

Simulación computacional de equilibrios geoquímicos: análisis del caso de la
neutralización de aguas ácidas de minería con residuos industriales

Jeison Arley Blanco Gelvez

Trabajo de grado para optar al título de ingeniero metalúrgico

Director

Pedro Luís Delvasto Angarita

Ingeniero de Materiales, PhD

Universidad Industrial de Santander

Facultad de Ingeniería Físicoquímica

Escuela de Ingeniería Metalúrgica y Ciencia de Materiales

Bucaramanga

2021

Agradecimientos

A Dios, por brindarme la oportunidad de cumplir sueños y metas, junto con las personas más importantes en mi vida, mi familia, su amor y esfuerzo son mi mayor motivación.

A la Escuela de Ingeniería Metalúrgica y ciencia de los materiales, por su calidad humana, por hacerme sentir parte de esta gran familia, por todos sus conocimientos, enseñanzas, apoyo y consejos compartidos. A cada miembro IMET, gracias por hacerme sentir como en casa durante este tiempo vivido y permitirme seguir creciendo académica y personalmente.

Al profesor Pedro Luís Delvasto Angarita, su tiempo, dedicación, apoyo, orientación y confianza han sido de gran importancia en mi desarrollo personal y académico.

A mis amigos, Albert, María, Pacho, André, Cristian, Dianita y todos aquellos que compartieron conmigo, gracias por su grano de arena, gracias por estar siempre en los momentos alegres y en las circunstancias difíciles, gracias por su apoyo y amistad.

En general, a todas las personas presentes e involucradas en mi proyecto académico y personal.

Jeison Arley Blanco Gelvez.

Tabla de Contenido

	Pág.
Introducción	15
1. Objetivos.....	16
1.1 Objetivo General.....	16
1.2 Objetivos Específicos.....	16
2. Indagación bibliográfica para la caracterización de aguas ácidas y residuos alcalinos de la industria metalúrgica y de la industria termoeléctrica.	17
2.1 Caracterización del agua ácida de minería.....	17
2.2 Caracterización de la escoria de acero como residuo alcalino de la industria metalúrgica. ...	18
2.3 Caracterización de las cenizas volantes como residuo alcalino de la industria termoeléctrica.	18
3. Diseño del modelo conceptual de equilibrio geoquímico en el caso de la neutralización de aguas ácidas de minería.....	18
3.1 Neutralización de agua pura.....	19
3.2 Neutralización de agua ácida considerando la presencia únicamente de hierro y azufre.	20
3.3 Neutralización de agua ácida considerando la presencia únicamente de aluminio (Al) y azufre (S).....	20
3.4 Neutralización de agua ácida considerando la presencia de aluminio (Al), hierro (Fe) y azufre (S).....	21
3.5 Neutralización de agua ácida de Santander, agregando 2.5 gramos de cal apagada por litro de agua ácida bajo condiciones oxidantes y anóxicas.	22

3.7 Neutralización de agua ácida de Santander, agregando 2.5 gramos de cenizas volantes por litro de agua ácida, como residuo de la industria termoeléctrica bajo condiciones oxidantes y anóxicas.	23
4. Resultados obtenidos de la neutralización del agua ácida.	23
4.1 Resultados en la alcalinización de agua pura.....	24
4.2 Resultados en la neutralización de agua ácida considerando la presencia únicamente de hierro (Fe) y azufre (S).	25
4.3 Resultados en la neutralización de agua ácida considerando la presencia únicamente de aluminio (Al) y azufre (S).	29
4.4 Resultados en la neutralización de agua ácida considerando la presencia de aluminio (Al), hierro (Fe) y azufre (S).	30
4.5 Resultados en la neutralización de agua ácida de Santander, agregando 2.5 gramos de cal apagada por litro de agua ácida bajo condiciones oxidantes y anóxicas.	33
4.5.1 neutralización del agua ácida de minería con cal apagada	33
4.5.2 Distribución de las especies formadas al interactuar con la cal apagada.....	34
4.5.3 metales precipitados en forma de lodos en la neutralización utilizando cal apagada.	36
4.5.4 Composición final del agua al interactuar con la cal apagada.	37
4.6 Resultados en la neutralización de agua ácida de Santander, agregando 2.5 gramos de escoria de acería por litro de agua ácida, bajo condiciones oxidantes y anóxicas.	38
4.6.1 neutralización del agua ácida de minería con escoria de acería.....	38
4.6.2 Distribución de las especies formadas al interactuar con la escoria de acería.	38
4.6.3 metales precipitados en forma de lodos durante la neutralización utilizando escoria de acería.	39

4.6.4 Composición final del agua al interactuar con la escoria de acería.	41
4.7 Resultados en la neutralización de agua ácida de Santander, agregando 2.5 gramos de cenizas volantes bajo condiciones oxidantes y anóxicas.	42
4.7.1 Neutralización del agua ácida de minería con escoria de acería.	42
4.7.2 Distribución de las especies formadas al interactuar con cenizas volantes.	42
4.7.3 metales precipitados en forma de lodos durante la neutralización, utilizando cenizas volantes.	43
4.7.4 Composición final del agua al interactuar con las cenizas volantes.	44
5. Evaluación en la calidad final del agua obtenida de la neutralización realizada.	45
6. Conclusiones	47
Referencias Bibliográficas	49
Apéndices.....	52

Lista de Tablas

	Pág.
Tabla 1. Caracterización fisicoquímica de las aguas ácidas de minería provenientes del departamento de Santander utilizada en este trabajo.	17
Tabla 2. Caracterización físico química de la escoria de acero utilizada como residuo alcalino en este trabajo.	18
Tabla 3. Caracterización de las cenizas volantes utilizada como residuo alcalino de la industria termoeléctrica.....	18
Tabla 4. Precipitación y disolución de agua pura con los neutralizantes alcalinos.	25
Tabla 5. Neutralización del agua ácida con cal apagada en condiciones oxidantes y anóxicas. ..	34
Tabla 6. Composición físico química del lodo formado utilizando cal pagada en condiciones anóxicas.....	36
Tabla 7. Composición físico química del lodo formado utilizando cal pagada en condiciones oxidantes	37
Tabla 8. Neutralización del agua ácida con escoria de acería en condiciones oxidantes y anóxicas.	38
Tabla 9. Composición físico química del lodo formado utilizando escoria de acería en condiciones anóxicas.....	40
Tabla 10. Composición físico química del lodo formado utilizando escoria de acería en condiciones oxidantes	40
Tabla 11. Neutralización del agua ácida con cenizas volantes en condiciones oxidantes y anóxicas.	42

Tabla 12. Composición físico química del lodo formado utilizando cenizas volantes en condiciones anóxicas.....	44
Tabla 13. Composición físico química del lodo formado utilizando cenizas volantes en condiciones oxidantes.	44
Tabla 14. Criterio de aceptación del agua residual final obtenida al interactuar con los neutralizantes y residuos alcalinos utilizados	46

Lista de Figuras

	Pág.
Figura 1. Condiciones del agua pura sometida a la reacción con los diversos neutralizantes alcalinos.	20
Figura 2. Condiciones del agua ácida con hierro, sometida a la reacción con los diversos neutralizantes alcalinos.	20
Figura 3. Condiciones del agua ácida con aluminio, sometida a la reacción con los diversos neutralizantes alcalinos	21
Figura 4 Condiciones del agua ácida con Hierro y aluminio, sometida a la reacción con los diversos neutralizantes alcalinos	21
Figura 5 Condiciones del agua ácida, sometida a la reacción con cal apagada como neutralizante alcalino.....	22
Figura 6 Condiciones del agua ácida sometida a la reacción con la escoria de acería como residuo	23
Figura 7 Condiciones del agua ácida sometida a la reacción con cenizas volantes como residuo alcalino.....	23
Figura 8 Influencia en el pH de los neutralizantes alcalinos con el agua pura.	25
Figura 9 Neutralización de agua ácida considerando la presencia principal de hierro bajo condiciones anóxicas	26
Figura 10 Neutralización de agua ácida considerando la presencia principal de hierro bajo condiciones oxidantes.	26
Figura 11 Hierro – calcita en condiciones anóxicas	27
Figura 12 Hierro – calcita en condiciones oxidantes.....	27

Figura 13 hierro – cal apagada en condiciones anóxicas.....	28
Figura 14 Hierro – cal apagada en condiciones oxidantes.....	28
Figura 15 Hierro – cal viva en condiciones anóxicas.....	29
Figura 16 Hierro - cal viva en condiciones oxidantes.....	29
Figura 17 Neutralización de agua ácida considerando la presencia principal de Aluminio bajo condiciones oxidantes y anóxicas.	29
Figura 18 Especiación de Al bajo condiciones anóxicas.....	30
Figura 19 Especiación de AL bajo condiciones oxidantes.....	30
Figura 20 Especiación Fe-AL en condiciones anóxicas.....	31
Figura 21 concentración Molal de las especies presentes en un pH máximo de 10.4 alcanzado por la calcita en condiciones anóxicas.....	31
Figura 22 Especiación Fe-AL en condiciones oxidantes.....	31
Figura 23 Concentración Molal de las especies presentes en un pH máximo de 10.3 alcanzado por la calcita en condiciones oxidantes.	31
Figura 24 Especiación Fe-AL en condiciones anóxicas utilizando cal apagada.....	32
Figura 25 Concentración Molal de las especies presentes en un pH máximo de 13.2 alcanzado con cal apagada en condiciones anóxicas.....	32
Figura 26 Especiación Fe-AL en condiciones oxidantes utilizando cal apagada.....	32
Figura 27 concentración molal de las especies presentes en un pH máximo de 13.1 alcanzado con cal apagada como agente neutralizante.....	32
Figura 28 Especiación Fe-AL en condiciones oxidantes utilizando cal viva.....	32
Figura 29 Concentración Molal de las especies presentes en un pH máximo de 13.3 alcanzado con cal viva como agente neutralizante.....	32

Figura 30 Especiación Fe-AL en condiciones oxidantes utilizando cal viva	33
Figura 31 Concentración Molal de las especies presentes en un pH máximo de 13.2 alcanzado con cal viva como agente neutralizante	33
Figura 32 Distribución de las especies formadas utilizando cal apagada como neutralizante alcalino.....	35
Figura 33 Concentración obtenida de las especies formadas a un pH máximo de 12.5 utilizando cal apagada como neutralizante alcalino.....	35
Figura 34 Composición porcentual del lodo formado en la neutralización del agua ácida bajo condiciones anóxicas.	36
Figura 35 Composición porcentual del lodo formado en la neutralización del agua ácida bajo condiciones oxidantes.	37
Figura 36 Composición final bajo condiciones anóxicas	38
Figura 37 Composición final bajo condiciones oxidantes.	38
Figura 38 Distribución de las especies formadas con escoria de aceria como residuo alcalino... ..	39
Figura 39 Concentración obtenida de las especies formadas a un pH de 11.7 utilizando cal apagada como neutralizante	39
Figura 40 Composición porcentual del lodo formado en la neutralización del agua ácida bajo condiciones anóxicas.	40
Figura 41 Composición porcentual del lodo formado en la neutralización del agua ácida bajo condiciones oxidantes.	41
Figura 42 Composición final bajo condiciones anóxicas	41
Figura 43 Composición final bajo condiciones oxidantes.	41
Figura 44 Distribución de las especies formadas cenizas volantes como residuo alcalino.	43

Figura 45 Concentración obtenida de las especies formadas a un pH de 6.5 utilizando cenizas volantes como neutralizante.....	43
Figura 46 Composición porcentual del lodo formado en la neutralización del agua ácida bajo condiciones anóxicas.	44
Figura 47 Composición porcentual del lodo formado en la neutralización del agua ácida bajo condiciones oxidantes.	44
Figura 48 Composición final bajo condiciones anóxicas	45
Figura 49 Composición final bajo condiciones oxidantes.	45

Lista de apéndices

	Pág.
APÉNDICE A. Diagramas de Pourbaix de las principales especies presentes en el agua ácida en medios acuosos realizados con Phreeplot, herramienta gráfica de PHREEQC.....	52
APÉNDICE B. Diagramas de especiación de las principales especies presentes en el agua ácida al reaccionar con el neutralizante alcalino (Cal apagada) bajo condiciones anóxicas y oxidantes.	53
APÉNDICE C. Diagramas de especiación de las principales especies presentes en el agua ácida al reaccionar con el residuo alcalino de la industria metalúrgica (escoria de acería), bajo condiciones anóxicas y oxidantes	55
APÉNDICE D. Diagramas de especiación de las principales especies presentes en el agua ácida al reaccionar con el residuo alcalino de la industria termoeléctrica (cenizas volantes), bajo condiciones anóxicas y oxidantes.	57
APÉNDICE E. Plantillas de simulación realizadas en la programación de los neutralizantes y residuos alcalinos mediante el software de código abierto Phreeqc.	59

RESUMEN

Título: Simulación computacional de equilibrios geoquímicos: análisis del caso de la neutralización de aguas ácidas de minería con residuos industriales. *

Autor: Jeison Arley Blanco Gelvez. **

Palabras clave: AMD, Neutralización, Residuos Alcalinos, Distribución de las Especies.

Descripción: En el presente trabajo se realizó la simulación computacional de la neutralización de un agua ácida de minería (AMD) del departamento de Santander, mediante la ayuda de un software de código abierto. Inicialmente se realizó la indagación bibliográfica en la neutralización de aguas ácidas de minería, métodos de neutralización y simulación de procesos geoquímicos. La simulación se realizó mediante el software PHREEQC en lenguaje C++, diseñado por el sistema geológico de los Estados Unidos (USGS). los neutralizantes alcalinos utilizados fueron la cal viva (CaO), la cal apagada (Ca(OH)₂) y la calcita (CaCO₃), se utilizó la escoria de acero como residuo alcalino de la industria metalúrgica y las cenizas volantes como residuo alcalino de la industria termoeléctrica. Finalmente se obtuvieron resultados de neutralización, posibles lodos formados, distribución de las especies en cada uno de los casos utilizados y el análisis en la calidad de agua final tanto en condiciones anóxicas como como en condiciones oxidantes. Los resultados obtenidos mostraron un mejor desempeño de la cal apagada Ca(OH)₂ en cuanto a los neutralizantes alcalinos utilizados. Por otra parte, la escoria de acería demostró un mejor comportamiento en comparación con el residuo de la industria termoeléctrica (cenizas volantes) al mostrar mayor alcalinidad y menor formación de lodos.

* Proyecto de grado

**Facultad de Ingenierías Físicoquímicas. Escuela de Ingeniería Metalúrgica y Ciencia de los Materiales.

Director: Pedro Luis Delvasto Angarita, Doctor en Ciencias y Tecnología de Materiales.

ABSTRACT

TITLE: COMPUTATIONAL SIMULATION OF GEOCHEMICAL EQUILIBRIA: ANALYSIS OF THE CASE OF NEUTRALIZATION OF ACID MINING WATERS WITH INDUSTRIAL WASTES. *

AUTHOR: JEISON ARLEY BLANCO GELVEZ**.

KEY WORDS: AMD, neutralization, alkaline residues, species distribution.

DESCRIPTION: In the current the computational simulation of the neutralization of an acid mining water (AMD) in the department of Santander was carried out, using open-source software. Initially, the bibliographic investigation was carried out on the neutralization of acidic mining waters, neutralization methods and simulation of geochemical processes. The simulation was carried out using the PHREEQC software in C ++ language, designed by the United States Geological System (USGS). The alkaline neutralizers used were quicklime (CaO), slaked lime (Ca (OH) 2) and calcite (CaCO₃), steel slag was used as alkaline waste from the metallurgical industry and fly ash as alkaline waste from the thermoelectric industry. Finally, neutralization results were obtained, possible sludge formed, distribution of the species in each of the cases used and the analysis of the final water quality both under anoxic and oxidizing conditions. The results obtained showed a better performance of the slaked lime Ca (OH) 2 in terms of the alkaline neutralizers used. On the other hand, the steel slag showed a better behavior compared to the waste from the thermoelectric industry (fly ash) by showing higher alkalinity and less sludge formation.

* Degree project

**Faculty of Physicochemical Engineering. School of Metallurgical Engineering and Materials Science.66

Director: Pedro Luis Delvasto Angarita, PhD in Materials Science and Technology

Introducción

El drenaje ácido de minas (AMD) es un problema ambiental importante y lo sigue siendo a pesar de la disponibilidad de una amplia gama de técnicas y tecnologías de remediación. Muchos métodos utilizados para remediar la AMD tienen una implementación limitada debido a un rendimiento deficiente, inexactitudes de diseño, altos costos, uso de productos químicos peligrosos, agotamiento de los recursos naturales y la generación de más desechos. (Moodley et al., 2018). Los procesos de minería actual para la extracción de sulfuros metálicos generan residuos de operación como relaves y escombros, estos conllevan un gran problema ambiental conocido como la acidificación del agua, debido a la formación de ácidos, oxidación de piritita y otros minerales sulfurados en los desechos de la mina, presencia de metales que se pueden liberar tales como arsénico, cadmio, zinc, cobre y plomo que finalmente pueden contaminar las aguas subterráneas, haciéndola inadecuada para beber y su uso agrícola. Es necesaria la creación de procesos para el tratamiento de aguas de operación, como es el caso de agentes neutralizantes capaces de normalizar el pH de las aguas y precipitar los iones de metales pesados en forma de lodos. Normalmente los procesos de neutralización son llevados a cabo con piedra caliza, sin embargo, este enfoque es efectivo pero insostenible a largo plazo, tanto el método de obtención de esta (minería), como la cantidad necesaria generan valores económicos significativos difíciles de costear (Carneiro Brandão Pereira et al., 2020). Mediante este proyecto se busca lograr nuevas alternativas en la eficiencia de la neutralización de agua ácida de minería, simulando diversas reacciones con neutralizantes y residuos alcalinos de la industria metalúrgica y termoeléctrica, que generalmente terminan desechados en vertederos y sin ningún uso, dando así, un enfoque de economía circular.

1. Objetivos

1.1 Objetivo General

Analizar mediante software de simulación computacional de código abierto la modificación de equilibrios geoquímicos en aguas ácidas de minería como consecuencia de la adición de residuos industriales de carácter alcalino

1.2 Objetivos Específicos

- Emplear un software de código abierto para analizar métodos tradicionales de neutralización de aguas ácidas de minería mediante la adición de cal o carbonato de calcio.
- Emplear un software de código abierto para analizar métodos tradicionales de neutralización de aguas ácidas de minería mediante la adición de residuos de la industria metalúrgica o de la industria de generación termoeléctrica.
- Analizar los resultados a fin de generar conceptualmente sistemas industriales de tratamientos de aguas ácidas de minería que utilicen residuos como agentes neutralizantes.

2. Indagación bibliográfica para la caracterización de aguas ácidas y residuos alcalinos de la industria metalúrgica y de la industria termoeléctrica.

Se realizó la indagación bibliográfica de aguas ácidas de minería ubicadas en el departamento de Santander, la caracterización de la escoria de acero utilizada como residuo de la industria metalúrgica y la caracterización de las cenizas volantes utilizadas como residuos de la industria termoeléctrica. Igualmente se utilizaron neutralizantes alcalinos como la cal viva (CaO), la calcita (CaCO₃) y la cal apagada (Ca(OH)₂), para evaluar su eficiencia en la neutralización con los AMD ubicados en el departamento de Santander.

2.1 Caracterización del agua ácida de minería.

En la tabla 1 se muestra la caracterización del agua ácida de minería utilizada, la cual fue obtenida de diferentes aguas ácidas tomadas la mina Angostura y la de la mina la Perezosa, ubicadas en la región de Soto Norte en Santander (Ramírez Pita 2012, Peña & Perez, 2009). La composición del agua ácida utilizada para la simulación fue tomada por el promedio de composición de las aguas ácidas con el fin de obtener una referencia más amplia en la caracterización del AMD de este departamento.

