm)}}{R \text{ (atm} \cdot \text{L} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1})T \text{ (K)}} \cdot N_A \text{ (6,022} \cdot 10^{23} \text{ moléculas} \cdot \text{mol}^{-1}) \quad [2]$$

a) A nivel del mar:

$$\rho' \text{ (moléculas} \cdot \text{L}^{-1}) = \frac{1 \text{ atm}}{0,082 \text{ atm} \cdot \text{L} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot 273 \text{ K}} \cdot 6,022 \cdot 10^{23} \text{ moléculas} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$$\rho' \text{ (moléculas} \cdot \text{L}^{-1}) = 2,69 \cdot 10^{22} \text{ moléculas} \cdot \text{L}^{-1}; \quad \rho' = 2,69 \cdot 10^{25} \text{ moléculas} \cdot \text{m}^{-3}$$

2,69·10²⁵ es el **número de Loschmidt**, es decir, el número de moléculas de un gas ideal en un 1 m³ a 0 °C y 1 atm.

2.1. UNIDADES

Densidad de moléculas (gases)

b) En la ozonofera a 17 mmHg y -30°C

Volviendo a la expresión [2] y considerando que 1 atm=760 mmHg:

$$\rho' \text{ (moléculas}\cdot\text{L}^{-1}\text{)} = \frac{17 \text{ mmHg} \frac{1 \text{ atm}}{760 \text{ mmHg}}}{0,082 \text{ atm}\cdot\text{L}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot(-30+273)\text{K}} \cdot 6,022\cdot 10^{23} \text{ moléculas}\cdot\text{mol}^{-1}$$

$$\rho' \text{ (moléculas}\cdot\text{L}^{-1}\text{)} = 6,76\cdot 10^{20} \text{ moléculas}\cdot\text{L}^{-1}; \quad \rho' = 6,76\cdot 10^{23} \text{ moléculas}\cdot\text{m}^{-3}$$

c) En la ionosfera a 1,9 10⁻⁶ mmHg y 210°C

Siguiendo el mismo procedimiento que en los apartados b) y c):

$$\rho' \text{ (moléculas}\cdot\text{L}^{-1}\text{)} = \frac{1,9\cdot 10^{-6} \text{ mmHg} \frac{1 \text{ atm}}{760 \text{ mmHg}}}{0,082 \text{ atm}\cdot\text{L}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot(210+273)\text{K}} \cdot 6,022\cdot 10^{23} \text{ moléculas}\cdot\text{mol}^{-1}$$

$$\rho' \text{ (moléculas}\cdot\text{L}^{-1}\text{)} = 3,80\cdot 10^{13} \text{ moléculas}\cdot\text{L}^{-1}; \quad \rho' = 3,80\cdot 10^{16} \text{ moléculas}\cdot\text{m}^{-3}$$

2.1. UNIDADES

Unidades de molaridad (moles / volumen)

Actividad práctica 2.8. Expresar la concentración de tricloroetileno (TCE) en agua 3,5 ppm_m en unidades de molaridad.

Datos: pesos atómicos Cl (35,5), C (12), H (1).

Disolución diluida: densidad = 1 kg·L⁻¹

Al tratarse de una disolución diluida puede considerarse que su densidad es 1 kg·L⁻¹, por lo que la concentración en unidades ppm_m es igual a mg·L⁻¹:

$$3,5 \text{ ppm}_m \text{ TCE} = \frac{3,5 \text{ mg TCE}}{1 \text{ kg disolución}} = \frac{3,5 \text{ mg TCE}}{1 \text{ L disolución}} = 3,5 \text{ mg TCE} \cdot \text{L}^{-1}$$

Para calcular la concentración en unidades de molaridad (mol TCE·L⁻¹) es necesario hacer la conversión de mg a moles de TCE (C₂HCl₃):

$$\frac{3,5 \text{ mg TCE}}{1 \text{ L disolución}} \cdot \frac{1 \text{ g TCE}}{1000 \text{ mg TCE}} \cdot \frac{1 \text{ mol TCE}}{131,5 \text{ g TCE}} = 2,7 \cdot 10^{-5} \text{ mol TCE} \cdot \text{L}^{-1}$$

2.1. UNIDADES

Unidades de molaridad (moles / volumen)

Actividad práctica 2.9. Una muestra líquida tiene una concentración de hierro de $5,6 \text{ mg}\cdot\text{L}^{-1}$. Si la densidad del líquido es $2000 \text{ g}\cdot\text{L}^{-1}$ ¿Cuál es la concentración de Fe en ppm_m ?

Disolución concentrada: densidad $\neq 1 \text{ kg}\cdot\text{L}^{-1}$

La densidad de esta disolución es $2000 \text{ g}\cdot\text{L}^{-1}$ ($2 \text{ kg}\cdot\text{L}^{-1}$), por lo que la concentración en unidades ppm_m **no** es igual a $\text{mg}\cdot\text{L}^{-1}$.

Partiendo de la concentración de la disolución en $\text{mg}\cdot\text{L}^{-1}$ y aplicando los siguientes factores de conversión se obtiene la concentración en ppm_m :

$$\frac{5,6 \text{ mg Fe}}{1 \text{ L disolución}} \cdot \frac{1 \text{ L disolución}}{2 \text{ kg disolución}} = 2,8 \cdot \text{mg Fe}\cdot\text{kg}^{-1} = 2,8 \text{ ppm}_m \text{ Fe}$$

2.1. UNIDADES

Concentración expresada como constituyente común

Actividad práctica 2.10. Una muestra de agua contiene dos especies de nitrógeno. La concentración de NH_3 es de $20 \text{ mg}\cdot\text{L}^{-1}$ y la de NO_3^- es $7 \text{ mg}\cdot\text{L}^{-1}$. Calcular la concentración de nitrógeno total en $\text{mg de N}\cdot\text{L}^{-1}$.
 Datos: pesos atómicos N (14), O (16), H (1).

Para expresar la concentración en $\text{mg de N}\cdot\text{L}^{-1}$ es necesario considerar el peso molecular de cada una de las especies y hacer la conversión:

$$\frac{20 \text{ mg NH}_3}{1 \text{ L}} \cdot \frac{1 \text{ mmol NH}_3}{17 \text{ mg NH}_3} \cdot \frac{1 \text{ mmol N}}{1 \text{ mmol NH}_3} \cdot \frac{14 \text{ mg N}}{1 \text{ mmol N}} = 16,5 \text{ mg N}\cdot\text{L}^{-1}$$

$$\frac{7 \text{ mg NO}_3^-}{1 \text{ L}} \cdot \frac{1 \text{ mmol NO}_3^-}{62 \text{ mg NO}_3^-} \cdot \frac{1 \text{ mmol N}}{1 \text{ mmol NO}_3^-} \cdot \frac{14 \text{ mg N}}{1 \text{ mmol N}} = 1,6 \text{ mg N}\cdot\text{L}^{-1}$$

Sumando se obtiene la concentración total:

$$(16,5 + 1,6) \text{ mg N}\cdot\text{L}^{-1} = 18,1 \text{ mg N}\cdot\text{L}^{-1}$$

2.1. UNIDADES

Concentración expresada como constituyente común

Actividad práctica 2.11. Calcular la dureza de un agua en $\text{mg}\cdot\text{L}^{-1}$ de CaCO_3 si su composición química es: Ca^{2+} : $18 \text{ mg}\cdot\text{L}^{-1}$, Mg^{2+} : $12 \text{ mg}\cdot\text{L}^{-1}$, SO_4^{2-} : $40 \text{ mg}\cdot\text{L}^{-1}$. Indicar qué tipo de agua es en función de la dureza establecida en la tabla 2.4. Datos: pesos atómicos Ca (40), S (32), O (16), Mg (24)

Tabla 2.4. Tipos de agua potable en función de la dureza (Fuente: [OMS, 2010](#))

Tipo de agua	Dureza (ppm CaCO_3)
Suave	< 60
Moderadamente dura	60-120
Dura	120-180
Muy dura	≥ 180

La dureza del agua se debe a la presencia de cationes divalentes, principalmente Ca^{2+} y Mg^{2+} (los más abundantes en aguas naturales).

