B. Diagramas de distribución de especies

Índice

B.1. Diagramas de especies por metal 2

B.1.1. Cinc 2

B.1.2. Cobre 3

B.1.3. Aluminio 3

B.1.4. Hierro 4

B.1.5. Cadmio 4

B.1.6. Mercurio 5

B.1.7. Plomo 5

B.1.8. Cromo 6

B.1.9. Arsénico 6

B.1.10. Níquel 7

Los diagramas de distribución de especies permiten conocer qué forma del metal predomina según el pH del medio en el que se encuentra. De esta manera, además, se puede saber a partir de qué pH el metal empezará a precipitar. Será suficiente con identificar cuando se empiezan a formar las especies sólidas (s) o cristalinas (cr).

Así pues, para obtener las siguientes gráficas (Figura B.1 a Figura B.10) se ha utilizado el programa Chemical Equilibrium Diagrams (http://www.kemi.kth.se/medusa/). Los parámetros a definir son:

- Metal que se desea representar, y su concentración dentro de la disolución acuosa (mg_metal/l_disolución)
- Tipo de reacción: en función del pH (Metal – H^+)
- Rango de pH que se quiere representar (0 – 12)
- Concentración máxima de metal en los experimentos realizados con HNO_3.

B.1. Diagramas de especies por metal

B.1.1. Cinc

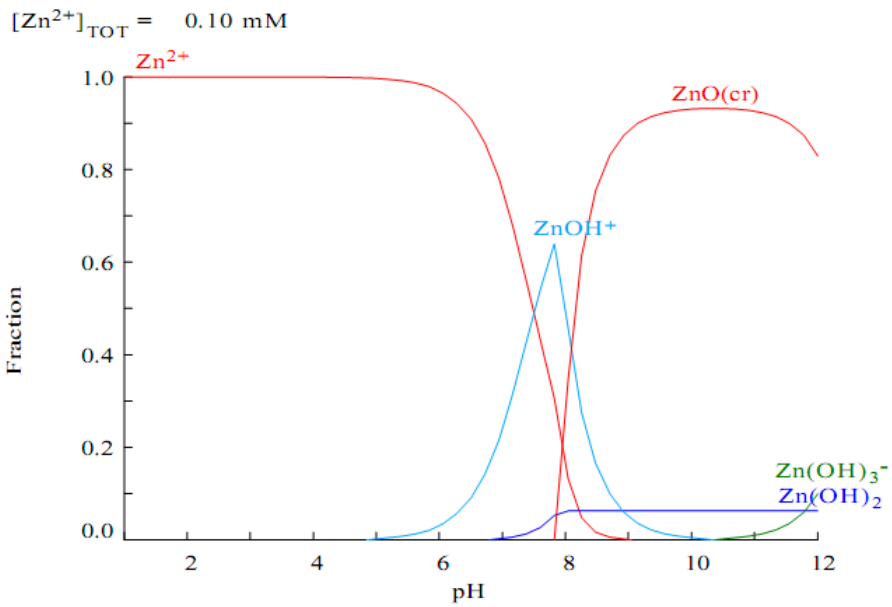

Figura B.1. Diagrama de distribución de especies del zinc

B.1.2. Cobre

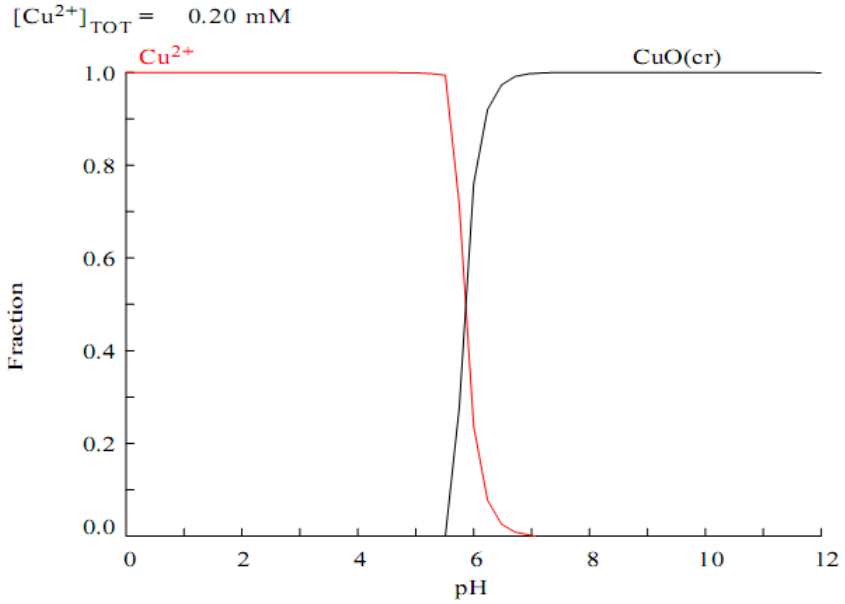

Figura B.2. Diagrama de distribución de especies del cobre

B.1.3. Aluminio

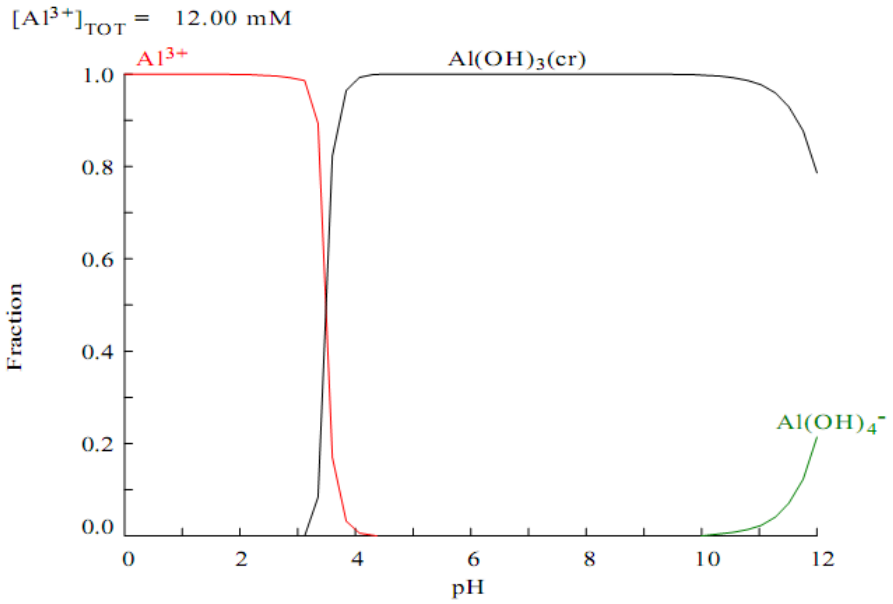

Figura B.3. Diagrama de distribución de especies del aluminio

B.1.4. Hierro

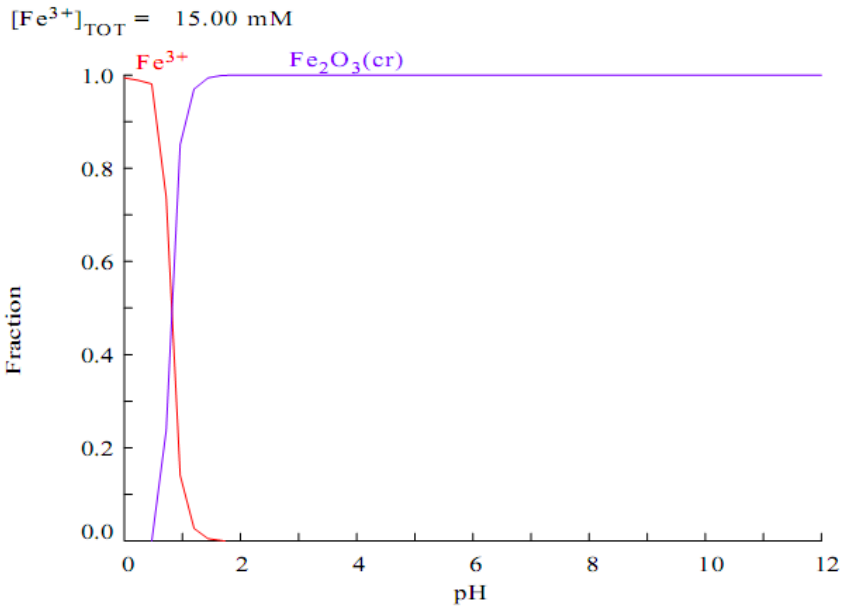

Figura B.4. Diagrama de distribución de especies del hierro

B.1.5. Cadmio

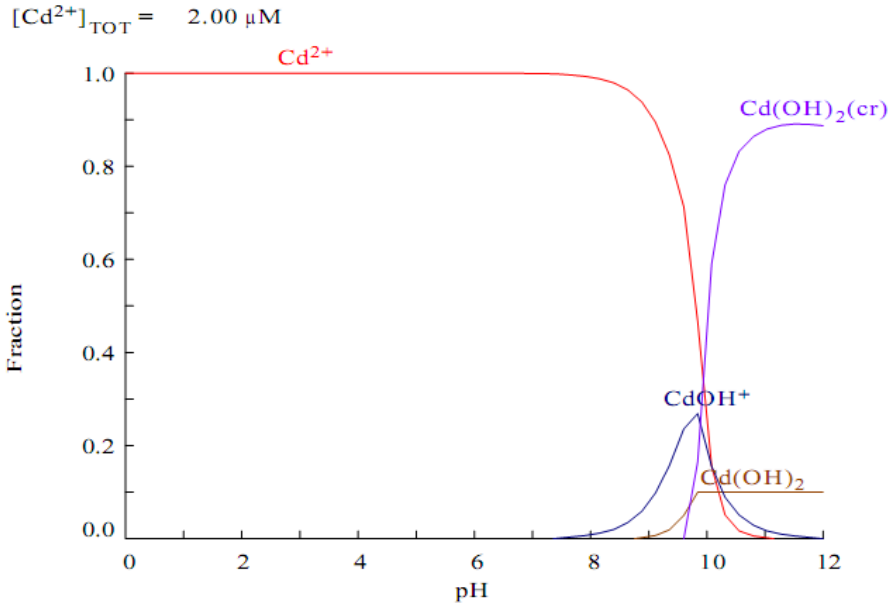

Figura B.5. Diagrama de distribución de especies del cadmio

B.1.6. Mercurio

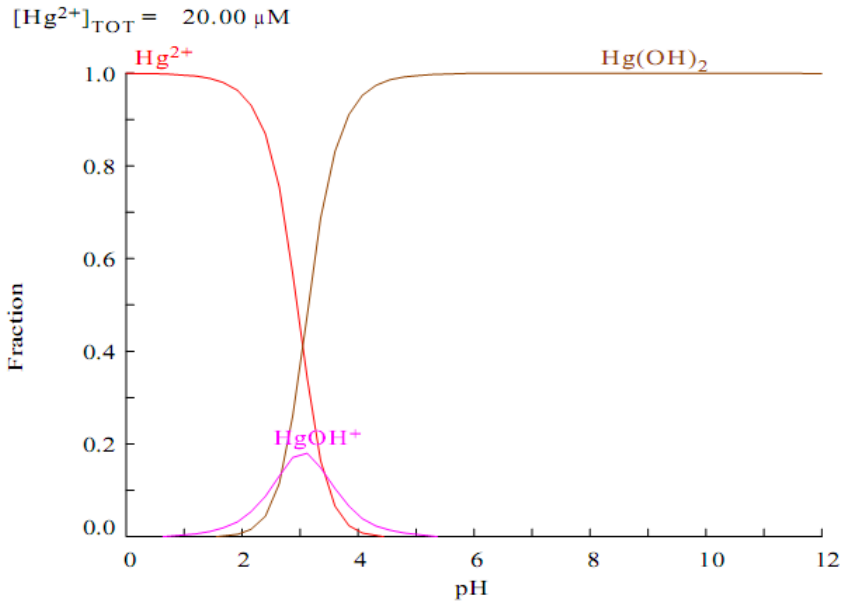

Figura B.6. Diagrama de distribución de especies del mercurio

B.1.7. Plomo

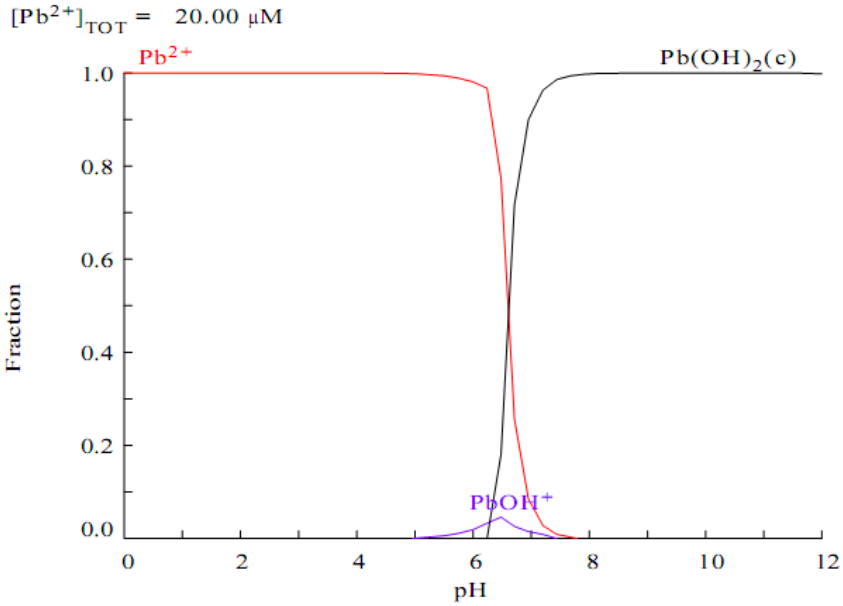

Figura B.7. Diagrama de distribución de especies del plomo

B.1.8. Cromo

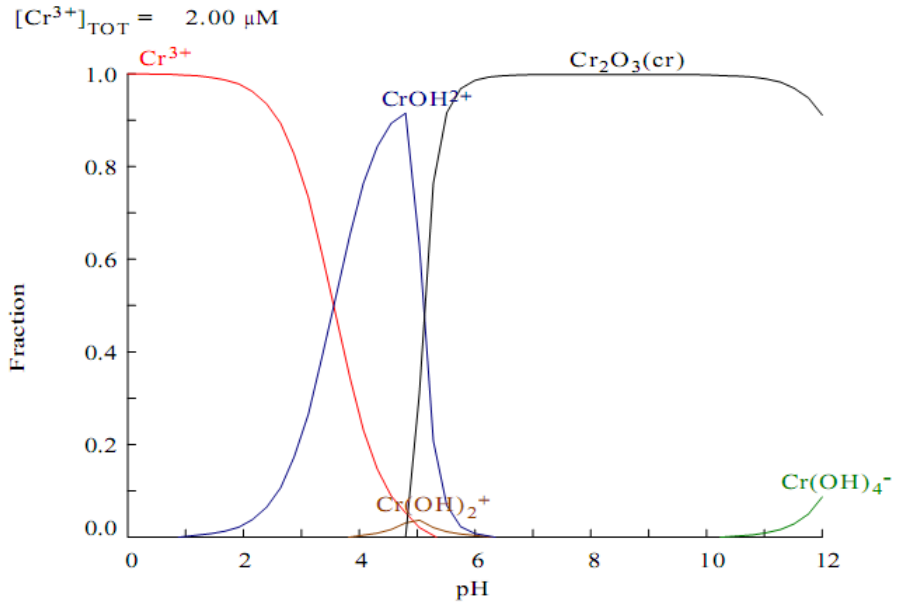

Figura B.8. Diagrama de distribución de especies del cromo

B.1.9. Arsénico

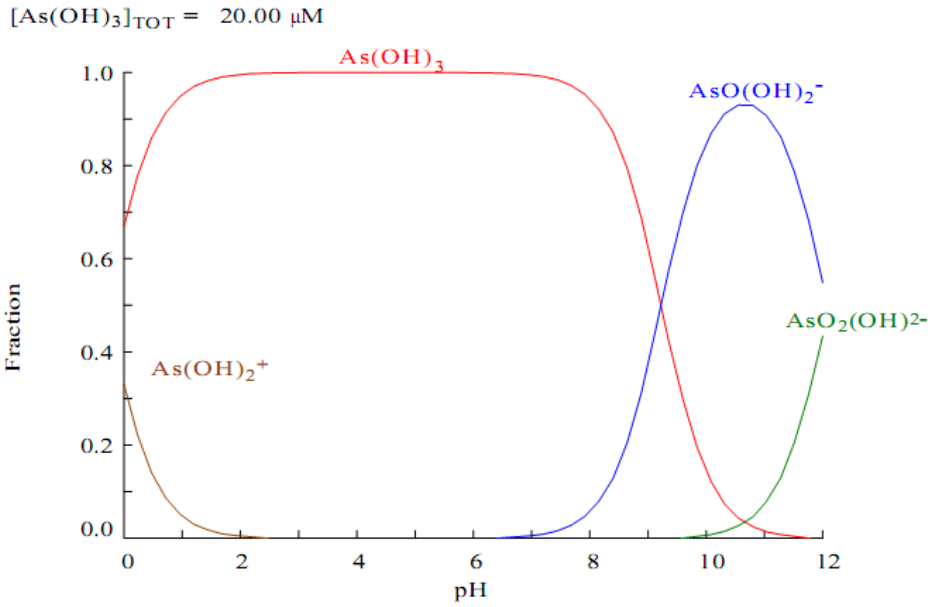

Figura B.9. Diagrama de distribución de especies del arsénico

B.1.10. Níquel

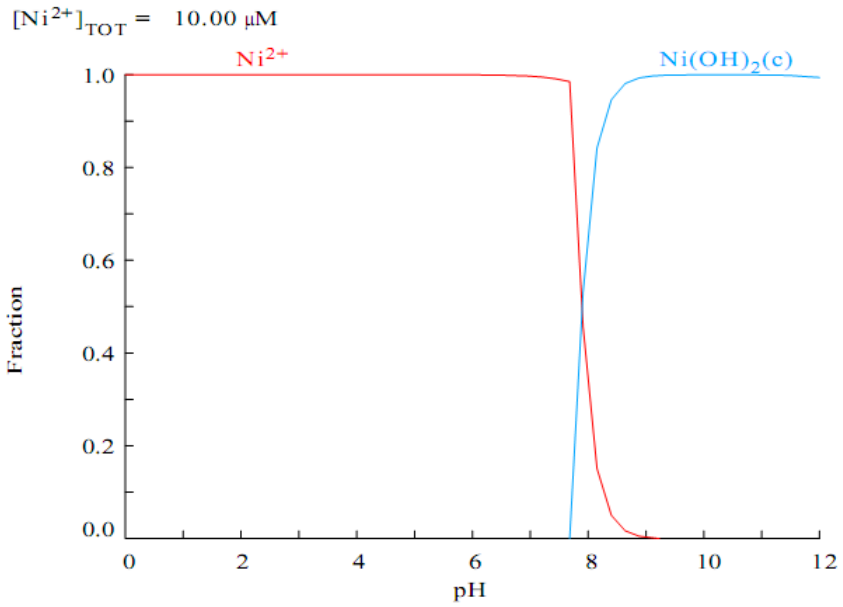

Figura B.10. Diagrama de distribución de especies del níquel

C. Modelo de difusión intraparticular

Índice

C.1. Metodología 3

C.1.1. Cinc 4

C.1.2. Cobre 9

C.1.3. Aluminio 14

C.1.4. Hierro 19

C.1.5. Cadmio 24

C.1.6. Mercurio 29

C.1.7. Plomo 33

C.1.8. Cromo 37

C.1.9. Arsénico 41

C.1.10. Níquel 45

C.2. Datos experimentales y valores obtenidos por el modelo de difusión intraparticular 52

C.2.1. Cinc 52

C.2.2. Cobre 54

C.2.3. Aluminio 57

C.2.4. Hierro 59

C.2.5. Cadmio 62

C.2.6. Mercurio 64

C.2.7. Plomo 66

C.2.8. Cromo 68

C.2.9. Arsénico 70

C.2.10. Níquel 72

En el presente anexo se adjuntan el total de las gráficas de la modelización de la difusión a partir de los datos experimentales, junto con el valor de los datos utilizados, los valores de k_d y del coeficiente de difusión (D) obtenidos. Además, reúne los valores de la concentración extraída por el EDTA según el modelo y, de forma detallada, se explica el procedimiento utilizado.