Tabla 1.

Caracterización fisicoquímica de las aguas ácidas de minería provenientes del departamento de Santander utilizada en este trabajo.

caracterización agua ácida	
Elemento	Concentración (g/l)
Hierro (Fe)	0.074
Aluminio (Al)	0.037
Cobre (Cu)	0.064
Magnesio (Mg)	0.008
Manganeso (Mn)	0.002
Potasio (K)	0.034
Sodio (Na)	0.003
Zinc (Zn)	0.001
Azufre (S)	0.053

2.2 Caracterización de la escoria de acero como residuo alcalino de la industria metalúrgica.

En la tabla 2 se muestra la caracterización de los residuos de escoria de acero de hornos de arco eléctrico. La escoria es obtenida de la producción de acero en Southern Steel Berhad, Penang, siendo una de las mayores siderúrgicas de Malasia (Ter Teo et al., 2016). La composición química de la escoria son principalmente óxidos como Al_2O_3 , CaO , MgO , SiO_2 , FeO y Fe_3O_4 , los cuales están presentes en fases tales como larnita (2CaOSiO_2), gehlenita ($\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 2\text{CaO} \cdot \text{SiO}_2$) y wustita (FeO).

Tabla 2.
Caracterización fisicoquímica de la escoria de acero utilizada como residuo alcalino en este trabajo.

Fases presentes	Peso porcentual (%)
larnita ($2\text{CaO} \cdot \text{SiO}_2$),	55.5
gehlenita ($\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 2\text{CaO} \cdot \text{SiO}_2$)	13.2
wustita (FeO)	32.4

2.3 Caracterización de las cenizas volantes como residuo alcalino de la industria termoeléctrica.

Las cenizas volantes de las centrales eléctricas son el subproducto de la producción de energía de la combustión del carbón que se genera en forma de polvo (Mádai et al., 2015). A continuación, en la tabla 3 se muestra la composición mineralógica equivalente usando los datos de difracción de rayos X (DFX) y fluorescencia de rayos X (FRX) del artículo (Mádai et al., 2015), asumiendo únicamente las fases mayoritarias de las cenizas volantes.

Tabla 3.
Caracterización de las cenizas volantes utilizada como residuo alcalino de la industria termoeléctrica.

Fases presentes	Peso porcentual (%)
Mullita ($\text{Al}_6\text{Si}_2\text{O}_{13}$),	36.4
Sílice amorfa (SiO_2)	65.7
Magnetita (Fe_3O_4)	5.2
Cal viva (CaO)	3.2

3. Diseño del modelo conceptual de equilibrio geoquímico en el caso de la

neutralización de aguas ácidas de minería.

El software utilizado para la realización de la simulación en la neutralización del agua ácida de minería fue PHREEQC versión 3. Este programa es escrito en los lenguajes de programación C y C++, está diseñado para realizar una amplia variedad de cálculos geoquímicos acuosos y su instalación se realizó de la página del sistema geológico de los Estados Unidos (Parkhurst & Appelo, 1999).

El análisis y especiación del agua ácida de minería se realizó en diferentes etapas. Primero se inició con la neutralización y especiación de agua pura al ir agregando distintas adiciones de los neutralizantes alcalinos para ver su influencia. Luego se fue agregando los principales metales presentes en el agua ácida, teniendo agua con hierro, agua con aluminio y agua con hierro más aluminio, para finalmente agregar el resto de los metales presentes. Se realizó la reacción del agua ácida total con los neutralizantes alcalinos y los residuos alcalinos con el fin de obtener los resultados de neutralización, distribución de las especies y los posibles lodos formados.

En la simulación del agua ácida, se tuvo en cuenta la presencia de oxígeno disuelto con el fin de simular distintas condiciones a las que puedan estar sometidos los AMD. La condición anóxica simula los AMD que proceden del interior de balsas, escombreras y labores subterráneas, las cuales tienen poco o casi nada de oxígeno disuelto y predominio de la fase ferrosa; la condición oxidante simula los AMD que entran en contacto con la atmósfera en zonas superficiales, se oxigenan rápidamente, están saturadas de oxígeno de (70-100%) y predomina la fase férrica (Peña & Perez, 2009). A continuación, en las figuras del 1 al 7 se muestran cada una de las etapas y condiciones del modelamiento geoquímico a las que fue sometida el agua ácida.

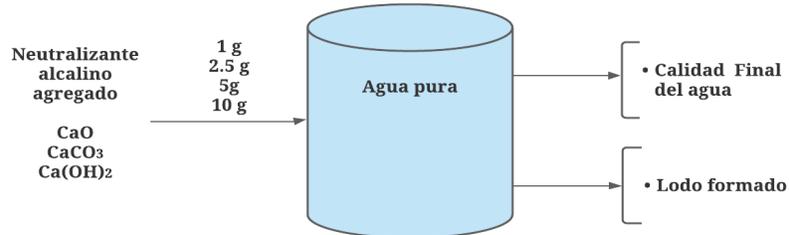
3.1 Neutralización de agua pura.

En este cálculo se reaccionó agua pura con cal viva (CaO), calcita (CaCO₃) y cal apagada (Ca(OH)₂) durante adiciones de 1, 2.5, 5 y 10 gramos de cada elemento neutralizante con el fin de

ver la influencia en el pH, la precipitación y la disolución de los elementos neutralizantes utilizados. En la figura 1 se muestra el diagrama de las condiciones iniciales de la simulación al interactuar el agua pura con los neutralizantes alcalinos utilizados.

Figura 1.

Condiciones del agua pura sometida a la reacción con los diversos neutralizantes alcalinos.

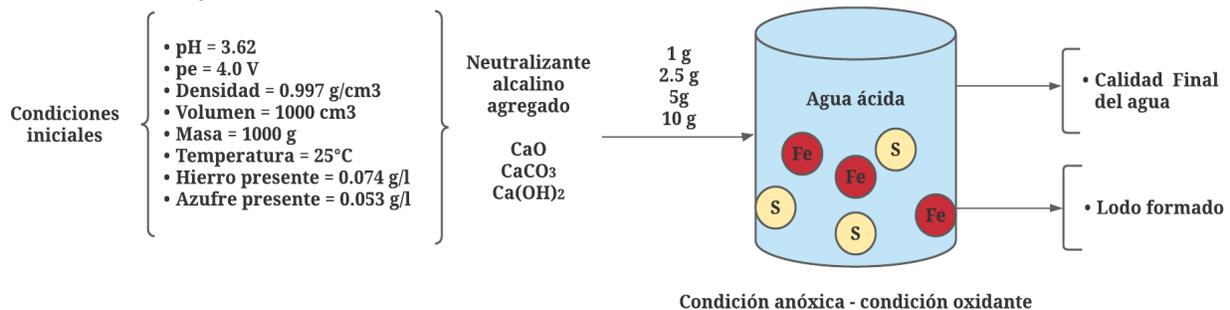


3.2 Neutralización de agua ácida considerando la presencia únicamente de hierro y azufre.

Durante esta simulación se reaccionó agua ácida con cal viva (CaO), calcita (CaCO₃) y cal apagada (Ca(OH)₂) en adiciones de 1, 2.5, 5 y 10 gramos de cada elemento neutralizante, con el fin de ver la influencia en el pH, la distribución de especies y la concentración final. La figura 2 muestra las condiciones iniciales de la simulación en donde se tuvo en cuenta únicamente la presencia de hierro y azufre en el agua ácida bajo condiciones oxidantes y anóxicas.

Figura 2.

Condiciones del agua ácida con hierro, sometida a la reacción con los diversos neutralizantes alcalinos.



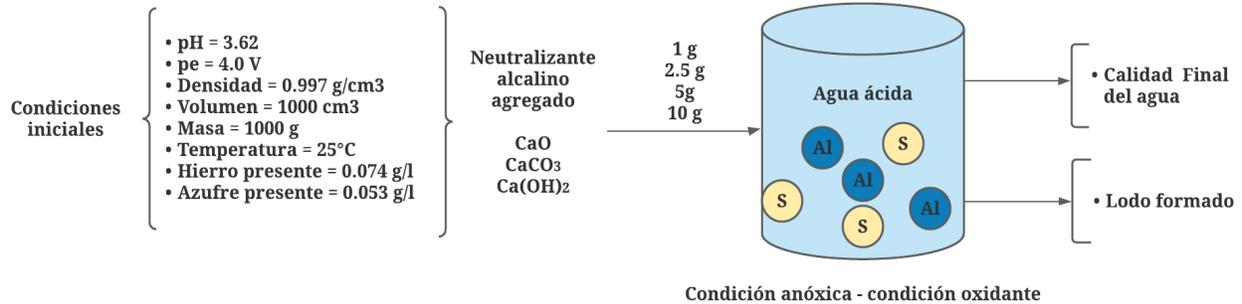
3.3 Neutralización de agua ácida considerando la presencia únicamente de aluminio (Al) y azufre (S).

En este cálculo se reaccionó agua ácida con cal viva (CaO), calcita (CaCO₃) y cal apagada (Ca(OH)₂) durante adiciones de 1, 2.5, 5 y 10 gramos de cada elemento neutralizante con el fin de

ver la influencia en el pH, la especiación presente y la concentración final. Se simuló únicamente la presencia de aluminio y azufre como elementos disueltos en el agua ácida. Igualmente, se tuvo en cuenta la presencia de oxígeno disuelto, con el fin de modelar las condiciones oxidantes y anóxicas a las que pueda estar sometida el AMD.

Figura 3.

Condiciones del agua ácida con aluminio, sometida a la reacción con los diversos neutralizantes alcalinos

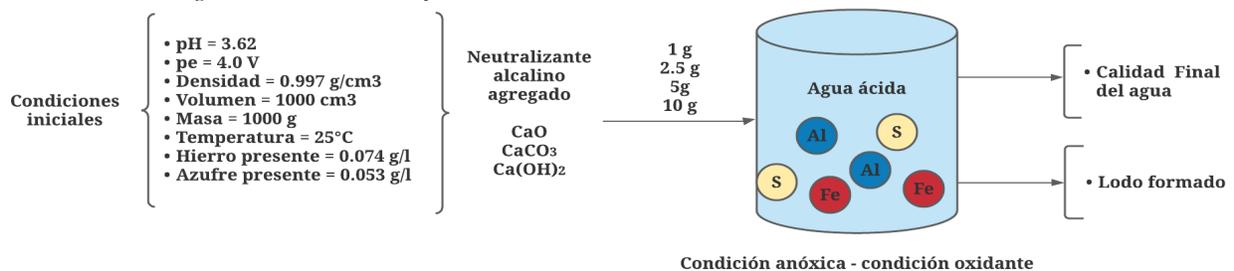


3.4 Neutralización de agua ácida considerando la presencia de aluminio (Al), hierro (Fe) y azufre (S).

A partir de esta simulación se hizo reaccionar agua ácida con los neutralizantes alcalinos utilizados en adiciones de 1, 2.5, 5 y 10 gramos de cada elemento, con el fin de mostrar la influencia en el pH y la especiación química presente. La figura 4 muestra las condiciones iniciales a las que fue sometida el agua ácida teniendo en cuenta la presencia del aluminio, hierro y azufre como metales disueltos.

Figura 4

Condiciones del agua ácida con hierro y aluminio, sometida a la reacción con los diversos neutralizantes alcalinos

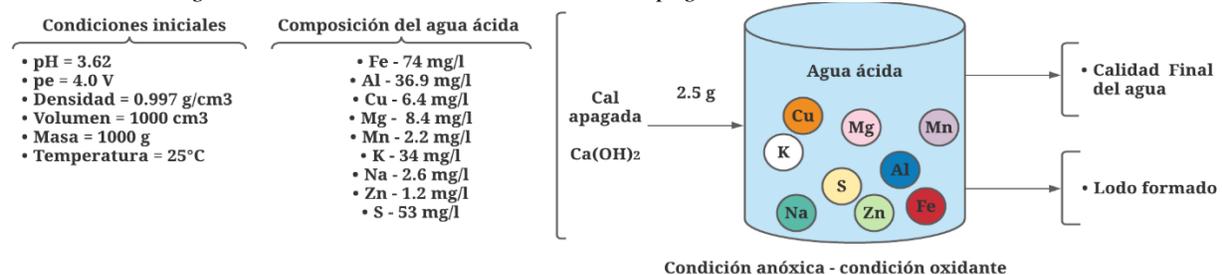


3.5 Neutralización de agua ácida de Santander, agregando 2.5 gramos de cal apagada por litro de agua ácida bajo condiciones oxidantes y anóxicas.

En esta simulación se agregaron todos los metales disueltos en el agua ácida de minería y se realizó bajo condiciones oxidantes y condiciones anóxicas al reaccionar con 2.5 gramos de cal apagada ($\text{Ca}(\text{OH})_2$). En la figura 5 se muestra las condiciones iniciales del agua ácida a las que se realizó la simulación con el fin de ver la influencia en el pH, la distribución de especies de cada elemento presente, la concentración en el pH final y los posibles lodos formados en el agua ácida para tener un criterio en la evaluación de la calidad del agua final.

Figura 5

Condiciones del agua ácida, sometida a la reacción con cal apagada como neutralizante alcalino

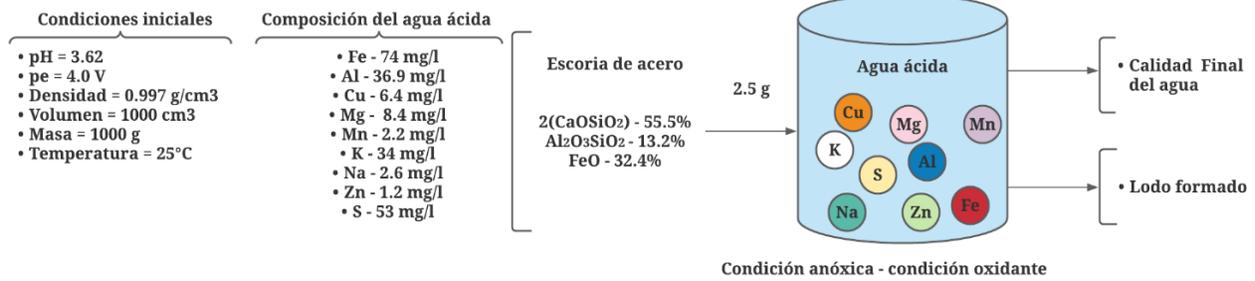


3.6 Neutralización de agua ácida de Santander, agregando 2.5 gramos de escoria de acería por litro de agua ácida, como residuo de la industria metalúrgica bajo condiciones oxidantes y anóxicas.

Para esta simulación se reaccionó agua ácida de minería con 2.5 gramos de escoria de acería bajo condiciones oxidantes y condiciones anóxicas, con el fin de ver la eficiencia en la neutralización del AMD, la distribución de cada una de las especies y los posibles lodos formados para dar un criterio de evaluación en la calidad final del agua obtenida. En la figura 6 se muestra la condición inicial, la concentración del agua ácida y las fases presentes de la escoria de acería a las que fue realizada la simulación.

Figura 6

Condiciones del agua ácida sometida a la reacción con la escoria de acería como residuo

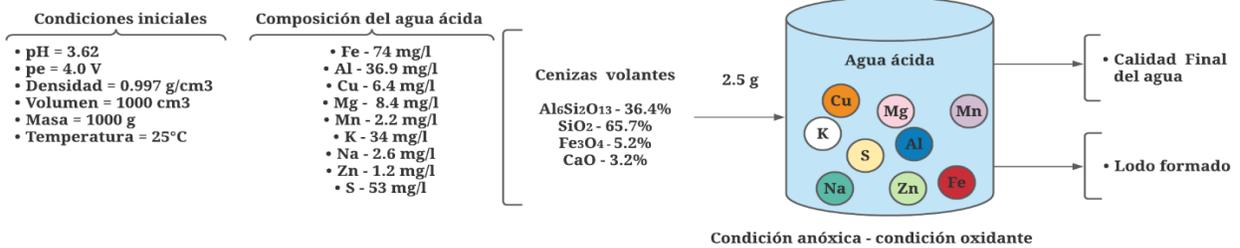


3.7 Neutralización de agua ácida de Santander, agregando 2.5 gramos de cenizas volantes por litro de agua ácida, como residuo de la industria termoeléctrica bajo condiciones oxidantes y anóxicas.

Durante esta simulación se reaccionó agua ácida de minería con 2.5g de cenizas volantes bajo condiciones oxidantes y condiciones anóxicas. Se realizó la distribución de especies, el análisis de posibles lodos formados y la neutralización del AMD con el fin de ver la calidad final de agua obtenida. La figura 7 muestra las condiciones a la que se tuvieron en cuenta en la realización de la simulación.

Figura 7

Condiciones del agua ácida sometida a la reacción con cenizas volantes como residuo alcalino.



4. Resultados obtenidos de la neutralización del agua ácida.

A partir de cada una de las simulaciones realizadas con ayuda del software PHREEQC versión 3.0, se obtuvieron diversos cálculos geoquímicos con el fin de mostrar la neutralización final del agua ácida, los posibles lodos formados y las fases presentes en él, la distribución de

especies de cada elemento presente en el agua ácida, la concentración de especies final del agua ácida y la calidad final del agua al reaccionar con los neutralizantes y residuos alcalinos utilizados.

Las simulaciones se hicieron bajo 2 condiciones, al ir agregando y eliminando oxígeno con el fin de simular un agua ácida en condiciones anóxicas, que representan AMD provenientes de minas subterráneas y aguas ácidas en condiciones oxidantes que representan AMD en contacto con la superficie.

4.1 Resultados en la alcalinización de agua pura

En la figura 8, se muestra la influencia en el pH del agua pura al entrar en contacto con los neutralizantes alcalinos utilizados (calcita, cal viva y cal apagada), todos los neutralizantes alcalinos mostraron una influencia positiva en la alcalinización del AMD al entrar en contacto con la primera adición (1 gramo), para finalmente mostrar una tendencia a estabilizarse en las otras tres adiciones (2.5, 5 y 10 gramos). La calcita (CaCO_3), fue el neutralizante alcalino que menor pH mostró mientras que la cal apagada (Ca(OH)_2) y la cal viva (CaO) mostraron resultados de alcalinización similares y óptimos.

En tabla 4 se muestran los resultados obtenidos en la precipitación y disolución de los neutralizantes alcalinos con el agua pura. Inicialmente se tienen los valores de solubilidad teórica consultados de cada uno de los neutralizantes al entrar en contacto con el agua pura; la solubilidad experimental máxima de los neutralizantes alcalinos mostrados en la simulación fueron similares a la teórica validando y verificando los resultados obtenidos. La calcita en el agua fue insoluble en todas las adiciones agregadas, mientras que la cal viva y la cal apagada se disolvieron en su totalidad al agregar 1 gramo, pero en las siguientes adiciones mostraron precipitados. La cal viva al reaccionar con el agua se precipitó en forma de Portlandita (Ca(OH)_2), como la fase presente en el lodo.

Figura 8
Influencia en el pH de los neutralizantes alcalinos con el agua pura.