2.1. UNIDADES

Concentración expresada como constituyente común

Para calcular la dureza total, se debe seguir el siguiente procedimiento de cálculo:

1.- Determinar todas las especies individuales que contribuyen a la dureza: Ca^{2+} y Mg^{2+} (el SO_4^{2-} no contribuye a la dureza),

2.- Convertir cada una de las especies a $\text{mg}\cdot\text{L}^{-1}$ de CaCO_3 ,

$$\frac{18 \text{ mg Ca}^{2+}}{1 \text{ L}} \cdot \frac{1 \text{ mmol Ca}^{2+}}{40 \text{ mg Ca}^{2+}} \cdot \frac{1 \text{ mmol CaCO}_3}{1 \text{ mmol Ca}^{2+}} \cdot \frac{100 \text{ mg CaCO}_3}{1 \text{ mmol CaCO}_3} = 45,0 \text{ mg CaCO}_3\cdot\text{L}^{-1}$$

$$\frac{12 \text{ mg Mg}^{2+}}{1 \text{ L}} \cdot \frac{1 \text{ mmol Mg}^{2+}}{24 \text{ mg Mg}^{2+}} \cdot \frac{1 \text{ mmol CaCO}_3}{1 \text{ mmol Mg}^{2+}} \cdot \frac{100 \text{ mg CaCO}_3}{1 \text{ mmol CaCO}_3} = 50,0 \text{ mg CaCO}_3\cdot\text{L}^{-1}$$

3.- Sumar la contribución de todas.

$$(45,0 + 50,0) \text{ mg CaCO}_3\cdot\text{L}^{-1} = 95,0 \text{ mg CaCO}_3\cdot\text{L}^{-1} = 95,0 \text{ ppm}_m \text{ CaCO}_3$$

 disolución diluida

Se trata de un agua moderadamente dura (Tabla 2.4: 60-120 $\text{ppm}_m \text{ CaCO}_3$)



TEMA 2.- Fundamentos de la Ingeniería Ambiental: reacción química y equilibrio

2.2. Reacción Química



2.2. REACCIÓN QUÍMICA

Reacción química

Actividad práctica 2.12. Una importante reacción química entre la atmósfera y los océanos es la que disuelve el dióxido de carbono en el agua líquida para formar ácido carbónico:



Calcular la masa de ácido carbónico que se forma por cada kilogramo de dióxido de carbono que reacciona con el agua líquida.

Datos: Pesos atómicos C (12), O (16) y H (1).

El procedimiento de cálculo a seguir es el siguiente:

- 1.- Ajustar la reacción química (está ajustada): $\text{CO}_2 (\text{g}) + \text{H}_2\text{O} (\text{l}) \rightarrow \text{H}_2\text{CO}_3 (\text{l})$
- 2.- Hacer la conversión de la masa a moles, ya que las proporciones estequiométricas en la reacción se indican en moles:

$$1 \text{ kg CO}_2 \cdot \frac{1 \text{ kmol CO}_2}{44 \text{ kg CO}_2} \cdot \frac{1 \text{ kmol H}_2\text{CO}_3}{1 \text{ kmol CO}_2} \cdot \frac{62 \text{ kg H}_2\text{CO}_3}{1 \text{ kmol H}_2\text{CO}_3} = 1,41 \text{ kg H}_2\text{CO}_3$$

Por cada kg de CO_2 que reacciona se forman 1,41 kg de H_2CO_3 .

2.2. REACCIÓN QUÍMICA

Reacciones fotoquímicas

Actividad práctica 2.13. Con luz solar ($h\nu$), el NO_2 se disocia según la siguiente reacción fotoquímica: $\text{NO}_2 (\text{g}) + h\nu \rightarrow \text{NO}_2^* (\text{g}) \rightarrow \text{NO} (\text{g}) + \text{O} (\text{g})$

Si la energía de disociación para la reacción es $304 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$, calcular cuál es la longitud de onda mínima de radiación que puede causar esta disociación.

La energía E de un fotón viene dada por: $E = h \nu = h \frac{c}{\lambda}$ [3]

h : constante de *Planck*, $6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$;

c : velocidad de propagación de la radiación electromagnética $\approx 3 \cdot 10^8 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$.

Por tanto, para calcular la longitud de onda es necesario calcular la energía de un solo fotón y sustituir en la expresión [3]:

$$304 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1} \cdot \frac{1 \text{ mol}}{6,022 \cdot 10^{23} \text{ fotones}} \cdot \frac{1000 \text{ J}}{1 \text{ kJ}} = 5,05 \cdot 10^{-19} \text{ J}\cdot\text{fotón}^{-1}$$

$$5,05 \cdot 10^{-19} \text{ J} = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s} \frac{3 \cdot 10^8 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}}{\lambda}$$

$$\lambda = 3,94 \cdot 10^{-7} \text{ m} \rightarrow (1 \text{ nm} = 10^{-9} \text{ m}) \rightarrow \lambda = 394 \text{ nm}$$

La longitud de onda 394 nm corresponde al espectro visible.



Universidad
del País Vasco

Euskal Herriko
Unibertsitatea

TEMA 2.- Fundamentos de la Ingeniería Ambiental: reacción química y equilibrio

2.3. Procesos de equilibrio



2.3.1. EQUILIBRIO Y CINÉTICA

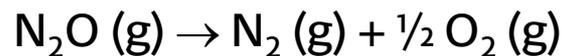
Órdenes de las reacciones

Actividad práctica 2.14. A 585°C la descomposición del óxido nitroso en nitrógeno y oxígeno sigue una reacción de primer orden. La presión ejercida por el sistema (partiendo de óxido nitroso puro) durante la descomposición a volumen constante ha sido medida experimentalmente en distintos tiempos obteniéndose los siguientes valores:

P_T (mmHg)	374,3	415,4	435,0	455,9	468,5
t (h)	0	26,5	42,0	62,6	75,0

Calcular la constante cinética k a 585°C.

La reacción planteada es:



Situación inicial: P_0 - -

Situación final: $P_0 - x$ x $\frac{1}{2} x$

Es una reacción de primer orden. La expresión de la velocidad de reacción es:

$$r = - \frac{d[\text{N}_2\text{O}]}{dt} = k[\text{N}_2\text{O}]$$

2.3.1. EQUILIBRIO Y CINÉTICA

Órdenes de las reacciones

Para indicar la expresión anterior en función de P_{N_2O} (presión parcial de N_2O), es necesario considerar la Ley de Gases Ideales:

$$P_{N_2O} V = n_{N_2O} R T, [N_2O] = \frac{P_{N_2O}}{RT} \quad r = - \frac{dP_{N_2O}}{dt} = k \cdot P_{N_2O}$$

Integrando la expresión entre el tiempo inicial (t_0) y final (t), para las presiones $(P_{N_2O})_0$ y $(P_{N_2O})_t$ se obtiene:

$$\ln \frac{(P_{N_2O})_t}{(P_{N_2O})_0} = -k t \quad k = \frac{\ln \frac{(P_{N_2O})_t}{(P_{N_2O})_0}}{t} \quad [4]$$

Para hallar la constante cinética k se debe indicar la expresión [4] en función de la presión parcial de N_2O (P_{N_2O}) y tiempo (t). La relación entre la presión total (P_T , valor experimental proporcionado) y P_{N_2O} , en el tiempo 't' (situación final):

$$P_T = P_0 - x + x + \frac{1}{2} x = P_0 + \frac{1}{2} x \quad \rightarrow \quad x = 2 P_T - 2 P_0$$

Se sustituye 'x' en la presión parcial de N_2O en el tiempo 't' (situación final):

$$P_{N_2O} = P_0 - x = P_0 - 2 P_T + 2 P_0 = 3 P_0 - 2 P_T$$

2.3.1. EQUILIBRIO Y CINÉTICA

Órdenes de las reacciones

Se sustituyen los datos experimentales de presión total inicial (P_0) y presión total (P_T) para calcular el valor de k según se recoge en la siguiente tabla:

Nº	P_T (mmHg)	t (h)	$P_{N_2O} = 3 P_0 - 2 P_T$ (mmHg)	$\ln \frac{(P_{N_2O})_t}{(P_{N_2O})_0}$	$k = \frac{\ln \frac{(P_{N_2O})_t}{(P_{N_2O})_0}}{t}$
0	374,3	0	-	-	-
1	415,4	26,5	292,1	0,2480	$9,357 \cdot 10^{-3}$
2	435,0	42,0	252,9	0,3921	$9,335 \cdot 10^{-3}$
3	455,9	62,6	211,1	0,5727	$9,149 \cdot 10^{-3}$
4	468,5	75,0	185,9	0,6998	$9,331 \cdot 10^{-3}$

Para calcular el valor de la constante cinética k' , se calcula el promedio de los valores obtenidos para los valores experimentales 1-4: $9,293 \cdot 10^{-3}$. Por tanto:

$$k' = 9,293 \cdot 10^{-3} \text{ h}^{-1}$$

2.3.1. EQUILIBRIO Y CINÉTICA

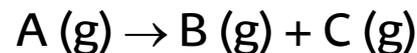
Órdenes de las reacciones

Actividad práctica 2.15. La reacción $A(g) \rightarrow B(g) + C(g)$ se estudió en función del tiempo en un recipiente cerrado de 250 mL de capacidad, encontrándose las siguientes presiones totales:

$P_T(\text{mmHg})$	397	431	471	531	602
$t(\text{s})$	0	42	105	240	500

Calcular el orden de reacción mediante el método de diagramas.

Se dispone de datos de presión total para la siguiente reacción, en la que todos los reactivos y productos están en fase gaseosa. La reacción planteada es:



Situación inicial: P_{A0} - -

Situación final: $P_{A0} - x$ + x + x

Para hallar el orden de reacción mediante el método de diagramas, se debe representar la presión en función del tiempo. En función de la representación obtenida la reacción será de orden cero, primer orden o de segundo orden.

