

UNIVERSIDAD DEL MAR
Campus Puerto Ángel



“Modelado y simulación de la extracción del herbicida atratón en un sistema de líquidos inmiscibles, utilizando un reactor electroquímico”

Tesis

Que como parte de los requisitos para obtener el título de Ingeniera Ambiental

Presenta:

Ilda O. Santos Mendoza

Dirigido por:

Dr. Miguel Velázquez Manzanares

Director de Tesis

M. en C. Héctor López Arjona

Asesor de Tesis

Puerto Ángel Oaxaca, 2011



Puerto Ángel, Octubre de 2011

UNIVERSIDAD DEL MAR

ACTA DE REVISIÓN DE TESIS

Después de realizar una revisión detallada de la tesis “**Modelado y simulación de la extracción del herbicida atratón en un sistema de líquidos inmiscibles, utilizando un reactor electroquímico**“, presentada por **la pasante de Ing. Ilda Olivia Santos Mendoza**, se considera que cumple con los requisitos y calidad necesarios para ser defendida en el examen profesional.

COMISIÓN REVISORA

Dr. Miguel Velázquez Manzanares
Universidad del Papaloapan
Director

M. en C. Héctor López Arjona
Universidad del Papaloapan
Asesor

Dra. Ma. del Rosario Enríquez Rosado
Universidad del Mar

M. en C. Cristóbal Santos Santos
Universidad del Papaloapan

Ing. Martín Zúñiga Ramírez
Universidad del Mar

Dedicatoria:

A mi mamá: Gracias mami por apoyarme siempre en esta decisión.

A mis padres, Juana y Daniel.

Simplemente porque los quiero...sin ellos esto no sería posible.

Agradecimientos:

Al Dr. Miguel Velázquez Manzanares por la confianza que depositó al darme la oportunidad de desarrollar este tema de tesis y por todas las facilidades y apoyo brindado durante mi estancia en la Universidad del Papaloápan.

Al M.C Héctor López Arjona por su paciencia y tiempo invertido en el desarrollo y revisión del trabajo. Porque a pesar de todo siempre encontró espacio para recibirme y con una gran sonrisa.

A los revisores por la atención y comentarios que contribuyeron a mejorar el trabajo final. A Cristóbal por sus comentarios y ánimo con el que se dirigió a esto. Especialmente a la profesora Rosario Enríquez por impulsarme a seguir adelante siempre.

A los profesores de Ing. Ambiental, que contribuyeron en mi formación profesional y crecimiento personal, por su tiempo y espacio. Epifanio Morales, Judith Amador, Guadalupe Tejeda, Carlos Rugerio, Germán Anaya, Rocío Gutiérrez, Alejandro Regalado, Beatriz Hernández, y Martín Zúniga, a todos ellos les debo algo especial. Muchas gracias.

A la Universidad del Mar y a la Jefatura de Carrera de Ingeniería Ambiental, por todo el apoyo y disposición que mostraron durante mi estancia en la institución. Y por la respuesta siempre amable que dieron a las peticiones.

A mis compañeros: Mago, Rafa, Brenda, Julián, Danilo y Sammy por acompañarme en la experiencia de estudiar la carrera en la UMAR, las noches de trabajo, las discusiones y aquellos días de convivencia en los que era difícil no hablar de la escuela.

A los chicos de la UNPA por recibirme con tanto cariño en su espacio, y ayudarme a sobrellevar los malos ratos con mi trabajo. Miguel, Anselmo, Alex, Rafa, Nohemí y claro, Oscar-op.

A mis amigos y hermanos: Adiel, Eduardo, Sandra, Beatriz, Carlos E. Porque en todo momento y a pesar de las circunstancias me hicieron sentir que contaba con su apoyo, dándome las palabras de aliento necesarias y los consejos adecuados en el momento en que los necesitaba.

A Edith por apoyarnos mientras nos adaptábamos a la vida en puerto, por esa calidez humana que la distingue siempre. E Igualmente a Esther, por los buenos momentos que compartimos mientras se podía.

A mi familia, que en todo momento me ha demostrado su cariño y “fé” en las cosas que hago. A Temo por toda la confianza y consejos. Mis tíos, que aunque no siempre juntos se mantienen unidos, a mis papás sin duda los tres pilares más importantes en mi vida.

A ti que, a pesar del tiempo, y la distancia soportaste los malos ratos; a ustedes, parte importante en esto, por enseñarme a ver las pequeñas cosas que no creía importantes en la vida. Porque a pesar de todo siempre he sentido su cariño y apoyo. Espero conservar su amistad por mucho tiempo.

Finalmente a todas y cada una de las personas que voluntaria e involuntariamente contribuyeron para que pudiera cumplir esta meta.

Se agradece a la Universidad del Papaloapan el apoyo otorgado para la realizacion de este trabajo a través del proyecto "Modelado y simulación de la extracción de moléculas de importancia medio ambiental a través de un sistema agua/solvente orgánico (UNPA-2011-37)".

Resumen	5
Capítulo 1 INTRODUCCIÓN	6
1.1 Objetivos:.....	9
1.1.1 Objetivo general:.....	9
1.2 Justificación.....	10
Capítulo 2 MARCO TEÓRICO	11
2.1. Herbicidas:	11
2.1.1. Generalidades de las Triazinas.....	12
2.1.1.1. Toxicidad de las triazinas:	13
2.1.1.2. Principales mecanismos de degradación de las triazinas:	14
2.1.1.3. El herbicida atratón.....	15
2.2. Interfase de dos soluciones electrolíticas inmiscibles.....	16
2.2.1. Reacciones de transferencia de carga	17
2.2.1.1. Transferencia de iones.....	18
2.3. Estructura interfacial: Modelos de la doble capa.....	21
2.4. Técnicas electroquímicas: Voltamperometría Cíclica.....	23
2.5. Antecedentes de modelación de interfases.....	24
Capítulo 3 METODOLOGÍA	27
3.1 Planteamiento del problema.....	28
3.2 Parámetros termodinámicos para el herbicida atratón.....	28
3.3 Consideraciones del modelo:.....	29
3.4 Solución al sistema de ecuaciones: Discretización por diferencias finitas.....	29
3.5 Análisis de Resultados.....	30
Capítulo 4 DESARROLLO DEL MODELO MATEMATICO PARA LA EXTRACCION DEL ATRATON EN UN SISTEMA IDSEI	31
4.1. Transferencia de masa y ecuación de Nernst-Planck.....	32
4.1.1. La ecuación de Nernst-Planck.....	33
4.1.2. Ley de Fick.....	33
4.2. Balances generales	34
4.2.1. Compartimentos (semiceldas) acuoso y orgánico.....	36
4.3. Ecuaciones adimensionales.....	39

4.4. Diferencias finitas	41
Capítulo 5 RESULTADOS	42
5.1. Cálculo de los coeficientes de difusión para el atratón.....	42
5.2 Análisis paramétrico de la transferencia de atratón	44
5.2.1 Modelo local y modelo global:.....	44
5.2.2 Coeficientes de difusión	45
5.2.3 Flujos de entrada al sistema.....	48
5.2.4 Diferencia de potenciales eléctrico de Galvani.....	54
Capítulo 6 CONCLUSIONES	61
Capítulo 7 ANEXOS	63
7.1. Ecuaciones adimensionales	63
7.2. Programa en Force 2.0	66
Capítulo 8 BIBLIOGRAFÍA	68

Índice de tablas

Tabla I. Propiedades fisicoquímicas de algunas triazinas [8,12]	13
---	----