C.1. Metodología

A partir de los datos ya analizados del laboratorio ICP, se grafica la concentración de metal extraída por el EDTA de metal M_t [mg_metal/kg_contaminante] en función de la raíz del tiempo [$s^{1/2}$] y se calcula la recta de recta de regresión éstos datos, tal y como se muestra a continuación.

Así, con el valor de la pendiente de la recta de regresión, según la ecuación (Ec. C.1), se calcula la k_d para cada metal y muestra.

$$\frac{M_t}{M_\infty} = k_d \cdot \sqrt{t} \qquad \text{(Ec. C.1)}$$

donde:

M_∞: cantidad de metal extraído empíricamente en el equilibrio (t=24 h) [mg_metal/kg_muestra]

M_t: cantidad de metal extraído empíricamente en el tiempo t [mg_metal/kg_muestra]

k_d: constante de velocidad de difusión intraparticular [$s^{-1/2}$]

t: tiempo considerado [s]

En las muestras y metales que se tienen datos experimentales por duplicado de la concentración extraída a las 24 horas de agitación ($M\infty$), para el cálculo de k_d se utiliza el promedio de las dos.

Por otra parte, en el caso concreto de este modelo, únicamente para el cálculo de la k_d, se han añadido el punto (0,0). De esta forma, la recta de regresión obtenida pasará por el origen tal y como requiere la ecuación (Ec. C.1).

A continuación se presentan las tablas con los datos utilizados junto con las gráficas de cada metal y muestra y la ecuación de la recta de regresión:

C.1.1. Cinc

t agitación [horas]	(t agitación)$^{1/2}$ [$s^{1/2}$]	[Zn]_exp [mg/kg]
0	0	0
0.08	17.3	11.044
0.17	24.5	9.813
0.33	34.6	10.866
0.5	42.4	12.936
1	60.0	15.282
1	60.0	14.411
2	84.9	18.544
2	84.9	14.342
5	134.2	18.795
24	293.9	51.735

Tabla C.1 MUESTRA M1: Concentración experimental de Zn y √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

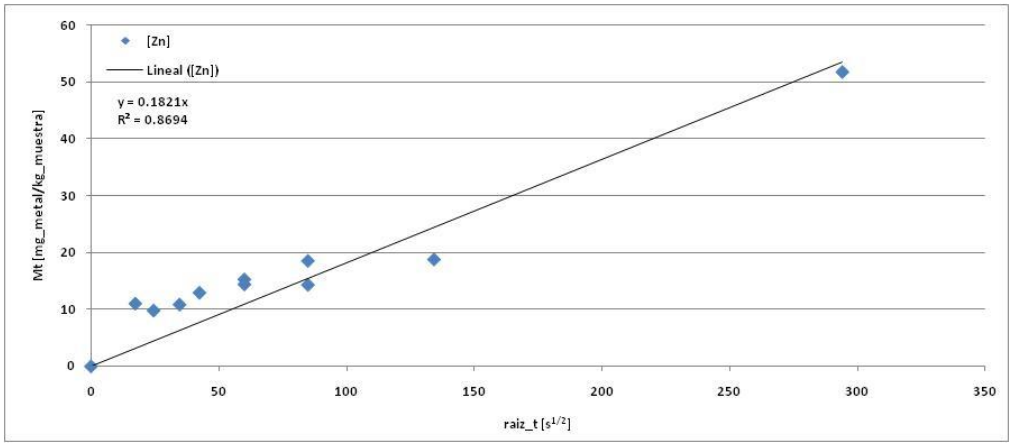

Figura C.1 MUESTRA M1: Concentración experimental de Zn en función de √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

t agitación [horas]	(t agitación)$^{1/2}$ [$s^{1/2}$]	[Zn]_exp [mg/kg]
0	0	0
0.08	17.3	17.420
0.17	24.5	16.120
0.33	34.6	20.629
0.5	42.4	18.908
1	60.0	21.518
1	60.0	24.374
2	84.9	22.364
5	134.2	29.922
10	189.7	37.062
24	293.9	42.204
24	293.9	37.100
	M∞ [mg/kg]	39.652

Tabla C.2 MUESTRA M2: Concentración experimental de Zn y √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

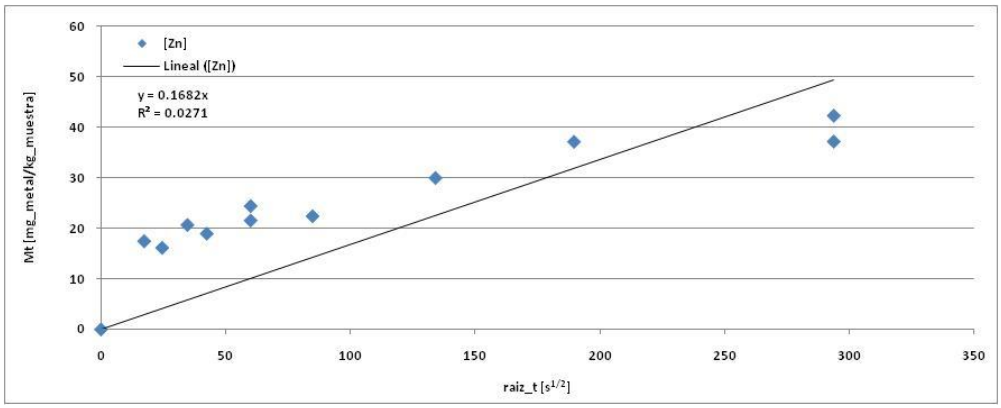

Figura C.2 MUESTRA M2: Concentración experimental de Zn en función de √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

t agitación [horas]	(t agitación)$^{1/2}$ [$s^{1/2}$]	[Zn]_exp [mg/kg]
0	0	0
0.08	17.3	19.909
0.17	24.5	21.093
0.17	24.5	19.380
0.33	34.6	20.424
0.5	42.4	20.505
1	60.0	21.711
2	84.9	27.160
2	84.9	26.943
5	134.2	31.368
10	189.7	34.821
24	293.9	38.999

Tabla C.3 MUESTRA M3: Concentración experimental de Zn y √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

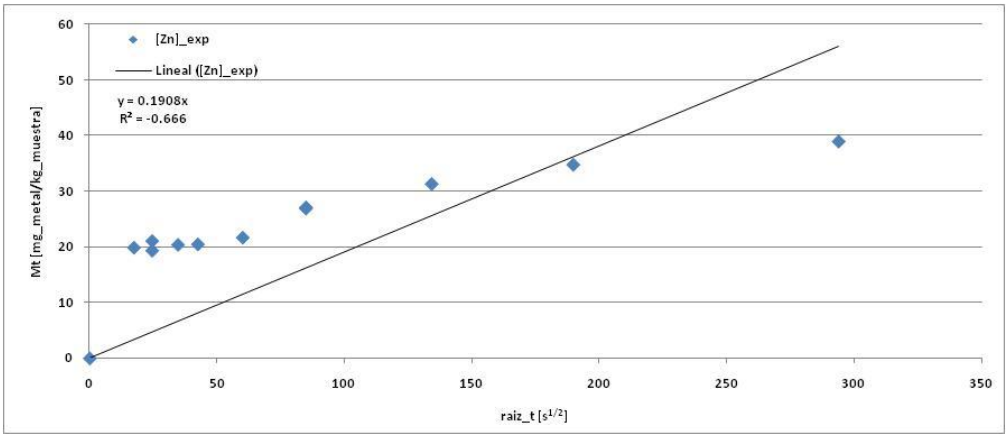

Figura C.3 MUESTRA M3: Concentración experimental de Zn en función de √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

t agitación [horas]	(t agitación)$^{1/2}$ [$s^{1/2}$]	[Zn]_exp [mg/kg]
0	0	0
0.08	17.3	118.940
0.08	17.3	120.069
0.17	24.5	116.633
0.33	34.6	119.672
0.33	34.6	121.360
0.5	42.4	119.794
1	60.0	133.509
2	84.9	146.712
5	134.2	160.325
5	134.2	158.894
10	189.7	175.141
24	293.9	200.525

Tabla C.4 MUESTRA M4: Concentración experimental de Zn y √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

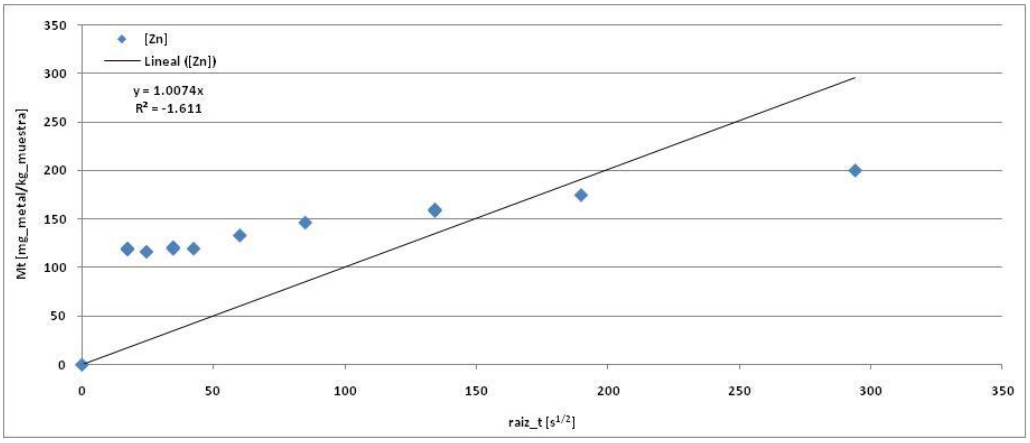

Figura C.4 MUESTRA M4: Concentración experimental de Zn en función de √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

t agitación [horas]	(t agitación)$^{1/2}$ [$s^{1/2}$]	[Zn]_exp [mg/kg]
0	0	0
0.08	17.3	31.880
0.17	24.5	30.471
0.33	34.6	29.927
0.5	42.4	33.992
1	60.0	35.067
2	84.9	37.733
5	134.2	36.248
5	134.2	36.540
10	189.7	40.931
24	293.9	45.577

Tabla C.5 MUESTRA M5: Concentración experimental de Zn y √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

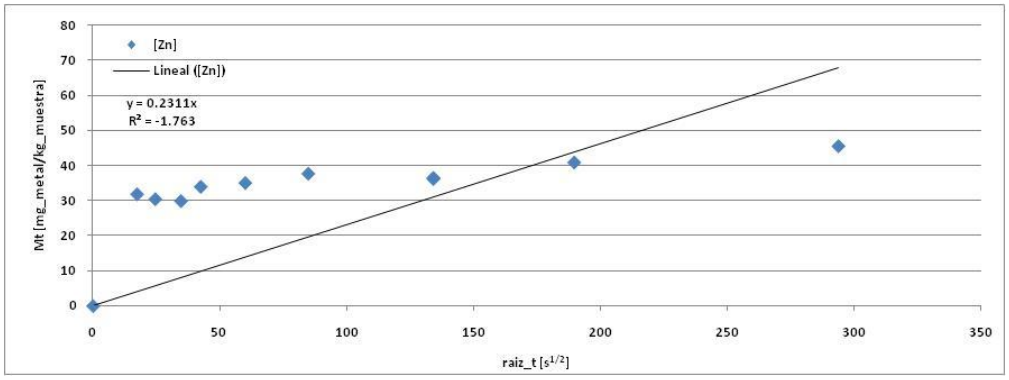

Figura C.5 MUESTRA M5: Concentración experimental de Zn en función de √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

C.1.2. Cobre

t agitación [horas]	(t agitación)$^{1/2}$ [$s^{1/2}$]	[Cu]_exp [mg/kg]
0	0	0
0.08	17.3	80.932
0.17	24.5	83.914
0.33	34.6	84.961
0.5	42.4	83.875
1	60.0	89.662
1	60.0	91.141
2	84.9	102.372
2	84.9	98.495
5	134.2	110.006
10	189.7	120.063
24	293.9	152.000

Tabla C.6 MUESTRA M1: Concentración experimental de Cu y √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

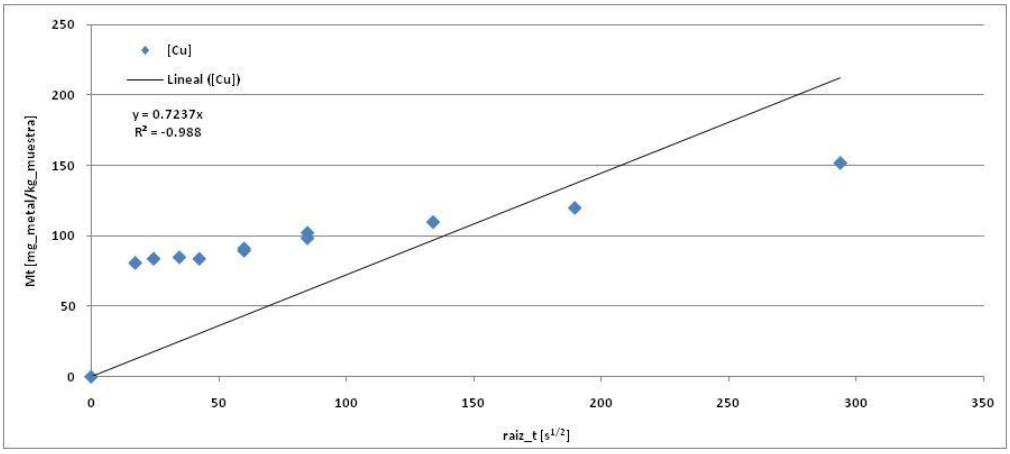

Figura C.6 MUESTRA M1: Concentración experimental de Cu en función de √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

t agitación [horas]	(t agitación)$^{1/2}$ [$s^{1/2}$]	[Cu]_exp [mg/kg]
0	0.000	0
0.08	17.3	188.359
0.17	24.5	192.727
0.33	34.6	189.887
0.5	42.4	191.651
1	60.0	210.551
1	60.0	209.633
2	84.9	229.603
5	134.2	251.465
10	189.7	286.022
24	293.9	325.857
24	293.9	328.253
	M∞ (mg/kg)	327.055

Tabla C.7 MUESTRA M2: Concentración experimental de Cu y √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

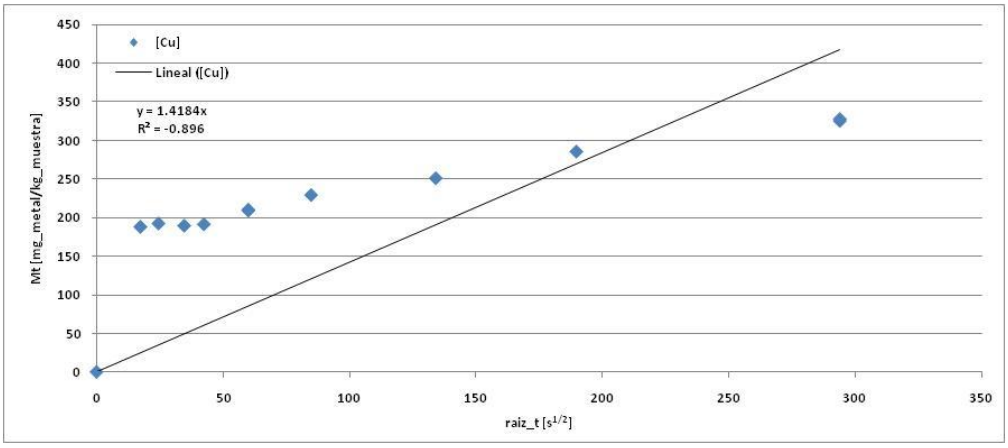

Figura C.7 MUESTRA M2: Concentración experimental de Cu en función de √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

t agitación [horas]	(t agitación)$^{1/2}$ [$s^{1/2}$]	[Cu]_exp [mg/kg]
0	0	0
0.08	17.3	154.994
0.17	24.5	162.743
0.17	24.5	160.845
0.33	34.6	157.871
0.5	42.4	157.645
1	60.0	168.062
2	84.9	187.281
2	84.9	184.962
5	134.2	206.154
10	189.7	225.088
24	293.9	258.581

Tabla C.8 MUESTRA M3: Concentración experimental de Cu y √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

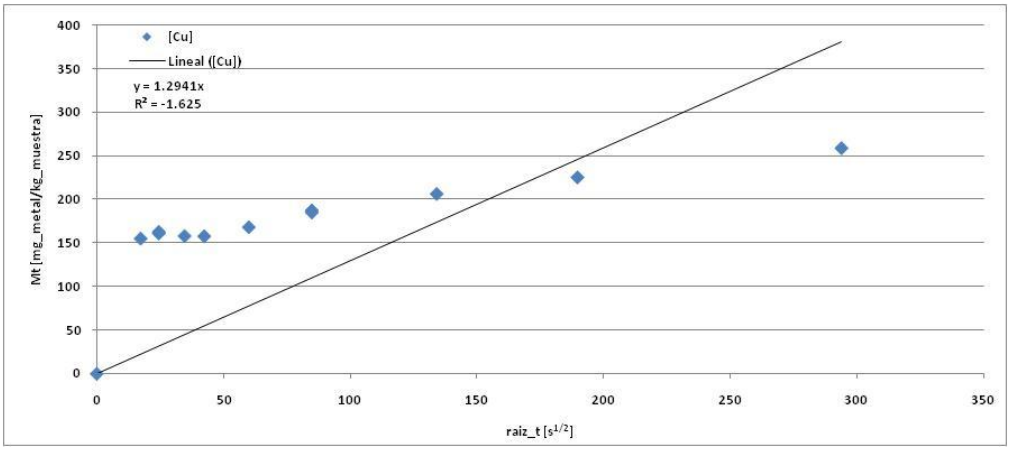

Figura C.8 MUESTRA M3: Concentración experimental de Cu en función de √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

t agitación [horas]	(t agitación)$^{1/2}$ [$s^{1/2}$]	[Cu]_exp [mg/kg]
0	0	0
0.08	17.3	193.118
0.08	17.3	196.023
0.17	24.5	190.352
0.33	34.6	194.250
0.33	34.6	193.109
0.5	42.4	196.595
5	134.2	234.168
1	60.0	211.455
2	84.9	224.105
5	134.2	231.288
10	189.7	253.561
24	293.9	273.558