2.3.1. EQUILIBRIO Y CINÉTICA

Órdenes de las reacciones

Orden cero: $r = -\frac{dP_A}{dt} = k_0 \quad \rightarrow \quad P_A = P_{A0} - k_0 t \quad [5.0]$

Primer orden: $r = -\frac{dP_A}{dt} = k_1 t \quad \rightarrow \quad \ln P_A = \ln P_{A0} - k_1 t \quad [5.1]$

Segundo orden: para reacción $A(g) \rightarrow B(g) + C(g)$, se plantea el caso sencillo, ya que A es el único reactivo:

$$r = -\frac{dP_A}{dt} = k_2 t \quad \rightarrow \quad \frac{1}{P_A} = \frac{1}{P_{A0}} + k_2 t \quad [5.2]$$

Para hallar la constante cinética mediante el método de diagramas se deben representar P_A , $\ln P_A$ y $1/P_A$ frente al tiempo (t), para ver cuál de las rectas se ajusta mejor. La constante cinética es la pendiente de la recta de las expresiones [5.0], [5.1] y [5.2], para la reacción de orden cero, primer orden y segundo orden respectivamente.

A continuación, se indica la relación entre la presión parcial de A (P_A) en el tiempo 't' (situación final) y el valor de presión total (P_T , valor experimental proporcionado).

2.3.1. EQUILIBRIO Y CINÉTICA

Órdenes de las reacciones

La presión total en la situación final:

$$P_T = P_{A0} - x + x + x \quad \rightarrow \quad x = P_T - P_{A0}$$

Se sustituye 'x' en la expresión de la presión parcial de A (situación final):

$$P_A = P_{A0} - x = P_{A0} - P_T + P_{A0} = 2 P_{A0} - P_T$$

Se sustituyen los datos experimentales de presión total inicial (P_0) y presión total (P_T) para calcular el valor de k, según se recoge en la siguiente tabla:

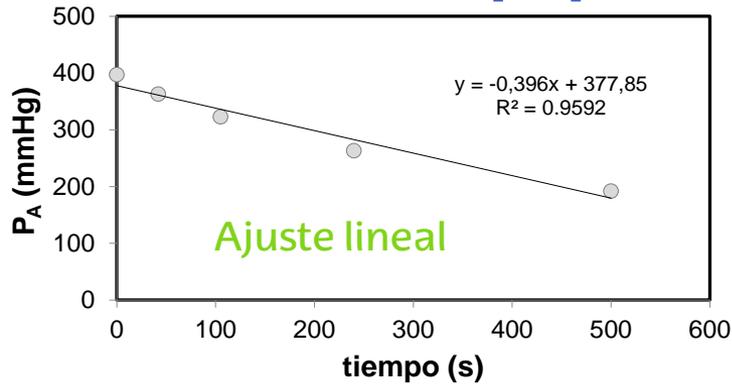
Nº	P_T (mmHg)	t (h)	Orden cero P_A (mmHg)	Primer orden $\ln P_A$ (adimensional)	Segundo orden $1/P_A$ (mmHg ⁻¹)
0	397	0	397	5,98	$2,52 \cdot 10^{-3}$
1	431	42	363	5,89	$2,75 \cdot 10^{-3}$
2	471	105	323	5,78	$3,10 \cdot 10^{-3}$
3	531	240	263	5,57	$3,80 \cdot 10^{-3}$
4	602	500	192	5,26	$5,21 \cdot 10^{-3}$

2.3.1. EQUILIBRIO Y CINÉTICA

Órdenes de las reacciones

Se representan los datos de la tabla anterior, P_A , $\ln P_A$ y $1/P_A$ frente al tiempo (t) y se obtiene el ajuste (lineal y/o polinómico) para cada orden de reacción:

Orden cero [5.0]



Primer orden [5.1]

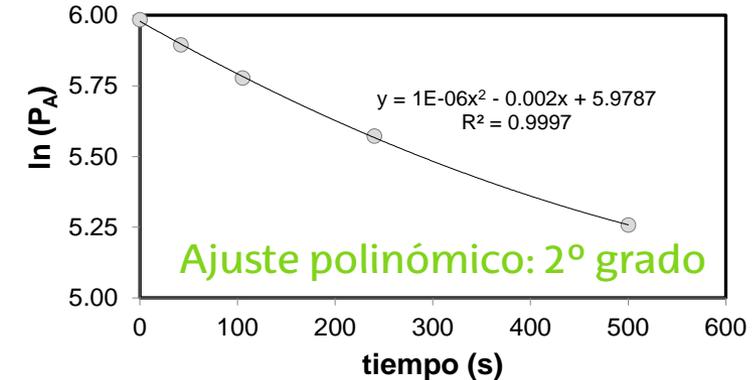
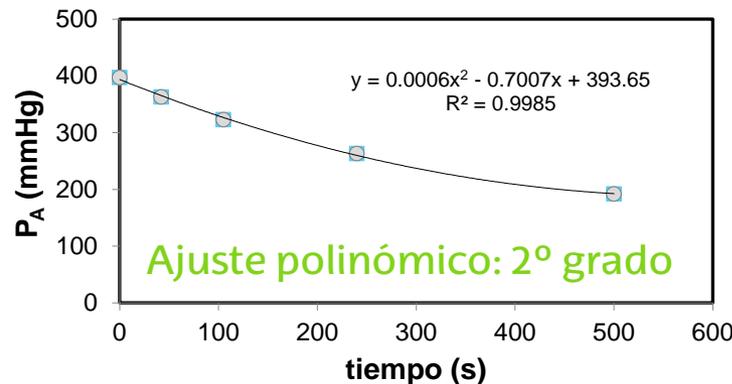
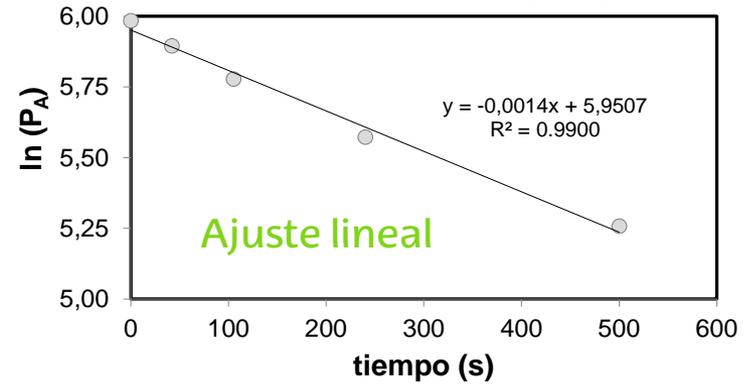


Gráfico 2.2. Ajustes lineal y polinómico para orden de reacción cero (izquierda) y primer orden (derecha). Elaboración propia

2.3.1. EQUILIBRIO Y CINÉTICA

Órdenes de las reacciones

Para las reacciones de orden cero y primer orden (gráfico 2.2) se observa que el ajuste polinómico de segundo grado (R^2 0,9985 y 0,9997 para las reacciones de orden cero y primer orden respectivamente) es mejor que el ajuste lineal.

Sin embargo, para la reacción de segundo orden (gráfico 2.3), los puntos se ajustan a una recta ($R^2 \approx 1$, ajuste lineal):

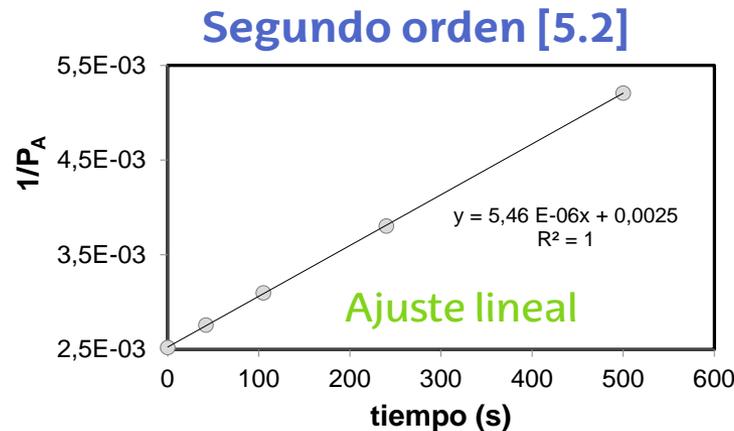


Gráfico 2.3. Ajuste lineal para reacción de segundo orden. Elaboración propia

El valor de la constante cinética es la pendiente de la recta de ajuste:

$$\frac{1}{P_A} = \frac{1}{P_{A0}} + k_2 t$$

$$k_2 = 5,46 \cdot 10^{-6} \text{ mmHg}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$$

2.3.1. EQUILIBRIO Y CINÉTICA

Influencia de la temperatura

Actividad práctica 2.16. La determinación de la constante cinética (k , h^{-1}) de una reacción química proporcionó los siguientes valores a diferentes temperaturas (T , $^{\circ}\text{C}$):

T ($^{\circ}\text{C}$)	240	270	290	310	330
k (h^{-1})	0,92	1,45	1,90	2,45	3,06

Calcular los parámetros de la ecuación de Arrhenius.

