

ÍNDICE ANEXOS

| | |
|---|-----|
| Índice Anexos..... | 1 |
| Anexo I: Métodos de degradación..... | 3 |
| Anexo II: Fichas de seguridad | 7 |
| Anexo III: Tablas de resultados de las calibraciones..... | 63 |
| Anexo IV: Tablas y gráficos de los datos experimentales | 71 |
| Anexo V: Datos primarios de los experimentos | 95 |
| Anexo VI: Resultados analíticos HPLC | 135 |
| Anexo VII: Estudio estadístico | 157 |
| Anexo VIII: Estudios previos al PFC-1..... | 161 |
| Anexo IX: Comunicación enviada al congreso CHISA..... | 171 |
| Anexo X: Comunicación enviada al congreso Mediterráneo | 183 |
| Anexo XI: Comunicación enviada al congreso SPEA5..... | 187 |

Anexo I: Métodos de degradación

Incineración

La incineración es uno de los métodos más usados para pequeñas cantidades de aguas residuales con altas concentraciones de contaminante, difícilmente recuperable. Presenta la desventaja de los elevados costes de la instalación y el elevado coste de consumo de energía del proceso. Además se prevén restricciones de este método porque se contribuye al aumento de la concentración de CO₂ en la atmósfera.

Adsorción

La adsorción mediante carbón activo es un método avanzado de tratamiento de aguas residuales que se utiliza para extraer compuestos orgánicos refractarios a otros tratamientos, para extraer compuestos inorgánicos y para eliminar cloro, malos sabores y olores. Es un método de separación que transfiere el contaminante desde la fase acuosa en la cual está disuelto a la superficie del carbón activo, donde queda retenido y se acumula. Las desventajas son que el carbón activado es caro y que los contaminantes quedan retenidos en su superficie por lo que se debe realizar una posterior desadsorción del contaminante para su recuperación o bien se debe desechar el carbón como residuo sólido. Este residuo sólido debe tratarse de forma especial si el contaminante absorbido es tóxico.

Oxidación húmeda con aire (WAO)

La oxidación húmeda mediante aire (Wet Air Oxidation) consiste en transferir los compuestos orgánicos volátiles desde la fase líquida al aire, mediante aireación con torres, difusores o mediante borboteo de aire comprimido. En el borboteo se puede emplear oxígeno en vez de aire comprimido y en ambos casos el oxígeno oxida a la materia orgánica. Estos métodos están más extendidos que la oxidación química porque las emisiones a la atmósfera no son todavía muy restrictivas.

Son los métodos más simples y económicos para eliminar los compuestos orgánicos volátiles presentes en aguas residuales, pero al igual que en el caso de la incineración cada vez más se están limitando las emisiones VOC's a la atmósfera lo que implicará un retroceso de estos métodos.

Oxidación húmeda supercrítica

En el proceso de oxidación húmeda supercrítica se oxidan los compuestos orgánicos e inorgánicos a altas presiones y temperaturas.

La temperatura a aplicar depende del contaminante a degradar. Suele oscilar entre los 150 °C y los 350 °C.

El mecanismo de la oxidación húmeda supercrítica ha sido profundamente estudiado y se considera que tiene lugar mediante radicales libres.

Oxidación electroquímica

El uso de la oxidación electroquímica para la destrucción de los compuestos orgánicos en soluciones acuosas se ha estudiado en el laboratorio y a escala piloto, pero su uso a nivel industrial implica un coste operativo muy elevado.

Una de las ventajas del proceso electroquímico es que los electrones que se ceden y los que se roban para reducir y oxidar especies químicas tiene lugar en los respectivos electrodos, sustituyendo a reactivos oxidantes. Es como si se tratase de reactivos limpios.

Como contrapartida el proceso es muy caro y además los contaminantes a ser tratados deben ser conductores.

Oxidación fotoquímica

Se han llevado a cabo investigaciones de la oxidación fotoquímica empleando luz ultravioleta, pero hay una serie de limitaciones. El fundamento del proceso es simplemente que al irradiar con luz el contaminante, éste absorbe energía pasando a un estado excitado en el que es capaz de reaccionar químicamente con otras especies.

La primera limitación es que el contaminante debe absorber la luz con la que es irradiado, compitiendo con otros compuestos e incluso con el propio efluente acuoso a depurar. La segunda limitación es que se pueden generar subproductos más complejos que el contaminante inicial.

Oxidación química

Dentro de la oxidación química se engloba a todos los tratamientos de oxidación convencionales (reacciones Redox de transferencia de electrones), empleando los reactivos químicos oxidantes: cloro, dióxido de cloro, lejía, permanganato de potasio, oxígeno, peróxido de hidrógeno y ozono.

Oxidación biológica

Los tratamientos biológicos para la destrucción de compuestos orgánicos presentan incuestionables ventajas respecto a los anteriores procesos por su bajo coste económico. Sin embargo muchos compuestos orgánicos no pueden ser eliminados con estos tratamientos.

Hay dos tipos de tratamientos biológicos: el aeróbico y el anaeróbico. El más utilizado es el aeróbico por eficiencia y simplicidad.

Anexo II: Fichas de seguridad

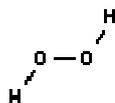
Ficha de seguridad del Peróxido de Hidrógeno 30 %(p/v)

Panreac

CODIGO PRODUCTO: 131077

Hidrógeno Peróxido 33% p/v (110 vol.) PA-ACS-ISO

H₂O₂



M.= 34,01

CAS [7722-84-1]

EINECS 231-765-0

NC 2847 00 00

SINONIMOS: Hidrógeno Dióxido • Hidroperóxido •

DATOS FISICOS: Líquido transparente e incoloro • Miscible con agua • D a 20/4: 1,12 • P. F.: -26 ° C • P. E.: 107 ° C • Pres. Vap. a 20 ° C 18 hPa •

APLICACIONES: Reactivo en análisis: USP 29 • Ph. Eur. 5.0 •

BIBLIOGRAFIA: Merck Index 12 , 4839 13 , 4819 • Sax HIB 000 •€Safety 2 , 2546 B •€Kühn-Birett W 2 •€Ullmann (5.) 13 , 443 •€Fieser 1 , 457 2 , 216 3 , 154 4 , 253 5 , 337 6 , 286 7 , 174 8 , 247 9 , 241 10 , 201 12 , 242 13 , 145 14 , 176 15 , 166 •€ACS IX , 340 X , 360 • ISO 6353/2-1983R - 14 , 19 •€USP 28 , 972 2 , 3493 29 , 1225 •€BP 2007 • Ph. Eur. IV , 1340 (2002) 5.0, 1763 (2005) • F.C.C. IV , 197 •

PELIGROSIDAD: C.E.: 008-003-00-9 • RTECS: MX 0899000 • DL L₀ oral hmn 1429 mg/Kg • VLA-ED: 1,4 mg/m³ •



R: 22-41

S: 17-26-28a-36/37/39-45

NORMAS DE TRANSPORTE: UN: 2014 • ADR: 5.1/II • IMDG: 5.1/II • IATA: 5.1/II • PAX: 501 • CAO: 506•

INFORMACION PESO/VOLUMEN: 1lX1,11kg 1kgX0,90l

ESPECIFICACIONES:

Riqueza (Perm.) p/p 30,0-32,0 %

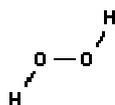
Riqueza (en vol. O₂)(Perm.) 110 vol.

Panreac

CODIGO PRODUCTO: 121076

Hidrógeno Peróxido 30% p/v (100 vol.) PA

H₂O₂



M.= 34,01

CAS [7722-84-1]

EINECS 231-765-0

NC 2847 00 00

SINONIMOS: Hidrogeno Dióxido • Hidroperóxido • Agua Oxigenada •

DATOS FISICOS: Líquido transparente e incoloro • Miscible con agua • D a 20/4: 1,10 • P. F.: -26 °C • P. E.: 107 °C • Pres. Vap. a 20 °C 18 hPa •

APLICACIONES: Reactivo en análisis: RFE • USP 26 • BP • Ph. Eur. IV • Reactivo utilizado para la descomposición de muestras orgánicas e inorgánicas ; R. Bock , "Aufschlussmethoden der Anorg. & Org. Chemie" , Verlag Chemie , Weinheim (1972) • Para la determinación del contenido de nitrógeno en leche según ISO 8968-3:2004 •

Reactivo en síntesis: Preparación de alquenos a partir de alquilfenil-seleniuros y alquilfenil-teluluros secundarios ; S. Uemura , *J. Chem. Soc. Chem. Comm.* , 1037 (1985) •

BIBLIOGRAFIA: Merck Index 12 , 4839 13 , 4819 • Sax HIB 000 • Safety 2 , 2546 B • Kühn-Birett W 2 • Fieser 1 , 457 2 , 216 3 , 154 4 , 253 5 , 337 6 , 286 7 , 174 8 , 247 9 , 241 10 , 201 12 , 242 13 , 145 14 , 176 15 , 166 17 , 145 • Ullmann (5.) 13 , 443 • ACS VIII , 376 IX , 340 • ISO 6353/2-1983R - 14 , 19 • USP 24 , 836 25 , 865 26 , 927 1 , 2969 • Ph. Eur. III , 991 (1997) IV , 1340 (2002) • F.C.C. IV , 197 V , 222 •

PELIGROSIDAD: C.E.: 008-003-00-9 • RTECS: MX 0899000 • DL L₀ oral hmn 1429 mg/Kg • VLA-ED: 1,4 mg/m³ •



R: 22-41

S: 17-26-28a-36/37/39-45

NORMAS DE TRANSPORTE: UN: 2014 • ADR: 5.1/II • IMDG: 5.1/II • IATA: 5.1/II • PAX: 501 • CAO: 506•

INFORMACION PESO/VOLUMEN: 1lX1,10kg 1kgX0,91l

Ficha de Datos de Seguridad Según Directiva 2001/58/CE

211077 Hidrógeno Peróxido 33% p/v (110 vol.) estabilizado QP

1. Identificación de la sustancia/preparado y de la sociedad o empresa

1.1 Identificación de la sustancia o del preparado

Denominación:
Hidrógeno Peróxido 33% p/v (110 vol.)

1.2 Uso de la sustancia o preparado:

Para usos de laboratorio, análisis, investigación y química fina.

1.3 Identificación de la sociedad o empresa:

PANREAC QUIMICA, S.A.U.
C/Garraf, 2
Polígono Pla de la Bruguera
E-08211 Castellar del Vallès
(Barcelona) España
Tel. (+34) 937 489 400
Urgencias:
Número único de teléfono para llamadas de urgencia: 112 (UE)
Tel.:(+34) 937 489 499

2. Composición/Información de los componentes

Solución acuosa

Hidrógeno Peróxido 33% p/v (110 vol.)
CAS [7722-84-1] Fórmula: H_2O_2 M.=34,01
Número CE (EINECS): 231-765-0
Número de índice CE: 008-003-00-9
R: 22-41

3. Identificación de los peligros

Nocivo por ingestión. Riesgo de lesiones oculares graves.

4. Primeros auxilios

4.1 Indicaciones generales:

En caso de pérdida del conocimiento nunca dar a beber ni provocar el vómito.

4.2 Inhalación:

Trasladar a la persona al aire libre. En caso de que persista el malestar, pedir atención médica.

4.3 Contacto con la piel:

Lavar abundantemente con agua. Quitarse las ropas contaminadas. En caso de irritación, pedir atención médica.

4.4 Ojos:

Lavar con agua abundante (mínimo durante 15 minutos), manteniendo los párpados abiertos. Pedir atención médica.

4.5 Ingestión:

Beber agua abundante. Evitar el vómito (existe riesgo de perforación). Pedir inmediatamente atención médica. No neutralizar.

5. Medidas de lucha contra incendio

5.1 Medios de extinción adecuados:

Agua.

5.2 Medios de extinción que NO deben utilizarse:

Dióxido de carbono (CO₂). Polvo seco. Espuma.

5.3 Riesgos especiales:

Incombustible. Favorece la formación de incendios. Mantener alejado de sustancias combustibles.

5.4 Equipos de protección:

6. Medidas a tomar en caso de vertido accidental

6.1 Precauciones individuales:

No inhalar los vapores.

6.2 Precauciones para la protección del medio ambiente:

| | |
|--|--|
| <p>6.3</p> | <p>No permitir el paso al sistema de desagües. Evitar la contaminación del suelo, aguas y desagües.</p> <p>Métodos de recogida/limpieza:</p> <p>Recoger con materiales absorbentes (Absorbente General Panreac, Kieselguhr, etc.) o en su defecto arena o tierra secas y depositar en contenedores para residuos para su posterior eliminación de acuerdo con las normativas vigentes. Limpiar los restos con agua abundante.</p> |
| <p>7. Manipulación y almacenamiento</p> | |
| <p>7.1</p> | <p>Manipulación:</p> <p>Sin indicaciones particulares.</p> |
| <p>7.2</p> | <p>Almacenamiento:</p> <p>Recipientes bien cerrados. Mantener alejado de sustancias inflamables, fuentes de ignición y calor. Protegido de la luz. Temperatura ambiente. Almacenar en recipientes cuyo cierre permita el escape de la presión interna (p.e. provistos de válvula de seguridad).</p> |
| <p>8. Controles de exposición/protección personal</p> | |
| <p>8.1</p> | <p>Medidas técnicas de protección:</p> <p>Asegurar una buena ventilación y renovación de aire del local.</p> |
| <p>8.2</p> | <p>Control límite de exposición:</p> <p>VLA-ED: 1 ppm ó 1,4 mg/m³</p> |
| <p>8.3</p> | <p>Protección respiratoria:</p> <p>En caso de formarse vapores/aerosoles, usar equipo respiratorio adecuado. Filtro NOX. Filtro P₃.</p> |
| <p>8.4</p> | <p>Protección de las manos:</p> <p>Usar guantes apropiados</p> |
| <p>8.5</p> | <p>Protección de los ojos:</p> <p>Usar gafas apropiadas.</p> |
| <p>8.6</p> | <p>Medidas de higiene particulares:</p> <p>Quitarse las ropas contaminadas. Usar ropa de trabajo adecuada. Lavarse manos y cara antes de las pausas y al finalizar el trabajo.</p> |
| <p>8.7</p> | <p>Controles de la exposición del medio ambiente:</p> |

Cumplir con la legislación local vigente sobre protección del medio ambiente.

El proveedor de los medios de protección debe especificar el tipo de protección que debe usarse para la manipulación del producto, indicando el tipo de material y, cuando proceda, el tiempo de penetración de dicho material, en relación con la cantidad y la duración de la exposición.

9. Propiedades físicas y químicas

Aspecto:

Líquido transparente e incoloro.

Olor:

Característico.

pH <~2-4

Punto de ebullición :107°C

Punto de fusión : -26°C

Presión de vapor: 18 hPa (20°C)

Densidad (20/4): 1,12

Solubilidad: Miscible con agua

10. Estabilidad y reactividad

10.1 Condiciones que deben evitarse:

Temperaturas elevadas.

10.2 Materias que deben evitarse:

Alcoholes. Aldehídos. Eteres. Acidos. Anhídridos. Aminas. Amoníaco. Hidracina y derivados. Metales alcalinotérreos. Metales alcalinos. Sales alcalinas. Hidróxidos alcalinos. Metales y sus aleaciones. Metales en polvo. Oxidos metálicos. Sales metálicas. No metales. Oxidos no metálicos. Hidruros. Sustancias inflamables. Agentes oxidantes. Compuestos orgánicos. Peróxidos. Impurezas/polvo. KMnO_4 . Disolventes orgánicos. Compuestos orgánicos de nitrógeno.

10.3 Productos de descomposición peligrosos:

10.4 Información complementaria:

Sensible a la luz.

11. Información toxicológica

11.1 Toxicidad aguda:

DL₅₀ oral rata: 2000 mg/kg (sol. 90%)
DL₅₀ dermal rata: 4060 mg/kg (sol. 90%)
CL₅₀ inh rata: 2000 mg/m³/4h (sol. 90%)

11.2 Efectos peligrosos para la salud:

Por inhalación de vapores: Irritaciones en vías respiratorias.
En contacto con la piel: Quemaduras en mucosas, piel y ojos
Por contacto ocular: quemaduras.
Por ingestión: Quemaduras en el aparato digestivo. Puede provocar náuseas, vómitos.
Por absorción de grandes cantidades: Puede provocar perforación intestinal y de esófago.
No hay conclusiones objetivas definitivas sobre el efecto cancerígeno de esta sustancia.

12. Información Ecológica

12.1 Movilidad :

12.2 Ecotoxicidad :

12.2.1 - Test EC₅₀ (mg/l) :
Peces (Leuciscus Idus) = 35 mg/l ; Clasificación : Extremadamente tóxico.
12.2.2 - Medio receptor :
Riesgo para el medio acuático = Medio
Riesgo para el medio terrestre = Medio
12.2.3 - Observaciones :
Ecotoxicidad aguda en la zona de vertido.

12.3 Degradabilidad :

12.3.1 - Test :-----
12.3.2 - Clasificación sobre degradación biótica :
DBO₅/DQO Biodegradabilidad = -----
12.3.3 - Degradación abiótica según pH : -----
12.3.4 - Observaciones :

12.4 Acumulación :

12.4.1 - Test :

12.4.2 - Bioacumulación :
Riesgo = -----
12.4.3 - Observaciones :

12.5 Otros posibles efectos sobre el medio natural :

No deben esperarse interferencias en depuradoras si se usa adecuadamente.

13. Consideraciones sobre la eliminación

13.1 Sustancia o preparado:

En la Unión Europea no están establecidas pautas homogéneas para la eliminación de residuos químicos, los cuales tienen carácter de residuos especiales, quedando sujetos su tratamiento y eliminación a los reglamentos internos de cada país. Por tanto, en cada caso, procede contactar con la autoridad competente, o bien con los gestores legalmente autorizados para la eliminación de residuos. 2001/573/CE: Decisión del Consejo, de 23 de julio de 2001, por la que se modifica la Decisión 2000/532/CE de la Comisión en lo relativo a la lista de residuos.

Directiva 91/156/CEE del Consejo de 18 de marzo de 1991 por la que se modifica la Directiva 75/442/CEE relativa a los residuos.

En España: Ley 10/1998, de 21 de abril, de Residuos. Publicada en BOE 22/04/98.

ORDEN MAM/304/2002, de 8 de febrero, por la que se publican las operaciones de valorización y eliminación de residuos y la lista europea de residuos. Publicada en BOE 19/02/02.

13.2 Envases contaminados:

Los envases y embalajes contaminados de sustancias o preparados peligrosos, tendrán el mismo tratamiento que los propios productos contenidos.

Directiva 94/62/CE del Parlamento Europeo y del Consejo, de 20 de diciembre de 1994, relativa a los envases y residuos de envases.

En España: Ley 11/1997, de 24 de abril, de Envases y Residuos de Envases. Publicada en BOE 25/04/97.

Real Decreto 782/1998, de 30 de abril, por el que se aprueba el Reglamento para el desarrollo y ejecución de la Ley 11/1997, de 24 de abril, de Envases y Residuos de Envases. Publicado en BOE 01/05/98.

14. Información relativa al transporte

Terrestre (ADR):

Denominación técnica: PERÓXIDO DE HIDRÓGENO EN SOLUCIÓN ACUOSA con un mínimo del 20% y un máximo del 60%, de H₂O₂ (estabilizado)

ONU 2014 Clase: 5.1 Grupo de embalaje: II

Marítimo (IMDG):

Denominación técnica: PERÓXIDO DE HIDRÓGENO EN SOLUCIÓN ACUOSA con un mínimo del 20% y un máximo del 60%, de H₂O₂ (estabilizado)

ONU 2014 Clase: 5.1 Grupo de embalaje: II

Aéreo (ICAO-IATA):
Denominación técnica: Peróxido de hidrógeno en solución acuosa
ONU 2014 Clase: 5.1 Grupo de embalaje: II
Instrucciones de embalaje: CAO 506 PAX 501

15. Información reglamentaria

15.1 Etiquetado según Directiva de la CE



Símbolos:

Indicaciones de peligro: Nocivo

Frases R: 22-41 Nocivo por ingestión. Riesgo de lesiones oculares graves.

Frases S: 17-26-28a-36/37/39-45 Manténgase lejos de materias combustibles. En caso de contacto con los ojos, lávese inmediata y abundantemente con agua y acúdase a un médico. En caso de contacto con la piel, lávese inmediata y abundantemente con agua. Úsense indumentaria y guantes adecuados y protección para los ojos-la cara. En caso de accidente o malestar, acuda inmediatamente al médico (si es posible, muéstrole la etiqueta).

Número de índice CE: 008-003-00-9

15.2 Disposiciones particulares en el ámbito comunitario:

16. Otras informaciones

Respecto a la revisión anterior, se han producido cambios en los apartados: 15.

Información de los componentes:

Hidrógeno Peróxido 33% p/v (110 vol.)

CAS [7722-84-1] H₂O₂ M.=34,01

231-765-0 008-003-00-9



R: 22-41

Nocivo por ingestión. Riesgo de lesiones oculares graves.

Número y fecha de la revisión: 2 29.06.06

Los datos consignados en la presente Ficha de Datos de Seguridad, están basados en nuestros conocimientos actuales, teniendo como único objeto informar sobre aspectos de seguridad y no garantizándose las propiedades y características en ella indicadas.

Ficha de seguridad del Ácido Sulfúrico 96 % (p/p)

Panreac

CODIGO PRODUCTO: **211058**

Acido Sulfúrico 96% QP

H₂O₄S

H₂SO₄

M.= 98,08

CAS [7664-93-9]

EINECS 231-639-5

NC 2807 00 10

E -513

DATOS FISICOS: Líquido transparente e incoloro • Miscible con agua • D a 20/4: 1,84 • P. F.: -15 °C • P. E.: 330 °C •

APLICACIONES: Reactivo en análisis : USP **29** • BP **2007** • Ph. Eur. **5.0** • F.C.C. **V** • Componente en las soluciones de DQO (demanda química de oxígeno). UNE **77-004-89** (1989).ISO **6060-1986**. Norme Française NFT **90-101** (1988) •

BIBLIOGRAFIA: Merck Index **12** , 9147 **13** , 9064 • Sax SOI 500 • Römpf **8** , 3760 • Safety **2** , 2178 D • Kühn-Birett S 12 • Fieser **1** , 470 **5** , 633 **6** , 558 **7** , 347 **9** , 441 • ACS **IX** , 643 , 647 **X** , 670-674 • ISO **6353-2/1983** R - 37 , 52 • USP- NF **28** , 3096 **29** , 3757 • BP **2007** • Ph. Eur. **IV** , 1989 (2002) **5.0**, 2520 (2005) • F.C.C. **IV** , 402 **V** , 461 • Directiva **2000/63/CE** , 22 •

PELIGROSIDAD: C.E.: 016-020-00-8 • RTECS: WS 5600000 • DL₅₀ oral rat 2150 mg/Kg • CL₅₀ ihl rat 510 mg/m³/2h • VLA-ED (H₂O₄ S): 1 mg/m³ • VLA-EC: 3 mg/m³ •



R: 35

S: 26-30-45

NORMAS DE TRANSPORTE: UN: 1830 • ADR: 8/II • IMDG: 8/II • IATA: 8/II • PAX: 809 • CAO: 813•

INFORMACION PESO/VOLUMEN: 11X1,84kg 1kgX0,54l

OBSERVACIONES: Producto regulado como precursor de drogas •

ESPECIFICACIONES:

| | |
|-------------------|--------|
| Riqueza (Acidim.) | 96 % |
| Fe | 0,01 % |
| Pb | 0,01 % |

Ficha de Datos de Seguridad Según Directiva 2001/58/CE

211058 Acido Sulfúrico 96% QP

1. Identificación de la sustancia/preparado y de la sociedad o empresa

1.1 Identificación de la sustancia o del preparado

| | |
|--|--|
| | Denominación: Acido Sulfúrico 93-98% |
| 1.2 | Uso de la sustancia o preparado: Para usos de laboratorio, análisis, investigación y química fina. |
| 1.3 | Identificación de la sociedad o empresa: PANREAC QUIMICA, S.A.U. C/Garraf, 2 E-08211 Castellar del Vallès (Barcelona) España Tel.:(+34) 937 489 400 Urgencias: Número único de teléfono para llamadas de urgencia: 112 (UE) Tel.:(+34) 937 489 499 |
| 2. Composición/Información de los componentes | |
| | Denominación: Acido Sulfúrico 93-98% Fórmula: H ₂ SO ₄ M.=98,08 CAS [7664-93-9] Número CE (EINECS): 231-639-5 Número de índice CE: 016-020-00-8 |
| 3. Identificación de los peligros | |
| | Provoca quemaduras graves. |
| 4. Primeros auxilios | |
| 4.1 | Indicaciones generales: En caso de pérdida del conocimiento nunca dar a beber ni provocar el vómito. |
| 4.2 | Inhalación: Trasladar a la persona al aire libre. En caso de que persista el malestar, pedir atención médica. |
| 4.3 | Contacto con la piel: Lavar abundantemente con agua. Quitarse las ropas contaminadas. En caso de irritación, pedir atención médica. |
| 4.4 | Ojos: Lavar con agua abundante (mínimo durante 15 minutos), manteniendo los párpados abiertos. Pedir atención médica. |
| 4.5 | Ingestión: |

Beber agua abundante. Evitar el vómito (existe riesgo de perforación). Pedir inmediatamente atención médica. No neutralizar.

5. Medidas de lucha contra incendio

5.1 Medios de extinción adecuados:

Los apropiados al entorno.

5.2 Medios de extinción que NO deben utilizarse:

5.3 Riesgos especiales:

Incombustible. En caso de incendio pueden formarse vapores tóxicos de SOx. En contacto con metales puede formarse hidrógeno gaseoso (existe riesgo de explosión).

5.4 Equipos de protección:

6. Medidas a tomar en caso de vertido accidental

6.1 Precauciones individuales:

No inhalar los vapores.

6.2 Precauciones para la protección del medio ambiente:

No permitir el paso al sistema de desagües. Evitar la contaminación del suelo, aguas y desagües.

6.3 Métodos de recogida/limpieza:

Recoger con materiales absorbentes (Absorbente General Panreac, Kieselguhr, etc.) o en su defecto arena o tierra secas y depositar en contenedores para residuos para su posterior eliminación de acuerdo con las normativas vigentes. Limpiar los restos con agua abundante. Neutralizar con sodio hidróxido diluido.

7. Manipulación y almacenamiento

7.1 Manipulación:

Sin indicaciones particulares.

7.2 Almacenamiento:

Recipientes bien cerrados. En local bien ventilado. Temperatura ambiente. No almacenar en recipientes metálicos.

8. Controles de exposición/protección personal

8.1 Medidas técnicas de protección:

Asegurar una buena ventilación y renovación de aire del local.

8.2 Control límite de exposición:

VLA-ED: 1 mg/m³

VLA-EC: 3 mg/m³

8.3 Protección respiratoria:

En caso de formarse vapores/aerosoles, usar equipo respiratorio adecuado. Filtro P.

8.4 Protección de las manos:

Usar guantes apropiados(neopreno, PVC).

8.5 Protección de los ojos:

Usar gafas apropiadas.

8.6 Medidas de higiene particulares:

Quitarse las ropas contaminadas. Usar ropa de trabajo adecuada. Lavarse manos y cara antes de las pausas y al finalizar el trabajo.

8.7 Controles de la exposición del medio ambiente:

Cumplir con la legislación local vigente sobre protección del medio ambiente.

El proveedor de los medios de protección debe especificar el tipo de protección que debe usarse para la manipulación del producto, indicando el tipo de material y, cuando proceda, el tiempo de penetración de dicho material, en relación con la cantidad y la duración de la exposición.

9. Propiedades físicas y químicas

Aspecto:

Líquido transparente e incoloro.

Olor:

Característico.

Punto de ebullición :330 °C
Punto de fusión : -15°C
Presión de vapor: (20°C) 0,0001
Densidad (20/4): 1,84
Solubilidad: Miscible con agua

10. Estabilidad y reactividad

10.1 Condiciones que deben evitarse:

Temperaturas elevadas.

10.2 Materias que deben evitarse:

Agua. (ATENCIÓN: Se genera calor). Compuestos alcalinos. Metales alcalinos. Amoníaco. Compuestos alcalinotérreos. Soluciones alcalinas. Ácidos. Metales y sus aleaciones. Fósforo. Oxidos de fósforo. Hidruros. Halogenuros de halógeno. Halogenatos. MnO₄. Nitratos. Carburos. Disolventes orgánicos. Sustancias inflamables. Acetiluros. Nitrilos. Compuestos orgánicos de nitrógeno. Anilinas. Peróxidos. Picratos. Nitruros. Litio siliciuro.

10.3 Productos de descomposición peligrosos:

Gases tóxicos.

10.4 Información complementaria:

Higroscópico. Corrosivo.

11. Información toxicológica

11.1 Toxicidad aguda:

DL₅₀ oral rata: 2140 mg/kg (sol. 25%)

11.2 Efectos peligrosos para la salud:

Por inhalación de vapores: Irritaciones en vías respiratorias. Sustancia muy corrosiva.
En contacto con la piel: Provoca quemaduras.
Por contacto ocular: quemaduras, ceguera (lesión irreversible del nervio óptico).
Por ingestión: Quemaduras en el aparato digestivo. Fuertes dolores, con riesgo de perforación. Puede provocar náuseas, vómitos, diarreas. Después de un periodo de latencia: estenosis del píloro.

12. Información Ecológica

12.1 Movilidad :

12.2 Ecotoxicidad :

12.2.1 - Test EC₅₀ (mg/l) :

Organismos acuáticos = 10 mg/l (96h) ; Clasificación :
Extremadamente tóxico.

Peces (Para Ac. Sulfúrico) = 1,2 mg/l ; Clasificación :
Extremadamente tóxico.

Peces (Para Sulfato sódico) = 7000 mg/l ; Clasificación : Tóx.

Bacterias (Para Sulfato sódico) = >2500 mg/l ; Clasificación : Muy
tóxico.

12.2.2 - Medio receptor :

Riesgo para el medio acuático = Alto

Riesgo para el medio terrestre = Medio

12.2.3 - Observaciones :

Extremadamente tóxico para peces. La ecotoxicidad se debe a la
desviación del pH y a la formación de sulfato sódico.

12.3 Degradabilidad :

12.3.1 - Test :-----

12.3.2 - Clasificación sobre degradación biótica :

DBO₅/DQO Biodegradabilidad = ----

12.3.3 - Degradación abiótica según pH : -----

12.3.4 - Observaciones :

12.4 Acumulación :

12.4.1 - Test :

12.4.2 - Bioacumulación :

Riesgo = ----

12.4.3 - Observaciones :

12.5 Otros posibles efectos sobre el medio natural :

Neutralizar con NaOH a pH 7. Producto altamente corrosivo. Existe
peligro en caso de vertido incontrolado (tanto en ríos como en
acuíferos).

13. Consideraciones sobre la eliminación

13.1 Sustancia o preparado:

En la Unión Europea no están establecidas pautas homogéneas
para la eliminación de residuos químicos, los cuales tienen carácter
de residuos especiales, quedando sujetos su tratamiento y
eliminación a los reglamentos internos de cada país. Por tanto, en
cada caso, procede contactar con la autoridad competente, o bien
con los gestores legalmente autorizados para la eliminación de

residuos.

2001/573/CE: Decisión del Consejo, de 23 de julio de 2001, por la que se modifica la Decisión 2000/532/CE de la Comisión en lo relativo a la lista de residuos.

Directiva 91/156/CEE del Consejo de 18 de marzo de 1991 por la que se modifica la Directiva 75/442/CEE relativa a los residuos.

En España: Ley 10/1998, de 21 de abril, de Residuos. Publicada en BOE 22/04/98.

ORDEN MAM/304/2002, de 8 de febrero, por la que se publican las operaciones de valorización y eliminación de residuos y la lista europea de residuos. Publicada en BOE 19/02/02.

13.2 Envases contaminados:

Los envases y embalajes contaminados de sustancias o preparados peligrosos, tendrán el mismo tratamiento que los propios productos contenidos.

Directiva 94/62/CE del Parlamento Europeo y del Consejo, de 20 de diciembre de 1994, relativa a los envases y residuos de envases.

En España: Ley 11/1997, de 24 de abril, de Envases y Residuos de Envases. Publicada en BOE 25/04/97.

Real Decreto 782/1998, de 30 de abril, por el que se aprueba el Reglamento para el desarrollo y ejecución de la Ley 11/1997, de 24 de abril, de Envases y Residuos de Envases. Publicado en BOE 01/05/98.

14. Información relativa al transporte

Terrestre (ADR):

Denominación técnica: ÁCIDO SÚLFURICO con más del 51% de ácido
ONU 1830 Clase: 8 Grupo de embalaje: II

Marítimo (IMDG):

Denominación técnica: ÁCIDO SÚLFURICO con más del 51% de ácido
ONU 1830 Clase: 8 Grupo de embalaje: II

Aéreo (ICAO-IATA):

Denominación técnica: Acido Sulfúrico con más del 51% de ácido
ONU 1830 Clase: 8 Grupo de embalaje: II
Instrucciones de embalaje: CAO 813 PAX 809

15. Información reglamentaria

15.1 Etiquetado según Directiva de la CE



Símbolos:

Indicaciones de peligro: Corrosivo

Frases R: 35 Provoca quemaduras graves.

Frases S: 26-30-45 En caso de contacto con los ojos, lávense inmediata y abundantemente con agua y acúdase a un médico. No echar jamás agua a este producto. En caso de accidente o malestar, acuda inmediatamente al médico (si es posible, muéstrele la etiqueta).

Número de índice CE: 016-020-00-8

15.2 Disposiciones particulares en el ámbito comunitario:

Reglamento (CE) nº 1251/2001 de la Comisión, de 26 de junio de 2001, que modifica el Reglamento (CEE) nº 3769/92 por el que se aplica y modifica el Reglamento (CEE) nº 3677/90 del Consejo relativo a las medidas que deben adoptarse para impedir el desvío de determinadas sustancias para la fabricación ilícita de estupefacientes y sustancias psicotrópicas.

Reglamento (CE) nº 1116/2001 del Consejo, de 5 de junio de 2001, por el que se modifica el Reglamento (CEE) nº 3677/90 relativo a las medidas que deben adoptarse para impedir el desvío de determinadas sustancias para la fabricación ilícita de estupefacientes y de sustancias psicotrópicas.

Directiva 2001/8/CE de la Comisión, de 8 de febrero de 2001, por la que se sustituye el anexo I de la Directiva 92/109/CEE del Consejo relativa a la fabricación y puesta en el mercado de determinadas sustancias utilizadas para la fabricación ilícita de estupefacientes y sustancias psicotrópicas.

Reglamento (CE) nº 260/2001 de la Comisión, de 8 de febrero de 2001, por el que se sustituye el anexo del Reglamento (CEE) nº 3677/90 del Consejo relativo a las medidas que deben adoptarse para impedir el desvío de determinadas sustancias para la fabricación ilícita de estupefacientes y de sustancias psicotrópicas.

16. Otras informaciones

Número y fecha de la revisión: 2 18.12.02

Respecto a la revisión anterior, se han producido cambios en los apartados: 15.

Los datos consignados en la presente Ficha de Datos de Seguridad, están basados en nuestros actuales conocimientos, teniendo como único objeto informar sobre aspectos de seguridad y no garantizándose las propiedades y características en ella indicadas.

Ficha de seguridad del Hidróxido de Sodio (lentejas)

Panreac

CODIGO PRODUCTO: 211687

Sodio Hidróxido lentejas QP

HNaO

NaOH

M.= 40,00

CAS [1310-73-2]

EINECS 215-185-5

NC 2815 11 00

E -524

SINONIMOS: Sosa Cáustica •

DATOS FISICOS: Sólido blanco en forma de lentejas o escamas , translúcido , cáustico, deliquescente , absorbe CO₂ del aire

• Solubilidad en agua a 20 °C 1090 g/l • D: 2,13 • P. F.: 318 °C • P. E.: 1390 °C •

APLICACIONES: Reactivo en análisis: USP **29** • BP **2007** • Ph. Eur. **5.0** • Desecante • Reactivo en análisis para fusiones alcalinas • Preparación de sales de sodio •

BIBLIOGRAFIA: Merck Index **13** , 8701 • Sax SHS 000 • Safety **2** , 3144 A • Kühn-Birett N 12 • Römpf **8** , 2738 • Fieser **5** , 615 **7** , 336 **8** , 460 • ACS **IX** , 592 **4** (30-10-2003) **X** , 617 • ISO **6353/2**-1983 R - 34 , 48 • USP-NF **28** , 3078 **29** , 3745 • BP **2007** • Ph. Eur. **IV** , 1917 (2002) **5.0**, 2437 (2005) • JP **XIII** , 908 • F.C.C. **IV** , 364 **V** , 416 • Directiva **2000/63/CE** , 29 •

PELIGROSIDAD: C.E.: 011-002-00-6 • RTECS: WB 4900000 • DL L₀ oral rbt 500 mg/Kg • VLA-EC: 2 mg/m³ •



R: 35

S: 26-37/39-45

NORMAS DE TRANSPORTE: UN: 1823 • ADR: 8/II • IMDG: 8/II • IATA: 8/II • PAX: 814 • CAO: 816 •

ESPECIFICACIONES:

| | |
|-------------------------------|----------|
| Riqueza (Acidim.) | 98 % |
| Insoluble en H ₂ O | 0,05 % |
| Cloruro (Cl) | 0,01 % |
| Sulfato (SO ₄) | 0,01 % |
| Metales pesados (en Pb) | 0,005 % |
| As | 0,0003 % |
| Fe | 0,005 % |

Ficha de Datos de Seguridad Según Directiva 2001/58/CE
211687 Sodio Hidróxido lentejas QP

| |
|---|
| <p>1. Identificación de la sustancia/preparado y de la sociedad o empresa</p> <p>1.1 Identificación de la sustancia o del preparado</p> <p>Denominación: Sodio Hidróxido lentejas</p> <p>1.2 Uso de la sustancia o preparado:</p> <p>Para usos de laboratorio, análisis, investigación y química fina.</p> <p>1.3 Identificación de la sociedad o empresa:</p> <p>PANREAC QUIMICA, S.A.U. C/Garraf, 2 E-08211 Castellar del Vallès (Barcelona) España Tel.:(+34) 937 489 400 Urgencias: Número único de teléfono para llamadas de urgencia: 112 (UE) Tel.:(+34) 937 489 499</p> |
| <p>2. Composición/Información de los componentes</p> <p>Denominación: Sodio Hidróxido lentejas Fórmula: NaOH M.=40,00 CAS [1310-73-2] Número CE (EINECS): 215-185-5 Número de índice CE: 011-002-00-6</p> |
| <p>3. Identificación de los peligros</p> <p>Provoca quemaduras graves.</p> |
| <p>4. Primeros auxilios</p> <p>4.1 Indicaciones generales:</p> <p>En caso de pérdida del conocimiento nunca dar a beber ni provocar el vómito.</p> <p>4.2 Inhalación:</p> <p>Trasladar a la persona al aire libre. En caso de que persista el malestar, pedir atención médica.</p> <p>4.3 Contacto con la piel:</p> <p>Lavar abundantemente con agua. Quitarse las ropas contaminadas. En caso de irritación, pedir atención médica.</p> <p>4.4 Ojos:</p> |

| | |
|---|--|
| | <p>Lavar con agua abundante (mínimo durante 15 minutos), manteniendo los párpados abiertos. Pedir inmediatamente atención médica.</p> <p>4.5 Ingestión:</p> <p>Beber agua abundante. Evitar el vómito (existe riesgo de perforación). Pedir inmediatamente atención médica. No neutralizar.</p> |
| <p>5. Medidas de lucha contra incendio</p> <p>5.1 Medios de extinción adecuados:</p> <p>Dióxido de carbono (CO₂). Polvo seco. Cubrir con tierra o arena secas.</p> <p>5.2 Medios de extinción que NO deben utilizarse:</p> <p>-----</p> <p>5.3 Riesgos especiales:</p> <p>Incombustible.</p> <p>5.4 Equipos de protección:</p> <p>-----</p> | |
| <p>6. Medidas a tomar en caso de vertido accidental</p> <p>6.1 Precauciones individuales:</p> <p>No inhalar el polvo. Evitar el contacto con la piel, los ojos y la ropa.</p> <p>6.2 Precauciones para la protección del medio ambiente:</p> <p>Prevenir la contaminación del suelo, aguas y desagües.</p> <p>6.3 Métodos de recogida/limpieza:</p> <p>Recoger en seco y depositar en contenedores de residuos para su posterior eliminación de acuerdo con las normativas vigentes. Neutralizar con ácido sulfúrico diluido.</p> | |
| <p>7. Manipulación y almacenamiento</p> <p>7.1 Manipulación:</p> <p>Sin indicaciones particulares.</p> | |

7.2 Almacenamiento:

Recipientes bien cerrados. Ambiente seco. Temperatura ambiente.
Consérvese lejos de ácidos. No almacenar en recipientes metálicos.

8. Controles de exposición/protección personal

8.1 Medidas técnicas de protección:

8.2 Control límite de exposición:

VLA-EC: 2 mg/m³.

8.3 Protección respiratoria:

En caso de formarse polvo, usar equipo respiratorio adecuado. Filtro P.

8.4 Protección de las manos:

Usar guantes apropiados

8.5 Protección de los ojos:

Usar gafas apropiadas.

8.6 Medidas de higiene particulares:

Quitarse las ropas contaminadas. Usar ropa de trabajo adecuada.
Lavarse manos y cara antes de las pausas y al finalizar el trabajo.

8.7 Controles de la exposición del medio ambiente:

Cumplir con la legislación local vigente sobre protección del medio ambiente.

El proveedor de los medios de protección debe especificar el tipo de protección que debe usarse para la manipulación del producto, indicando el tipo de material y, cuando proceda, el tiempo de penetración de dicho material, en relación con la cantidad y la duración de la exposición.

9. Propiedades físicas y químicas

Aspecto:

Sólido blanco.

Olor:

| |
|--|
| <p>Inodoro.</p> <p>14 (50g/l)</p> <p>Punto de ebullición :1390°C</p> <p>Punto de fusión : 318°C</p> <p>Densidad (20/4): 2,13</p> <p>Solubilidad: 1090 g/l en agua a 20°C</p> |
| <p>10. Estabilidad y reactividad</p> <p>10.1 Condiciones que deben evitarse:</p> <p>-----</p> <p>10.2 Materias que deben evitarse:</p> <p>Metales. Metales ligeros: Formación de hidrógeno (riesgo de explosión). Acidos. Metales alcalinotérreos en polvo. Compuestos amoniacales. Cianuros. Magnesio. Compuestos orgánicos de nitrógeno. Compuestos orgánicos. Fenoles. Compuestos oxidables.</p> <p>10.3 Productos de descomposición peligrosos:</p> <p>-----</p> <p>10.4 Información complementaria:</p> <p>Higroscópico.</p> |
| <p>11. Información toxicológica</p> <p>11.1 Toxicidad aguda:</p> <p>DLLo oral conejo: 500 mg/kg.</p> <p>DL₅₀ intraperitoneal ratón: 40 mg/kg.</p> <p>11.2 Efectos peligrosos para la salud:</p> <p>Por inhalación: Quemaduras en mucosas.</p> <p>En contacto con la piel: quemaduras.</p> <p>Por contacto ocular: quemaduras, ceguera (lesión irreversible del nervio óptico).</p> <p>Por ingestión: Irritaciones en mucosas de la boca, garganta, esófago y tracto intestinal. Riesgo de perforación intestinal y de esófago.</p> |
| <p>12. Información Ecológica</p> <p>12.1 Movilidad : ----</p> <p>12.2 Ecotoxicidad :</p> <p>12.2.1 - Test EC₅₀ (mg/l) :</p> <p>Peces = 189 mg/l ; Clasificación : Altamente tóxico.</p> <p>12.2.2 - Medio receptor :</p> |

Riesgo para el medio acuático = Medio
Riesgo para el medio terrestre = Bajo
12.2.3 - Observaciones :
Ecotóxico para organismos acuáticos y terrestres debido a la desviación del pH. Efectos agudos importantes en la zona de vertido.

12.3 Degradabilidad :

12.3.1 - Test :-----
12.3.2 - Clasificación sobre degradación biótica :
DBO₅/DQO Biodegradabilidad = -----
12.3.3 - Degradación abiótica según pH : -----
12.3.4 - Observaciones :-----

12.4 Acumulación :

12.4.1 - Test :-----
12.4.2 - Bioacumulación :
Riesgo = -----
12.4.3 - Observaciones :-----

12.5 Otros posibles efectos sobre el medio natural :

El tratamiento es la neutralización. Fácilmente depurable. No permitir su incorporación al suelo ni a acuíferos. Producto altamente corrosivo.