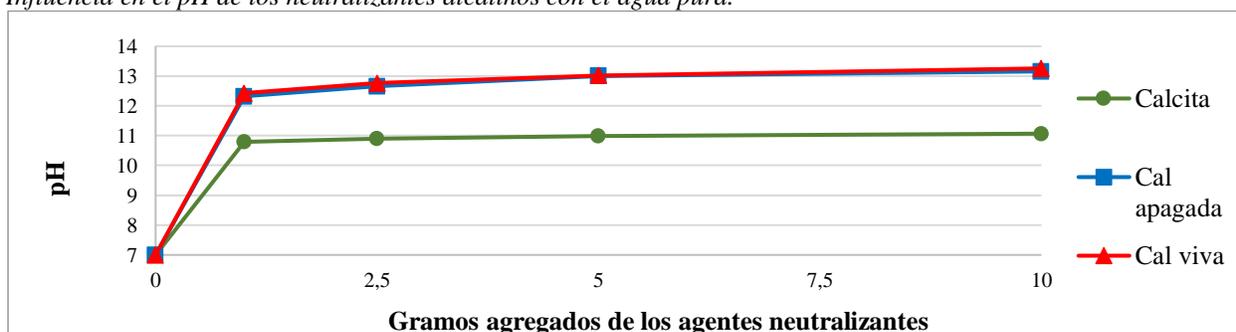


Tabla 4.
Precipitación y disolución de agua pura con los neutralizantes alcalinos.

	Solubilidad teórica (g/l)	Solubilidad experimental (g/l)	Gramos agregados inicialmente	Fases presentes	Gramos Precipitados	Gramos disueltos (g)
Calcita (CaCO ₃)	Insoluble 0.013	0.012	1.0		0.988	0.011
			2.5		2.489	0.010
			5.0	Calcita	4.992	0.008
			10.0		9.996	0.004
Cal viva (CaO)	Soluble 1.19	1.130	1.0	-	0.000	1.000
			2.5		1.372	1.128
			5.0	Portlandita	3.874	1.126
			10.0	Ca(OH) ₂	8.872	1.128
Cal apagada (Ca(OH) ₂)	Soluble 1.85	1.493	1.0	-	0.000	1.000
			2.5		1.011	1.489
			5.0	Portlandita	3.508	1.492
			10.0	Ca(OH) ₂	8.510	1.490

Nota: * Los datos obtenidos de la solubilidad teórica de los neutralizantes alcalinos en el agua fueron adaptados de “Centro de Investigación y Desarrollo Tecnológico en Electroquímica Dr. Yunny Meas Vong” Alejandro, M C Barrios, Peraza 2009.

4.2 Resultados en la neutralización de agua ácida considerando la presencia únicamente de hierro (Fe) y azufre (S).

A continuación, en las figuras 9 y 10 se muestran los resultados de neutralización y especiación del agua ácida considerando únicamente la presencia de hierro al interactuar con distintas adiciones de los neutralizantes. Bajo condiciones oxidantes la simulación mostró una

disminución en el pH inicial y los resultados finales de pH del agua ácida al interactuar tanto con la calcita como con la cal viva mostraron una leve disminución.

Figura 9

Neutralización de agua ácida considerando la presencia principal de hierro bajo condiciones anóxicas

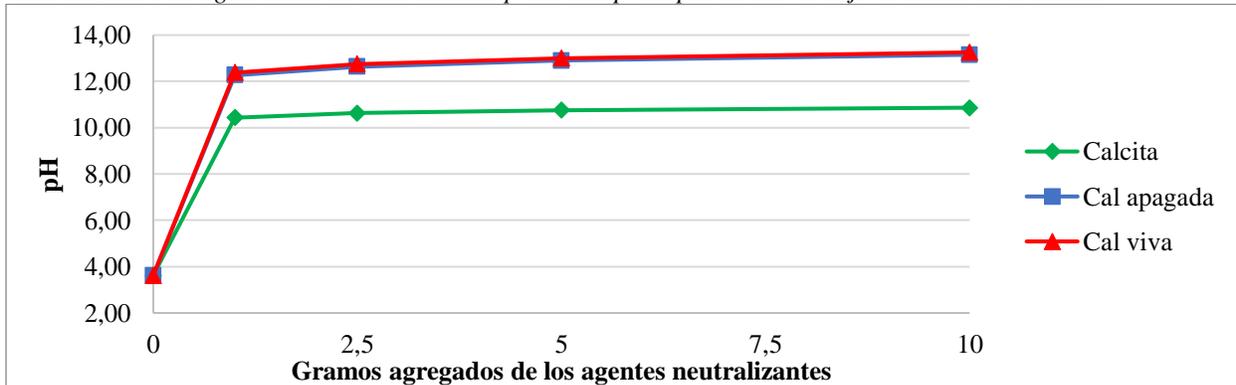
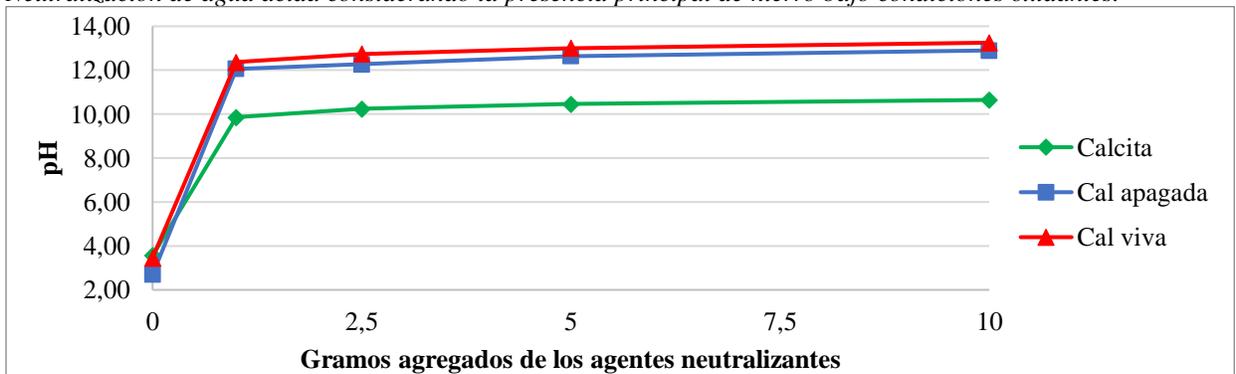


Figura 10

Neutralización de agua ácida considerando la presencia principal de hierro bajo condiciones oxidantes.



En la simulación realizada con calcita (CaCO_3) bajo condiciones anóxicas, el pH inicial de 3.62 y potencial eléctrico de 4.0 estuvieron estables. Los minerales carbonatos como la calcita brindan amortiguamiento fuerte a la acidificación de suelos y aguas en zonas mineras. Sin embargo, algunos carbonatos de hierro como la siderita (FeCO_3), toman papeles ambiguos. La disolución de estos minerales provoca un aumento en el pH mientras que añade más hierro disuelto a las aguas. Una vez que estas aguas entran en contacto con la atmósfera, el hierro añadido se oxida a la forma férrica (Fe^{3+}) por hidrólisis, liberando más protones otra vez (Aduvire, 1991). La distribución de especies del hierro en condición anóxicas con calcita presentó la formación de

Fe(2+) en forma del ion Fe^{+2} y de FeSO_4 . Al agregar el neutralizante alcalino se inició la disminución de las especies iniciales para finalmente formar carbonatos férricos como la siderita (FeCO_3) y FeCO_3OH^- en su mayoría. Al ingresar oxígeno saturado en la simulación, se mostró una disminución inicial en el pH bajo estas condiciones oxidantes. El oxígeno disuelto ingresado en la simulación favoreció la formación de Fe(3+), teniendo en la distribución de especies inicial el Fe(2+) en forma de Fe^{+2} y FeSO_4 , y el Fe(3+) en forma de FeO^+ . Al reaccionar con el neutralizante alcalino y en su pH final, el Fe(3+) se presentó como FeOH_4^- y el Fe(2+) como FeCO_3OH^- . Las figuras 11 y 12 presentan la distribución de especies del hierro (Fe) al interactuar con calcita bajo condiciones anóxicas y oxidantes, respectivamente.

Figura 11

Hierro – calcita en condiciones anóxicas

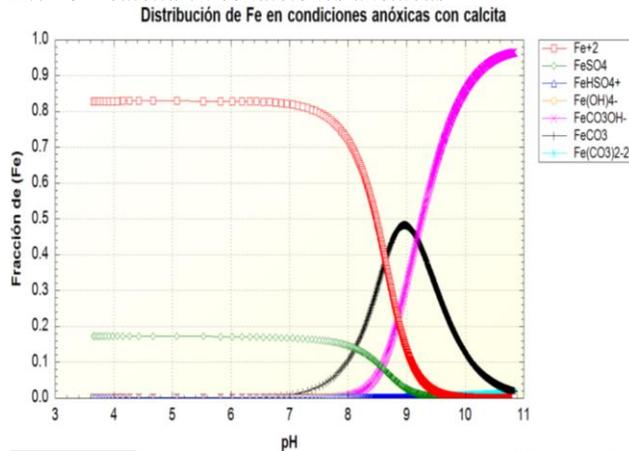
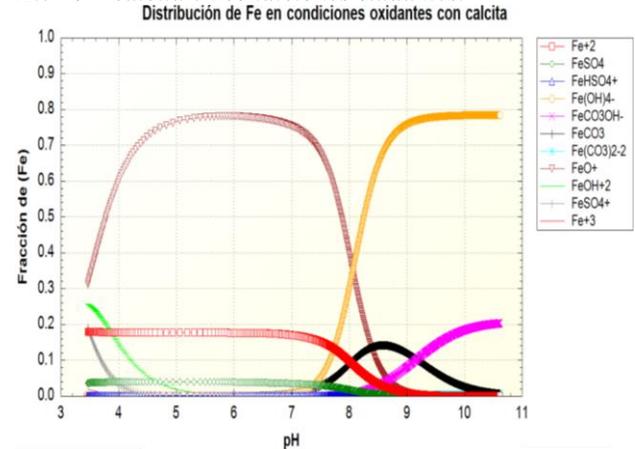


Figura 12

Hierro – calcita en condiciones oxidantes.



Por su parte, la cal apagada ($\text{Ca}(\text{OH})_2$) es útil para tratar grandes caudales en alta acidez. Como la cal apagada es hidrofóbica, para conseguir una buena mezcla con el agua, se precisa de un dispositivo de agitación. Cuando se pretende eliminar el hierro, en el propio proceso de agitación se incorpora la aireación necesaria para lograr la oxidación del hierro ferroso hasta transformarse en hierro férrico y conseguir la mayor eliminación de éste. (Aduvire, 1991). Los resultados en la distribución de especies del hierro en condiciones anóxicas mostraron la formación

de $\text{Fe}(2+)$ como Fe^{+2} y FeO , al ir agregando el neutralizante alcalino se favoreció la formación de hierro $\text{Fe}(3+)$ teniendo en su pH máximo alcanzado la presencia de hidróxidos como el FeOH_4^- y $\text{Fe}(2+)$ en forma de HFeO_2^- . Bajo condiciones oxidantes, se presentó una disminución en el pH y favorecimiento de formación de $\text{Fe}(3+)$, teniendo en mayor proporción la formación de FeOH_4^- , como se muestra en las figuras 13 y 14 .

Figura 13
hierro – cal apagada en condiciones anóxicas
Distribución especies de Hierro bajo condiciones anóxicas

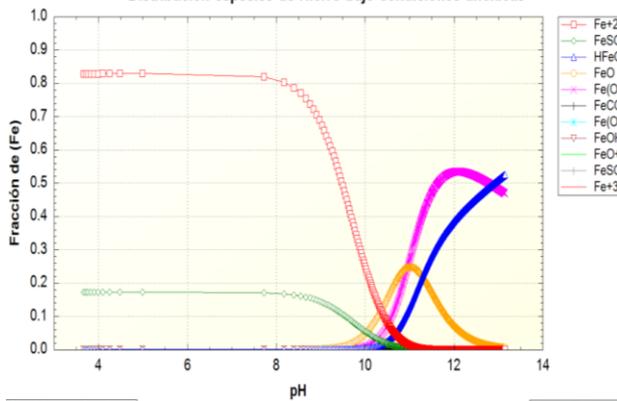
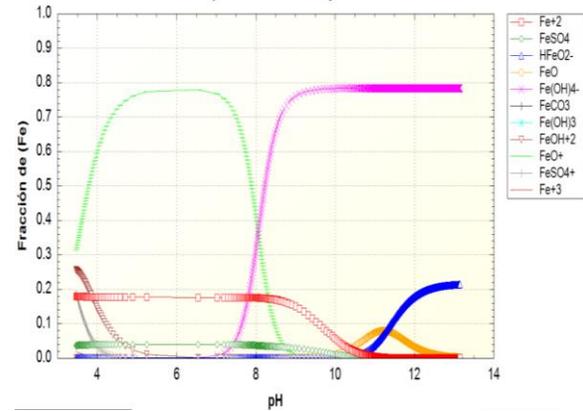


Figura 14
Hierro – cal apagada en condiciones oxidantes.
Distribución especies de Hierro bajo condiciones oxidantes



La distribución de especies del hierro al reaccionar con la cal viva, utilizado como neutralizante alcalino, mostró un comportamiento similar en condiciones anóxicas a la cal apagada y calcita, el hierro precipita como hidróxido ferroso insoluble en pH superiores a 8. Al agregar oxígeno saturado durante la reacción se favoreció la formación de $\text{Fe}(3+)$ en forma de hidróxido ferroso ($\text{Fe}(\text{OH})_4^-$) como se muestra en las figuras 15 y 16.

Figura 15
Hierro – cal viva en condiciones anóxicas

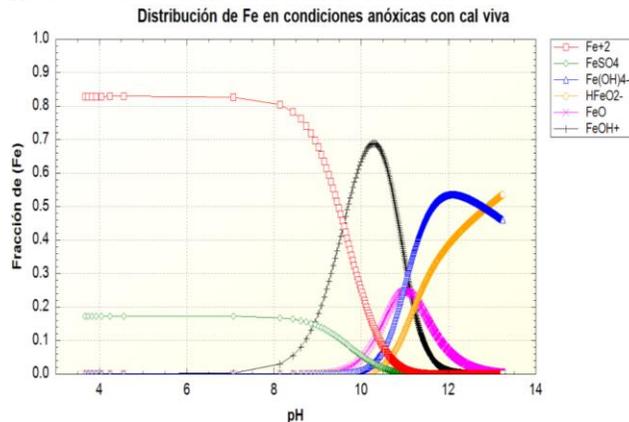
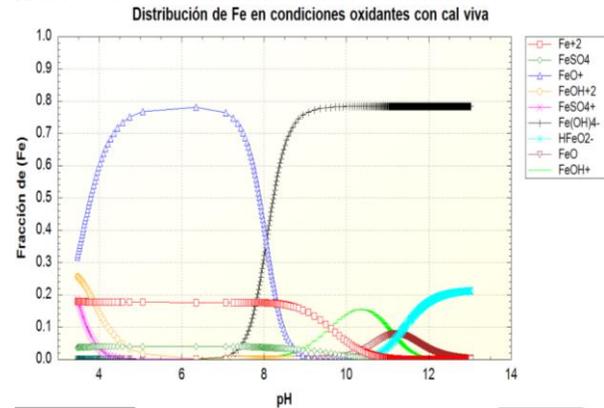


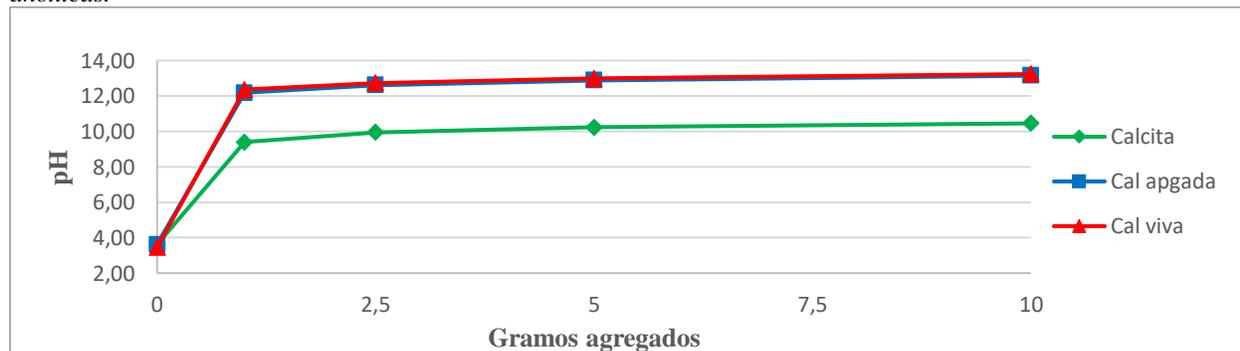
Figura 16
Hierro - cal viva en condiciones oxidantes.



4.3 Resultados en la neutralización de agua ácida considerando la presencia únicamente de aluminio (Al) y azufre (S).

A continuación, en la figura 17, se muestran los resultados obtenidos en la simulación de neutralización de agua ácida, considerando únicamente la presencia del aluminio. La simulación se realizó bajo condiciones anóxicas y oxidantes en las que su comportamiento en el pH y especiación no sufrieron cambios, esto debido al estado único de oxidación (Al⁺³) que presenta el aluminio, que a diferencia del hierro sí presenta un par redox sufriendo transformaciones de óxido reducción. El aluminio sufrirá transformaciones puramente químicas como se evidencia en la especiación mostrada y no electroquímicas.

Figura 17
Neutralización de agua ácida considerando la presencia principal de Aluminio bajo condiciones oxidantes y anóxicas.



Los diagramas de especiación mostrados en las figuras 18 y 19 describieron un comportamiento similar al reaccionar con los neutralizantes alcalinos presentes, tanto en condiciones anóxicas como en condiciones oxidantes. Se obtuvo en su pH máximo la presencia de aluminio en forma de AlO_2^- y la eliminación de Al^{3+} y AlSO_4 formados en condiciones iniciales. El AlO_2^- puede hidrolizarse fácilmente en $\text{Al}(\text{OH})_3$ en condiciones de pH adecuadas; la presencia del aluminato AlO_2^- es favorable para la precipitación de los metales, pues este se presenta sobre la superficie como una capa soluble, fácilmente removible, que permite la transferencia de los iones complejos hacia la superficie del aluminio y al mismo tiempo la disolución de este, con transferencia de los iones hacia el seno de la solución (Meng et al., 2017)

Figura 18
Especiación de Al bajo condiciones anóxicas

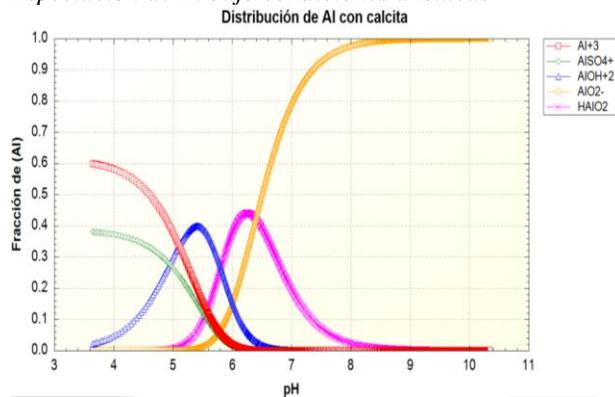
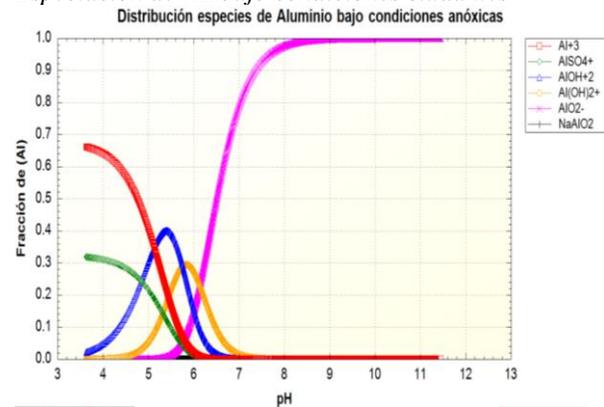


Figura 19
Especiación de AL bajo condiciones oxidantes



4.4 Resultados en la neutralización de agua ácida considerando la presencia de aluminio (Al), hierro (Fe) y azufre (S).

Durante esta simulación se consideró la presencia de los principales elementos metálicos (Fe y Al) del agua ácida de minería bajo condiciones anóxicas y oxidantes. los resultados obtenidos identificaron la presencia de una fase ferrosa y férrica al agregar oxígeno disuelto al sistema simulado, por su parte la fase alumínica tuvo mayor concentración en la reacción con los neutralizantes alcalinos y se dio bajo la forma de AlO_2^- . Tanto la cal viva como la cal apagada mostraron una distribución similar en condiciones anóxicas y oxidantes: bajo la carencia de

oxígeno la fase ferrosa estuvo como un oxihidróxido de hierro (HFeO_2^-) mientras que en condiciones de oxígeno saturado la fase férrica se mostró como un hidróxido de hierro (Fe(OH)_4^-). A continuación, se muestran las especies formadas durante la simulación y su concentración al alcanzar el máximo pH en contacto con los neutralizantes alcalinos utilizados.