La ecuación de Arrhenius: $k(T) = A_0 \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right)$

Aplicando logaritmos: $\ln k = \ln A_0 - \frac{E_A}{R} \frac{1}{T}$

Para hallar los parámetros de la ecuación de Arrhenius (A_0 y E_A), se debe representar el valor de $\ln k$ frente a $1/T$. A partir de los valores de la recta de ajuste ($y = b + m x$) se podrán obtener los parámetros:

A_0 (factor preexponencial): $b = \ln A_0$

E_A (energía de activación): $m = -E_A/R$ ($R = 8,314 \text{ J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$)

2.3.1. EQUILIBRIO Y CINÉTICA

Influencia de la temperatura

En la siguiente tabla se recogen los valores de $\ln k$ y $T^{-1}(1/T)$, que se representan gráficamente a continuación (gráfico 2.4):

Nº	$\ln k$	T^{-1}
0	-0,083	1,95E-03
1	0,372	1,84E-03
2	0,642	1,78E-03
3	0,896	1,72E-03
4	1,118	1,66E-03

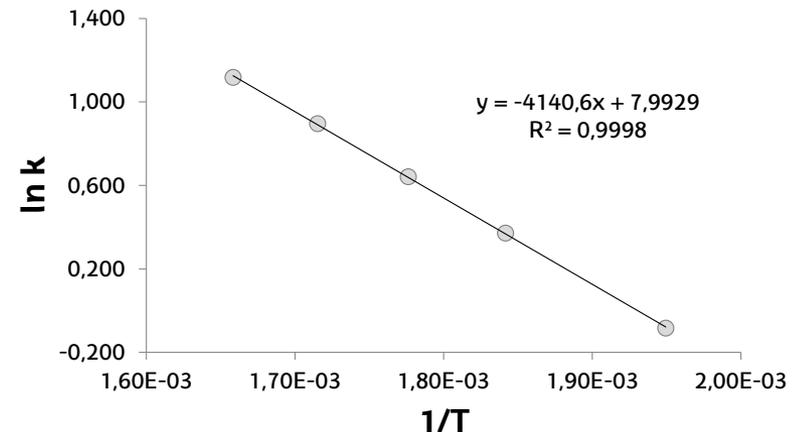


Gráfico 2.4. Ajuste lineal: $\ln k$ vs. $1/T$. Elaboración propia

De la representación gráfica se obtiene la recta de ajuste, la ecuación de Arrhenius ($R^2=0,9998$):

$$\ln k = 7,9929 - 4140,6 \cdot T^{-1}$$

Por tanto, los parámetros de la ecuación:

$$b = \ln A_0 = -7,9929$$

$$A_0 = 2960 \text{ h}^{-1}$$

$$\text{pendiente (m)} = -E_A/R = -4140,6 ; E_A = 34.425 \text{ J}\cdot\text{mol}^{-1}$$

2.3.2. EQUILIBRIO QUÍMICO

Actividad práctica 2.17. A 2000 °C el valor de K_c en la reacción tiene un valor de $1,0 \cdot 10^{-4}$:



Si las concentraciones de equilibrio de $\text{O}_2 (\text{g})$ y $\text{NO} (\text{g})$ son 50 M y 0,030 M respectivamente, calcular cuál será la concentración de equilibrio de $\text{N}_2 (\text{g})$.

La expresión de la constante de equilibrio en términos de concentración es:

$$K_c = \frac{[\text{NO}]^2}{[\text{N}_2][\text{O}_2]}$$

Sustituyendo los valores de la constante de equilibrio $K_c = 1,0 \cdot 10^{-4}$ y de concentración $[\text{O}_2] = 50 \text{ M}$ y $[\text{NO}] = 0,30 \text{ M}$, se puede calcular la concentración de N_2 en el equilibrio:

$$1,0 \cdot 10^{-4} = \frac{[0,03 \text{ M}]^2}{[\text{N}_2][50 \text{ M}]}; \quad [\text{N}_2] = 0,18 \text{ M}$$

Por tanto, a 2000 °C la concentración de $\text{N}_2 (\text{g})$ en equilibrio para las concentraciones dadas de $\text{O}_2 (\text{g})$ y $\text{NO} (\text{g})$ es 0,18 M.

2.3.2. EQUILIBRIO QUÍMICO

Actividad práctica 2.18. El amoníaco se produce industrialmente a partir de la siguiente reacción:

$$\text{N}_2 (\text{g}) + 3 \text{H}_2 (\text{g}) \rightleftharpoons 2 \text{NH}_3 (\text{g})$$

A 472 °C las concentraciones de N₂, H₂ y NH₃ en el equilibrio son 0,04 M, 0,12 M y 0,003 M respectivamente. Calcular los valores de K_c y K_p.

La constante de equilibrio en términos de concentración (K_c) puede calcularse directamente, sustituyendo los valores de concentración en la expresión:

$$K_c = \frac{[\text{NH}_3]^2}{[\text{N}_2] \cdot [\text{H}_2]^3} = \frac{[0,003 \text{ M}]^2}{[0,04 \text{ M}] \cdot [0,12 \text{ M}]^3} = 0,13 \text{ M}^{-2}$$

La constante de equilibrio en términos de presión (K_p) puede calcularse a partir de K_c, considerando la siguiente expresión, para la reacción aA + bB ⇌ cC + dD (Tema 2.- Materiales de estudio, apartado 2.3.2):

$$K_c = K_p \cdot (R \cdot T)^{\Delta n}; \quad \Delta n = (a + b + \dots) - (c + d + \dots)$$

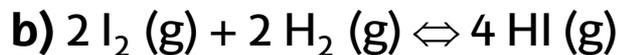
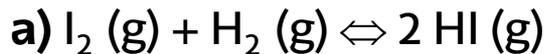
$\Delta n = (1+3) - (2) = 2$ (coeficientes estequiométricos de reactivos – productos)

$$0,13 \text{ M}^{-2} = K_p \cdot (0,082 \text{ atm} \cdot \text{L} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot 745 \text{ K})^2$$

$$K_p = 3,48 \cdot 10^{-5} \text{ atm}^{-2}$$

2.3.2. EQUILIBRIO QUÍMICO

Actividad práctica 2.19. A 450 °C las presiones parciales de equilibrio de una mezcla gaseosa formada por H₂, I₂, y HI son 0,1095, 0,1095 y 0,7810 atmósferas, respectivamente. Calcular la K_p considerando las siguientes maneras de ajustar la reacción química:



Indicar si se obtiene el mismo resultado y la relación existente entre ambas K_p.

Para cada reacción, se sustituyen las presiones parciales en el equilibrio p(H₂)=0,1095 atm, p(I₂)=0,1095 atm y p(HI)=0,7810 atm en la expresión de K_p correspondiente:

$$a) K_p = \frac{p_{HI(g)}^2}{p_{I_2(g)} p_{H_2(g)}} = \frac{0,781^2}{0,1095 \cdot 0,1095} = 50,87$$

$$b) K'_p = \frac{p_{HI(g)}^4}{p_{I_2(g)}^2 p_{H_2(g)}^2} = \frac{0,781^4}{0,1095^2 \cdot 0,1095^2} = K_p^2 = 2588$$

Los valores de K_p son diferentes (dependen de la reacción) y la relación entre ambas constantes es: $K_{p,b} = [K_{p,a}]^2$

2.3.3. ACTIVIDAD Y CONCENTRACIÓN

Cálculo de coeficientes de actividad (electrolitos)

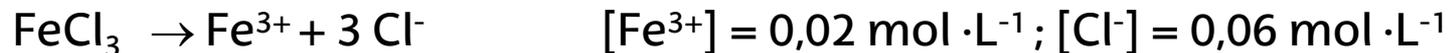
Actividad práctica 2.20. Calcular la fuerza iónica y los coeficientes de actividad de 1 L de una solución acuosa a 25 °C en la que se han disuelto 0,02 moles de FeCl₃ y 0,01 moles de H₂SO₄. Utilizar la aproximación de Davies.