13. Consideraciones sobre la eliminación

13.1 Sustancia o preparado:

En la Unión Europea no están establecidas pautas homogéneas para la eliminación de residuos químicos, los cuales tienen carácter de residuos especiales, quedando sujetos su tratamiento y eliminación a los reglamentos internos de cada país. Por tanto, en cada caso, procede contactar con la autoridad competente, o bien con los gestores legalmente autorizados para la eliminación de residuos.

2001/573/CE: Decisión del Consejo, de 23 de julio de 2001, por la que se modifica la Decisión 2000/532/CE de la Comisión en lo relativo a la lista de residuos.

Directiva 91/156/CEE del Consejo de 18 de marzo de 1991 por la que se modifica la Directiva 75/442/CEE relativa a los residuos.

En España: Ley 10/1998, de 21 de abril, de Residuos. Publicada en BOE 22/04/98.

ORDEN MAM/304/2002, de 8 de febrero, por la que se publican las operaciones de valorización y eliminación de residuos y la lista europea de residuos. Publicada en BOE 19/02/02.

13.2 Envases contaminados:

Los envases y embalajes contaminados de sustancias o preparados peligrosos, tendrán el mismo tratamiento que los propios productos contenidos.

Directiva 94/62/CE del Parlamento Europeo y del Consejo, de 20 de diciembre de 1994, relativa a los envases y residuos de envases.

En España: Ley 11/1997, de 24 de abril, de Envases y Residuos de Envases. Publicada en BOE 25/04/97.

Real Decreto 782/1998, de 30 de abril, por el que se aprueba el Reglamento para el desarrollo y ejecución de la Ley 11/1997, de 24 de abril, de Envases y Residuos de Envases. Publicado en BOE 01/05/98.

14. Información relativa al transporte

Terrestre (ADR):
Denominación técnica: HIDRÓXIDO SÓDICO SÓLIDO
ONU 1823 Clase: 8 Grupo de embalaje: II
Marítimo (IMDG):
Denominación técnica: HIDRÓXIDO SÓDICO SÓLIDO
ONU 1823 Clase: 8 Grupo de embalaje: II
Aéreo (ICAO-IATA):
Denominación técnica: Hidróxido sódico, sólido
ONU 1823 Clase: 8 Grupo de embalaje: II
Instrucciones de embalaje: CAO 816 PAX 814

15. Información reglamentaria

15.1 Etiquetado según Directiva de la CE



Símbolos:

Indicaciones de peligro: Corrosivo

Frases R: 35 Provoca quemaduras graves.

Frases S: 26-37/39-45 En caso de contacto con los ojos, lávense inmediata y abundantemente con agua y acúdase a un médico. Úsese guantes adecuados y protección para los ojos-la cara. En caso de accidente o malestar, acuda inmediatamente al médico (si es posible, muéstrela la etiqueta).

Número de índice CE: 011-002-00-6

15.2 Disposiciones particulares en el ámbito comunitario: -----

16. Otras informaciones

Número y fecha de la revisión: 1 18.12.02

Respecto a la revisión anterior, se han producido cambios en los apartados: 8.

Los datos consignados en la presente Ficha de Datos de Seguridad, están basados en nuestros actuales conocimientos, teniendo como único objeto informar sobre aspectos de seguridad y no garantizándose las propiedades y características en ella indicadas.

Ficha de seguridad del Sulfato ferroso heptahidratado.

Panreac

CODIGO PRODUCTO: **131362**

Hierro(II) Sulfato 7-hidrato PA-ACS

$\text{FeO}_4\text{S}\cdot 7\text{H}_2\text{O}$

$\text{FeSO}_4\cdot 7\text{H}_2\text{O}$

M.= 278,02

CAS [7782-63-0]

EINECS 231-753-5

NC 2833 29 50

SINONIMOS: Vitriolo verde •

DATOS FISICOS: Cristales verde azulado • Solubilidad en agua a 20 ° C 400 g/l • D: 1,897 • P. F.: 64 ° C • Desc. térmica desde 400 ° C •

APLICACIONES: Reactivo en análisis: USP **29** • BP **2007** • Ph. Eur. **5.0** • Componente en las soluciones de DQO (Demanda Química de Oxígeno) UNE **77-004-89** (1989) . ISO **6060**-1986 . Norme Française NFT **90-101** (1988) •

BIBLIOGRAFIA: Merck Index **12** , 4105 **13** , 4091 • Sax FBO 000 • Safety **2** , 2014 D • Römpf **8** , 1069 • Fieser **1** , 393 **4** , 237 **5** , 308 **11** , 276 • ACS **IX** , 310 **4** (30-10-2003) **X** , 328 • ISO **6353/3**-1987R - 69 , 37 • USP **28** , 821 **29** , 1036 • BP **2007** • Ph. Eur.**IV** , 1185 (2002) **3** , 3029 (2003) **5.0** , 1591 (2005) • F.C.C. **IV** , 155 **V** , 178 •

PELIGROSIDAD: RTECS: NO 8510000 • DL₅₀ oral mus 1520 mg/Kg • DL L₀ oral rat 1389 mg/Kg •



R: 22

S: 24

ESPECIFICACIONES:

| | |
|------------------------|--------|
| Riqueza mínima (Perm.) | 99,0 % |
|------------------------|--------|

| | |
|------------|---------|
| pH sol. 5% | 3,0-4,0 |
|------------|---------|

Ficha de Datos de Seguridad Según Directiva 2001/58/CE
131362 Hierro(II) Sulfato 7-hidrato PA-ACS

| | |
|---|--|
| 1. Identificación de la sustancia/preparado y de la sociedad o empresa | |
| 1.1 | Identificación de la sustancia o del preparado Denominación: Hierro(II) Sulfato 7-hidrato |
| 1.2 | Uso de la sustancia o preparado: Para usos de laboratorio, análisis, investigación y química fina. |
| 1.3 | Identificación de la sociedad o empresa: PANREAC QUIMICA, S.A.U. C/Garraf, 2 E-08211 Castellar del Vallès (Barcelona) España Tel.:(+34) 937 489 400 Urgencias: Número único de teléfono para llamadas de urgencia: 112 (UE) Tel.:(+34) 937 489 499 |
| 2. Composición/Información de los componentes | |
| Denominación: Hierro(II) Sulfato 7-hidrato Fórmula: $\text{FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ M.=278,02 CAS [7782-63-0] Número CE (EINECS): 231-753-5 | |
| 3. Identificación de los peligros | |
| Nocivo por ingestión. | |
| 4. Primeros auxilios | |
| 4.1 | Indicaciones generales: En caso de pérdida del conocimiento nunca dar a beber ni provocar el vómito. |
| 4.2 | Inhalación: Ir al aire fresco. |
| 4.3 | Contacto con la piel: Lavar abundantemente con agua. Quitarse las ropas contaminadas. |

4.4 Ojos:

Lavar con agua abundante manteniendo los párpados abiertos.

4.5 Ingestión:

Beber agua abundante. Beber leche sola o mezclada con huevos crudos. Provocar el vómito. Pedir atención médica.

5. Medidas de lucha contra incendio

5.1 Medios de extinción adecuados:

Los apropiados al entorno.

5.2 Medios de extinción que NO deben utilizarse:

5.3 Riesgos especiales:

Incombustible. En caso de incendio pueden formarse vapores tóxicos de SOx.

5.4 Equipos de protección:

6. Medidas a tomar en caso de vertido accidental

6.1 Precauciones individuales:

Evitar el contacto con la piel, los ojos y la ropa.

6.2 Precauciones para la protección del medio ambiente:

No permitir el paso al sistema de desagües. Evitar la contaminación del suelo, aguas y desagües.

6.3 Métodos de recogida/limpieza:

Recoger en seco y depositar en contenedores de residuos para su posterior eliminación de acuerdo con las normativas vigentes. Limpiar los restos con agua abundante.

7. Manipulación y almacenamiento

7.1 Manipulación:

Sin indicaciones particulares.

7.2 Almacenamiento:

Recipientes bien cerrados. Ambiente seco. En local bien ventilado.
Temperatura ambiente.

8. Controles de exposición/protección personal

8.1 Medidas técnicas de protección:

8.2 Control límite de exposición:

8.3 Protección respiratoria:

En caso de formarse polvo, usar equipo respiratorio adecuado.

8.4 Protección de las manos:

Usar guantes apropiados

8.5 Protección de los ojos:

Usar gafas apropiadas.

8.6 Medidas de higiene particulares:

Quitarse las ropas contaminadas. Lavarse las manos antes de las pausas y al finalizar el trabajo.

8.7 Controles de la exposición del medio ambiente:

Cumplir con la legislación local vigente sobre protección del medio ambiente.

El proveedor de los medios de protección debe especificar el tipo de protección que debe usarse para la manipulación del producto, indicando el tipo de material y, cuando proceda, el tiempo de penetración de dicho material, en relación con la cantidad y la duración de la exposición.

9. Propiedades físicas y químicas

Aspecto:

Sólido verde

Olor:

Inodoro.

3-4
Punto de fusión : 64°C
Densidad (20/4): 1,89
Solubilidad: 400 g/l en agua a 20°C

10. Estabilidad y reactividad

10.1 Condiciones que deben evitarse:

10.2 Materias que deben evitarse:

10.3 Productos de descomposición peligrosos:

SO_x.

10.4 Información complementaria:

11. Información toxicológica

11.1 Toxicidad aguda:

DL₅₀ oral ratón: 1520 mg/kg
DL₅₀ intraperitoneal ratón: 245 mg/kg
DLLo oral conejo: 2778 mg/kg
DLLo oral rata: 1389 mg/kg

11.2 Efectos peligrosos para la salud:

Por inhalación: Irritaciones.
En contacto con la piel: Irritaciones.
Por contacto ocular: Irritaciones.
Por ingestión: Irritaciones en el aparato digestivo.
Por ingestión de grandes cantidades: vómitos, desarreglos intestinales, hipotensión.
No se descartan otras características peligrosas. Observar las precauciones habituales en el manejo de productos químicos.

12. Información Ecológica

12.1 Movilidad :

12.2 Ecotoxicidad :

12.2.1 - Test EC_{50} (mg/l) :
Peces (Fe, pH 6,5-7,5) = EC_0 0,9 mg/l ; Clasificación :
Extremadamente tóxico.
Peces (Fe pH 5,5-6,7) = EC_0 1 mg/l ; Clasificación :
Extremadamente tóxico.
Peces (Fe) = EC_{100} 50 mg/l ; Clasificación : Extremadamente tóxico.
12.2.2 - Medio receptor :
Riesgo para el medio acuático = Medio
Riesgo para el medio terrestre = Bajo
12.2.3 - Observaciones :
Ecotoxicidad aguda en la zona de vertido.

12.3 Degradabilidad :

12.3.1 - Test :-----
12.3.2 - Clasificación sobre degradación biótica :
DBO₅/DQO Biodegradabilidad = ----
12.3.3 - Degradación abiótica según pH : -----
12.3.4 - Observaciones :

12.4 Acumulación :

12.4.1 - Test :

12.4.2 - Bioacumulación :
Riesgo = ----
12.4.3 - Observaciones :

12.5 Otros posibles efectos sobre el medio natural :

Favorece la eutrofia en ríos y acuíferos. No permitir su incorporación al suelo ni a acuíferos.

13. Consideraciones sobre la eliminación

13.1 Sustancia o preparado:

En la Unión Europea no están establecidas pautas homogéneas para la eliminación de residuos químicos, los cuales tienen carácter de residuos especiales, quedando sujetos su tratamiento y eliminación a los reglamentos internos de cada país. Por tanto, en cada caso, procede contactar con la autoridad competente, o bien con los gestores legalmente autorizados para la eliminación de residuos.

2001/573/CE: Decisión del Consejo, de 23 de julio de 2001, por la que se modifica la Decisión 2000/532/CE de la Comisión en lo relativo a la lista de residuos.

Directiva 91/156/CEE del Consejo de 18 de marzo de 1991 por la que se modifica la Directiva 75/442/CEE relativa a los residuos.

En España: Ley 10/1998, de 21 de abril, de Residuos. Publicada en BOE 22/04/98.

ORDEN MAM/304/2002, de 8 de febrero, por la que se publican las operaciones de valorización y eliminación de residuos y la lista europea de residuos. Publicada en BOE 19/02/02.

13.2 Envases contaminados:

Los envases y embalajes contaminados de sustancias o preparados peligrosos, tendrán el mismo tratamiento que los propios productos contenidos.

Directiva 94/62/CE del Parlamento Europeo y del Consejo, de 20 de diciembre de 1994, relativa a los envases y residuos de envases.

En España: Ley 11/1997, de 24 de abril, de Envases y Residuos de Envases. Publicada en BOE 25/04/97.

Real Decreto 782/1998, de 30 de abril, por el que se aprueba el Reglamento para el desarrollo y ejecución de la Ley 11/1997, de 24 de abril, de Envases y Residuos de Envases. Publicado en BOE 01/05/98.

14. Información relativa al transporte

15. Información reglamentaria

Etiquetado según Directiva de la CE



Símbolos:

Indicaciones de peligro: Nocivo

Frases R: 22 Nocivo por ingestión.

Frases S: 24 Evítese el contacto con la piel.

16. Otras informaciones

Número y fecha de la revisión: 0 18.12.02

Los datos consignados en la presente Ficha de Datos de Seguridad, están basados en nuestros actuales conocimientos, teniendo como único objeto informar sobre aspectos de seguridad y no garantizándose las propiedades y características en ella indicadas.

Ficha de seguridad del meta-Vanadato amónico

Panreac

CODIGO PRODUCTO: **142352**

Amonio meta-Vanadato PRS

H_4NO_3V

NH_4VO_3

M.= 116,98

CAS [7803-55-6]

EINECS 232-261-3

NC 2841 90 30

SINONIMOS: Amonio Metavanadato • Amonio *mono*-Vanadato •

DATOS FISICOS: Polvo cristalino blanco o lig. amarillento • Solubilidad en agua a 15 °C 6,2 g/l • D: 2,326 •

APLICACIONES: Reactivo en análisis: RFE I • USP 25 • BP 2000 • Ph. Eur. IV • Componente del reactivo molibdato-vanadato para la determinación de fosfatos • Reactivo de pulverización en CCF ; "Thin-Layer Chromatography " Vol. 1a , 427. VCH Verlagsgesellschaft mbH.D-6940 Weinheim (1990) •

BIBLIOGRAFIA: Merck Index 12 , 605 13 , 572 • Sax ANY 250 • Safety 2 , 241 B • Römpf 8 , 192 • Fieser 1 , 1057 • ACS IX , 151 X , 163 •

PELIGROSIDAD: RTECS: YW 0875000 • DL 50 oral rat 160 mg/Kg •



R: 25-36/37/38

S: 37-45

NORMAS DE TRANSPORTE: UN: 2859 • ADR: 6.1/II • IMDG: 6.1/II • IATA: 6.1/II • PAX: 613 • CAO: 615•

ESPECIFICACIONES:

| | |
|-----------------------|---------|
| Riqueza (Redox) | 98 % |
| Insoluble en NH_4OH | 0,02 % |
| Cloruro (Cl) | 0,05 % |
| Sulfato (SO_4) | 0,05 % |
| Cu | 0,005 % |
| Fe | 0,005 % |
| Ni | 0,005 % |
| Pb | 0,005 % |

Ficha de Datos de Seguridad Según Directiva 2001/58/CE
142352 Amonio meta-Vanadato PRS

| | |
|--|--|
| 1. Identificación de la sustancia/preparado y de la sociedad o empresa | |
| 1.1 | Identificación de la sustancia o del preparado Denominación: Amonio meta-Vanadato |
| 1.2 | Uso de la sustancia o preparado: Para usos de laboratorio, análisis, investigación y química fina. |
| 1.3 | Identificación de la sociedad o empresa: PANREAC QUIMICA, S.A.U. C/Garraf, 2 E-08211 Castellar del Vallès (Barcelona) España Tel.:(+34) 937 489 400 Urgencias: Número único de teléfono para llamadas de urgencia: 112 (UE) Tel.:(+34) 937 489 499 |
| 2. Composición/Información de los componentes | |
| Denominación: Amonio meta-Vanadato Fórmula: NH_4VO_3 M.=116,98 CAS [7803-55-6] Número CE (EINECS): 232-261-3 | |
| 3. Identificación de los peligros | |
| Tóxico por ingestión. Irrita los ojos, la piel y las vías respiratorias. | |
| 4. Primeros auxilios | |
| 4.1 | Indicaciones generales: En caso de pérdida del conocimiento nunca dar a beber ni provocar el vómito. |
| 4.2 | Inhalación: Trasladar a la persona al aire libre. En caso de asfixia proceder a la respiración artificial. |
| 4.3 | Contacto con la piel: Lavar abundantemente con agua. Quitarse las ropas contaminadas. |

| |
|--|
| <p>4.4 Ojos:</p> <p>Lavar con agua abundante manteniendo los párpados abiertos. Pedir atención médica.</p> <p>4.5 Ingestión:</p> <p>Beber agua abundante. Provocar el vómito. Pedir atención médica. En caso de asfixia proceder a la respiración artificial. Pedir inmediatamente atención médica.</p> |
| <p>5. Medidas de lucha contra incendio</p> <p>5.1 Medios de extinción adecuados:</p> <p>Los apropiados al entorno.</p> <p>5.2 Medios de extinción que NO deben utilizarse:</p> <p>-----</p> <p>5.3 Riesgos especiales:</p> <p>Incombustible. En caso de incendio pueden formarse vapores tóxicos.</p> <p>5.4 Equipos de protección:</p> <p>-----</p> |
| <p>6. Medidas a tomar en caso de vertido accidental</p> <p>6.1 Precauciones individuales:</p> <p>-----</p> <p>6.2 Precauciones para la protección del medio ambiente:</p> <p>No permitir el paso al sistema de desagües. Evitar la contaminación del suelo, aguas y desagües.</p> <p>6.3 Métodos de recogida/limpieza:</p> <p>Recoger en seco y depositar en contenedores de residuos para su posterior eliminación de acuerdo con las normativas vigentes. Limpiar los restos con agua abundante.</p> |
| <p>7. Manipulación y almacenamiento</p> <p>7.1 Manipulación:</p> <p>Sin indicaciones particulares.</p> |

7.2 Almacenamiento:

Recipientes bien cerrados. Ambiente seco. En local bien ventilado. Temperatura ambiente.

8. Controles de exposición/protección personal

8.1 Medidas técnicas de protección:

8.2 Control límite de exposición:

8.3 Protección respiratoria:

En caso de formarse polvo, usar equipo respiratorio adecuado.

8.4 Protección de las manos:

Usar guantes apropiados

8.5 Protección de los ojos:

Usar gafas apropiadas.

8.6 Medidas de higiene particulares:

Quitarse las ropas contaminadas. Lavarse las manos antes de las pausas y al finalizar el trabajo.

8.7 Controles de la exposición del medio ambiente:

Cumplir con la legislación local vigente sobre protección del medio ambiente.

El proveedor de los medios de protección debe especificar el tipo de protección que debe usarse para la manipulación del producto, indicando el tipo de material y, cuando proceda, el tiempo de penetración de dicho material, en relación con la cantidad y la duración de la exposición.

9. Propiedades físicas y químicas

Aspecto:

Polvo cristalino blanco o ligeramente amarillento.

Olor:

Característico.

~6,5 (5 g/l)

Densidad (20/4): 2,33

Solubilidad: 6,2 g/l en agua a 15°C.

10. Estabilidad y reactividad

10.1 Condiciones que deben evitarse:

Temperaturas elevadas.

10.2 Materias que deben evitarse:

10.3 Productos de descomposición peligrosos:

Amoniaco.

10.4 Información complementaria:

11. Información toxicológica

11.1 Toxicidad aguda:

DL₅₀ oral rata: 160 mg/kg

DL₅₀ intraperitoneal rata: 18 mg/kg

11.2 Efectos peligrosos para la salud:

Por inhalación: Irritaciones en piel, ojos y mucosas. Provoca tos, dificultades respiratorias.

Por absorción: alteraciones sanguíneas, trastornos cardiovasculares, pérdida de peso.

12. Información Ecológica

12.1 Movilidad :

12.2 Ecotoxicidad :

12.2.1 - Test EC₅₀ (mg/l) :

Peces (NH₄) = 0,3 mg/l ; Clasificación : Extremadamente tóxico.

Bacterias (Photobacterium phosphoreum) (NH₄) = 2 mg/l ;

Clasificación : Extremadamente tóxico.

Peces (V) = 4,8 - 30 mg/l ; Clasificación : Extremadamente tóxico.
12.2.2 - Medio receptor :
Riesgo para el medio acuático = Alto
Riesgo para el medio terrestre = Medio
12.2.3 - Observaciones :
La ecotoxicidad se debe al ión amonio y al vanadio.

12.3 Degradabilidad :

12.3.1 - Test :-----
12.3.2 - Clasificación sobre degradación biótica :
DBO₅/DQO Biodegradabilidad = ----
12.3.3 - Degradación abiótica según pH : -----
12.3.4 - Observaciones :

12.4 Acumulación :

12.4.1 - Test :

12.4.2 - Bioacumulación :
Riesgo = ----
12.4.3 - Observaciones :

12.5 Otros posibles efectos sobre el medio natural :

No permitir su incorporación al suelo ni a acuíferos.

13. Consideraciones sobre la eliminación

13.1 Sustancia o preparado:

En la Unión Europea no están establecidas pautas homogéneas para la eliminación de residuos químicos, los cuales tienen carácter de residuos especiales, quedando sujetos su tratamiento y eliminación a los reglamentos internos de cada país. Por tanto, en cada caso, procede contactar con la autoridad competente, o bien con los gestores legalmente autorizados para la eliminación de residuos.

2001/573/CE: Decisión del Consejo, de 23 de julio de 2001, por la que se modifica la Decisión 2000/532/CE de la Comisión en lo relativo a la lista de residuos.

Directiva 91/156/CEE del Consejo de 18 de marzo de 1991 por la que se modifica la Directiva 75/442/CEE relativa a los residuos.

En España: Ley 10/1998, de 21 de abril, de Residuos. Publicada en BOE 22/04/98.

ORDEN MAM/304/2002, de 8 de febrero, por la que se publican las operaciones de valorización y eliminación de residuos y la lista europea de residuos. Publicada en BOE 19/02/02.

13.2 Envases contaminados:

Los envases y embalajes contaminados de sustancias o preparados peligrosos, tendrán el mismo tratamiento que los propios productos contenidos.

Directiva 94/62/CE del Parlamento Europeo y del Consejo, de 20 de

diciembre de 1994, relativa a los envases y residuos de envases.
En España: Ley 11/1997, de 24 de abril, de Envases y Residuos de Envases. Publicada en BOE 25/04/97.
Real Decreto 782/1998, de 30 de abril, por el que se aprueba el Reglamento para el desarrollo y ejecución de la Ley 11/1997, de 24 de abril, de Envases y Residuos de Envases. Publicado en BOE 01/05/98.

14. Información relativa al transporte

Terrestre (ADR):
Denominación técnica: Amonio meta-Vanadato
ONU 2859 Clase: 6.1 Grupo de embalaje: II
Marítimo (IMDG):
Denominación técnica: Amonio meta-Vanadato
ONU 2859 Clase: 6.1 Grupo de embalaje: II
Aéreo (ICAO-IATA):
Denominación técnica: Metavanadato amónico
ONU 2859 Clase: 6.1 Grupo de embalaje: II
Instrucciones de embalaje: CAO 615 PAX 613

15. Información reglamentaria

Etiquetado según Directiva de la CE



Símbolos: 
Indicaciones de peligro: Tóxico
Frases R: 25-36/37/38 Tóxico por ingestión. Irrita los ojos, la piel y las vías respiratorias.
Frases S: 37-45 Úsense guantes adecuados. En caso de accidente o malestar, acuda inmediatamente al médico (si es posible, muéstrole la etiqueta).

16. Otras informaciones

Número y fecha de la revisión: 0 18.12.02
Los datos consignados en la presente Ficha de Datos de Seguridad, están basados en nuestros actuales conocimientos, teniendo como único objeto informar sobre aspectos de seguridad y no garantizándose las propiedades y características en ella indicadas.

Ficha de seguridad del Permanganato de potasio

Panreac

CODIGO PRODUCTO: 131527

Potasio Permanganato (Permanganato Potásico) PA-ACS

KMnO₄

KMnO₄

M.= 158,04

CAS [7722-64-7]

EINECS 231-760-3

NC 2841 61 00

SINONIMOS: Acido Permangánico Sal Potásica •

DATOS FISICOS: Cristales de color marrón oscuro a violeta • Solubilidad en agua a 20 °C 65 g/l • Desc. térmica desde 240 °C

APLICACIONES: Reactivo en análisis: USP **29** • BP **2007** • Ph. Eur. **5.0** • Preparación de soluciones volumétricas en manganometría • Antiséptico en la industria Farmacéutica • Para la destrucción de materia orgánica en las determinaciones de mercurio • Reactivo en síntesis: Oxidante en síntesis orgánica; A. J. Fatiadi, *Synthesis*, **85**, (1987) • Oxidación de iminas a nitronas; D. Christensen et al., *J. Org. Chem.*, **54**, 126 (1989) • Preparación de hidroxialquilcarboxilatos; N. J. Huang et al., *Synth. Commun.*, **20**, 1563 (1990) • Oxidación de alquenos con KMnO₄ sobre soporte sólido; B. M. Choudary et al., *Synth. Commun.*, **21**, 2007 (1991) •

BIBLIOGRAFIA: Merck Index **12**, 7824 **13**, 7740 • Sax PLC 000 • Safety **2**, 2908 B • Kühn-Birett K 13 • Römpf **8**, 2022 • Fieser **1**, 942 **2**, 348 **4**, 412 **5**, 582 **8**, 416 **9**, 388 **10**, 330 **11**, 440 **12**, 413 **13**, 258 **14**, 267 **15**, 273 • ACS **IX**, 524 **4** (30-10-2003) **X**, 547 • ISO **6353/2-1983R** - 26, 36 • USP **28**, 1598 **29**, 1950 • BP **2007** • Ph. Eur. **IV**, 1793 (2002) **5.0**, 2286 (2005) •

PELIGROSIDAD: C.E.: 025-002-00-9 • RTECS: SD 6475000 • DL₅₀ oral rat 1090 mg/Kg • DL L₀ oral hmn 143 mg/Kg •



R: 8-22-50/53

S: 60-61

NORMAS DE TRANSPORTE: UN: 1490 • ADR: 5.1/II • IMDG: 5.1/II • IATA: 5.1/II • PAX: 508 • CAO: 511 •

OBSERVACIONES: Producto regulado como precursor de drogas •

ESPECIFICACIONES:

Riqueza mínima 99,0 %

LIMITE MAXIMO DE IMPUREZAS

Insoluble en H₂O 0,2 %

Compuestos de N (en N) 0,005 %

Cloruro y Clorato (en Cl) 0,005 %

Sulfato (SO₄) 0,02 %

Ficha de Datos de Seguridad
Según Directiva 2001/58/CE

131527 **Potasio Permanganato PA-ACS**

1. Identificación de la sustancia/preparado y de la sociedad o empresa

1.1 Identificación de la sustancia o del preparado

Denominación:
Potasio Permanganato

1.2 Uso de la sustancia o preparado:

Para usos de laboratorio, análisis, investigación y química fina.

1.3 Identificación de la sociedad o empresa:

PANREAC QUIMICA, S.A.U. C/Garraf, 2 E-08211 Castellar del Vallès
(Barcelona) España Tel.:(+34) 937 489 400
Urgencias:
Número único de teléfono para llamadas de urgencia: 112 (UE)
Tel.:(+34) 937 489 499

2. Composición/Información de los componentes

Denominación: Potasio Permanganato
Fórmula: KMnO₄ M.=158,04 CAS [7722-64-7]
Número CE (EINECS): 231-760-3
Número de índice CE: 025-002-00-9

3. Identificación de los peligros

Peligro de fuego en contacto con materias combustibles. Nocivo por ingestión. Muy tóxico para los organismos acuáticos, puede provocar a largo plazo efectos negativos en el medio ambiente acuático.

4. Primeros auxilios

4.1 Indicaciones generales:

En caso de pérdida del conocimiento nunca dar a beber ni provocar el vómito.

4.2 Inhalación:

Trasladar a la persona al aire libre. En caso de asfixia proceder a la respiración artificial. En caso de que persista el malestar, pedir atención médica.

4.3 Contacto con la piel:

Lavar abundantemente con agua. Quitarse las ropas contaminadas.

4.4 Ojos:

Lavar con agua abundante (mínimo durante 15 minutos), manteniendo los párpados abiertos. Pedir atención médica.

4.5 Ingestión:

Beber leche sola o mezclada con huevos crudos. Provocar el vómito. Lavado de estómago. Pedir atención médica.

5. Medidas de lucha contra incendio

5.1 Medios de extinción adecuados:

Los apropiados al entorno.

5.2 Medios de extinción que NO deben utilizarse:

5.3 Riesgos especiales:

Incombustible. Favorece la formación de incendios. Mantener alejado de sustancias combustibles.

5.4 Equipos de protección:

6. Medidas a tomar en caso de vertido accidental

6.1 Precauciones individuales:

| | |
|---|---|
| | No inhalar el polvo. |
| 6.2 | Precauciones para la protección del medio ambiente: ----- |
| 6.3 | Métodos de recogida/limpieza: Recoger en seco y depositar en contenedores de residuos para su posterior eliminación de acuerdo con las normativas vigentes. Limpiar los restos con agua abundante. |
| 7. Manipulación y almacenamiento | |
| 7.1 | Manipulación: Sin indicaciones particulares. |
| 7.2 | Almacenamiento: Recipientes bien cerrados. Ambiente seco. Mantener alejado de sustancias inflamables, fuentes de ignición y calor. Temperatura ambiente. |
| 8. Controles de exposición/protección personal | |
| 8.1 | Medidas técnicas de protección: ----- |
| 8.2 | Control límite de exposición: ----- |
| 8.3 | Protección respiratoria: En caso de formarse polvo, usar equipo respiratorio adecuado. |
| 8.4 | Protección de las manos: Usar guantes apropiados |
| 8.5 | Protección de los ojos: Usar gafas apropiadas. |
| 8.6 | Medidas de higiene particulares: Quitarse las ropas contaminadas. Usar ropa de trabajo adecuada. Lavarse las manos antes de las pausas y al finalizar el trabajo. |

8.7 Controles de la exposición del medio ambiente:

Cumplir con la legislación local vigente sobre protección del medio ambiente.

El proveedor de los medios de protección debe especificar el tipo de protección que debe usarse para la manipulación del producto, indicando el tipo de material y, cuando proceda, el tiempo de penetración de dicho material, en relación con la cantidad y la duración de la exposición.

9. Propiedades físicas y químicas

Aspecto:

Sólido violeta.

Olor:

Inodoro.

~7-9

Punto de ebullición :>240°C (dec.)

Punto de fusión : 50°C

Presión de vapor: <0,01 mbar(20°)

Densidad (20/4): 2,70

Solubilidad: 65 g/l en agua a 20°C

10. Estabilidad y reactividad

10.1 Condiciones que deben evitarse:

10.2 Materias que deben evitarse:

Compuestos orgánicos. Ácidos. Azufre. Ácido sulfúrico concentrado. Compuestos amoniacales. Alcoholes./ Ácido sulfúrico concentrado. Fósforo. Sustancias inflamables. Peróxido de hidrógeno (agua oxigenada). Hidroxilamina. HF.

10.3 Productos de descomposición peligrosos:

10.4 Información complementaria:

Agente oxidante fuerte. En polvo, existe riesgo de explosión.

11. Información toxicológica

11.1 Toxicidad aguda:

DL₅₀ oral rata: 1090 mg/kg

11.2 Efectos peligrosos para la salud:

Por inhalación del polvo: Puede provocar edemas en el tracto respiratorio

En contacto con la piel: quemaduras.

Por contacto ocular: quemaduras.

Por ingestión: náuseas, vómitos, Riesgo de perforación intestinal y de esófago.

12. Información Ecológica

12.1 Movilidad :

12.2 Ecotoxicidad :

12.2.1 - Test EC₅₀ (mg/l) :

Crustáceos (Daphnia Magna) = EC₀ 0,63 ; Clasificación :
Extremadamente tóxico.

Peces = 3,2 mg/l ; Clasificación : Extremadamente tóxico.

12.2.2 - Medio receptor :

Riesgo para el medio acuático = Bajo

Riesgo para el medio terrestre = Bajo

12.2.3 - Observaciones :

Efecto bactericida. Tóxico en general para organismos acuáticos.

Ecotoxicidad aguda en la zona de vertido.

12.3 Degradabilidad :

12.3.1 - Test :-----

12.3.2 - Clasificación sobre degradación biótica :

DBO₅/DQO Biodegradabilidad = -----

= -----

12.3.3 - Degradación abiótica según pH : -----

12.3.4 - Observaciones :

12.4 Acumulación :

12.4.1 - Test :

12.4.2 - Bioacumulación :

Riesgo = -----

12.4.3 - Observaciones :

12.5 Otros posibles efectos sobre el medio natural :

No permitir su incorporación al suelo ni a acuíferos. Producto utilizado en la depuración físico-química de aguas con fuerte carga orgánica.

13. Consideraciones sobre la eliminación

13.1 Sustancia o preparado:

En la Unión Europea no están establecidas pautas homogéneas para la eliminación de residuos químicos, los cuales tienen carácter de residuos especiales, quedando sujetos su tratamiento y eliminación a los reglamentos internos de cada país. Por tanto, en cada caso, procede contactar con la autoridad competente, o bien con los gestores legalmente autorizados para la eliminación de residuos.

2001/573/CE: Decisión del Consejo, de 23 de julio de 2001, por la que se modifica la Decisión 2000/532/CE de la Comisión en lo relativo a la lista de residuos.

Directiva 91/156/CEE del Consejo de 18 de marzo de 1991 por la que se modifica la Directiva 75/442/CEE relativa a los residuos.

En España: Ley 10/1998, de 21 de abril, de Residuos. Publicada en BOE 22/04/98.

ORDEN MAM/304/2002, de 8 de febrero, por la que se publican las operaciones de valorización y eliminación de residuos y la lista europea de residuos. Publicada en BOE 19/02/02.

13.2 Envases contaminados:

Los envases y embalajes contaminados de sustancias o preparados peligrosos, tendrán el mismo tratamiento que los propios productos contenidos.

Directiva 94/62/CE del Parlamento Europeo y del Consejo, de 20 de diciembre de 1994, relativa a los envases y residuos de envases.

En España: Ley 11/1997, de 24 de abril, de Envases y Residuos de Envases. Publicada en BOE 25/04/97.

Real Decreto 782/1998, de 30 de abril, por el que se aprueba el Reglamento para el desarrollo y ejecución de la Ley 11/1997, de 24 de abril, de Envases y Residuos de Envases. Publicado en BOE 01/05/98.

14. Información relativa al transporte

Terrestre (ADR):

Denominación técnica: PERMANGANATO POTÁSICO

ONU 1490 Clase: 5.1 Grupo de embalaje: II

Marítimo (IMDG):

Denominación técnica: PERMANGANATO POTÁSICO

ONU 1490 Clase: 5.1 Grupo de embalaje: II

Aéreo (ICAO-IATA):

Denominación técnica: Permanganato potásico

ONU 1490 Clase: 5.1 Grupo de embalaje: II

Instrucciones de embalaje: CAO 511 PAX 508

15. Información reglamentaria

15.1 Etiquetado según Directiva de la CE



Símbolos:

Indicaciones de peligro: Comburente Nocivo Peligroso para medio ambiente

Frases R: 8-22-50/53 Peligro de fuego en contacto con materias combustibles. Nocivo por ingestión. Muy tóxico para los organismos acuáticos, puede provocar a largo plazo efectos negativos en el medio ambiente acuático.

Frases S: 60-61 Elimínense el producto y su recipiente como residuos peligrosos. Evítese su liberación al medio ambiente. Recábense instrucciones específicas de la ficha de datos de seguridad.

Número de índice CE: 025-002-00-9

15.2 Disposiciones particulares en el ámbito comunitario:

Reglamento (CE) nº 1251/2001 de la Comisión, de 26 de junio de 2001, que modifica el Reglamento (CEE) nº 3769/92 por el que se aplica y modifica el Reglamento (CEE) nº 3677/90 del Consejo relativo a las medidas que deben adoptarse para impedir el desvío de determinadas sustancias para la fabricación ilícita de estupefacientes y sustancias psicotrópicas.

Reglamento (CE) nº 1116/2001 del Consejo, de 5 de junio de 2001, por el que se modifica el Reglamento (CEE) nº 3677/90 relativo a las medidas que deben adoptarse para impedir el desvío de determinadas sustancias para la fabricación ilícita de estupefacientes y de sustancias psicotrópicas.

Directiva 2001/8/CE de la Comisión, de 8 de febrero de 2001, por la que se sustituye el anexo I de la Directiva 92/109/CEE del Consejo relativa a la fabricación y puesta en el mercado de determinadas sustancias utilizadas para la fabricación ilícita de estupefacientes y sustancias psicotrópicas.

Reglamento (CE) nº 260/2001 de la Comisión, de 8 de febrero de 2001, por el que se sustituye el anexo del Reglamento (CEE) nº 3677/90 del Consejo relativo a las medidas que deben adoptarse para impedir el desvío de determinadas sustancias para la fabricación ilícita de estupefacientes y de sustancias psicotrópicas.

16. Otras informaciones

Número y fecha de la revisión: 2 18.12.02

Respecto a la revisión anterior, se han producido cambios en los apartados: 15.

Los datos consignados en la presente Ficha de Datos de Seguridad, están basados en nuestros actuales conocimientos, teniendo como único objeto informar sobre aspectos de seguridad y no garantizándose las propiedades y características en ella indicadas.

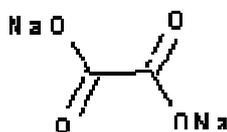
Ficha de seguridad del di-Sodio Oxalato

Panreac

CODIGO PRODUCTO: 131706

di-Sodio Oxalato (Reag. USP, Ph. Eur.) PA-ACS

$C_2Na_2O_4$



M.= 134,00

CAS [62-76-0]

EINECS 200-550-3

NC 2917 11 00

SINONIMOS: Acido Oxálico Sal Sódica •

DATOS FISICOS: Pequeños cristales o polvo cristalino blanco • Solubilidad en agua a 20 °C 37 g/l •D: 2,34 •

APLICACIONES: Reactivo en análisis: RFE • USP **29** • BP • Ph. Eur. **5.0** •

BIBLIOGRAFIA: Merck Index **12** , 8795 **13** , 8723 • Sax SIY 500 • Römpf **8** , 2741 • Beilstein **2** , **IV** , 1819 •BRN: 3631622
• ACS **IX** , 604 **X** , 630 •

PELIGROSIDAD: C.E.: 607-007-00-3 • RTECS: KI 1750000 •



R: 21/22

S: 24/25

NORMAS DE TRANSPORTE: UN: 2811 • ADR: 6.1/III • IMDG: 6.1/III • IATA: 6.1/III • PAX: 619 • CAO: 619•

ESPECIFICACIONES:

| | |
|------------------------|--------|
| Riqueza mínima (Perm.) | 99,5 % |
|------------------------|--------|

LIMITE MAXIMO DE IMPUREZAS

| | |
|-------------------------------|---------|
| Insoluble en H ₂ O | 0,005 % |
|-------------------------------|---------|

| | |
|----------------------------|--------|
| Pérdida por desec. a 105°C | 0,01 % |
|----------------------------|--------|

| | |
|---|------|
| Sustancias carbonizables por H ₂ SO ₄ | s/e. |
|---|------|

| | |
|-------------|------|
| Neutralidad | s/e. |
|-------------|------|

| | |
|--------------|---------|
| Cloruro (Cl) | 0,002 % |
|--------------|---------|

| | |
|----------------------------|---------|
| Fosfato (PO ₄) | 0,005 % |
|----------------------------|---------|

| | |
|----------------------------|---------|
| Sulfato (SO ₄) | 0,002 % |
|----------------------------|---------|

| | |
|---------------------------|---------|
| Amonio (NH ₄) | 0,002 % |
|---------------------------|---------|

| | |
|-------------------------|---------|
| Metales pesados (en Pb) | 0,002 % |
|-------------------------|---------|

| | |
|----|---------|
| Cu | 0,001 % |
|----|---------|

| | |
|----|----------|
| Fe | 0,0005 % |
|----|----------|

| | |
|---|---------|
| K | 0,005 % |
|---|---------|

| | |
|----|---------|
| Ni | 0,001 % |
|----|---------|

| | |
|----|---------|
| Pb | 0,001 % |
|----|---------|

Ficha de Datos de Seguridad
Según Directiva 2001/58/CE

131706 *di-Sodio Oxalato* PA-ACS

1. Identificación de la sustancia/preparado y de la sociedad o empresa

1.1 Identificación de la sustancia o del preparado

Denominación:
di-Sodio Oxalato

1.2 Uso de la sustancia o preparado:

Para usos de laboratorio, análisis, investigación y química fina.

1.3 Identificación de la sociedad o empresa:

PANREAC QUIMICA, S.A.U. C/Garraf, 2 E-08211 Castellar del Vallès
(Barcelona) España Tel.:(+34) 937 489 400
Urgencias:
Número único de teléfono para llamadas de urgencia: 112 (UE)
Tel.:(+34) 937 489 499

2. Composición/Información de los componentes

Denominación: di-Sodio Oxalato
Fórmula: $(\text{NaCOO})_2$ M.=134,00 CAS [62-76-0]
Número CE (EINECS): 200-550-3
Número de índice CE: 607-007-00-3

3. Identificación de los peligros

Nocivo en contacto con la piel y por ingestión.

4. Primeros auxilios

4.1 Indicaciones generales:

En caso de pérdida del conocimiento nunca dar a beber ni provocar el vómito.

4.2 Inhalación:

Trasladar a la persona al aire libre. En caso de que persista el malestar, pedir atención médica.

4.3 Contacto con la piel:

Lavar abundantemente con agua. Quitarse las ropas contaminadas.

4.4 Ojos:

Lavar con agua abundante (mínimo durante 15 minutos), manteniendo los párpados abiertos. En caso de irritación, pedir atención médica.

4.5 Ingestión:

Beber agua abundante. Provocar el vómito. Pedir atención médica.

5. Medidas de lucha contra incendio

5.1 Medios de extinción adecuados:

Los apropiados al entorno.

5.2 Medios de extinción que NO deben utilizarse:

5.3 Riesgos especiales:

Incombustible.

5.4 Equipos de protección:

6. Medidas a tomar en caso de vertido accidental

6.1 Precauciones individuales:

6.2 Precauciones para la protección del medio ambiente:

6.3 Métodos de recogida/limpieza:

Recoger en seco y depositar en contenedores de residuos para su posterior eliminación de acuerdo con las normativas vigentes.
Limpiar los restos con agua abundante.

7. Manipulación y almacenamiento

7.1 Manipulación:

Sin indicaciones particulares.

7.2 Almacenamiento:

Recipientes bien cerrados. Ambiente seco. Temperatura ambiente.

8. Controles de exposición/protección personal

8.1 Medidas técnicas de protección:

8.2 Control límite de exposición:

8.3 Protección respiratoria:

En caso de formarse polvo, usar equipo respiratorio adecuado.

8.4 Protección de las manos:

Usar guantes apropiados

8.5 Protección de los ojos:

Usar gafas apropiadas.

8.6 Medidas de higiene particulares:

Quitarse las ropas contaminadas. Lavarse las manos antes de las pausas y al finalizar el trabajo.

8.7 Controles de la exposición del medio ambiente:

Cumplir con la legislación local vigente sobre protección del medio ambiente.

El proveedor de los medios de protección debe especificar el tipo de protección que debe usarse para la manipulación del producto, indicando el tipo de material y, cuando proceda, el tiempo de penetración de dicho material, en relación con la cantidad y la duración de la exposición.

9. Propiedades físicas y químicas

Aspecto:

Sólido blanco.

Olor:

Inodoro.

pH \approx 8(30g/H₂O

Punto de ebullición :>250°C (d

Densidad (20/4): 2,34

Solubilidad: 37 g/l en agua a 20°C

10. Estabilidad y reactividad

10.1 Condiciones que deben evitarse:

10.2 Materias que deben evitarse:

10.3 Productos de descomposición peligrosos:

10.4 Información complementaria:

11. Información toxicológica

11.1 Toxicidad aguda:

DL₅₀ oral rata: 375 mg/kg (referido al ácido libre)

11.2 Efectos peligrosos para la salud:

En contacto con la piel: Riesgo de absorción cutánea.

Por contacto ocular: Irritaciones leves.

Por ingestión: náuseas, vómitos.

Por inhalación del polvo: Irritaciones en mucosas, dificultades respiratorias. tos

Efectos sistémicos: descenso del nivel de calcio en la sangre, problemas renales, trastornos cardiovasculares.

12. Información Ecológica

12.1 Movilidad :

12.2 Ecotoxicidad :

12.2.1 - Test EC₅₀ (mg/l) :

12.2.2 - Medio receptor :

Riesgo para el medio acuático = ----

Riesgo para el medio terrestre = ----

12.2.3 - Observaciones :

Datos ecotóxicos no disponibles.