Figura 20
Especiación Fe-AL en condiciones anóxicas

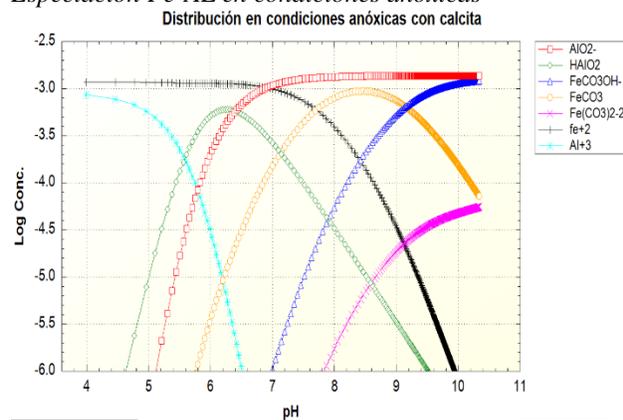


Figura 21
concentración molar de las especies presentes en un pH máximo de 10.4 alcanzado por la calcita en condiciones anóxicas

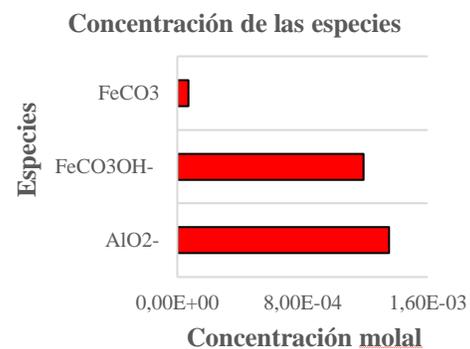


Figura 22
Especiación Fe-AL en condiciones oxidantes

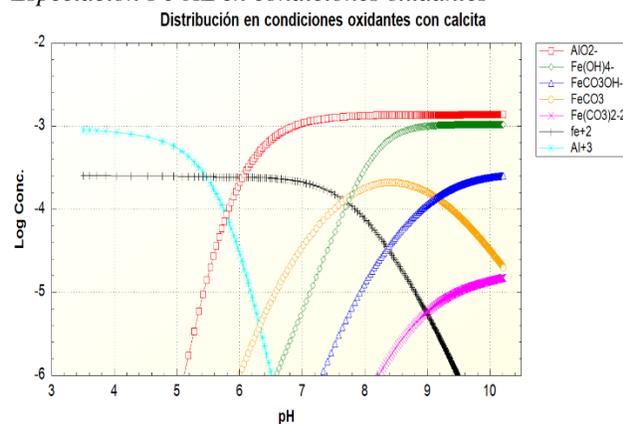


Figura 23
Concentración molar de las especies presentes en un pH máximo de 10.3 alcanzado por la calcita en condiciones oxidantes.

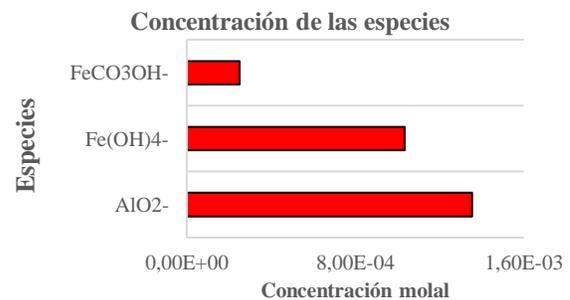


Figura 24
Especiación Fe-AL en condiciones anóxicas utilizando cal apagada

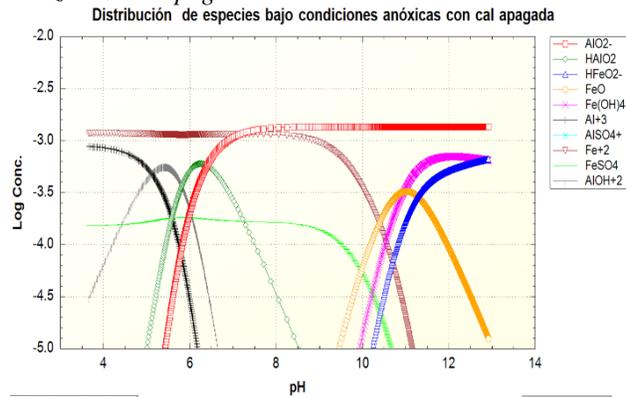


Figura 25
Concentración molar de las especies presentes en un pH máximo de 13.2 alcanzado con cal apagada en condiciones anóxicas.

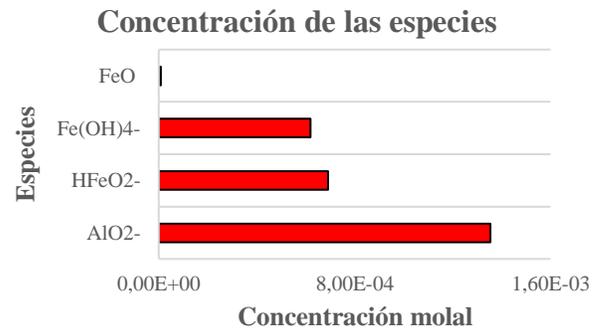


Figura 26
Especiación Fe-AL en condiciones oxidantes utilizando cal apagada

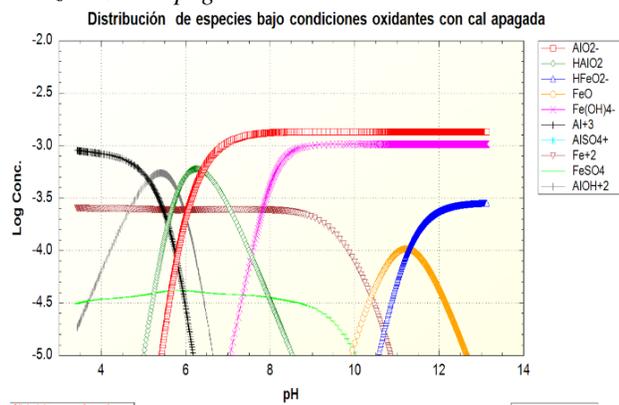


Figura 27
concentración molar de las especies presentes en un pH máximo de 13.1 alcanzado con cal apagada como agente neutralizante

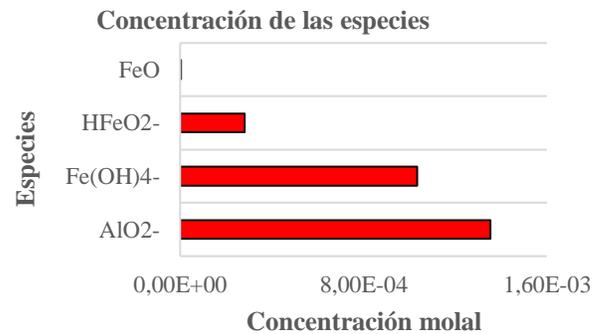


Figura 28
Especiación Fe-AL en condiciones oxidantes utilizando cal viva

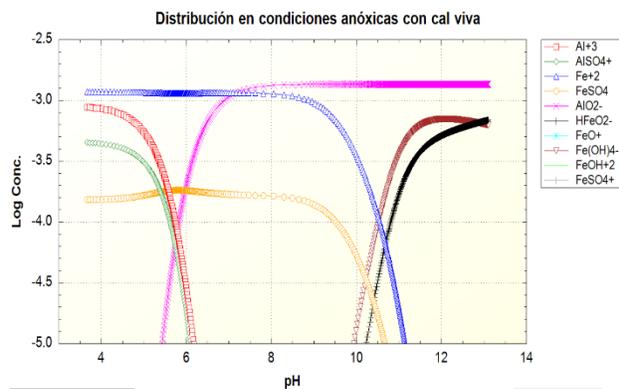


Figura 29
Concentración molar de las especies presentes en un pH máximo de 13.3 alcanzado con cal viva como agente neutralizante.

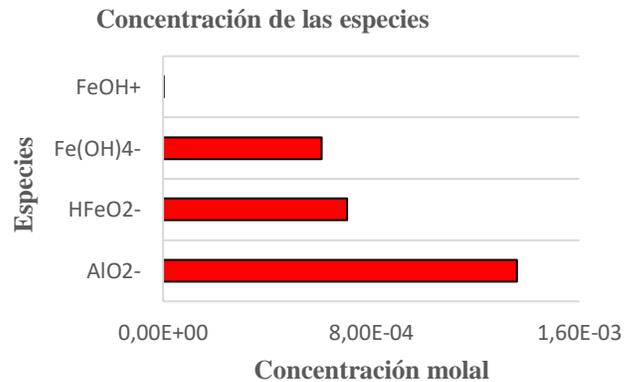


Figura 30
Especiación Fe-AL en condiciones oxidantes
utilizando cal viva

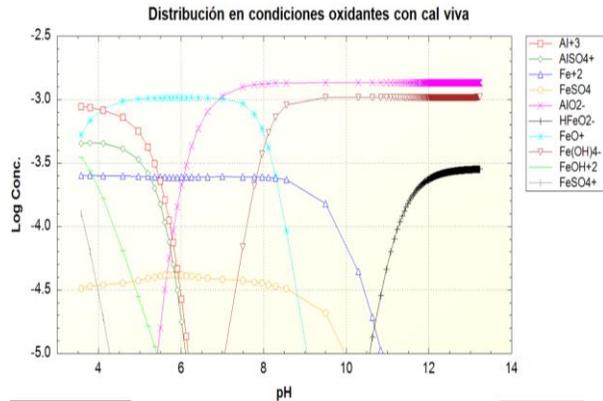
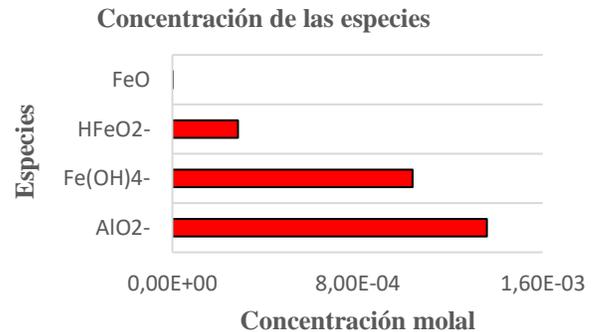


Figura 31
Concentración molar de las especies presentes en un
pH máximo de 13.2 alcanzado con cal viva como
agente neutralizante



4.5 Resultados en la neutralización de agua ácida de Santander, agregando 2.5 gramos de cal apagada por litro de agua ácida bajo condiciones oxidantes y anóxicas.

4.5.1 neutralización del agua ácida de minería con cal apagada

Los tratamientos activos se basan en la adición de neutralizantes alcalinos como cal viva, cal apagada y piedra caliza que suelen ser utilizados para lograr la neutralización del ácido y alcanzar las condiciones adecuadas para la precipitación de los metales pesados en forma de lodos. Estos metales precipitan como hidróxidos insolubles en un intervalo de pH que suele estar comprendido entre 8,5 a 10. Tanto el método como el neutralizante alcalino utilizado depende de las características y condiciones a las que esté sometida el AMD. Según la evaluación de los resultados anteriores se seleccionó 2.5 gramos de cal apagada como neutralizante alcalino del agua ácida. La cal apagada es particularmente útil para tratar grandes caudales en oxidación de alta acidez además de producir la neutralización de las aguas ácidas creando un ambiente desfavorable para la oxidación de los materiales sulfurosos. Primero, porque las bacterias que participan en el proceso de oxidación del hierro requieren un medio ácido para que su actividad sea óptima y segundo, porque con pH cercanos al neutro el hidróxido férrico precipita y tiende a depositarse

sobre la superficie de los sulfuros, recubriéndolos y rompiendo el mecanismo de oxidación (Aduvire, 1991). En la tabla 5 se muestran los resultados de pH final obtenidos.

Tabla 5.

Neutralización del agua ácida con cal apagada en condiciones oxidantes y anóxicas.

Neutralizante alcalino	Gramos Agregados	Agua ácida	
		condición Anóxica	condición oxidante
		pH	pH
Cal apagada Ca (OH) ₂	2.5	12.587	12.585

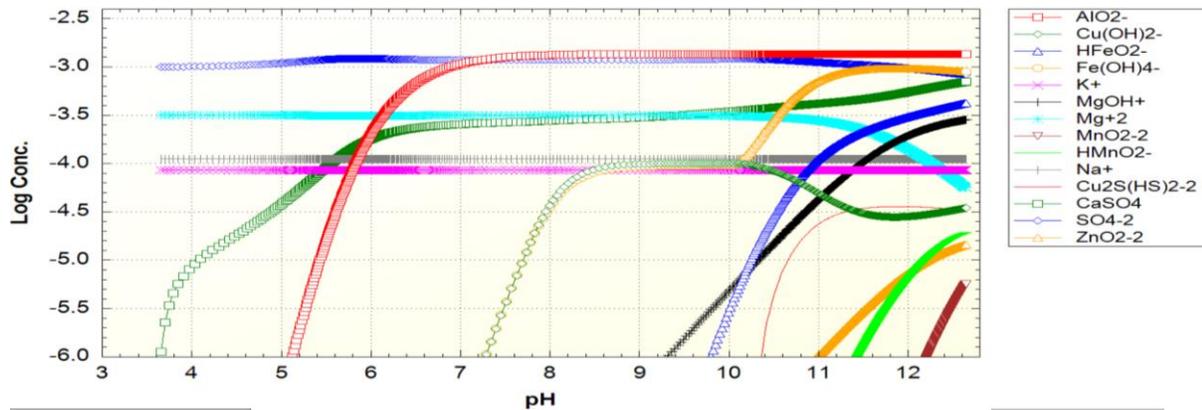
4.5.2 Distribución de las especies formadas al interactuar con la cal apagada

La estabilidad geoquímica y la toxicidad de un agua de mina está relacionada con la forma y presencia de contaminantes en el medio, por lo que no basta con saber cuánto hierro, aluminio, mercurio, plomo o azufre contiene un agua, sino que es necesario saber también en qué forma química se encuentran en el mismo. El hierro estuvo presente como Fe(2+) en forma de Fe⁺², al agregar oxígeno saturado en la simulación se presentó la formación de la fase férrica en condiciones iniciales al tener Fe(3+) en forma de FeSO₄ y Fe(OH)₄⁻. La precipitación del aluminio en el agua ocurre a un pH de 5,5 pero se vuelve otra vez soluble a un pH superior a 8,5. Su comportamiento en el sistema es puramente químico a diferencia del hierro, se muestra la distribución de especies del aluminio (Ver Anexo B) que inicialmente estaba formado por Al⁺³ y a un pH de 5.5 comenzó a precipitar en forma de AlO₂⁻. Los metales como cobre, zinc o níquel pueden ser precipitados de manera separada en forma de concentrados. Por otro lado, el manganeso es soluble en el agua en forma de Mn⁺² pero se transforma en insoluble hasta un pH de 9.5. La eliminación del Mn⁺² y MnSO₄ conlleva a la formación de Hidróxidos y óxidos de manganeso. Tanto el sodio (Na) como el potasio (K), elementos presentes en la caracterización de agua ácida no tuvieron una reacción directa durante la neutralización y estos se disolvieron en el agua en

forma de sales. A continuación, en la figura 32 se muestran los resultados de especiación general de todos los elementos presentes en el agua ácida al reaccionar con la cal apagada y la distribución de cada una de las especies presentes en el agua ácida (Ver anexo B).

Figura 32

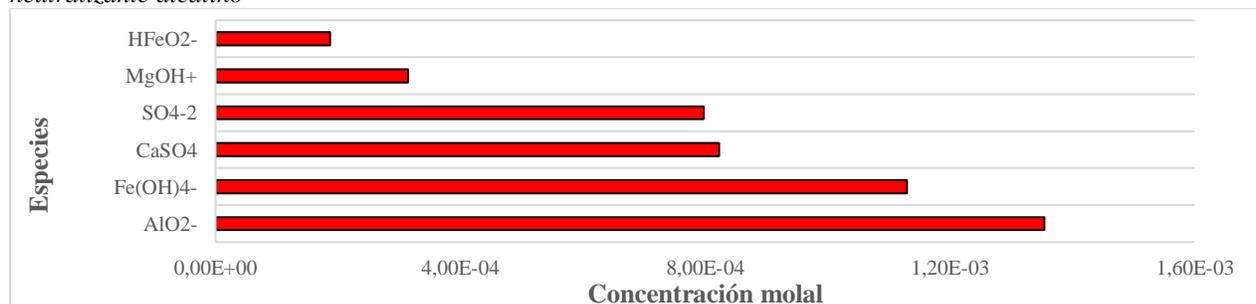
Distribución de las especies formadas utilizando cal apagada como neutralizante alcalino.
Distribución de especies con cal apagada



La formación de especies insolubles que finalmente precipitan en forma de óxidos e hidróxidos al pH alcanzado (12.5) por la cal apagada, dio como resultado mayor concentración de AlO_2^- . La presencia inicial de $\text{Fe}(2+)$ fue transformada finalmente en $\text{Fe}(3+)$ en forma de Hidróxido $\text{Fe}(\text{OH})_4^-$. El aluminio y el hierro fueron las especies con mayor concentración molar; la neutralización del ácido con una base ($\text{Ca}(\text{OH})_2$) precipitó el sulfato en forma de CaSO_4 y SO_4^{2-} , de esta forma su concentración final en los lodos estará directamente relacionada. La figura 33 muestra las especies presentes y su concentración en el pH final logrado.

Figura 33

Concentración obtenida de las especies formadas a un pH máximo de 12.5 utilizando cal apagada como neutralizante alcalino



4.5.3 metales precipitados en forma de lodos en la neutralización utilizando cal apagada.

La remoción de contaminantes se da por la precipitación de sólidos en forma de lodos que posteriormente serán separados de la solución para ser eliminados o reutilizados. Bajo condiciones anóxicas, el lodo estuvo formado en un 47% por el neutralizante alcalino en forma de Portlandita ($\text{Ca}(\text{OH})_2$) y en un 53% por sólidos disueltos, el principal sólido precipitado en el lodo fue un sulfoaluminato de calcio hidratado conocido como Ettringite ($\text{Ca}_6\text{Al}_2(\text{SO}_4)_3(\text{OH})_{12}$), seguidos por la formación de las fases metaestables de calcio hierro (C_4FH_{13}) y calcio aluminio (C_4AH_{13}).

Tabla 6.