Tabla C.9 MUESTRA M4: Concentración experimental de Cu y √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

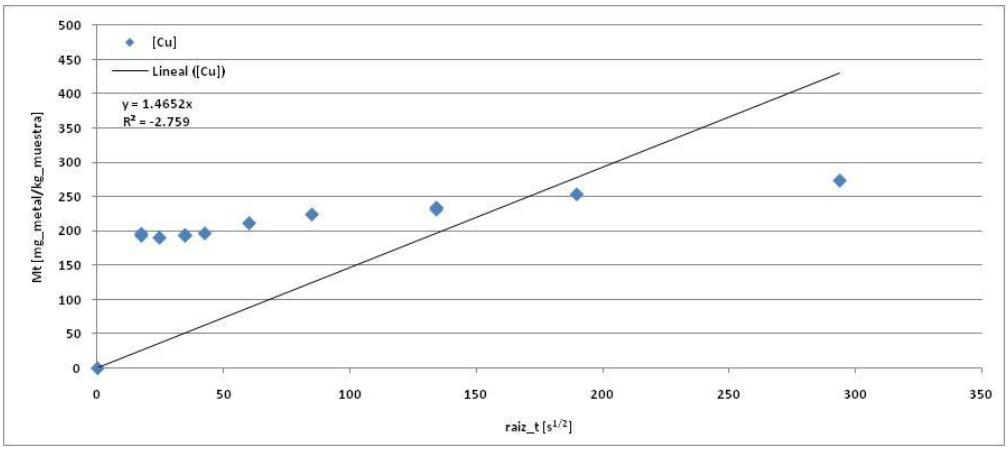

Figura C.9 MUESTRA M4: Concentración experimental de Cu en función de √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

t agitación [horas]	(t agitación)$^{1/2}$ [$s^{1/2}$]	[Cu]_exp [mg/kg]
0	0	0
0.08	17.3	5.875
0.17	24.5	5.668
0.33	34.6	5.539
0.5	42.4	5.705
1	60.0	5.715
2	84.9	6.123
5	134.2	6.183
5	134.2	6.314
10	189.7	7.010
24	293.9	7.924

Tabla C.10 MUESTRA M5: Concentración experimental de Cu y √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

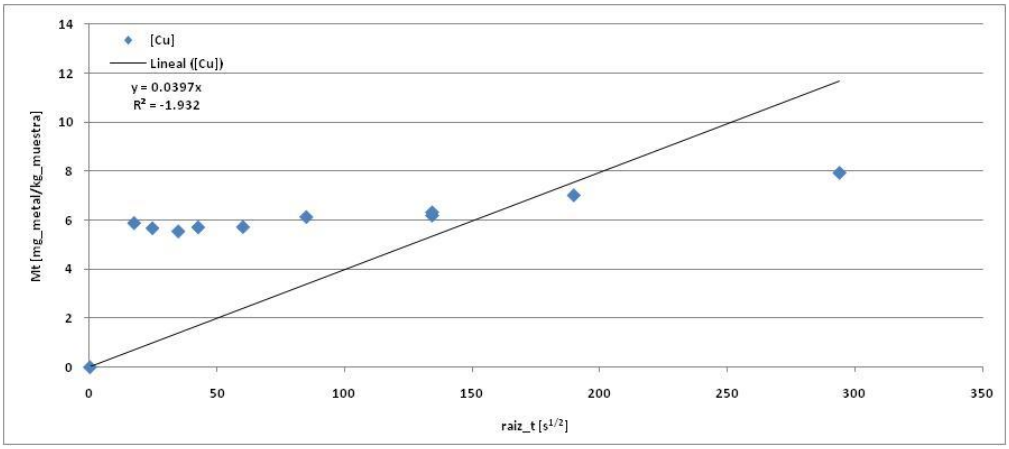

Figura C.10 MUESTRA M5: Concentración experimental de Cu en función de √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

C.1.3. Aluminio

t agitación [horas]	(t agitación)$^{1/2}$ [$s^{1/2}$]	[Al]_exp [mg/kg]
0	0	0
0.08	17.3	362.684
0.17	24.5	390.150
0.33	34.6	402.626
0.5	42.4	390.662
1	60.0	462.602
1	60.0	468.643
2	84.9	621.458
2	84.9	601.089
5	134.2	803.006
10	189.7	1029.594
24	293.9	1426.502

Tabla C.11 MUESTRA M1: Concentración experimental de Al y √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

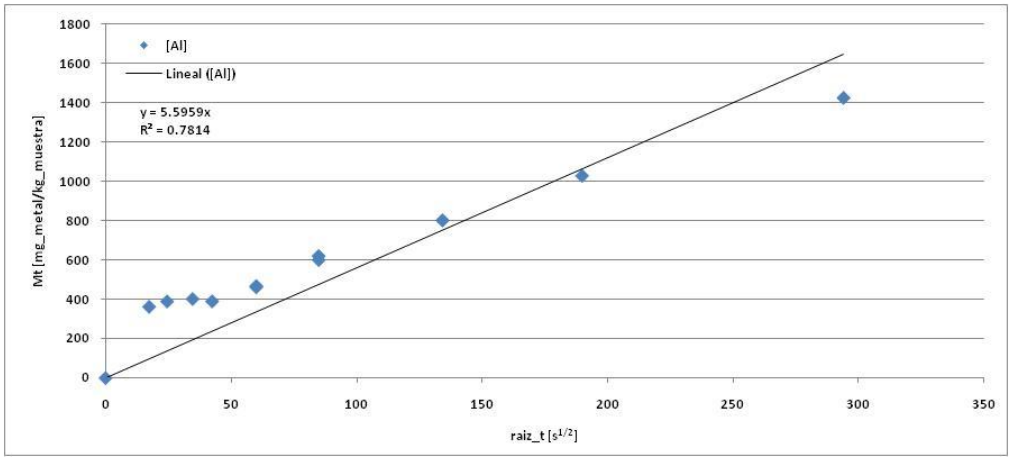

Figura C.11 MUESTRA M1: Concentración experimental de Al en función de √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

t agitación [horas]	(t agitación)$^{1/2}$ [$s^{1/2}$]	[Al]_exp [mg/kg]
0	0.000	0
0.08	17.3	1077.647
0.17	24.5	1189.299
0.33	34.6	1279.821
0.5	42.4	1287.884
1	60.0	1588.649
1	60.0	1591.303
2	84.9	2043.719
5	134.2	2646.048
10	189.7	3394.622
24	293.9	4377.701
24	293.9	4386.443
	M∞ (mg/kg)	4382.072

Tabla C.12 MUESTRA M2: Concentración experimental de Al y √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

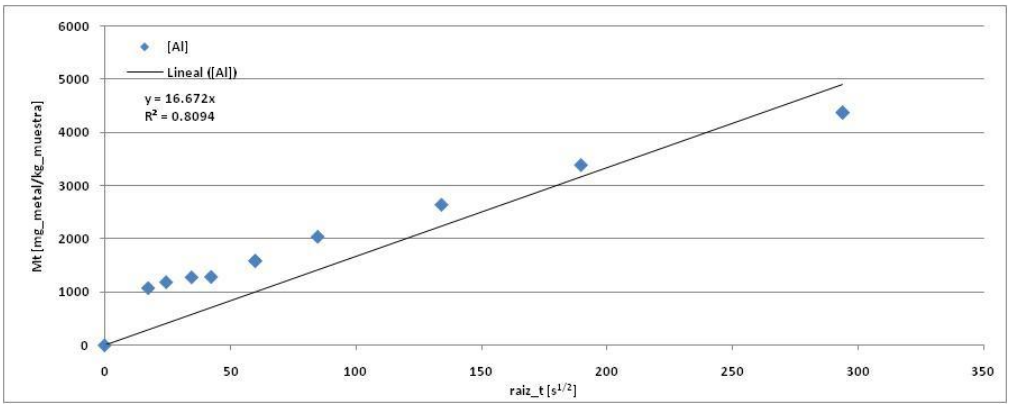

Figura C.12 MUESTRA M2: Concentración experimental de Al en función de √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

t agitación [horas]	(t agitación)$^{1/2}$ [$s^{1/2}$]	[Al]_exp [mg/kg]
0	0	0
0.08	17.3	219.215
0.17	24.5	248.047
0.17	24.5	248.863
0.33	34.6	244.533
0.5	42.4	234.360
1	60.0	286.480
2	84.9	377.740
2	84.9	371.180
5	134.2	499.538
10	189.7	636.742
24	293.9	830.599

Tabla C.13 MUESTRA M3: Concentración experimental de Al y √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

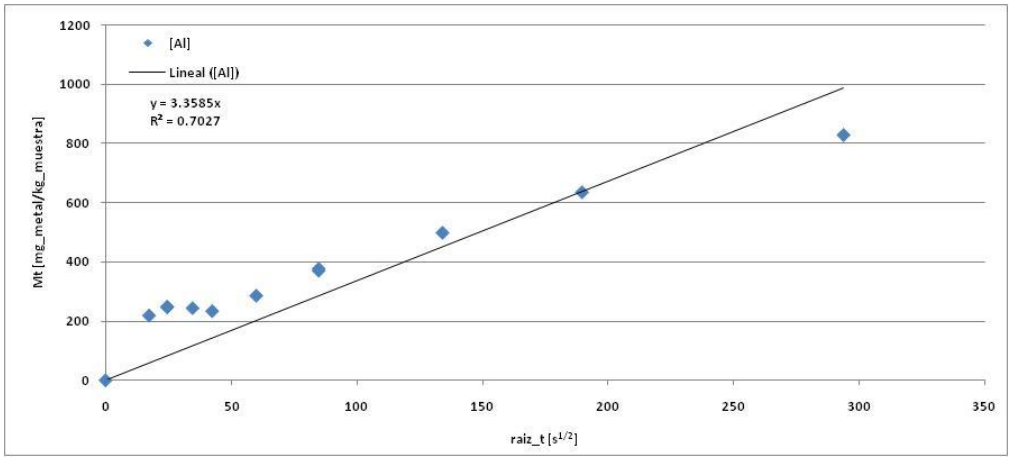

Figura C.13 MUESTRA M3: Concentración experimental de Al en función de √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

t agitación [horas]	(t agitación)$^{1/2}$ [$s^{1/2}$]	[Al]_exp [mg/kg]
0	0	0
0.08	17.3	776.293
0.08	17.3	788.809
0.17	24.5	836.643
0.33	34.6	915.302
0.33	34.6	920.969
0.5	42.4	927.559
1	60.0	1177.449
2	84.9	1552.516
5	134.2	1949.913
5	134.2	1966.227
10	189.7	2469.177
24	293.9	3107.516

Tabla C.14 MUESTRA M4: Concentración experimental de Al y √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

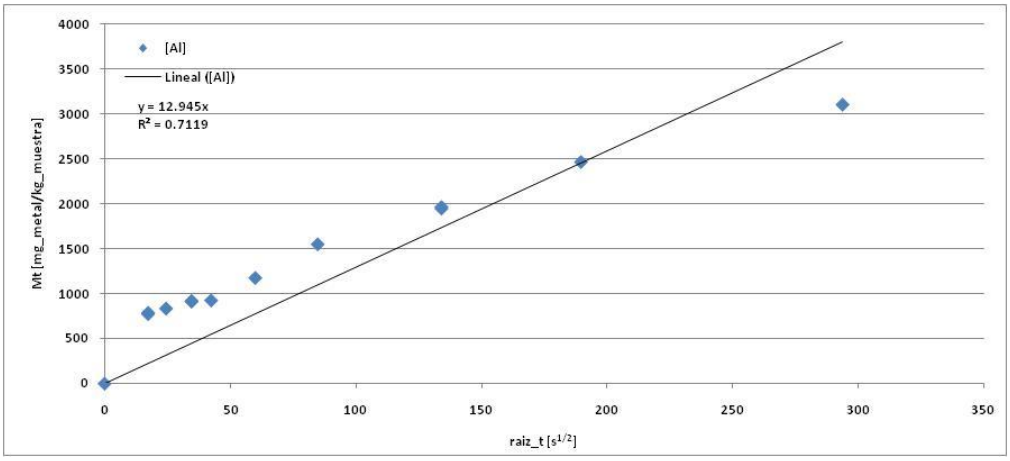

Figura C.14 MUESTRA M4: Concentración experimental de Al en función de √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

En este caso concreto, donde la concentración extraída por EDTA en el equilibrio se ha excluido del estudio al ser un error de medida, se ha tomado como M∞ (para el posterior cálculo de k_d) la concentración a las 10 horas de agitación.

t agitación [horas]	(t agitación)$^{1/2}$ [$s^{1/2}$]	[Al]_exp [mg/kg]
0	0	0
0.08	17.3	54.420
0.17	24.5	60.443
0.33	34.6	60.789
0.5	42.4	67.497
1	60.0	70.590
2	84.9	71.360
5	134.2	74.438
5	134.2	74.725
10	189.7	80.443
	M∞ (mg/kg)	80.443

Tabla C.15 MUESTRA M5: Concentración experimental de Al y √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

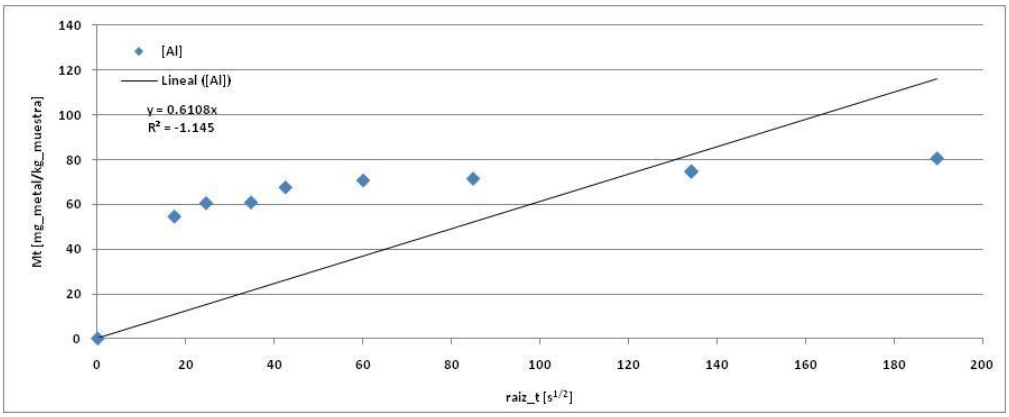

Figura C.15 MUESTRA M5: Concentración experimental de Al en función de √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

C.1.4. Hierro

t agitación [horas]	(t agitación)$^{1/2}$ [$s^{1/2}$]	[Fe]_exp [mg/kg]
0	0	0
0.08	17.3	620.594
0.17	24.5	655.368
0.33	34.6	641.611
0.5	42.4	572.250
1	60.0	665.721
1	60.0	667.367
2	84.9	914.196
2	84.9	888.324
5	134.2	1233.220
10	189.7	1688.927
24	293.9	2791.563

Tabla C.16 MUESTRA M1: Concentración experimental de Fe y √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

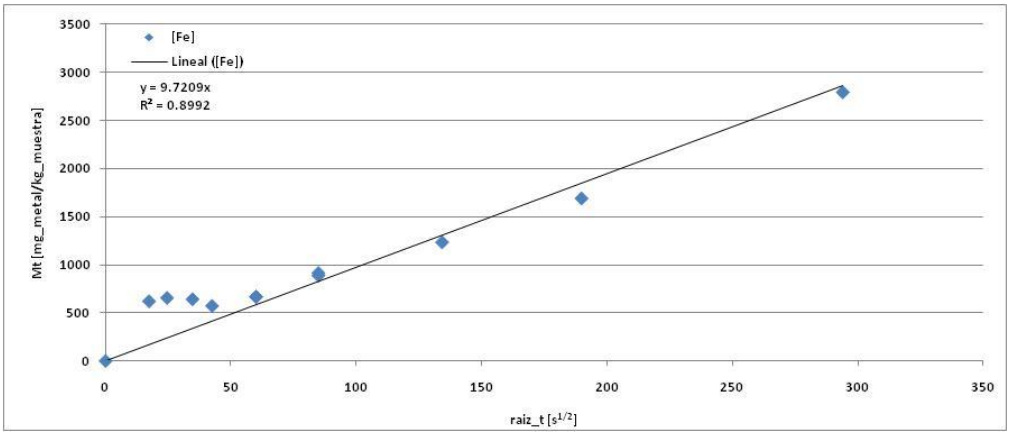

Figura C.16 MUESTRA M1: Concentración experimental de Fe en función de √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

t agitación [horas]	(t agitación)$^{1/2}$ [$s^{1/2}$]	[Fe]_exp [mg/kg]
0	0	0
0.08	17.3	516.587
0.17	24.5	539.197
0.33	34.6	548.906
0.5	42.4	512.725
1	60.0	619.039
1	60.0	626.027
2	84.9	852.340
5	134.2	1211.327
10	189.7	1718.952
24	293.9	2645.993
24	293.9	2606.560
	M∞ (mg/kg)	2626.277

Tabla C.17 MUESTRA M2: Concentración experimental de Fe y √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

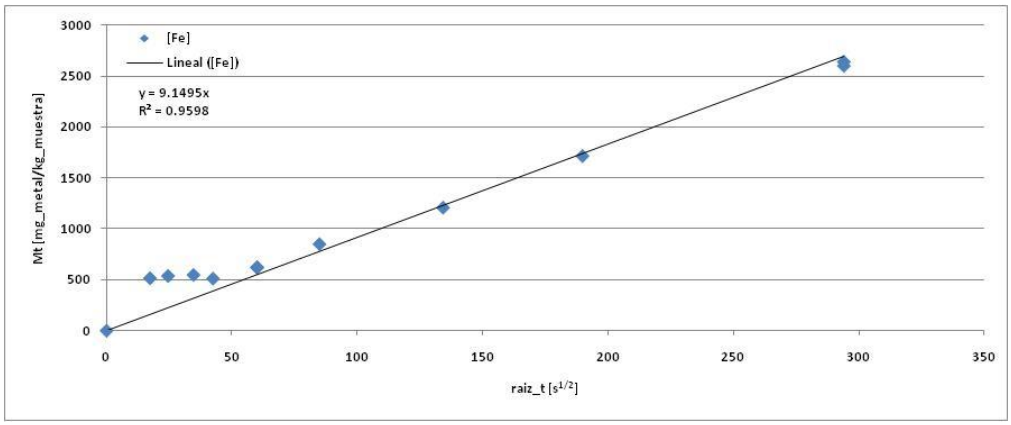

Figura C.17 MUESTRA M2: Concentración experimental de Fe en función de √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

t agitación [horas]	(t agitación)$^{1/2}$ [$s^{1/2}$]	[Fe]_exp [mg/kg]
0	0	0
0.08	17.3	270.142
0.17	24.5	313.270
0.17	24.5	305.457
0.33	34.6	268.596
0.5	42.4	228.232
1	60.0	284.266
2	84.9	415.981
2	84.9	422.570
5	134.2	584.845
10	189.7	882.000
24	293.9	1358.170