12.3 Degradabilidad :

12.3.1 - Test :-----

12.3.2 - Clasificación sobre degradación biótica :

DBO₅/DQO Biodegradabilidad = ----

12.3.3 - Degradación abiótica según pH : -----

12.3.4 - Observaciones :

Datos no disponibles.

12.4 Acumulación :

12.4.1 - Test :

12.4.2 - Bioacumulación :

Riesgo = ----

12.4.3 - Observaciones :

Datos no disponibles.

12.5 Otros posibles efectos sobre el medio natural :

No permitir su incorporación al suelo ni a acuíferos.

13. Consideraciones sobre la eliminación

13.1 Sustancia o preparado:

En la Unión Europea no están establecidas pautas homogéneas para la eliminación de residuos químicos, los cuales tienen carácter de residuos especiales, quedando sujetos su tratamiento y eliminación a los reglamentos internos de cada país. Por tanto, en cada caso, procede contactar con la autoridad competente, o bien con los gestores legalmente autorizados para la eliminación de residuos.

2001/573/CE: Decisión del Consejo, de 23 de julio de 2001, por la que se modifica la Decisión 2000/532/CE de la Comisión en lo relativo a la lista de residuos.

Directiva 91/156/CEE del Consejo de 18 de marzo de 1991 por la que se modifica la Directiva 75/442/CEE relativa a los residuos.

En España: Ley 10/1998, de 21 de abril, de Residuos. Publicada en BOE 22/04/98.

ORDEN MAM/304/2002, de 8 de febrero, por la que se publican las operaciones de valorización y eliminación de residuos y la lista europea de residuos. Publicada en BOE 19/02/02.

13.2 Envases contaminados:

Los envases y embalajes contaminados de sustancias o preparados peligrosos, tendrán el mismo tratamiento que los propios productos contenidos.

Directiva 94/62/CE del Parlamento Europeo y del Consejo, de 20 de diciembre de 1994, relativa a los envases y residuos de envases.

En España: Ley 11/1997, de 24 de abril, de Envases y Residuos de Envases. Publicada en BOE 25/04/97.

Real Decreto 782/1998, de 30 de abril, por el que se aprueba el Reglamento para el desarrollo y ejecución de la Ley 11/1997, de 24 de abril, de Envases y Residuos de Envases. Publicado en BOE 01/05/98.

14. Información relativa al transporte

Terrestre (ADR):

Denominación técnica: SÓLIDO ORGÁNICO TÓXICO, N.E.P.

ONU 2811 Clase: 6.1 Grupo de embalaje: III
Marítimo (IMDG):
Denominación técnica: SÓLIDO ORGÁNICO TÓXICO, N.E.P.
ONU 2811 Clase: 6.1 Grupo de embalaje: III
Aéreo (ICAO-IATA):
Denominación técnica: Sólido tóxico, orgánico, n.e.p.
ONU 2811 Clase: 6.1 Grupo de embalaje: III
Instrucciones de embalaje: CAO 619 PAX 619

15. Información reglamentaria

15.1 Etiquetado según Directiva de la CE



Símbolos:

Indicaciones de peligro: Nocivo

Frases R: 21/22 Nocivo en contacto con la piel y por ingestión.

Frases S: 24/25 Evítese el contacto con los ojos y la piel.

Número de índice CE: 607-007-00-3

15.2 Disposiciones particulares en el ámbito comunitario:

16. Otras informaciones

Número y fecha de la revisión: 1 18.12.02

Respecto a la revisión anterior, se han producido cambios en los apartados: 3, 14, 15.

Los datos consignados en la presente Ficha de Datos de Seguridad, están basados en nuestros actuales conocimientos, teniendo como único objeto informar sobre aspectos de seguridad y no garantizándose las propiedades y características en ella indicadas.

Anexo III: Tablas de resultados de las calibraciones

Tabla 1. Resultados de comprobación de correcto funcionamiento del termómetro.

| Tiempo (min) | t (°C) termómetro utilizado | t (°C) termómetro patrón |
|--------------|-----------------------------|--------------------------|
| 0 | 21,2 | 21,7 |
| 5 | 22,5 | 22,55 |
| 10 | 23,0 | 23,16 |
| 15 | 24,0 | 23,90 |
| 20 | 25,0 | 25,13 |
| 25 | 25,8 | 25,71 |
| 30 | 26,6 | 26,53 |
| 35 | 27,5 | 27,38 |
| 40 | 28,2 | 28,19 |
| 45 | 29,1 | 29,00 |
| 50 | 29,9 | 29,77 |
| 55 | 30,6 | 30,51 |
| 60 | 31,1 | 31,62 |

Tabla 2. Resultados del correcto funcionamiento de la micropipeta utilizada.

| Persona | Peso 1 (g) | Peso 2 (g) | Peso 3 (g) |
|---------|------------|------------|------------|
| Guillem | 0,99 | 0,99 | 0,98 |
| Esther | 0,97 | 0,99 | 0,99 |
| Jordi | 0,99 | 0,99 | 1,00 |

Tabla 3. Resultados de la verificación de las jeringas.

| Volumen | Jordi | Esther | Guillem | Jeringas utilizadas |
|---------|-------|--------|---------|---------------------|
| 2mL | 1,99g | 2,04g | 2,00g | Jeringa de 2 mL |
| Máximo | 2,90g | 2,92g | 2,92g | |
| 0,5mL | 0,47g | 0,51g | 0,50g | Jeringa de 1 mL |
| 1mL | 0,94g | 1,00g | 0,98g | |
| Máximo | 1,11g | 1,12g | 1,11g | |
| 5 mL | 4,89g | 4,96g | 4,96g | Jeringa 5mL |
| Máximo | 6,01g | 6,08g | 6,08g | |

Tabla 4. Resultados del correcto funcionamiento de la jeringa utilizada.

| Persona | Peso 1 (g) | Peso 2 (g) | Peso 3 (g) |
|---------|------------|------------|------------|
| Guillem | 2,91 | 2,91 | 2,92 |
| Esther | 2,86 | 2,87 | 2,91 |
| Jordi | 2,87 | 2,89 | 2,87 |

Cálculos y resultados SMT a 240 nm

| Analito SMT unidades concentración ppm ¿es una impureza? (si/no) no λ 240 nm Concentración Disolución madre 100 ppm Diluciones de la disolución madre tomando alícuotas en ml y diluyendo hasta 100 ml (Las 3 últimas disoluciones se diluyen a 10 ml) | | | | | | | | | | | | | | |
|---|-------------|-------------|-------------|----------------|----------------|-------------|----------------|----------------------|-------------|-------------|-------------|-------------|----------------|------------------------|
| Alícuota (ml) | Conc en ppm | | Absorbancia | | | | | | | medias ABS | | | | |
| | X | Y | X · Y | X ² | Y ² | Ŷ | e ² | (X - x) ² | f(Y/X) | X | Y | s | s ² | Sensibilidad analítica |
| 2 | 2,0 | 0,145 | 0,29 | 4 | 0,021025 | 0,151768605 | 4,5814E-05 | 70,56 | 0,0725 | 2,0 | 0,145 | 0,00057735 | 3,33333E-07 | 114,7204734 |
| 2 | 2,0 | 0,146 | 0,292 | 4 | 0,021316 | 0,151768605 | 3,32768E-05 | 70,56 | 0,073 | | | | | |
| 2 | 2,0 | 0,145 | 0,29 | 4 | 0,021025 | 0,151768605 | 4,5814E-05 | 70,56 | 0,0725 | | | | | |
| 5 | 5,0 | 0,351 | 1,755 | 25 | 0,123201 | 0,350470294 | 2,80589E-07 | 29,16 | 0,0702 | 5,0 | 0,350 | 0,00057735 | 3,33333E-07 | 114,7204734 |
| 5 | 5,0 | 0,350 | 1,75 | 25 | 0,1225 | 0,350470294 | 2,21176E-07 | 29,16 | 0,07 | | | | | |
| 5 | 5,0 | 0,350 | 1,75 | 25 | 0,1225 | 0,350470294 | 2,21176E-07 | 29,16 | 0,07 | | | | | |
| 10 | 10,0 | 0,688 | 6,88 | 100 | 0,473344 | 0,681639775 | 4,04525E-05 | 0,16 | 0,0688 | 10,0 | 0,688 | 0,00057735 | 3,33333E-07 | 114,7204734 |
| 10 | 10,0 | 0,688 | 6,88 | 100 | 0,473344 | 0,681639775 | 4,04525E-05 | 0,16 | 0,0688 | | | | | |
| 10 | 10,0 | 0,687 | 6,87 | 100 | 0,471969 | 0,681639775 | 2,8732E-05 | 0,16 | 0,0687 | | | | | |
| 15 | 15,0 | 1,024 | 15,36 | 225 | 1,048576 | 1,012809256 | 0,000125233 | 21,16 | 0,068266667 | 15,0 | 1,024 | 0,00057735 | 3,33333E-07 | 114,7204734 |
| 15 | 15,0 | 1,024 | 15,36 | 225 | 1,048576 | 1,012809256 | 0,000125233 | 21,16 | 0,068266667 | | | | | |
| 15 | 15,0 | 1,025 | 15,375 | 225 | 1,050625 | 1,012809256 | 0,000148614 | 21,16 | 0,068333333 | | | | | |
| 2 | 20,0 | 1,332 | 26,64 | 400 | 1,774224 | 1,343978737 | 0,00014349 | 92,16 | 0,0666 | 20,0 | 1,333 | 0,001 | 0,000001 | 66,23389619 |
| 2 | 20,0 | 1,333 | 26,66 | 400 | 1,776889 | 1,343978737 | 0,000120533 | 92,16 | 0,06665 | | | | | |
| 2 | 20,0 | 1,334 | 26,68 | 400 | 1,779556 | 1,343978737 | 9,95752E-05 | 92,16 | 0,0667 | | | | | |
| Σ | 156 | 10,622 | 152,832 | 2262 | 10,32867 | 10,622 | 0,000997942 | 639,6 | 1,039316667 | 52 | 3,540666667 | 0,003309401 | 2,33333E-06 | 525,1157897 |
| N | 15 | 15 | 15 | 15 | 15 | 15 | 15 | 15 | 15 | 5 | 5 | 5 | 5 | 5 |
| x | 10,4 | 0,708133333 | 10,1888 | 150,8 | 0,688578 | 0,708133333 | 6,65295E-05 | 42,64 | 0,069287778 | 10,4 | 0,708133333 | 0,00066188 | 4,66667E-07 | 105,0231579 |
| S | 6,759120822 | 0,447762511 | 10,12305337 | 151,8195357 | 0,675074566 | 0,447682907 | 5,4443E-05 | 34,88575641 | 0,002086697 | 7,300684899 | 0,483638386 | 0,000189015 | 2,98142E-07 | 21,68385652 |
| CV | 64,99154636 | 63,2313846 | 99,35471661 | 100,6760847 | 98,03893908 | 63,22014312 | 81,83284189 | 81,81462572 | 3,011637888 | 70,19889326 | 68,29764449 | 28,5572376 | 63,8876565 | 20,64673825 |

UV 240nm

| | | | | | | | | | | | | |
|---------------------------------------|-----------|---------------|-------------|-------------|-------------|-------------------------|-------------|------------------------|------|-------------|-----------------|-----------------|
| $Y = b \cdot X + a$ | | $S^2_{(Y/X)}$ | 7,67648E-05 | $S_{(Y/X)}$ | 0,008761553 | n | 13 | α | 0,05 | IC | Limite inferior | Limite superior |
| $b =$ | 0,0662339 | S^2_b | 1,2002E-07 | S_b | 0,000346439 | $t_b \text{ calculado}$ | 191,1848415 | $t_b \text{ tabulado}$ | 2,16 | 0,000748308 | 0,065485588 | 0,066982205 |
| $a =$ | 0,0193008 | S^2_a | 1,8099E-05 | S_a | 0,004254294 | $t_a \text{ calculado}$ | 4,536783812 | $t_a \text{ tabulado}$ | 2,16 | 0,009189275 | 0,010111538 | 0,028490088 |
| $r =$ | 0,9998222 | r^2 | 0,999644465 | | | $t_r \text{ calculado}$ | 191,1848415 | $t_r \text{ tabulado}$ | 2,16 | | | |

| | |
|--|---|
| TEST DEL COEFICIENTE DE CORRELACIÓN (R) | CUMPLE (El coeficiente r es mayor o igual a 0,999) |
| TEST DE SIGNIFICACIÓN DEL COEFICIENTE (R) | CUMPLE (El ajuste lineal tiene una confianza superior o igual al 95 %) |
| TEST LINEALIDAD. CV DE LOS FACTORES DE RESPUESTA | CUMPLE (El CV del factor respuesta no es superior al 5%) |
| SIGNIFICACIÓN ESTADÍSTICA DE LA PENDIENTE | CUMPLE (La pendiente es $\neq 0$ con una confianza del 95 %) |
| TEST DE PROPORCIONALIDAD | NO CUMPLE (a $\neq 0$ con un 95 % de confianza, es decir hay sesgo) |
| SENSIBILIDAD DE LA CALIBRACIÓN | 0,0662339 |
| CONCENTRACIÓN LÍMITE DE DETECCIÓN | 0,396846 ppm |
| CONCENTRACIÓN LÍMITE DE CUANTIFICACIÓN | 1,3228201 ppm |
| CONCENTRACIÓN CON MAYOR SENSIBILIDAD ANALÍTICA | Es aquella/s concentración/es tal que su sensibilidad analítica sea 114,72047 |

| DETERMINACIONES MUESTRA | | | Y_0 | X_0 | S_{X_0} | N | α | t_{tabulado} | IC |
|--|-------|-------|-------|-----------|-----------|---|----------|-----------------------|-----------|
| 1,300 | 1,290 | 1,310 | 1,3 | 19,336009 | 0,0958335 | 3 | 0,05 | 4,303 | 0,4123714 |
| RESULTADO FINAL | | | | | | | | | |
| <div style="border: 1px solid black; padding: 5px; display: inline-block;"> 19,3 ppm \pm 0,4 ppm </div> | | | | | | | | | |

Cálculos y resultados SMT a 260 nm

| Analito SMT | | Concentración Disolución madre | | | | | | | | | | | | |
|--|-------------|--|-------------|----------------|----------------|-------------|----------------|----------------------|-------------|-------------|-------------|-------------|----------------|------------------------|
| unidades concentración ¿es una impureza? (si/no) | | 100 ppm | | | | | | | | | | | | |
| λ 260 nm | | Diluciones de la disolución madre tomando alícuotas en ml y diluyendo hasta 100 ml (Las 3 últimas disoluciones se diluyen a 10 ml) | | | | | | | | | | | | |
| conc en ppm | | Absorbancia | | | | | | | | Medias ABS | | | | |
| Alicuota (ml) | X | Y | X - Y | X ² | Y ² | Ŷ | e ² | (X - x) ² | f(Y/X) | X | Y | s | s ² | Sensibilidad analítica |
| 2 | 2,0 | 0,106 | 0,212 | 4 | 0,011236 | 0,083903064 | 0,000488275 | 70,56 | 0,053 | 2,0 | 0,106 | 0,00057735 | 3,33333E-07 | 110,225157 |
| 2 | 2,0 | 0,106 | 0,212 | 4 | 0,011236 | 0,083903064 | 0,000488275 | 70,56 | 0,053 | | | | | |
| 2 | 2,0 | 0,105 | 0,21 | 4 | 0,011025 | 0,083903064 | 0,000445081 | 70,56 | 0,0525 | | | | | |
| 5 | 5,0 | 0,266 | 1,33 | 25 | 0,070756 | 0,274818637 | 7,77684E-05 | 29,16 | 0,0532 | 5,0 | 0,269 | 0,003 | 9E-06 | 21,21284136 |
| 5 | 5,0 | 0,272 | 1,36 | 25 | 0,073984 | 0,274818637 | 7,94471E-06 | 29,16 | 0,0544 | | | | | |
| 5 | 5,0 | 0,269 | 1,345 | 25 | 0,072361 | 0,274818637 | 3,38565E-05 | 29,16 | 0,0538 | | | | | |
| 10 | 10,0 | 0,567 | 5,67 | 100 | 0,321489 | 0,593011257 | 0,000676585 | 0,16 | 0,0567 | 10,0 | 0,569 | 0,002 | 4E-06 | 31,81926204 |
| 10 | 10,0 | 0,571 | 5,71 | 100 | 0,326041 | 0,593011257 | 0,000484495 | 0,16 | 0,0571 | | | | | |
| 10 | 10,0 | 0,569 | 5,69 | 100 | 0,323761 | 0,593011257 | 0,00057654 | 0,16 | 0,0569 | | | | | |
| 15 | 15,0 | 0,898 | 13,47 | 225 | 0,806404 | 0,911203877 | 0,000174342 | 21,16 | 0,059866667 | 15,0 | 0,898 | 0,00057735 | 3,33333E-07 | 110,225157 |
| 15 | 15,0 | 0,898 | 13,47 | 225 | 0,806404 | 0,911203877 | 0,000174342 | 21,16 | 0,059866667 | | | | | |
| 15 | 15,0 | 0,899 | 13,485 | 225 | 0,808201 | 0,911203877 | 0,000148935 | 21,16 | 0,059933333 | | | | | |
| 2 | 20,0 | 1,250 | 25 | 400 | 1,5625 | 1,229396498 | 0,000424504 | 92,16 | 0,0625 | 20,0 | 1,250 | 0,00057735 | 3,33333E-07 | 110,225157 |
| 2 | 20,0 | 1,250 | 25 | 400 | 1,5625 | 1,229396498 | 0,000424504 | 92,16 | 0,0625 | | | | | |
| 2 | 20,0 | 1,251 | 25,02 | 400 | 1,565001 | 1,229396498 | 0,000466711 | 92,16 | 0,06255 | | | | | |
| Σ | 156 | 9,277 | 137,184 | 2262 | 8,332899 | 9,277 | 0,00509216 | 639,6 | 0,857816667 | 52 | 3,092333333 | 0,006732051 | 0,000014 | 383,7075745 |
| N | 15 | 15 | 15 | 15 | 15 | 15 | 15 | 15 | 15 | 5 | 5 | 5 | 5 | 5 |
| x | 10,4 | 0,618466667 | 9,1456 | 150,8 | 0,5555266 | 0,618466667 | 0,000339477 | 42,64 | 0,057187778 | 10,4 | 0,618466667 | 0,00134641 | 2,8E-06 | 76,74151489 |
| S | 6,759120822 | 0,430563064 | 9,519859121 | 151,8195357 | 0,596850457 | 0,430140473 | 0,000213743 | 34,88575641 | 0,003775992 | 7,300684899 | 0,465058754 | 0,001110844 | 3,81226E-06 | 46,00245987 |
| CV | 64,99154636 | 69,61782866 | 104,0922315 | 100,6760847 | 107,438682 | 69,54949981 | 62,96248633 | 81,81462572 | 6,602795046 | 70,19889326 | 75,19544364 | 82,50413756 | 136,1521758 | 59,94468566 |

UV 260nm

| | | | | | | | | | | | | |
|---------------------------------------|------------------|---------------|-------------|-------------|-------------|-------------------------|-------------|------------------------|------|-------------|-----------------|-----------------|
| $Y = b \cdot X + a$ | | $S^2_{(Y/X)}$ | 0,000391705 | $S_{(Y/X)}$ | 0,019791529 | n | 13 | α | 0,05 | IC | Limite inferior | Limite superior |
| $b =$ | 0,0636385 | S^2_b | 6,12421E-07 | S_b | 0,000782573 | $t_b \text{ calculado}$ | 81,31955206 | $t_b \text{ tabulado}$ | 2,16 | 0,001690359 | 0,061948165 | 0,065328883 |
| $a =$ | -0,043374 | S^2_a | 9,23531E-05 | S_a | 0,009610053 | $t_a \text{ calculado}$ | 4,513396839 | $t_a \text{ tabulado}$ | 2,16 | 0,020757715 | -0,0641317 | -0,02261627 |
| $r =$ | 0,9990185 | r^2 | 0,998037993 | | | $t_r \text{ calculado}$ | 81,31955206 | $t_r \text{ tabulado}$ | 2,16 | | | |

| | |
|--|--|
| TEST DEL COEFICIENTE DE CORRELACIÓN (R) | CUMPLE (El coeficiente r es mayor o igual a 0,999) |
| TEST DE SIGNIFICACIÓN DEL COEFICIENTE (R) | CUMPLE (El ajuste lineal tiene una confianza superior o igual al 95 %) |
| TEST LINEALIDAD. CV DE LOS FACTORES DE RESPUESTA | NO CUMPLE (El CV del factor respuesta es superior al 5%) |
| SIGNIFICACIÓN ESTADÍSTICA DE LA PENDIENTE | CUMPLE (La pendiente es $\neq 0$ con una confianza del 95 %) |
| TEST DE PROPORCIONALIDAD | NO CUMPLE (a $\neq 0$ con un 95 % de confianza, es decir hay sesgo) |
| SENSIBILIDAD DE LA CALIBRACIÓN | 0,0636385 |
| CONCENTRACIÓN LÍMITE DE DETECCIÓN | 0,9329976 ppm |
| CONCENTRACIÓN LÍMITE DE CUANTIFICACIÓN | 3,1099918 ppm |
| CONCENTRACIÓN CON MAYOR SENSIBILIDAD ANALÍTICA | Es aquella/s concentración/es tal que su sensibilidad analítica sea 110,225157 |

| DETERMINACIONES MUESTRA | | | Y_0 | X_0 | S_{X_0} | N | α | t_{tabulado} | IC |
|---|-------|-------|-------|-----------|-----------|---|----------|-----------------------|-----------|
| 0,705 | 0,705 | 0,705 | 0,705 | 11,759763 | 0,1974026 | 3 | 0,05 | 4,303 | 0,8494235 |
| RESULTADO FINAL | | | | | | | | | |
| <div style="border: 1px solid black; padding: 5px; display: inline-block;"> 11,8 ppm \pm 0,8 ppm </div> | | | | | | | | | |

Cálculos y resultados curva calibrado H₂O₂ a 450nm en espectro visible:

| Analito H ₂ O ₂ | | Concentración Disolución madre | | | | | | | | | | | | |
|---------------------------------------|-------------|--|-------------|----------------|----------------|-------------|----------------|----------------------|-------------|-------------|-------------|-------------|----------------|------------------------|
| unidades concentración | Ppm | 3000 ppm | | | | | | | | | | | | |
| ¿es una impureza? | No | | | | | | | | | | | | | |
| λ | 450 nm | Diluciones de la disolución madre tomando alícuotas en ml y diluyendo hasta 100 ml | | | | | | | | | | | | |
| conc en ppm | Absorbancia | Medias ABS | | | | | | | | | | | | |
| Alicuota (ml) | X | Y | X · Y | X ² | Y ² | Ŷ | e ² | (X - x) ² | f(Y/X) | X | Y | s | s ² | Sensibilidad analítica |
| 1 | 30,0 | 0,271 | 8,13 | 900 | 0,073441 | 0,2738 | 7,84E-06 | 3600 | 0,009033333 | 30,0 | 0,271 | 0,00057735 | 3,33333E-07 | 14,75514838 |
| 1 | 30,0 | 0,270 | 8,1 | 900 | 0,0729 | 0,2738 | 1,444E-05 | 3600 | 0,009 | | | | | |
| 1 | 30,0 | 0,271 | 8,13 | 900 | 0,073441 | 0,2738 | 7,84E-06 | 3600 | 0,009033333 | | | | | |
| 2 | 60,0 | 0,526 | 31,56 | 3600 | 0,276676 | 0,529366667 | 1,13344E-05 | 900 | 0,008766667 | 60,0 | 0,528 | 0,001732051 | 3E-06 | 4,918382793 |
| 2 | 60,0 | 0,529 | 31,74 | 3600 | 0,279841 | 0,529366667 | 1,34444E-07 | 900 | 0,008816667 | | | | | |
| 2 | 60,0 | 0,529 | 31,74 | 3600 | 0,279841 | 0,529366667 | 1,34444E-07 | 900 | 0,008816667 | | | | | |
| 3 | 90,0 | 0,792 | 71,28 | 8100 | 0,627264 | 0,784933333 | 4,99378E-05 | 0 | 0,0088 | 90,0 | 0,792 | 0,00057735 | 3,33333E-07 | 14,75514838 |
| 3 | 90,0 | 0,792 | 71,28 | 8100 | 0,627264 | 0,784933333 | 4,99378E-05 | 0 | 0,0088 | | | | | |
| 3 | 90,0 | 0,791 | 71,19 | 8100 | 0,625681 | 0,784933333 | 3,68044E-05 | 0 | 0,008788889 | | | | | |
| 4 | 120,0 | 1,045 | 125,4 | 14400 | 1,092025 | 1,0405 | 2,025E-05 | 900 | 0,008708333 | 120,0 | 1,044 | 0,001154701 | 1,33333E-06 | 7,37757419 |
| 4 | 120,0 | 1,043 | 125,16 | 14400 | 1,087849 | 1,0405 | 6,25E-06 | 900 | 0,008691667 | | | | | |
| 4 | 120,0 | 1,043 | 125,16 | 14400 | 1,087849 | 1,0405 | 6,25E-06 | 900 | 0,008691667 | | | | | |
| 5 | 150,0 | 1,288 | 193,2 | 22500 | 1,658944 | 1,296066667 | 6,50711E-05 | 3600 | 0,008586667 | 150,0 | 1,291 | 0,003785939 | 1,43333E-05 | 2,250139033 |
| 5 | 150,0 | 1,289 | 193,35 | 22500 | 1,661521 | 1,296066667 | 4,99378E-05 | 3600 | 0,008593333 | | | | | |
| 5 | 150,0 | 1,295 | 194,25 | 22500 | 1,677025 | 1,296066667 | 1,13778E-06 | 3600 | 0,008633333 | | | | | |
| Σ | 1350 | 11,774 | 1289,67 | 148500 | 11,201562 | 11,774 | 0,0003273 | 27000 | 0,131760556 | 450 | 3,924666667 | 0,007827391 | 1,93333E-05 | 44,05639278 |
| N | 15 | 15 | 15 | 15 | 15 | 15 | 15 | 15 | 15 | 5 | 5 | 5 | 5 | 5 |
| x | 90 | 0,784933333 | 85,978 | 9900 | 0,7467708 | 0,784933333 | 2,182E-05 | 1800 | 0,008784037 | 90 | 0,784933333 | 0,001565478 | 3,86667E-06 | 8,811278555 |
| S | 43,91550328 | 0,374142537 | 69,20666485 | 8057,028875 | 0,594449341 | 0,374111293 | 2,21648E-05 | 1558,845727 | 0,000145094 | 47,4341649 | 0,404116141 | 0,001330388 | 5,95166E-06 | 5,720967454 |
| CV | 48,79500365 | 47,66551773 | 80,49345746 | 81,38413005 | 79,60264936 | 47,66153724 | 101,5802842 | 86,60254038 | 1,651791777 | 52,70462767 | 51,48413553 | 84,9828237 | 153,9221663 | 64,92777885 |

| | | | | | | | | | | | | |
|---------------------------------------|------------------|---------------|-------------|-------------|-------------|---------------------------|-------------|--------------------------|------|-------------|-----------------|-----------------|
| $Y = b \cdot X + a$ | | $S^2_{(Y/X)}$ | 2,51769E-05 | $S_{(Y/X)}$ | 0,005017661 | n | 13 | α | 0,05 | IC | Limite inferior | Limite superior |
| $b =$ | 0,0085189 | S^2_b | 9,32479E-10 | S_b | 3,05365E-05 | $t_{b \text{ calculado}}$ | 278,9738586 | $t_{b \text{ tabulado}}$ | 2,16 | 6,59589E-05 | 0,00845293 | 0,008584848 |
| $a =$ | 0,0182333 | S^2_a | 9,23154E-06 | S_a | 0,003038345 | $t_{a \text{ calculado}}$ | 6,00107466 | $t_{a \text{ tabulado}}$ | 2,16 | 0,006562825 | 0,011670509 | 0,024796158 |
| $r =$ | 0,9999165 | r^2 | 0,999832989 | | | $t_{r \text{ calculado}}$ | 278,9738586 | $t_{r \text{ tabulado}}$ | 2,16 | | | |

| | |
|--|---|
| TEST DEL COEFICIENTE DE CORRELACIÓN (R) | CUMPLE (El coeficiente r es mayor o igual a 0,999) |
| TEST DE SIGNIFICACIÓN DEL COEFICIENTE (R) | CUMPLE (El ajuste lineal tiene una confianza superior o igual al 95 %) |
| TEST LINEALIDAD. CV DE LOS FACTORES DE RESPUESTA | CUMPLE (El CV del factor respuesta no es superior al 5%) |
| SIGNIFICACIÓN ESTADÍSTICA DE LA PENDIENTE | CUMPLE (La pendiente es $\neq 0$ con una confianza del 95 %) |
| TEST DE PROPORCIONALIDAD | NO CUMPLE (a $\neq 0$ con un 95 % de confianza, es decir hay sesgo) |
| SENSIBILIDAD DE LA CALIBRACIÓN | 0,0085189 |
| CONCENTRACIÓN LÍMITE DE DETECCIÓN | 1,7670125 ppm |
| CONCENTRACIÓN LÍMITE DE CUANTIFICACIÓN | 5,8900417 ppm |
| CONCENTRACIÓN CON MAYOR SENSIBILIDAD ANALÍTICA | Es aquella/s concentración/es tal que su sensibilidad analítica sea 14,75514838 |

| DETERMINACIONES MUESTRA | | | Y_0 | X_0 | S_{X_0} | N | α | t_{tabulado} | IC |
|-------------------------|-------|-------|-------|----------|-----------|---|----------|-----------------------|-----------|
| 0,705 | 0,705 | 0,705 | 0,705 | 80,61693 | 0,3740343 | 3 | 0,05 | 4,303 | 1,6094694 |
| RESULTADO FINAL | | | | | | | | | |
| 81 ppm \pm 2 ppm | | | | | | | | | |

Anexo IV: Tablas y gráficos de los datos experimentales

Tabla 5. Resultados de los experimentos SMT.00 y SMT.01.

EXP.SMT.00
22-10-2007

| RESULTADOS EXPERIMENTALES | |
|---------------------------|---------------|
| T (min) | T (°C) SMT.00 |
| 0 | 21,2 |
| 5 | 22,5 |
| 10 | 23,0 |
| 15 | 24,0 |
| 20 | 25,0 |
| 25 | 25,8 |
| 30 | 26,6 |
| 35 | 27,5 |
| 40 | 28,2 |
| 45 | 29,1 |
| 50 | 29,9 |
| 55 | 30,6 |
| 60 | 31,1 |
| 65 | 32,0 |
| 70 | 32,7 |
| 75 | 33,3 |
| 80 | 33,9 |
| 85 | 34,4 |
| 90 | 35,0 |
| 95 | |
| 100 | |
| 105 | |
| 110 | |
| 115 | |
| 120 | |
| 125 | |
| 130 | |

EXP.SMT.01
25-10-2007

| RESULTADOS EXPERIMENTALES | |
|---------------------------|---------------|
| T (min) | t (°C) SMT.01 |
| 0 | 21,0 |
| 5 | 22,0 |
| 10 | 21,2 |
| 15 | 21,4 |
| 20 | 21,5 |
| 25 | 21,6 |
| 30 | 21,8 |
| 35 | 21,8 |
| 40 | 21,8 |
| 45 | 21,9 |
| 50 | 21,9 |
| 55 | 21,9 |
| 60 | 21,8 |
| 65 | 21,9 |
| 70 | 21,9 |
| 75 | 21,8 |
| 80 | 21,9 |
| 85 | 21,8 |
| 90 | 21,9 |
| 95 | 21,8 |
| 100 | 21,8 |
| 105 | 21,8 |
| 110 | 21,8 |
| 115 | 21,8 |
| 120 | 21,8 |
| 125 | 21,8 |
| 130 | 21,8 |

Tabla 6. Resultados del experimento SMT.02.

EXP.SMT.02 (SMT+Fe²⁺) 12-11-2007

| RESULTADOS EXPERIMENTALES | | | | | | | RESULTADOS EN % RESPECTO EL MÁX | | | | | | |
|---------------------------|--------|------|----------|-------|--------------|--------------|------------------------------------|--------|------|----------|------|--------------|--------------|
| T (min) | t (°C) | pH | P. redox | TOC | [SMT] 240 nm | [SMT] 260 nm | T (min) | t (°C) | pH | P. redox | TOC | [SMT] 240 nm | [SMT] 260 nm |
| 0 | 17,0 | 5,08 | 495 | 23,44 | 45 | 52 | 0 | 0,97 | 1,00 | 0,25 | 0,95 | 0,94 | 0,91 |
| 1 | 17,0 | 5,05 | 544 | | | | 1 | 0,97 | 0,99 | 0,27 | | | |
| 2 | 17,0 | 5,04 | 569 | | | | 2 | 0,97 | 0,99 | 0,28 | | | |
| 5 | 17,0 | 5,01 | 648 | 22,73 | 48 | 54 | 5 | 0,97 | 0,99 | 0,32 | 0,92 | 1,00 | 0,95 |
| 10 | 17,0 | 4,97 | 792 | | | | 10 | 0,97 | 0,98 | 0,40 | | | |
| 15 | 17,0 | 4,95 | 910 | 23,88 | 48 | 57 | 15 | 0,97 | 0,97 | 0,46 | 0,97 | 1,00 | 1,00 |
| 30 | 17,2 | 4,88 | 1319 | 24,01 | 48 | 57 | 30 | 0,98 | 0,96 | 0,66 | 0,97 | 1,00 | 1,00 |
| 45 | 17,5 | 4,83 | 1726 | | | | 45 | 1,00 | 0,95 | 0,86 | | | |
| 60 | 17,5 | 4,80 | 2000 | 24,70 | 48 | 57 | 60 | 1,00 | 0,94 | 1,00 | 1,00 | 1,00 | 1,00 |
| 78 | 17,5 | 4,76 | 2000 | | | | 78 | 1,00 | 0,94 | 1,00 | | | |
| máx | 17,5 | 5,1 | 2000,0 | 24,7 | 48,0 | 57,0 | | | | | | | |
| mín | 17,0 | 4,8 | 495,0 | 22,7 | 45,0 | 52,0 | | | | | | | |
| Media | 17,2 | 4,9 | 1100,3 | 23,8 | 47,4 | 55,4 | | | | | | | |

Tabla 7. Resultados del experimento SMT.03.

EXP.SMT.03 (SMT+LUZ) 15-11-2007

| RESULTADOS EXPERIMENTALES | | | | | | | RESULTADOS EN % RESPECTO EL MÁX | | | | | | |
|---------------------------|--------|------|----------|-------|--------------|--------------|------------------------------------|--------|------|----------|------|--------------|--------------|
| T (min) | t (°C) | pH | P. redox | TOC | [SMT] 240 nm | [SMT] 260 nm | T (min) | t (°C) | pH | P. redox | TOC | [SMT] 240 nm | [SMT] 260 nm |
| 0 | 17,5 | 5,82 | 219 | 25,51 | 48 | 54 | 0 | 0,92 | 0,99 | 1,00 | 1,00 | 0,94 | 1,00 |
| 1 | 17,5 | 5,85 | 210 | | | | 1 | 0,92 | 1,00 | 0,96 | | | |
| 2 | 17,5 | 5,81 | 190 | | | | 2 | 0,92 | 0,99 | 0,87 | | | |
| 5 | 17,5 | 5,81 | 206 | 25,11 | 48 | 54 | 5 | 0,92 | 0,99 | 0,94 | 0,98 | 0,94 | 1,00 |
| 10 | 18,0 | 5,78 | 180 | | | | 10 | 0,95 | 0,98 | 0,82 | | | |
| 15 | 18,0 | 5,84 | 176 | 25,20 | 51 | 48 | 15 | 0,95 | 0,99 | 0,80 | 0,99 | 1,00 | 0,89 |
| 30 | 18,5 | 5,85 | 182 | 25,15 | 51 | 48 | 30 | 0,97 | 1,00 | 0,83 | 0,99 | 1,00 | 0,89 |
| 45 | 18,8 | 5,87 | 192 | | | | 45 | 0,99 | 1,00 | 0,88 | | | |
| 60 | 19,0 | 5,85 | 195 | 24,99 | 48 | 54 | 60 | 1,00 | 1,00 | 0,89 | 0,98 | 0,94 | 1,00 |
| máx | 19,0 | 5,9 | 219,0 | 25,5 | 51,0 | 54,0 | | | | | | | |
| mín | 17,5 | 5,8 | 176,0 | 25,0 | 48,0 | 48,0 | | | | | | | |
| Media | 18,0 | 5,8 | 194,4 | 25,2 | 49,2 | 51,6 | | | | | | | |

Tabla 8. Resultados del experimento SMT.04.

EXP.SMT.04 (SMT+H₂O₂) 22-11-2007

| RESULTADOS EXPERIMENTALES | | | | | | | | RESULTADOS EN % RESPECTO EL MÁX | | | | | | | |
|---------------------------|--------|------|----------|-------|--------------|--------------|---|---------------------------------|--------|------|----------|------|--------------|--------------|---|
| T (min) | t (°C) | pH | P. redox | TOC | [SMT] 240 nm | [SMT] 260 nm | [H ₂ O ₂] 450 nm | T (min) | t (°C) | pH | P. redox | TOC | [SMT] 240 nm | [SMT] 260 nm | [H ₂ O ₂] 450 nm |
| 0 | 20,0 | 5,62 | 261 | 26,53 | 51 | 45 | 600 | 0 | 1,00 | 1,00 | 0,80 | 0,99 | 0,89 | 0,79 | 0,97 |
| 1 | 19,8 | 5,55 | 325 | | | | | 1 | 0,99 | 0,99 | 0,99 | | | | |
| 2 | 19,9 | 5,56 | 327 | | | | | 2 | 1,00 | 0,99 | 1,00 | | | | |
| 5 | 19,5 | 5,54 | 322 | 25,21 | 57 | 57 | 575 | 5 | 0,98 | 0,99 | 0,98 | 0,94 | 1,00 | 1,00 | 0,93 |
| 10 | 19,5 | 5,57 | 327 | | | | | 10 | 0,98 | 0,99 | 1,00 | | | | |
| 15 | 19,5 | 5,60 | 327 | 26,21 | 57 | 57 | 595 | 15 | 0,98 | 1,00 | 1,00 | 0,98 | 1,00 | 1,00 | 0,96 |
| 30 | 19,5 | 5,59 | 324 | 26,68 | 57 | 57 | 600 | 30 | 0,98 | 0,99 | 0,99 | 1,00 | 1,00 | 1,00 | 0,97 |
| 45 | 19,0 | 5,60 | 321 | | | | | 45 | 0,95 | 1,00 | 0,98 | | | | |
| 60 | 19,0 | 5,59 | 323 | 26,49 | 57 | 57 | 620 | 60 | 0,95 | 0,99 | 0,99 | 0,99 | 1,00 | 1,00 | 1,00 |
| máx | 20,0 | 5,6 | 327,0 | 26,7 | 57,0 | 57,0 | 620,0 | | | | | | | | |
| mín | 19,0 | 5,5 | 261,0 | 25,2 | 51,0 | 45,0 | 575,0 | | | | | | | | |
| Media | 19,5 | 5,6 | 317,4 | 26,2 | 55,8 | 54,6 | 598,0 | | | | | | | | |

Tabla 9. Resultados del experimento SMT.05.

EXP.SMT.05 (SMT+Fe²⁺+ Luz) 10-12-2007

| RESULTADOS EXPERIMENTALES | | | | | RESULTADOS EN % RESPECTO EL MÁX | | | | |
|---------------------------|--------|------|----------|-------|---------------------------------|--------|------|----------|------|
| T (min) | t (°C) | pH | P. redox | TOC | T (min) | t (°C) | pH | P. redox | TOC |
| 0 | 17,0 | 5,17 | 119 | 25,86 | 0 | 1,00 | 0,99 | 0,86 | 0,97 |
| 1 | 17,0 | 5,23 | 122 | | 1 | 1,00 | 1,00 | 0,88 | |
| 2 | 17,0 | 5,21 | 124 | | 2 | 1,00 | 1,00 | 0,90 | |
| 5 | 17,0 | 5,19 | 126 | 26,64 | 5 | 1,00 | 0,99 | 0,91 | 1,00 |
| 10 | 17,0 | 5,12 | 132 | | 10 | 1,00 | 0,98 | 0,96 | |
| 15 | 17,0 | 5,08 | 138 | 26,61 | 15 | 1,00 | 0,97 | 1,00 | 1,00 |
| máx | 17,0 | 5,2 | 138,0 | 26,6 | | | | | |
| mín | 17,0 | 5,1 | 119,0 | 25,9 | | | | | |
| Media | 17,0 | 5,2 | 126,8 | 26,4 | | | | | |

Tabla 10. Resultados del experimento SMT.06.

EXP.SMT.06 (SMT+Fe²⁺+H₂O₂) 03-12-2007

| RESULTADOS EXPERIMENTALES | | | | | | | | RESULTADOS EN % RESPECTO EL MÁX | | | | | | | |
|---------------------------|--------|------|----------|-------|--------------|--------------|---|---------------------------------|--------|------|----------|------|--------------|--------------|---|
| T (min) | t (°C) | pH | P. redox | TOC | [SMT] 240 nm | [SMT] 260 nm | [H ₂ O ₂] 450 nm | T (min) | t (°C) | pH | P. redox | TOC | [SMT] 240 nm | [SMT] 260 nm | [H ₂ O ₂] 450 nm |
| 0 | 17,0 | 4,98 | 126 | 24,83 | 48 | 54 | 600 | 0 | 1,00 | 1,00 | 0,26 | 1,00 | 0,89 | 1,00 | 1,00 |
| 1 | 17,0 | 3,16 | 447 | | | | | 1 | 1,00 | 0,63 | 0,93 | | | | |
| 2 | 17,0 | 3,10 | 453 | | | | | 2 | 1,00 | 0,62 | 0,94 | | | | |
| 5 | 17,0 | 3,06 | 462 | 22,57 | 54 | 42 | 395 | 5 | 1,00 | 0,61 | 0,96 | 0,91 | 1,00 | 0,78 | 0,66 |
| 10 | 17,0 | 3,03 | 469 | | | | | 10 | 1,00 | 0,61 | 0,98 | | | | |
| 15 | 17,0 | 3,02 | 474 | 21,48 | 51 | 42 | 277 | 15 | 1,00 | 0,61 | 0,99 | 0,87 | 0,94 | 0,78 | 0,46 |
| 30 | 17,0 | 2,99 | 479 | 21,84 | 51 | 42 | 222 | 30 | 1,00 | 0,60 | 1,00 | 0,88 | 0,94 | 0,78 | 0,37 |
| 45 | 17,0 | 2,99 | 481 | | | | | 45 | 1,00 | 0,60 | 1,00 | | | | |
| 60 | 17,0 | 2,98 | 481 | 21,04 | 48 | 42 | 167 | 60 | 1,00 | 0,60 | 1,00 | 0,85 | 0,89 | 0,78 | 0,28 |
| máx | 17,0 | 5,0 | 481,0 | 24,8 | 54,0 | 54,0 | 600,0 | | | | | | | | |
| mín | 17,0 | 3,0 | 126,0 | 21,0 | 48,0 | 42,0 | 167,0 | | | | | | | | |
| Media | 17,0 | 3,3 | 430,2 | 22,4 | 50,4 | 44,4 | 332,2 | | | | | | | | |

Tabla 11. Resultados del experimento SMT.07.

EXP.SMT.07 (SMT+H₂O₂+ Luz) 10-12-2007

| RESULTADOS EXPERIMENTALES | | | | | | RESULTADOS EN % RESPECTO EL MÁX | | | | | |
|---------------------------|--------|------|----------|-------|---|---------------------------------|--------|------|----------|------|---|
| T (min) | t (°C) | pH | P. redox | TOC | [H ₂ O ₂] 450 nm | T (min) | t (°C) | pH | P. redox | TOC | [H ₂ O ₂] 450 nm |
| 0 | 17,8 | 5,72 | 192 | 27,43 | 600 | 0 | 1,00 | 1,00 | 0,56 | 0,98 | 0,90 |
| 1 | 17,8 | 5,69 | 341 | | | 1 | 1,00 | 0,99 | 1,00 | | |
| 2 | 17,8 | 5,70 | 341 | | | 2 | 1,00 | 0,99 | 1,00 | | |
| 5 | 17,8 | 5,71 | 339 | 27,87 | 670 | 5 | 1,00 | 1,00 | 0,99 | 1,00 | 1,00 |
| 10 | 17,8 | 5,72 | 338 | | | 10 | 1,00 | 1,00 | 0,99 | | |
| 15 | 17,8 | 5,73 | 336 | 27,97 | 625 | 15 | 1,00 | 1,00 | 0,99 | 1,00 | 0,93 |
| máx | 17,8 | 5,7 | 341,0 | 28,0 | 670,0 | | | | | | |
| mín | 17,8 | 5,7 | 192,0 | 27,4 | 600,0 | | | | | | |
| Media | 17,8 | 5,7 | 314,5 | 27,8 | 631,7 | | | | | | |

Tabla 12. Resultados del experimento SMT.08.