Composición físico química del lodo formado utilizando cal pagada en condiciones anóxicas

Fases disueltas	Formula molecular	Moles de la fase	Miligramos formados en el lodo
Bornita(Alfa)	Cu_5FeS_4	0.0001	10.0
Brucita	$\text{Mg}(\text{OH})_2$	0.0000	1.00
C4AH13	$\text{Ca}_4\text{Al}_2\text{O}_7$	0.0003	111.6
C4FH13	$\text{Ca}_4\text{Fe}_2\text{O}_7$	0.0002	59.5
Ettringita	$\text{Ca}_6\text{Al}_2(\text{SO}_4)_3(\text{OH})_{12}$	0.0005	394.5
Ferrita(Mn)	MnFe_2O_4	0.0001	9.20
Hematita	Fe_2O_3	0.0001	11.60
Magnetita(am)	Fe_3O_4	0.0004	82.80
Portlandita	$\text{Ca}(\text{OH})_2$	0.0084	610.9
LODO TOTAL			1292.8 mg

Figura 34

Composición porcentual del lodo formado en la neutralización del agua ácida bajo condiciones anóxicas.



Bajo la presencia de condiciones oxidantes, la formación de lodos disueltos disminuyó, el neutralizante alcalino precipitó en forma de Portlandita en un 52% en el lodo, las fases de Ettringita

y Hematita fueron las de mayor presencia en esta condición oxidante en las que se evidenció la presencia de todos los metales contenidos en el agua.

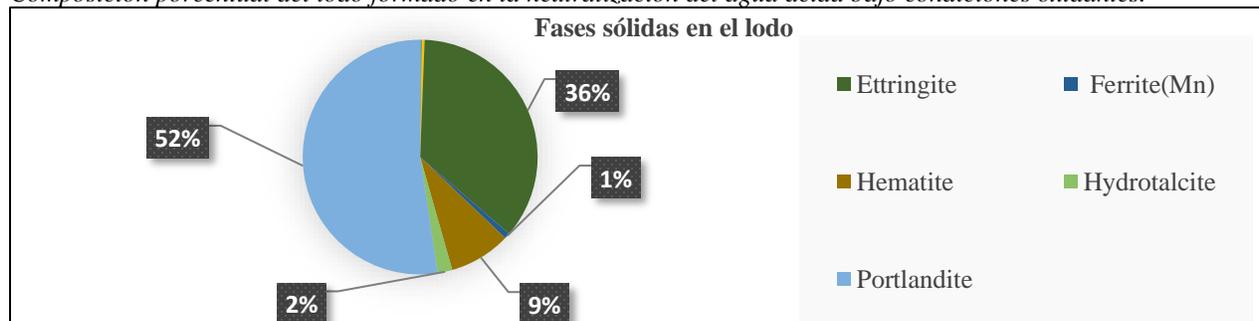
Tabla 7.

Composición físico química del lodo formado utilizando cal pagada en condiciones oxidantes

Fases disueltas	Formula molecular	Moles de la fase	Miligramos formados en el lodo
Ettringita	$\text{Ca}_6\text{Al}_2(\text{SO}_4)_3(\text{OH})_{12}$	0.00053	416.9
Ferrita(Mn)	MnFe_2O_4	0.00004	9.20
Hematita	Fe_2O_3	0.00062	99.0
Hydrotalcita	$\text{Mg}_4\text{Al}_2\text{O}_7$	0.00009	23.68
Portlandita	$\text{Ca}(\text{OH})_2$	0.00825	611.4
LODO TOTAL			1167.28 mg

Figura 35

Composición porcentual del lodo formado en la neutralización del agua ácida bajo condiciones oxidantes.



4.5.4 Composición final del agua al interactuar con la cal apagada.

En la neutralización del agua ácida con cal apagada, los metales presentes precipitaron en forma de lodos a excepción del sodio (Na) y potasio (K) que se disolvieron en forma de sales, en condiciones anóxicas se vio la eliminación en un alto porcentaje de los metales presentes a excepción del azufre que fue del 86%, bajo condiciones oxidantes se vio una eficiencia del 99% en la precipitación de los metales presentes y del 97% del azufre. En la siguiente figura se muestran los resultados de concentración tanto en el lodo formado como en el agua final luego de ser neutralizada con cal apagada bajo condiciones anóxicas y oxidantes.

Figura 36
Composición final bajo condiciones anóxicas

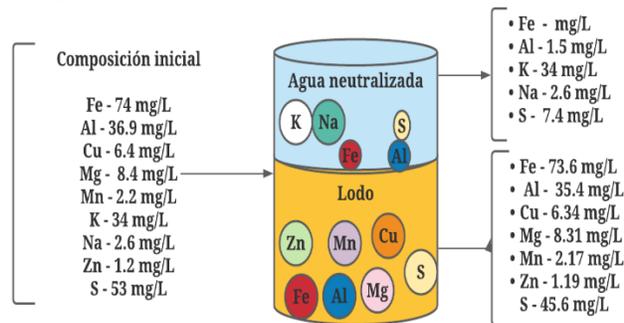
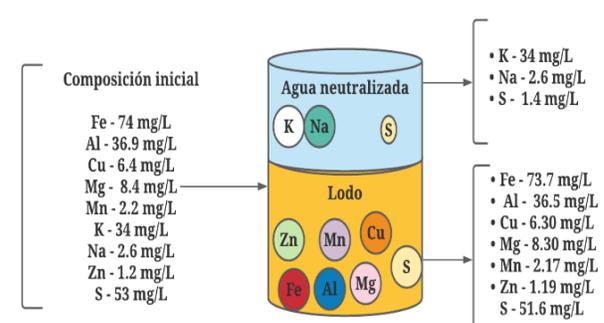


Figura 37
Composición final bajo condiciones oxidantes.



4.6 Resultados en la neutralización de agua ácida de Santander, agregando 2.5 gramos de escoria de acería por litro de agua ácida, bajo condiciones oxidantes y anóxicas.

4.6.1 neutralización del agua ácida de minería con escoria de acería

La escoria de horno de acería se utilizó para el tratamiento del drenaje ácido de mina, su composición, complejidad y características permiten su utilización en la reparación del agua ácida formada, los resultados obtenidos mostraron un aumento significativo en el pH vinculado con la interacción del AMD y la escoria de acería, la neutralización se dio desde el pH inicial de 3.6 hasta alcanzar un pH de 11.7 tanto en condiciones anóxicas como oxidantes.

Tabla 8.

Neutralización del agua ácida con escoria de acería en condiciones oxidantes y anóxicas.

Residuo alcalino	Gramos Agregados	Agua ácida	
		condición Anóxica	condición oxidante
		pH	pH
Escoria de acería	2.5	11.717	11.710

4.6.2 Distribución de las especies formadas al interactuar con la escoria de acería.

La especiación final de la escoria de acería reaccionada con el agua ácida se muestra en la figura 50, de igual manera, se realizó la distribución de especies de cada uno de los elementos de manera individual (Ver apéndice 3) con el fin de mostrar el comportamiento de los elementos durante toda la neutralización. La mayor concentración al pH alcanzado se dio por parte de las especies de silicio, hierro y aluminio en forma de óxidos, hidróxidos y silicatos, el sodio y el

potasio no tuvieron interacción y permanecieron en el agua ácida disueltos en forma de Na^+ y K^+ respectivamente formando sales.

Figura 38

Distribución de las especies formadas con escoria de acería como residuo alcalino.

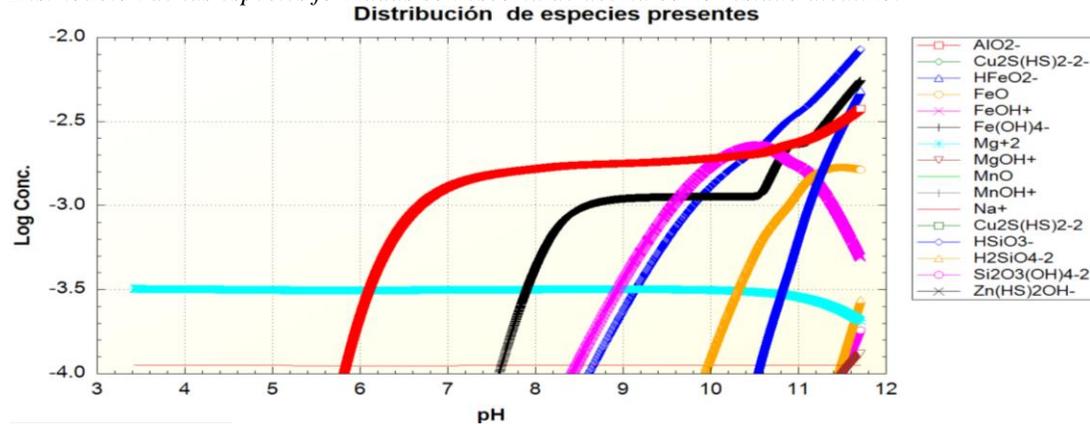
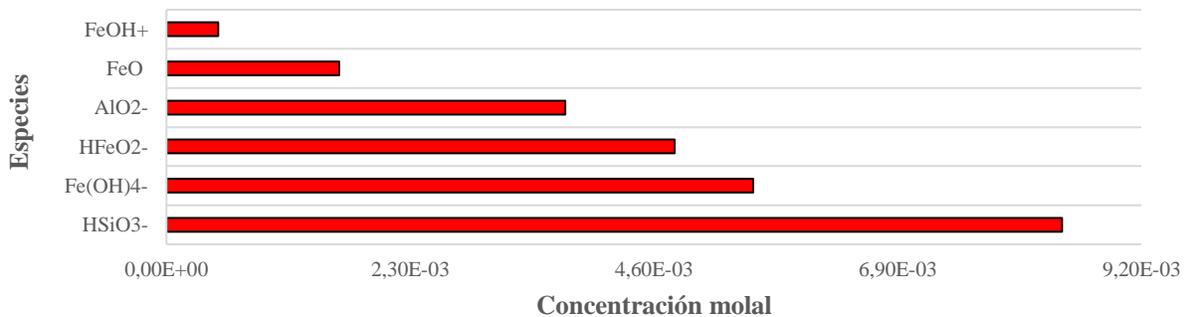


Figura 39

Concentración obtenida de las especies formadas a un pH de 11.7 utilizando cal apagada como neutralizante



4.6.3 metales precipitados en forma de lodos durante la neutralización utilizando escoria de acería.

la formación del lodo producto de la neutralización estuvo representado de forma diversa y heterogénea en forma de óxidos e hidróxidos en su mayoría, bajo condiciones anóxicas la andradita, fase formada por silicatos de hierro y calcio ocupó la mayor presencia en el lodo con un valor del 57%, la magnetita fue la fase del hierro en mayor proporción mientras que el aluminio estuvo presente como un oxihidróxido ($\text{AlO}(\text{OH})$). Por otro lado, al agregar oxígeno saturado al sistema se mostró una mayor concentración en el lodo final formado, las fases precipitadas fueron

las mismas presentadas en las condiciones anóxicas, sin embargo, la formación de fases de aluminio se vio favorecida y las concentraciones de fases oxidas como Diaspore y Ettringita aumentaron.

Tabla 9.

Composición físico química del lodo formado utilizando escoria de acería en condiciones anóxicas.

Fases disueltas	Formula molecular	Moles de la fase	Miligramos formados en el lodo
Actinolita	$\text{Ca}_2(\text{Mg}_{2.25}\text{Fe}_{2.5}\text{Al}_{0.25})(\text{Si}_{7.75}\text{Al}_{0.25})\text{O}_{22}(\text{OH})_2$	1.521e-04	197.4
Andradita	$\text{Ca}_3\text{Fe}_2\text{Si}_3\text{O}_{12}$	2.679e-03	1361
Calcopirita(Alpha)	CuFeS_2	9.974e-05	18.3
Diaspore	$\text{AlO}(\text{OH})$	3.362e-03	201.6
Ettringita	$\text{Ca}_6\text{Al}_2(\text{SO}_4)_3(\text{OH})_{12}$	9.732e-05	76.5
Ferrita(Mn)	MnFe_2O_4	3.955e-05	9.12
Magnetita	Fe_3O_4	2.022e-03	468.1
Sphalerita	ZnS	1.817e-05	1.77
LODO TOTAL			2390.5 mg

Figura 40

Composición porcentual del lodo formado en la neutralización del agua ácida bajo condiciones anóxicas.



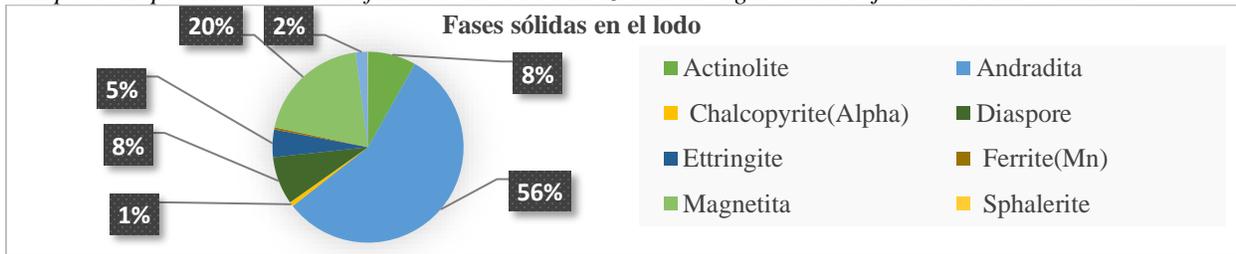
Tabla 10.

Composición físico química del lodo formado utilizando escoria de acería en condiciones oxidantes

Fases disueltas	Formula molecular	Moles de la fase	Miligramos formados en el lodo
Actinolita	$\text{Ca}_2(\text{Mg}_{2.25}\text{Fe}_{2.5}\text{Al}_{0.25})(\text{Si}_{7.75}\text{Al}_{0.25})\text{O}_{22}(\text{OH})_2$	1.521e-04	197.4
Andradita	$\text{Ca}_3\text{Fe}_2\text{Si}_3\text{O}_{12}$	2.679e-03	1361
Calcopirita(Alpha)	CuFeS_2	9.974e-05	18.3
Diaspore	$\text{AlO}(\text{OH})$	3.275e-03	196.4
Ettringita	$\text{Ca}_6\text{Al}_2(\text{SO}_4)_3(\text{OH})_{12}$	1.432e-04	112.6
Ferrita(Mn)	MnFe_2O_4	3.955e-05	9.12
Magnetita	Fe_3O_4	2.044e-03	473.2
LODO TOTAL			2418 mg

Figura 41

Composición porcentual del lodo formado en la neutralización del agua ácida bajo condiciones oxidantes.



4.6.4 Composición final del agua al interactuar con la escoria de acería.

La caracterización inicial del agua ácida fue modificada al reaccionar con la escoria de acería, esta mostró buenos resultados como agente neutralizante y su caracterización final fue en un 98% eficiente bajo condiciones oxidantes en la eliminación de los metales disueltos inicialmente, bajo condiciones anóxicas, el aluminio no fue disuelto en su totalidad, sin embargo, los resultados obtenidos mostraron una muy buena composición final del agua y la precipitación de los metales en el lodo. Las figuras 42 y 43 muestran la composición de los metales durante la simulación realizada bajo condiciones anóxicas y oxidantes respectivamente.

Figura 42

Composición final bajo condiciones anóxicas

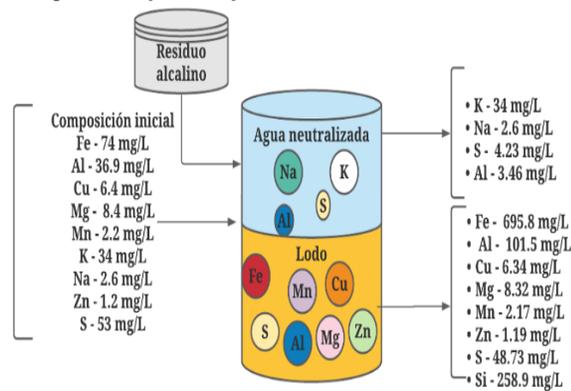
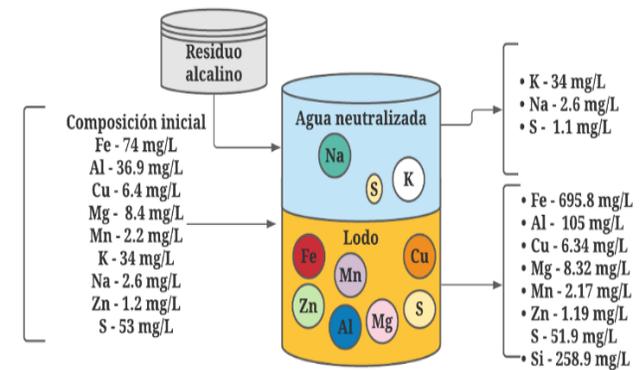


Figura 43

Composición final bajo condiciones oxidantes.



4.7 Resultados en la neutralización de agua ácida de Santander, agregando 2.5 gramos de cenizas volantes bajo condiciones oxidantes y anóxicas.

4.7.1 Neutralización del agua ácida de minería con escoria de acería.

Durante la adición de cenizas volantes al agua ácida de minería utilizado como agente neutralizante de la industria termoeléctrica, la neutralización del agua ácida obtuvo un aumento en su pH, sin embargo, este no fue tan significativo en comparación a los residuos y neutralizantes alcalinos utilizados anteriormente y no se logró la normalización del pH (7) del agua.

Tabla 11.

Neutralización del agua ácida con cenizas volantes en condiciones oxidantes y anóxicas.

Neutralizante alcalino	Gramos Agregados	Agua ácida	
		condición Anóxica	condición oxidante
		pH	pH
Escoria de acería	2.5	6.54	6.50

4.7.2 Distribución de las especies formadas al interactuar con cenizas volantes.

La distribución de especies formadas durante la neutralización del agua ácida mostró una gran concentración en la formación del ácido tetraoxosilícico (H_4SiO_4) y de óxidos e hidróxidos de aluminio en el agua ácida que se vio favorecida, sin embargo, el hierro, cobre, magnesio, manganeso y demás elementos no sufrieron transformaciones redox, su reacción química simple formó compuestos en los que estos metales se encontraban en la misma valencia a las que estaban inicialmente. (Ver apéndice 4). Las figuras 44 y 45 muestran la distribución y concentración de las especies formadas en la neutralización del agua ácida al reaccionar con las cenizas volantes.

Figura 44

Distribución de las especies formadas cenizas volantes como residuo alcalino.