Tabla C.18 MUESTRA M3: Concentración experimental de Fe y √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

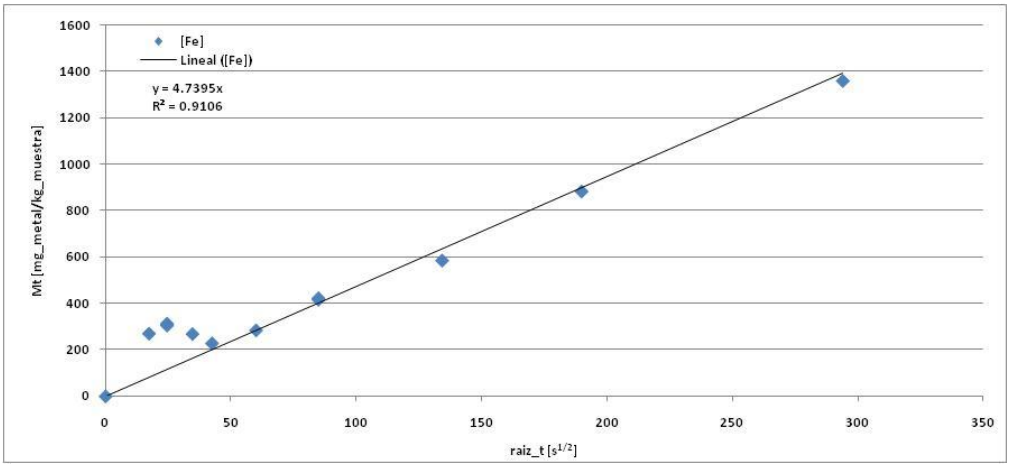

Figura C.18 MUESTRA M3: Concentración experimental de Fe en función de √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

t agitación [horas]	(t agitación)$^{1/2}$ [$s^{1/2}$]	[Fe]_exp [mg/kg]
0	0	0
0.08	17.3	953.617
0.08	17.3	971.431
0.17	24.5	1008.211
0.33	34.6	1062.200
0.33	34.6	1070.595
0.5	42.4	951.215
1	60.0	1299.713
2	84.9	2048.774
5	134.2	3092.507
5	134.2	3115.546
10	189.7	4688.416
24	293.9	6694.101

Tabla C.19 MUESTRA M4: Concentración experimental de Fe y √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

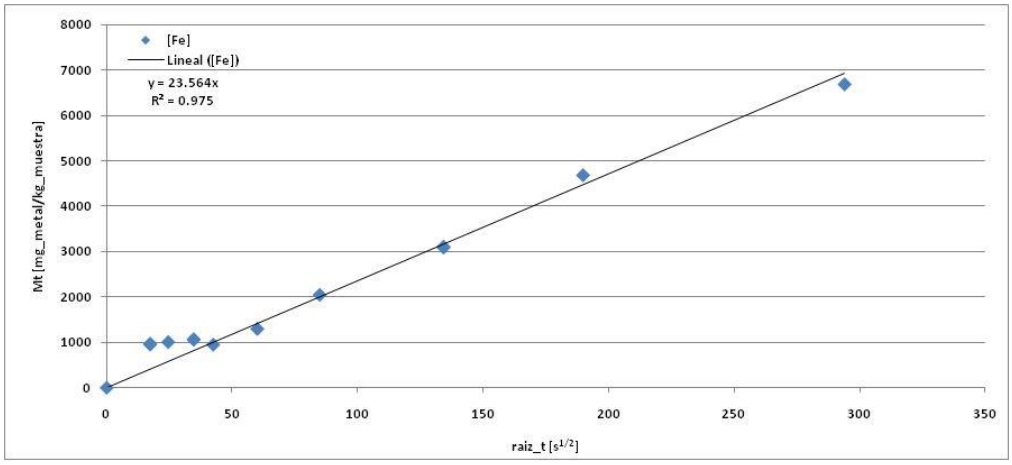

Figura C.19 MUESTRA M4: Concentración experimental de Fe en función de √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

t agitación [horas]	(t agitación)$^{1/2}$ [$s^{1/2}$]	[Fe]_exp [mg/kg]
0	0	0
0.08	17.3	280.906
0.17	24.5	298.343
0.33	34.6	295.701
0.5	42.4	321.658
1	60.0	333.233
2	84.9	342.907
5	134.2	368.869
5	134.2	372.981
10	189.7	408.657
24	293.9	496.009

Tabla C.20 MUESTRA M5: Concentración experimental de Fe y √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

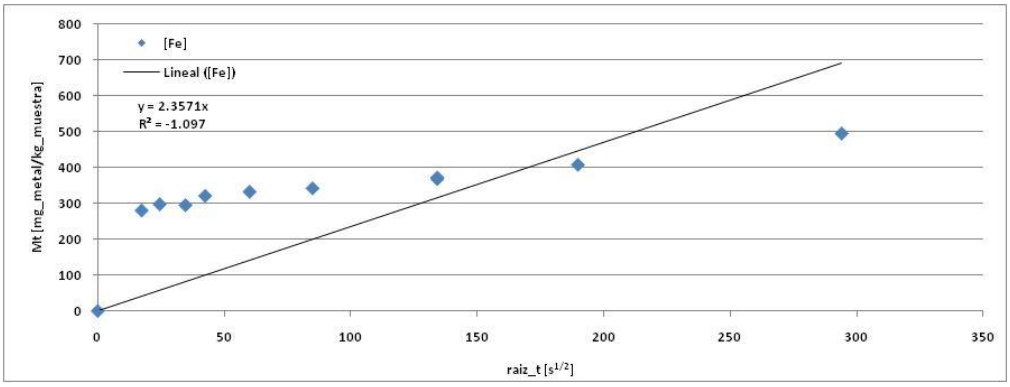

Figura C.20 MUESTRA M5: Concentración experimental de Fe en función de √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

C.1.5. Cadmio

t agitación [horas]	(t agitación)$^{1/2}$ [$s^{1/2}$]	[Cd]_exp [mg/kg]
0	0	0
0.08	17.3	0.544
0.17	24.5	0.581
0.33	34.6	0.575
0.5	42.4	0.569
1	60.0	0.601
1	60.0	0.593
2	84.9	0.603
2	84.9	0.616
5	134.2	0.647
10	189.7	0.664
24	293.9	0.710

Tabla C.21 MUESTRA M1: Concentración experimental de Cd y √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

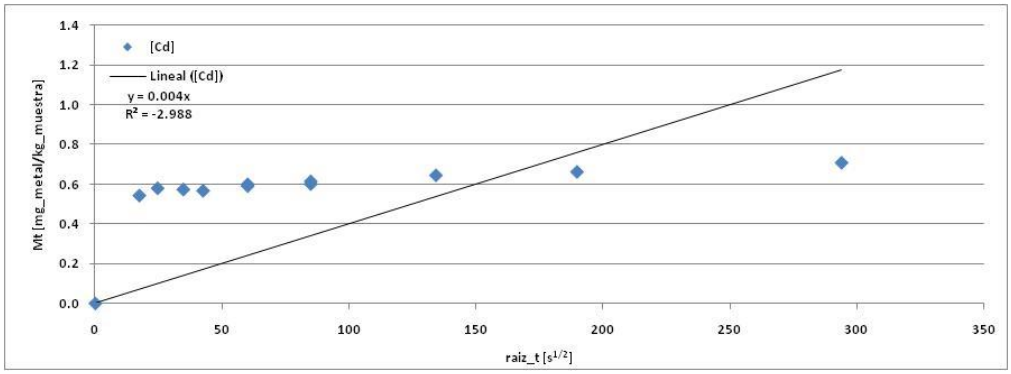

Figura C.21 MUESTRA M1: Concentración experimental de Cd en función de √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

t agitación [horas]	(t agitación)$^{1/2}$ [$s^{1/2}$]	[Cd]_exp [mg/kg]
0	0	0
0.08	17.3	0.183
0.17	24.5	0.189
0.33	34.6	0.195
0.5	42.4	0.176
1	60.0	0.188
2	84.9	0.184
5	134.2	0.196
10	189.7	0.201
24	293.9	0.222
24	293.9	0.210
	M∞ (mg/kg)	0.216

Tabla C.22 MUESTRA M2: Concentración experimental de Cd y √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

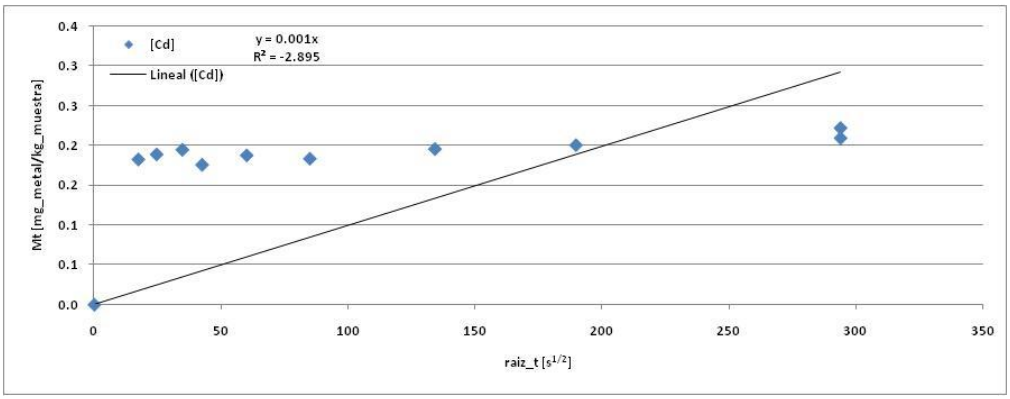

Figura C.22 MUESTRA M2: Concentración experimental de Cd en función de √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

t agitación [horas]	(t agitación)$^{1/2}$ [$s^{1/2}$]	[Cd]_exp [mg/kg]
0	0	0
0.08	17.3	0.495
0.17	24.5	0.510
0.33	34.6	0.516
0.5	42.4	0.488
1	60.0	0.515
2	84.9	0.524
2	84.9	0.539
5	134.2	0.577
10	189.7	0.629
24	293.9	0.655

Tabla C.23 MUESTRA M3: Concentración experimental de Cd y √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

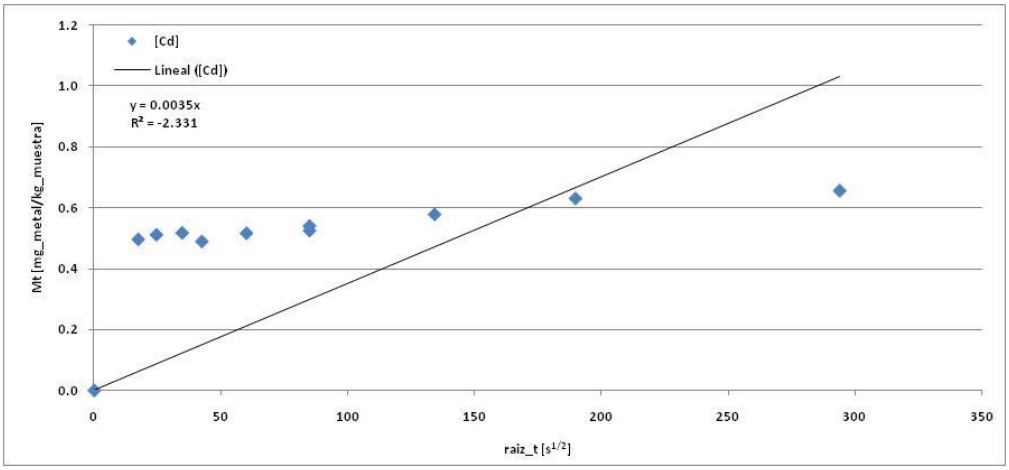

Figura C.23 MUESTRA M3: Concentración experimental de Cd en función de √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

t agitación [horas]	(t agitación)$^{1/2}$ [$s^{1/2}$]	[Cd]_exp [mg/kg]
0	0	0
0.08	17.3	6.544
0.08	17.3	6.479
0.17	24.5	6.478
0.33	34.6	6.478
0.33	34.6	6.500
0.5	42.4	6.484
1	60.0	6.720
2	84.9	6.898
5	134.2	6.999
5	134.2	6.995
10	189.7	7.368
24	293.9	7.837

Tabla C.24 MUESTRA M4: Concentración experimental de Cd y √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

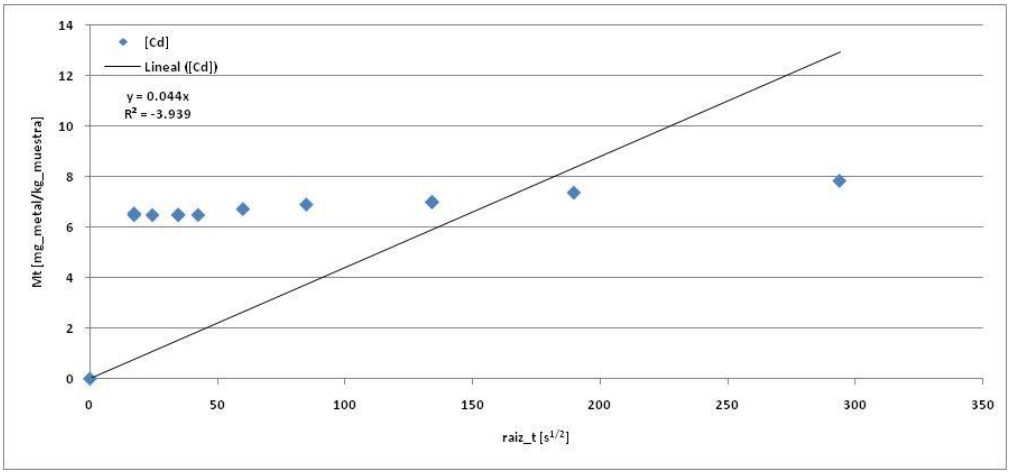

Figura C.24 MUESTRA M4: Concentración experimental de Cd en función de √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

t agitación [horas]	(t agitación)$^{1/2}$ [$s^{1/2}$]	[Cd]_exp [mg/kg]
0	0	0
0.08	17.3	0.598
0.17	24.5	0.625
0.33	34.6	0.612
0.5	42.4	0.606
1	60.0	0.626
2	84.9	0.644
5	134.2	0.694
5	134.2	0.688
10	189.7	0.724
24	293.9	0.793

Tabla C.25 MUESTRA M5: Concentración experimental de Cd y √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

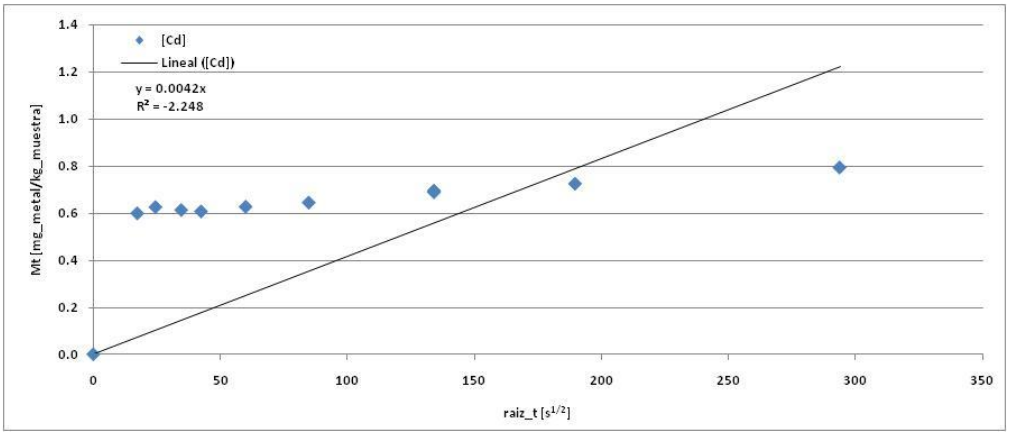

Figura C.25 MUESTRA M5: Concentración experimental de Cd en función de √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

C.1.6. Mercurio

t agitación [horas]	(t agitación)$^{1/2}$ [$s^{1/2}$]	[Hg]_exp [mg/kg]
0	0	0
0.08	17.3	0.012
0.17	24.5	0.012
0.5	42.4	0.018
1	60.0	0.019
2	84.9	0.019
2	84.9	0.019
5	134.2	0.027
24	293.9	0.030

Tabla C.26 MUESTRA M1: Concentración experimental de Hg y √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

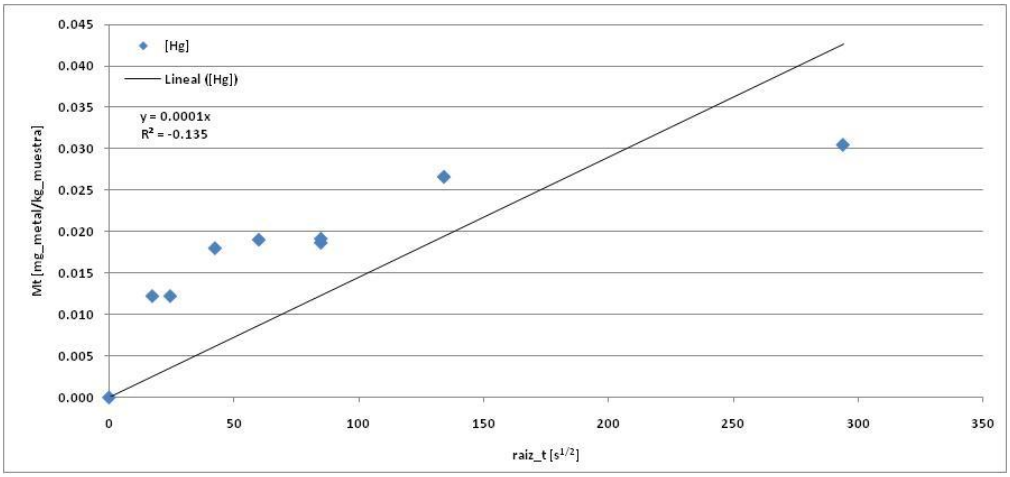

Figura C.26 MUESTRA M1: Concentración experimental de Hg en función de √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

t agitación [horas]	(t agitación)$^{1/2}$ [$s^{1/2}$]	[Hg]_exp [mg/kg]
0	0	0
0.08	17.3	0.003
0.17	24.5	0.003
0.33	34.6	0.006
0.5	42.4	0.006
1	60.0	0.005
1	60.0	0.003
2	84.9	0.005
5	134.2	0.009
10	189.7	0.008
24	293.9	0.013
24	293.9	0.015
	M∞ (mg/kg)	0.014