EXP.SMT.08 (SMT+Fe²⁺+H₂O₂+LUZ) 29-11-2007

| RESULTADOS EXPERIMENTALES | RESULTADOS EN % RESPECTO EL MÁX |
|---------------------------|---------------------------------|
|---------------------------|---------------------------------|

| T (min) | t (°C) | pH | P. redox | TOC | [SMT] 240 nm | [SMT] 260 nm | [H ₂ O ₂] 450 nm | T (min) | t (°C) | pH | P. redox | TOC | [SMT] 240 nm | [SMT] 260 nm | [H ₂ O ₂] 450 nm |
|---------|--------|------|----------|--------|--------------|--------------|---|---------|--------|------|----------|------|--------------|--------------|---|
| 0 | 17,5 | 5,37 | 154 | 24,250 | 48 | 54 | 600 | 0 | 0,92 | 1,00 | 0,30 | 1,00 | 0,89 | 1,00 | 1,00 |
| 1 | 15,0 | 3,21 | 458 | | | | | 1 | 0,79 | 0,60 | 0,89 | | | | |
| 2 | 18,0 | 3,12 | 463 | | | | | 2 | 0,95 | 0,58 | 0,90 | | | | |
| 5 | 18,1 | 3,03 | 474 | 20,380 | 54 | 45 | 275 | 5 | 0,95 | 0,56 | 0,92 | 0,84 | 1,00 | 0,83 | 0,46 |
| 10 | 18,5 | 3,00 | 476 | | | | | 10 | 0,97 | 0,56 | 0,93 | | | | |
| 15 | 18,9 | 2,99 | 498 | 16,140 | 45 | 39 | 95 | 15 | 0,99 | 0,56 | 0,97 | 0,67 | 0,83 | 0,72 | 0,16 |
| 30 | 19,0 | 3,00 | 512 | 11,360 | 39 | 33 | 30 | 30 | 1,00 | 0,56 | 1,00 | 0,47 | 0,72 | 0,61 | 0,05 |
| 45 | 19,0 | 2,99 | 512 | | | | | 45 | 1,00 | 0,56 | 1,00 | | | | |
| 60 | 19,0 | 2,99 | 513 | 9,392 | 33 | 30 | 10 | 60 | 1,00 | 0,56 | 1,00 | 0,39 | 0,61 | 0,56 | 0,02 |
| 75 | 19,0 | 2,98 | 510 | 7,876 | 33 | 30 | 5 | 75 | 1,00 | 0,55 | 0,99 | 0,32 | 0,61 | 0,56 | 0,01 |
| 100 | 19,0 | 2,97 | 501 | 7,608 | 33 | 27 | | 100 | 1,00 | 0,55 | 0,98 | 0,31 | 0,61 | 0,50 | |
| máx | 19,0 | 5,4 | 513,0 | 24,3 | 54,0 | 54,0 | 600,0 | | | | | | | | |
| mín | 15,0 | 3,0 | 154,0 | 7,6 | 33,0 | 27,0 | 5,0 | | | | | | | | |
| Media | 18,3 | 3,2 | 461,0 | 13,9 | 40,7 | 36,9 | 169,2 | | | | | | | | |

Tabla 13. Resultados del experimento SMT.09.

EXP.SMT.09 (SMT+Fe²⁺+H₂O₂+LUZ) 10-12-2007

| RESULTADOS EXPERIMENTALES | | | | | RESULTADOS EN % RESPECTO EL MÁX | | | | |
|---------------------------|--------|------|----------|--------|---------------------------------|--------|------|----------|------|
| T (min) | t (°C) | pH | P. redox | TOC | T (min) | t (°C) | pH | P. redox | TOC |
| 0 | 18,0 | 5,75 | 338 | 27,970 | 0 | 0,95 | 1,00 | 0,69 | 1,00 |
| 1 | 18,0 | 3,39 | 448 | | 1 | 0,95 | 0,59 | 0,91 | |
| 2 | 18,0 | 3,30 | 455 | | 2 | 0,95 | 0,57 | 0,93 | |
| 5 | 18,0 | 3,25 | 458 | 21,020 | 5 | 0,95 | 0,57 | 0,93 | 0,75 |
| 10 | 18,5 | 3,14 | 461 | | 10 | 0,97 | 0,55 | 0,94 | |
| 15 | 19,0 | 3,13 | 465 | 19,740 | 15 | 1,00 | 0,54 | 0,95 | 0,71 |
| 30 | 18,0 | 3,17 | 480 | 15,210 | 30 | 0,95 | 0,55 | 0,98 | 0,54 |
| 41 | 18,0 | 3,20 | 490 | | 41 | 0,95 | 0,56 | 1,00 | |
| 45 | 18,0 | 3,21 | 491 | | 45 | 0,95 | 0,56 | 1,00 | |

Tabla 14. Comparativa de los experimentos del PFC-1.

Comparativa de los experimentos del PFC-1

| Comparativa de resultados de disminución del TOC | | | | | | | | |
|--|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|
| T (min) | SMT.02 | SMT.03 | SMT.04 | SMT.05 | SMT.06 | SMT.07 | SMT.08 | SMT.09 |
| 0 | 0,95 | 1,00 | 0,99 | 0,97 | 1,00 | 0,98 | 1,00 | 1,00 |
| 5 | 0,92 | 0,98 | 0,94 | 1,00 | 0,91 | 1,00 | 0,84 | 0,75 |
| 15 | 0,97 | 0,99 | 0,98 | 1,00 | 0,87 | 1,00 | 0,67 | 0,71 |
| 30 | 0,97 | 0,99 | 1,00 | | 0,88 | | 0,47 | 0,54 |
| 60 | 1,00 | 0,98 | 0,99 | | 0,85 | | 0,39 | |
| 75 | | | | | | | 0,32 | |
| 100 | | | | | | | 0,31 | |

Tabla 15. Resultados del experimento SMT.11

EXP.SMT.11 (29-01-2008)

(45 ppm SMT + 60 ppm Fe²⁺ + 900 ppm H₂O₂ + LUZ)

| RESULTADOS EXPERIMENTALES | | | | | | RESULTADOS EN % RESPECTO EL MÁX | | | | | |
|---------------------------|--------|------|----------|-------|---|---------------------------------|--------|------|----------|------|---|
| T (min) | t (°C) | pH | P. redox | TOC | [H ₂ O ₂] 450 nm | T (min) | t (°C) | pH | P. redox | TOC | [H ₂ O ₂] 450 nm |
| 0 | 18,0 | 4,70 | 226 | 38,78 | 900 | 0 | 0,95 | 1,00 | 0,40 | 0,86 | 1,00 |
| 1 | 18,0 | 3,10 | 533 | | | 1 | 0,95 | 0,66 | 0,94 | | |
| 2 | 18,0 | 3,06 | 537 | | | 2 | 0,95 | 0,65 | 0,95 | | |
| 5 | 18,0 | 2,99 | 539 | 45,06 | 755 | 5 | 0,95 | 0,64 | 0,95 | 1,00 | 0,84 |
| 10 | 18,5 | 2,93 | 542 | 41,18 | 500 | 10 | 0,97 | 0,62 | 0,95 | 0,91 | 0,56 |
| 15 | 18,5 | 2,89 | 545 | | | 15 | 0,97 | 0,61 | 0,96 | | |
| 20 | 18,5 | 2,89 | 547 | 36,04 | 327 | 20 | 0,97 | 0,61 | 0,96 | 0,80 | 0,36 |
| 30 | 19,0 | 2,88 | 553 | 31,29 | 246 | 30 | 1,00 | 0,61 | 0,97 | 0,69 | 0,27 |
| 45 | 19,0 | 2,89 | 562 | | | 45 | 1,00 | 0,61 | 0,99 | | |
| 60 | 19,0 | 2,90 | 568 | 24,76 | 92 | 60 | 1,00 | 0,62 | 1,00 | 0,55 | 0,10 |
| máx | 19,0 | 4,7 | 568,0 | 45,1 | 900,0 | | | | | | |
| mín | 18,0 | 2,9 | 226,0 | 24,8 | 92,0 | | | | | | |
| Media | 18,5 | 3,1 | 515,2 | 36,2 | 470,0 | | | | | | |

Tabla 16. Resultados del experimento SMT.12

EXP.SMT.12 (29-01-2008)

(45 ppm SMT + 40 ppm Fe²⁺ + 1024 ppm H₂O₂ + LUZ)

| RESULTADOS EXPERIMENTALES | | | | | | RESULTADOS EN % RESPECTO EL MÁX | | | | | |
|---------------------------|--------|------|----------|-------|---|---------------------------------|--------|------|----------|------|---|
| T (min) | t (°C) | pH | P. redox | TOC | [H ₂ O ₂] 450 nm | T (min) | t (°C) | pH | P. redox | TOC | [H ₂ O ₂] 450 nm |
| 0 | 19,0 | 4,74 | 227 | 40,28 | 1024 | 0 | 0,93 | 1,00 | 0,42 | 1,00 | 1,00 |
| 1 | 19,0 | 3,21 | 518 | | | 1 | 0,93 | 0,68 | 0,95 | | |
| 2 | 19,0 | 3,16 | 520 | | | 2 | 0,93 | 0,67 | 0,95 | | |
| 5 | 19,0 | 3,08 | 524 | 33,64 | 968 | 5 | 0,93 | 0,65 | 0,96 | 0,84 | 0,95 |
| 10 | 19,5 | 3,02 | 526 | 30,26 | 406 | 10 | 0,95 | 0,64 | 0,96 | 0,75 | 0,40 |
| 15 | 20,0 | 3,00 | 528 | | | 15 | 0,98 | 0,63 | 0,97 | | |
| 20 | 20,0 | 3,00 | 530 | 25,00 | 323 | 20 | 0,98 | 0,63 | 0,97 | 0,62 | 0,32 |
| 30 | 20,5 | 3,01 | 534 | 22,07 | 243 | 30 | 1,00 | 0,64 | 0,98 | 0,55 | 0,24 |
| 45 | 20,5 | 3,01 | 541 | | | 45 | 1,00 | 0,64 | 0,99 | | |
| 60 | 20,5 | 3,01 | 546 | 17,72 | 85 | 60 | 1,00 | 0,64 | 1,00 | 0,44 | 0,08 |
| máx | 20,5 | 4,7 | 546,0 | 40,3 | 1024,0 | | | | | | |
| mín | 19,0 | 3,0 | 227,0 | 17,7 | 85,0 | | | | | | |
| Media | 19,7 | 3,2 | 499,4 | 28,2 | 508,2 | | | | | | |

Tabla 17. Resultados del experimento SMT.13

EXP.SMT.13 (30-01-2008)

(45 ppm SMT + 12 ppm Fe²⁺ + 600 ppm H₂O₂ + LUZ)

| RESULTADOS EXPERIMENTALES | | | | | | RESULTADOS EN % RESPECTO EL MÁX | | | | | |
|---------------------------|--------|------|----------|-------|---|---------------------------------|--------|------|----------|------|---|
| T (min) | t (°C) | pH | P. redox | TOC | [H ₂ O ₂] 450 nm | T (min) | t (°C) | pH | P. redox | TOC | [H ₂ O ₂] 450 nm |
| 0 | 17,0 | 4,97 | 221 | 38,17 | 600 | 0 | 0,94 | 1,00 | 0,44 | 0,97 | 1,00 |
| 1 | 17,0 | 3,74 | 485 | | | 1 | 0,94 | 0,75 | 0,97 | | |
| 2 | 17,0 | 3,71 | 489 | | | 2 | 0,94 | 0,75 | 0,98 | | |
| 5 | 17,0 | 3,62 | 492 | 39,26 | 561 | 5 | 0,94 | 0,73 | 0,98 | 1,00 | 0,94 |
| 10 | 17,0 | 3,57 | 493 | 38,53 | 498 | 10 | 0,94 | 0,72 | 0,99 | 0,98 | 0,83 |
| 15 | 17,5 | 3,54 | 494 | | | 15 | 0,97 | 0,71 | 0,99 | | |
| 20 | 17,5 | 3,52 | 494 | 38,35 | 331 | 20 | 0,97 | 0,71 | 0,99 | 0,98 | 0,55 |
| 30 | 17,5 | 3,48 | 496 | 37,52 | 222 | 30 | 0,97 | 0,70 | 0,99 | 0,96 | 0,37 |
| 45 | 17,5 | 3,42 | 498 | | | 45 | 0,97 | 0,69 | 1,00 | | |
| 60 | 18,0 | 3,38 | 500 | 34,62 | 226 | 60 | 1,00 | 0,68 | 1,00 | 0,88 | 0,38 |

máx 18,0 5,0 500,0 39,3 600,0

mín 17,0 3,4 221,0 34,6 222,0

Media 17,3 3,7 466,2 37,7 406,3

Tabla18. Resultados del experimento SMT.14

EXP.SMT.14 (30-01-2008)

(45 ppm SMT + 20 ppm Fe₂+ + 300 ppm H₂O₂ + LUZ)

| RESULTADOS EXPERIMENTALES | | | | | | RESULTADOS EN % RESPECTO EL MÁX | | | | | |
|---------------------------|--------|------|----------|-------|---|---------------------------------|--------|------|----------|------|---|
| T (min) | t (°C) | pH | P. redox | TOC | [H ₂ O ₂] 450 nm | T (min) | t (°C) | pH | P. redox | TOC | [H ₂ O ₂] 450 nm |
| 0 | 18,5 | 5,03 | 230 | 39,30 | 300 | 0 | 1,00 | 1,00 | 0,44 | 1,00 | 1,00 |
| 1 | 18,5 | 3,37 | 493 | | | 1 | 1,00 | 0,67 | 0,94 | | |
| 2 | 18,5 | 3,35 | 501 | | | 2 | 1,00 | 0,67 | 0,95 | | |
| 5 | 18,5 | 3,33 | 502 | 38,16 | 273 | 5 | 1,00 | 0,66 | 0,95 | 0,97 | 0,91 |
| 10 | 18,5 | 3,28 | 507 | 37,33 | 261 | 10 | 1,00 | 0,65 | 0,96 | 0,95 | 0,87 |
| 15 | 18,5 | 3,26 | 510 | | | 15 | 1,00 | 0,65 | 0,97 | | |
| 20 | 18,5 | 3,23 | 511 | 35,24 | 218 | 20 | 1,00 | 0,64 | 0,97 | 0,90 | 0,73 |
| 30 | 18,5 | 3,20 | 514 | 32,18 | 162 | 30 | 1,00 | 0,64 | 0,98 | 0,82 | 0,54 |
| 45 | 18,5 | 3,21 | 526 | | | 45 | 1,00 | 0,64 | 1,00 | | |
| 60 | 18,5 | 3,25 | 521 | 23,32 | 47 | 60 | 1,00 | 0,65 | 0,99 | 0,59 | 0,16 |

máx 18,5 5,0 526,0 39,3 300,0

mín 18,5 3,2 230,0 23,3 47,0

Media 18,5 3,5 481,5 34,3 210,2

Tabla 19. Resultados del experimento SMT.15

EXP.SMT.15 (31-01-2008)

(45 ppm SMT + 20 ppm Fe²⁺ + 900 ppm H₂O₂ + LUZ)

| RESULTADOS EXPERIMENTALES | | | | | | RESULTADOS EN % RESPECTO EL MÁX | | | | | |
|---------------------------|--------|------|----------|-------|---|---------------------------------|--------|------|----------|------|---|
| T (min) | t (°C) | pH | P. redox | TOC | [H ₂ O ₂] 450 nm | T (min) | t (°C) | pH | P. redox | TOC | [H ₂ O ₂] 450 nm |
| 0 | 16,5 | 4,91 | 221 | 30,08 | 900 | 0 | 0,97 | 1,00 | 0,44 | 1,00 | 1,00 |
| 1 | 16,5 | 3,58 | 485 | | | 1 | 0,97 | 0,73 | 0,97 | | |
| 2 | 16,5 | 3,54 | 492 | | | 2 | 0,97 | 0,72 | 0,98 | | |
| 5 | 16,5 | 3,46 | 495 | 29,68 | 828 | 5 | 0,97 | 0,70 | 0,99 | 0,99 | 0,92 |
| 10 | 16,5 | 3,40 | 497 | 28,93 | 465 | 10 | 0,97 | 0,69 | 0,99 | 0,96 | 0,52 |
| 15 | 17,0 | 3,36 | 498 | | | 15 | 1,00 | 0,68 | 0,99 | | |
| 20 | 17,0 | 3,33 | 499 | 26,13 | 282 | 20 | 1,00 | 0,68 | 1,00 | 0,87 | 0,31 |
| 30 | 17,0 | 3,26 | 501 | 22,17 | 201 | 30 | 1,00 | 0,66 | 1,00 | 0,74 | 0,22 |
| 45 | 17,0 | 3,28 | 499 | | | 45 | 1,00 | 0,67 | 1,00 | | |
| 60 | 17,0 | 3,31 | 498 | 15,96 | 195 | 60 | 1,00 | 0,67 | 0,99 | 0,53 | 0,22 |

máx 17,0 4,9 501,0 30,1 900,0
 mín 16,5 3,3 221,0 16,0 195,0
 Media 16,8 3,5 468,5 25,5 478,5

Tabla 20. Resultados del experimento SMT.16

EXP.SMT.16 (31-01-2008)

(45 ppm SMT + 40 ppm Fe²⁺ + 600 ppm H₂O₂ + LUZ)

| RESULTADOS EXPERIMENTALES | | | | | | RESULTADOS EN % RESPECTO EL MÁX | | | | | |
|---------------------------|--------|------|----------|-------|---|---------------------------------|--------|------|----------|------|---|
| T (min) | t (°C) | pH | P. redox | TOC | [H ₂ O ₂] 450 nm | T (min) | t (°C) | pH | P. redox | TOC | [H ₂ O ₂] 450 nm |
| 0 | 17,0 | 4,81 | 212 | 30,29 | 600 | 0 | 0,94 | 1,00 | 0,39 | 1,00 | 1,00 |
| 1 | 17,0 | 3,30 | 516 | | | 1 | 0,94 | 0,69 | 0,94 | | |
| 2 | 17,0 | 3,24 | 520 | | | 2 | 0,94 | 0,67 | 0,95 | | |
| 5 | 17,0 | 3,14 | 525 | 27,77 | 460 | 5 | 0,94 | 0,65 | 0,96 | 0,92 | 0,77 |
| 10 | 17,0 | 3,07 | 527 | 24,34 | 351 | 10 | 0,94 | 0,64 | 0,96 | 0,80 | 0,59 |
| 15 | 17,5 | 3,04 | 528 | | | 15 | 0,97 | 0,63 | 0,96 | | |
| 20 | 17,5 | 3,05 | 530 | 19,88 | 176 | 20 | 0,97 | 0,63 | 0,97 | 0,66 | 0,29 |
| 30 | 17,5 | 3,06 | 535 | 17,09 | 94 | 30 | 0,97 | 0,64 | 0,98 | 0,56 | 0,16 |
| 45 | 17,5 | 3,07 | 543 | | | 45 | 0,97 | 0,64 | 0,99 | | |
| 60 | 18,0 | 3,07 | 548 | 13,30 | 19 | 60 | 1,00 | 0,64 | 1,00 | 0,44 | 0,03 |

máx 18,0 4,8 548,0 30,3 600,0
 mín 17,0 3,0 212,0 13,3 19,0
 Media 17,3 3,3 498,4 22,1 283,3

Tabla 21. Resultados del experimento SMT.17

EXP.SMT.17 (01-02-2008)

(45 ppm SMT + 60 ppm Fe²⁺ + 300 ppm H₂O₂ + LUZ)

| RESULTADOS EXPERIMENTALES | | | | | | RESULTADOS EN % RESPECTO EL MÁX | | | | | |
|---------------------------|--------|------|----------|-------|---|---------------------------------|--------|------|----------|------|---|
| T (min) | t (°C) | pH | P. redox | TOC | [H ₂ O ₂] 450 nm | T (min) | t (°C) | pH | P. redox | TOC | [H ₂ O ₂] 450 nm |
| 0 | 16,5 | 4,48 | 220 | 29,83 | 300 | 0 | 0,97 | 1,00 | 0,40 | 1,00 | 1,00 |
| 1 | 16,5 | 3,19 | 497 | | | 1 | 0,97 | 0,71 | 0,90 | | |
| 2 | 16,5 | 3,09 | 532 | | | 2 | 0,97 | 0,69 | 0,96 | | |
| 5 | 16,5 | 3,02 | 538 | 26,47 | 155 | 5 | 0,97 | 0,67 | 0,97 | 0,89 | 0,52 |
| 10 | 16,5 | 2,98 | 542 | 23,01 | 98 | 10 | 0,97 | 0,67 | 0,98 | 0,77 | 0,33 |
| 15 | 16,5 | 2,97 | 545 | | | 15 | 0,97 | 0,66 | 0,99 | | |
| 20 | 17,0 | 2,97 | 548 | 19,37 | 38 | 20 | 1,00 | 0,66 | 0,99 | 0,65 | 0,13 |
| 30 | 16,5 | 2,98 | 550 | 16,81 | 18 | 30 | 0,97 | 0,67 | 1,00 | 0,56 | 0,06 |
| 45 | 16,5 | 2,98 | 552 | | | 45 | 0,97 | 0,67 | 1,00 | | |
| 60 | 16,5 | 2,97 | 550 | 14,51 | 2 | 60 | 0,97 | 0,66 | 1,00 | 0,49 | 0,01 |

máx 17,0 4,5 552,0 29,8 300,0
 mín 16,5 3,0 220,0 14,5 2,0
 Media 16,6 3,2 507,4 21,7 101,8

Tabla 22. Resultados del experimento SMT.18

EXP.SMT.18 (01-02-2008)

(45 ppm SMT + 40 ppm Fe²⁺ + 600 ppm H₂O₂ + LUZ)

| RESULTADOS EXPERIMENTALES | | | | | | RESULTADOS EN % RESPECTO EL MÁX | | | | | |
|---------------------------|--------|------|----------|-------|---|---------------------------------|--------|------|----------|------|---|
| T (min) | t (°C) | pH | P. redox | TOC | [H ₂ O ₂] 450 nm | T (min) | t (°C) | pH | P. redox | TOC | [H ₂ O ₂] 450 nm |
| 0 | 17,5 | 4,72 | 225 | 30,29 | 600 | 0 | 0,97 | 1,00 | 0,41 | 1,00 | 1,00 |
| 1 | 17,5 | 3,23 | 508 | | | 1 | 0,97 | 0,68 | 0,93 | | |
| 2 | 17,5 | 3,18 | 515 | | | 2 | 0,97 | 0,67 | 0,94 | | |
| 5 | 17,5 | 3,11 | 521 | 27,77 | 460 | 5 | 0,97 | 0,66 | 0,95 | 0,92 | 0,77 |
| 10 | 18,0 | 3,05 | 526 | 24,34 | 351 | 10 | 1,00 | 0,65 | 0,96 | 0,80 | 0,59 |
| 15 | 18,0 | 3,03 | 528 | | | 15 | 1,00 | 0,64 | 0,96 | | |
| 20 | 18,0 | 3,03 | 530 | 19,88 | 176 | 20 | 1,00 | 0,64 | 0,97 | 0,66 | 0,29 |
| 30 | 18,0 | 3,04 | 535 | 17,09 | 94 | 30 | 1,00 | 0,64 | 0,97 | 0,56 | 0,16 |
| 45 | 18,0 | 3,06 | 544 | | | 45 | 1,00 | 0,65 | 0,99 | | |
| 60 | 18,0 | 3,06 | 549 | 13,30 | 19 | 60 | 1,00 | 0,65 | 1,00 | 0,44 | 0,03 |

máx 18,0 4,7 549,0 30,3 600,0
 mín 17,5 3,0 225,0 13,3 19,0
 Media 17,8 3,3 498,1 22,1 283,3

Tabla 23. Resultados del experimento SMT.19

EXP.SMT.19 (06-02-2008)

(45 ppm SMT + 68 ppm Fe²⁺ + 600 ppm H₂O₂ + LUZ)

| RESULTADOS EXPERIMENTALES | | | | | | RESULTADOS EN % RESPECTO EL MÁX | | | | | |
|---------------------------|--------|------|----------|-------|---|---------------------------------|--------|------|----------|------|---|
| T (min) | t (°C) | pH | P. redox | TOC | [H ₂ O ₂] 450 nm | T (min) | t (°C) | pH | P. redox | TOC | [H ₂ O ₂] 450 nm |
| 0 | 16,0 | 4,84 | 191 | 30,84 | 600 | 0 | 0,94 | 1,00 | 0,34 | 1,00 | 1,00 |
| 1 | 16,5 | 3,18 | 513 | | | 1 | 0,97 | 0,66 | 0,92 | | |
| 2 | 16,5 | 3,13 | 523 | | | 2 | 0,97 | 0,65 | 0,94 | | |
| 5 | 16,5 | 3,04 | 529 | 26,57 | 345 | 5 | 0,97 | 0,63 | 0,95 | 0,86 | 0,58 |
| 10 | 17,0 | 2,99 | 537 | 23,69 | 222 | 10 | 1,00 | 0,62 | 0,96 | 0,77 | 0,37 |
| 15 | 17,0 | 2,98 | 541 | | | 15 | 1,00 | 0,62 | 0,97 | | |
| 20 | 17,0 | 2,97 | 544 | 20,03 | 111 | 20 | 1,00 | 0,61 | 0,98 | 0,65 | 0,19 |
| 30 | 17,0 | 2,97 | 548 | 17,12 | 60 | 30 | 1,00 | 0,61 | 0,98 | 0,56 | 0,10 |
| 45 | 17,0 | 2,97 | 554 | | | 45 | 1,00 | 0,61 | 0,99 | | |
| 60 | 17,0 | 2,96 | 557 | 14,27 | 10 | 60 | 1,00 | 0,61 | 1,00 | 0,46 | 0,02 |

máx 17,0 4,8 557,0 30,8 600,0
 mín 16,0 3,0 191,0 14,3 10,0
 Media 16,8 3,2 503,7 22,1 224,7

Tabla 24. Resultados del experimento SMT.20

EXP.SMT.20 (06-02-2008)

(45 ppm SMT + 40 ppm Fe²⁺ + 600 ppm H₂O₂ + LUZ)

| RESULTADOS EXPERIMENTALES | | | | | | RESULTADOS EN % RESPECTO EL MÁX | | | | | |
|---------------------------|--------|------|----------|-------|---------------|---------------------------------|--------|------|----------|------|---------------|
| T (min) | t (°C) | pH | P. redox | TOC | [H2O2] 450 nm | T (min) | t (°C) | pH | P. redox | TOC | [H2O2] 450 nm |
| 0 | 17,0 | 4,80 | 224 | 30,78 | 600 | 0 | 0,94 | 1,00 | 0,41 | 1,00 | 1,00 |
| 1 | 17,0 | 3,27 | 511 | | | 1 | 0,94 | 0,68 | 0,93 | | |
| 2 | 17,0 | 3,21 | 517 | | | 2 | 0,94 | 0,67 | 0,94 | | |
| 5 | 17,0 | 3,13 | 524 | 27,65 | 457 | 5 | 0,94 | 0,65 | 0,95 | 0,90 | 0,76 |
| 10 | 17,5 | 3,06 | 528 | 24,82 | 349 | 10 | 0,97 | 0,64 | 0,96 | 0,81 | 0,58 |
| 15 | 17,5 | 3,04 | 529 | | | 15 | 0,97 | 0,63 | 0,96 | | |
| 20 | 17,5 | 3,05 | 530 | 20,02 | 193 | 20 | 0,97 | 0,64 | 0,96 | 0,65 | 0,32 |
| 30 | 17,5 | 3,06 | 534 | 17,74 | 115 | 30 | 0,97 | 0,64 | 0,97 | 0,58 | 0,19 |
| 45 | 18,0 | 3,06 | 545 | | | 45 | 1,00 | 0,64 | 0,99 | | |
| 60 | 18,0 | 3,06 | 550 | 14,00 | 26 | 60 | 1,00 | 0,64 | 1,00 | 0,45 | 0,04 |

máx 18,0 4,8 550,0 30,8 600,0
 mín 17,0 3,0 224,0 14,0 26,0
 Media 17,4 3,3 499,2 22,5 290,0

Tabla 25. Resultados del experimento SMT.21

EXP.SMT.21 (07-02-2008)

(45 ppm SMT + 40 ppm Fe²⁺ + 176 ppm H₂O₂ + LUZ)

| RESULTADOS EXPERIMENTALES | | | | | | RESULTADOS EN % RESPECTO EL MÁX | | | | | |
|---------------------------|--------|------|----------|-------|---------------|---------------------------------|--------|------|----------|------|---------------|
| T (min) | t (°C) | pH | P. redox | TOC | [H2O2] 450 nm | T (min) | t (°C) | pH | P. redox | TOC | [H2O2] 450 nm |
| 0 | 18,0 | 4,74 | 213 | 30,45 | 176 | 0 | 0,97 | 1,00 | 0,41 | 1,00 | 1,00 |
| 1 | 18,0 | 3,29 | 497 | | | 1 | 0,97 | 0,69 | 0,95 | | |
| 2 | 18,5 | 3,21 | 519 | | | 2 | 1,00 | 0,68 | 0,99 | | |
| 5 | 18,5 | 3,13 | 524 | 29,89 | 98 | 5 | 1,00 | 0,66 | 1,00 | 0,98 | 0,56 |
| 10 | 18,5 | 3,06 | 524 | 24,68 | 68 | 10 | 1,00 | 0,65 | 1,00 | 0,81 | 0,39 |
| 15 | 18,5 | 3,04 | 523 | | | 15 | 1,00 | 0,64 | 1,00 | | |
| 20 | 18,5 | 3,04 | 524 | 21,41 | 26 | 20 | 1,00 | 0,64 | 1,00 | 0,70 | 0,15 |
| 30 | 18,5 | 3,06 | 524 | 18,85 | 10 | 30 | 1,00 | 0,65 | 1,00 | 0,62 | 0,06 |
| 45 | 18,5 | 3,07 | 520 | | | 45 | 1,00 | 0,65 | 0,99 | | |
| 60 | 18,5 | 3,07 | 510 | 16,86 | 0,26 | 60 | 1,00 | 0,65 | 0,97 | 0,55 | 0,00 |

máx 18,5 4,7 524,0 30,5 176,0
 mín 18,0 3,0 213,0 16,9 0,3
 Media 18,4 3,3 487,8 23,7 63,0

Tabla 26. Resultados del experimento SMT.24

EXP.SMT.24 (SMT+Fe²⁺+H₂O₂+LUZ) 18-04-08

| RESULTADOS EXPERIMENTALES | | | | | | RESULTADOS EN % RESPECTO EL MÁX | | | | | |
|---------------------------|--------|------|----------|--------|---|---------------------------------|--------|------|----------|------|---|
| T (min) | t (°C) | pH | P. redox | TOC | [H ₂ O ₂] 450 nm | T (min) | t (°C) | pH | P. redox | TOC | [H ₂ O ₂] 450 nm |
| 0 | 20,0 | 4,67 | 2 | 28,530 | 600 | 0 | 0,95 | 1,00 | 0,40 | 1,00 | 1,00 |
| 2 | 20,0 | 2,92 | 5 | 26,800 | - | 2 | 0,95 | 0,63 | 1,00 | 0,94 | - |
| 5 | 20,0 | 2,83 | 5 | 24,670 | 433 | 5 | 0,95 | 0,61 | 1,00 | 0,86 | 0,72 |
| 10 | 20,5 | 2,83 | 4 | 21,470 | 300 | 10 | 0,98 | 0,61 | 0,80 | 0,75 | 0,50 |
| 20 | 20,5 | 2,87 | 4 | 17,230 | 137 | 20 | 0,98 | 0,61 | 0,80 | 0,60 | 0,23 |
| 30 | 21,0 | 2,89 | 4 | 14,840 | 71 | 30 | 1,00 | 0,62 | 0,80 | 0,52 | 0,12 |
| 60 | 21,0 | 2,89 | 3 | 14,470 | 14 | 60 | 1,00 | 0,62 | 0,60 | 0,51 | 0,02 |
| 80 | 21,0 | 2,88 | 3 | 12,160 | 5 | 80 | 1,00 | 0,62 | 0,60 | 0,43 | 0,01 |
| 100 | 21,0 | 2,87 | 3 | 12,150 | 2 | 100 | 1,00 | 0,61 | 0,60 | 0,43 | 0,00 |
| 120 | 21,0 | 2,87 | 3 | 11,880 | 0,5 | 120 | 1,00 | 0,61 | 0,60 | 0,42 | 0,00 |
| 120 | 21,0 | 2,87 | 3 | 11,880 | 600 | 120 | 1,00 | 0,61 | 0,60 | 0,42 | 1,00 |
| 150 | 21,0 | 2,86 | 5 | 10,750 | - | 150 | 1,00 | 0,61 | 1,00 | 0,38 | - |
| máx | 21,0 | 4,7 | 5,0 | 28,5 | 600,0 | | | | | | |
| mín | 20,0 | 2,8 | 2,0 | 10,8 | 0,5 | | | | | | |
| Media | 20,7 | 3,0 | 3,7 | 17,2 | 216,3 | | | | | | |

Tabla 27. Resultados del experimento SMT.25

EXP.SMT.25 (SMT+Fe²⁺+H₂O₂) 25-04-08

| RESULTADOS EXPERIMENTALES | | | | | | RESULTADOS EN % RESPECTO EL MÁX | | | | | |
|---------------------------|--------|------|----------|--------|---|---------------------------------|--------|------|----------|------|---|
| T (min) | t (°C) | pH | P. redox | TOC | [H ₂ O ₂] 450 nm | T (min) | t (°C) | pH | P. redox | TOC | [H ₂ O ₂] 450 nm |
| 0 | 20,0 | 4,06 | 1 | 30,380 | 600 | 0 | 1,00 | 1,00 | 0,20 | 1,00 | 1,00 |
| 2 | 20,0 | 2,74 | 4 | 28,650 | | 2 | 1,00 | 0,67 | 0,80 | 0,94 | |
| 5 | 20,0 | 2,69 | 4 | 25,910 | 517 | 5 | 1,00 | 0,66 | 0,80 | 0,85 | 0,86 |
| 10 | 20,0 | 2,68 | 4 | 25,760 | 436 | 10 | 1,00 | 0,66 | 0,80 | 0,85 | 0,73 |
| 20 | 20,0 | 2,70 | 4 | 24,170 | 354 | 20 | 1,00 | 0,67 | 0,80 | 0,80 | 0,59 |
| 30 | 20,0 | 2,70 | 4 | 23,350 | 311 | 30 | 1,00 | 0,67 | 0,80 | 0,77 | 0,52 |
| 60 | 20,0 | 2,72 | 5 | 22,180 | 225 | 60 | 1,00 | 0,67 | 1,00 | 0,73 | 0,38 |
| 80 | 20,0 | 2,76 | 5 | 24,730 | 200 | 80 | 1,00 | 0,68 | 1,00 | 0,81 | 0,33 |
| 100 | 20,0 | 2,77 | 5 | 25,230 | 180 | 100 | 1,00 | 0,68 | 1,00 | 0,83 | 0,30 |
| 120 | 20,0 | 2,79 | 5 | 25,670 | 150 | 120 | 1,00 | 0,69 | 1,00 | 0,84 | 0,25 |
| máx | 20,0 | 4,1 | 5,0 | 30,4 | 600,0 | | | | | | |
| mín | 20,0 | 2,7 | 1,0 | 22,2 | 150,0 | | | | | | |
| Media | 20,0 | 2,9 | 4,1 | 25,6 | 330,3 | | | | | | |

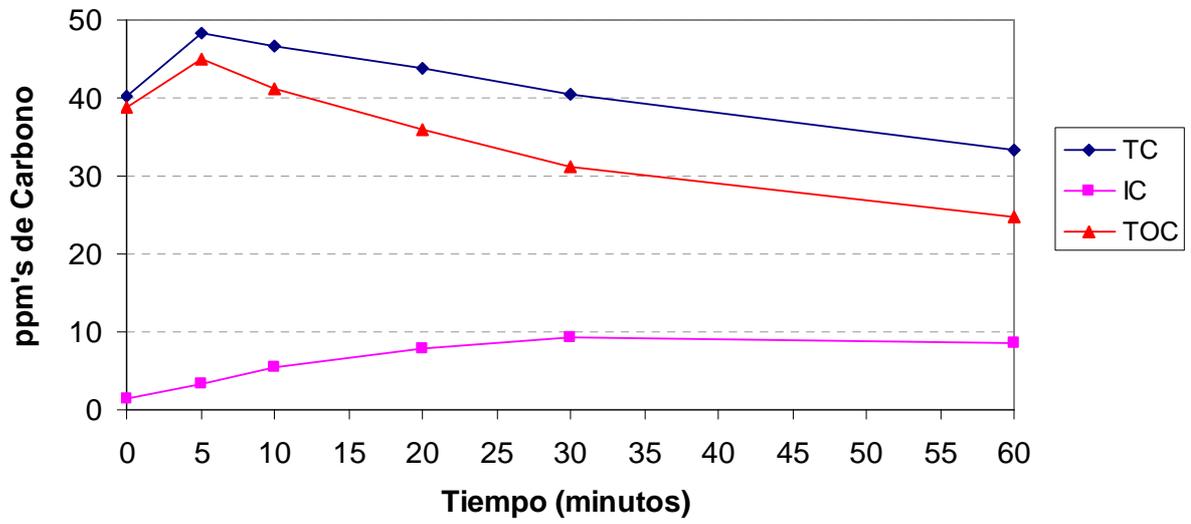


Figura 1. SMT.11 (TC, IC, TOC).

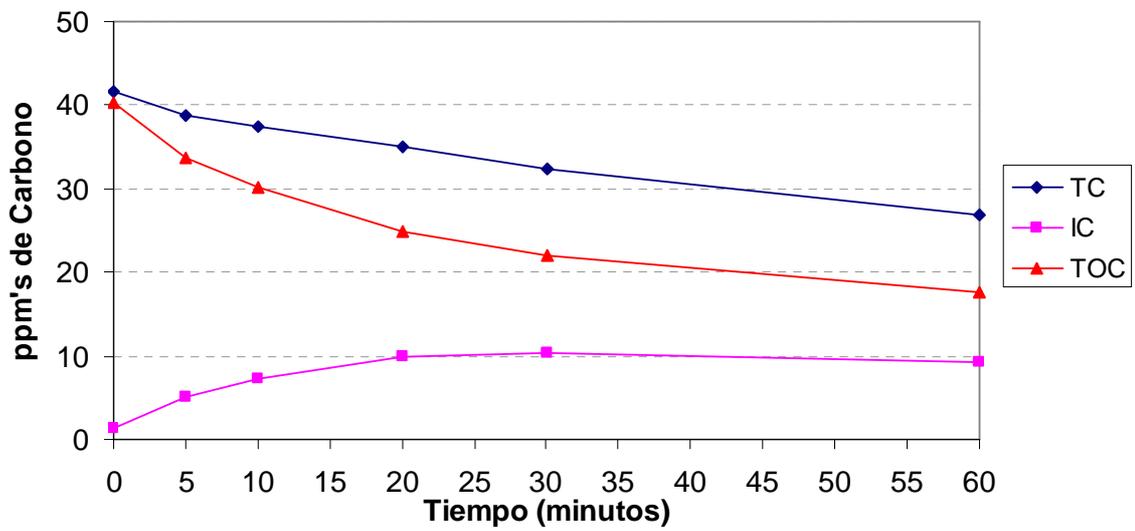


Figura 2. SMT.12 (TC, IC, TOC).

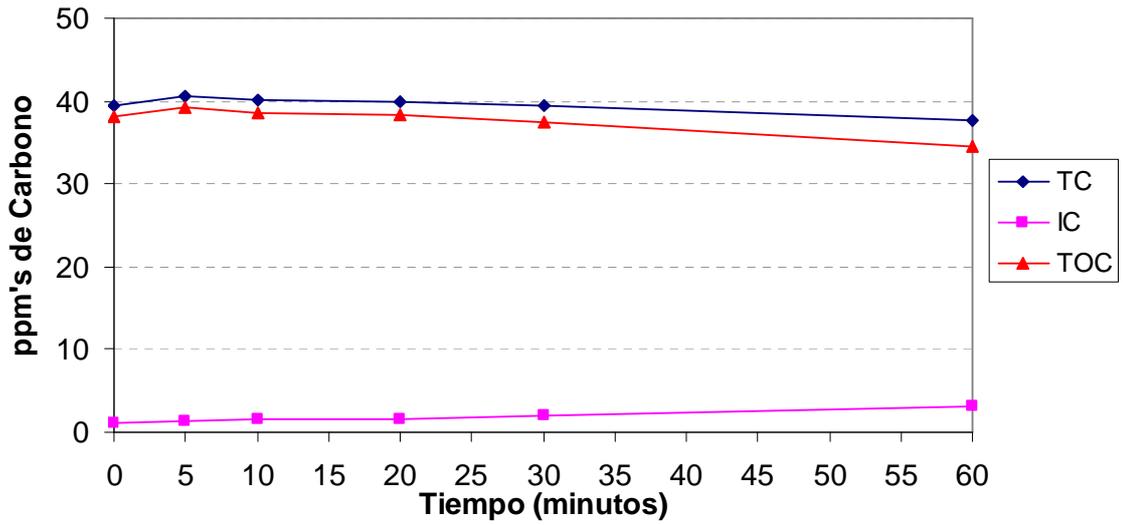


Figura 3. SMT.13 (TC, IC, TOC).

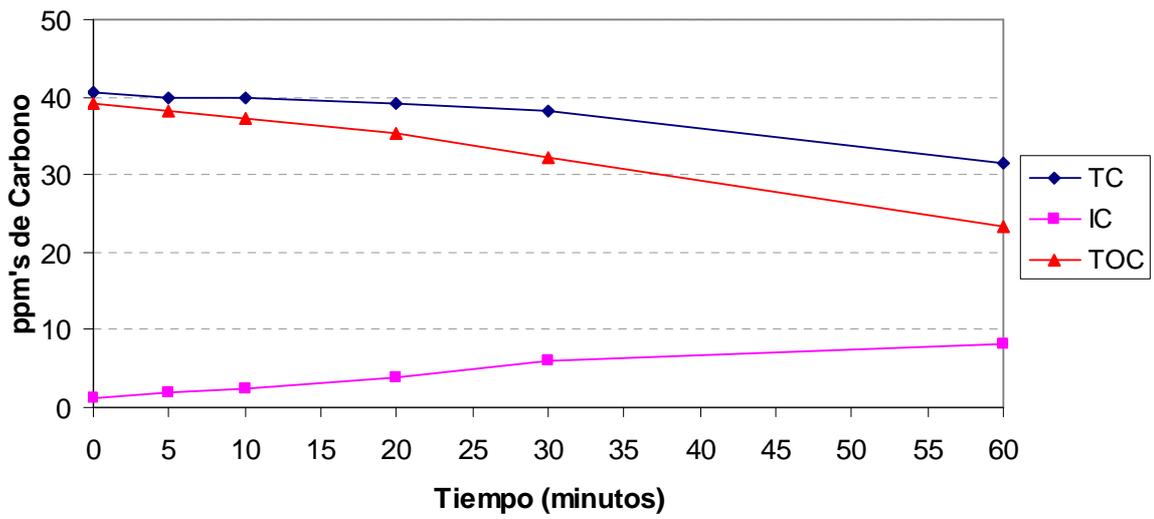


Figura 4. SMT.14 (TC, IC, TOC).

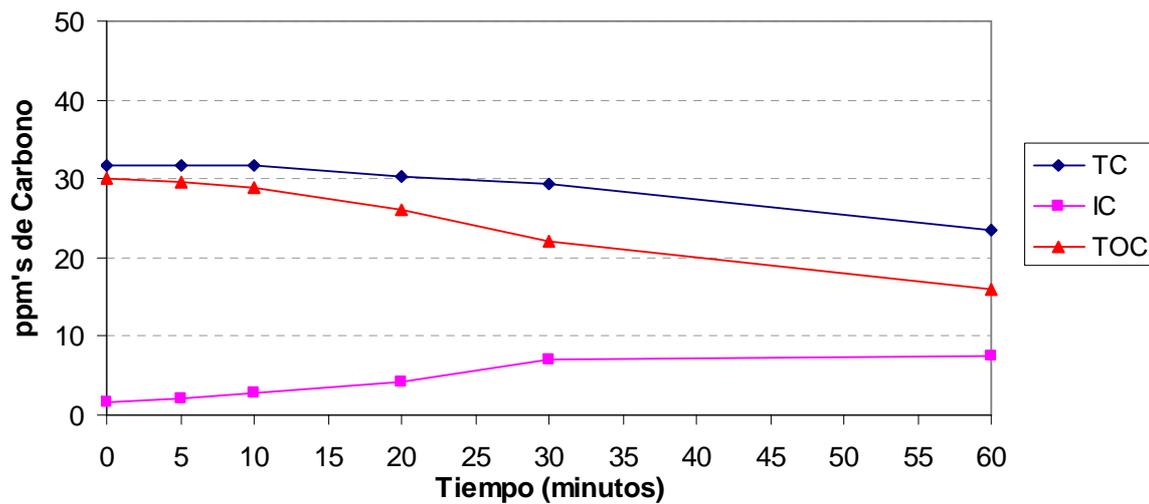


Figura 5. SMT.15 (TC, IC, TOC).