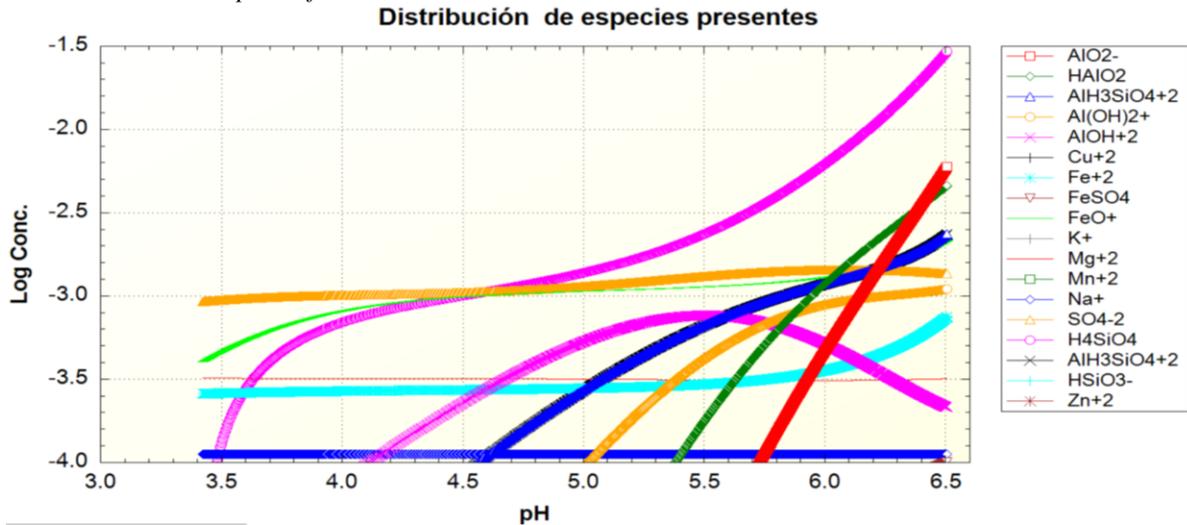
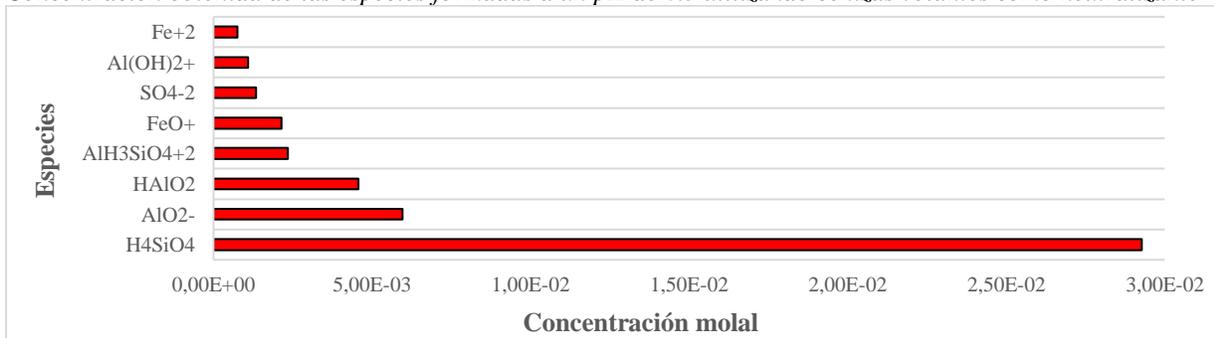


Figura 45

Concentración obtenida de las especies formadas a un pH de 6.5 utilizando cenizas volantes como neutralizante



4.7.3 metales precipitados en forma de lodos durante la neutralización, utilizando cenizas volantes.

La composición inicial de las cenizas volantes presentaba una forma amorfa y cristalina, luego de reaccionar con el agua ácida, las cenizas volantes precipitaron de la misma forma sin sufrir una alteración química bajo condiciones anóxicas, al agregar oxígeno saturado se evidenció la pequeña formación de un sulfato de potasio y aluminio hidroxilado conocido como alunita ($\text{KAl}_3(\text{OH})_6(\text{SO}_4)_2$). Los resultados obtenidos en los lodos mostraron concentraciones altas, su composición química no influyó en la formación de nuevas fases y precipitados en forma de óxidos e hidróxidos con los metales disueltos en el agua ácida inicial.

Tabla 12.

Composición físico química del lodo formado utilizando cenizas volantes en condiciones anóxicas

Fases disueltas	Formula molecular	Moles de la fase	Miligramos formados en el lodo
Diaspore	AlO(OH)	1.411e-02	846.4
Hematita	Fe ₂ O ₃	5.604e-04	89.4
Cuarzo(Alfa)	SiO ₂	3.142e-02	1887.8
LODO TOTAL			2823.6

Figura 46

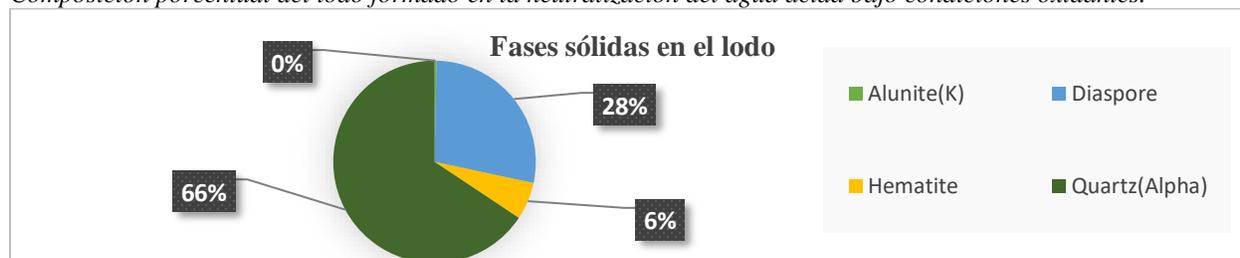
Composición porcentual del lodo formado en la neutralización del agua ácida bajo condiciones anóxicas.

Tabla 13.

Composición físico química del lodo formado utilizando cenizas volantes en condiciones oxidantes.

Fases disueltas	Formula molecular	Moles de la fase	Miligramos formados en el lodo
Alunita(K)	KAl ₃ (OH) ₆ (SO ₄) ₂	2.237e-05	9.2
Diaspore	AlO(OH)	1.344e-02	806.2
Hematita	Fe ₂ O ₃	1.077e-03	171.98
Cuarzo(Alfa)	SiO ₂	3.142e-02	1887.8
LODO TOTAL			2875.18

Figura 47

Composición porcentual del lodo formado en la neutralización del agua ácida bajo condiciones oxidantes.

4.7.4 Composición final del agua al interactuar con las cenizas volantes.

La neutralización del agua ácida de mina con el residuo alcalino de la industria termoeléctrica no tuvo mayor influencia en el pH al no lograr la alcalinización deseada, la distribución de especies de cada elemento se mostró en forma iónica al no reaccionar con las cenizas volantes y los lodos obtenidos fueron el resultado de la precipitación de las fases del

residuo alcalino utilizado, sin embargo, la composición final del agua si tuvo afectación significativa, primero por mostrar nuevos metales disueltos como es el caso del silicio y además de esto aumentar su concentración en alguno de los metales que estaban inicialmente como fue el caso del aluminio y el hierro. Bajo condiciones oxidantes la concentración del aluminio aumento y el hierro fue el único metal que disminuyó su concentración precipitando en forma de lodo; bajo condiciones anóxicas, se dio una pequeña precipitación de aluminio y un aumento en la concentración del hierro disuelto en el agua ácida. El paso del agua de mina a través de condiciones oxidantes o anóxicas no tienen efecto sobre las concentraciones de aluminio a menos que el pH también cambie. Sin embargo, cuando el pH del agua de mina decrece (debido a la oxidación e hidrólisis del hierro), las concentraciones de Al pueden aumentar debido a la disolución de arcillas (aluminio-silicatos) por el agua ácida. Cuando el agua ácida de mina pasa a través de ambientes anaerobios, el aumento de pH que puede resultar de la disolución de carbonatos o actividad microbiana puede causar la precipitación del aluminio (Aduvire, 1991).

Figura 48
Composición final bajo condiciones anóxicas

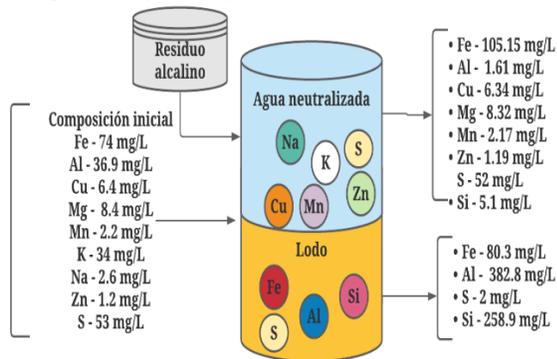
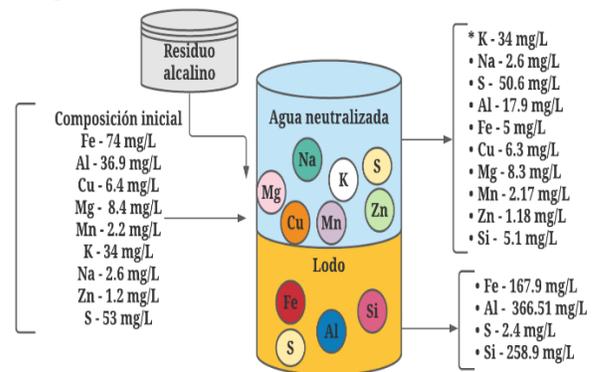


Figura 49
Composición final bajo condiciones oxidantes.



5. Evaluación en la calidad final del agua obtenida de la neutralización realizada.

A continuación, según la composición final del agua residual obtenida al reaccionar con los residuos y neutralizantes alcalinos, se presenta el criterio de aceptación o rechazo en distintos sectores, teniendo en cuenta la RESOLUCIÓN NÚMERO 1207 DE 2014, por la cual se adoptan disposiciones relacionadas con el uso de aguas residuales tratadas, basadas en la Ley 99 DE 1993.

En la tabla 14 se comprobó la neutralización del agua residual mediante tratamientos activos como la cal apagada y la escoria de acería al cumplir con los parámetros exigidos para su reutilización en distintos sectores. El agua residual obtenida del tratamiento con cal apagada puede ser reutilizada y es aceptada en la mayoría de los sectores que se presentan al igual que la escoria de acería, sin embargo, los resultados en el agua residual tratada con cenizas volantes como sustancia alcalina fue rechazada por lo que sus condiciones finales no cumplieron con la norma establecida.

Tabla 14.

Criterio de aceptación del agua residual final obtenida al interactuar con los neutralizantes y residuos alcalinos utilizados

Actividades de uso	Agua residual formada con cal apagada		Agua residual formada con escoria de acería		Agua residual formada con cenizas volantes	
	condición anóxica	Condición oxidante	condición anóxica	Condición oxidante	condición anóxica	Condición oxidante
Uso Agroindustrial	Aceptada	Aceptada	Aceptada	Aceptada	Aceptada	Aceptada
Uso minero	Aceptada	Aceptada	Aceptada	Aceptada	Rechazada	Rechazada
Uso en hidrocarburos	Aceptada	Aceptada	Rechazada	Aceptada	Rechazada	Rechazada
Uso en elaboración de productos alimenticios y bebidas	Rechazada	Aceptada	Rechazada	Rechazada	Rechazada	Rechazada
fabricación y manufactura de bienes	Aceptada	Aceptada	Aceptada	Aceptada	Rechazada	Rechazada
servicios y otras actividades.	Aceptada	Aceptada	Aceptada	Aceptada	Rechazada	Rechazada

6. Conclusiones

La simulación realizada mediante el software de código abierto PHREEQC, mostró gran eficiencia en el tratamiento del agua ácida con los neutralizantes alcalinos (Cal viva, cal apagada y calcita) utilizados. Se evidenció el alcance de un pH altamente alcalino y la precipitación de los metales disueltos del agua ácida original en forma de lodos. La cal apagada, debido a su comportamiento en condiciones anóxicas y oxidantes, su facilidad comercial y su alcalinidad, fue el neutralizante seleccionado para el tratamiento del agua, sin embargo, la selección del neutralizante alcalino está sometido a diversos parámetros y condiciones en las que este el agua ácida de mina como características de absorción, composición química, pH y Eh del drenaje.

La neutralización del agua ácida de minería con la escoria de acería como residuo de la industria metalúrgica, mostró que podría utilizarse para tratamientos de AMD ubicados en Santander. se observó que estos residuos ofrecen resultados y efectos similares a los neutralizantes alcalinos comunes. Los resultados mostraron que al agregar 2.5 gramos de la escoria de acería por cada litro de solución de agua ácida, el agua ácida tendría un aumento en el pH de 3.6 a 11.5. El pH final logrado fue adecuado para la remoción de los metales disueltos en el agua y logró una eficiencia en la eliminación superior al 96% tanto en condiciones anóxicas como en condiciones oxidantes. Por otro lado, la neutralización del agua ácida de minería con las cenizas volantes como residuo alcalino de la industria termoeléctrica, no obtuvo los mejores resultados posibles, el pH del agua ácida mostró un leve aumento, pero no fue el suficiente para lograr la normalización del pH del agua ácida ni la remoción de los metales que siguieron en su forma iónica inicial. Se mostró un efecto negativo al disolver más hierro y aluminio en condiciones anóxicas y oxidantes respectivamente.

Como tal los residuos alcalinos son candidatos idóneos para el tratamiento de AMD, pero sus resultados finales estarán ligados tanto a la caracterización fisicoquímica del agua ácida de minería como a la de los residuos alcalinos utilizados, por lo que la simulación y modelamiento de cálculos geoquímicos con PHREEQC, se muestra como una herramienta eficiente en la predicción de especies y precipitación de especies químicas, entre otros aspectos. Sus cálculos geoquímicos permitieron realizar un análisis completo en la neutralización del agua mediante cálculos de concentraciones de elementos, molalidades y actividades de especies acuosas, pH, potencial eléctrico, índices de saturación y transferencias molares de fases para lograr el equilibrio en función de reacciones geoquímicas y condiciones a las que está sometida el agua ácida.

Referencias Bibliográficas

- Aduvire, O. (1991). Drenaje Ácido de Mina. Generación y Tratamiento. *Instituto Geológico y Minero de España*, 51.
- Carneiro Brandão Pereira, T., Batista dos Santos, K., Lautert-Dutra, W., de Souza Teodoro, L., de Almeida, V. O., Weiler, J., Homrich Schneider, I. A., & Reis Bogo, M. (2020). Acid mine drainage (AMD) treatment by neutralization: Evaluation of physical-chemical performance and ecotoxicological effects on zebrafish (*Danio rerio*) development. *Chemosphere*, 253, 1–9. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2020.126665>
- Dutta, M., Islam, N., Rabha, S., Narzary, B., Bordoloi, M., Saikia, D., Silva, L. F. O., & Saikia, B. K. (2020). Acid mine drainage in an Indian high-sulfur coal mining area: Cytotoxicity assay and remediation study. *Journal of Hazardous Materials*, 389(December 2019), 121851. <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2019.121851>
- Eppink, F. V., Trumm, D., Weber, P., Olds, W., Pope, J., & Cavanagh, J. E. (2020). Economic Performance of Active and Passive AMD Treatment Systems Under Uncertainty: Case Studies from the Brunner Coal Measures in New Zealand. *Mine Water and the Environment*, 39(4), 785–796. <https://doi.org/10.1007/s10230-020-00710-w>
- Favas, P. J. de C., Martino, L. E., & Prasad, M. N. V. (2018). Bio-Geotechnologies for Mine Site Rehabilitation. In P. Maiti, M.N.V., P. J. de C. Favas, & S. Kumar (Eds.), *Elsevier* (1st ed.). <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-812986-9.00001-4>
- Igarashi, T., Herrera, P. S., Uchiyama, H., Miyamae, H., Iyatomi, N., Hashimoto, K., & Tabelin, C. B. (2020). The two-step neutralization ferrite-formation process for sustainable acid mine drainage treatment: Removal of copper, zinc and arsenic, and the influence of coexisting ions on ferritization. *Science of the Total Environment*, 715, 136877.

<https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2020.136877>

Jacobs, J. A., Lehr, J. H., & Testa, S. M. (2014). Acid Mine Drainage, Rock Drainage, and Acid Sulfate Soils. In *Acid Mine Drainage, Rock Drainage, and Acid Sulfate Soils*. Wiley.

<https://doi.org/10.1002/9781118749197>

Mádai, F., Kristály, F., & Mucsi, G. (2015). Microstructure, mineralogy and physical properties of ground fly ash based geopolymers. *Ceramics - Silikaty*, 59(1), 70–79.

MADS, M. de A. y D. S. (2015). Resolución 631 de 2015. *Diario Oficial No. 49.486 de 18 de Abril de 2015*, 2015(49), 73.

http://www.minambiente.gov.co/images/normativa/app/resoluciones/d1-res_631_marz_2015.pdf

Masindi, V., Ramakokovhu, M. M., Osman, M. S., & Tekere, M. (2020). Advanced application of BOF and SAF slags for the treatment of acid mine drainage (AMD): A comparative study. *Materials Today: Proceedings*, xxxx. <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2020.05.422>

Meng, H., Zhou, P., Zhang, Z., Tao, Z., & Chen, J. (2017). Preparation and characterization of LiNi_{0.8}Co_{0.15}Al_{0.05}O₂ with high cycling stability by using AlO₂- as Al source. *Ceramics International*, 43(4), 3885–3892. <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2016.12.054>

MinAmbiente, (Ministerio de ambiente y desarrollo sostenible). (2014). Resolución número 1207 de 2014. *Diario Oficial No. 49.242 de 13 de Agosto de 2014*, 2014(julio 25), 1–9. http://www.minambiente.gov.co/images/GestionIntegraldelRecursoHidrico/pdf/normativa/Res_1207_2014.pdf

Moodley, I., Sheridan, C. M., Kappelmeyer, U., & Akcil, A. (2018). drainage remediation: Research developments with a focus on waste/by-products. *Minerals Engineering*, 126(November 2016), 207–220. <https://doi.org/10.1016/j.mineng.2017.08.008>

- Muniruzzaman, M., Karlsson, T., Ahmadi, N., & Rolle, M. (2020). Multiphase and multicomponent simulation of acid mine drainage in unsaturated mine waste: Modeling approach, benchmarks and application examples. *Applied Geochemistry*, 120(June), 104677. <https://doi.org/10.1016/j.apgeochem.2020.104677>
- Parkhurst, D. L., & Appelo, C. A. J. (1999). User's Guide to PHREEQC (Version 2): A Computer Program for Speciation, Batch-Reaction, One-Dimensional Transport, and Inverse Geochemical Calculations. In *Water-Resources Investigations Report 99-4259* (Issue Water-Resources Investig. Rep. 99-4259). https://wwwbrr.cr.usgs.gov/projects/GWC_coupled/phreeqc/html/final.html
- Peña, J., & Perez, W. (2009). *Manejo De Drenajes Acidos De Mina* [UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER]. <https://doi.org/10.1017/CBO9781107415324.004>
- Ter Teo, P., Seman, A. A., Basu, P., & Sharif, N. M. (2016). Characterization of EAF Steel Slag Waste: The Potential Green Resource for Ceramic Tile Production. *Procedia Chemistry*, 19, 842–846. <https://doi.org/10.1016/j.proche.2016.03.111>
- Ramírez Pita, F. A. (2012). *Simulación de la respuesta hidrogéocímica de drenajes ácidos de mina, incrementando el pH usando CaO (cal) como agente alcalino en el distrito minero vetas-california, Santander*. Universidad Industrial de Santander.
- Rezaie, B., & Anderson, A. (2020). Science of the Total Environment Sustainable resolutions for environmental threat of the acid mine drainage. *Science of the Total Environment*, 717, 137211. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2020.137211>
- Skousen, J. G., Ziemkiewicz, P. F., & McDonald, L. M. (2019). Acid mine drainage formation, control and treatment: Approaches and strategies. *Extractive Industries and Society*, 6(1), 241–249. <https://doi.org/10.1016/j.exis.2018.09.008>.

Apéndices

Apéndice A. Diagramas de Pourbaix de las principales especies presentes en el agua ácida en medios acuosos realizados con Phreeplot, herramienta gráfica de PHREEQC.