Primeramente, se debe calcular la **fuerza iónica** (μ) de la disolución, que se trata de un electrolito, mediante la expresión:

$$\mu = \frac{1}{2} \sum_i [i] z_i^2 \quad [6]$$

Donde: [i] es la concentración molar de una especie iónica en la solución
 z_i es la carga del ion

La disociación de FeCl₃ (0,02 mol · L⁻¹) y H₂SO₄ (0,01 mol · L⁻¹) es completa:



Sustituyendo en la expresión [6], se calcula la fuerza iónica de la disolución:

$$\mu = \frac{1}{2} \left[[\text{Fe}^{3+}] (z_{\text{Fe}^{3+}})^2 + [\text{Cl}^-] (z_{\text{Cl}^-})^2 + [\text{H}^+] (z_{\text{H}^+})^2 + [\text{SO}_4^{2-}] (z_{\text{SO}_4^{2-}})^2 \right]$$

$$\mu = \frac{1}{2} \left[0,02 \cdot (+3)^2 + 0,06 (-1)^2 + 0,02 \cdot (+1)^2 + 0,01 \cdot (-2)^2 \right] = 0,15 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$$

2.3.3. ACTIVIDAD Y CONCENTRACIÓN

Cálculo de coeficientes de actividad (electrolitos)

La fuerza iónica del medio es 0,15 M ($\mu < 0,5$ M), por lo que puede utilizarse la aproximación de **Davies** para calcular los coeficientes de actividad:

$$\log f_i = \frac{-0,5 z_I^2 \mu^{1/2}}{1 + \mu^{1/2} - 0,3 \mu}$$

$A \approx 0,5$ (25 °C) (Tema 2.- Materiales de estudio). Sustituyendo los valores de carga de cada ion y la fuerza iónica, se obtienen los coeficientes de actividad:

$$\log f(\text{H}^+) = \frac{-0,5 \cdot (1)^2 (0,15)^{1/2}}{1 + (0,15)^{1/2} - 0,3 \cdot 0,15} = -0,14; \quad f(\text{H}^+) = 10^{-0,14} = 0,72$$

$$\log f(\text{Cl}^-) = \frac{-0,5 \cdot (-1)^2 (0,15)^{1/2}}{1 + (0,15)^{1/2} - 0,3 \cdot 0,15} = -0,14; \quad f(\text{Cl}^-) = 10^{-0,14} = 0,72$$

$$\log f(\text{SO}_4^{2-}) = \frac{-0,5 \cdot (-2)^2 (0,15)^{1/2}}{1 + (0,15)^{1/2} - 0,3 \cdot 0,15} = -0,58; \quad f(\text{SO}_4^{2-}) = 10^{-0,58} = 0,26$$

$$\log f(\text{Fe}^{3+}) = \frac{-0,5 \cdot (3)^2 (0,15)^{1/2}}{1 + (0,15)^{1/2} - 0,3 \cdot 0,15} = -1,30; \quad f(\text{Fe}^{3+}) = 10^{-1,30} = 0,050$$

2.3.3. ACTIVIDAD Y CONCENTRACIÓN

Cálculo de coeficientes de actividad (electrolitos)

De los coeficientes de actividad (f_i) obtenidos se deduce que: para una misma fuerza iónica, el valor de f_i disminuye a medida que aumenta la carga del ion, siendo: $f(\text{H}^+) = f(\text{Cl}^-) > f(\text{SO}_4^{2-}) > f(\text{Fe}^{3+})$, lo que indica que los iones con mayor carga están más afectados por la presencia de otros iones.

Además, al tratarse de un electrolito todos los coeficientes de actividad son < 1 .

Por otro lado, una vez calculados los coeficientes de actividad (f_i), se puede calcular la actividad de cada ion (a_i) en la disolución:

$$a_i = [i] f_i$$

$$a(\text{H}^+) = [\text{H}^+] f(\text{H}^+) = 0,02 \cdot 0,72 = 0,0144 \text{ M}$$

$$a(\text{Cl}^-) = [\text{Cl}^-] f(\text{Cl}^-) = 0,06 \cdot 0,72 = 0,0432 \text{ M}$$

$$a(\text{SO}_4^{2-}) = [\text{SO}_4^{2-}] f(\text{SO}_4^{2-}) = 0,01 \cdot 0,26 = 0,0026 \text{ M}$$

$$a(\text{Fe}^{3+}) = [\text{Fe}^{3+}] f(\text{Fe}^{3+}) = 0,02 \cdot 0,050 = 0,001 \text{ M}$$

2.3.3. ACTIVIDAD Y CONCENTRACIÓN

Cálculo de los coeficientes de actividad (no electrolitos)

Actividad práctica 2.21. Se quiere eliminar el tolueno presente en agua marina o agua dulce utilizando una torre de desorción, suponiendo que la fuerza iónica del agua de mar es 0,7 M y la del agua dulce 0,001 M. Calcular el coeficiente de actividad del tolueno en agua marina y agua dulce.

Dato: coeficiente de reserva del tolueno $k_s = 0,208$.

El tolueno (T) es un compuesto orgánico (no electrolito), por lo que para calcular su coeficiente de actividad puede utilizarse la expresión:

$$\log f_B = k_s \cdot \mu$$

Para el agua de mar la fuerza iónica $\mu = 0,7$ M

$$\log f_{T, \text{agua de mar}} = 0,208 \cdot 0,7 = 0,1456; \quad f_T = 10^{0,1456} = 1,40$$

Para el agua dulce la fuerza iónica $\mu = 0,001$ M

$$\log f_{T, \text{agua dulce}} = 0,208 \cdot 0,001 = 2,08 \cdot 10^{-4}; \quad f_T = 1,0005 \approx 1$$

En agua dulce $f_B \approx 1$: las moléculas de tolueno apenas se ven afectadas por la presencia de otros iones. En el agua de mar $f_B > 1$: las moléculas de tolueno están afectadas por otros iones presentes.

2.3.3. ACTIVIDAD Y CONCENTRACIÓN

Actividad práctica 2.22. Calcular el valor de ΔG^0 a 25 °C y 1 atmósfera para la reacción:



Indicar y razonar si el $\text{H}_2\text{O}_2 (\text{g})$ es estable a 25 °C y 1 atmósfera.

Datos: $\Delta G^0_f (\text{H}_2\text{O}_2 (\text{g})) = -105,5 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$; $\Delta G^0_f (\text{H}_2\text{O} (\text{g})) = -228,6 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$

Para calcular el valor de la energía libre de Gibbs a 25 °C y 1 atm:

$$\Delta G^0 = \sum_i n_i \Delta G^0_{fi(\text{productos})} - \sum_j n_j \Delta G^0_{fj(\text{reactivos})}$$

Para la reacción dada:

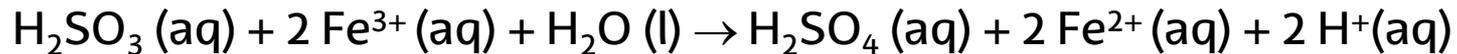
$$\Delta G^0 = \Delta G^0_f (\text{H}_2\text{O} (\text{g})) + \frac{1}{2} \Delta G^0_f (\text{O}_2 (\text{g})) - \Delta G^0_f (\text{H}_2\text{O}_2 (\text{g}))$$

Las entalpías de formación del $\text{H}_2\text{O}(\text{g})$ y $\text{H}_2\text{O}_2(\text{g})$ son datos y del $\text{O}_2(\text{g})$ es cero, ya que se encuentra en su estado estándar a 25 °C y 1 atm:

$$\Delta G^0 = -228,6 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1} - (-105,5 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}) = -123,1 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1} = -123,1 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$$

$\Delta G^0 < 0$, por lo que la reacción puede proceder espontáneamente de reactivos a productos, tal como se ha definido la reacción química, lo que indica que el $\text{H}_2\text{O}_2 (\text{g})$ es inestable a 25 °C y 1 atm.

Actividad práctica 2.23. Determinar si la oxidación del ácido sulfuroso a ácido sulfúrico se podría llevar a cabo en las nubes en las condiciones dadas.



Suponer que en las nubes la temperatura es de 25 °C y las concentraciones son: $[\text{H}_2\text{SO}_3] = 10^{-7} \text{ M}$, $[\text{H}_2\text{SO}_4] = 10^{-4,7} \text{ M}$, $[\text{Fe}^{3+}] = 10^{-7} \text{ M}$, $[\text{Fe}^{2+}] = 10^{-9} \text{ M}$, y $[\text{H}^+] = 10^{-4} \text{ M}$.

Dato: $\Delta G^\circ_{\text{reacción}} = -122,6 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$

Para hacer el cálculo de la variación de la energía libre de Gibbs en condiciones diferentes a las estándar: $\Delta G = \Delta G^\circ + RT \ln Q$ [7]

Al ser una disolución diluida, los coeficientes de actividad de las distintas especies en la disolución acuosa $f_i \approx 1$, $a_i = [i]$, por lo que el término Q:

$$Q = \frac{[\text{H}_2\text{SO}_4] \cdot [\text{Fe}^{2+}]^2 \cdot [\text{H}^+]^2}{[\text{H}_2\text{SO}_3] \cdot [\text{Fe}^{3+}]^2 \cdot [\text{H}_2\text{O}]} = \frac{[10^{-4,7}] \cdot [10^{-9}]^2 \cdot [10^{-4}]^2}{[10^{-7}] \cdot [10^{-7}]^2} = 10^{-9,7} = 2 \cdot 10^{-10}$$

Sustituyendo en la expresión [7]:

$$\Delta G = -122,6 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1} + 8,314 \cdot 10^{-3} \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1} (25+273) \text{ K} \cdot \ln (2 \cdot 10^{-10})$$

$$\Delta G = -177,9 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1} \quad (\Delta G^\circ < 0 : \text{la reacción es espontánea})$$



TEMA 2.- Fundamentos de la Ingeniería Ambiental: reacción química y equilibrio

2.4. Procesos de equilibrio en sistemas ambientales



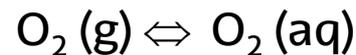
Equilibrio gas – líquido: ley de Henry

Actividad práctica 2.24. Calcular la concentración de equilibrio de oxígeno disuelto (en mol·L⁻¹) en el sistema agua-atmósfera a 1 atm a las siguientes temperaturas y comparar los resultados obtenidos:

a) 25 °C, constante de Henry del O₂ $K_H(25\text{ °C}) = 1,29 \cdot 10^{-3} \text{ mol}\cdot\text{L}^{-1}\cdot\text{atm}^{-1}$.

b) 20 °C, constante de Henry del O₂ $K_H(20\text{ °C}) = 1,37 \cdot 10^{-3} \text{ mol}\cdot\text{L}^{-1}\cdot\text{atm}^{-1}$.