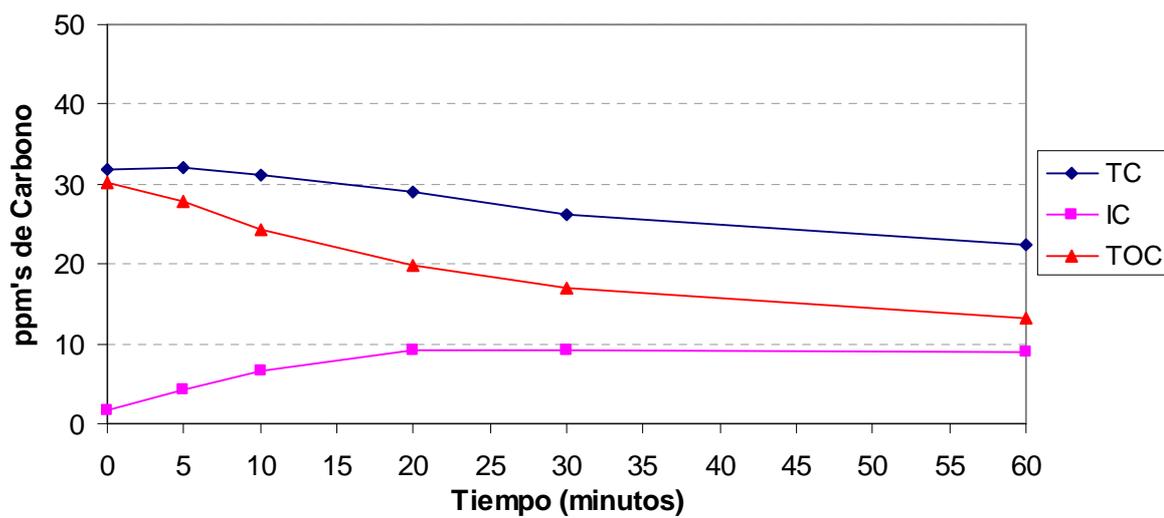


Figura 6. SMT.16 (TC, IC, TOC).

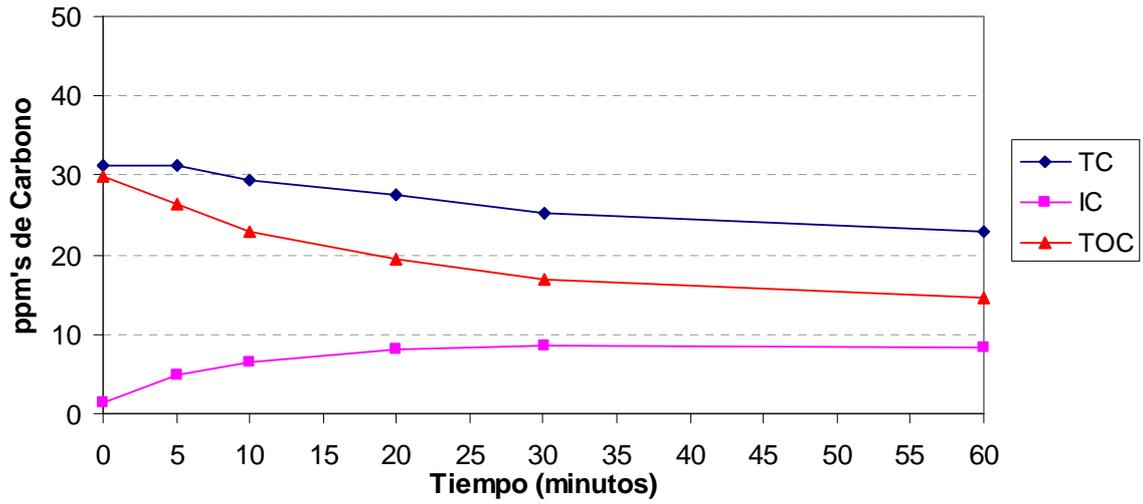


Figura 7. SMT.17 (TC, IC, TOC).

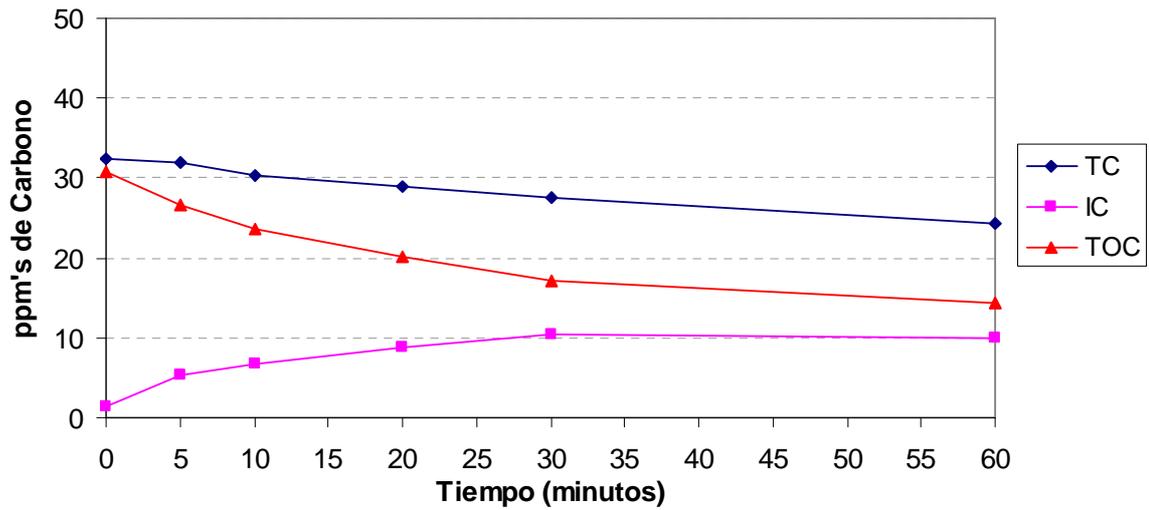


Figura 8. SMT.19 (TC, IC, TOC).

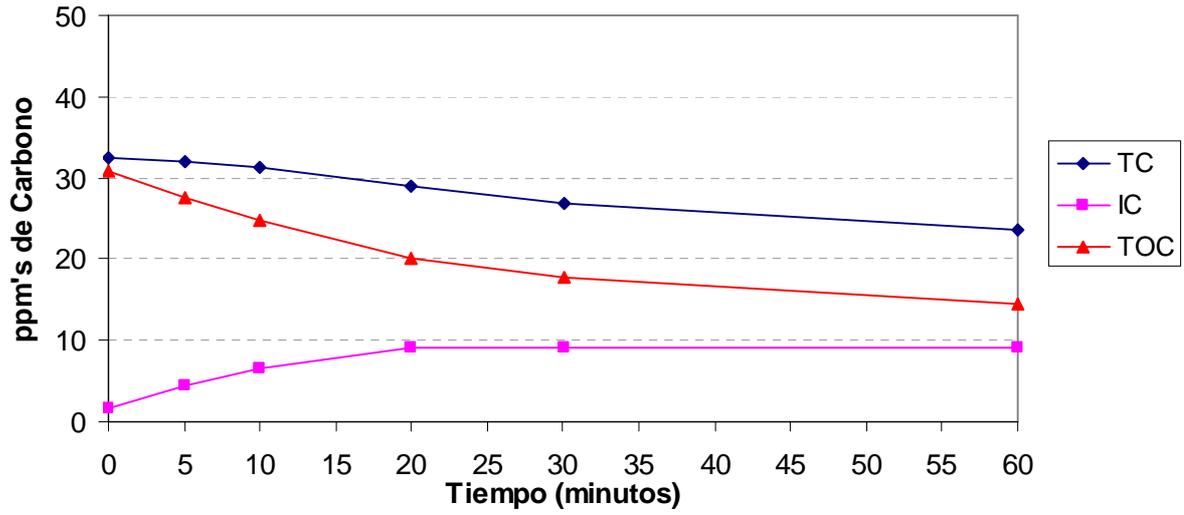


Figura 9. SMT.20 (TC, IC, TOC).

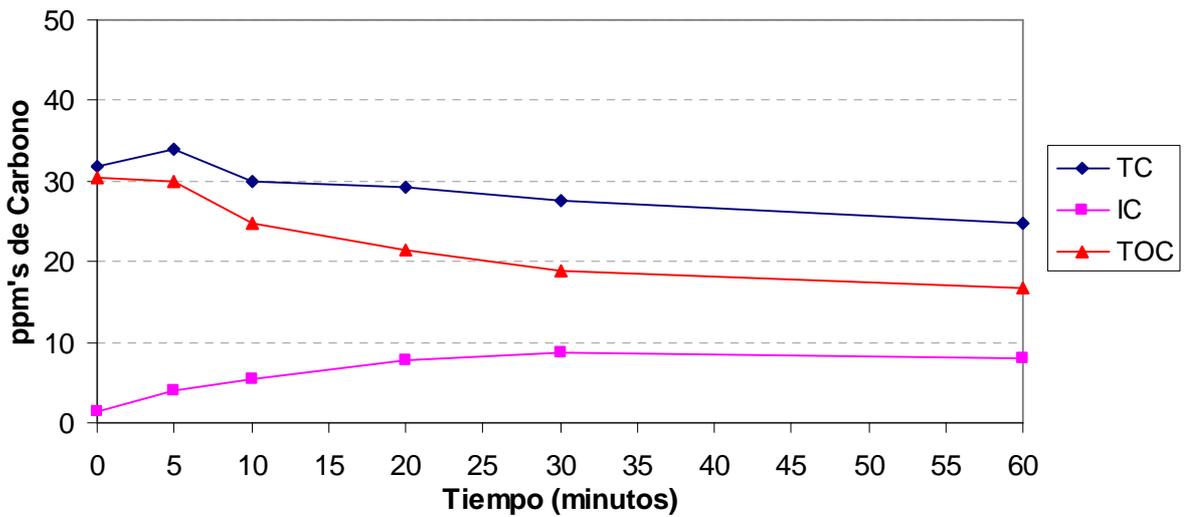


Figura 10. SMT.21 (TC, IC, TOC).

Anexo V: Datos primarios de los experimentos

A) CONDICIONES EXPERIMENTALES:

| Proyecto | Nº Exp. | Fecha | Hora Inicio | Hora fin | Volumen Reacción (Litros) | [Fe ²⁺] (ppm) | [SMT] (ppm) | [H ₂ O ₂] (ppm) | Agitación (rpm) | Luz Si/No | Altura luz | Potencia luz | T.amb Hum. | Temp Baño (°C) | Firma EOA | Firma GBG | Firma JAM | Firma MPM |
|----------|---------|----------|-------------|----------|---------------------------|---------------------------|-------------|--|-----------------|-----------|------------|--------------|------------|-------------------|-----------|-----------|-----------|-----------|
| SMT | 02 | 12/11/07 | 15:30 | 18:30 | 1 | 50 | 50 | No | 500 500 | No | NP | NP | | Agua a temp. amb. | | | JAM | |

B) COMPROBACIONES INICIALES:

- Valoración UV H₂O₂ 30 % (p/v): Añadir en un matraz de 100 ml, 1 ml de Disol de vanadato, añadir 30 µL de H₂O₂, enrasar y medir absorbancia a 450 nm.

$$X \% (p/v) = \left(\frac{ABS - 0,0182}{0,0085} \right) \times \left(\frac{1}{3} \right)$$

Este comprobación no procede en este experimento porque no se añade peróxido de hidrógeno

- Calibración pH-metro:

- Comprobación del funcionamiento del baño, lámpara, agitación:

- Viales preparados y fríos para las muestras de seguimiento SMT por HPLC (Sin dilución):

- Viales preparados y fríos para el seguimiento de TOC (Sin dilución):

- Viales preparados con agua fría en su interior para el seguimiento SMT por UV a 240 nm y a 260 nm (Dilución 1 a 3):

- Matraces de 10 ml preparados cada uno con 1 ml de disol de vanadato para las muestras de seguimiento de H₂O₂ por Vis a 450 nm (Dilución 3 a 10):

C) CÁLCULOS:

- Peso en mg de catalizador a añadir:

$$\frac{50 \text{ mg Fe}^{2+}}{1 \text{ L}} \times \frac{1 \text{ mmol Fe}^{2+}}{55,85 \text{ mg Fe}^{2+}} \times \frac{1 \text{ mmol FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}}{1 \text{ mmol Fe}^{2+}} \times \frac{278,02 \text{ mg FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}}{1 \text{ mmol FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}} \times \frac{100 \text{ mg Reactivo FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}}{98 \text{ mg FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}} = 253,97 \text{ mg Reactivo FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$$

- Peso en mg de Sulfametazina a añadir:

$$\frac{50 \text{ mg SMT}}{1 \text{ L}} \times 1 \text{ L} = 50 \text{ mg Reactivo SMT}$$

- Volumen en µL del reactivo H₂O₂ X % (p/v) a añadir: (Sustituir el valor de 30·10⁻³ por X·10⁻³ en el cálculo, dónde X es el resultado de la valoración del reactivo)

$$\frac{0 \text{ mg H}_2\text{O}_2}{1 \text{ L}} \times \frac{100 \text{ ml reactivo}}{30 \cdot 10^3 \text{ mg H}_2\text{O}_2} \times \frac{10^3 \mu\text{L reactivo H}_2\text{O}_2}{1 \text{ ml reactivo H}_2\text{O}_2} = 0 \mu\text{L reactivo H}_2\text{O}_2 \text{ (No procede este cálculo)}$$

D) PROCESO EXPERIMENTAL: Se realizan las siguientes tareas por el orden indicado: (1) Calibración pH-metro, (2) Montaje Foto-fenton con agitación y sensores, (3) comprobaciones iniciales, (4) revisión de cálculos, (5) adición del catalizador Fe²⁺, (6) medida y ajuste a pH 7 con sosa cáustica, (7) adición de SMT, (8) esperar a disolución de SMT y tomar muestra 00, (9) Encender la luz y adicionar el H₂O₂ rápidamente si procede, activando el cronómetro para el seguimiento de la reacción, (11) anotar los valores de temperatura, pH, potencial redox, el color de la mezcla de reacción y tomar las muestras de seguimiento de la reacción en los tiempos marcados en la tabla de registro del seguimiento experimental (las muestras tomadas se llevan a la nevera hasta su análisis excepto las de TOC, que se analizan justo después de tomar la muestra, (12) Realizar los análisis UV-Visible, para la cuantificación de SMT y de H₂O₂. *Se recomienda en el paso 5) Disolver del todo la SMT antes de realizar cualquier otra adición*

El potencial redox parece que no muestra un forma concisa, los valores muy altos.

E) VOLUMEN DE MUESTRA PARA EL SEGUIMIENTO DE LA REACCIÓN:

La muestra inicial será de 30 ml. Las muestras de seguimiento de la reacción serán 20 ml repetidos de la siguiente forma (1 ml para HPLC, 10 ml para TOC, 3ml para UV a 240 nm, 3 ml para UV a 260 nm y 3 ml para Visible a 450 nm).

F) SEGUIMIENTO EXPERIMENTAL:

| Tiempo (min.) | Temp (°C) | pH | P redox (mv) | Color | TC | TI | TOC | Abs UV 240 nm | [SMT] (ppm) | Abs UV 260 nm | [SMT] (ppm) | Abis Visible 450 nm | [H ₂ O ₂] (ppm) | [SO ₄ ²⁻] (ppm) | [NH ₄ ⁺] (ppm) | Muestra SI / No | muestra fiable SFT No | Código muestra SMT.XX.YY |
|---------------|-----------|------|--------------|-------|------|------|------|---------------|-------------|---------------|-------------|---------------------|--|--|---------------------------------------|-----------------|-----------------------|--------------------------|
| 0 | 17°C | 5,08 | 695 | Tramp | 5,5 | 1488 | 2340 | 3,025 | 45±1 | 3,24 | 53±1 | | | | | SI | SI | 02.00 |
| 1 | 17°C | 5,05 | 544 | Tramp | | | | | | | | | | | | | | |
| 2 | 17°C | 5,04 | 569 | " | | | | | | | | | | | | | | |
| 5 | 17°C | 5,01 | 648 | " | 2442 | 1688 | 2473 | 4,889 | 48±3 | 4,09 | 54±1 | | | | | SI | SI | 02.01 |
| 10 | 17°C | 4,94 | 792 | " | | | | | | | | | | | | | | |
| 15 | 17°C | 4,95 | 910 | " | 2553 | 1697 | 2388 | 4,089 | 48±3 | 4,14 | 57±1 | | | | | SI | SI | 02.02 |
| 30 | 17°C | 4,88 | 829 | " | 2566 | 1616 | 2401 | 4,087 | 48±3 | 4,149 | 57±1 | | | | | SI | SI | 02.03 |
| 45 | 17,5°C | 4,83 | 876 | " | | | | | | | | | | | | | | |
| 60 | 17,3°C | 4,8 | 2050* | " | 2627 | 1574 | 2470 | 4,093 | 48±3 | 4,178 | 57±1 | | | | | SI | SI | 02.04 |
| 75 | 17,5 | 4,76 | 2000* | 0 | | | | 4,094 | | 4,123 | | | | | | | | |

OBSERVACIONES

pH inicial agua desionizado 5,5. Para reactivo Fe2+ 2,357 p. Alineamos Fe2+ a pH 5,31. No se usaron
 04: 115 (al añadir SMT no se disuelve bien); 04: 23 cogemos muestra, 00. Con la lectura del
 ToC de la muestra 00 nos damos cuenta que no está. La SMT bien disuelta p/ 23,44 de ToC corresponde
 a 47,5 ppm de SMT y de hecho son 50 ppm. Para las próximas experimentos se diluirá bien la SMT
 antes de añadir Fe2+ para evitar problemas que al añadir Fe2+ no haya mucho el pH
 Por error no se han debido las muestras iniciales 02.00 para el análisis de SFT por UV
 En consecuencia no se puede confiar por interpolación (Valor
 * posible límite de detección instrumental. con la recta de calibrado. Por extrapolación (Valor
 no fiable los resultados serían ≈ 50 ppm
 Se deduce del exp. 02.00 que la SFT no se degrada sob con catalizador

A) CONDICIONES EXPERIMENTALES:

| Proyecto | Nº Exp. | Fecha | hora inicio | hora fin | Volumen Reacción (Litros) | [Fe ²⁺] (ppm) | [SMT] (ppm) | [H ₂ O ₂] (ppm) | Agitación (rpm) | Luz S/No | Altura luz | Potencia luz | Temp Baño (°C) | Firma EOA | Firma GBG | Firma JAM | Firma MPM |
|----------|---------|----------|-------------|----------|---------------------------|---------------------------|-------------|--|-----------------|----------|------------|--------------|----------------------|-----------|-----------|-----------|-----------|
| SMT | 03 | 15/11/07 | 15:30 | 18:30 | 1 | No | 50 | No | 500 | SI | 21 cm | | Agua a temp ambiente | | | JAM | |

B) COMPROBACIONES INICIALES:

- Valoración UV H₂O₂ 30 % (p/v): Añadir en un matraz de 100 ml, 1 ml de Disol de vanadato, añadir 30 µL de H₂O₂, ensayar y medir absorbancia a 450 nm.

$$X \% (p/v) = \left(\frac{ABS - 0,0182}{0,0085} \right) \times \left(\frac{1}{3} \right)$$

Este comprobación no procede en este experimento porque no se añade peróxido de hidrógeno

- Calibración pH-metro:

- Comprobación del funcionamiento del baño, lámpara, agitación:

- Viales preparados y fríos para las muestras de seguimiento SMT por HPLC (Sin dilución):

- Viales preparados y fríos para el seguimiento de TOC (Sin dilución):

- Viales preparados con agua fría en su interior para el seguimiento SMT por UV a 240 nm (Dilución 1 a 3):

- Matraces de 10 ml preparados cada uno con 1 ml de disol de vanadato para las muestras de seguimiento de H₂O₂ por Vis a 450 nm (Dilución 3 a 10):

C) CÁLCULOS:

- Peso en mg de catalizador a añadir:

$$0 \text{ mg Fe}^{2+} \times \frac{1 \text{ mmol Fe}^{2+}}{1 \text{ mmol FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}} \times \frac{278,02 \text{ mg FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}}{1 \text{ mmol FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}} \times \frac{100 \text{ mg Reactivo FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}}{98 \text{ mg FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}} = 0 \text{ mg Reactivo FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$$

- Peso en mg de Sulfametazina a añadir:

$$\frac{1 \text{ L}}{55,85 \text{ mg Fe}^{2+}} \times 1 \text{ mmol Fe}^{2+} \times 1 \text{ L} = 50 \text{ mg Reactivo SMT}$$

- Volumen en µL del reactivo H₂O₂ X % (p/v) a añadir: (Sustituir el valor de X en el cálculo, donde X es el resultado de la valoración del reactivo)

$$0 \text{ mg H}_2\text{O}_2 \times \frac{100 \text{ ml reactivo}}{30 \cdot 10^3 \text{ mg H}_2\text{C}_2} \times \frac{10^3 \text{ µL reactivo H}_2\text{O}_2}{1 \text{ ml reactivo H}_2\text{O}_2} = 0 \text{ µL reactivo H}_2\text{O}_2$$

D) PROCESO EXPERIMENTAL: Se realizan las siguientes tareas por el orden indicado: (1) Calibración pH-metro, (2) Montaje Foto-fenton con agitación y sensores, (3) Comprobaciones iniciales, (4) Revisión de cálculos, (5) Disolución de la SMT en 500 ml mediante ultrasonidos y dilución posterior a 1 litro, (6) Adición de Fe²⁺, (7) Tomar muestra 00, (8) Encender la luz y adicionar el H₂O₂ rápidamente, activando el cronómetro para el seguimiento de la reacción, (9) Anotar los valores de temperatura, pH, potencial redox, color de la mezcla de reacción y tomar las muestras de seguimiento de la reacción en los tiempos marcados en la tabla de registro del seguimiento experimental (las muestras tomadas se llevan a la nevera hasta su análisis excepto las muestras para el TOC, que se analizan justo después de tomar la muestra, (10) Realizar los análisis de TOC, (11) Realizar los análisis UV-Visible por duplicado, para la cuantificación de SMT y de H₂O₂.

E) VOLUMEN DE TOMA DE MUESTRA PARA EL SEGUIMIENTO DE LA REACCIÓN:

La muestra inicial y el resto de muestras de seguimiento de la reacción serán 21-22 ml repartidos de la siguiente forma (1 ml para HPLC, 3ml para UV a 240 nm, 3 ml para UV a 260 nm, 3 ml para Visible a 450 nm y el resto para el TOC).

F) SEGUIMIENTO EXPERIMENTAL:

| Tiempo (min.) | Temp (°C) | pH | P _{redox} (mv) | Color | TC | TI | TOC | Abs UV 240 nm | [SMT] (ppm) | Abs UV 260 nm | [SMT] (ppm) | Abs Visible 450 nm | [H ₂ O ₂] (ppm) | [SO ₄ ²⁻] (ppm) | [NH ₄ ⁺] (ppm) | Muestra SI / No | muestra fiable SI / No | Código muestra SMT.XX.YY |
|---------------|-----------|------|-------------------------|--------------|-------|------|-------|----------------|-------------|----------------|-------------|--------------------|--|--|---------------------------------------|-----------------|------------------------|--------------------------|
| 0 | 17,7 | 5,82 | 219 | Transparente | 27,21 | 1691 | 25151 | 1,057 1,055 | 48±3 | 1,102 1,100 | 54±9 | | | | | SI | SI | 03.00 |
| 1 | 17,5 | 5,85 | 210 | | | | | | | | | | | | | | | |
| 2 | 17,5 | 5,81 | 190 | | | | | | | | | | | | | | | |
| 5 | 17,5 | 5,81 | 206 | | 25,63 | 1526 | 25111 | 1,093 1,092 | 48±3 | 1,102 1,102 | 54±9 | | | | | SI | SI | 03.01 |
| 10 | 18 | 5,78 | 180 | | | | | | | | | | | | | | | |
| 15 | 18 | 5,81 | 176 | | 25,74 | 1531 | 25120 | 1,134 1,129 | 51±3 | 0,957 0,954 | 48±9 | | | | | SI | SI | 03.02 |
| 30 | 18,5 | 5,85 | 182 | | 25,69 | 1531 | 25115 | 1,118 1,114 | 51±3 | 0,952 0,953 | 48±9 | | | | | SI | SI | 03.03 |
| 45 | 18,8 | 5,87 | 192 | | | | | | | | | | | | | | | |
| 60 | 19 | 5,83 | 178 | | 25,82 | 1534 | 25109 | 1,064 1,059 | 48±3 | 1,107 1,101 | 54±9 | | | | | SI | SI | 03.04 |

OBSERVACIONES

Aunque se intenta disolver inicialmente el SMT por completo no se consigue del todo. Esto se comprueba por el perfil o bandeo en UV. SMT disuelto M. SMT no disoluble M. Por este motivo se le propone a Montserrat trabajar con [SMT] < 50 ppm, lo cual, ya era una idea que tenía y le parece bien. El PFC-1 lo tenemos con 50 ppm pero el PFC-2 será con mayores conc. En este exp. se observa que con la luz por si solo no se degrada el SMT

A) CONDICIONES EXPERIMENTALES:

| Proyecto | Nº Exp. | Fecha | Hora Inicio | Hora fin | Volumen Reacción (Litros) | [Fe ²⁺] (ppm) | [SMT] (ppm) | [H ₂ O ₂] (ppm) | Agitación (rpm) | Luz SI/No | Altura luz | Potencia luz | Temp Baño (°C) | Firma EOA | Firma GBG | Firma JAM | Firma MPM |
|----------|---------|----------|-------------|----------|---------------------------|---------------------------|-------------|--|-----------------|-----------|------------|--------------|----------------------|-----------|-----------|-----------|-------------|
| SMT | 04 | 22/11/07 | 15:02 | 18:02 | 1 | No | 50 | 600 | 500 | No | NP | NP | Agua a temp ambiente | EM | GABG | JAM | [Signature] |

B) COMPROBACIONES INICIALES:

- Valoración UV H₂O₂ 30 % (p/v): Añadir en un matraz de 100 ml, 10 ml de Disol de vanadato, añadir 30 µL de H₂O₂, ensayar y medir absorbancia a 450 nm.

$$X \% (p/v) = \left(\frac{ABS - 0,0182}{0,0085} \right) \times \left(\frac{1}{3} \right)$$

lecturas { 0,803
ABS 0,802
Medic. → 0,805

$$\% (p/v) = \frac{(0,8025 - 0,0182)}{0,0025 \cdot 3} = 30,76\%$$

- Calibración pH-metro:

- Comprobación del funcionamiento del baño, lámpara, agitación:

- Viales preparados y fríos para las muestras de seguimiento SMT por HPLC (Sin dilución):

- Viales preparados y fríos para el de seguimiento de TOC (Sin dilución):

- Viales preparados con agua fría en su interior para el seguimiento SMT por UV a 240 nm y a 260 nm (Dilución 1 a 3):

- Matrazes de 10 ml preparados cada uno con 1 ml de disol de vanadato para las muestras de seguimiento de H₂O₂ por Visible a 450 nm (Dilución 2 a 10):

El método de Central de Control de Calidad funciona solo para este laboratorio el resto de experimentación que se hizo a este resultado podría ser 30 ± 1,76 p/v

CUMPLE

C) CÁLCULOS:

- Peso en mg de catalizador a añadir:

$$0 \text{ mg Fe}^{2+} \times \frac{1 \text{ mmol Fe}^{2+}}{55,85 \text{ mg Fe}^{2+}} \times \frac{1 \text{ mmol FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}}{278,02 \text{ mg FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}} \times \frac{100 \text{ mg Reactivo FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}}{98 \text{ mg FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}} = 0 \text{ mg Reactivo FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$$

- Peso en mg de Sulfametazina a añadir:

$$50 \text{ mg SMT} \times \frac{1 \text{ L}}{1 \text{ L}} = 50 \text{ mg Reactivo SMT}$$

- Volumen en µL del reactivo H₂O₂ X % (p/v) a añadir: (Sustituir el valor de 30·10⁻³ por X·10⁻³ en el cálculo, dónde X es el resultado de la valoración del reactivo)

$$\frac{600 \text{ mg H}_2\text{O}_2}{1 \text{ L}} \times \frac{100 \text{ ml reactivo}}{30 \cdot 10^3 \text{ mg H}_2\text{O}_2} \times 10^3 \mu\text{L reactivo H}_2\text{O}_2 = 2000 \mu\text{L reactivo H}_2\text{O}_2$$

D) PROCESO EXPERIMENTAL: Se realizan las siguientes tareas por el orden indicado: (1) Calibración pH-metro, (2) Montaje Foto-fenton con agitación y sensores, (3) Comprobaciones iniciales, (4) Revisión de cálculos, (5) Disolución de la SMT en 500 ml mediante ultrasonidos y dilución posterior a 1 litro, (6) Adición de Fe²⁺, (7) Tomar muestra 00, (8) Enderper la luz y adicionar el H₂O₂ rápidamente, activando el cronómetro para el seguimiento de la reacción, (9) Anotar los valores de temperatura, pH, potencial redox, color de la mezcla de reacción y tomar las muestras de seguimiento de la reacción en los tiempos marcados en la tabla de registro del seguimiento experimental (las muestras tomadas se llevan a la nevera hasta su análisis excepto las muestras para el TOC, que se analizan justo después de tomar la muestra, (10) Realizar los análisis de TOC, (11) Realizar los análisis UV-Visible por duplicado, para la cuantificación de SMT y de H₂O₂.

E) VOLUMEN DE TOMA DE MUESTRA PARA EL SEGUIMIENTO DE LA REACCIÓN:

La muestra inicial y el resto de muestras de seguimiento de la reacción serán 21-22 ml repartidos de la siguiente forma (1 ml para HPLC, 3ml para UV a 240 nm, 3 ml para UV a 260 nm, 2 ml para Visible a 450 nm y el resto para el TOC).

F) SEGUIMIENTO EXPERIMENTAL:

| Tiempo (min.) | Temp (°C) | pH | P. redox (mv) | Color | TC | TI | TOC | Abs UV 240 nm | [SMT] (ppm) | Abs UV 260 nm | [SMT] (ppm) | Abs Visible 450 nm | [H ₂ O ₂] (ppm) | [SO ₄ ²⁻] (ppm) | [NH ₄ ⁺] (ppm) | Muestra Si / No | muestra fiable Si / No | Código muestra SMT-XX-YY |
|---------------|-----------|------|---------------|--------|------|-------|-------|----------------|-------------|----------------|-------------|--------------------|--|--|---------------------------------------|-----------------|------------------------|--------------------------|
| 0 | 20°C | 5.62 | 261 | T(amb) | 2706 | 0.309 | 26.53 | 1.113 1.317 | 51±3 | 0.914 0.945 | 45±9 | — | — | — | — | SI | SI | 04.00 |
| 1 | 19.8°C | 5.55 | 325 | T(amb) | | | | | | | | | | | | | | |
| 2 | 19.9°C | 5.56 | 327 | T(amb) | | | | | | | | | | | | | | |
| 5 | 19.5°C | 5.54 | 322 | T(amb) | 2575 | 0.194 | 25.21 | 1.199 1.247 | 57±3 | 1.141 1.140 | 57±9 | 1.050 1.051 | 575±30 | | | SI | SI | 04.01 |
| 10 | 19.5 | 5.57 | 327 | T(amb) | | | | | | | | | | | | | | |
| 15 | 19.5 | 5.60 | 327 | T(amb) | 2619 | 0.198 | 26.21 | 1.207 1.215 | 57±3 | 1.175 1.175 | 57±9 | 1.033 1.034 | 575±3 | | | SI | SI | 04.02 |
| 30 | 19.5 | 5.59 | 329 | T(amb) | 2720 | 0.155 | 26.68 | 1.245 1.292 | 57±3 | 1.174 1.175 | 57±9 | 1.033 1.034 | 600±30 | | | SI | SI | 04.03 |
| 45 | 19.0 | 5.60 | 321 | T(amb) | | | | | | | | | | | | | | |
| 60 | 19 | 5.59 | 323 | T(amb) | 2802 | 0.132 | 26.49 | 1.210 1.183 | 57±3 | 1.151 1.180 | 57±9 | 1.071 1.081 | 300 600±30 | | | SI | SI | 04.04 |

OBSERVACIONES

El control de calidad del reactivo H₂O₂ 30% H a os de 39.7% (ppm) de contenido concreto de candaje que en estas condiciones experimentales no se ha producido degradación alguna. Así lo demuestra el seguimiento del contaminante por TOC y UV y el seguimiento del reactivo H₂O₂ por UV. Se observa como en los experimentos anteriores una ligero aumento de la absorbancia (que) del contaminante transcurridos 5 minutos. Esto se debe a que este que se disuelve y durante el transcurso del experimento en su inicio (5-15min)

PS 4.3re → 0, 803
 (curvas H₂O₂) → 0, 802

Se acaba por disolverse. El aumento constante de la concentración de H₂O₂ remanente del seguimiento de momento no tiene explicación salvo que las muestras no sean estables. En este caso se explicaría que el aumento porque las muestras de análisis al final del experimento siendo las primeras realizadas (muestras iniciales) menores por descomposición. modo

A) CONDICIONES EXPERIMENTALES:

| Proyecto | Nº Exp. | Fecha | Hora Inicio | Hora fin | Volumen Reacción (Litros) | [Fe ²⁺] (ppm) | [SMT] (ppm) | [H ₂ O ₂] (ppm) | Agitación (rpm) | Luz SI/No | Altura luz | Potencia luz | Temp Baño (°C) | Firma EOA | Firma GBG | Firma JAM | Firma MPM |
|----------|---------|----------|-------------|----------|---------------------------|---------------------------|-------------|--|-----------------|-----------|------------|--------------|----------------------|-----------|-----------|-----------|-----------|
| SMT | 05 | 28/11/07 | 15:00 | 16:00 | 1 | 50 | 50 | No | 500 | SI | 21 cm | | Agua a temo ambiente | | GBG | JAM | |

B) COMPROBACIONES INICIALES:

- Valoración UV H₂O₂ 30 % (p/v): Añadir en un matraz de 100 ml, 1ml de Disol de yodato, añadir 30 µL de H₂O₂, esperar y medir absorbancia a 450 nm.

$$X \% (p/v) = \left(\frac{ABS - 0,0182}{0,0085} \right) \times \left(\frac{1}{3} \right)$$

Este comprobación no procede en este experimento porque no se añade peróxido de hidrógeno

- Calibración pH-metro;
- Comprobación del funcionamiento del baño, lámpara, agitación;
- Viales preparados y fríos para las muestras de seguimiento SMT por HPLC (Sin dilución);
- Viales preparados y fríos para el de seguimiento de TOC (Sin dilución);
- Viales preparados con agua fría en su interior para el seguimiento SMT por UV a 240 nm y a 260 nm (Dilución 1 a 3);
- Matrazes de 40 ml preparados cada uno con 4 ml de disol de yodato para las muestras de seguimiento de H₂O₂ por Vis a 450 nm. (Dilución 3 a 40)

C) CÁLCULOS:

- Peso en mg de catalizador a añadir:

$$50 \text{ mg Fe}^{2+} \times \frac{1 \text{ mmol Fe}^{2+}}{55,85 \text{ mg Fe}^{2+}} \times \frac{1 \text{ mmol FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}}{1 \text{ mmol Fe}^{2+}} \times \frac{278,02 \text{ mg FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}}{1 \text{ mmol FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}} \times \frac{100 \text{ mg Reactivo FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}}{98 \text{ mg FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}} = 253,97 \text{ mg Reactivo FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$$

- Peso en mg de Sulfametazina a añadir:

$$50 \text{ mg SMT} \times 1 \text{ L} = 50 \text{ mg Reactivo SMT}$$

- Volumen en µL del reactivo H₂O₂ X % (p/v) a añadir: (Sustituir el valor de 30 · 10³ por X · 10³ en el cálculo, donde X es el resultado de la valoración del reactivo)

$$0 \text{ mg H}_2\text{O}_2 \times \frac{100 \text{ ml reactivo}}{30 \cdot 10^3 \text{ mg H}_2\text{O}_2} \times \frac{10^3 \mu\text{L reactivo H}_2\text{O}_2}{1 \text{ ml reactivo H}_2\text{O}_2} = 0 \mu\text{L reactivo H}_2\text{O}_2 \text{ (No procede este cálculo)}$$

D) PROCESO EXPERIMENTAL: Se realizan las siguientes tareas por el orden indicado: (1) Calibración pH-metro, (2) Montaje Foto-fenton con agitación y sensores, (3) Comprobaciones iniciales, (4) Revisión de cálculos, (5) Disolución de la SMT en 500 ml mediante ultrasonidos y dilución posterior a 1 litro, (6) Adición de Fe²⁺, (7) Tomar muestra 00, (8) Encender la luz y adicionar el H₂O₂ rápidamente, activando el cronómetro para el seguimiento de la reacción, (9) Anotar los valores de temperatura, pH, potenciales redox, color de la mezcla de reacción y tomar las muestras de seguimiento de la reacción en los tiempos marcados en la tabla de registro del seguimiento experimental (las muestras tomadas se llevan a la nevera hasta su análisis excepto las muestras para el TOC, que se analizan justo después de tomar la muestra), (10) Realizar los análisis de TOC, (11) Realizar los análisis UV-Visible por duplicado, para la cuantificación de SMT y de H₂O₂.
(5) La dilución se preparó el pasado lunes 3/12/07. Se prepararon 2L de disolución SMT de 50 ppm. En el proceso de dilución se cubrió el agua hasta 30-40 °C y se comprobó que se diluyó mejor y más rápido. Puede ser de agua humana de 40 °C un control de calidad de de dilución y nos da 50 ppm ± 3 ppm. (absorbancia a 240 nm 15)

E) VOLUMEN DE TOMA DE MUESTRA PARA EL SEGUIMIENTO DE LA REACCIÓN:

La muestra inicial y el resto de muestras de seguimiento de la reacción serán 21-22 ml repartidos de la siguiente forma (1 ml para HPLC, 3ml para UV a 240 nm, 3 ml para UV a 260 nm, 3 ml para visible a 450 nm y el resto para el TOC).

F) SEGUIMIENTO EXPERIMENTAL:

| Tiempo (min.) | Temp (°C) | pH | P. redox (mv) | Color | TC | TI | TOC | Abs UV 240 nm | [SMT] (ppm) | Abs UV 260 nm | [SMT] (ppm) | Abs Visible 450 nm | [H ₂ O ₂] (ppm) | [SO ₄ ²⁻] (ppm) | [NH ₄ ⁺] (ppm) | Muestra SI / No | muestra fiable SI / No | Código muestra SMT XX YY |
|---------------|-----------|------|---------------|----------------|------|------|------|---------------|-------------|---------------|-------------|--------------------|--|--|---------------------------------------|-----------------|------------------------|--------------------------|
| 0 | 17°C | 5'17 | 119 | verde amarill. | 340 | 0002 | 2196 | | | | | | | | | SI | SI | 05.00 |
| 1 | 17°C | 5'23 | 122 | " | | | | | | | | | | | | | | |
| 2 | 17°C | 5'21 | 124 | " | | | | | | | | | | | | | | |
| 5 | 17°C | 5'19 | 126 | " | 2935 | 0106 | 2664 | | | | | | | | | SI | SI | 05.01 |
| 10 | 17°C | 5'12 | 132 | " | | | | | | | | | | | | | | |
| 15 | 17°C | 5'08 | 138 | " | 2713 | 0160 | 2663 | | | | | | | | | | | |
| 30 | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| 45 | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| 60 | | | | | | | | | | | | | | | | | | |

OBSERVACIONES

Se mide el caudal de agua utilizado en el curso 180 g/l/min ≈ 180 ml/min = 108 l/h
 Decisiones para el experimento a los 15 min porque sabemos por la experiencia acumulada de otros experimentos que no se ha producido reacción. Los datos que nos indican que no se ha producido reacción son:
 - el pH se mantiene alrededor de 5 → cuando se produce reacción baja a pH 3 aproximadamente
 - el P. redox se mantiene estable o con ligero ascenso → cuando se produce reacción baja hasta valores de 400-500
 - el TOC se mantiene estable → cuando se produce reacción disminuye significativamente.

No se han cogido muestras de seguimiento para Abs en el UV porque se comprobó el primer lunes 03/12/07 que las sales inorgánicas más típicas de la descomposición (NO₃⁻, SO₄²⁻, SiO₄²⁻) presentan diferencias menores tanto de la absorbancia a 240nm y disminuyendo de absorbancia a 260nm → Por lo tanto no se puede cuantificar de SMT en el proceso de degradación.

A) CONDICIONES EXPERIMENTALES:

| Proyecto | Nº Exp. | Fecha | Hora Inicio | Hora fin | Volumen Reacción (Litros) | [Fe ²⁺] (ppm) | [SMT] (ppm) | [H ₂ O ₂] (ppm) | Agitación (rpm) | Luz Si/No | Altura luz | Potencia luz | Temp Baño (°C) | Firma EOA | Firma GBG | Firma JAM | Firma MPM |
|----------|---------|----------------------|-------------|----------|---------------------------|---------------------------|-------------|--|-----------------|-----------|------------|--------------|----------------------|-----------|-----------|-----------|-----------|
| SMT | 06 | 29/11/07 03:32/08 | 15:00 | 18:45 | 1 | 50 | 50 | 600 | 500 | No | NP | NP | Agua a temp ambiente | EGA | GBG | JAM | |

B) COMPROBACIONES INICIALES:

- Valoración UV H₂O₂ 30 % (p/v): Añadir en un matraz de 100 ml, 10 ml de disol de vanadato, añadir 30 µl de H₂O₂, enrasar y medir absorbencia a 450 nm.

$$x \% (p/v) = \left(\frac{ABS - 0,0182}{0,0085} \right) \times \left(\frac{1}{3} \right) = \frac{(0,7495 - 0,0182)}{(0,0085 \times 3)} = 28,67\%$$

Para que cumpla el criterio de aceptación debería ser 30 ± 1,33% (FNU)

- Calibración pH-metro:

- Comprobación del funcionamiento del baño, lámpara, agitación:

- Viales preparados y fríos para las muestras de seguimiento SMT por HPLC (Sin dilución):

- Viales preparados y fríos para el de seguimiento de TOC (Sin dilución):

- Viales preparados con agua fría en su interior para el seguimiento SMT por UV a 240 nm y a 260 nm (Dilución 1 a 3):

- Matraces de 10 ml preparados cada uno con 1 ml de disol de vanadato para las muestras de seguimiento de H₂O₂ por Vis a 450 nm (Dilución 2 a 10):

a las 5 min dilución 2 a 10 a las 15 min dilución 3 a 10 a las 30 min dilución 4 a 10 a las 60 min dilución 4 a 10

C) CÁLCULOS:

- Peso en mg de catalizador a añadir:

$$50 \text{ mg Fe}^{2+} \times \frac{1 \text{ mmol Fe}^{2+}}{55,85 \text{ mg Fe}^{2+}} \times \frac{1 \text{ mmol FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}}{1 \text{ mmol Fe}^{2+}} \times \frac{278,02 \text{ mg FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}}{1 \text{ mmol FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}} \times \frac{100 \text{ mg Reactivo FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}}{98 \text{ mg FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}} = 253,6 \text{ mg}$$

- Peso en mg de Sulfametazina a añadir:

$$\frac{50 \text{ mg SMT}}{1 \text{ L}} \times 1 \text{ L} = 50 \text{ mg Reactivo SMT} \quad 49,9 \text{ mg}$$

- Volumen en µL del reactivo H₂O₂ X % (p/v) a añadir: (Sustituir el valor de 30·10⁻³ por X·10⁻³ en el cálculo, dónde X es el resultado de la valoración del reactivo)

$$600 \text{ mg H}_2\text{O}_2 \times \frac{100 \text{ ml reactivo}}{30 \cdot 10^3 \text{ mg H}_2\text{O}_2} \times \frac{10^3 \text{ µL reactivo H}_2\text{O}_2}{1 \text{ ml reactivo H}_2\text{O}_2} = 2000 \text{ µL reactivo H}_2\text{O}_2$$

D) PROCESO EXPERIMENTAL: Se realizan las siguientes tareas por el orden indicado: (1) Calibración pH-metro, (2) Montaje Foto-fenton con agitación y sensores, (3) Comprobaciones iniciales, (4) Revisión de cálculos, (5) Disolución de la SMT en 500 ml mediante ultrasonidos y dilución posterior a 1 litro, (6) Adición de Fe²⁺, (7) Tomar muestra 00, (8) Encender la luz y adicionar el H₂O₂ rápidamente, activando el cronómetro para el seguimiento de la reacción, (9) Anotar los valores de temperatura, pH, potencial redox, color de la mezcla de reacción y tomar las muestras de seguimiento de la reacción en los tiempos marcados en la tabla de registro del seguimiento experimental (las muestras tomadas se llevan a la nevera hasta su análisis excepto las muestras para el TOC, que se analizan justo después de tomar la muestra), (10) Realizar los análisis de TOC, (11) Realizar los análisis UV-Visible por duplicado, para la cuantificación de SMT y de H₂O₂.