Figura 49

Diagrama Pourbaix de Fe en condiciones acuosas

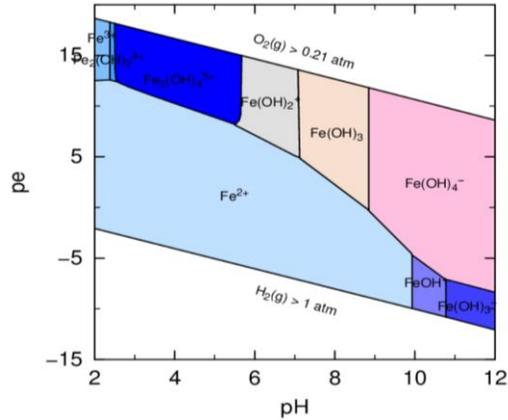


Figura 50

Diagrama Pourbaix de Zn en condiciones acuosas

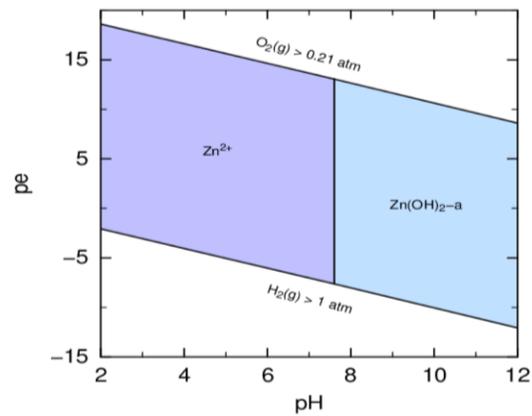


Figura 51

Diagrama Pourbaix de Fe en condiciones acuosas

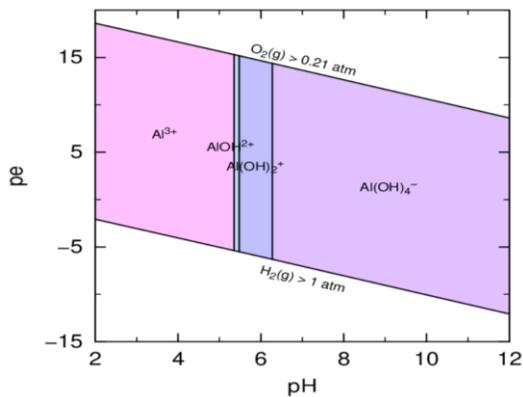


Figura 52

Diagrama Pourbaix de Zn en condiciones acuosas

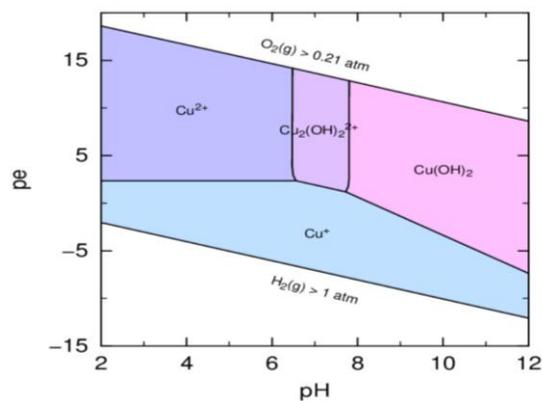


Figura 53

Diagrama Pourbaix de Fe en condiciones acuosas

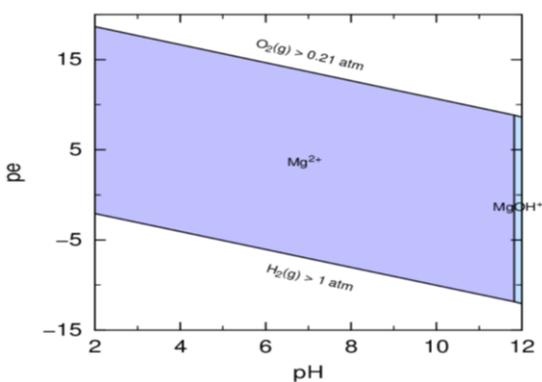
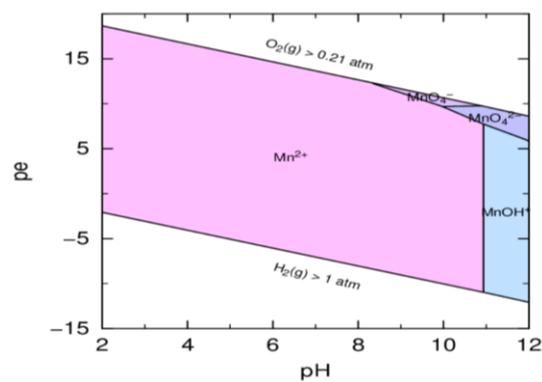


Figura 54

Diagrama Pourbaix de Zn en condiciones acuosas



Apéndice A. Diagramas de especiación de las principales especies presentes en el agua ácida al reaccionar con el neutralizante alcalino (Cal apagada) bajo condiciones anóxicas y oxidantes.

Figura 55
Especiación del Fe – Ca(OH)₂ en condición anóxica

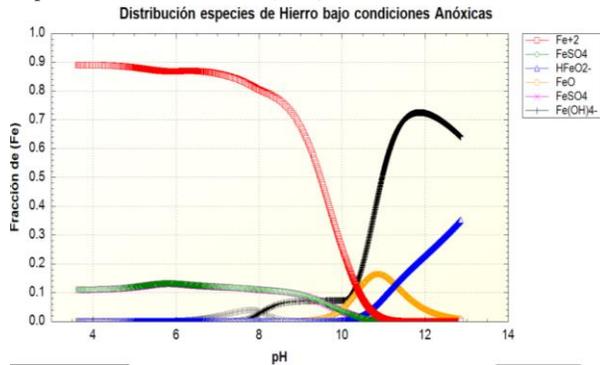


Figura 56
Especiación del Fe – Ca(OH)₂ en condición oxidante

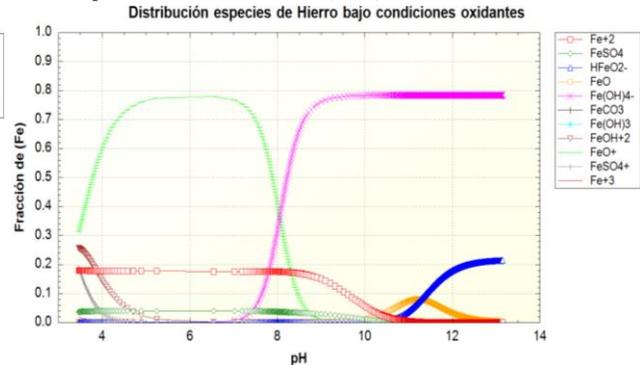


Figura 57
Especiación del Al – Ca(OH)₂ en condición anóxica

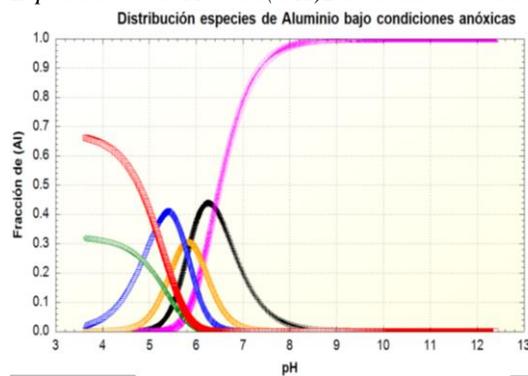


Figura 58
Especiación del Al – Ca(OH)₂ en condición oxidante.

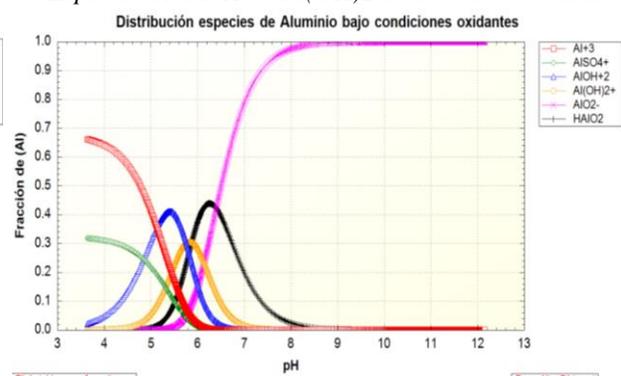


Figura 59
Especiación del Al – Ca(OH)₂ en condición anóxica

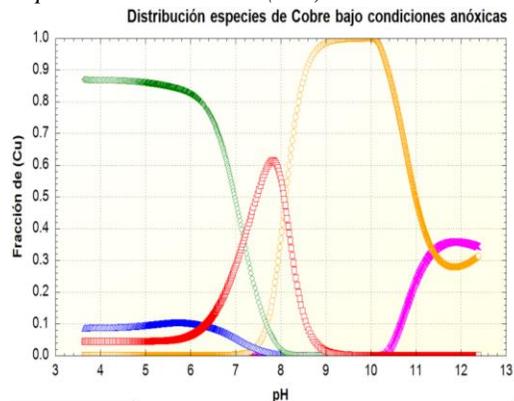


Figura 60
Especiación del Al – Ca(OH)₂ en condición oxidante.

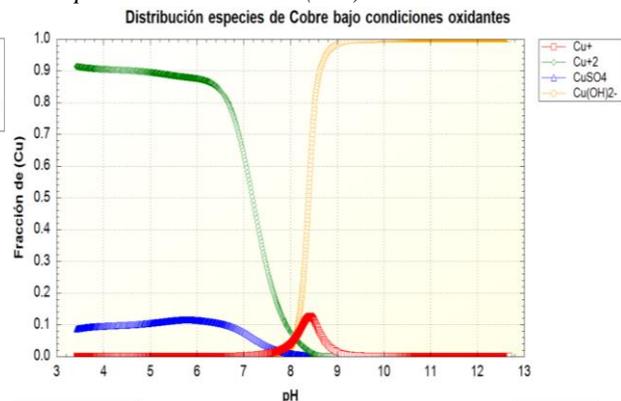


Figura 61
Especiación del Zn – $\text{Ca}(\text{OH})_2$ en condición anóxica

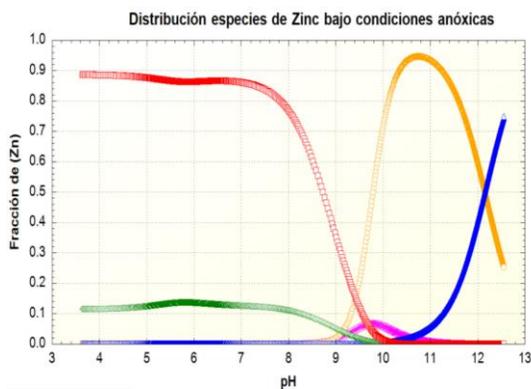


Figura 62
Especiación del Zn – $\text{Ca}(\text{OH})_2$ en condición oxidante

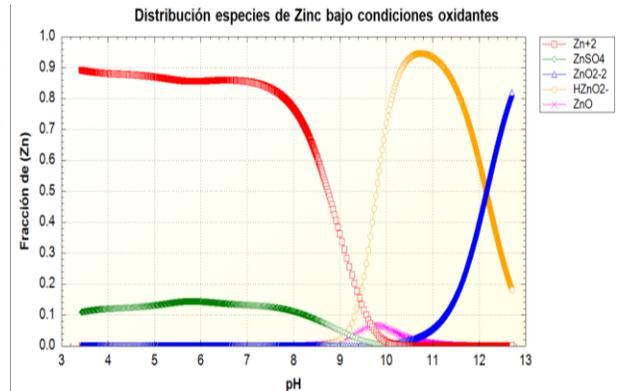


Figura 63
Especiación del Mg – $\text{Ca}(\text{OH})_2$ en condición anóxica

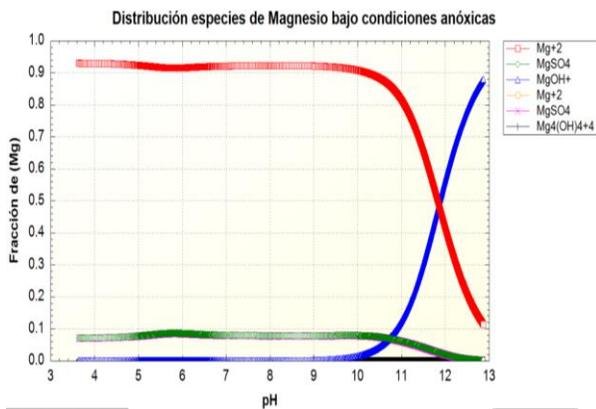


Figura 64
Especiación del Mg – $\text{Ca}(\text{OH})_2$ en condición oxidante

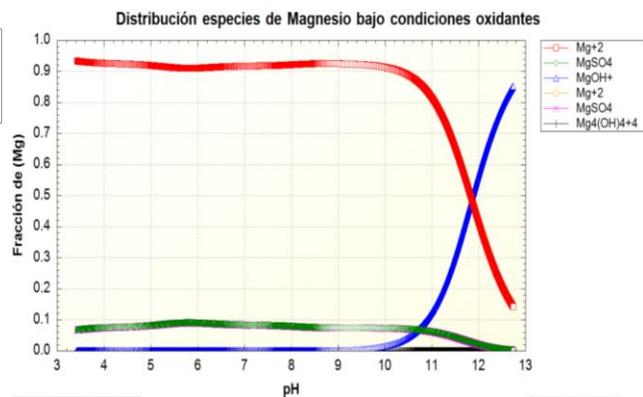


Figura 65
Especiación del Mn – $\text{Ca}(\text{OH})_2$ en condición anóxica

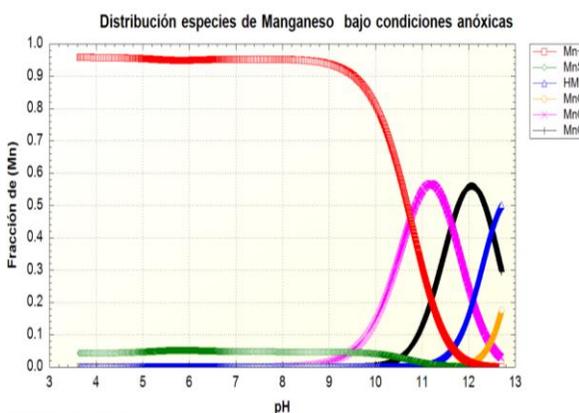
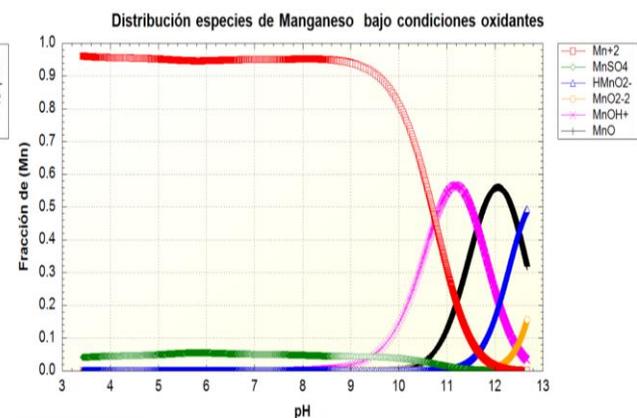


Figura 66
Especiación del Mn – $\text{Ca}(\text{OH})_2$ en condición oxidante



Apéndice C. Diagramas de especiación de las principales especies presentes en el agua ácida al reaccionar con el residuo alcalino de la industria metalúrgica (escoria de acería), bajo condiciones anóxicas y oxidantes