Tabla C.27 MUESTRA M2: Concentración experimental de Hg y √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

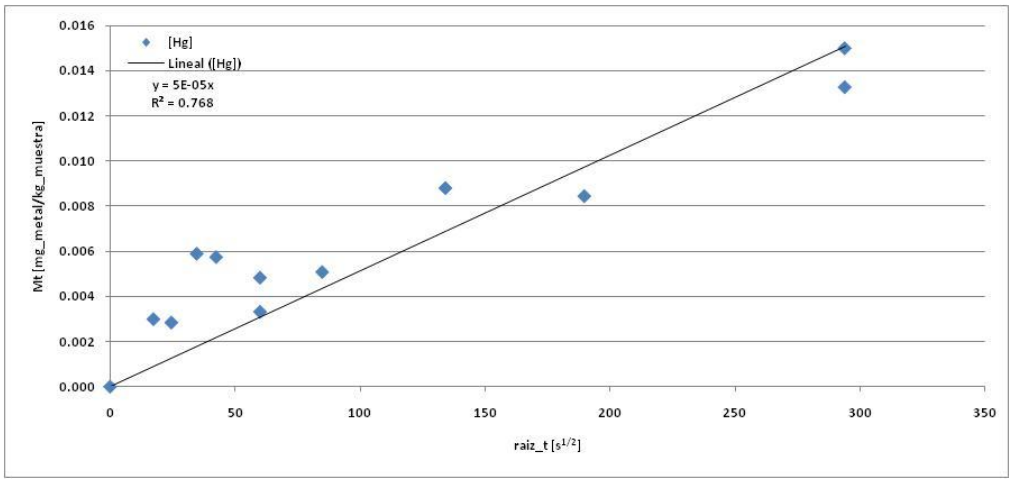

Figura C.27 MUESTRA M2: Concentración experimental de Hg en función de √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

t agitación [horas]	(t agitación)$^{1/2}$ [$s^{1/2}$]	[Hg]_exp [mg/kg]
0	0	0
0.08	17.3	0.047
0.17	24.5	0.061
0.17	24.5	0.064
0.5	42.4	0.067
1	60.0	0.070
2	84.9	0.075
2	84.9	0.073
5	134.2	0.095
24	293.9	0.114

Tabla C.28 MUESTRA M3: Concentración experimental de Hg y √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

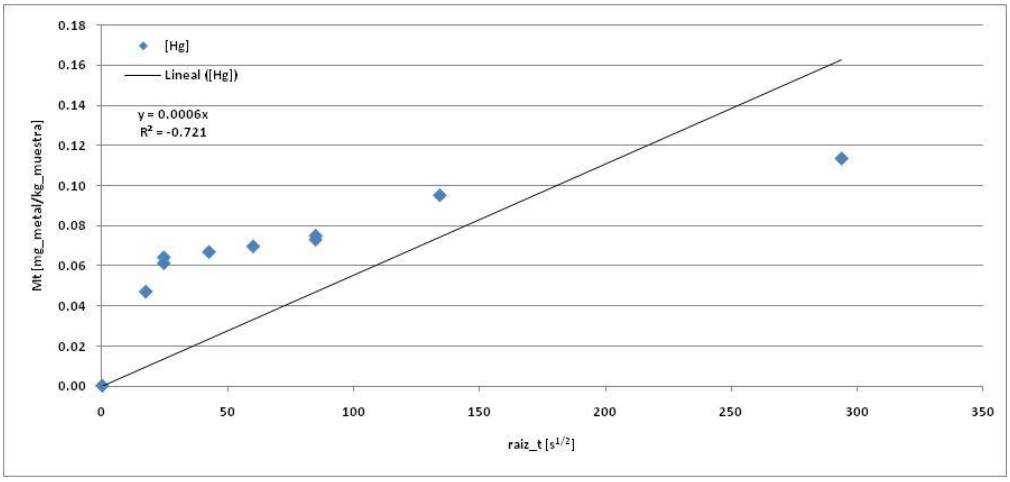

Figura C.28 MUESTRA M3: Concentración experimental de Hg en función de √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

t agitación [horas]	(t agitación)$^{1/2}$ [$s^{1/2}$]	[Hg]_exp [mg/kg]
0	0	0
0.08	17.3	0.0022
0.08	17.3	0.0020
0.17	24.5	0.0030
0.33	34.6	0.0062
0.33	34.6	0.0054
0.5	42.4	0.0063
1	60.0	0.0028
2	84.9	0.0053
5	134.2	0.0093
10	189.7	0.0091
24	293.9	0.0133

Tabla C.29 MUESTRA M4: Concentración experimental de Hg y √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

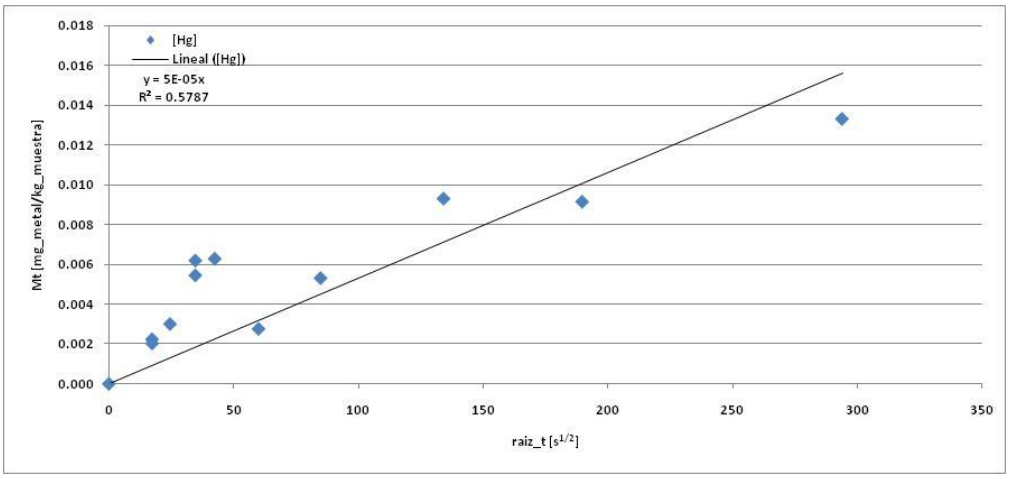

Figura C.29 MUESTRA M4: Concentración experimental de Hg en función de √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

C.1.7. Plomo

t agitación [horas]	(t agitación)$^{1/2}$ [$s^{1/2}$]	[Pb]_exp [mg/kg]
0	0	0
0.08	17.3	2.961
0.17	24.5	3.125
0.33	34.6	3.159
0.5	42.4	3.077
1	60.0	3.358
1	60.0	3.202
2	84.9	3.568
2	84.9	3.530
5	134.2	4.412
10	189.7	4.478
24	293.9	5.561

Tabla C.30 MUESTRA M1: Concentración experimental de Pb y √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

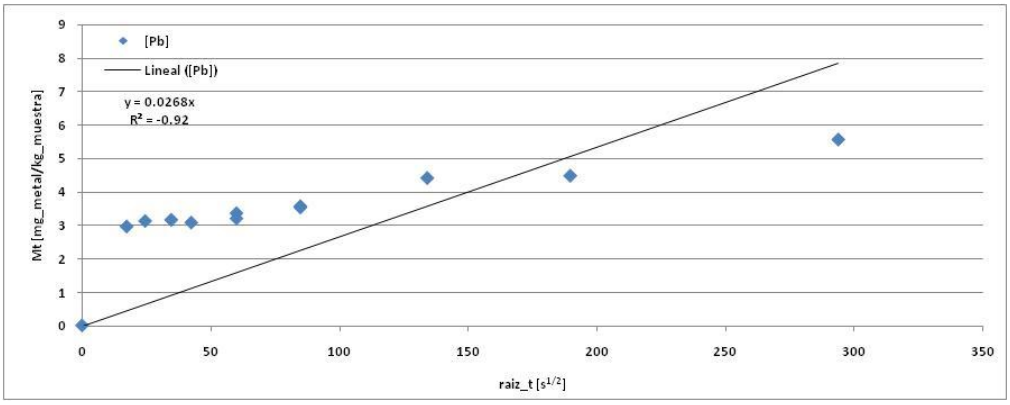

Figura C.30 MUESTRA M1: Concentración experimental de Pb en función de √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

t agitación [horas]	(t agitación)$^{1/2}$ [$s^{1/2}$]	[Pb]_exp [mg/kg]
0	0	0
0.08	17.3	2.371
0.17	24.5	2.378
0.33	34.6	2.553
0.5	42.4	2.426
1	60.0	2.597
1	60.0	2.693
2	84.9	2.802
5	134.2	3.253
10	189.7	3.542
24	293.9	4.751
24	293.9	4.159
	M∞ (mg/kg)	4.455

Tabla C.31 MUESTRA M2: Concentración experimental de Pb y √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

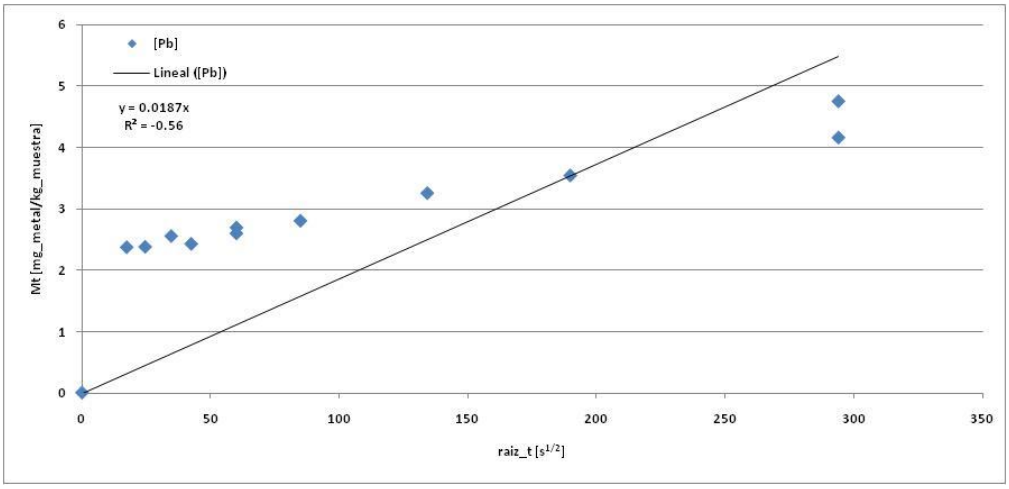

Figura C.31 MUESTRA M2: Concentración experimental de Hg en función de √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

t agitación [horas]	(t agitación)$^{1/2}$ [$s^{1/2}$]	[Pb]_exp [mg/kg]
0	0	0
0.08	17.3	47.584
0.17	24.5	50.097
0.17	24.5	49.660
0.33	34.6	47.393
0.5	42.4	45.650
1	60.0	50.658
2	84.9	59.532
2	84.9	59.781
5	134.2	69.678
10	189.7	78.054
24	293.9	90.182

Tabla C.32 MUESTRA M3: Concentración experimental de Pb y √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

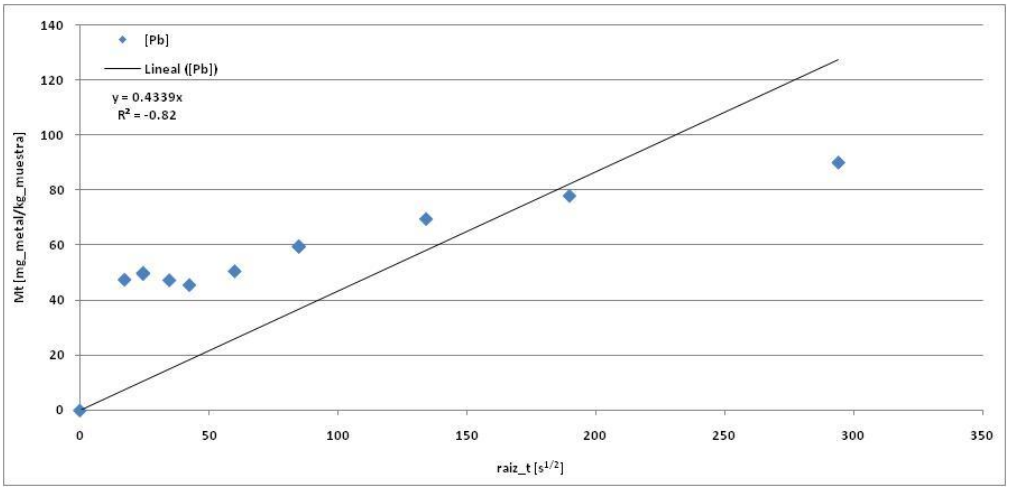

Figura C.32 MUESTRA M3: Concentración experimental de Hg en función de √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

t agitación [horas]	(t agitación)$^{1/2}$ [$s^{1/2}$]	[Pb]_exp [mg/kg]
0	0	0
0.08	17.3	9.027
0.08	17.3	8.550
0.17	24.5	8.781
0.33	34.6	8.370
0.33	34.6	8.392
0.5	42.4	8.146
1	60.0	8.995
2	84.9	11.123
5	134.2	13.179
5	134.2	13.614
10	189.7	15.848
24	293.9	18.726

Tabla C.33 MUESTRA M4: Concentración experimental de Pb y √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

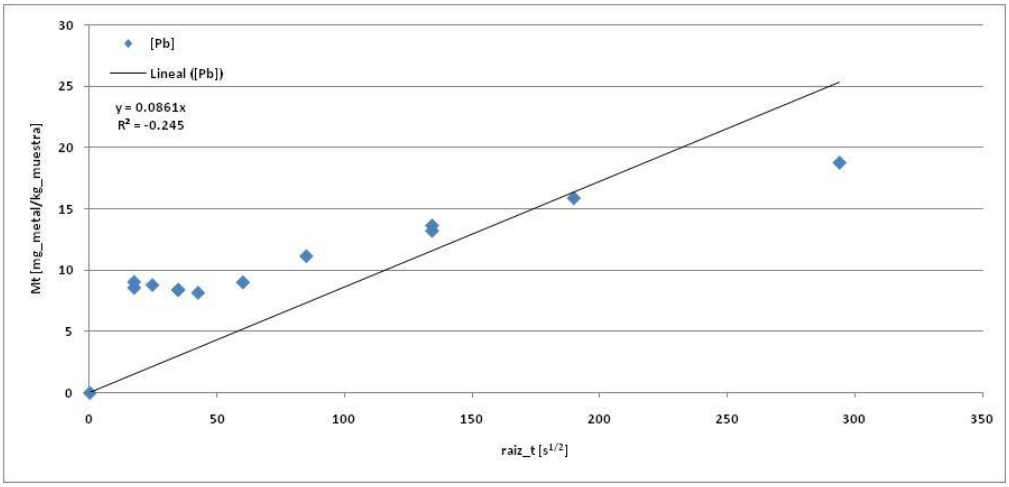

Figura C.33 MUESTRA M4: Concentración experimental de Hg en función de √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

C.1.8. Cromo

t agitación [horas]	(t agitación)$^{1/2}$ [$s^{1/2}$]	[Cr]_exp [mg/kg]
0	0	0
0.08	17.3	0.003
0.33	34.6	0.047
0.5	42.4	0.029
2	84.9	0.073
2	84.9	0.052
24	293.9	0.143

Tabla C.34 MUESTRA M1: Concentración experimental de Cr y √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

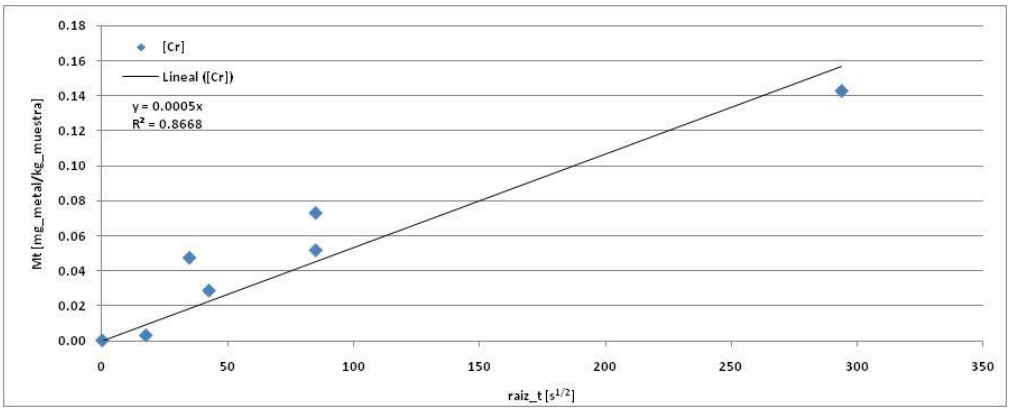

Figura C.34 MUESTRA M1: Concentración experimental de Cr en función de √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

t agitación [horas]	(t agitación)$^{1/2}$ [$s^{1/2}$]	[Cr]_exp [mg/kg]
0	0	0
0.08	17.3	0.038
0.33	34.6	0.025
0.5	42.4	0.144
1	60.0	0.081
1	60.0	0.095
2	84.9	0.174
10	189.7	0.267
24	293.9	0.365
24	293.9	0.323
	M∞ (mg/kg)	0.344

Tabla C.35 MUESTRA M2: Concentración experimental de Cr y √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

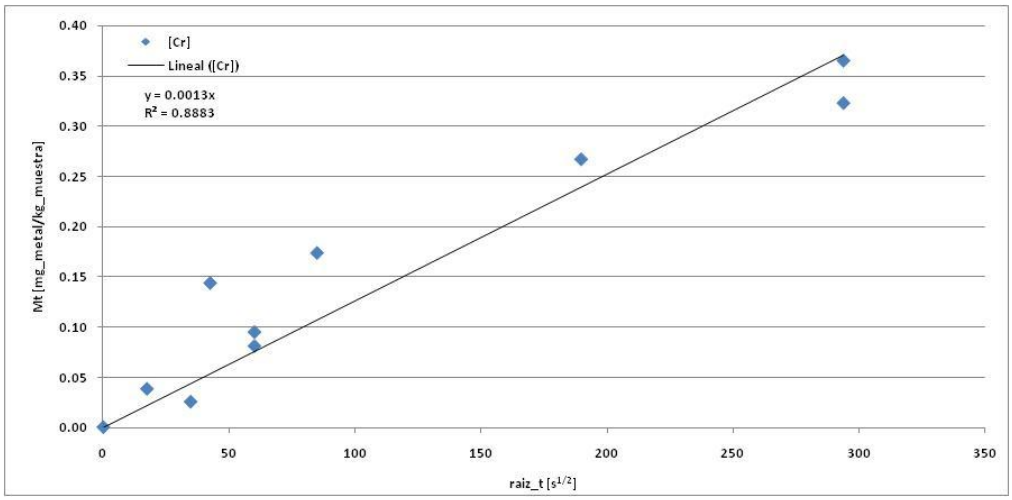

Figura C.35 MUESTRA M2: Concentración experimental de Cr en función de √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

t agitación [horas]	(t agitación)$^{1/2}$ [$s^{1/2}$]	[Cr]_exp [mg/kg]
0	0	0
0.17	24.5	0.058
0.33	34.6	0.068
0.5	42.4	0.058
1	60.0	0.116
2	84.9	0.076
2	84.9	0.054
10	189.7	0.166
24	293.9	0.266