E) VOLUMEN DE TOMA DE MUESTRA PARA EL SEGUIMIENTO DE LA REACCIÓN:

La muestra inicial y el resto de muestras de seguimiento de la reacción serán 21-22 ml repetitivos de la siguiente forma (1 ml para HPLC, 3ml para UV a 240 nm, 3 ml para UV a 260 nm, 2 ml para Visible a 450 nm y el resto para el TOC.
 → 3 ml a 5 ml.

F) SEGUIMIENTO EXPERIMENTAL:

| Tiempo (min.) | Temp (°C) | pH | P. redox (mV) | Color | TC | TI | TOC | Abs UV 240 nm | [SMT] (ppm) | Abs UV 260 nm | [SMT] (ppm) | Abs Visible 450 nm | [H ₂ O ₂] (ppm) | [SO ₄ ²⁻] (ppm) | [NH ₄ ⁺] (ppm) | Muestra SI / No | muestra fiable SI / No | Código muestra SMT.XX.YY | |
|---------------|-----------|------|---------------|----------------|------|------|-------|----------------|-------------|----------------|-------------|--------------------|--|--|---------------------------------------|-----------------|------------------------|--------------------------|--|
| 0 | 17 | 9,98 | 426 | Rojo oscuro | 2832 | 2030 | 24,93 | 1,016 2,092 | 48±3 | 1,093 1,095 | 54±9 | 600 | | | | SI | SI | 06.00 | |
| 1 | 17 | 3,16 | 447 | Rojo oscuro | | | | | | | | | | | | | | | |
| 2 | 17 | 3,10 | 453 | " | | | | | | | | | | | | | | | |
| 5 | 17 | 3,06 | 462 | " con turbidez | 2058 | 404 | 22,09 | 1,178 1,176 | 54±3 | 0,874 0,884 | 43±9 | 672 693 | 395 | | | SI | SI | 06.01 | |
| 10 | 17 | 3,03 | 469 | " | | | | | | | | | | | | | | | |
| 15 | 17 | 3,02 | 474 | " | 2534 | 3810 | 21,48 | 1,147 1,152 | 51±3 | 0,823 0,837 | 42±9 | 962 964 | 273,5 | | | SI | SI | 06.02 | |
| 30 | 17 | 2,99 | 479 | " | 2544 | 3600 | 21,04 | 1,133 1,140 | 51±3 | 0,830 0,840 | 42±9 | 771 790 | 223,5 | | | SI | SI | 06.03 | |
| 45 | 17 | 2,99 | 481 | " | | | | | | | | | | | | | | | |
| 60 | 17 | 2,98 | 481 | " | 2858 | 2322 | 21,04 | 1,098 1,104 | 48±3 | 0,823 0,825 | 42±9 | 942 942 | 167,5 | | | SI | SI | 06.04 | |

OBSERVACIONES

No se observa degradación de burbujas deforme tan intensa como en el exp. foto futura.
 Se genera una gran turbidez.
 1050 | Muestra 06.01 dilución (2:10) en HPLC y las muestras 06.02; 06.03 y 06.04 dilución (4:10)

Control H₂O₂ → 0,741 } **X: 0,7495** Entorno matriz 240 260
 (450 nm) 0,751 } Banco 0,726/0,534 0,595/0,596
 Sales 2,079/2,072 0,228/0,224

A) CONDICIONES EXPERIMENTALES: El experimento SMT07 se realiza e continuación del SMT05 el mismo día (19/12/07)

| Proyecto | Nº Exp. | Fecha | Hora inicio | Hora fin | Volumen Reacción (Litros) | [Fe ²⁺] (ppm) | [SMT] (ppm) | [H ₂ O ₂] (ppm) | Agitación (rpm) | Luz S/No | Altura luz | Potencia luz | Temp Baño (°C) | Firma EOA | Firma GBG | Firma JAM | Firma MPM |
|----------|---------|----------|-------------|----------|---------------------------|---------------------------|-------------|--|-----------------|----------|------------|--------------|-----------------------|-----------|-----------|-----------|-----------|
| SMT | 07 | 03/12/07 | 16:00 | 16:30 | 1 | No | 50 | 600 | 500 | SI | 21 cm | | Agua a temp ambiente. | | GBG | JAM | |

B) COMPROBACIONES INICIALES:

- Valoración UV H₂O₂ 30 % (p/v): Añadir en un matraz de 100 ml, 1ml de Disol de vanadato, añadir 30 µL de H₂O₂, enrasar y medir absorbancia a 450 nm.

$$x \% (p/v) = \left(\frac{ABS - 0,0182}{0,0085} \right) \times \left(\frac{1}{3} \right) = \frac{(0,78 - 0,0182)}{(0,0085 \times 3)} = 29,87\%$$
Los respectivos Comprobos de Calidad del reactivo H₂O₂ 30% p/v han dado los siguientes resultados por orden cronológico: 29/11/2007 → 30,76% Estable como 29/11/2007 → 29,58% como control 02/12/2007 → 29,67% de aceptación 18/12/2007 → 30,07% 30,0 ± 1,5 %

- Calibración pH-metro:
 - Comprobación del funcionamiento del baño, lámpara, agitación:
 - Viales preparados y fríos para las muestras de seguimiento SMT por HPLC (Sin dilución):
 - Viales preparados y fríos para el de seguimiento de TOC (Sin dilución):
 - Viales preparados con agua fría en su interior para el seguimiento SMT por UV a 240 nm y a 260 nm (Dilución 1 a 3):
 - Matraces de 10 ml preparados cada uno con 1 ml de disol de vanadato para las muestras de seguimiento de H₂O₂ por Vis a 450 nm (Dilución 2 a 10):

C) CÁLCULOS:

- Peso en mg de catalizador a añadir:

$$0 \text{ mg Fe}^{2+} \times \frac{1 \text{ mmol Fe}^{2+}}{1 \text{ mmol FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}} \times \frac{278,02 \text{ mg FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}}{100 \text{ mg Reactivo FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}} = 0 \text{ mg Reactivo FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$$

- Peso en mg de Sulfametazina a añadir:

$$50 \text{ mg SMT} \times \frac{1 \text{ L}}{1 \text{ L}} = 50 \text{ mg Reactivo SMT}$$

- Volumen en µL del reactivo H₂O₂ X % (p/v) a añadir: (Sustituir el valor de 30·10⁻³ por X·10⁻³ en el cálculo, dónde X es el resultado de la valoración del reactivo)

$$600 \text{ mg H}_2\text{O}_2 \times \frac{100 \text{ ml reactivo}}{30 \cdot 10^3 \text{ mg H}_2\text{O}_2} \times \frac{10^3 \mu\text{L reactivo H}_2\text{O}_2}{1 \text{ ml reactivo H}_2\text{O}_2} = 2000 \mu\text{L reactivo H}_2\text{O}_2$$

D) PROCESO EXPERIMENTAL: Se realizan las siguientes tareas por el orden indicado: (1) Calibración pH-metro, (2) Montaje Foto-fenton con agitación y sensores, (3) Comprobaciones iniciales, (4) Revisión de cálculos, (5) Disolución de la SMT en 500 ml mediante ultrasonidos y dilución posterior a 1 litro, (6) Adición de Fe²⁺, (7) Tomar muestra 00, (8) Encender la luz y adicionar el H₂O₂ rápidamente, activando el cronómetro para el seguimiento de la reacción, (9) Anotar los valores de temperatura, pH, potencial redox, color de la mezcla de reacción y tomar las muestras de seguimiento de la reacción en los tiempos marcados en la tabla de registro del seguimiento experimental (las muestras tomadas se llevan a la nevera hasta su análisis excepto las muestras para el TOC, que se analizan justo después de tomar la muestra), (10) Realizar los análisis de TOC, (11) Realizar los análisis UV-Visible por duplicado, para la cuantificación de SMT y de H₂O₂.
(5) La dilución de SMT se preparó el pasado lunes 02/12/07 mediante calificación de agua hasta 30-40 °C. Este proceso es más eficiente y no pierdo respecto al subsecuente y además se reduce el consumo de agua durante el análisis. Este proceso según el control de calidad realizado. Se multiplica el procedimiento de preparación de disoluciones de Sulfametazina de SMT para realizarlas mediante calificación de agua fría (una o dos veces antes del experimento)

E) VOLUMEN DE TOMA DE MUESTRA PARA EL SEGUIMIENTO DE LA REACCIÓN:

La muestra inicial y el resto de muestras de seguimiento de la reacción serán 21-22 ml repartidos de la siguiente forma (1 ml para HPLC, 3ml para UV a 240 nm, 3 ml para UV a 260 nm, 3 ml para Visible a 450 nm y el resto para el TOC).

F) SEGUIMIENTO EXPERIMENTAL:

| Tiempo (min.) | Temp (°C) | pH | P. rojo (mV) | Color | TC | TI | TOC | Abs UV 240 nm | [SMT] (ppm) | Abs UV 260 nm | [SMT] (ppm) | Abs Visible 450 nm | [H ₂ O ₂] (ppm) | [SO ₄ ²⁻] (ppm) | [NH ₄ ⁺] (ppm) | Muestra SI / No | muestra filtrable SI / No | Código muestra SMT.XX.YY |
|---------------|-----------|------|--------------|-----------|-----------------|------|-----|---------------|-------------|---------------|-------------|--------------------|--|--|---------------------------------------|-----------------|---------------------------|--------------------------|
| 0 | 17°C | 5.72 | 192 | colorless | 2833.0576 | 2343 | | | | | | | 600 | | | SI | ✓ | 07.00 |
| 1 | 17.8°C | 5.69 | 341 | " | | | | | | | | | | | | | | |
| 2 | 17.8°C | 5.70 | 341 | " | | | | | | | | | | | | | | |
| 5 | 17.8°C | 5.71 | 339 | " | 2833.09723184 | | | | | | | 2.154 2.156 | 670 | | | SI | ✓ | 07.01 |
| 10 | 17.8°C | 5.72 | 338 | " | | | | | | | | | | | | | | |
| 15 | 17.8°C | 5.73 | 336 | " | 2836.0871123197 | | | | | | | 1.081 2.032 | 625 | | | SI | ✓ | 07.02 |
| 30 | | | | | | | | | | | | | | | | SI | | 07.03 |
| 45 | | | | | | | | | | | | | | | | SI | | |
| 60 | | | | | | | | | | | | | | | | SI | | 07.04 |

OBSERVACIONES

Decidimos parar el experimento a los 15 minutos porque las datos nos indican que no se produce reacción
 - el pH se mantiene alrededor de 5.7. Cuando se produce reacción desciende a 3 rápidamente
 - el P. rojo se mantiene estable alrededor de 338. Cuando se produce reacción asciende hasta valores de 490, 500
 - El TOC se mantiene estable. (cuando se produce reacción el TOC desciende significativamente)

C.C. [H₂O₂] → (0.77), (0.782)
 ↙ X (0.78)

No se han cogido muestras de seguimiento de la SMT mediante Sectiones de Absorbancia en el UV porque se cambió el pasado 03/12/07 que por ser de emergencia resultantes de la degradación producida en laboratorio. Por lo tanto no se puede cuantificar el SMT por esta vía.

A) CONDICIONES EXPERIMENTALES:

| Proyecto | N° Exp. | Fecha | hora Inicio | hora fin | Volumen Reacción (Litros) | [Fe ²⁺] (ppm) | [SMT] (ppm) | [H ₂ O ₂] (ppm) | Agitación (rpm) | Luz Si/No | Altura luz | Potencia luz | Temp Baño (°C) | Firma EOA | Firma GBG | Firma JAM | Firma MPM |
|----------|---------|----------|-------------|----------|---------------------------|---------------------------|-------------|--|-----------------------|-----------|------------|--------------|------------------|-----------|-----------|-----------|-----------|
| SMT | 08 | 23/11/07 | 15:00 | 19:00 | 1 | 50 | 50 | 600 | 600 500 | SI | 21 cm | | Agua a temp amb. | | | | |

B) COMPROBACIONES INICIALES:

- Valoración UV H₂O₂ 30 % (p/v): Añadir en un matraz de 100 ml, 10 ml de Dióxido de vanadato, añadir 30 µL de H₂O₂, enrasar y medir absorbancia a 450 nm.

$$X \% (p/v) = \left(\frac{ABS - 0,0182}{0,0085} \right) \times \left(\frac{1}{3} \right) = \frac{(0,165 - 0,0182)}{(0,0085 \times 3)} = 29,28\% \approx 29\% (p/v) \text{ ok! Cumple } 30 \pm 1\% (p/v)$$
- Calibración pH-metro:
- Comprobación del funcionamiento del baño, lámpara, agitación:
- Viales preparados y fríos para las muestras de seguimiento SMT por HPLC (Sin dilución):
- Viales preparados y fríos para el de seguimiento de TOC (Sin dilución):
- Viales preparados con agua fría en su inferior para el seguimiento SMT por UV a 240 nm y a 260 nm (Dilución 1 a 3):
- Matraces de 10 ml preparados cada uno con 1 ml de dióxido de vanadato para las muestras de seguimiento de H₂O₂ por Vis a 450 nm (Dilución 2 a 10):

C) CÁLCULOS:

- Peso en mg de catalizador a añadir:

$$50 \text{ mg Fe}^{2+} \times \frac{1 \text{ mmol Fe}^{2+}}{55,85 \text{ mg Fe}^{2+}} \times \frac{1 \text{ mmol FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}}{1 \text{ mmol Fe}^{2+}} \times \frac{278,02 \text{ mg FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}}{1 \text{ mmol FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}} \times \frac{100 \text{ mg Reactivo FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}}{98 \text{ mg FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}} = 253,97 \text{ mg Reactivo FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$$
- Peso en mg de Sulfametazina a añadir:

$$50 \text{ mg SMT} \times 1 \text{ L} = 50 \text{ mg Reactivo SMT}$$
- Volumen en µL del reactivo H₂O₂ X % (p/v) a añadir: (Sustituir el valor de 30·10⁻³ por X·10⁻³ en el cálculo, dónde X es el resultado de la valoración del reactivo)

$$\frac{600 \text{ mg H}_2\text{O}_2}{1 \text{ L}} \times \frac{100 \text{ ml reactivo}}{30 \cdot 10^3 \text{ mg H}_2\text{O}_2} \times \frac{10^3 \mu\text{L reactivo H}_2\text{O}_2}{1 \text{ ml reactivo H}_2\text{O}_2} = 2000 \mu\text{L reactivo H}_2\text{O}_2$$

D) PROCESO EXPERIMENTAL: Se realizan las siguientes tareas por el orden indicado: (1) Calibración pH-metro, (2) Montaje Foto-fenton con agitación y sensores, (3) Comprobaciones iniciales, (4) Revisión de cálculos, (5) Disolución de la SMT en 500 ml mediante ultrasonidos y dilución posterior a 1 litro, (6) Adición de Fe²⁺, (7) Tomar muestra O₂, (8) Encender la luz y adicionar el H₂O₂ rápidamente, activando el cronómetro para el seguimiento de la reacción, (9) Anotar los valores de temperatura, pH, potencial redox, color de la mezcla de seguimiento y tomar las muestras de seguimiento de la reacción en los tiempos marcados en la tabla de registro del seguimiento experimental (las muestras tomadas se llevan a la nevera hasta su análisis excepto las muestras para el TOC, que se analizan justo después de tomar la muestra, (10) Realizar los análisis de TOC, (11) Realizar los análisis UV-Visible por duplicado, para la cuantificación de SMT y de H₂O₂.

E) VOLUMEN DE TOMA DE MUESTRA PARA EL SEGUIMIENTO DE LA REACCIÓN:

La muestra inicial y el resto de muestras de seguimiento de la reacción serán 21-22 ml repartidos de la siguiente forma (1 ml para HPLC, 3ml para UV a 240 nm, 3 ml para UV a 260 nm, 2 ml para Visible a 450 nm y el resto para el TOC).

lecturas del control de Reactivo N_2O_2
 $\bar{X} = 0,265$
Calculado del Reactivo N_2O_2

F) SEGUIMIENTO EXPERIMENTAL:

| Tiempo (min.) | Temp (°C) | pH | P. oxid. (mv) | Color | TC | TI | TOC | Abs UV 240 nm | [SMT] (ppm) | Abs UV 260 nm | [SMT] (ppm) | Abs Visible 450 nm | [H ₂ O ₂] (ppm) | [SO ₄ ²⁻] (ppm) | [NH ₄ ⁺] (ppm) | Muestra SI / No | muestra fiable SI / No | Código muestra SMT.XX.YY | |
|---------------|-----------|------|---------------|----------------|-------|------|-------|----------------|-------------|----------------|-------------|--------------------|--|--|---------------------------------------|-----------------|------------------------|--------------------------|--|
| 0 | 18.5 | 5.37 | 154 | Transparente | 25.37 | 1115 | 24.25 | 1.111 1.109 | 48±3 | 1.100 1.101 | 54±9 | 0.764 0.762 | 600 | | | SI | SI | 08.00 | |
| 1 | 18 | 3.21 | 460 | Amarillo claro | | | | 0.350 0.344 | | | | | | | | | | | |
| 2 | 18 | 3.12 | 463 | Amarillo claro | | | | 0.350 0.344 | | | | | | | | | | | |
| 5 | 18.1 | 3.03 | 474 | Amarillo claro | 25.71 | 5320 | 20.38 | 1.007 1.010 | 54±3 | | 45±9 | 0.990 0.991 | 275 | | | SI | SI | 08.01 | |
| 10 | 18.5 | 3 | 476 | Amarillo claro | | | | 0.350 0.344 | | | | | | | | | | | |
| 15 | 18.9 | 2.99 | 498 | Amarillo claro | 22.94 | 7804 | 16.14 | 1.040 1.043 | 45±3 | | 37±3 | 2.184 2.183 | 195 = 95 | | | SI | SI | 08.02 | |
| 30 | 19.0 | 3.0 | 512 | Amarillo claro | 20.94 | 9135 | 11.36 | 0.880 0.885 | 39±3 | | 33±9 | 0.619 0.609 | 65 = 30 | | | SI | SI | 08.03 | |
| 45 | 19.02 | 2.97 | 512 | Amarillo claro | | | | 0.350 0.344 | | | | | | | | | | | |
| 60 | 19.02 | 2.97 | 5.3 | Amarillo claro | 17.07 | 9807 | 9.97 | 0.756 0.760 | 33±3 | | 30±9 | 0.031 0.032 | 10 = 5 | | | SI | SI | 08.04 | |
| 75 | 19.0 | 2.98 | 5.0 | Amarillo | 15.2 | 6603 | 7.976 | 0.754 0.757 | 33±3 | | 30±9 | 0.025 0.022 | 5 = 5 | | | SI | SI | 08.05 | |

OBSERVACIONES

Al adicionar el N_2O_2 se pone amarillo oscuro casi naranja. Transcurrido 1 min se adora el color. Se puede observar que hay una fase superior la que está en contacto con la luz de color amarillo muy claro, mientras que la fase inferior tiene un color amarillo más oscuro. Se observaron burbujas, parecen pegadas al inicio hasta 30' *** Por debajo del L.D.**
 A los 20 min. disminuyen. A los 45 min. parecen ya no se ven burbujas

100' | 19.7 | 2.97 | 5.1 | Amarillo | 12.24 | 5.132 | 7.608 | 0.715 | 0.501
 TC | TI | TOC | 0.716 | 0.578
 240 33±3 5.66 ppm 27±9 ppm

Muestra inicial (SI) 08:06

Experimento adicional mezclando las cantidades de los experimentos SMT.05 y SMT.02 mezclas finales
 Es el experimento adicional SMT.09 se realizó a continuación de los experimentos SMT.05 y SMT.07 el mismo día (10/10/2008)

A) CONDICIONES EXPERIMENTALES:

| Proyecto | Nº Exp. | Fecha | Hora inicio | Hora fin | Volumen Reacción (Litros) | [Fe ²⁺] (ppm) | [SMT] (ppm) | [H ₂ O ₂] (ppm) | Agitación (rpm) | Luz SI/NO | Altura luz | Potencia luz | Temp Baño (°C) | Firma EOA | Firma GBG | Firma JAM | Firma MPM |
|----------|---------|----------|-------------|----------|---------------------------|---------------------------|-------------|--|-----------------|-----------|------------|--------------|------------------------------|-----------|-----------|-----------|-----------|
| SMT | 07 | 09/12/07 | 16:30 | 18:00 | 1 | No | 50 | 600 | 500 | SI | 21 cm | | Agua a temperatura ambiente. | | GBG | JAM | |

B) COMPROBACIONES INICIALES:

- Valoración UV H₂O₂ 30 % (p/v): Añadir en un matraz de 100 ml, 10 ml de Diol de vanadato, añadir 30 µl de H₂O₂, enrasar y medir absorbancia a 450 nm.

$$X \% (p/v) = \left(\frac{ARS - 0,0182}{0,0085} \right) \times \left(\frac{1}{3} \right)$$

- Calibración pH-metro:
- Comprobación del funcionamiento del baño, lámpara, agitación:
- Viales preparados y fríos para las muestras de seguimiento SMT por HPLC (Sin dilución):
- Viales preparados para el seguimiento de TOC (Sin dilución):
- Viales preparados con agua fría en su interior para el seguimiento SMT por UV a 240 nm y a 260 nm (Dilución 1 a 3):
- Matrices de 10 ml preparados cada uno con 1 ml de diol de vanadato para las muestras de seguimiento de H₂O₂ por Vis a 450 nm (Dilución 2 a 10):

C) CÁLCULOS:

- Peso en mg de catalizador a añadir:

$$\frac{0 \text{ mg Fe}^{2+}}{1 \text{ L}} \times \frac{1 \text{ mmol Fe}^{2+}}{55,85 \text{ mg Fe}^{2+}} \times \frac{1 \text{ mmol FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}}{1 \text{ mmol Fe}^{2+}} \times \frac{278,02 \text{ mg FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}}{1 \text{ mmol FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}} \times \frac{100 \text{ mg Reactivo FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}}{98 \text{ mg FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}} = 0 \text{ mg Reactivo FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$$

- Peso en mg de Sulfametazina a añadir

$$\frac{50 \text{ mg SMT}}{1 \text{ L}} \times 1 \text{ L} = 50 \text{ mg Reactivo SMT}$$

- Volumen en µl del reactivo H₂O₂ X % (p/v) a añadir: (Sustituir el valor de 30·10⁻³ por X·10⁻³ en el cálculo, dónde X es el resultado de la valoración del reactivo)

$$\frac{600 \text{ mg H}_2\text{O}_2}{1 \text{ L}} \times \frac{100 \text{ ml reactivo}}{30 \cdot 10^3 \text{ mg H}_2\text{O}_2} \times \frac{10^3 \text{ µl reactivo H}_2\text{O}_2}{1 \text{ ml reactivo H}_2\text{O}_2} = 2000 \text{ µl reactivo H}_2\text{O}_2$$

D) PROCESO EXPERIMENTAL: Se realizan las siguientes tareas por el orden indicado: (1) Calibración pH-metro, (2) Montaje Foto-fenton con agitación y sensores, (3) Comprobaciones iniciales, (4) Revisión de cálculos, (5) Disolución de la SMT en 600 ml mediante ultrasonidos y dilución posterior a 1 litro, (6) Adición de Fe²⁺, (7) Tomar muestra 00, (8) Encender la luz y adicionar el H₂O₂ rápidamente, activando el cronómetro para el seguimiento de la reacción, (9) Anotar los valores de temperatura, pH, potencial redox, color de la mezcla de reacción y tomar las muestras de seguimiento de la reacción en los tiempos marcados en la tabla de registro del seguimiento experimental (las muestras tomadas se llevan a la nevera hasta su análisis excepto las muestras para el TOC, que se analizan justo después de tomar la muestra, (10) Realizar los análisis de TOC, (11) Realizar los análisis UV-Visible por duplicado, para la cuantificación de SMT y de H₂O₂.

E) VOLUMEN DE TOMA DE MUESTRA PARA EL SEGUIMIENTO DE LA REACCIÓN:

La muestra inicial y el resto de muestras de seguimiento de la reacción serán 21-22 ml repartidos de la siguiente forma (1 ml para HPLC, 3ml para UV a 240 nm, 3 ml para UV a 260 nm, 2 ml para Visible a 450 nm y el resto para el TOC).

F) SEGUIMIENTO EXPERIMENTAL:

| Tiempo (min.) | Temp (°C) | pH | P. redox (mv) | Color | TC | TI | TOC | Abs UV [SMT] (ppm) | Abs UV 240 nm | [SMT] (ppm) | Abs Visible 450 nm | [H ₂ O ₂] (ppm) | [SO ₄ ²⁻] (ppm) | [NH ₄ ⁺] (ppm) | Muestra SI / No | muestra fiable SI / No | Código muestra SMT_XX_YY |
|---------------|-----------|------|---------------|----------------|------|------|-------|--------------------|---------------|-------------|--------------------|--|--|---------------------------------------|-----------------|------------------------|--------------------------|
| 0 | 18 | 5,45 | 338 | tiempo | 2286 | 920 | 27,97 | | | | | | | | SI | SI | -07-00 |
| 1 | 18 | 3,39 | 448 | normal color | | | | | | | | | | | | | |
| 2 | 18 | 3,30 | 455 | brunyo color | | | | | | | | | | | | | |
| 5 | 18 | 3,25 | 455 | amarillo claro | 2507 | 4600 | 21,02 | | | | | | | | SI | SI | -07-01 |
| 10 | 18,5 | 3,14 | 461 | amarillo claro | | | | | | | | | | | | | |
| 15 | 19 | 3,13 | 465 | amarillo claro | 2047 | 6504 | 19,74 | | | | | | | | SI | SI | -07-02 |
| 30 | 18 | 3,11 | 480 | amarillo claro | 2175 | 4521 | 15,21 | | | | | | | | SI | SI | -07-03 |
| 45 | 18 | 3,20 | 490 | amarillo claro | | | | | | | | | | | | | |
| 45:00 | 18 | 3,21 | 491 | | | | | | | | | | | | SI | | -07-04 |

OBSERVACIONES

Al realizar la mezcla de los crudos de los exp SMT 05 y SMT 07 cambia instantaneamente de color y (color oscuro, mancha clara) y el pH baja a 3,39. No se observan burbujas. A los 3 minutos se observa una gran dependencia de burbujas. A los 8 minutos se observa un aumento del crecimiento de burbujas. A los 10 minutos el pH es 3,11 y se observa un gran crecimiento de burbujas. A los 30 se observa una desmejora en el desprendimiento de burbujas. La muestra no es del todo fiable porque no la enfriamos y no se analiza instantaneamente por lo tanto se pone menor TOC del que le correspondiera por contaminación de la muestra a la hora del análisis TOC.

A) CONDICIONES EXPERIMENTALES:

| Proyecto | Nº Exp. | Fecha | Hora Inicio | Hora fin | Volumen Reacción (Litros) | [Fe ²⁺] (ppm) | [SMT] (ppm) | [H ₂ O ₂] (ppm) | Agitación (rpm) | Luz Si/No | Altura luz | Potencia luz | Temp Baño (°C) | Firma EDA | Firma GBG | Firma JAM | Firma MPM |
|----------|---------|----------|-------------|----------|---------------------------|---------------------------|-------------|--|-----------------|-----------|------------|--------------|-----------------------|-----------|-----------|-----------|-----------|
| SMT | 11 | 30/01/08 | 11:00 | 11:00 | 1 | 50 | 50 | 300 | 500 | SI | 21 cm | 300 W | Agua a temp ambiente. | EDA | GBG | JAM | MPM |

B) COMPROBACIONES INICIALES:

- Valoración UV H₂O₂ 30 % (p/v): Añadir en un matraz de 100 ml, 10 ml de Disol de vanadato, añadir 30 µL de H₂O₂, enrasar y medir absorbancia a 450 nm.

$$X \% (p/v) = \left(\frac{ABS - 0,0182}{0,0085} \right) \times \left(\frac{1}{3} \right)$$

"Si el valor de X no está dentro de 30 ± 2 % hay que utilizar reactivo nuevo o bien recalcular los volúmenes de peróxido a añadir"

Absorbancia 1: 0,782 Absorbancia 2: 0,779 Resultado: 29,9 % Cumple/ No Cumple

"Si el valor de Y no está dentro de 45 ± 5 ppm hay que preparar una nueva disolución de SMT"

$$Y [ppm] = \left(\frac{ABS - 0,0193}{0,0662} \right) \times 3$$

Absorbancia 1: 0,985 Absorbancia 2: 0,987 Resultado: 43,8 ppm Cumple/ No Cumple

- Calibración pH-metro: ok

- Comprobación del funcionamiento del baño, lámpara, agitación: ok

- Viales preparados y fríos para las muestras de seguimiento SMT por HPLC (Sin dilución): ok

- Viales preparados y fríos para el de seguimiento de TOC (Sin dilución): ok

- Viales preparados y fríos para las muestras de toxicidad (Sin dilución): ok

- Matrazas de 10 ml preparados, cada uno con 1 ml de disol de vanadato, para las muestras de seguimiento de H₂O₂ a 450 nm (Dilución 2 a 10, 4 a 10, 6 a 10 y 8 a 10): ok

- Recipientes para los residuos y crudos finales de los experimentos: ok

C) CÁLCULOS:

- Peso en mg de catalizador a añadir:

$$1L \times \frac{60 \text{ mg Fe}^{2+}}{1 \text{ mmol Fe}^{2+}} \times \frac{1 \text{ mmol FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}}{55,85 \text{ mg Fe}^{2+}} \times \frac{1 \text{ mmol Fe}^{2+}}{1 \text{ mmol FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}} \times \frac{100 \text{ mg Reactivo FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}}{98 \text{ mg FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}} = 304,77 \text{ mg Reactivo FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$$

Peso real añadido: 0,3052 g

- Volumen en µL del reactivo H₂O₂ X % (p/v) a añadir: (Sustituir el valor de 30·10⁻³ por X·10⁻³ en el cálculo, dónde X es el resultado de la valoración del reactivo)

$$1L \times \frac{900 \text{ mg H}_2\text{O}_2}{30 \cdot 10^3 \text{ mg H}_2\text{O}_2} \times \frac{10^3 \mu\text{L reactivo H}_2\text{O}_2}{1 \text{ ml reactivo H}_2\text{O}_2} = 3000 \mu\text{L reactivo H}_2\text{O}_2$$

Volumen real añadido: 3 ml

D) PROCESO EXPERIMENTAL: (1) Tomar muestra 00. (2) Adición de Fe²⁺. (3) Encender la luz y adicionar el H₂O₂ rápidamente, activando el cronómetro para el seguimiento de la reacción, (4) Anotar los valores de temperatura, pH, potencial redox, color de la mezcla de reacción y tomar las muestras de seguimiento de la reacción en los tiempos marcados en la tabla siguiente. Las muestras se llevan al congelador excepto las muestras para TOC, que se analizan justo después de tomar la muestra. (10) Realizar análisis de TOC y a continuación guardar las muestras de TOC en congelador para posterior análisis de iones inorgánicos.

E) VOLUMEN DE TOMA DE MUESTRA PARA EL SEGUIMIENTO DE LA REACCIÓN:

La muestra inicial y el resto de muestras de seguimiento de la reacción serán 40 ml repartidos de la siguiente forma: 1,5 ml para HPLC, de 2 a 8 ml para determinar la concentración de H₂O₂ y 26 ml para el TOC, que servirán también una vez analizado el TOC para análisis de toxicidad (2 muestras de 1,5 ml) y para análisis de iones inorgánicos.

F) SEGUIMIENTO EXPERIMENTAL:

| Tiempo (min.) | Temp (°C) | pH | P. redox (mv) | Color | Muestra SI/No | Código muestra XX.YY | muestra fiable SI/No | TC | IC | TOC | Alicuote ml para Abs vis | Abs Visible 450 nm | [H ₂ O ₂] (ppm) | [SO ₄ ²⁻] (ppm) | [N inorg] (ppm) |
|---------------|-----------|------|---------------|-----------------|---------------|----------------------|----------------------|-------|-------|-------|--------------------------|--------------------|--|--|-----------------|
| 0 | 18°C | 4,70 | 216 | Tiamp | SI | 11.00 | SI/No | 40,26 | 4,490 | 38,72 | | | 900 | | |
| 1 | 18°C | 3,10 | 535 | Amarrado oscuro | | | | | | | | | | | |
| 2 | 18°C | 3,06 | 537 | Amarrado oscuro | | | | | | | | | | | |
| 5 | 18°C | 2,99 | 539 | Amarrado oscuro | SI | 11.01 | SI/No | 43,41 | 3,34 | 45,06 | 2 | 1,302 1,303 | 755 | | |
| 10 | 18,5°C | 2,93 | 542 | Amarrado oscuro | SI | 11.02 | SI/No | 46,67 | 5,493 | 41,18 | 4 | 1,217 1,218 | 500 | | |
| 15 | 18,5°C | 2,89 | 545 | | | | | | | | | | | | |
| 20 | 18,5°C | 2,89 | 547 | | SI | 11.03 | SI/No | 43,82 | 7,725 | 36,04 | 6 | 1,610 1,687 | 327 | | |
| 30 | 19°C | 2,88 | 553 | | SI | 11.04 | SI/No | 40,54 | 9,247 | 31,29 | 8 | 1,691 1,694 | 246 | | |
| 45 | 19°C | 2,89 | 562 | | | | | | | | | | | | |
| 60 | 19°C | 2,90 | 568 | | SI | 11.05 | SI/No | 33,82 | 8,518 | 11,76 | 8 | 0,612 0,658 | 92 | | |

Observaciones:

La muestra inicial a 10 min de Tama de la disolución SUT sin haber añadido Fe²⁺ ni H₂O₂ (Nota: verificación para todas las copias)
 el pH y P. redox de 1 a 10 min de
 Volúmenes de pH por debajo de 3!!
 Los valores de P. redox han subido muy rápidamente.
 A partir de los 20 min el TC parece cte.

A) CONDICIONES EXPERIMENTALES:

| Proyecto | Nº Exp. | Fecha | Hora Inicio | Hora fin | Volumen Reacción (Litros) | [Fe ²⁺] (ppm) | [SMT] (ppm) | [H ₂ O ₂] (ppm) | Agitación (rpm) | Luz Si/No | Altura luz | Potencia luz | Temp Baño (°C) | Firma EDA | Firma GBG | Firma JAM | Firma MPM |
|----------|---------|----------|-------------|----------|---------------------------|---------------------------|-------------|--|-----------------|-----------|------------|--------------|-----------------------|-----------|-----------|-----------|-----------|
| SMT | 12 | 29/01/09 | 18:30 | 19:30 | 1 | 40 | 50 | 1024 | 500 | SI | 21 cm | 300 W | Agua a temp ambiente. | EDA | GBG | JAM | |

B) COMPROBACIONES INICIALES:

- Valoración UV H₂O₂ 30 % (p/v): Añadir en un matraz de 100 ml, 10 ml de Disol de vanadato, añadir 30 µL de H₂O₂, ensayar y medir absorbancia a 450 nm.

$$X \% (p/v) = \left(\frac{ABS - 0,0182}{0,0085} \right) \times \left(\frac{1}{3} \right)$$

"Si el valor de X no está dentro de 30 ± 2 % hay que utilizar reactivo nuevo o bien recalcular los volúmenes de peróxido a añadir"
Adoptamos los valores de la dilución de la exp SMT de realizado el mismo día 21 de octubre
 Absorbancia 1: 0,782 Absorbancia 2: 0,774 Resultado: 29,9 %
 Cumple / No Cumple

- Valoración de la disolución de SMT: Tomar una muestra de 1 ml y diluirla 1 a 3. A continuación medir la absorbancia a 240 nm.

$$Y [ppm] = \left(\frac{ABS - 0,0193}{0,0662} \right) \times 3$$

"Si el valor de Y no está dentro de 45 ± 5 ppm hay que preparar una nueva disolución de SMT"
Adoptamos los valores de la valoración del mismo día 21 de octubre
 Absorbancia 1: 0,925 Absorbancia 2: 0,987 Resultado: 43,8 ppm
 Cumple / No Cumple

- Calibración pH-metro:

- Comprobación del funcionamiento del baño, lámpara, agitación: ok

- Viales preparados y fríos para las muestras de seguimiento SMT por HPLC (Sin dilución): ok

- Viales preparados y fríos para el de seguimiento de TOC (Sin dilución): ok

- Viales preparados y fríos para las muestras de toxicidad (Sin dilución): ok

- Matraces de 10 ml preparados, cada uno con 1 ml de disol de vanadato, para las muestras de seguimiento de H₂O₂ a 450 nm (Dilución 2 a 10, 4 a 10, 6 a 10 y 8 a 10): ok

- Recipientes para los residuos y crudos finales de los experimentos: ok

C) CÁLCULOS:

- Peso en mg de catalizador a añadir:

$$40 \text{ mg Fe}^{2+} \times \frac{1 \text{ mmol Fe}^{2+}}{55,85 \text{ mg Fe}^{2+}} \times \frac{1 \text{ mmol FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}}{1 \text{ mmol Fe}^{2+}} \times \frac{278,02 \text{ mg FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}}{1 \text{ mmol FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}} \times \frac{100 \text{ mg Reactivo FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}}{98 \text{ mg FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}} = 203,18 \text{ mg Reactivo FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$$

Peso real añadido: 0,2031g

- Volumen en µL del reactivo H₂O₂ X % (p/v) a añadir: (Sustituir el valor de 30·10⁻³ por X·10⁻³ en el cálculo, dónde X es el resultado de la valoración del reactivo)

$$1024 \text{ mg H}_2\text{O}_2 \times \frac{10^3 \text{ µL reactivo H}_2\text{O}_2}{30 \cdot 10^3 \text{ mg H}_2\text{O}_2} \times \frac{1 \text{ ml reactivo H}_2\text{O}_2}{10^3 \text{ µL reactivo H}_2\text{O}_2} = 3414,2 \text{ µL reactivo H}_2\text{O}_2$$

Volumen real añadido: 3,414 mL

D) PROCESO EXPERIMENTAL: (1) Tomar muestra 00, (2) Adición de Fe²⁺, (3) Encender la luz y adicionar el H₂O₂ rápidamente, activando el cronómetro para el seguimiento de la reacción, (4) Anotar los valores de temperatura, pH, potencial redox, color de la mezcla de reacción y tomar las muestras de seguimiento de la reacción en los tiempos marcados en la tabla siguiente. Las muestras se llevan al congelador excepto las muestras para TOC, que se analizan justo después de tomar la muestra, (10) Realizar análisis de TOC y a continuación guardar las muestras de TOC en congelador para posterior análisis de iones inorgánicos.

E) VOLUMEN DE TOMA DE MUESTRA PARA EL SEGUIMIENTO DE LA REACCION:

La muestra inicial y el resto de muestras de seguimiento de la reaccion serán 40 ml repetidas de la siguiente forma (1,5 ml para HPLC, de 2 a 8 ml para determinar la concentración de H₂O₂ y 25 ml para el TOC, que servirán también una vez analizado el TOC para análisis de toxicidad (2 muestras de 1,5 ml) y para análisis de iones inorgánicos.

F) SEGUIMIENTO EXPERIMENTAL:

| Tiempo (min.) | Temp (°C) | pH | P. redox (mv) | Cólor | Muestra SI / No | Código muestra XX.YY | muestra fiable SI / No | TC | IC | TOC | Alicuota ml para Abs vis | Abs Visible 450 nm | [H ₂ O ₂] (ppm) | [SO ₄ ²⁻] (ppm) | [N Inorg] (ppm) |
|---------------|-----------|------|---------------|------------------------------|-----------------|----------------------|------------------------|-------|-------|-------|--------------------------|--------------------|--|--|-----------------|
| 0 | 19°C | 4,74 | 522 | Turp | SI | 12.00 | SI/No | 41,38 | 1,3 | 40,28 | | | 1024 | | |
| 1 | 19°C | 3,21 | 518 | Naranja muy amarilla (claro) | | | | | | | | | | | |
| 2 | 19°C | 3,16 | 520 | Amarillo claro | | | | | | | | | | | |
| 5 | 19°C | 3,08 | 524 | Amarillo muy claro | SI | 12.01 | SI/No | 38,77 | 5,128 | 33,64 | 2 | 1665 1661 | 968 | | |
| 10 | 19,5°C | 3,02 | 526 | " | SI | 12.02 | SI/No | 37,43 | 7,18 | 30,26 | 4 | 1402 1394 | 406 | | |
| 15 | 20°C | 3,00 | 528 | " | | | | | | | | | | | |
| 20 | 20°C | 3,00 | 530 | " | SI | 12.03 | SI/No | 34,92 | 7,91 | 25,00 | 8 | 1665 1666 | 323 | | |
| 30 | 20,5°C | 3,01 | 534 | " | SI | 12.04 | SI/No | 32,33 | 10,16 | 22,07 | 8 | 1677 1655 | 243 | | |
| 45 | 20,5°C | 3,01 | 541 | " | | | | | | | | | | | |
| 60 | 20,5°C | 3,06 | 546 | " | SI | 12.05 | SI/No | 24,96 | 9,195 | 17,22 | 8 | 1600 1595 | 85 | | |

Observaciones:
 Valor de pH justo a 3. El color inicial es muy claro que el experimento SMT. 011.
 El P. redox debe ser menor proporcionalmente que en el SMT. 11.
 A las 20 min parece que se estabiliza el IC.
 El bajar de pH 3,2 se por de color naranja amarillento y amarillo.

A) CONDICIONES EXPERIMENTALES:

| Proyecto | Nº Exp. | Fecha | Hora Inicio | Hora fin | Volumen Reacción (Litros) | [Fe ²⁺] (ppm) | [SMT] (ppm) | [H ₂ O ₂] (ppm) | Agitación (rpm) | Luz Si/No | Altura luz | Potencia luz | Temp Baño (°C) | Firma EOA | Firma GBG | Firma JAM | Firma MPM |
|----------|---------|----------|-------------|----------|---------------------------|---------------------------|-------------|--|-----------------|-----------|------------|--------------|-----------------------|-----------|-----------|-----------|-----------|
| SMT | 13 | 30/01/08 | 11:00 | 12:00 | 1 | 12 | 50 | 600 | 500 | Si | 21 cm | 300 W | Agua a temp ambiente. | EOA | GBG | JAM | |

B) COMPROBACIONES INICIALES:

- Valoración UV H₂O₂ 30 % (p/v): Añadir en un matraz de 100 ml, 10 ml de Disol de vanadato, añadir 30 µl de H₂O₂, enrasar y medir absorbancia a 450 nm.

$$X \% (p/v) = \left(\frac{ABS - 0,0182}{0,0085} \right) \times \left(\frac{1}{3} \right) \quad \text{"Si el valor de X no está dentro de } 30 \pm 2 \% \text{ hay que utilizar reactivo nuevo o bien recalcular los volúmenes de peróxido a añadir"}$$

Absorbancia 1: 0,217 Absorbancia 2: 0,211 Resultado: 31,2% Cumple / No Cumple

- Valoración de la disolución de SMT: Tomar una muestra de 1 ml y diluirla 1 a 3. A continuación medir la absorbancia a 240 nm.

$$Y [ppm] = \left(\frac{ABS - 0,0193}{0,0662} \right) \times 3$$

"Si el valor de Y no está dentro de 48 ± 5 ppm hay que preparar una nueva disolución de SMT"

Absorbancia 1: 1,057 Absorbancia 2: 1,058 Resultado: 48,07 ppm Cumple / No Cumple

- Calibración pH-metro: ok

- Comprobación del funcionamiento del baño, lámpara, agitación: ok

- Viales preparados y fríos para las muestras de seguimiento SMT por HPLC (Sin dilución): ok

- Viales preparados y fríos para el de seguimiento de TOC (Sin dilución): ok

- Viales preparados y fríos para las muestras de toxicidad (Sin dilución): ok

- Matrices de 10 ml preparados, cada uno con 1 ml de disol de vanadato, para las muestras de seguimiento de H₂O₂ a 450 nm (Dilución 2 a 10, 4 a 10, 6 a 10 y 8 a 10): ok

- Recipientes para los residuos y crudos finales de los experimentos: ok

C) CÁLCULOS:

- Peso en mg de catalizador a añadir:

$$12 \text{ mg Fe}^{2+} \times \frac{1 \text{ mmol Fe}^{2+}}{55,85 \text{ mg Fe}^{2+}} \times \frac{1 \text{ mmol FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}}{1 \text{ mmol Fe}^{2+}} \times \frac{278,02 \text{ mg FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}}{1 \text{ mmol FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}} \times \frac{100 \text{ mg Reactivo FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}}{98 \text{ mg FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}} = 59,51 \text{ mg Reactivo FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$$

Peso real añadido: 90,5423 g

- Volumen en µL del reactivo H₂O₂ X % (p/v) a añadir: (Sustituir el valor de 30·10⁻³ por X·10⁻³ en el cálculo, dónde X es el resultado de la valoración del reactivo)

$$\frac{600 \text{ mg H}_2\text{O}_2}{1 \text{ L}} \times \frac{100 \text{ ml reactivo}}{30 \cdot 10^3 \text{ mg H}_2\text{O}_2} \times \frac{10^3 \text{ µL reactivo H}_2\text{O}_2}{1 \text{ ml reactivo H}_2\text{O}_2} = 2000 \text{ µL reactivo H}_2\text{O}_2$$

Volumen real añadido: 2 ml

D) PROCESO EXPERIMENTAL: (1) Tomar muestra 00, (2) Adición de Fe²⁺, (3) Encender la luz y adicionar el H₂O₂ rápidamente, activando el cronómetro para el seguimiento de la reacción, (4) Anotar los valores de temperatura, pH, potencial redox, color de la mezcla de reacción y tomar las muestras de seguimiento de la reacción en los tiempos marcados en la tabla siguiente. Las muestras se llevan al congelador excepto las muestras para TOC, que se analizan justo después de tomar la muestra, (10) Realizar análisis de TOC y a continuación guardar las muestras de TOC en congelador para posterior análisis de iones inorgánicos.