Figura 67
Especiación del Fe – escoria en condición anóxica



Figura 68
Especiación del Fe – escoria en condición oxidante

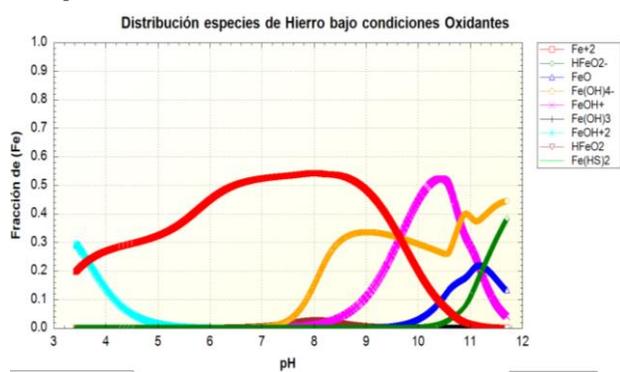


Figura 69
Especiación del Al – escoria en condición anóxica

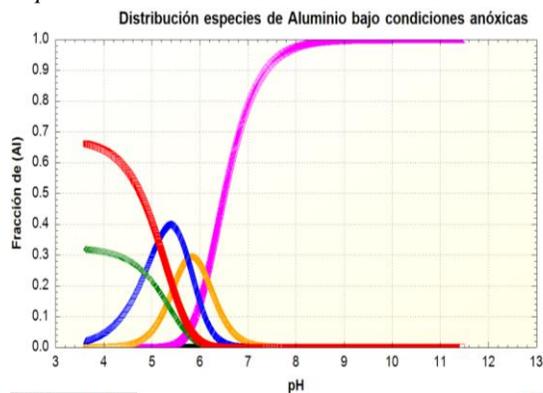


Figura 70
Especiación del Al – escoria en condición oxidante

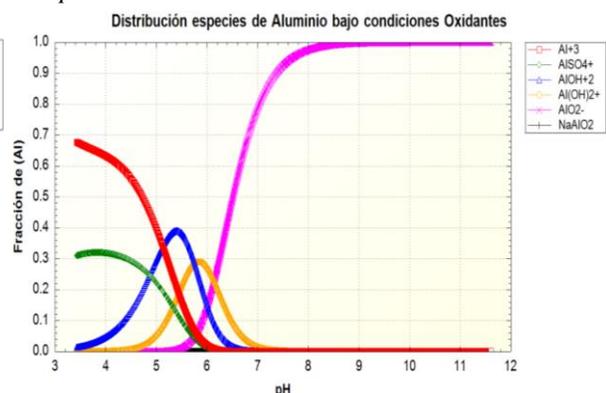


Figura 71
Especiación del Cu – escoria en condición anóxica

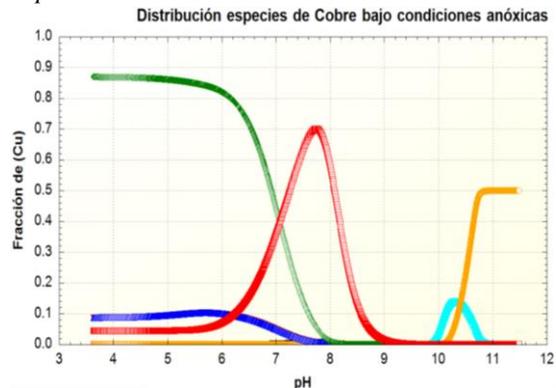


Figura 72
Especiación del Cu – escoria en condición oxidante

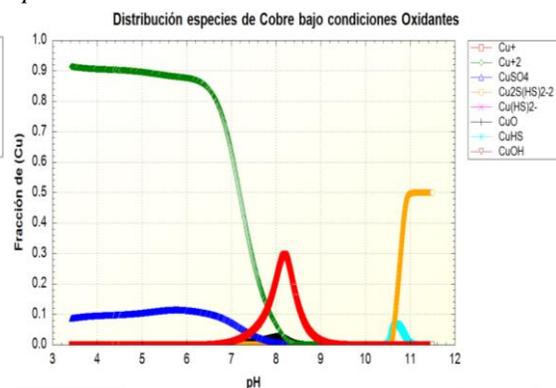


Figura 73

Especiación del Zn – escoria en condición anóxica



Figura 74

Especiación del Zn – escoria en condición oxidante

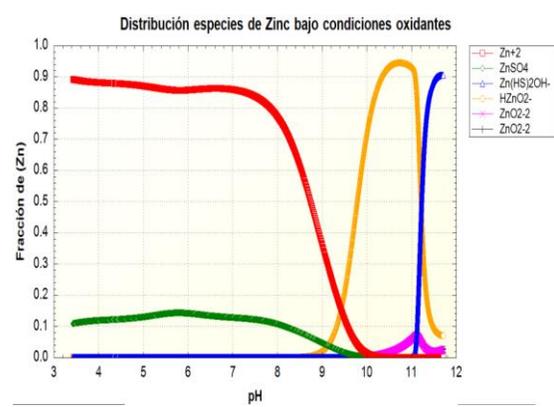


Figura 75

Especiación del Mg – escoria en condición anóxica

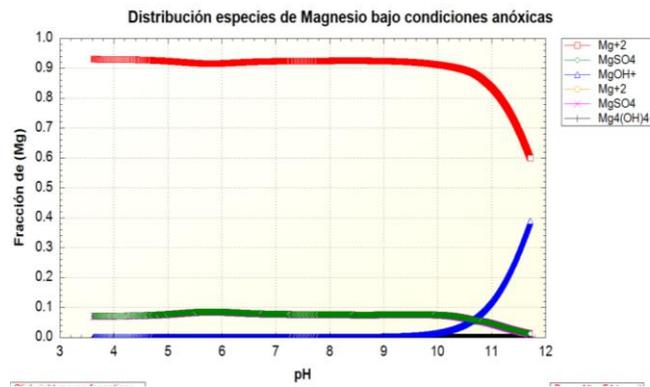


Figura 76

Especiación del Mg – escoria en condición oxidante

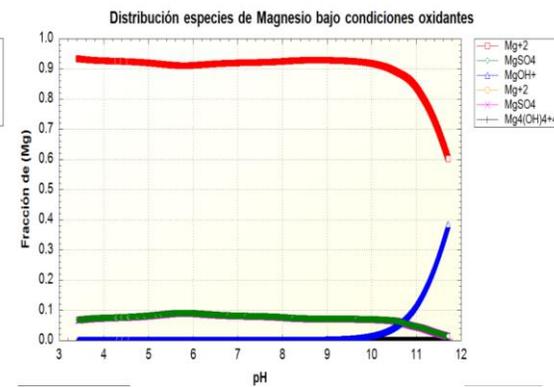


Figura 77

Especiación del Mn – escoria en condición anóxica

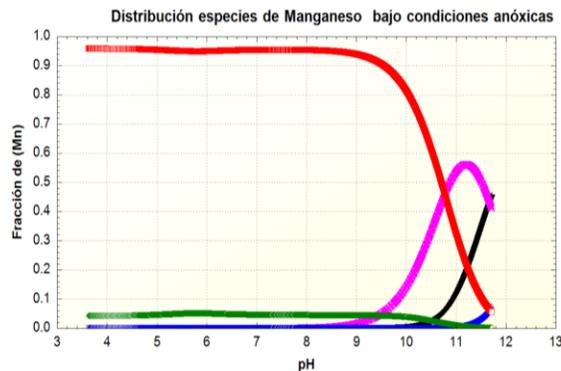
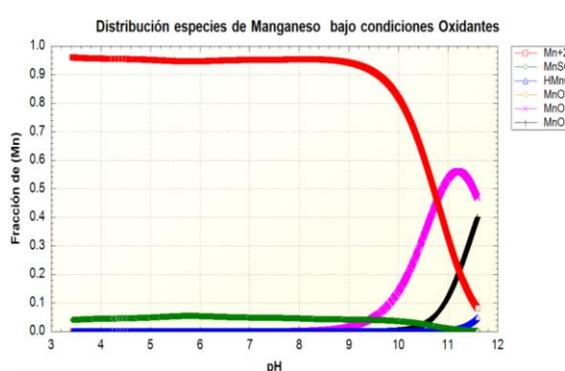


Figura 78

Especiación del Mn – escoria en condición oxidante



Apéndice D. Diagramas de especiación de las principales especies presentes en el agua ácida al reaccionar con el residuo alcalino de la industria termoelectrónica (cenizas volantes), bajo condiciones anóxicas y oxidantes.

Figura 79
Especiación del Fe – cenizas en condición anóxica

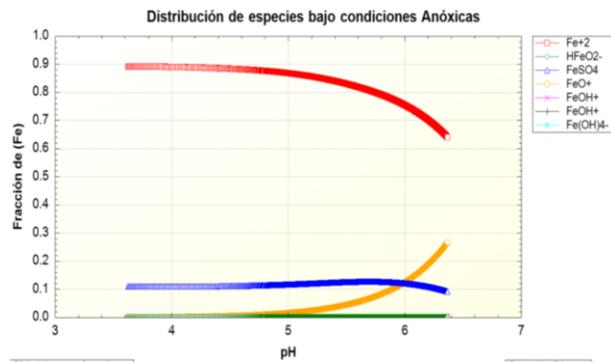


Figura 80
Especiación del Fe – cenizas en condición oxidante

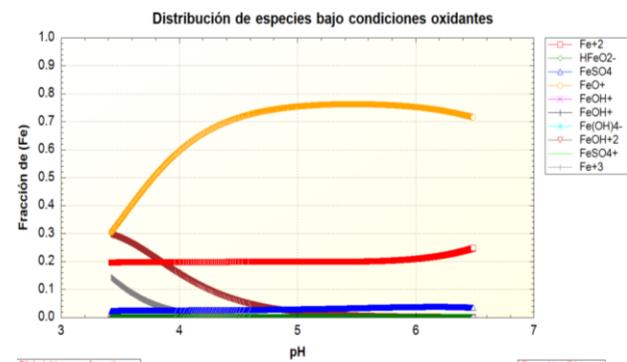


Figura 81
Especiación del Al – cenizas en condición anóxica

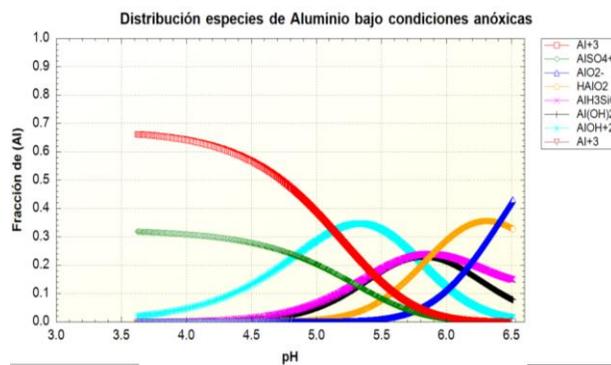


Figura 82
Especiación del Al – cenizas en condición oxidante

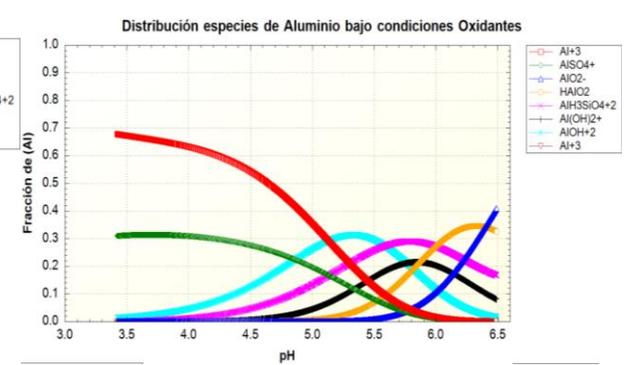


Figura 83
Especiación del Cu – cenizas en condición anóxica

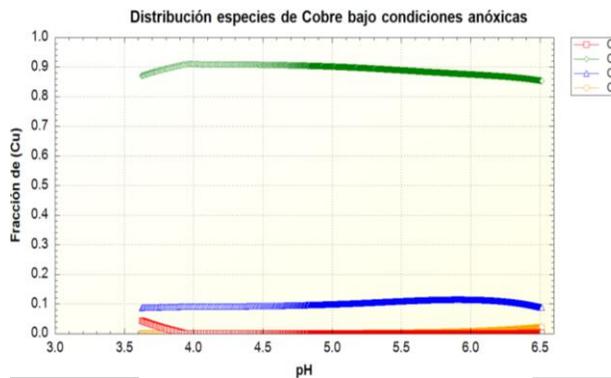


Figura 84
Especiación del Cu – cenizas en condición oxidante

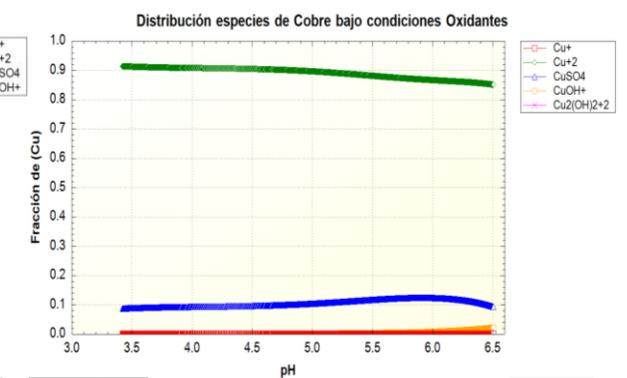


Figura 85
Especiación del Zn – cenizas en condición anóxica

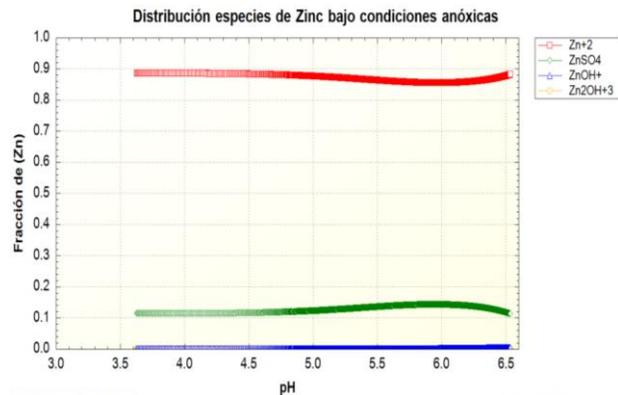


Figura 86
Especiación del Zn – cenizas en condición oxidante

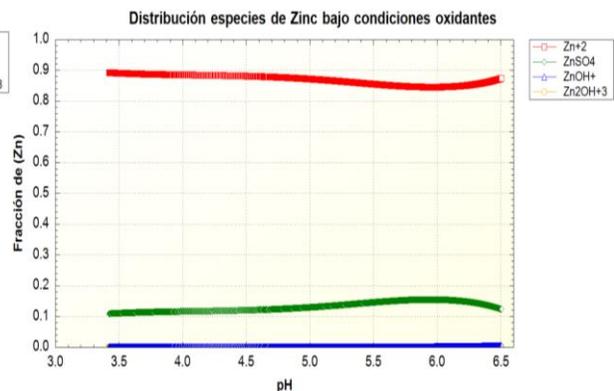


Figura 87
Especiación del Mg – cenizas en condición anóxica

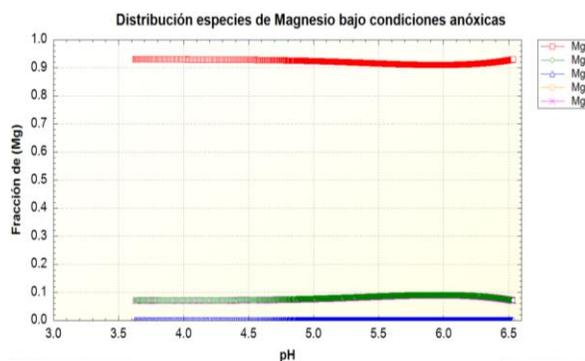


Figura 88
Especiación del Mg – cenizas en condición oxidante

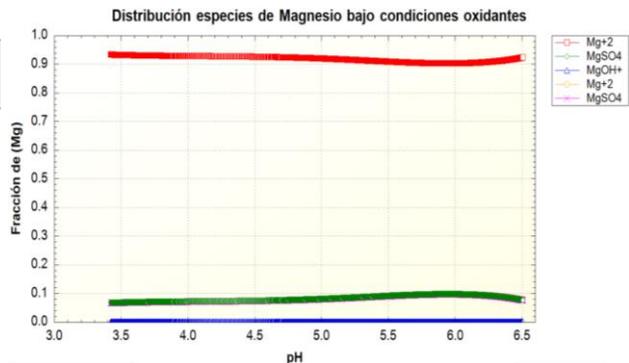
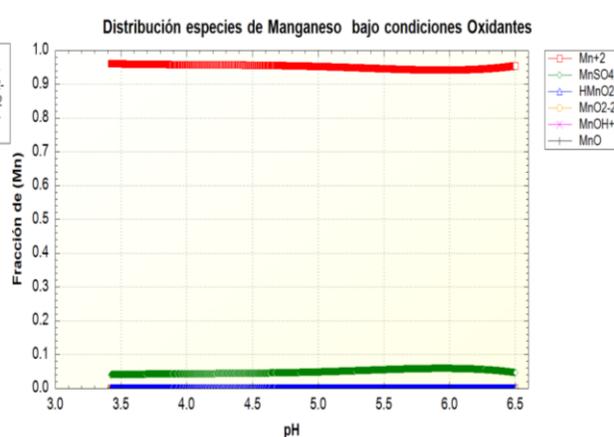


Figura 89
Especiación del Mn – cenizas en condición anóxica



Figura 90
Especiación del Mn – cenizas en condición oxidante



Apéndice B. Plantillas de simulación realizadas en la programación de los neutralizantes y residuos alcalinos mediante el software de código abierto PHREEQC.

Figura 90

Programación realizada en la neutralización del agua ácida de minería con cal apagada

```

C:\Users\Administrador\OneDrive\Escritorio\archivos Phreeqc\AMD\Simulación 5\anóxico\Lodos Agua ácida - CAOH2.phr - Notepad++ [Administrator]
File Edit Search View Encoding Language Settings Macro Run TextFX Plugins Window 2
Lodos CAOH2.phr Fases en lodos GPAPICA.phr Lodos Al - calotea.phr Lodos Agua ácida - CAOH2.phr
1 DATABASE c:\phreeqc\database\Thermodyn1.10_15dec2020.DAT
2 TITLE Neutralización de agua ácida
3 SOLUTION 1 Agua ácida
4 temp 25
5 pH 3.62
6 units mg/L
7 density 1.01
8 Fe 74.4
9 Al 36.9
10 Cu 6.4
11 Mg 8.4
12 Mn 2.2
13 K 3.4
14 Na 2.6
15 Zn 1.2
16 S(6) 52.5
17 O(0) 8.38
18
19
20 -water 1 # kg
21 END
22 # calcite equilibrium
23 USE solution 1
24 EQUILIBRIUM_PHASES 1
25 Portlandite 0
26 USER_PRINT
27 10 PRINT "calcite precipitate to equilibrium: ", EQUIL_DELTA("Portlandite")
28 20 PRINT "muscovite precipitate to equilibrium: ", EQUIL_DELTA("muscovite")
29 30 PRINT "goethite precipitate to equilibrium: ", EQUIL_DELTA("goethite")
30 40 PRINT "pyrite precipitate to equilibrium: ", EQUIL_DELTA("Fe(OH)2")
31 50 PRINT "mackinawite precipitate to equilibrium: ", EQUIL_DELTA("Feo")
32 END
33 # incremental addition of calcite, precipitate at equilibrium
34 USE solution 1
35 REACTION 1
36 Ca(OH)2
37 0.0338 moles
38
39 USER_GRAPH 1
40 -headings "Ca(OH)2"
41 -axis_titles "Ca(OH)2 added, moles" "pH" ""
42 -chart_title "Moles cal apagada vs pH en zona anóxica"
43 -initial_solutions false
44 -connect_simulations true
45 -plot_concentration_vs x
46 -start
47 10 GRAPH_X RXN
48 20 GRAPH_Y -LA("H+")
49 -end
50 -active true
51 EQUILIBRIUM_PHASES
52 Portlandite 0 0

```

Figura 91

Programación realizada en la neutralización del agua ácida de minería con escoria de acería

```

C:\Users\Administrador\OneDrive\Escritorio\archivos Phreeqc\AMD\Simulación 6\anóxico\Lodos Agua ácida - escoria.phr - Notepad++ [Administrator]
File Edit Search View Encoding Language Settings Macro Run TextFX Plugins Window 2
Lodos CAOH2.phr Fases en lodos GPAPICA.phr Lodos Al - calotea.phr Lodos Agua ácida - CAOH2.phr Lodos Agua ácida - escoria.phr
1 DATABASE c:\phreeqc\database\Thermodyn1.10_15dec2020.DAT
2 TITLE Neutralización de agua ácida
3 SOLUTION 1 Agua ácida
4 temp 25
5 pH 3.62
6 units mg/L
7 density 1.01
8 Fe 74.4
9 Al 36.9
10 Cu 6.4
11 Mg 8.4
12 Mn 2.2
13 K 3.4
14 Na 2.6
15 Zn 1.2
16 S(6) 52.5
17 O(0) 0
18
19 -water 1 # kg
20 END
21 # calcite equilibrium
22 USE solution 1
23 EQUILIBRIUM_PHASES 1
24 Portlandite 0
25 USER_PRINT
26 10 PRINT "Ca2SiO4, mol: ", 1.380/GFW("Ca2SiO4")
27 20 PRINT "Ca2(Al2Si)O7, mol: ", 0.330/GFW("Ca2(Al2Si)O7")
28 30 PRINT "Feo, mol: ", 0.80/GFW("Feo")
29 END
30 USE solution 1
31 REACTION 1
32 Ca2SiO4 8.0122e-03 # 0.35 mg Ferrita de calcio
33 Ca2(Al2Si)O7 1.2035e-03
34 Feo 1.1135e-02
35 USER_GRAPH 1
36 -headings "Ca(OH)2"
37 -axis_titles "Ca(OH)2 added, moles" "pH" ""
38 -chart_title "Moles Cal apagada vs pH en zona anóxica"
39 -initial_solutions false
40 -connect_simulations true
41 -plot_concentration_vs x
42 -start
43 10 GRAPH_X RXN
44 20 GRAPH_Y -LA("H+")
45 -end
46 -active true
47 EQUILIBRIUM_PHASES
48 END
49 Larnite(alpha) 0 0

```

Figura 92

Programación realizada en la neutralización del agua ácida de minería con cal apagada

```

C:\Users\Administrador\OneDrive\Escritorio\archivos Phreeqc\AMD\Simulación 7\anóxico\Lodos Agua ácida - cenizas.phr - Notepad++ [Administrator]
File Edit Search View Encoding Language Settings Macro Run TextFX Plugins Window 2
Lodos CaO.phr | Fases en lodos GRAFICA.phr | Lodos Al - calcite .phr | Lodos Agua ácida - CAOH2.phr | Lodos Agua ácida - esconia.phr | Lodos Agua ácida - cenizas.phr
1 DATABASE c:\phreeqc\database\Thermoddem\1.10_15Dec2020.DAT
2 TITLE Neutralización de agua ácida
3 SOLUTION 1 Agua ácida
4   temp      25
5   pH        3.62
6   units     mg/L
7   density   1.01
8   Fe        74.4
9   Al        36.9
10  Cu        6.4
11  Mg        8.4
12  Mn        2.2
13  K         3.4
14  Na        2.6
15  Zn        1.2
16  S(6)      52.5
17  O(0)      0
18
19  -water    1      # kg
20
21 # Calcite equilibrium
22 USE solution 1
23 EQUILIBRIUM_PHASES 1
24
25 USER_PRINT
26 USER_PRINT
27 10 PRINT "Al6Si2O13, mol: ", 0.91/GFW("Al6Si2O13")
28 20 PRINT "SiO2, mol: ", 1.6425/GFW("SiO2")
29 30 PRINT "Fe3O4, mol: ", 0.13/GFW("Fe3O4")
30 40 PRINT "CaO, mol: ", 0.08/GFW("CaO")
31
32 END
33 USE solution 1
34 REACTION 1
35 Al6Si2O13      2.1359e-03 # 0.35 mg Ferrita de calcio
36 SiO2           2.7337e-02
37 Fe3O4          5.6147e-04
38 CaO            1.4266e-03
39
40 USER_GRAPH 1
41 -headings "Ca(OH)2"
42 -axis_titles "Ca(OH)2 added, moles" "pH" ""
43 -chart_title "Moles Cal apagada vs pH en zona anóxica"
44 -initial_solutions false
45 -connect_simulations true

```