Tabla C.36 MUESTRA M3: Concentración experimental de Cr y √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

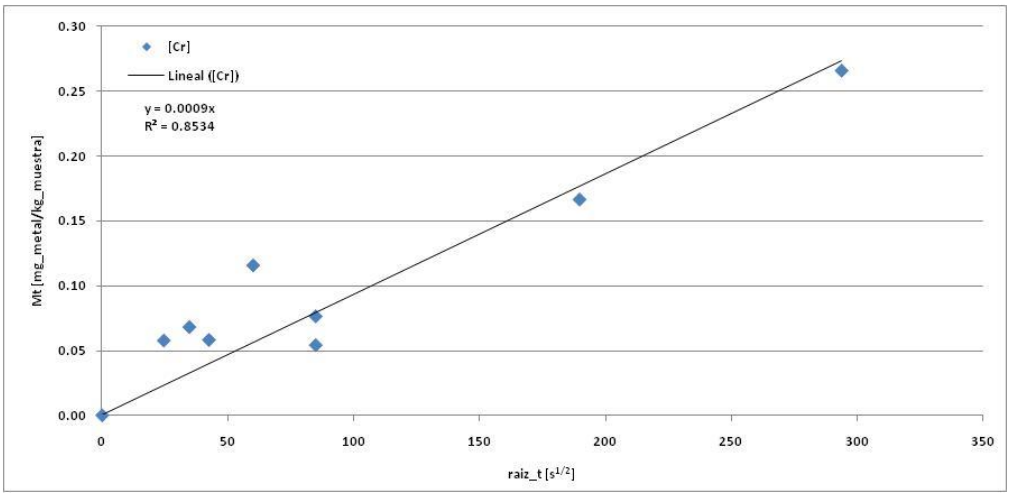

Figura C.36 MUESTRA M3: Concentración experimental de Cr en función de √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

t agitación [horas]	(t agitación)$^{1/2}$ [$s^{1/2}$]	[Cr]_exp [mg/kg]
0	0	0
0.08	17.3	0.240
0.08	17.3	0.327
0.17	24.5	0.319
0.33	34.6	0.287
0.33	34.6	0.233
0.5	42.4	0.284
1	60.0	0.295
5	134.2	0.370
5	134.2	0.421
10	189.7	0.456
24	293.9	0.573

Tabla C.37 MUESTRA M4: Concentración experimental de Cr y √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

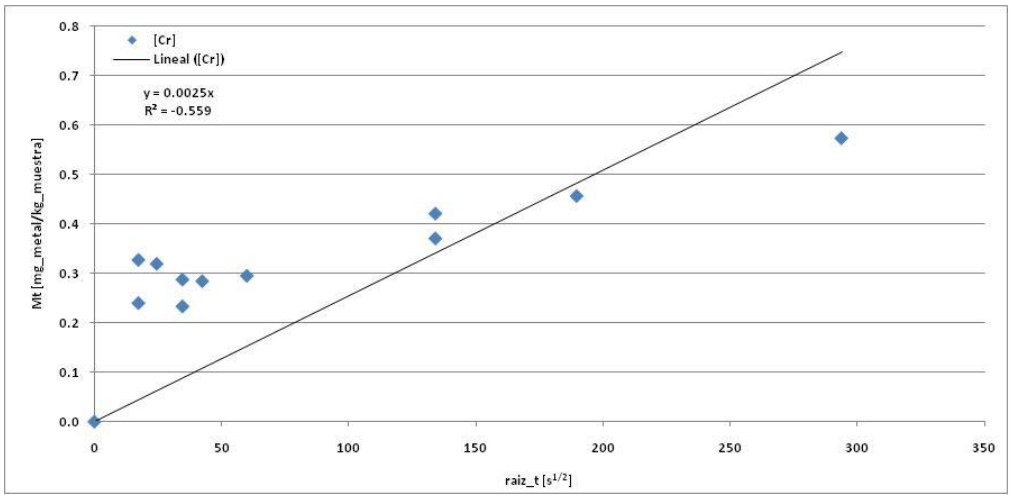

Figura C.37 MUESTRA M4: Concentración experimental de Cr en función de √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

C.1.9. Arsénico

t agitación [horas]	(t agitación)$^{1/2}$ [$s^{1/2}$]	[As]_exp [mg/kg]
0	0	0
0.08	17.3	0.252
0.17	24.5	0.268
0.33	34.6	0.272
0.5	42.4	0.305
1	60.0	0.314
1	60.0	0.313
2	84.9	0.343
2	84.9	0.340
5	134.2	0.432
10	189.7	0.467
24	293.9	0.504

Tabla C.38 MUESTRA M1: Concentración experimental de As y √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

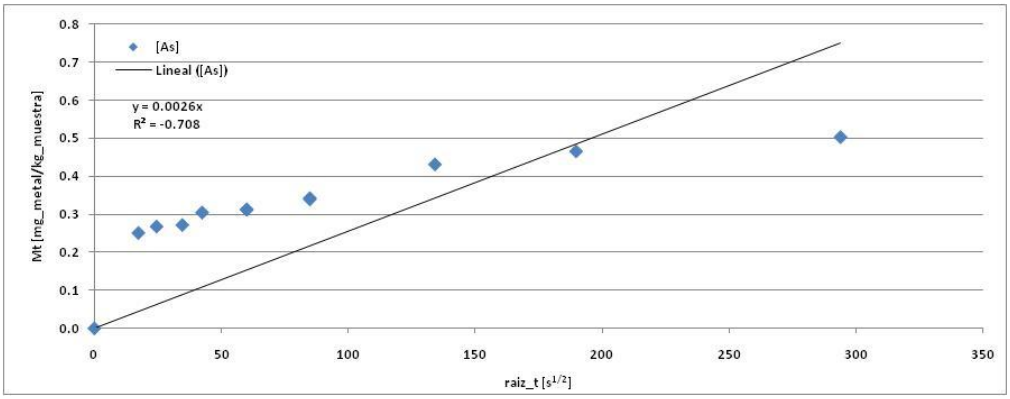

Figura C.38 MUESTRA M1: Concentración experimental de As en función de √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

t agitación [horas]	(t agitación)$^{1/2}$ [$s^{1/2}$]	[As]_exp [mg/kg]
0	0	0
0.08	17.3	0.540
0.17	24.5	0.646
0.33	34.6	0.699
0.5	42.4	0.735
1	60.0	0.776
1	60.0	0.789
2	84.9	0.980
5	134.2	1.494
10	189.7	2.074
24	293.9	3.174
24	293.9	3.088
	M∞ (mg/kg)	3.131

Tabla C.39 MUESTRA M2: Concentración experimental de As y √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

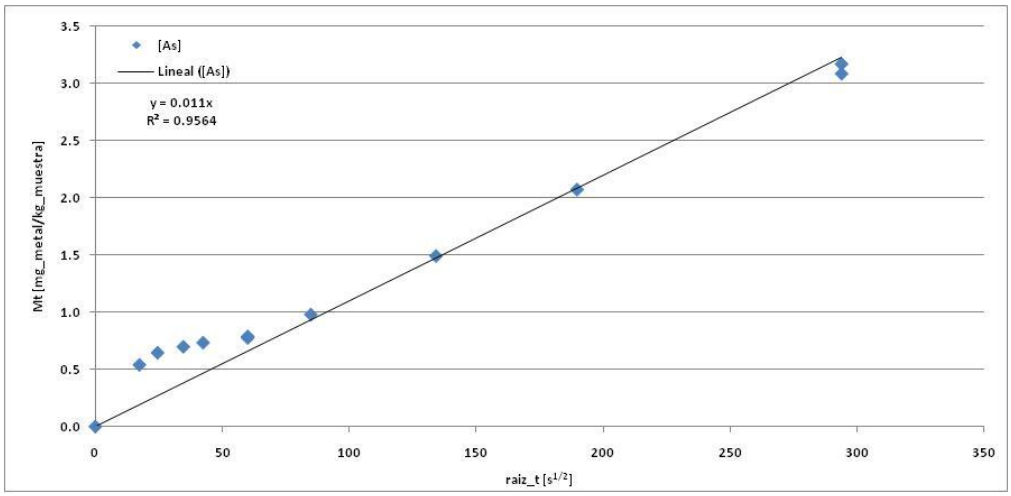

Figura C.39 MUESTRA M2: Concentración experimental de As en función de √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

t agitación [horas]	(t agitación)$^{1/2}$ [$s^{1/2}$]	[As]_exp [mg/kg]
0	0	0
0.08	17.3	2.049
0.17	24.5	2.199
0.17	24.5	2.288
0.33	34.6	2.327
0.5	42.4	2.452
1	60.0	2.543
2	84.9	2.573
2	84.9	2.571
5	134.2	2.923
10	189.7	3.344
24	293.9	3.861

Tabla C.40 MUESTRA M3: Concentración experimental de As y √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

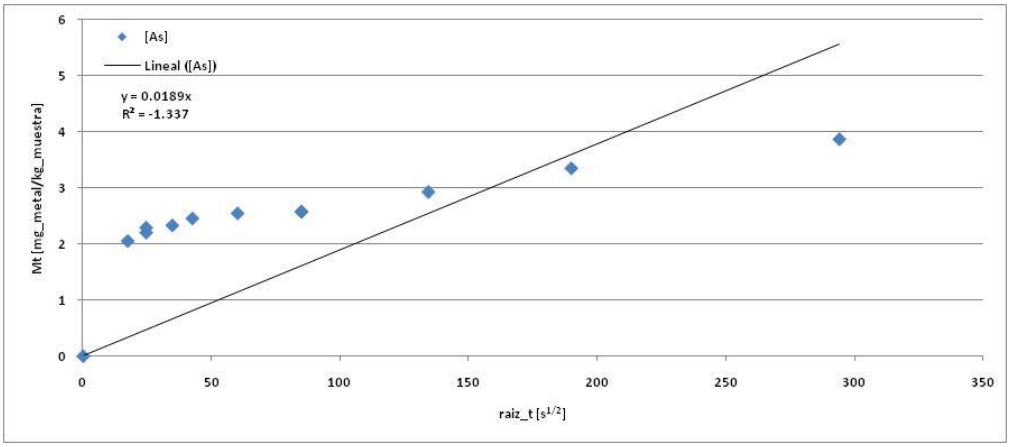

Figura C.40 MUESTRA M3: Concentración experimental de As en función de √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

t agitación [horas]	(t agitación)$^{1/2}$ [$s^{1/2}$]	[As]_exp [mg/kg]
0	0	0
0.08	17.3	0.997
0.08	17.3	1.019
0.17	24.5	1.140
0.33	34.6	1.213
0.33	34.6	1.260
0.5	42.4	1.294
1	60.0	1.437
2	84.9	1.783
5	134.2	2.617
5	134.2	2.654
10	189.7	3.705
24	293.9	5.391

Tabla C.41 MUESTRA M4: Concentración experimental de As y √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

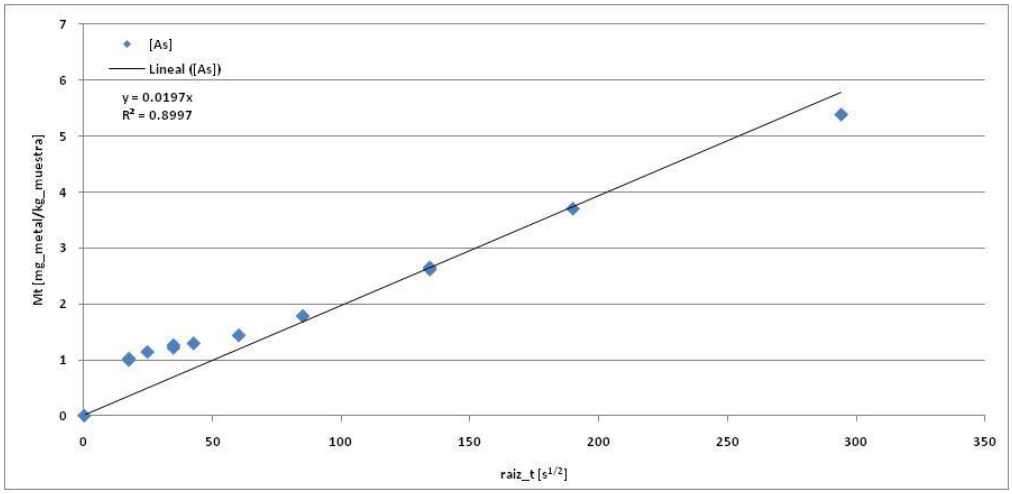

Figura C.41 MUESTRA M4: Concentración experimental de As en función de √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

C.1.10. Níquel

t agitación [horas]	(t agitación)$^{1/2}$ [$s^{1/2}$]	[Ni]_exp [mg/kg]
0	0	0
0.08	17.3	0.621
0.17	24.5	0.485
0.33	34.6	0.452
0.5	42.4	0.448
1	60.0	0.501
1	60.0	0.474
2	84.9	0.594
2	84.9	0.556
5	134.2	0.781
10	189.7	1.073
24	293.9	1.884

Tabla C.42 MUESTRA M1: Concentración experimental de Ni y √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

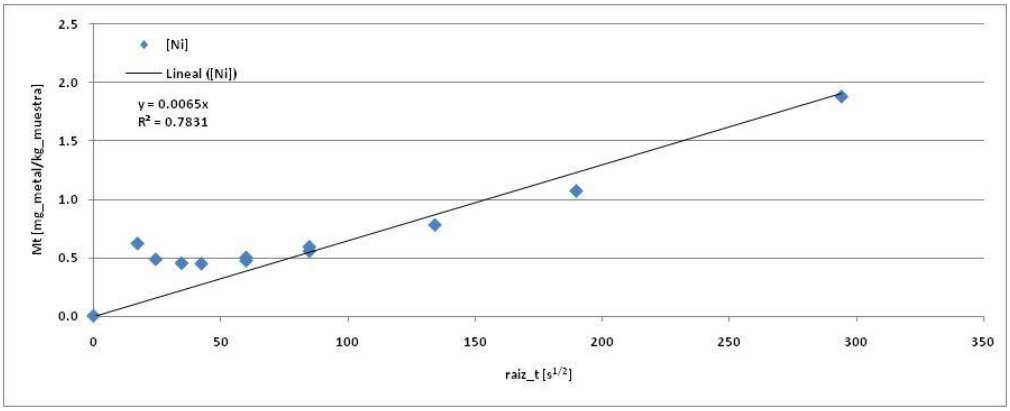

Figura C.42 MUESTRA M1: Concentración experimental de Ni en función de √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

t agitación [horas]	(t agitación)$^{1/2}$ [$s^{1/2}$]	[Ni]_exp [mg/kg]
0	0	0
0.08	17.3	0.444
0.17	24.5	0.462
0.5	42.4	0.531
1	60.0	0.507
1	60.0	0.501
2	84.9	0.626
5	134.2	0.895
10	189.7	1.137
24	293.9	1.700
24	293.9	1.672
	M∞ (mg/kg)	1.686

Tabla C.43 MUESTRA M2: Concentración experimental de Ni y √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

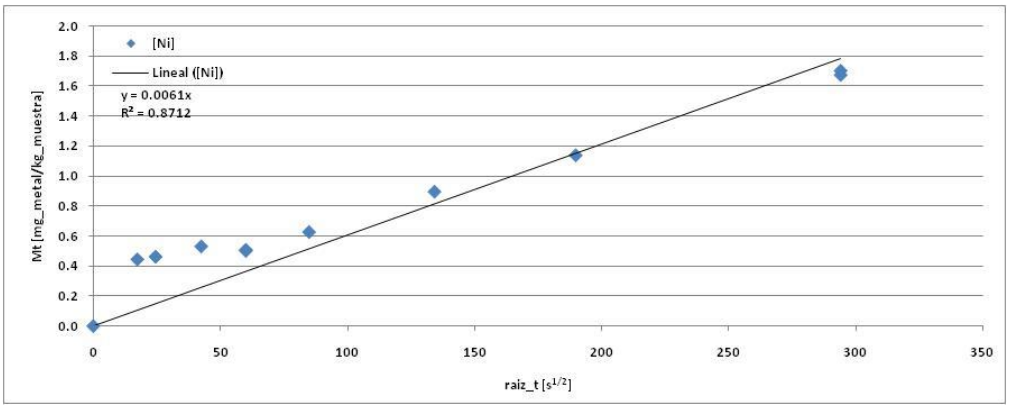

Figura C.43 MUESTRA M2: Concentración experimental de Ni en función de √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

t agitación [horas]	(t agitación)$^{1/2}$ [$s^{1/2}$]	[Ni]_exp [mg/kg]
0	0	0
0.08	17.3	0.097
0.17	24.5	0.114
0.33	34.6	0.109
0.5	42.4	0.111
1	60.0	0.152
2	84.9	0.184
2	84.9	0.174
5	134.2	0.222
10	189.7	0.343
24	293.9	0.464

Tabla C.44 MUESTRA M3: Concentración experimental de Ni y √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