E) VOLUMEN DE TOMA DE MUESTRA PARA EL SEGUIMIENTO DE LA REACCIÓN:

La muestra inicial y el resto de muestras de seguimiento de la reacción serán 40 ml repartidos de la siguiente forma (1,5 ml para HPLC, de 2 a 8 ml para determinar la concentración de H_2O_2 y 25 ml para el TOC, que servirán también una vez finalizado el TOC para análisis de toxicidad (2 muestras de 1,5 ml) y para análisis de iones inorgánicos.

F) SEGUIMIENTO EXPERIMENTAL:

| Tempo (min.) | Temp (°C) | pH | P. redox (mv) | Color | Muestra SI / No | Código muestra XX.YY | muestra fiable SI / No | TC | IC | TOC | Alicuota ml para Abs vis | Abs Visible 450 nm | [H_2O_2] (ppm) | [SO_4^{2-}] (ppm) | [N inorg] (ppm) |
|--------------|-----------|------|---------------|----------------------|-----------------|----------------------|------------------------|-------|-------|-------|--------------------------|--------------------|--------------------|-----------------------|-----------------|
| 0 | 17°C | 4,97 | 221 | amarillo Densidad | SI | 13.00 | SI/No | 34,38 | 1,248 | 38,17 | | | 600 | | |
| 1 | 17°C | 3,74 | 485 | o | | | | | | | | | | | |
| 2 | 17°C | 3,71 | 489 | + | | | | | | | | | | | |
| 6 | 17°C | 3,66 | 492 | o | SI | 13.01 | SI/No | 40,65 | 1,350 | 34,26 | 2 | 0,971 0,973 | | | 561 |
| 10 | 17°C | 3,57 | 493 | " | SI | 13.02 | SI/No | 40,63 | 1,507 | 38,53 | 4 | 1,140 1,143 | | | 499 |
| 16 | 17,5°C | 3,54 | 494 | + | | | | | | | | | | | |
| 20 | 17,5°C | 3,52 | 494 | + | SI | 13.03 | SI/No | 40,00 | 1,647 | 38,35 | 6 | 1,104 1,108 | | | 331 |
| 30 | 17,5°C | 3,48 | 496 | + | SI | 13.04 | SI/No | 39,56 | 1,046 | 38,52 | 8 | 1,130 1,131 | | | 222 |
| 45 | 17,5°C | 3,42 | 498 | o | | | | | | | | | | | |
| 80 | 18,0°C | 3,38 | 500 | + | SI | 13.05 | SI/No | 37,76 | 3,138 | 34,62 | 8 | 1,152 1,155 | | | 226 |

Observaciones:

El color naranja claro se mantiene estable durante todo el experimento y no se observa color amarillo. Las reducciones con que no se ha alcanzado en pH menor a 3, el no se produce cambio de color y no consideramos que el pH es muy crítico que si es mayor a 3, el no se produce cambio de color y no de gran calidad, es decir, es por defectivo y reducciones de pH con la cantidad de hierro añadida. Da por SI T 11 [Fe²⁺] = 60 ppm → pH = 2,9 } 1. mayor [Fe²⁺] menor pH. Como el pH que parece adecuado
SI T 12 [Fe²⁺] = 40 ppm → pH = 3 } 2. pH 3 ⇒ la [Fe²⁺] más adecuada es de 40 ppm porque
SI T 13 [Fe²⁺] = 10 ppm → pH = 3 } 3. que consigue pitar e quitar el pH a 3.
Acabado este experimento hicimos una prueba a decir el que tanto responder a los preguntas que es más crítico [Fe²⁺] o pH? d. Si [Fe²⁺] = 10 pero muchos más bajando el pH. ¿funcionamiento de reacción?
Analizamos 2 gotas H₂SO₄ 1:1 bajo el pH a 2,6 y transcurridos 15 minutos el TC IC y TOC son: 36,86 / 3,41 y 33,44

A) CONDICIONES EXPERIMENTALES:

| Proyecto | Nº Exp. | Fecha | Hora Inicio | Hora fin | Volumen Reacción (Litros) | [Fe ²⁺] (ppm) | [SMT] (ppm) | [H ₂ O ₂] (ppm) | Agitación (rpm) | Luz SI/NO | Altura luz | Potencia luz | Temp Baño (°C) | Firma EDA | Firma GBG | Firma JAM | Firma MPM |
|----------|---------|----------|-------------|----------|---------------------------|---------------------------|-------------|--|-----------------|-----------|------------|--------------|-----------------------|-----------|-----------|-----------|-----------|
| SMT | 14 | 30/10/18 | 18:30 | 19:30 | 1 | 20 | 50 | 300 | 500 | SI | 21 cm | 300 W | Agua a temp ambiente. | EDA | GBG | JAM | |

B) COMPROBACIONES INICIALES:

- Valoración UV H₂O₂ 30 % (p/v): Añadir en un matraz de 100 ml, 10 ml de Disol de vanadato, añadir 30 µL de H₂O₂, erresar y medir absorbancia a 450 nm.

$$X \% (p/v) = \left(\frac{ABS - 0,0182}{0,0085} \right) \times \left(\frac{1}{3} \right)$$

"Si el valor de X no está dentro de 30 ± 2 % hay que utilizar reactivo nuevo o bien recalcular los volúmenes de peróxido a añadir"
 Valores adaptados de la valoración del exp. SMT 13

- Valoración de la disolución de SMT: Tomar una muestra de 1 ml y diluirla 1 a 3. A continuación medir la absorbancia a 240 nm.
 Absorbancia 1: 9,817 Absorbancia 2: 0,941 Resultado: 31,27 Cumple/ No Cumple

$$Y [ppm] = \left(\frac{ABS - 0,0193}{0,0662} \right) \times 3$$

"Si el valor de Y no está dentro de 45 ± 5 ppm hay que preparar una nueva disolución de SMT"
 Valores adaptados de la valoración del exp. SMT 13 Resultado: 47,05 ppm Cumple/ No Cumple

- Calibración pH-metro: OK
- Comprobación del funcionamiento del baño, lámpara, agitación: OK
- Viales preparados y fríos para las muestras de seguimiento SMT por HPLC (Sin dilución): OK
- Viales preparados y fríos para el de seguimiento de TOC (Sin dilución): OK
- Viales preparados y fríos para las muestras de toxicidad (Sin dilución): OK
- Matrazes de 10 ml preparados, cada uno con 1 ml de disol de vanadato, para las muestras de seguimiento de H₂O₂ a 450 nm (Dilución 2 a 10, 4 a 10, 6 a 10 y 8 a 10): OK
- Recipientes para los residuos y crudos finales de los experimentos: OK

C) CÁLCULOS:

- Peso en mg de catalizador a añadir:

$$\frac{20 \text{ mg Fe}^{2+}}{1 \text{ L}} \times \frac{1 \text{ mmol Fe}^{2+}}{55,85 \text{ mg Fe}^{2+}} \times \frac{1 \text{ mmol FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}}{1 \text{ mmol Fe}^{2+}} \times \frac{278,02 \text{ mg FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}}{1 \text{ mmol FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}} \times \frac{100 \text{ mg Reactivo FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}}{98 \text{ mg FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}} = 101,59 \text{ mg Reactivo FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$$

Peso real añadido: 0,1015 g

- Volumen en µL del reactivo H₂O₂ X % (p/v) a añadir: (Sustituir el valor de 30·10⁻³ por X·10⁻³ en el cálculo, dándose X es el resultado de la valoración del reactivo)

$$\frac{300 \text{ mg H}_2\text{O}_2}{1 \text{ L}} \times \frac{30 \cdot 10^3 \text{ mg H}_2\text{O}_2}{100 \text{ ml reactivo}} \times \frac{10^3 \text{ µL reactivo H}_2\text{O}_2}{1 \text{ ml reactivo H}_2\text{O}_2} = 1000 \text{ µL reactivo H}_2\text{O}_2$$

Volumen real añadido: 1 ml

D) PROCESO EXPERIMENTAL: (1) Tomar muestra 00, (2) Adición de Fe²⁺, (3) Encender la luz y adicionar el H₂O₂ rápidamente, activando el cronómetro para el seguimiento de la reacción, (4) Anotar los valores de temperatura, pH, potencial redox, color de la mezcla de reacción y tomar las muestras de seguimiento de la reacción en los tiempos marcados en la tabla siguiente. Las muestras se llevan al congelador excepto las muestras para TOC, que se analizan justo después de tomar la muestra, (10) Realizar análisis de TOC y a continuación guardar las muestras de TOC en congelador para posterior análisis de iones inorgánicos.

E) VOLÚMEN DE TOMA DE MUESTRA PARA EL SEGUIMIENTO DE LA REACCIÓN:

La muestra inicial y el resto de muestras de seguimiento de la reacción serán 40 ml repartidos de la siguiente forma (1,5 ml para HPLC, de 2 a 8 ml para determinar la concentración de H₂O₂ y 25 ml para el TOC, que servirán también una vez analizado el TOC para análisis de toxicidad (2 muestras de 1,5 ml) y para análisis de iones inorgánicos.

F) SEGUIMIENTO EXPERIMENTAL:

| Tiempo (min.) | Temp (°C) | pH | P. redox (mv) | Color | Muestra SI / No | Código muestra XX.YY | muestra fiable SI / No | TC | IC | TOC | Alección ml para Abs vis | Abs Visible 450 nm | [H ₂ O ₂] (ppm) | [SO ₄ ²⁻] (ppm) | [N inorg] (ppm) |
|---------------|-----------|------|---------------|--------------------|-----------------|----------------------|------------------------|--------|-------|-------|--------------------------|--------------------|--|--|-----------------|
| 0 | 18,5 | 3,05 | 230 | Naranja muy claro | SI | 14.00 | (SI) No | 40,520 | 1,220 | 34,30 | | | 300 | | |
| 1 | 18,5 | 3,37 | 493 | " | | | | | | | | | | | |
| 2 | 18,5 | 3,35 | 501 | " | | | | | | | | | | | |
| 5 | 18,5 | 3,33 | 502 | " | SI | 14.01 | (SI) No | 40,00 | 1,837 | 38,16 | 2 | 9,92 6,482 | 283 | | |
| 10 | 18,5 | 3,28 | 507 | " | SI | 14.02 | (SI) No | 39,92 | 2,427 | 35,33 | 4 | 9,90 9,909 | 261 | | |
| 15 | 18,5 | 3,26 | 510 | " | | | | | | | | | | | |
| 20 | 18,5 | 3,23 | 511 | " | SI | 14.03 | (SI) No | 39,07 | 3,853 | 35,24 | 6 | 1,127 1,131 | 218 | | |
| 30 | 18,5 | 3,20 | 514 | Amarillo muy claro | SI | 14.04 | (SI) No | 38,12 | 5,942 | 32,18 | 8 | 1,117 1,119 | 162 | | |
| 45 | 18,5 | 3,21 | 526 | " | | | | | | | | | | | |
| 60 | 18,5 | 3,25 | 521 | " | SI | 14.05 | (SI) No | 31,55 | 9,229 | 23,32 | 8 | 9,336 9,335 | 47 | | |

Observaciones:
 Al elevar a 3,2 de pH cambia el color a amarillo claro
 Por las lecturas de [H₂O₂] y del TOC se espera que cuando el pH baje a 3,2 sea a las 30 min cuando se deparación de SXT. Se produce una aceleración del pH. Según el pH no se ha regulado a 3,2 inicialmente pero durante el proceso de degradación de producción cúbica que bajan el pH

A) CONDICIONES EXPERIMENTALES:

| Proyecto | Nº Exp. | Fecha | Hora inicio | Hora fin | Volumen Reacción (Litros) | [Fe ²⁺] (ppm) | [SMT] (ppm) | [H ₂ O ₂] (ppm) | Agitación (rpm) | Luz SINO | Altura luz | Potencia luz | Temp Baño (°C) | Firma EOA | Firma GBG | Firma JAM | Firma MPM |
|----------|---------|----------|-------------|----------|---------------------------|---------------------------|-------------|--|-----------------|----------|------------|--------------|-----------------------|-----------|-----------|-----------|-----------|
| SMT | 15 | 31/01/08 | 16:00 | 18:00 | 1 | 20 | 50 | 900 | 500 | SI | 21 cm | 300 W | Agua a temp ambiente. | EJA | G. B. G. | JAM | MPM |

B) COMPROBACIONES INICIALES:

- Valoración UV H₂O₂ 30 % (p/v): Añadir en un matraz de 100 ml, 10 ml de Disol de vanadato, añadir 30 µL de H₂O₂, enrasar y medir absorbancia a 450 nm.

$$X \% (p/v) = \left(\frac{ABS - 0,0182}{0,0085} \right) \times \left(\frac{1}{3} \right) \quad \text{"Si el valor de X no está dentro de } 30 \pm 2 \% \text{ hay que utilizar reactivo nuevo o bien recalcular los volúmenes de peróxido a añadir"}$$

Valores obtenidos del exp 3 SMT se realizan el mismo día

- Valoración de la disolución de SMT: Tomar una muestra de 1 ml y diluirla 1 a 3. A continuación medir la absorbancia a 240 nm.

$$Y [ppm] = \left(\frac{ABS - 0,0193}{0,0662} \right) \times 3$$

"Si el valor de Y no está dentro de 45 ± 5 ppm hay que preparar una nueva disolución de SMT"
Valores obtenidos del exp SMT recalcular el mismo día
 Absorbancia 1: 0,806 Resultado: 30,8176 Cumple/No Cumple
 Absorbancia 2: 1,004 Resultado: 44,65 ppm Cumple/No Cumple

- Calibración pH-metro;
- Comprobación del funcionamiento del baño, lámpara, agitación;
- Viales preparados y fríos para las muestras de seguimiento SMT por HPLC (Sin dilución);
- Viales preparados y fríos para el de seguimiento de TOC (Sin dilución);
- Viales preparados y fríos para las muestras de toxicidad (Sin dilución);
- Matraces de 10 ml preparados, cada uno con 1 ml de disol de vanadato, para las muestras de seguimiento de H₂O₂ a 450 nm (Dilución 2 a 10, 4 a 10, 6 a 10 y 8 a 10);
- Recipientes para los residuos y crudos finales de los experimentos;

C) CÁLCULOS:

- Peso en mg de catalizador a añadir:

$$20 \text{ mg Fe}^{2+} \times \frac{1 \text{ mmol Fe}^{2+}}{55,85 \text{ mg Fe}^{2+}} \times 1 \text{ mmol FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O} = 278,02 \text{ mg FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$$

$$1 \text{ L} \times \frac{100 \text{ mg FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}}{1 \text{ mmol Fe}^{2+}} \times \frac{100 \text{ mg Reactivo FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}}{98 \text{ mg FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}} = 101,59 \text{ mg Reactivo FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$$

Peso real añadido: 0,1020g

- Volumen en µL del reactivo H₂O₂ X % (p/v) a añadir: (Sustituir el valor de 30·10⁻³ por X·10⁻³ en el cálculo, dónde X es el resultado de la valoración del reactivo)

$$900 \text{ mg H}_2\text{O}_2 \times \frac{100 \text{ ml reactivo}}{30 \cdot 10^3 \text{ mg H}_2\text{O}_2} \times \frac{10^3 \text{ µL reactivo H}_2\text{O}_2}{1 \text{ ml reactivo H}_2\text{O}_2} = 3000 \text{ µL reactivo H}_2\text{O}_2$$

Volumen real añadido:

D) PROCESO EXPERIMENTAL: (1) Tomar muestra 00, (2) Adición de Fe²⁺, (3) Encender la luz y adicionar el H₂O₂ rápidamente, activando el cronómetro para el seguimiento de la reacción, (4) Anotar los valores de temperatura, pH, potencial redox, color de la mezcla de reacción y tomar las muestras de seguimiento de la reacción en los tiempos marcados en la tabla siguiente. Las muestras se llevan al congelador excepto las muestras para TOC, que se analizan justo después de tomar la muestra, (10) Realizar análisis de TOC y a continuación guardar las muestras de TOC en congelador para posterior análisis de iones inorgánicos.

E) VOLUMEN DE TOMA DE MUESTRA PARA EL SEGUIMIENTO DE LA REACCIÓN:

La muestra inicial y el resto de muestras de seguimiento de la reacción serán 40 ml repetidos de la siguiente forma (1,5 ml para HPLC, de 2 a 8 ml para determinar la concentración de H₂O₂ y 25 ml para el TOC, que servirán también una vez analizado el TOC para análisis de toxicidad (2 muestras de 1,5 ml) y para análisis de iones inorgánicos.

F) SEGUIMIENTO EXPERIMENTAL:

| Tiempo (min.) | Temp (°C) | pH | P. redox (mv) | Color | Muestra SI / No | Código muestra XX.YY | muestra fiable SI / No | TC | IC | TOC | Alicuota ml para Abs vis | Abs Visible 450 nm | [H ₂ O ₂] (ppm) | [SO ₄ ²⁻] (ppm) | [N Inorg] (ppm) |
|---------------|-----------|------|---------------|--------------|-----------------|----------------------|------------------------|-------|-------|-------|--------------------------|--------------------|--|--|-----------------|
| 0 | 16,5°C | 4,91 | 221 | transparente | SI | 15.00 | SI / No | 31164 | 11560 | 30108 | | | 900 | | |
| 1 | 16,5°C | 3,58 | 485 | Opaco | | | | | | | | | | | |
| 2 | 16,5°C | 3,54 | 492 | Opaco | | | | | | | | | | | |
| 5 | 16,5°C | 3,46 | 495 | " | SI | 15.01 | SI / No | 31176 | 21078 | 29168 | 2 | 4,424 4,421 | 828 | | |
| 10 | 16,5 | 3,40 | 497 | " | SI | 15.02 | SI / No | 31174 | 21509 | 28143 | 4 | 4,601 4,599 | 465 | | |
| 15 | 17°C | 3,36 | 498 | Opaco | | | | | | | | | | | |
| 20 | 17°C | 3,33 | 499 | Opaco | SI | 15.03 | SI / No | 30137 | 41239 | 26113 | 6 | 4,455 4,456 | 282 | | |
| 30 | 17°C | 3,26 | 501 | " | SI | 15.04 | SI / No | 29123 | 31055 | 22117 | 8 | 4,385 4,384 | 201 | | |
| 45 | 17°C | 3,28 | 499 | " | | | | | | | | | | | |
| 60 | 17°C | 3,31 | 498 | " | SI | 15.05 | SI / No | 23149 | 31525 | 15106 | 8 | 4,344 4,342 | 195 | | |

Observaciones:

Lempere Oxiam Ultra-Vitalax 300W 230V AC Made in SK T368

A) CONDICIONES EXPERIMENTALES:

| Proyecto | Nº Exp. | Fecha | Hora inicio | Hora fin | Volumen Reacción (Litros) | [Fe ²⁺] (ppm) | [SMT] (ppm) | [H ₂ O ₂] (ppm) | Agitación (rpm) | Luz Si/No | Altura luz | Potencia luz | Temp Baño (°C) | Firma EOA | Firma GBG | Firma JAM | Firma MPM |
|----------|---------|---------|-------------|----------|---------------------------|---------------------------|-------------|--|-----------------|-----------|------------|--------------|-----------------------|-----------|-----------|-----------|-----------|
| SMT | 16 | 3/10/08 | 18:20 | 19:30 | 1 | 40 | 50 | 600 | 500 | SI | 21 cm | 300W | Agua a temp ambiente. | EOA | GBG | JAM | |

B) COMPROBACIONES INICIALES:

- Valoración UV H₂O₂ 30 % (p/v): Añadir en un matraz de 100 ml, 10 ml de Disol de vanadato, añadir 30 µL de H₂O₂, enrasar y medir absorbancia a 450 nm.

$$X \% (p/v) = \left(\frac{ABS - 0,0182}{0,0085} \right) \times \left(\frac{1}{3} \right) \quad \text{"Si el valor de X no está dentro de } 30 \pm 2 \% \text{ hay que utilizar reactivo nuevo o bien recalcular los volúmenes de peróxido a añadir"}$$

- Valoración de la disolución de SMT: Tomar una muestra de 1 ml y diluirla 1 a 3. A continuación medir la absorbancia a 240 nm.

$$Y [ppm] = \left(\frac{ABS - 0,0193}{0,0662} \right) \times 3 \quad \text{"Si el valor de Y no está dentro de } 45 \pm 5 \text{ ppm hay que preparar una nueva disolución de SMT"}$$

- Calibración pH-metro: ok

- Comprobación del funcionamiento del baño, lámpara, agitación: ok

- Viales preparados y fríos para las muestras de seguimiento SMT por HPLC (Sin dilución): ok

- Viales preparados y fríos para el de seguimiento de TOC (Sin dilución): ok

- Viales preparados y fríos para las muestras de toxicidad (Sin dilución): ok

- Matrices de 10 ml preparados, cada uno con 1 ml de disol de vanadato, para las muestras de seguimiento de H₂O₂ a 450 nm (Dilución 2 a 10, 4 a 10, 6 a 10 y 8 a 10): ok

- Recipientes para los residuos y cruados finales de los experimentos: ok

C) CÁLCULOS:

- Peso en mg de catalizador a añadir:

$$\frac{40 \text{ mg Fe}^{2+}}{1 \text{ L}} \times \frac{1 \text{ mmol Fe}^{2+}}{55,85 \text{ mg Fe}^{2+}} \times \frac{1 \text{ mmol FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}}{1 \text{ mmol Fe}^{2+}} \times \frac{278,02 \text{ mg FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}}{1 \text{ mmol FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}} \times \frac{100 \text{ mg Reactivo FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}}{98 \text{ mg FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}} = 203,18 \text{ mg Reactivo FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$$

Peso real añadido: 203,33 g

- Volumen en µL del reactivo H₂O₂ X % (p/v) a añadir: (Sustituir el valor de 30·10⁻³ por X·10⁻³ en el cálculo, dónde X es el resultado de la valoración del reactivo)

$$\frac{600 \text{ mg H}_2\text{O}_2}{1 \text{ L}} \times \frac{100 \text{ ml reactivo}}{30 \cdot 10^3 \text{ mg H}_2\text{O}_2} \times \frac{10^3 \mu\text{L reactivo H}_2\text{O}_2}{1 \text{ ml reactivo H}_2\text{O}_2} = 2000 \mu\text{L reactivo H}_2\text{O}_2$$

Volumen real añadido: 2 ml

D) PROCESO EXPERIMENTAL: (1) Tomar muestra 00, (2) Adición de Fe²⁺, (3) Encender la luz y adicionar el H₂O₂ rápidamente, activando el cronómetro para el seguimiento de la reacción, (4) Anotar los valores de temperatura, pH, potencial redox, color de la mezcla de reacción y tomar las muestras de seguimiento de la reacción en los tiempos marcados en la tabla siguiente. Las muestras se llevan al congelador excepto las muestras para TOC, que se analizan justo después de tomar la muestra, (10) Realizar análisis de TOC y a continuación guardar las muestras de TOC en congelador para posterior análisis de iones inorgánicos.

E) VOLUMEN DE TOMA DE MUESTRA PARA EL SEGUIMIENTO DE LA REACCIÓN:

La muestra inicial y el resto de muestras de seguimiento de la reacción serán 40 ml repartidos de la siguiente forma (1,5 ml para HPLC, de 2 a 8 ml para determinar la concentración de H₂O₂ y 25 ml para el TOC, que servirán también una vez analizado el TOC para análisis de toxicidad (2 muestras de 1,5 ml) y para análisis de iones inorgánicos.

F) SEGUIMIENTO EXPERIMENTAL:

| Tiempo (min.) | Temp (°C) | pH | P. redox (mv) | Color | Muestra SI / No | Código muestra XX.YY | muestra Sí / No | TC | IC | TOC | Alcohol ml para Abs vis | Abs Viable 460 nm | [H ₂ O ₂] (ppm) | [SO ₄ ²⁻] (ppm) | [N Inorg] (ppm) |
|---------------|-----------|------|---------------|----------------|-----------------|----------------------|-----------------|-------|-------|-------|-------------------------|-------------------|--|--|-----------------|
| 0 | 17°C | 4,81 | 212 | Turvy | SI | 16.00 | SI/No | 3191 | 1623 | 39,59 | | | 600 | | |
| 1 | 17°C | 3,30 | 516 | Verde amarillo | | | | | | | | | | | |
| 2 | 17°C | 3,24 | 520 | Verde amarillo | | | | | | | | | | | |
| 5 | 17°C | 3,14 | 525 | Amarillo claro | SI | 16.01 | SI/No | 52100 | 4231 | 23,77 | 2 | 0,800 0,800 | 460 | | |
| 10 | 17°C | 3,07 | 524 | Amarillo claro | SI | 16.02 | SI/No | 31103 | 61683 | 24134 | 4 | 4,242 4,109 | 351 | | |
| 16 | 17,5°C | 3,04 | 528 | " | | | | | | | | | | | |
| 20 | 17,5°C | 3,05 | 530 | " | SI | 16.03 | SI/No | 29102 | 91143 | 19188 | 6 | 0,945 0,921 | 176 | | |
| 30 | 17,5°C | 3,06 | 535 | " | SI | 16.04 | SI/No | 2623 | 91135 | 17109 | 8 | 0,733 0,741 | 94 | | |
| 45 | 17,5°C | 3,07 | 543 | " | | | | | | | | | | | |
| 60 | 18,0°C | 3,07 | 548 | " | SI | 16.05 | SI/No | 2234 | 91031 | 13130 | 8 | 0,142 0,146 | 19 | | |

Observaciones:

Ⓜ A las 5 min de empezar el pH cediendo 319 es el que cambia de coloración y amarillo. Se observa a diferencia de las anteriores (11,12,13,14) una franja superior más clara de forma más notoria.
 Ⓜ Se observan muchos burbujos.
 Ⓜ A partir del minuto 20, el IC se vuelve constante, mientras que el TC disminuye. Es debido, probablemente al desprendimiento del CO₂ de unidades que los subproductos de degradación. Son unos segundos.

A) CONDICIONES EXPERIMENTALES:

| Proyecto | N° Exp. | Fecha | Hora inicio | Hora fin | Volumen Reacción (Litros) | [Fe ²⁺] (ppm) | [SMT] (ppm) | [H ₂ O ₂] (ppm) | Agitación (rpm) | Luz Si/No | Altura luz | Potencia luz | Temp Baño (°C) | Firma EOA | Firma GBG | Firma JAM | Firma MPH |
|----------|---------|----------|-------------|----------|---------------------------|---------------------------|-------------|--|-----------------|-----------|------------|--------------|-----------------------|-----------|-----------|-----------|-----------|
| SMT | 17 | 01/08/18 | 16:30 | 17:30 | 1 | 60 | 50 | 300 | 500 | SI | 21 cm | 300W | Agua a temp ambiente. | EOA | GBG | JAM | |

B) COMPROBACIONES INICIALES:

- Valoración UV H₂O₂ 30 % (p/v): Añadir en un matraz de 100 ml, 10 ml de Disol de vanadato, añadir 30 µL de H₂O₂, arrasar y medir absorbancia a 450 nm.

$X \% (p/v) = \left(\frac{ABS - 0,0182}{0,0085} \right) \times \left(\frac{1}{3} \right)$ "Si el valor de X no está dentro de 30 ± 2 % hay que utilizar reactivo nuevo o bien recalcular los volúmenes de peróxido a añadir"

- Valoración de la disolución de SMT: Tomar una muestra de 1 ml y diluirla 1 a 3. A continuación medir la absorbancia a 240 nm. Absorbancia 1: 0,793 Absorbancia 2: 0,794 Resultado: 30,4 Cumple/No Cumple

$Y [ppm] = \left(\frac{ABS - 0,0193}{0,0662} \right) \times 3$ "Si el valor de Y no está dentro de 45 ± 5 ppm hay que preparar una nueva disolución de SMT"

- Calibración pH-metro: ok. Absorbancia 1: 0,988 Absorbancia 2: 43,72 Cumple/No Cumple

- Comprobación del funcionamiento del baño, lámpara, agitación: ok
- Viales preparados y fríos para las muestras de seguimiento SMT por HPLC (Sin dilución): ok
- Viales preparados y fríos para el de seguimiento de TOC (Sin dilución): ok
- Viales preparados y fríos para las muestras de toxicidad (Sin dilución): ok
- Matraces de 10 ml preparados, cada uno con 1 ml de disol de vanadato, para las muestras de seguimiento de H₂O₂ a 450 nm (Dilución 2 a 10, 4 a 10, 6 a 10 y 8 a 10): ok
- Recipientes para los residuos y crudos finales de los experimentos: ok

C) CÁLCULOS:

- Peso en mg de catalizador a añadir:

$$1L \times \frac{60 \text{ mg Fe}^{2+}}{1 \text{ mmol Fe}^{2+}} \times \frac{1 \text{ mmol FeSO}_4 \cdot 7H_2O}{1 \text{ mmol Fe}^{2+}} \times \frac{278,02 \text{ mg FeSO}_4 \cdot 7H_2O}{100 \text{ mg Reactivo FeSO}_4 \cdot 7H_2O} \times \frac{100 \text{ mg Reactivo FeSO}_4 \cdot 7H_2O}{98 \text{ mg FeSO}_4 \cdot 7H_2O} = 304,77 \text{ mg Reactivo FeSO}_4 \cdot 7H_2O$$

Peso real añadido: 0,30505

- Volumen en µL del reactivo H₂O₂ X % (p/v) a añadir: (Sustituir el valor de 30·10⁻³ por X·10⁻³ en el cálculo, dónde X es el resultado de la valoración del reactivo)

$$300 \text{ mg H}_2\text{O}_2 \times \frac{1L}{100 \text{ ml reactivo}} \times \frac{10^3 \mu\text{L reactivo H}_2\text{O}_2}{30 \cdot 10^3 \text{ mg H}_2\text{O}_2} \times \frac{1 \text{ ml reactivo H}_2\text{O}_2}{1000 \mu\text{L reactivo H}_2\text{O}_2} = 1000 \mu\text{L reactivo H}_2\text{O}_2$$

Volumen real añadido: 1,000

D) PROCESO EXPERIMENTAL: (1) Tomar muestra 00, (2) Adición de Fe²⁺, (3) Encender la luz y adicionar el H₂O₂ rápidamente, activando el cronómetro para el seguimiento de la reacción, (4) Anotar los valores de temperatura, pH, potencial redox, color de la mezcla de reacción y tomar las muestras de seguimiento de la reacción en los tiempos marcados en la tabla siguiente. Las muestras se llevan al congelador excepto las muestras para TOC, que se analizan justo después de tomar la muestra, (10) Realizar análisis de TOC y a continuación guardar las muestras de TOC en congelador para posterior análisis de iones inorgánicos.

E) VOLUMEN DE TOMA DE MUESTRA PARA EL SEGUIMIENTO DE LA REACCION:

La muestra inicial y el resto de muestras de seguimiento de la reacción serán 40 ml repartidos de la siguiente forma (1.5 ml para HPLC, de 2 a 8 ml para determinar la concentración de H₂O₂ y 25 ml para el TOC, que servirán también una vez analizado el TOC para análisis de toxicidad (2 muestras de 1,5 ml) y para análisis de iones inorgánicos.

F) SEGUIMIENTO EXPERIMENTAL:

| Tiempo (min.) | Temp (°C) | pH | P. redox (mv) | Color | Muestra SI/No | Código muestra XX.YY | muestra fiable SI/No | TC | IC | TOC | Alcuzota ml para Abs vis | Abs visible 450 nm | [H ₂ O ₂] (ppm) | [SO ₄ ²⁻] (ppm) | [N inorg] (ppm) |
|---------------|-----------|------|---------------|--------------------|---------------|----------------------|----------------------|-------------------------|------|-------|--------------------------|--------------------|--|--|-----------------|
| 0 | 16,5°C | 4,48 | 320 | Transp | SI | 17.00 | (SI) No | 3120 | 1369 | 21,83 | | | 300 | | |
| 1 | 16,5°C | 3,19 | 497 | Neonj ^o | | | | | | | | | | | |
| 2 | 16,5°C | 3,09 | 532 | Amarello | | | | | | | | | | | |
| 5 | 16,5°C | 3,02 | 538 | " | SI | 17.01 | (SI) No | 3127 | 4808 | 36,47 | 2 | 0,230 0,283 | 455 | | |
| 10 | 16,5°C | 2,98 | 542 | " | SI | 17.02 | (SI) No | 3164 3199 | 6382 | 23,01 | 4 | 0,352 0,349 | 98 | | |
| 15 | 16,5°C | 2,97 | 545 | ll | | | | | | | | | | | |
| 20 | 17,1°C | 2,97 | 548 | " | SI | 17.03 | (SI) No | 2154 | 3169 | 19,37 | 6 | 0,211 0,214 | 98 | | |
| 30 | 16,5°C | 2,98 | 550 | " | SI | 17.04 | (SI) No | 2528 | 5178 | 16,81 | 8 | 0,146 0,142 | 18 | | |
| 45 | 16,5°C | 2,98 | 552 | " | | | | | | | | | | | |
| 60 | 16,5°C | 2,97 | 550 | " | SI | 17.05 | (SI) No | 2288 | 8309 | 11,51 | 8 | 0,026 0,033 | 2 | | |

Observaciones:

A) CONDICIONES EXPERIMENTALES:

| Proyecto | Nº Exp. | Fecha | Hora Inicio | Hora fin | Volumen Reacción (Litros) | [Fe ²⁺] (ppm) | [SMT] (ppm) | [H ₂ O ₂] (ppm) | Agitación (rpm) | Luz Si/No | Altura luz | Potencia luz | Temp Baño (°C) | Firma EOA | Firma GBG | Firma JAM | Firma MPM |
|----------|---------|----------|-------------|----------|---------------------------|---------------------------|-------------|--|-----------------|-----------|------------|--------------|-----------------------|-----------|-----------|-----------|-----------|
| SMT | 18 | 04/02/03 | 19:30 | 18:30 | 1 | 40 | 50 | 600 | 500 | SI | 21 cm | 300 W | Agua a temp ambiente. | ENA | GBG | JAM | MPM |

B) COMPROBACIONES INICIALES:

- Valoración UV H₂O₂: 30 % (p/v): Añadir en un matraz de 100 ml, 10 ml de Disol de vanadato, añadir 30 µL de H₂O₂, enrasar y medir absorbancia a 450 nm.

$$X \% (p/v) = \left(\frac{ABS - 0,0182}{0,0085} \right) \times \left(\frac{1}{3} \right) \quad \text{"Si el valor de X no está dentro de } 30 \pm 2 \% \text{ hay que utilizar reactivo nuevo o bien recalcular los volúmenes de peróxido a añadir"}$$

- Valoración de la disolución de SMT: Tomar una muestra de 1 ml y diluirla 1 a 3. A continuación medir la absorbancia a 240 nm.
 Absorbancia 1: 0,793 Absorbancia 2: 0,794 Resultado: 30,4% Cumplido/No Cumplido

$$Y [ppm] = \left(\frac{ABS - 0,0193}{0,0662} \right) \times 3 \quad \text{"Si el valor de Y no está dentro de } 45 \pm 5 \text{ ppm hay que preparar una nueva disolución de SMT"}$$

- Calibración pH-metro: ok Absorbancia 1: 0,938 Absorbancia 2: 0,980 Resultado: 43,7 ppm Cumplido/No Cumplido

- Comprobación del funcionamiento del baño, lámpara, agitación: ok
- Viales preparados y fríos para las muestras de seguimiento SMT por HPLC (Sin dilución): ok
- Viales preparados y fríos para el seguimiento de TOC (Sin dilución): ok
- Viales preparados y fríos para las muestras de toxicidad (Sin dilución): ok
- Matraces de 10 ml preparados, cada uno con 1 ml de disol de vanadato, para las muestras de seguimiento de H₂O₂ a 450 nm (Dilución 2 a 10, 4 a 10, 6 a 10 y 8 a 10): ok
- Recipientes para los residuos y crudos finales de los experimentos: ok

C) CÁLCULOS:

- Peso en mg de catalizador a añadir:

$$\frac{40 \text{ mg Fe}^{2+}}{1 \text{ L}} \times \frac{55,85 \text{ mg Fe}^{3+}}{1 \text{ mmol Fe}^{2+}} \times \frac{1 \text{ mmol FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}}{1 \text{ mmol Fe}^{3+}} \times \frac{278,02 \text{ mg FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}}{1 \text{ mmol FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}} \times \frac{100 \text{ mg Reactivo FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}}{98 \text{ mg FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}} = 203,18 \text{ mg Reactivo FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$$

Peso real añadido: 0,2029 g

- Volumen en µL del reactivo H₂O₂ X % (p/v) a añadir: (Sustituir el valor de 30·10⁻³ por X·10⁻³ en el cálculo, dónde X es el resultado de la valoración del reactivo)

$$\frac{600 \text{ mg H}_2\text{O}_2}{1 \text{ L}} \times \frac{100 \text{ ml reactivo}}{30 \cdot 10^3 \text{ mg H}_2\text{O}_2} \times \frac{10^3 \mu\text{L reactivo H}_2\text{O}_2}{1 \text{ ml reactivo H}_2\text{O}_2} = 2000 \mu\text{L reactivo H}_2\text{O}_2$$

Volumen real añadido: 2,00 µL

D) PROCESO EXPERIMENTAL: (1) Tomar muestra 00, (2) Adición de Fe²⁺, (3) Encender la luz y adicionar el H₂O₂ rápidamente, activando el cronómetro para el seguimiento de la reacción, (4) Anotar los valores de temperatura, pH, potencial redox, color de la mezcla de reacción y tomar las muestras de seguimiento de la reacción en los tiempos marcados en la tabla siguiente. Las muestras se llevan al congelador excepto las muestras para TOC, que se analizan justo después de tomar la muestra, (10) Realizar análisis de TOC y a continuación guardar las muestras de TOC en congelador para posterior análisis de iones inorgánicos.

E) VOLUMEN DE TOMA DE MUESTRA PARA EL SEGUIMIENTO DE LA REACCIÓN:

La muestra inicial y el resto de muestras de seguimiento de la reacción serán 40 ml repartidos de la siguiente forma (1,5 ml para I-PLC, de 2 a 8 ml para determinar la concentración de H₂O₂ y 25 ml para el TOC, que servirán también una vez analizado el TOC para análisis de toxicidad (2 muestras de 1,5 ml) y para análisis de iones inorgánicos.

F) SEGUIMIENTO EXPERIMENTAL:

| Tiempo (min.) | Temp (°C) | pH | P. redox (mV) | Color | Muestra SI / No | Código muestra XX.YY | muestra fiable SI / No | TC | IC | TOC | Alcudra ml para Abs via | Abs visible 450 nm | [H ₂ O ₂] (ppm) | [SO ₄ ²⁻] (ppm) | [N inorg] (ppm) |
|---------------|-----------|------|---------------|-----------------|-----------------|----------------------|------------------------|-------|-------|-------|-------------------------|--------------------|--|--|-----------------|
| 0 | 17,5°C | 4,72 | 225 | Transparente | SI | 18.00 | (SI) No | 32,77 | 1,620 | 31,15 | | | 600 | | |
| 1 | 17,5°C | 3,23 | 508 | Naranja turbida | | | | | | | | | | | |
| 2 | 17,5°C | 3,18 | 515 | " | | | | | | | | | | | |
| 5 | 17,5°C | 3,14 | 524 | Anarja. case | SI | 18.01 | (SI) No | 31,39 | 4,221 | 27,15 | 2 | 0,386 0,789 | 453 | | |
| 10 | 18°C | 3,05 | 526 | " | SI | 18.02 | (SI) No | 31,21 | 6,418 | 24,99 | 4 | 4,223 4,246 | 355 | | |
| 15 | 18°C | 3,03 | 528 | " | | | | | | | | | | | |
| 20 | 18°C | 3,03 | 530 | " | SI | 18.03 | (SI) No | 29,08 | 8,731 | 20,34 | 8 | 2,039 2,040 | 200 | | |
| 30 | 15°C | 3,04 | 535 | " | SI | 18.04 | (SI) No | 27,43 | 10,12 | 17,30 | 8 | 0,304 0,301 | 146 | | |
| 45 | 18°C | 3,06 | 544 | " | | | | | | | | | | | |
| 60 | 18°C | 3,06 | 549 | " | SI | 18.05 | (SI) No | 25,65 | 12,01 | 13,61 | 8 | 0,207 0,204 | 27 | | |

Observaciones:

(1) Cambio de color de naranja a amarillo, (2) gran dependencia de los tiempos
 (3) de observar gran dependencia de los tiempos

A) CONDICIONES EXPERIMENTALES:

| Proyecto | Nº Exp. | Fecha | Hora inicio | Hora fin | Volumen Reacción (Litros) | [Fe ²⁺] (ppm) | [SMT] (ppm) | [H ₂ O ₂] (ppm) | Agitación (rpm) | Luz Si/No | Altura luz | Potencia luz | Temp Baño (°C) | Firma EOA | Firma GBG | Firma JAM | Firma MPM |
|----------|---------|----------|-------------|----------|---------------------------|---------------------------|-------------|--|-----------------|-----------|------------|--------------|-----------------------|-----------|-----------|-----------|-----------|
| SMT | 19 | 06/10/08 | 16:30 | 17:30 | 1 | 68 | 50 | 600 | 500 | SI | 21 cm | 300 W | Agua a temp ambiente. | CJA | GBG | JAM | |

B) COMPROBACIONES INICIALES:

- Valoración UV H₂O₂ 30 % (p/v): Añadir en un matraz de 100 ml, 10 ml de Disol de vanadato, añadir 30 µL de H₂O₂, entrasear y medir absorbancia a 450 nm.

$$X \% (p/v) = \left(\frac{ABS - 0,0182}{0,0085} \right) \times \left(\frac{1}{3} \right) \quad \text{"Si el valor de X no está dentro de } 30 \pm 2 \% \text{ hay que utilizar reactivo nuevo o bien recalcular los volúmenes de peróxido a añadir"}$$

- Valoración de la disolución de SMT: Tomar una muestra de 1 ml y diluirla 1 a 3. A continuación medir la absorbancia a 240 nm.

$$Y [ppm] = \left(\frac{ABS - 0,0193}{0,0662} \right) \times 3 \quad \text{"Si el valor de Y no está dentro de } 48 \pm 5 \text{ ppm hay que preparar una nueva disolución de SMT"}$$

- Calibración pH-metro: Cumple / No Cumple

- Comprobación del funcionamiento del baño, lámpara, agitación: Cumple / No Cumple

- Viales preparados y fríos para las muestras de seguimiento SMT por HPLC (Sin dilución): Cumple / No Cumple

- Viales preparados y fríos para el seguimiento de TOC (Sin dilución): Cumple / No Cumple

- Viales preparados y fríos para las muestras de toxicidad (Sin dilución): Cumple / No Cumple

- Matrazas de 10 ml preparados, cada uno con 1 ml de disol de vanadato, para las muestras de seguimiento de H₂O₂ a 450 nm (Dilución 2 a 10, 4 a 10, 6 a 10 y 8 a 10): Cumple / No Cumple

- Recipientes para los residuos y crudos finales de los experimentos: Cumple / No Cumple

C) CÁLCULOS:

- Peso en mg de catalizador a añadir:

$$68 \text{ mg Fe}^{2+} \times \frac{1 \text{ mmol Fe}^{2+}}{55,85 \text{ mg Fe}^{2+}} \times \frac{1 \text{ mmol FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}}{1 \text{ mmol Fe}^{2+}} \times \frac{278,02 \text{ mg FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}}{1 \text{ mmol FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}} \times \frac{100 \text{ mg Reactivo FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}}{98 \text{ mg FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}} = 346,85 \text{ mg Reactivo FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$$

Peso real añadido: 0'3473g

- Volumen en µL del reactivo H₂O₂ X % (p/v) a añadir: (Sustituir el valor de 30·10⁻² por X·10⁻² en el cálculo, dónde X es el resultado de la valoración del reactivo)

$$600 \text{ mg H}_2\text{O}_2 \times \frac{100 \text{ ml reactivo}}{30 \cdot 10^3 \text{ mg H}_2\text{O}_2} \times \frac{10^3 \text{ µL reactivo H}_2\text{O}_2}{1 \text{ ml reactivo H}_2\text{O}_2} = 2000 \text{ µL reactivo H}_2\text{O}_2$$

Volumen real añadido: 2 ml

D) PROCESO EXPERIMENTAL: (1) Tomar muestra 00, (2) Adición de Fe²⁺, (3) Encender la luz y adicionar el H₂O₂ rápidamente, activando el cronómetro para el seguimiento de la reacción, (4) Anotar los valores de temperatura, pH, potencial redox, color de la mezcla de reacción y tomar las muestras de seguimiento de la reacción en los tiempos marcados en la tabla siguiente. Las muestras se llevan al congelador excepto las muestras para TOC, que se analizan justo después de tomar la muestra, (10) Realizar análisis de TOC y a continuación guardar las muestras de TOC en congelador para posterior análisis de iones inorgánicos.