El equilibrio gas-líquido se representa mediante el proceso en el que el oxígeno gaseoso O₂ (g) se disuelve en el agua O₂ (aq):



Las concentraciones del oxígeno en el aire y en el agua se relacionan mediante la siguiente expresión, con la constante de Henry (K_H):

$$K_H = \frac{[\text{O}_2(\text{aq})]}{[\text{O}_2(\text{g})]} = \frac{[\text{O}_2(\text{aq})]}{p\text{O}_2} \quad [8]$$

K_H se expresa en mol·L⁻¹·atm⁻¹. La concentración del oxígeno en el agua [O₂(aq)] viene dada en mol·L⁻¹ y la presión parcial del oxígeno (p_{O₂}) en atm.

Equilibrio gas – líquido: ley de Henry

El contenido de oxígeno en el aire es el 21% en volumen, por lo que la fracción molar del oxígeno es $y_{O_2} = 0,21$ y por tanto la presión parcial del oxígeno:

$$p_{O_2} = y_{O_2} \cdot p = 0,21 \cdot 1 \text{ atm} = 0,21 \text{ atm}$$

Para las dos temperaturas dadas, se sustituye el valor de K_H y p_{O_2} en [8]:

$$\text{a) } 25 \text{ }^\circ\text{C: } 1,29 \cdot 10^{-3} \text{ mol}\cdot\text{L}^{-1}\cdot\text{atm}^{-1} = \frac{[O_2(\text{aq})]}{0,21 \text{ atm}} \quad ; [O_2(\text{aq})] = 2,71 \cdot 10^{-4} \text{ mol}\cdot\text{L}^{-1}$$

$$\text{b) } 20 \text{ }^\circ\text{C: } 1,37 \cdot 10^{-3} \text{ mol}\cdot\text{L}^{-1}\cdot\text{atm}^{-1} = \frac{[O_2(\text{aq})]}{0,21 \text{ atm}} \quad ; [O_2(\text{aq})] = 2,88 \cdot 10^{-4} \text{ mol}\cdot\text{L}^{-1}$$

Cuanto menor es la temperatura, mayor es la cantidad de oxígeno gaseoso disuelto en el agua.

Equilibrio gas – líquido: ley de Henry

Actividad práctica 2.25. La concentración de oxígeno disuelto en las aguas naturales es un aspecto crucial para sustentar la vida de los animales acuáticos, aumentando la riqueza pesquera con el aumento del oxígeno.

Si se considera que para una determinada especie de pez se necesita una concentración mínima de oxígeno de 8,0 ppm, se pide calcular utilizando los valores de la tabla 2.10 (interpolando linealmente para valores intermedios), la temperatura máxima que podría alcanzar el agua en el río si se considera que se encuentra a 1000 m de altitud (presión media 675 mmHg). Repetir el cálculo a nivel del mar (presión media de 760 mmHg).

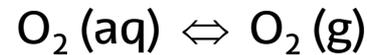
T [°C]	0	20	25	40
$K_H(O_2)$, atm/x	$2,55 \cdot 10^4$	$4,01 \cdot 10^4$	$4,32 \cdot 10^4$	$5,35 \cdot 10^4$

Donde x es la fracción molar del oxígeno en el agua.

Dato: Peso atómico O (16)

Equilibrio gas – líquido: ley de Henry

El equilibrio gas-líquido se representa mediante el proceso en el que el oxígeno disuelto en agua O_2 (aq) se libera a la atmósfera O_2 (g):



Las concentraciones del oxígeno en el aire y en el agua se relacionan mediante la siguiente expresión, con la constante de Henry (K_H):

$$K_H = \frac{[O_2(g)]}{[O_2(aq)]} = \frac{pO_2}{xO_2} \quad [9]$$

K_H se expresa en $\text{atm} \cdot \text{x}^{-1}$. La presión parcial del oxígeno (p_{O_2}) viene dada en atm y la fracción molar de oxígeno en el agua xO_2 es adimensional (al tratarse de una disolución diluida puede considerarse: $xO_2 = \text{mol } O_2 / \text{mol agua}$).

Por tanto, es necesario calcular la concentración de O_2 en agua (8,0 ppm $O_2 = 8,0 \text{ mg } O_2 \cdot \text{L}^{-1}$) en términos de fracción molar:

$$8,0 \frac{\text{mg } O_2}{\text{L agua}} \cdot \frac{1 \text{ mol } O_2}{32 \cdot 10^3 \text{ mg } O_2} \cdot \frac{1 \text{ L agua}}{1000 \text{ g agua}} \cdot \frac{18 \text{ g agua}}{1 \text{ mol agua}} = 4,50 \cdot 10^{-6}$$

Equilibrio gas – líquido: ley de Henry

El contenido de O₂ en el aire es el 21% en volumen, por lo que la fracción molar del O₂ es $y_{O_2} = 0,21$. Sabiendo que 1 atm = 760 mmHg, la presión parcial del O₂ en atm, para una presión total de **675 mmHg** (1000 m de altura) será:

$$p_{O_2} = y_{O_2} \cdot p = 0,21 \cdot (675/760) \text{ atm} = 0,187 \text{ atm}$$

Sustituyendo en la expresión [9] se obtiene el valor de la constante de Henry:

$$K_H = \frac{p_{O_2}}{x_{O_2}} = \frac{0,187 \text{ atm}}{4,50 \cdot 10^{-6}} = 4,15 \cdot 10^4 \text{ atm}$$

Para obtener la temperatura para el valor de $K_H = 4,15 \cdot 10^4 \text{ atm}$ se puede utilizar la interpolación lineal entre 20 °C y 25 °C (ver tabla del enunciado):

$$T = 20 \text{ °C} + \frac{(25-20) \text{ °C}}{(4,32 \cdot 10^4 - 4,01 \cdot 10^4)} (4,32 \cdot 10^4 - 4,15 \cdot 10^4) = 22,3 \text{ °C}$$

Otra forma de obtener el valor de la temperatura es a partir de la recta de ajuste de la constante de Henry (K_H , atm) frente a la temperatura (ver gráfico 2.5): $K_H = 700 \cdot T + 25700 = 4,15 \cdot 10^4 \text{ atm}$

Se obtiene un valor de temperatura de **22,6 °C**
(similar al obtenido mediante interpolación lineal)