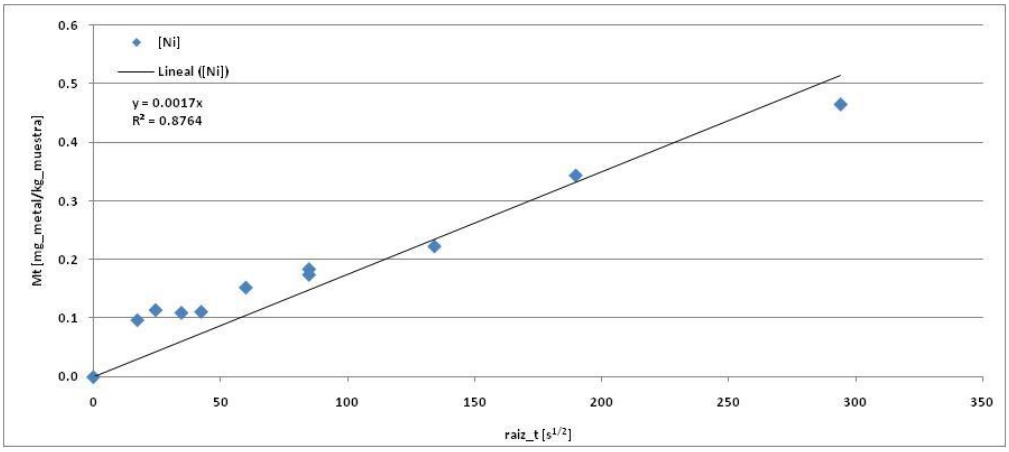

Figura C.44 MUESTRA M3: Concentración experimental de Ni en función de √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

t agitación [horas]	(t agitación)$^{1/2}$ [$s^{1/2}$]	[Ni]_exp [mg/kg]
0	0	0
0.08	17.3	1.097
0.08	17.3	1.250
0.17	24.5	1.180
0.33	34.6	1.272
0.33	34.6	1.296
0.5	42.4	1.233
1	60.0	1.276
2	84.9	1.482
5	134.2	1.820
5	134.2	1.816
10	189.7	2.113
24	293.9	2.617

Tabla C.45 MUESTRA M4: Concentración experimental de Ni y √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

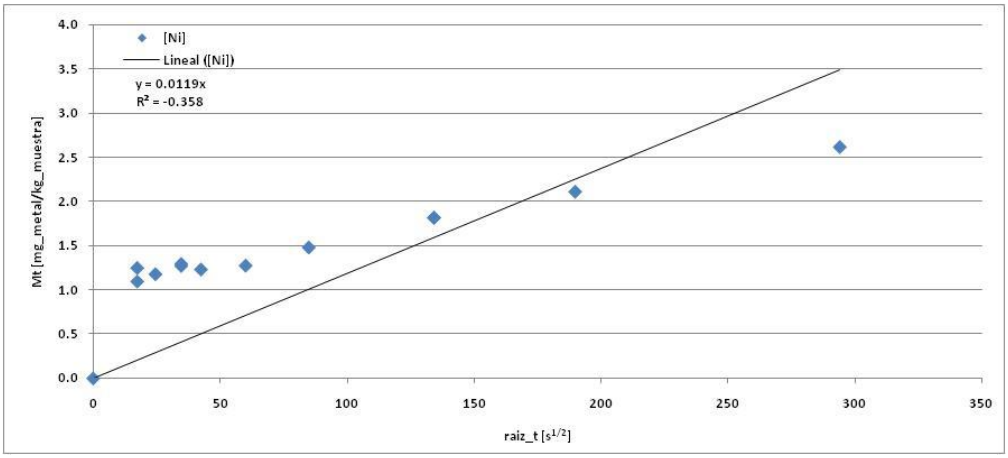

Figura C.45 MUESTRA M4: Concentración experimental de Ni en función de √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

t agitación [horas]	(t agitación)$^{1/2}$ [$s^{1/2}$]	[Ni]_exp [mg/kg]
0	0	0
0.08	17.3	0.265
0.17	24.5	0.245
0.33	34.6	0.230
0.5	42.4	0.227
1	60.0	0.209
2	84.9	0.229
5	134.2	0.277
5	134.2	0.279
10	189.7	0.320
24	293.9	0.489

Tabla C.46 MUESTRA M5: Concentración experimental de Ni y √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

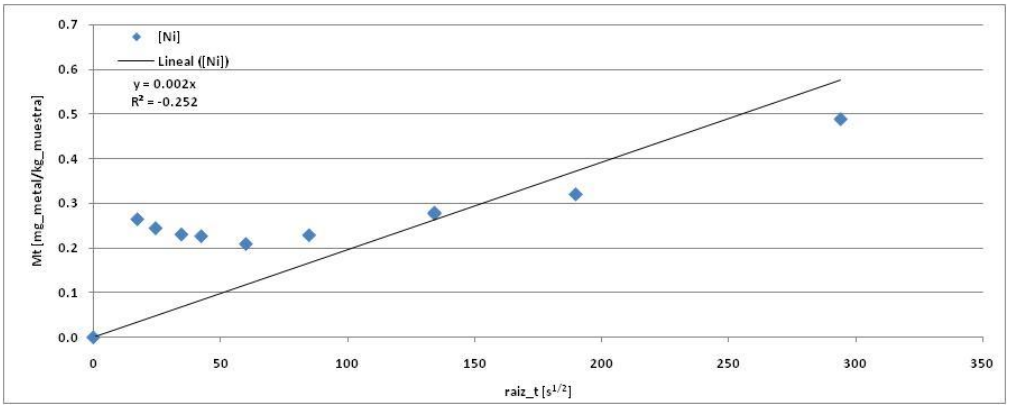

Figura C.46 MUESTRA M5: Concentración experimental de Ni en función de √t para el cálculo de la k_d y D del modelo de difusión

Por tanto, a partir de la pendiente de la recta de regresión y la $M\infty$ (Ec. C.1), se calculan las k_d de cada metal y muestra. Estos valores quedan recogidos en la Tabla C.47 :

k_d [$s^{-1/2}$]	Zn	Cu	Al	Fe	Cd	Hg	Pb	Cr	As	Ni
M1	$3.5\cdot10^{-03}$	$4.8\cdot10^{-03}$	$3.9\cdot10^{-03}$	$3.5\cdot10^{-03}$	$5.6\cdot10^{-03}$	$3.3\cdot10^{-03}$	$4.8\cdot10^{-03}$	$3.5\cdot10^{-03}$	$5.2\cdot10^{-03}$	$3.4\cdot10^{-03}$
M2	$4.2\cdot10^{-03}$	$4.3\cdot10^{-03}$	$3.8\cdot10^{-03}$	$3.5\cdot10^{-03}$	$4.6\cdot10^{-03}$	$3.5\cdot10^{-03}$	$4.2\cdot10^{-03}$	$3.8\cdot10^{-03}$	$3.5\cdot10^{-03}$	$3.6\cdot10^{-03}$
M3	$4.9\cdot10^{-03}$	$5.0\cdot10^{-03}$	$4.0\cdot10^{-03}$	$3.5\cdot10^{-03}$	$5.3\cdot10^{-03}$	$5.3\cdot10^{-03}$	$4.8\cdot10^{-03}$	$3.4\cdot10^{-03}$	$4.9\cdot10^{-03}$	$3.7\cdot10^{-03}$
M4	$5.0\cdot10^{-03}$	$5.4\cdot10^{-03}$	$4.2\cdot10^{-03}$	$3.5\cdot10^{-03}$	$5.6\cdot10^{-03}$	$3.8\cdot10^{-03}$	$4.6\cdot10^{-03}$	$4.4\cdot10^{-03}$	$3.7\cdot10^{-03}$	$4.5\cdot10^{-03}$
M5	$5.1\cdot10^{-03}$	$5.0\cdot10^{-03}$	$7.6\cdot10^{-03}$	$4.8\cdot10^{-03}$	$5.3\cdot10^{-03}$	-	-	-	-	$4.1\cdot10^{-03}$

Tabla C.47 Valores de k_d calculados para cada metal y muestra

A continuación, a partir de la ecuación (Ec. C.2), se calcula el coeficiente de difusión para cada metal y muestra.

$$k_d = \left(\frac{D}{R^2}\right)^{\frac{1}{2}} \rightarrow D = (k_d \cdot R)^2 \qquad \text{(Ec. C.2)}$$

donde R es el radio de la partícula [m]

En el presente proyecto, como se ha comentado en la memoria, el R de las partículas es de $63\cdot10^{-5}$ m.

Los resultados obtenidos del coeficiente de difusión D [m^2/s] se muestran en la Tabla C.48:

D [m^2/s]	Zn	Cu	Al	Fe	Cd	Hg	Pb	Cr	As	Ni
M1	$4.9\cdot10^{-14}$	$9.0\cdot10^{-14}$	$6.1\cdot10^{-14}$	$4.8\cdot10^{-14}$	$1.3\cdot10^{-13}$	$4.3\cdot10^{-14}$	$9.2\cdot10^{-14}$	$4.9\cdot10^{-14}$	$1.1\cdot10^{-13}$	$4.7\cdot10^{-14}$
M2	$7.1\cdot10^{-14}$	$7.5\cdot10^{-14}$	$5.7\cdot10^{-14}$	$4.8\cdot10^{-14}$	$8.5\cdot10^{-14}$	$5.0\cdot10^{-14}$	$7.0\cdot10^{-14}$	$5.7\cdot10^{-14}$	$4.9\cdot10^{-14}$	$5.2\cdot10^{-14}$
M3	$9.5\cdot10^{-14}$	$9.9\cdot10^{-14}$	$6.5\cdot10^{-14}$	$4.8\cdot10^{-14}$	$1.1\cdot10^{-13}$	$1.1\cdot10^{-13}$	$9.2\cdot10^{-14}$	$4.6\cdot10^{-14}$	$9.5\cdot10^{-14}$	$5.3\cdot10^{-14}$
M4	$1.0\cdot10^{-13}$	$1.1\cdot10^{-13}$	$6.9\cdot10^{-14}$	$4.9\cdot10^{-14}$	$1.3\cdot10^{-13}$	$5.6\cdot10^{-14}$	$8.4\cdot10^{-14}$	$7.6\cdot10^{-14}$	$5.3\cdot10^{-14}$	$8.2\cdot10^{-14}$
M5	$1.0\cdot10^{-13}$	$1.0\cdot10^{-13}$	$2.3\cdot10^{-13}$	$9.0\cdot10^{-14}$	$1.1\cdot10^{-13}$	-	-	-	-	$6.6\cdot10^{-14}$

Tabla C.48 Valores de D calculados para cada metal y muestra

Seguidamente se adjunta la Tabla C.49, donde se pueden observar los valores de R^2 obtenidos en este ajuste:

R^2	Zn	Cu	Al	Fe	Cd	Hg	Pb	Cr	As	Ni
M1	0.87	-0.99	0.78	0.90	-2.99	-0.14	-0.92	0.87	-0.71	0.78
M2	0.03	-0.90	0.81	0.96	-2.90	0.77	-0.56	0.89	0.96	0.87
M3	-0.67	-1.63	0.70	0.91	-2.33	-0.72	-0.82	0.85	-1.34	0.88
M4	-1.61	-2.76	0.71	0.98	-3.94	0.58	-0.25	-0.56	0.90	-0.36
M5	-1.76	-1.93	-1.15	-1.10	-2.25	-	-	-	-	-0.25
PROMEDIO	-0.63	-1.64	0.37	0.53	-2.88	0.12	-0.64	0.51	-0.05	0.38

Tabla C.49 Valores de R^2 por muestra y metal. Modelo de difusión.

Una vez calculada la k_d y utilizando el valor experimental de la $M\infty$, a partir de la ecuación (Ec. C.1) se obtienen los resultados calculados con el modelo de difusión intraparticular así como el error *ARE*.

C.2. Datos experimentales y valores obtenidos por el modelo de difusión intraparticular

C.2.1. Cinc

t agitación [horas]	[Zn]_exp [mg/kg]	[Zn]_calc [mg/kg]
0.08	11.044	3.154
0.17	9.813	4.461
0.33	10.866	6.308
0.5	12.936	7.726
1	15.282	10.926
1	14.411	10.926
2	18.544	15.452
2	14.342	15.452
5	18.795	24.431
24	51.735	53.526
	ARE	0.32

Tabla C.50 MUESTRA M1: Datos experimentales y valores obtenidos a partir del modelo de difusión intraparticular y *ARE* (Average Relative Error) para el cinc.

t agitación [horas]	[Zn]_exp [mg/kg]	[Zn]_calc [mg/kg]
0.08	17.420	2.913
0.17	16.120	4.120
0.33	20.629	5.827
0.5	18.908	7.136
1	21.518	10.092
1	24.374	10.092
2	22.364	14.272
5	29.922	22.566
10	37.062	31.914
24	42.204	49.441
24	37.100	49.441
	ARE	0.48

Tabla C.51 MUESTRA M2: Datos experimentales y valores obtenidos a partir del modelo de difusión intraparticular y *ARE* (Average Relative Error) para el cinc.

t agitación [horas]	[Zn]_exp [mg/kg]	[Zn]_calc [mg/kg]
0.08	19.909	3.305
0.17	21.093	4.674
0.17	19.380	4.674
0.33	20.424	6.610
0.5	20.505	8.095
1	21.711	11.448
2	27.160	16.190
2	26.943	16.190
5	31.368	25.599
10	34.821	36.202
24	38.999	56.084
	ARE	0.51

Tabla C.52 MUESTRA M3: Datos experimentales y valores obtenidos a partir del modelo de difusión intraparticular y *ARE* (Average Relative Error) para el cinc.

t agitación [horas]	[Zn]_exp [mg/kg]	[Zn]_calc [mg/kg]
0.08	118.940	17.449
0.08	120.069	17.449
0.17	116.633	24.676
0.33	119.672	34.897
0.33	121.360	34.897
0.5	119.794	42.740
1	133.509	60.444
2	146.712	85.481
5	160.325	135.157
5	158.894	135.157
10	175.141	191.141
24	200.525	296.114
	ARE	0.53

Tabla C.53 MUESTRA M4: Datos experimentales y valores obtenidos a partir del modelo de difusión intraparticular y *ARE* (Average Relative Error) para el cinc.

t agitación [horas]	[Zn]_exp [mg/kg]	[Zn]_calc [mg/kg]
0.08	31.880	4.003
0.17	30.471	5.661
0.33	29.927	8.006
0.5	33.992	9.805
1	35.067	13.866
2	37.733	19.609
5	36.248	31.005
5	36.540	31.005
10	40.931	43.848
24	45.577	67.929
	ARE	0.51

Tabla C.54 MUESTRA M5: Datos experimentales y valores obtenidos a partir del modelo de difusión intraparticular y *ARE* (Average Relative Error) para el cinc.

C.2.2. Cobre

t agitación [horas]	[Cu]_exp [mg/kg]	[Cu]_calc [mg/kg]
0.08	80.932	12.535
0.17	83.914	17.727
0.33	84.961	25.070
0.5	83.875	30.704
1	89.662	43.422
1	91.141	43.422
2	102.372	61.408
2	98.495	61.408
5	110.006	97.095
10	120.063	137.312
24	152.000	212.723
	ARE	0.50

Tabla C.55 MUESTRA M1: Datos experimentales y valores obtenidos a partir del modelo de difusión intraparticular y *ARE* (Average Relative Error) para el cobre.

t agitación [horas]	[Cu]_exp [mg/kg]	[Cu]_calc [mg/kg]
0.08	188.359	24.567
0.17	192.727	34.744
0.33	189.887	49.135
0.5	191.651	60.178
1	210.551	85.104
1	209.633	85.104
2	229.603	120.355
5	251.465	190.298
10	286.022	269.122
24	325.857	416.923
24	328.253	416.923
	ARE	0.51

Tabla C.56 MUESTRA M2: Datos experimentales y valores obtenidos a partir del modelo de difusión intraparticular y *ARE* (Average Relative Error) para el cobre.

t agitación [horas]	[Cu]_exp [mg/kg]	[Cu]_calc [mg/kg]
0.08	154.994	200.578
0.17	162.743	210.606
0.17	160.845	208.150
0.33	157.871	204.301
0.5	157.645	204.008
1	168.062	217.489
2	187.281	242.361
2	184.962	239.360
5	206.154	266.784
10	225.088	291.286
24	258.581	334.629
	ARE	0.54

Tabla C.57 MUESTRA M3: Datos experimentales y valores obtenidos a partir del modelo de difusión intraparticular y *ARE* (Average Relative Error) para el cobre.

t agitación [horas]	[Cu]_exp [mg/kg]	[Cu]_calc [mg/kg]
0.08	193.118	25.378
0.08	196.023	25.378
0.17	190.352	35.890
0.33	194.250	50.756
0.33	193.109	50.756
0.5	196.595	62.163
1	211.455	87.912
2	224.105	124.326
5	231.288	196.577
5	234.168	196.577
10	253.561	278.002
24	273.558	430.679
	ARE	0.56

Tabla C.58 MUESTRA M4: Datos experimentales y valores obtenidos a partir del modelo de difusión intraparticular y *ARE* (Average Relative Error) para el cobre.

t agitación [horas]	[Cu]_exp [mg/kg]	[Cu]_calc [mg/kg]
0.08	5.875	0.688
0.17	5.668	0.972
0.33	5.539	1.375
0.5	5.705	1.684
1	5.715	2.382
2	6.123	3.369
5	6.183	5.326
5	6.314	5.326
10	7.010	7.533
24	7.924	11.669
	ARE	0.50

Tabla C.59 MUESTRA M5: Datos experimentales y valores obtenidos a partir del modelo de difusión intraparticular y *ARE* (Average Relative Error) para el cobre.

C.2.3. Aluminio

t agitación [horas]	[Al]_exp [mg/kg]	[Al]_calc [mg/kg]
0.08	362.684	96.924
0.17	390.150	137.071
0.33	402.626	193.848
0.5	390.662	237.414
1	462.602	335.754
2	621.458	474.828
5	803.006	750.769
10	1029.594	1061.747
24	1426.502	1644.852
1	468.643	335.754
2	601.089	474.828
	ARE	0.32

Tabla C.60 MUESTRA M1: Datos experimentales y valores obtenidos a partir del modelo de difusión intraparticular y *ARE* (Average Relative Error) para el aluminio.

t agitación [horas]	[Al]_exp [mg/kg]	[Al]_calc [mg/kg]
0.08	1077.647	288.768
0.17	1189.299	408.379
0.33	1279.821	577.535
0.5	1287.884	707.333
1	1588.649	1000.320
2	2043.719	1414.666
5	2646.048	2236.784
10	3394.622	3163.290
24	4377.701	4900.547
1	1591.303	1000.320
24	4386.443	4900.547
	ARE	0.35

Tabla C.61 MUESTRA M2: Datos experimentales y valores obtenidos a partir del modelo de difusión intraparticular y *ARE* (Average Relative Error) para el aluminio.

t agitación [horas]	[Al]_exp [mg/kg]	[Al]_calc [mg/kg]
0.08	219.215	58.171
0.17	248.047	82.266
0.33	244.533	116.342
0.5	234.360	142.489
1	286.480	201.510
2	377.740	284.978
5	499.538	450.590
10	636.742	637.231
24	830.599	987.193
0.17	248.863	82.266
2	371.180	284.978
	ARE	0.37

Tabla C.62 MUESTRA M3: Datos experimentales y valores obtenidos a partir del modelo de difusión intraparticular y *ARE* (Average Relative Error) para el aluminio.

t agitación [horas]	[Al]_exp [mg/kg]	[Al]_calc [mg/kg]
0.08	776.293	224.214
0.08	788.809	224.214
0.17	836.643	317.086
0.33	915.302	448.428
0.33	920.969	448.428
0.5	927.559	549.210
1	1177.449	776.700
2	1552.516	1098.420
5	1949.913	1736.754
5	1966.227	1736.754
10	2469.177	2456.141
24	3107.516	3805.037
	ARE	0.38

Tabla C.63 MUESTRA M4: Datos experimentales y valores obtenidos a partir del modelo de difusión intraparticular y *ARE* (Average Relative Error) para el aluminio.

t agitación [horas]	[Al]_exp [mg/kg]	[Al]_calc [mg/kg]
0.08	54.420	10.579
0.17	60.443	14.961
0.33	60.789	21.159
0.5	67.497	25.914
1	70.590	36.648
2	71.360	51.828
5	74.438	81.947
10	80.443	115.891
5	74.725	81.947
	ARE	0.47

Tabla C.64 MUESTRA M5: Datos experimentales y valores obtenidos a partir del modelo de difusión intraparticular y *ARE* (Average Relative Error) para el aluminio.