Equilibrio gas- líquido: ley de Henry

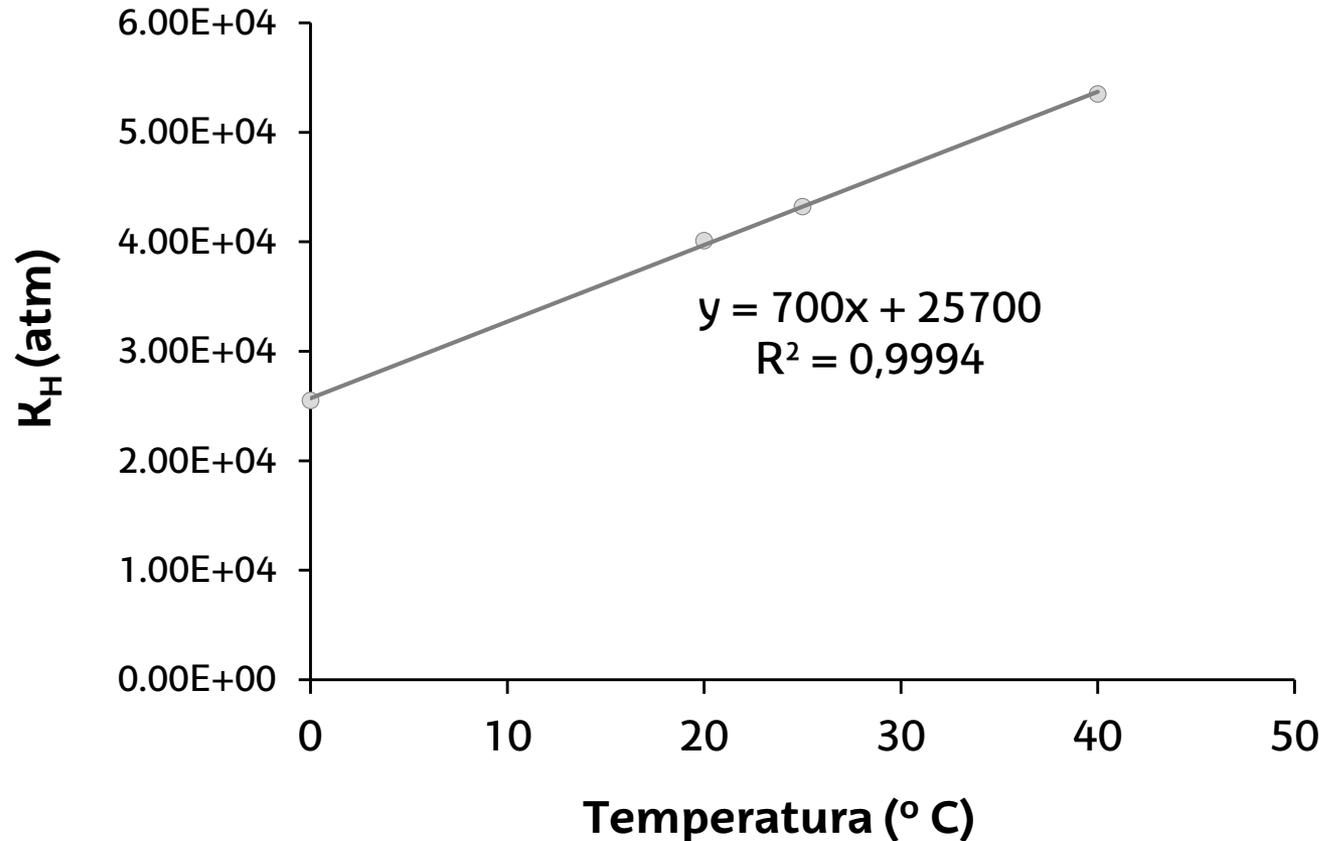


Gráfico 2.5. Recta de ajuste de la constante de Henry (K_H , atm) frente a la temperatura ($^{\circ}\text{C}$)

Equilibrio gas – líquido: ley de Henry

Para hacer el cálculo a nivel del mar, para una presión total de **760 mmHg** (1 atm) la presión parcial del O₂:

$$p_{O_2} = y_{O_2} \cdot p = 0,21 \cdot 1 \text{ atm} = 0,21 \text{ atm}$$

Sustituyendo en la expresión [9] obtiene el valor de la constante de Henry:

$$K_H = \frac{p_{O_2}}{x_{O_2}} = \frac{0,21 \text{ atm}}{4,50 \cdot 10^{-6}} = 4,67 \cdot 10^4 \text{ atm}$$

Para obtener la temperatura para el valor de $K_H = 4,67 \cdot 10^4 \text{ atm}$, mediante la interpolación lineal entre 25 °C y 40 °C (ver tabla del enunciado):

$$T = 25 \text{ °C} + \frac{(40-25) \text{ °C}}{(5,35 \cdot 10^4 - 4,32 \cdot 10^4)} (4,67 \cdot 10^4 - 4,32 \cdot 10^4) = 30,1 \text{ °C}$$

A partir de la recta de ajuste de la constante de Henry (K_H , atm) frente a la temperatura (ver gráfico 2.2): $K_H = 700 \cdot T + 25700 = 4,67 \cdot 10^4 \text{ atm}$

Se obtiene un valor de temperatura de **30,0 °C**

(valor similar al obtenido mediante interpolación lineal)

La temperatura obtenida a nivel del mar es **más alta**, ya que a mayor presión habrá una mayor cantidad de O₂ disuelto.

Equilibrio ácido – base

Actividad práctica 2.26. Calcular el pH de las siguientes disoluciones acuosas:

- a) Ácido clorhídrico de 0,1 M,
- b) Ácido clorhídrico de 10^{-5} M,
- c) Ácido nitroso de 0,1 M,
- d) Ácido nitroso de 10^{-5} M,

Datos.- Se puede considerar que el ácido clorhídrico es un ácido fuerte. Para el ácido nitroso $pK_a = 3,29$ (25 °C).

El ácido clorhídrico es un ácido fuerte, por lo que se encuentra totalmente disociado en disolución acuosa: $\text{HCl (aq)} \rightarrow \text{H}^+ \text{ (aq)} + \text{Cl}^- \text{ (aq)}$

Para cada una de las concentraciones del enunciado:

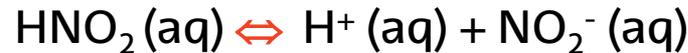
a) $[\text{HCl}] = 0,1 \text{ M}$, $[\text{H}^+] = [\text{Cl}^-] = 0,1 \text{ M}$; $\text{pH} = -\log [\text{H}^+] = -\log (0,1) = 1$

b) $[\text{HCl}] = 10^{-5} \text{ M}$, $[\text{H}^+] = [\text{Cl}^-] = 10^{-5} \text{ M}$; $\text{pH} = -\log [\text{H}^+] = -\log (10^{-5}) = 5$

Equilibrio ácido – base

El ácido nitroso es un ácido relativamente débil, con $pK_a=3,29$ (25 °C). Por lo que: $K_a=10^{-3,29}=5,1 \cdot 10^{-4}$

Se encuentra disociado en disolución acuosa, en el equilibrio:



Equilibrio: $[\text{HNO}_2]_0 - x \qquad x \qquad x$

$$K_a = \frac{[\text{H}^+][\text{NO}_2^-]}{[\text{HNO}_2]}$$

Para cada una de las concentraciones del enunciado:

c) $[\text{HNO}_2]_0 = 0,1 \text{ M}$, $5,1 \cdot 10^{-4} = \frac{x^2}{0,1 - x}$; $x^2 = 5,1 \cdot 10^{-5}$; $x = 0,007 = [\text{H}^+]$

$\text{pH} = -\log [\text{H}^+] = -\log(0,007) = 2,15$

Por aproximación: $x \ll 0,1$. También se podría resolver la ecuación de segundo grado y daría el mismo resultado

d) $[\text{HNO}_2]_0 = 10^{-5} \text{ M}$, $5,1 \cdot 10^{-4} = \frac{x^2}{10^{-5} - x}$; $x^2 + 5,1 \cdot 10^{-4}x - 5,1 \cdot 10^{-9} = 0$

$x = 9,81 \cdot 10^{-6} = [\text{H}^+]$; $\text{pH} = -\log [\text{H}^+] = -\log(9,81 \cdot 10^{-6}) = 5,01$

Equilibrio ácido – base

Actividad práctica 2.27. Calcular el porcentaje de amoníaco sobre el total ($\text{NH}_3 + \text{NH}_4^+$) que está presente como NH_3 en una disolución acuosa para los siguientes valores de pH: 6, 7 y 10.

Dato: $\text{p}K_a(\text{NH}_4^+) = 9,3$ (25 °C).

El ion amonio (NH_4^+) puede considerarse un ácido débil. Al disociarse en agua libera amoníaco (NH_3) y protones (H^+):



El valor de su $\text{p}K_a = 9,3$ (25 °C), por lo que: $K_a = 10^{-9,3} = 5,01 \cdot 10^{-10}$

La expresión de la constante de acidez: $K_a = \frac{[\text{NH}_3][\text{H}^+]}{[\text{NH}_4^+]}$; $\frac{[\text{NH}_4^+]}{[\text{NH}_3]} = \frac{[\text{H}^+]}{K_a}$

El porcentaje de amoníaco en la disolución: $\% \text{NH}_3 = \frac{[\text{NH}_3]}{[\text{NH}_4^+] + [\text{NH}_3]} \cdot 100$

Dividiendo la expresión entre $[\text{NH}_3]$ arriba y abajo: $\% \text{NH}_3 = \frac{1}{\frac{[\text{NH}_4^+]}{[\text{NH}_3]} + 1} \cdot 100$

Equilibrio ácido – base

Sustituyendo la relación $[\text{NH}_4^+]/[\text{NH}_3]$ en términos $[\text{H}^+]$ y K_a , se obtiene:

$$\% \text{NH}_3 = \frac{1}{\frac{[\text{H}^+]}{K_a} + 1} \cdot 100 \quad [10]$$

Para obtener el porcentaje de amoníaco a diferentes valores de pH, se sustituye en $[\text{H}^+] = 10^{-\text{pH}}$ en la expresión [10]:

$$\text{pH} = 6 \quad \rightarrow \quad \% \text{NH}_3 = \frac{1}{\frac{10^{-6}}{10^{-9,3}} + 1} \cdot 100 = 0,05 \%$$

$$\text{pH} = 7 \quad \rightarrow \quad \% \text{NH}_3 = \frac{1}{\frac{10^{-7}}{10^{-9,3}} + 1} \cdot 100 = 0,50 \%$$

$$\text{pH} = 10 \quad \rightarrow \quad \% \text{NH}_3 = \frac{1}{\frac{10^{-10}}{10^{-9,3}} + 1} \cdot 100 = 83,4 \%$$

A medida que aumenta el pH, aumenta el porcentaje de amoníaco sobre el total de especies ($\text{NH}_3 + \text{NH}_4^+$). Por este motivo, es habitual aumentar el pH de la disolución acuosa cuando se quiere eliminar el NH_3 del agua.