C.2.4. Hierro

t agitación [horas]	[Fe]_exp [mg/kg]	[Fe]_calc [mg/kg]
0.08	620.594	168.371
0.17	655.368	238.112
0.33	641.611	336.742
0.5	572.250	412.423
1	665.721	583.254
1	667.367	583.254
2	914.196	824.846
2	888.324	824.846
5	1233.220	1304.196
10	1688.927	1844.411
24	2791.563	2857.349
	ARE	0.25

Tabla C.65 MUESTRA M1: Datos experimentales y valores obtenidos a partir del modelo de difusión intraparticular y *ARE* (Average Relative Error) para el hierro.

t agitación [horas]	[Fe]_exp [mg/kg]	[Fe]_calc [mg/kg]
0.08	516.587	158.474
0.17	539.197	224.116
0.33	548.906	316.948
0.5	512.725	388.180
1	619.039	548.970
1	626.027	548.970
2	852.340	776.361
5	1211.327	1227.534
10	1718.952	1735.996
24	2645.993	2689.393
24	2606.560	2689.393
	ARE	0.21

Tabla C.66 MUESTRA M2: Datos experimentales y valores obtenidos a partir del modelo de difusión intraparticular y *ARE* (Average Relative Error) para el hierro.

t agitación [horas]	[Fe]_exp [mg/kg]	[Fe]_calc [mg/kg]
0.08	270.142	82.091
0.17	313.270	116.094
0.17	305.457	116.094
0.33	268.596	164.181
0.5	228.232	201.080
1	284.266	284.370
2	415.981	402.160
2	422.570	402.160
5	584.845	635.871
10	882.000	899.257
24	1358.170	1393.123
	ARE	0.24

Tabla C.67 MUESTRA M3: Datos experimentales y valores obtenidos a partir del modelo de difusión intraparticular y *ARE* (Average Relative Error) para el hierro.

t agitación [horas]	[Fe]_exp [mg/kg]	[Fe]_calc [mg/kg]
0.08	953.617	408.140
0.08	971.431	408.140
0.17	1008.211	577.198
0.33	1062.200	816.281
0.33	1070.595	816.281
0.5	951.215	999.736
1	1299.713	1413.840
2	2048.774	1999.472
5	3092.507	3161.442
5	3115.546	3161.442
10	4688.416	4470.955
24	6694.101	6926.373
	ARE	0.19

Tabla C.68 MUESTRA M4: Datos experimentales y valores obtenidos a partir del modelo de difusión intraparticular y *ARE* (Average Relative Error) para el hierro.

t agitación [horas]	[Fe]_exp [mg/kg]	[Fe]_calc [mg/kg]
0.08	280.906	40.826
0.17	298.343	57.737
0.33	295.701	81.652
0.5	321.658	100.003
1	333.233	141.426
2	342.907	200.007
5	368.869	316.238
5	372.981	316.238
10	408.657	447.228
24	496.009	692.843
	ARE	0.49

Tabla C.69 MUESTRA M5: Datos experimentales y valores obtenidos a partir del modelo de difusión intraparticular y *ARE* (Average Relative Error) para el hierro.

C.2.5. Cadmio

t agitación [horas]	[Cd]_exp [mg/kg]	[Cd]_calc [mg/kg]
0.08	0.544	0.069
0.17	0.581	0.098
0.33	0.575	0.139
0.5	0.569	0.170
1	0.601	0.240
1	0.593	0.240
2	0.603	0.339
2	0.616	0.339
5	0.647	0.537
10	0.664	0.759
24	0.710	1.176
	ARE	0.57

Tabla C.70 MUESTRA M1: Datos experimentales y valores obtenidos a partir del modelo de difusión intraparticular y *ARE* (Average Relative Error) para el cadmio.

t agitación [horas]	[Cd]_exp [mg/kg]	[Cd]_calc [mg/kg]
0.08	0.183	0.017
0.17	0.189	0.024
0.33	0.195	0.035
0.5	0.176	0.042
1	0.188	0.060
2	0.184	0.085
5	0.196	0.134
10	0.201	0.190
24	0.222	0.294
24	0.210	0.294
	ARE	0.57

Tabla C.71 MUESTRA M2: Datos experimentales y valores obtenidos a partir del modelo de difusión intraparticular y *ARE* (Average Relative Error) para el cadmio.

t agitación [horas]	[Cd]_exp [mg/kg]	[Cd]_calc [mg/kg]
0.08	0.495	0.061
0.33	0.516	0.121
0.17	0.510	0.086
0.5	0.488	0.148
1	0.515	0.210
2	0.524	0.297
2	0.539	0.297
5	0.577	0.470
10	0.629	0.664
24	0.655	1.029
	ARE	0.55

Tabla C.72 MUESTRA M3: Datos experimentales y valores obtenidos a partir del modelo de difusión intraparticular y *ARE* (Average Relative Error) para el cadmio.

t agitación [horas]	[Cd]_exp [mg/kg]	[Cd]_calc [mg/kg]
0.08	6.544	0.762
0.08	6.479	0.762
0.17	6.478	1.078
0.33	6.478	1.524
0.33	6.500	1.524
0.5	6.484	1.867
5	6.995	5.903
1	6.720	2.640
2	6.898	3.734
5	6.999	5.903
10	7.368	8.348
24	7.837	12.933
	ARE	0.58

Tabla C.73 MUESTRA M4: Datos experimentales y valores obtenidos a partir del modelo de difusión intraparticular y *ARE* (Average Relative Error) para el cadmio.

t agitación [horas]	[Cd]_exp [mg/kg]	[Cd]_calc [mg/kg]
0.08	0.598	0.073
0.17	0.625	0.103
0.33	0.612	0.145
0.5	0.606	0.178
1	0.626	0.252
2	0.644	0.356
5	0.694	0.563
5	0.688	0.563
10	0.724	0.797
24	0.793	1.235
	ARE	0.53

Tabla C.74 MUESTRA M5: Datos experimentales y valores obtenidos a partir del modelo de difusión intraparticular y *ARE* (Average Relative Error) para el cadmio.

C.2.6. Mercurio

t agitación [horas]	[Hg]_exp [mg/kg]	[Hg]_calc [mg/kg]
0.08	0.0122	0.0017
0.17	0.0122	0.0024
0.5	0.0180	0.0042
1	0.0190	0.0060
2	0.0186	0.0085
2	0.0191	0.0085
5	0.0266	0.0134
24	0.0304	0.0294
	ARE	0.59

Tabla C.75 MUESTRA M1: Datos experimentales y valores obtenidos a partir del modelo de difusión intraparticular y *ARE* (Average Relative Error) para el mercurio.

t agitación [horas]	[Hg]_exp [mg/kg]	[Hg]_calc [mg/kg]
0.08	0.0030	0.0009
0.17	0.0028	0.0012
0.33	0.0059	0.0017
0.5	0.0057	0.0021
1	0.0048	0.0030
1	0.0033	0.0030
2	0.0051	0.0042
5	0.0088	0.0067
10	0.0084	0.0095
24	0.0133	0.0147
24	0.0150	0.0147
	ARE	0.34

Tabla C.76 MUESTRA M2: Datos experimentales y valores obtenidos a partir del modelo de difusión intraparticular y *ARE* (Average Relative Error) para el mercurio.

t agitación [horas]	[Hg]_exp [mg/kg]	[Hg]_calc [mg/kg]
0.08	0.0470	0.0104
0.17	0.0612	0.0147
0.17	0.0641	0.0147
0.5	0.0668	0.0255
1	0.0697	0.0360
2	0.0749	0.0509
2	0.0730	0.0509
5	0.0951	0.0805
24	0.1135	0.1764
	ARE	0.53

Tabla C.77 MUESTRA M3: Datos experimentales y valores obtenidos a partir del modelo de difusión intraparticular y *ARE* (Average Relative Error) para el mercurio.

t agitación [horas]	[Hg]_exp [mg/kg]	[Hg]_calc [mg/kg]
0.08	0.0022	0.0009
0.08	0.0020	0.0009
0.17	0.0030	0.0012
0.33	0.0062	0.0017
0.33	0.0054	0.0017
0.5	0.0063	0.0021
1	0.0028	0.0030
2	0.0053	0.0042
5	0.0093	0.0067
10	0.0091	0.0095
24	0.0133	0.0147
	ARE	0.41

Tabla C.78 MUESTRA M4: Datos experimentales y valores obtenidos a partir del modelo de difusión intraparticular y *ARE* (Average Relative Error) para el mercurio.

C.2.7. Plomo

t agitación [horas]	[Pb]_exp [mg/kg]	[Pb]_calc [mg/kg]
0.08	2.961	0.464
0.17	3.125	0.656
0.33	3.159	0.928
0.5	3.077	1.137
1	3.358	1.608
1	3.202	1.608
2	3.568	2.274
2	3.530	2.274
5	4.412	3.596
10	4.478	5.085
24	5.561	7.878
	ARE	0.49

Tabla C.79 MUESTRA M1: Datos experimentales y valores obtenidos a partir del modelo de difusión intraparticular y *ARE* (Average Relative Error) para el plomo.

t agitación [horas]	[Pb]_exp [mg/kg]	[Pb]_calc [mg/kg]
0.08	2.371	0.324
0.17	2.378	0.458
0.33	2.553	0.648
0.5	2.426	0.793
1	2.597	1.122
1	2.693	1.122
2	2.802	1.587
5	3.253	2.509
10	3.542	3.548
24	4.751	5.497
24	4.159	5.497
	ARE	0.49

Tabla C.80 MUESTRA M2: Datos experimentales y valores obtenidos a partir del modelo de difusión intraparticular y *ARE* (Average Relative Error) para el plomo.

t agitación [horas]	[Pb]_exp [mg/kg]	[Pb]_calc [mg/kg]
0.08	47.584	7.515
0.17	50.097	10.628
0.17	49.660	10.628
0.33	47.393	15.031
0.5	45.650	18.409
1	50.658	26.034
2	59.532	36.818
2	59.781	36.818
5	69.678	58.214
10	78.054	82.327
24	90.182	127.540
	ARE	0.51

Tabla C.81 MUESTRA M3: Datos experimentales y valores obtenidos a partir del modelo de difusión intraparticular y *ARE* (Average Relative Error) para el plomo.

t agitación [horas]	[Pb]_exp [mg/kg]	[Pb]_calc [mg/kg]
0.08	9.027	1.491
0.08	8.550	1.491
0.17	8.781	2.109
0.33	8.370	2.983
0.33	8.392	2.983
0.5	8.146	3.653
1	8.995	5.166
2	11.123	7.306
5	13.179	11.552
5	13.614	11.552
10	15.848	16.336
24	18.726	25.308
	ARE	0.47

Tabla C.82 MUESTRA M4: Datos experimentales y valores obtenidos a partir del modelo de difusión intraparticular y *ARE* (Average Relative Error) para el plomo.

C.2.8. Cromo

t agitación [horas]	[Cr]_exp [mg/kg]	[Cr]_calc [mg/kg]
0.08	0.003	0.009
0.33	0.047	0.017
0.5	0.029	0.021
2	0.073	0.042
2	0.052	0.042
24	0.143	0.147
	ARE	0.58

Tabla C.83 MUESTRA M1: Datos experimentales y valores obtenidos a partir del modelo de difusión intraparticular y *ARE* (Average Relative Error) para el cromo.

t agitación [horas]	[Cr]_exp [mg/kg]	[Cr]_calc [mg/kg]
0.08	0.038	0.023
0.33	0.025	0.045
0.5	0.144	0.055
1	0.081	0.078
1	0.095	0.078
2	0.174	0.110
10	0.267	0.247
24	0.365	0.382
24	0.323	0.382
	ARE	0.30

Tabla C.84 MUESTRA M2: Datos experimentales y valores obtenidos a partir del modelo de difusión intraparticular y *ARE* (Average Relative Error) para el cromo.

t agitación [horas]	[Cr]_exp [mg/kg]	[Cr]_calc [mg/kg]
0.17	0.058	0.022
0.33	0.068	0.031
0.5	0.058	0.038
1	0.116	0.054
2	0.076	0.076
2	0.054	0.076
10	0.166	0.171
24	0.266	0.265
	ARE	0.31

Tabla C.85 MUESTRA M3: Datos experimentales y valores obtenidos a partir del modelo de difusión intraparticular y *ARE* (Average Relative Error) para el cromo.

t agitación [horas]	[Cr]_exp [mg/kg]	[Cr]_calc [mg/kg]
0.08	0.240	0.043
0.08	0.327	0.043
0.17	0.319	0.061
0.33	0.287	0.087
0.33	0.233	0.087
0.5	0.284	0.106
1	0.295	0.150
5	0.421	0.335
5	0.370	0.335
10	0.456	0.474
24	0.573	0.735
	ARE	0.51

Tabla C.86 MUESTRA M4: Datos experimentales y valores obtenidos a partir del modelo de difusión intraparticular y *ARE* (Average Relative Error) para el cromo.

C.2.9. Arsénico

t agitación [horas]	[As]_exp [mg/kg]	[As]_calc [mg/kg]
0.08	0.252	0.045
0.17	0.268	0.064
0.33	0.272	0.090
0.5	0.305	0.110
1	0.314	0.156
1	0.313	0.156
2	0.343	0.221
2	0.340	0.221
5	0.432	0.349
10	0.467	0.493
24	0.504	0.764
	ARE	0.49

Tabla C.87 MUESTRA M1: Datos experimentales y valores obtenidos a partir del modelo de difusión intraparticular y *ARE* (Average Relative Error) para el arsénico.

t agitación [horas]	[As]_exp [mg/kg]	[As]_calc [mg/kg]
0.08	0.540	0.191
0.17	0.646	0.269
0.33	0.699	0.381
0.5	0.735	0.467
1	0.776	0.660
1	0.789	0.660
2	0.980	0.933
5	1.494	1.476
10	2.074	2.087
24	3.174	3.233
24	3.088	3.233
	ARE	0.23

Tabla C.88 MUESTRA M2: Datos experimentales y valores obtenidos a partir del modelo de difusión intraparticular y *ARE* (Average Relative Error) para el arsénico

t agitación [horas]	[As]_exp [mg/kg]	[As]_calc [mg/kg]
0.08	2.049	0.327
0.17	2.199	0.463
0.17	2.288	0.463
0.33	2.327	0.655
0.50	2.452	0.802
1.00	2.543	1.134
2.00	2.573	1.604
2.00	2.571	1.604
5.00	2.923	2.536
10.00	3.344	3.586
24.00	3.861	5.555
	ARE	0.52

Tabla C.89 MUESTRA M3: Datos experimentales y valores obtenidos a partir del modelo de difusión intraparticular y *ARE* (Average Relative Error) para el arsénico

t agitación [horas]	[As]_exp [mg/kg]	[As]_calc [mg/kg]
0.08	0.997	0.341
0.08	1.019	0.341
0.17	1.140	0.483
0.33	1.213	0.682
0.33	1.260	0.682
0.5	1.294	0.836
1	1.437	1.182
2	1.783	1.672
5	2.617	2.643
5	2.654	2.643
10	3.705	3.738
24	5.391	5.791
	ARE	0.29

Tabla C.90 MUESTRA M4: Datos experimentales y valores obtenidos a partir del modelo de difusión intraparticular y *ARE* (Average Relative Error) para el arsénico

C.2.10. Níquel

t agitación [horas]	[Ni]_exp [mg/kg]	[Ni]_calc [mg/kg]
0.08	0.621	0.113
0.17	0.485	0.159
0.33	0.452	0.225
0.5	0.448	0.276
1	0.501	0.390
1	0.474	0.390
2	0.594	0.552
2	0.556	0.552
5	0.781	0.872
10	1.073	1.233
24	1.884	1.911
	ARE	0.28

Tabla C.91 MUESTRA M1: Datos experimentales y valores obtenidos a partir del modelo de difusión intraparticular y *ARE* (Average Relative Error) para el níquel.

t agitación [horas]	[Ni]_exp [mg/kg]	[Ni]_calc [mg/kg]
0.08	0.444	0.106
0.17	0.462	0.149
0.5	0.531	0.259
1	0.507	0.366
1	0.501	0.366
2	0.626	0.518
5	0.895	0.818
10	1.137	1.157
24	1.700	1.793
24	1.672	1.793
	ARE	0.29

Tabla C.92 MUESTRA M2: Datos experimentales y valores obtenidos a partir del modelo de difusión intraparticular y *ARE* (Average Relative Error) para el níquel.

t agitación [horas]	[Ni]_exp [mg/kg]	[Ni]_calc [mg/kg]
0.08	0.097	0.029
0.17	0.114	0.042
0.33	0.109	0.059
0.5	0.111	0.072
1	0.152	0.102
2	0.184	0.144
2	0.174	0.144
5	0.222	0.228
10	0.343	0.323
24	0.464	0.500
	ARE	0.30

Tabla C.93 MUESTRA M3: Datos experimentales y valores obtenidos a partir del modelo de difusión intraparticular y *ARE* (Average Relative Error) para el níquel.

t agitación [horas]	[Ni]_exp [mg/kg]	[Ni]_calc [mg/kg]
0.08	1.097	0.206
0.08	1.250	0.206
0.17	1.180	0.291
0.33	1.272	0.412
0.33	1.296	0.412
0.5	1.233	0.505
1	1.276	0.714
2	1.482	1.010
5	1.820	1.597
5	1.816	1.597
10	2.113	2.258
24	2.617	3.498
	ARE	0.48

Tabla C.94 MUESTRA M4: Datos experimentales y valores obtenidos a partir del modelo de difusión intraparticular y *ARE* (Average Relative Error) para el níquel.

t agitación [horas]	[Ni]_exp [mg/kg]	[Ni]_calc [mg/kg]
0.08	0.265	0.035
0.17	0.245	0.049
0.33	0.230	0.069
0.5	0.227	0.085
1	0.209	0.120
2	0.229	0.170
5	0.277	0.268
5	0.279	0.268
10	0.320	0.379
24	0.489	0.588
	ARE	0.41

Tabla C.95 MUESTRA M5: Datos experimentales y valores obtenidos a partir del modelo de difusión intraparticular y *ARE* (Average Relative Error) para el níquel.