Equilibrio ácido – base

Actividad práctica 2.28. Cuando se agrega gas Cl_2 al agua durante el proceso de desinfección del agua potable, se hidroliza para formar HOCl.

La capacidad de desinfección de la forma ácida HOCl es aproximadamente 88 veces superior a la de su base conjugada OCl^- . Calcular la concentración de HOCl respecto del total ($\text{HOCl} + \text{OCl}^-$) para un $\text{pH} = 6$ y para un $\text{pH} = 7$.

Dato: $\text{pK}_a(\text{HClO}) = 7,5$ (25°C).

La reacción de hidrólisis del cloro para formar ácido hipocloroso y ácido clorhídrico:



Posteriormente, el ácido hipocloroso se puede disociar para dar iones hipoclorito (OCl^-) y protones (H^+):



La constante de acidez de la reacción anterior:

$$K_a = \frac{[\text{OCl}^-][\text{H}^+]}{[\text{HOCl}]} ; \quad \frac{[\text{OCl}^-]}{[\text{HOCl}]} = \frac{K_a}{[\text{H}^+]} \quad [11]$$

Equilibrio ácido – base

La capacidad de desinfección puede medirse como la suma de HOCl y OCl⁻. El porcentaje de HOCl respecto del total:

$$\% \text{HOCl} = \frac{[\text{HOCl}]}{[\text{HOCl}] + [\text{OCl}^-]} \cdot 100$$

Dividir la expresión entre [HOCl] arriba y abajo, y sustituir la expresión [11]:

$$\% \text{HOCl} = \frac{1}{1 + \frac{[\text{HOCl}]}{[\text{OCl}^-]}} \cdot 100 = \frac{1}{1 + \frac{K_a}{[\text{H}^+]}} \cdot 100$$

Sustituyendo para diferentes valores de pH:

$$\text{pH} = 6 \quad \rightarrow \quad \% \text{HOCl} = \frac{1}{1 + \frac{10^{-7,5}}{10^{-6}}} \cdot 100 = 96,9 \%$$

$$\text{pH} = 7 \quad \rightarrow \quad \% \text{HOCl} = \frac{1}{\frac{10^{-7,5}}{10^{-7}} + 1} \cdot 100 = 76,0 \%$$

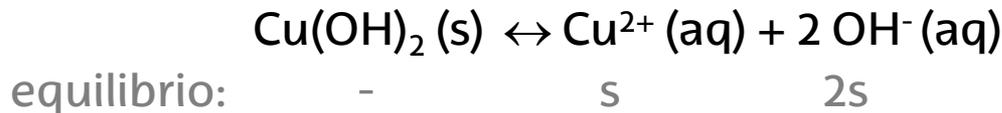
A medida que aumenta el pH disminuye la capacidad de desinfección: a mayor pH, disminuye [H⁺], disminuye [HOCl] y aumenta [OCl⁻], que tiene una menor capacidad de desinfección que el HOCl.

Equilibrio de precipitación – disolución

Actividad práctica 2.29. Calcular la solubilidad del hidróxido de cobre $\text{Cu(OH)}_2(\text{s})$ en agua a $25\text{ }^\circ\text{C}$ y la concentración de iones de Cu^{2+} en $\mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ en una disolución saturada de $\text{Cu(OH)}_2(\text{s})$.

Datos: $K_{ps}[\text{Cu(OH)}_2]_{25\text{ }^\circ\text{C}} = 7,8 \cdot 10^{-20}$, Peso atómico Cu (63,5).

La reacción de precipitación de la disolución de hidróxido de cobre es la siguiente, donde se considera M la concentración inicial y s: solubilidad:



La expresión del producto de solubilidad:

$$K_{ps} = [\text{Cu}^{2+}][\text{OH}^{-}]^2$$

$$7,8 \cdot 10^{-20} = s \cdot (2s)^2; \quad s = 2,69 \cdot 10^{-7} \text{ mol}\cdot\text{L}^{-1}$$

La concentración de iones Cu^{2+} en la disolución saturada es $s = 2,69 \cdot 10^{-7} \text{ mol}\cdot\text{L}^{-1}$, haciendo el cambio de unidades a $\mu\text{g Cu}^{2+} \cdot \text{L}^{-1}$:

$$2,69 \cdot 10^{-7} \frac{\text{mol Cu}^{2+}}{\text{L}} \cdot \frac{63,5 \text{ g Cu}^{2+}}{1 \text{ mol Cu}^{2+}} \cdot \frac{10^6 \mu\text{g Cu}^{2+}}{1 \text{ g Cu}^{2+}} = 17,1 \mu\text{g Cu}^{2+} \cdot \text{L}^{-1}$$

Equilibrio de precipitación – disolución

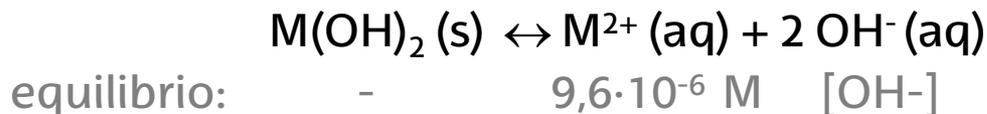
Actividad práctica 2.30. Indicar en qué orden se eliminarían los cationes divalentes de Cd, Zn y Mg cuando se aumenta el pH de la disolución, suponiendo que la concentración de todos es $9,6 \cdot 10^{-6} \text{ M}$.

Datos: productos de solubilidad de los hidróxidos metálicos: $K_{ps}[\text{Cd}(\text{OH})_2]=5,0 \cdot 10^{-15}$; $K_{ps}[\text{Zn}(\text{OH})_2]= 3,2 \cdot 10^{-16}$, $K_{ps}[\text{Mg}(\text{OH})_2]=6,9 \cdot 10^{-12}$.

El problema se puede resolver de manera cuantitativa y cualitativa.

Resolución cuantitativa:

La reacción de precipitación-disolución para un ion divalente M^{2+} es:



La expresión del producto de solubilidad:

$$K_{ps} = [\text{M}^{2+}] [\text{OH}^-]^2 \quad \mathbf{[12]} \quad \text{donde } [\text{M}^{2+}] = 9,6 \cdot 10^{-6} \text{ M y } [\text{OH}^-] = 10^{-\text{pOH}}$$

Para calcular el pH: $\text{pH} = 14 - \text{pOH}$

Equilibrio de precipitación – disolución

Se sustituyendo los valores de K_{ps} para cada catión divalente en [12]:

Cd²⁺: $K_{ps}[\text{Cd}(\text{OH})_2] = [\text{Cd}^{2+}] [\text{OH}^-]^2$
 $5,0 \cdot 10^{-15} = [9,6 \cdot 10^{-6}] [\text{OH}^-]^2 \rightarrow [\text{OH}^-] = 2,28 \cdot 10^{-5};$
 $\text{pH} = 14 - \text{pOH} = 14 - \log(2,28 \cdot 10^{-5}) = 9,36$

Zn²⁺: $K_{ps}[\text{Zn}(\text{OH})_2] = [\text{Zn}^{2+}] [\text{OH}^-]^2$
 $3,2 \cdot 10^{-16} = [9,6 \cdot 10^{-6}] [\text{OH}^-]^2 \rightarrow [\text{OH}^-] = 5,77 \cdot 10^{-5};$
 $\text{pH} = 14 - \text{pOH} = 14 - \log(5,77 \cdot 10^{-5}) = 8,76$

Mg²⁺: $K_{ps}[\text{Mg}(\text{OH})_2] = [\text{Mg}^{2+}] [\text{OH}^-]^2$
 $6,9 \cdot 10^{-12} = [9,6 \cdot 10^{-6}] [\text{OH}^-]^2 \rightarrow [\text{OH}^-] = 8,47 \cdot 10^{-4};$
 $\text{pH} = 14 - \text{pOH} = 14 - \log(8,47 \cdot 10^{-4}) = 10,93$

El orden de eliminación al aumentar el pH es:
Zn²⁺, Cd²⁺ y Mg²⁺

Resolución cualitativa. A partir de la expresión [12]: $K_{ps} = [\text{M}^{2+}] [\text{OH}^-]^2$

La concentración de los cationes divalentes en disolución es $[\text{M}^{2+}] = 9,6 \cdot 10^{-6} \text{ M}$, por lo que a medida que aumenta el pH \rightarrow pOH disminuye \rightarrow $[\text{OH}^-]$ aumenta, por lo que, para un mismo valor de M^{2+} el valor de K_{ps} debería ir aumentando.