E) VOLUMEN DE TOMA DE MUESTRA PARA EL SEGUIMIENTO DE LA REACCIÓN:

La muestra inicial y el resto de muestras de seguimiento de la reacción serán 40 ml repartidos de la siguiente forma (1,5 ml para HPLC, de 2 a 6 ml para determinar la concentración de H₂O₂ y 25 ml para el TOC, que servirán también una vez analizado el TOC para análisis de toxicidad (2 muestras de 1,5 ml) y para análisis de iones inorgánicos.

F) SEGUIMIENTO EXPERIMENTAL:

| Tiempo (min.) | Temp (°C) | pH | P. oxid. (mV) | Color | Muestra SI / No | Código muestra XX.YY | muestra fiable SI / No | TC | IC | TOC | Alcúvola ml para Abs vis | Abs Visible 450 nm | [H ₂ O ₂] (ppm) | [SO ₄ ²⁻] (ppm) | [N inorg] (ppm) |
|---------------|-----------|------|---------------|---------|-----------------|----------------------|------------------------|-------|-------|-------|--------------------------|--------------------|--|--|-----------------|
| 0 | 16°C | 4,84 | 191 | Remojo | SI | 19.00 | SI/No | 32'34 | 1'494 | 30'84 | | | 600 | | |
| 1 | 16,5°C | 3,88 | 523 | Sumido | | | | | | | | | | | |
| 2 | 16,5°C | 3,13 | 523 | Amulido | | | | | | | | | | | |
| 5 | 16,5°C | 3,04 | 529 | . | SI | 19.01 | SI/No | 34'96 | 5'384 | 26'57 | 2 | 0,600 0,640 | 345 | | |
| 10 | 17,0°C | 2,99 | 537 | 4 | SI | 19.02 | SI/No | 35'40 | 6'711 | 23'69 | 4 | 0,774 0,769 | 222 | | |
| 15 | 17,0°C | 2,98 | 541 | 11 | | | | | | | | | | | |
| 20 | 17,0°C | 2,97 | 544 | 4 | SI | 19.03 | SI/No | 25'09 | 3'830 | 20'03 | 8 | 0,577 0,562 | 111 | | |
| 30 | 17,0°C | 2,97 | 548 | 6 | SI | 19.04 | SI/No | 27'46 | 10'34 | 17'12 | 8 | 0,484 0,478 | 60 | | |
| 45 | 17,0°C | 2,97 | 554 | 4 | | | | | | | | | | | |
| 60 | 17,0°C | 2,96 | 557 | 1 | SI | 19.05 | SI/No | 24'19 | 4'928 | 14'23 | 8 | 0,088 0,087 | 10 | | |

Observaciones:

Muestra 19.04 de H₂O₂ contiene 9.0 de la muestra solución.

A) CONDICIONES EXPERIMENTALES:

| Proyecto | Nº Exp. | Fecha | Hora inicio | Hora fin | Volumen Reacción (Litros) | [Fe ²⁺] (ppm) | [SMT] (ppm) | [H ₂ O ₂] (ppm) | Agitación (rpm) | Luz Si/No | Altura luz | Potencia luz | Temp Baño (°C) | Firma EOA | Firma GBG | Firma JAM | Firma MPM |
|----------|---------|----------|-------------|----------|---------------------------|---------------------------|-------------|--|-----------------|-----------|------------|--------------|-----------------------|-----------|-----------|-----------|-----------|
| SMT | 20 | 05/01/08 | 11:00 | 11:00 | 1 | 40 | 50 | 600 | 500 | SI | 21 cm | 300 W | Agua a temp ambiente. | EOA | GBG | JAM | |

B) COMPROBACIONES INICIALES:

- Valoración UV H₂O₂ 30 % (p/v): Añadir en un matraz de 100 ml, 10 ml de Disol de vanadato, añadir 30 µL de H₂O₂, entrasear y medir absorbancia a 450 nm.

$$X \% (p/v) = \left(\frac{ABS - 0,0182}{0,0085} \right) \times \left(\frac{1}{3} \right)$$

"Si el valor de X no está dentro de 30 ± 2 % hay que utilizar reactivo nuevo o bien recalcular los volúmenes de peróxido a añadir"

Absorbancia 1: 0,805 Absorbancia 2: 0,819 Resultado: 31,4% Cumple No Cumple

- Valoración de la disolución de SMT: Tomar una muestra de 1 ml y diluiría 1 a 3. A continuación medir la absorbancia a 240 nm.

$$Y [ppm] = \left(\frac{ABS - 0,0193}{0,0662} \right) \times 3$$

"Si el valor de Y no está dentro de 45 ± 5 ppm hay que preparar una nueva disolución de SMT"

Absorbancia 1: 1,053 Absorbancia 2: 1,050 Resultado: 46,8 ppm Cumple No Cumple

- Calibración pH-metro: ok

- Comprobación del funcionamiento del baño, lámpara, agitación: ok

- Viales preparados y fríos para las muestras de seguimiento SMT por HPLC (Sin dilución): ok

- Viales preparados y fríos para el de seguimiento de TOC (Sin dilución): ok

- Viales preparados y fríos para las muestras de toxicidad (Sin dilución): ok

- Matrices de 16 ml preparados, cada uno con 1 ml de disol de vanadato, para las muestras de seguimiento de H₂O₂ a 450 nm (Dilución 2 a 10, 4 a 10, 6 a 10 y 8 a 10): ok

- Recipientes para los residuos y crudos finales de los experimentos: ok

C) CÁLCULOS:

- Peso en mg de catalizador a añadir:

$$\frac{40 \text{ mg Fe}^{2+}}{1 \text{ L}} \times \frac{1 \text{ mmol Fe}^{2+}}{55,85 \text{ mg Fe}^{2+}} \times \frac{1 \text{ mmol FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}}{1 \text{ mmol Fe}^{2+}} \times \frac{278,02 \text{ mg FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}}{100 \text{ mg Reactivo FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}} = 203,18 \text{ mg Reactivo FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$$

Peso real añadido: 0,2030 g

- Volumen en µL del reactivo H₂O₂ X % (p/v) a añadir: (Sustituir el valor de 30·10⁻³ por X·10⁻³ en el cálculo, dónde X es el resultado de la valoración del reactivo)

$$\frac{600 \text{ mg H}_2\text{O}_2}{1 \text{ L}} \times \frac{30 \cdot 10^3 \text{ mg H}_2\text{O}_2}{100 \text{ ml reactivo}} \times \frac{10^3 \text{ µL reactivo H}_2\text{O}_2}{1 \text{ ml reactivo H}_2\text{O}_2} = 2000 \text{ µL reactivo H}_2\text{O}_2$$

Volumen real añadido: 2 µL

D) PROCESO EXPERIMENTAL: (1) Tomar muestra 00. (2) Adición de Fe²⁺. (3) Encender la luz y adicionar el H₂O₂ rápidamente, activando el cronómetro para el seguimiento de la reacción. (4) Anotar los valores de temperatura, pH, potencial redox, color de la mezcla de reacción y tomar las muestras de seguimiento de la reacción en los tiempos marcados en la tabla siguiente. Las muestras se llevan al congelador excepto las muestras para TOC, que se analizan justo después de tomar la muestra. (10) Realizar análisis de TOC y a continuación guardar las muestras de TOC en congelador para posterior análisis de iones inorgánicos.

E) VOLUMEN DE TOMA DE MUESTRA PARA EL SEGUIMIENTO DE LA REACCIÓN:

La muestra inicial y el resto de muestras de seguimiento de la reacción serán 40 ml repartidos de la siguiente forma (1.5 ml para HPLC, de 2 a 8 ml para determinar la concentración de H₂O₂ y 25 ml para el TOC, que servirán también una vez analizado el TOC para análisis de toxicidad (2 muestras de 1.5 ml) y para análisis de iones inorgánicos.

F) SEGUIMIENTO EXPERIMENTAL:

| Tiempo (min.) | Temp (°C) | pH | P. redox (mv) | Color | Muestra SI / No | Código muestra XX.YY | muestra fiable SI / No | TC | IC | TOC | Alcuota ml para Abs.vis | Abs Visible 490 nm | [H ₂ O ₂] (ppm) | [SO ₄ ²⁻] (ppm) | [N inorg] (ppm) |
|---------------|-----------|------|---------------|------------------|-----------------|----------------------|------------------------|-------|-------|-------|-------------------------|--------------------|--|--|-----------------|
| 0 | 17 | 4,80 | 224 | Tramp | SI | 20.00 | (SI) No | 34,46 | 1619 | 30,78 | | | 600 | | |
| 1 | 17 | 3,27 | 511 | Naranja amarillo | | | | | | | | | | | |
| 2 | 17 | 3,21 | 517 | 4 | | | | | | | | | | | |
| (A) 5 | 17 | 3,13 | 524 | Amarillo claro | SI | 20.01 | (SI) No | 32,00 | 4,350 | 2765 | 2 | 0,300 0,191 | 457 | | |
| (B) 10 | 17,5 | 3,06 | 528 | Amarillo claro | SI | 20.02 | (SI) No | 31,35 | 6,531 | 2482 | 4 | 1,210 1,3101 | 349 | | |
| 15 | 17,5 | 3,04 | 529 | 4 | | | | | | | | | | | |
| 20 | 17,5 | 3,05 | 530 | 4 | SI | 20.03 | (SI) No | 29,07 | 9,051 | 20,02 | 6 | 1,008 1,002 | 193 | | |
| 30 | 17,5 | 3,06 | 534 | 4 | SI | 20.04 | (SI) No | 26,94 | 9,152 | 17,74 | 8 | 0,801 0,803 | 115 | | |
| 45 | 18 | 3,06 | 545 | 4 | | | | | | | | | | | |
| 60 | 18 | 3,06 | 550 | 4 | SI | 20.05 | (SI) No | 23,58 | 9,074 | 14,00 | 8 | 0,194 0,190 | 86 | | |

Observaciones:

(A) Cambio de color de naranja amarillo a amarillo claro
(1) y (2) gran dependencia de burbujas

A) CONDICIONES EXPERIMENTALES:

| Proyecto | Nº Exp. | Fecha | Hora inicio | Hora fin | Volumen Reacción (Litros) | [Fe ²⁺] (ppm) | [SMT] (ppm) | [H ₂ O ₂] (ppm) | Agitación (rpm) | Luz SI/No | Altura luz | Potencia luz | Temp Baño (°C) | Firma EOA | Firma GBG | Firma JAM | Firma MPM |
|----------|---------|----------|-------------|----------|---------------------------|---------------------------|-------------|--|-----------------|-----------|------------|--------------|-----------------------|-----------|-----------|-----------|-----------|
| SMT | 21 | 07/04/08 | 14:30 | 17:30 | 1 | 40 | 50 | 176 | 500 | SI | 21 cm | 300 W | Agua a temp ambiente. | | GBG | JAM | |

B) COMPROBACIONES INICIALES:

- Valoración UV H₂O₂ 30 % (p/v): Añadir en un matraz de 100 ml, 10 ml de Disol de vanadato, añadir 30 µL de H₂O₂, enrasar y medir absorbancia a 450 nm.

$$X \% (p/v) = \left(\frac{ABS - 0,0182}{0,0085} \right) \times \left(\frac{1}{3} \right) \quad \text{"Si el valor de X no está dentro de } 30 \pm 2 \% \text{ hay que utilizar reactivo nuevo o bien recalcular los volúmenes de peróxido a añadir"}$$

Absorbancia 1: ~~0,796~~ 0,796 Resultado: 30,46 Cumple/ No Cumple

- Valoración de la disolución de SMT: Tomar una muestra de 1 ml y diluirla 1 a 3. A continuación medir la absorbancia a 240 nm.

$$Y [ppm] = \left(\frac{ABS - 0,0193}{0,0662} \right) \times 3$$

"Si el valor de Y no está dentro de 45 ± 5 ppm hay que preparar una nueva disolución de SMT"

Absorbancia 1: ~~0,934~~ 0,928 Resultado: ~~44,25~~ 44,25 Cumple/ No Cumple

- Calibración pH-metro:

- Comprobación del funcionamiento del baño, lámpara, agitación:

- Viales preparados y fríos para las muestras de seguimiento SMT por HPLC (Sin dilución):

- Viales preparados y fríos para el de seguimiento de TOC (Sin dilución):

- Viales preparados y fríos para las muestras de toxicidad (Sin dilución):

- Matraces de 10 ml preparados, cada uno con 1 ml de disol de vanadato, para las muestras de seguimiento de H₂O₂ a 450 nm (Dilución 2 a 10, 4 a 10, 5 a 10 y 6 a 10):

- Recipientes para los residuos y crudos finales de los experimentos:

C) CÁLCULOS:

- Peso en mg de catalizador a añadir:

$$\frac{40 \text{ mg Fe}^{2+}}{1 \text{ L}} \times \frac{1 \text{ mmol Fe}^{2+}}{55,85 \text{ mg Fe}^{2+}} \times \frac{1 \text{ mmol FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}}{1 \text{ mmol Fe}^{2+}} \times \frac{278,02 \text{ mg FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}}{1 \text{ mmol FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}} \times \frac{100 \text{ mg Reactivo FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}}{98 \text{ mg FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}} = 203,18 \text{ mg Reactivo FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$$

Peso real añadido:

- Volumen en µL del reactivo H₂O₂ X % (p/v) a añadir: (Sustituir el valor de 30·10⁻³ por X·10⁻³ en el cálculo, dónde X es el resultado de la valoración del reactivo)

$$\frac{176 \text{ mg H}_2\text{O}_2}{1 \text{ L}} \times \frac{100 \text{ ml reactivo}}{30 \cdot 10^3 \text{ mg H}_2\text{O}_2} \times \frac{10^3 \text{ µL reactivo H}_2\text{O}_2}{1 \text{ ml reactivo H}_2\text{O}_2} = 585,8 \text{ µL reactivo H}_2\text{O}_2$$

Volumen real añadido:

D) PROCESO EXPERIMENTAL: (1) Tomar muestra 00, (2) Adición de Fe²⁺, (3) Encender la luz y adicionar el H₂O₂ rápidamente, activando el cronómetro para el seguimiento de la reacción, (4) Anotar los valores de temperatura, pH, potencial redox, color de la mezcla de reacción y tomar las muestras de seguimiento de la reacción en los tiempos marcados en la tabla siguiente. Las muestras se llevan al congelador excepto las muestras para TOC, que se analizan justo después de tomar la muestra, (10) Realizar análisis de TOC y a continuación guardar las muestras de TOC en congelador para posterior análisis de iones inorgánicos.

E) VOLUMEN DE TOMA DE MUESTRA PARA EL SEGUIMIENTO DE LA REACCIÓN:

La muestra inicial y el resto de muestras de seguimiento de la reacción serán 40 ml repartidos de la siguiente forma (1,5 ml para HPLC, de 2 a 6 ml para determinar la concentración de H₂O₂ y 25 ml para el TOC, que servirán también una vez analizado el TOC para análisis de toxicidad (2 muestras de 1,5 ml) y para análisis de iones inorgánicos.

F) SEGUIMIENTO EXPERIMENTAL:

| Tiempo (min.) | Temp (°C) | pH | P. redox (mv) | Color | Muestra SI / No | Código muestra XX.YY | Muestra fiable SI / No | TC | IC | TOC | Alicuota ml para Abs vis | Abs Visible 460 nm | [H ₂ O ₂] (ppm) | [SO ₄ ²⁻] (ppm) | [N Inorg] (ppm) |
|---------------|-----------|------|---------------|----------------|-----------------|----------------------|------------------------|-------|-------|-------|--------------------------|--------------------|--|--|-----------------|
| 0 | 18°C | 4'74 | 213 | Temp | SI | 21.00 | SI/No | 31'76 | 1'307 | 30'45 | | | 500 | | |
| 1 | 18°C | 3'29 | 497 | Amarió. oscura | | | | | | | | | | | |
| 2 | 18'52 | 3'21 | 519 | " | | | | | | | | | | | |
| 5 | 18'52 | 3'13 | 524 | Amarió. | SI | 21.01 | SI/No | 33'96 | 4'071 | 29'89 | 2 | 0'135 0'126 | 98 | | |
| 10 | 18'52 | 3'06 | 524 | Amarió. oscura | SI | 21.02 | SI/No | 30'07 | 5'381 | 24'69 | 4 | 0'248 0'248 | 68 | | |
| 15 | 18'52 | 3'04 | 523 | " | | | | | | | | | | | |
| 20 | 18'52 | 3'04 | 524 | " | SI | 21.03 | SI/No | 29'31 | 7'877 | 24'41 | 6 | 0'151 0'154 | 26 | | |
| 30 | 18'52 | 3'06 | 524 | " | SI | 21.04 | SI/No | 27'49 | 8'638 | 18'85 | 8 | 0'086 0'084 | 10 | | |
| 45 | 18'52 | 3'07 | 520 | " | | | | | | | | | | | |
| 60 | 18'52 | 3'07 | 520 | " | SI | 21.05 | SI/No | 24'33 | 7'969 | 16'36 | 8 | 0'010 0'020 | 0,26 | | |

Observaciones:

Anexo VI: Resultados analíticos HPLC

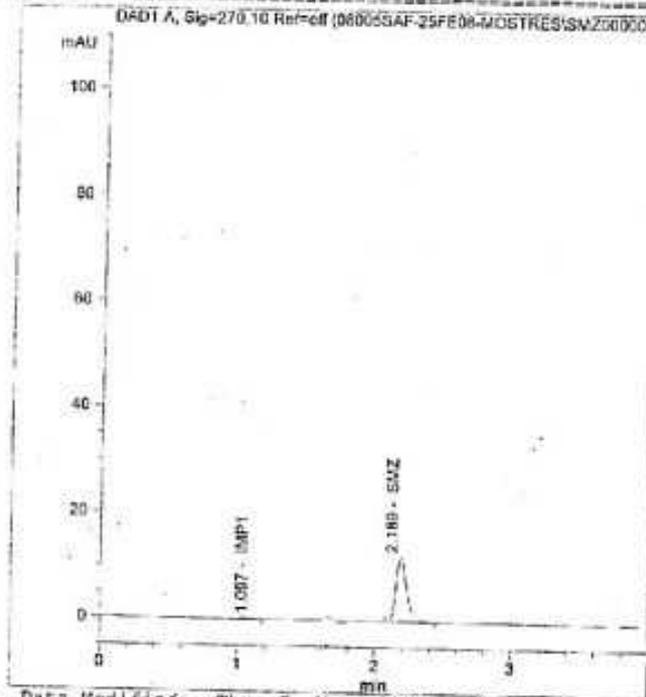
TITULO DEL ESTUDIO: Cuantificación de sulfametazina en muestras de agua

Fase: Análisis de las muestras

Código del estudio: 080055AF

```

-----
Sample Name      : A
Data file       : C:\CHEM32\1\DATA\080055AF-25FE08-MOSTRES\SMZ000003.D
Acq. Method     : SMZ-H2O.M
Analysis Method : C:\CHEM32\1\METHODS\SMZ-H2O.M
Last Changed    : Thu, 6. Mar. 2008, 02:12:23 pm
Vial No.       : 91
Inj. No.       : 1
Method Inj. Volume: 5 µl
Actual Inj. Volume: 5.0
Amount units:  µg/ml
Sample temperature:
Seq Line       :
Injection time : 15:32:32
Injection Date : Mon, 25. Feb. 2008
-----
    
```



Calib. Data Modified: Thu, 6. Mar. 2008, 02:13:58 pm

```

-----
Signal 1: DAD1 A, Sig=270,10 Ref=off
-----
Peak # . Ret. Time . Compound Name . Height . Area . Amount
-----
. 1 . 1.097 .IMP1 . 0.135 . 0.79825 . 0.000
. 2 . 0.000 .IMP2 . 0.000 . 0.00000 . 0.000
. 3 . 0.000 .IMP3 . 0.000 . 0.00000 . 0.000
. 4 . 0.000 .IMP4 . 0.000 . 0.00000 . 0.000
. 5 . 2.189 .SMZ . 12.180 . 66.19011 . 5.087
. 6 . 0.000 .IMP5 . 0.000 . 0.00000 . 0.000
-----
    
```

*** End of Report ***

Software: HP CHEM Rev. B.01:03 [204] Copyright © Agilent Technologies

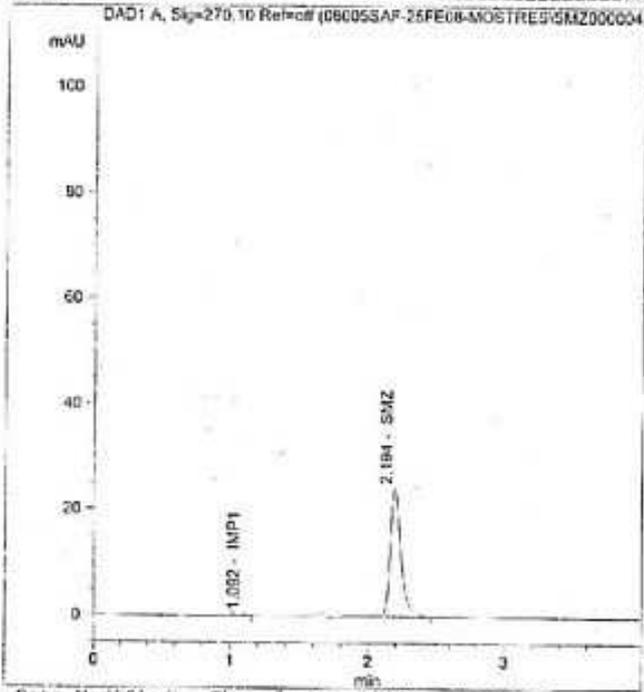
TITULO DEL ESTUDIO: Cuantificación de sulfametacina en muestras de agua

Fase: Análisis de las muestras

Código del estudio: 08005GAF

```

-----
Sample Name      :3
Data file       :C:\CHEM32\1\DATA\08005GAF-25FE08-MOSTRES\SM2000004.D
Acq. Method     :SMZ-H2O.M
Analysis Method :C:\CHEM32\1\METHODS\SMZ-H2O.M
Last Changed    :Thu, 6. Mar. 2008, 02:12:23 pm
Vial No.        :92
Inj. No.        :1
Method Inj. Volume: 5 µl
Actual Inj. Volume:5.0
Amount units:pg/ml
Sample temperature: 4 °C
Seq line        :4
Injection time   :15:38:05
Injection Date   :Mon, 25. Feb. 2008
-----
    
```



Calib. Date Modified: Thu, 6. Mar. 2008, 02:14:06 pm

```

-----
Signal 1:DAD1 A, Sig=270,10 Ref=off
Peak # .Ret. Time . Compound Name . Weight . Area . Amount .
-----
1 . 1.082 .IMP1 . 0.249 . 1.19361 . 0.000 .
2 . 0.000 .IMP2 . 0.000 . 0.00000 . 0.000 .
3 . 0.000 .IMP3 . 0.000 . 0.00000 . 0.000 .
4 . 0.000 .IMP4 . 0.000 . 0.00000 . 0.000 .
5 . 2.194 .SMZ . 24.137 . 130.59950 . 9.988 .
6 . 0.000 .IMP5 . 0.000 . 0.00000 . 0.000 .
-----
    
```

*** End of Report ***

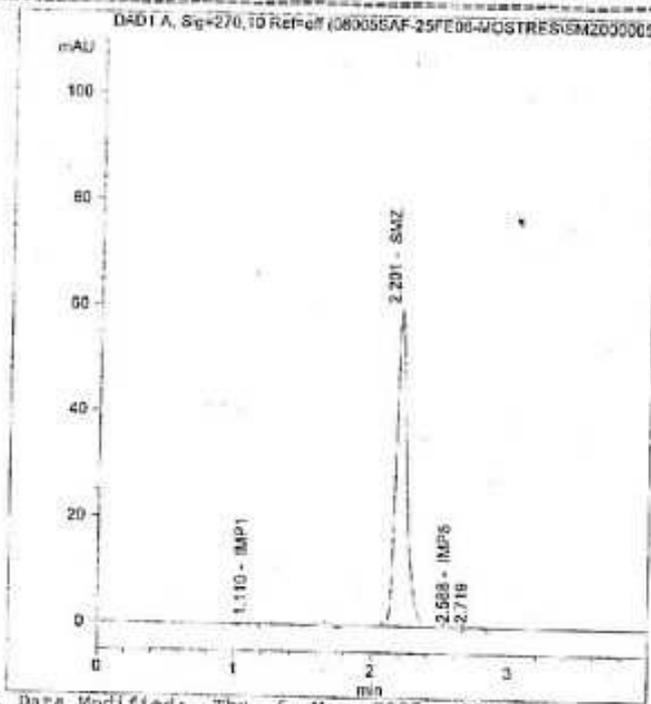
Software: HP CHEM Rev. B.01.02 (2004) Copyright © Agilent Technologies

***** CUANTIFICACION DE SULFAMETAZINA EN MUESTRAS DE AGUA.

Fase: Analisis de las muestras

Código del estudio: 080055AF

```
-----
Sample Name      :C
Data file       :C:\CHEM32\1\DATA\080055AF-25FE08-MOSTRES\SM2600005.D
Acq. Method     :SM2-H2O.M
Analysis Method :C:\CHEM32\1\METHODS\SM2-H2O.M
Last Changed    :Thu, 6. Mar. 2008, 02:12:23 pm
Vial No.        :93
Inj. No.        :1
Method inj. Volume: 5 µl
Actual inj. Volume:5.0
Amount units:µg/ml
Sample temperature: 4 °C
Seq Line       :5
Injection time :15:43:40
Injection Date :Mon, 25. Feb. 2008
-----
```



Calib. Data Modified: Thu, 6. Mar. 2008, 02:14:12 pm

```
-----
Signal 1:DAD1 A, Sig=270,10 Ref=off
Peak # .Ret. Time . Compound Name . Height . Area . Amount .
-----
```

| Peak # | Ret. Time | Compound Name | Height | Area | Amount |
|--------|-----------|---------------|--------|-----------|--------|
| 1 | 1.110 | IMP1 | 0.643 | 2.78075 | 0.000 |
| 2 | 0.000 | IMP2 | 0.000 | 0.00000 | 0.000 |
| 3 | 0.000 | IMP3 | 0.000 | 0.00000 | 0.000 |
| 4 | 0.000 | IMP4 | 0.000 | 0.00000 | 0.000 |
| 5 | 2.201 | SMZ | 60.178 | 326.06393 | 24.863 |
| 6 | 2.588 | IMPS | 0.054 | 0.20889 | 0.000 |
| 7 | 2.719 | | 0.049 | 0.20329 | 0.000 |

```
-----
```

*** End of Report ***

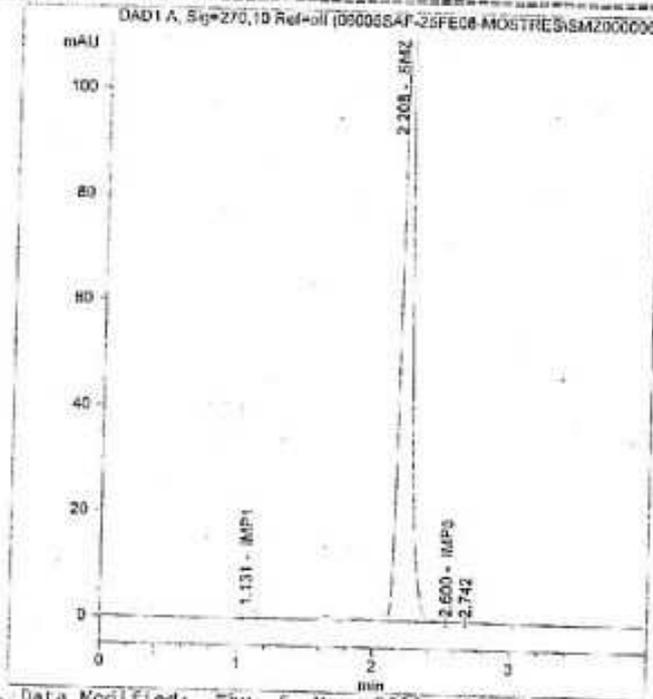
Software: HP CHEM Rev. B.01.03 [204] Copyright © Agilent Technologies

*** End of Report ***

Fase: Analisis de las muestras

Código del estudio: 06005SAF

Sample Name : 0
 Data file: C:\CHEM32\1\DATA\06005SAF-25FE08-MOSTRES\SM2000006.D
 Acq. Method :SME-H2O.M
 Analysis Method :C:\CHEM32\1\METHODS\SM2-H2O.M
 Last Changed :Thu, 6. Mar. 2008, 02:12:23 pm
 Vial No. :94
 Inj. No. :1
 Method Inj. Volume: 5 µl
 Actual Inj. Volume:5.0
 Amount units:µg/µl
 Sample temperature: 4 °C
 Seq Line : 6
 Injection time: 15:49:15
 Injection Date: Mon, 25. Feb. 2008



Calib. Data Modified: Thu, 6. Mar. 2008, 02:14:18 pm

| Peak # | Ret. Time | Compound Name | Height | Area | Amount |
|--------|-----------|---------------|---------|-----------|--------|
| 1 | 1.131 | .IMP1 | 1.480 | 6.04636 | 0.000 |
| 2 | 0.000 | .IMP2 | 0.000 | 0.00000 | 0.000 |
| 3 | 0.000 | .IMP3 | 0.000 | 0.00000 | 0.000 |
| 4 | 0.000 | .IMP4 | 0.000 | 0.00000 | 0.000 |
| 5 | 2.208 | .SME | 121.962 | 657.21164 | 50.062 |
| 6 | 2.600 | .IMP5 | 0.098 | 0.40536 | 0.000 |
| 7 | 2.742 | | 0.095 | 0.29536 | 0.000 |

*** End of Report ***

Software: HP CHEM Rev. B.01.03 [200] Copyright © Agilent Technologies

Method C:\CHEM32\1\METHODS\SM2-H2O.M

08055AF

 Calibration Table

2E2A 25/02/08

Cuantificación de sulfametacina en muestras de agua. 08055AF

Calib. Data Modified : Thursday, 6 / March / 2008 14:09:38
 Calculate : External Standard
 Based on : Peak Area
 Rel. Reference Window : 1.000 %
 Abs. Reference Window : 0.200 min
 Rel. Non-ref. Window : 1.000 %
 Abs. Non-ref. Window : 0.200 min
 Use Multiplier & Dilution Factor with ISTDs
 Uncalibrated Peaks : not reported
 Partial Calibration : Yes, identified peaks are recalibrated
 Correct All Ret. Times: No, only for identified peaks
 Curve Type : Linear (some peaks differ, see below)
 Origin : Ignored (some peaks differ, see below)
 Weight : Equal (some peaks differ, see below)
 Recalibration Settings:
 Average Response : Average all calibrations
 Average Retention Time: Floating Average New 75%

Calibration Report Options :
 Printout of recalibrations within a sequence:
 Calibration Table after Recalibration
 Normal Report after Recalibration
 If the sequence is done with bracketing:
 Results of first cycle (ending previous bracket)

Signal 1: DAD1 A, Sig=270,10 Ref-off

| RetTime [min] | Lvl Sig | Amount [ug/ml] | Area | Amt/Area | Ref Grp Name |
|------------------|------------|-------------------|------------|------------|--------------|
| 1.131 | 1 1 | 0.00000 | 7.98251e-1 | 0.00000 | IMP1 |
| 1.600 | 1 1 | 0.00000 | 0.00000 | 0.00000 | IMP2 |
| 1.958 | 1 1 | 0.00000 | 0.00000 | 0.00000 | IMP3 |
| 2.040 | 1 1 | 0.00000 | 0.00000 | 0.00000 | IMP4 |
| 2.208 | 1 1 | 5.00000 | 66.19011 | 7.55400e-2 | SM2 |
| | 2 | 10.00000 | 130.59950 | 7.65700e-2 | |
| | 3 | 25.00000 | 326.06393 | 7.66721e-2 | |
| | 4 | 50.00000 | 657.21344 | 7.60789e-2 | |
| 2.600 | 1 1 | 0.00000 | 0.00000 | 0.00000 | IMP5 |

More compound-specific settings:

Compound: IMP1
 Curve Type : Linear
 Origin : Included
 Calibration Level Weights:/
 Level 1 : 1

Compound: IMP2
 Curve Type : Linear
 Origin : Included
 Calibration Level Weights:/
 Level 1 : 1

Compound: IMP3
 Curve Type : Linear
 Origin : Included
 Calibration Level Weights:/
 Level 1 : 1

Compound: IMP4

Method C:\CHEM32\1\METHODS\SM2-H2O.M

Curve Type : Linear
Origin : Included
Calibration Level Weights:/
Level 1 : 1

Compound: IMP3
Curve Type : Linear
Origin : Included
Calibration Level Weights:/
Level 1 : 1

Warnings or Errors :

Warning : Overlapping peak time windows at 1.958 min, signal 1
Warning : Overlapping peak time windows at 2.04 min, signal 1

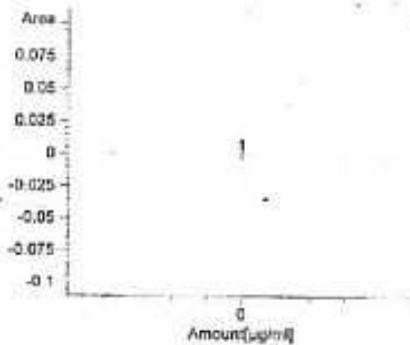
Peak Sum Table

No Entries in table

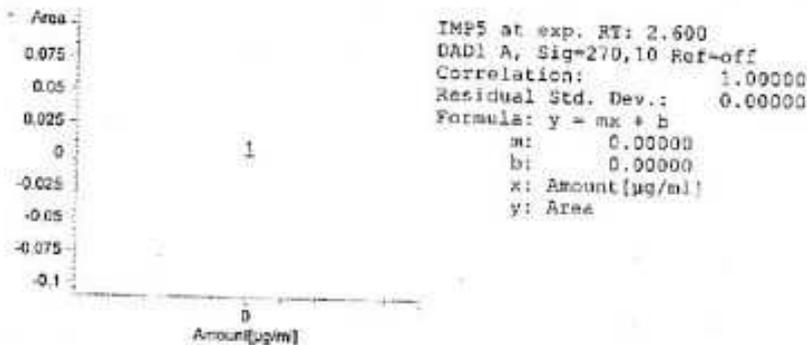
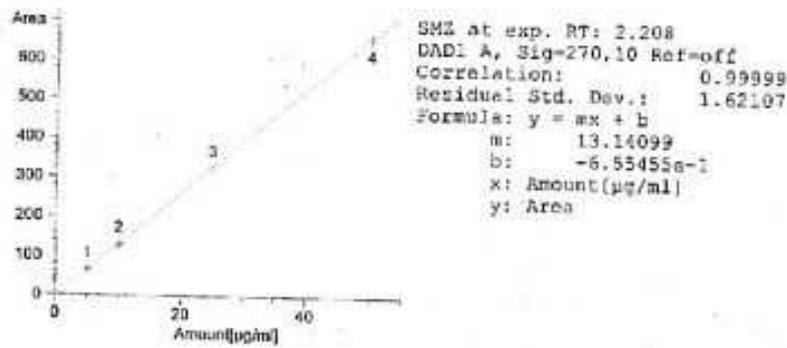
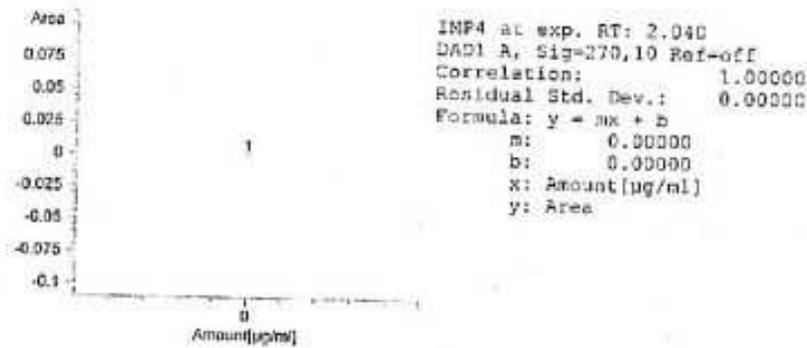
Calibration Curves



IMP1 at exp. RT: 1.131
DAD1 A, Sig=270,10 Ref=off
Correlation: 1.00000
Residual Std. Dev.: 0.00000
Formula: y = mx + b
m: 0.00000
b: 0.00000
x: Amount[µg/ml]
y: Area



IMP2 at exp. RT: 1.600
DAD1 A, Sig=270,10 Ref=off
Correlation: 1.00000
Residual Std. Dev.: 0.00000
Formula: y = mx + b
m: 0.00000
b: 0.00000
x: Amount[µg/ml]
y: Area



Method C:\CHEM32\1\METHODS\SMZ-H2O.M

080055AF

 Calibration Table

RECITA 26/02/08

Cuantificación de sulfametocina en muestras de agua. 080055AF

Calib. Data Modified : Thursday, 6 / March / 2008 14:21:32
 Calculate : External Standard
 Based on : Peak Area
 Rel. Reference Window : 1.000 %
 Abs. Reference Window : 0.200 min
 Rel. Non-ref. Window : 1.000 %
 Abs. Non-ref. Window : 0.200 min
 Use Multiplier & Dilution Factor with ISTDs
 Uncalibrated Peaks : not reported
 Partial Calibration : Yes, identified peaks are recalibrated
 Correct All Ret. Times : No, only for identified peaks
 Curve Type : Linear (some peaks differ, see below)
 Origin : Ignored (some peaks differ, see below)
 Weight : Equal (some peaks differ, see below)
 Recalibration Settings:
 Average Response : Average all calibrations
 Average Retention Time: Floating Average New 75%

Calibration Report Options :
 Printout of recalibrations within a sequence:
 Calibration Table after Recalibration
 Normal Report after Recalibration
 If the sequence is done with bracketing:
 Results of first cycle (ending previous bracket)

Signal 1: DAD1 A, Sig=270,10 Ref=off

| RetTime [min] | Lvl Sig | Amt [ug/ml] | Area | Amt/Area | Ref Grp Name |
|------------------|------------|----------------|------------|------------|--------------|
| 1.131 | 1 1 | 0.00000 | 7.98251e-1 | 0.00000 | IMP1 |
| 1.500 | 1 1 | 0.00000 | 0.00000 | 0.00000 | IMP2 |
| 1.958 | 1 1 | 0.00000 | 0.00000 | 0.00000 | IMP3 |
| 2.040 | 1 1 | 0.00000 | 0.00000 | 0.00000 | IMP4 |
| 2.184 | 1 1 | 5.00000 | 67.86357 | 7.36772e-2 | SMZ |
| | 2 | 10.00000 | 134.49844 | 7.43503e-2 | |
| | 3 | 25.00000 | 331.63272 | 7.53046e-2 | |
| | 4 | 50.00000 | 670.63062 | 7.45567e-2 | |
| 2.600 | 1 1 | 0.00000 | 0.00000 | 0.00000 | IMP5 |

More compound-specific settings:

Compound: IMP1
 Curve Type : Linear
 Origin : Included
 Calibration Level Weights: /
 Level 1 : 1

Compound: IMP2
 Curve Type : Linear
 Origin : Included
 Calibration Level Weights: /
 Level 1 : 1

Compound: IMP3
 Curve Type : Linear
 Origin : Included
 Calibration Level Weights: /
 Level 1 : 1

Compound: IMP4

Method C:\CHEM32\1\METHODS\SMZ-320.M

Curve Type : Linear
 Origin : Included
 Calibration Level Weights:/
 Level 1 : 1

Compound: IMP5
 Curve Type : Linear
 Origin : Included
 Calibration Level Weights:/
 Level 1 : 1

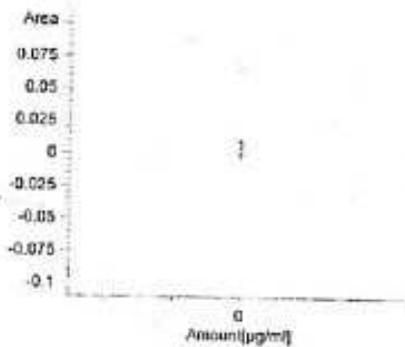
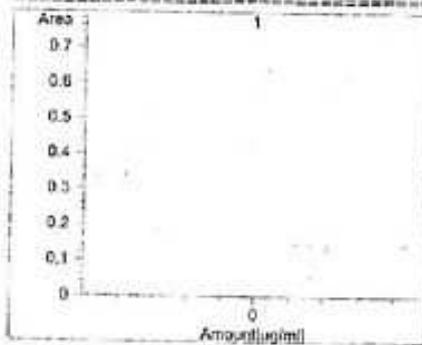
2 Warnings or Errors :

Warning : Overlapping peak time windows at 1.956 min, signal 1
 Warning : Overlapping peak time windows at 2.04 min, signal 1

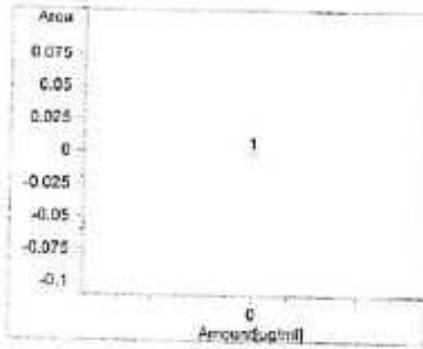
Peak Sum Table

No Entries in table

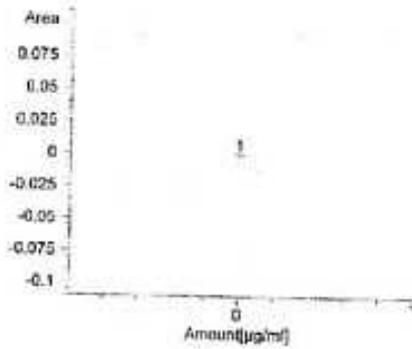
Calibration Curves



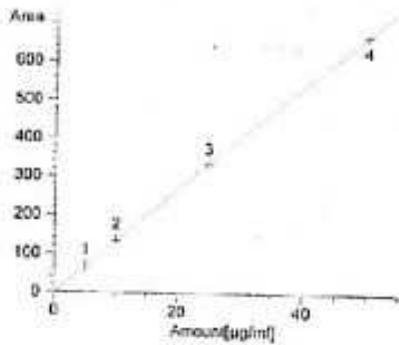
Method C:\CHEM32\1\METHODS\SM2-H20.M



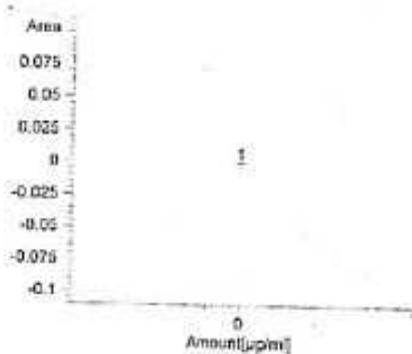
IMP5 at exp. RT: 1.958
 DAD1 A, Sig=270,10 Ref=off
 Correlation: 1.00000
 Residual Std. Dev.: 0.00000
 Formula: $y = mx + b$
 m: 0.00000
 b: 0.00000
 x: Amount[µg/ml]
 y: Area



IMP4 at exp. RT: 2.040
 DAD1 A, Sig=270,10 Ref=off
 Correlation: 1.00000
 Residual Std. Dev.: 0.00000
 Formula: $y = mx + b$
 m: 0.00000
 b: 0.00000
 x: Amount[µg/ml]
 y: Area



SM2 at exp. RT: 2.184
 DAD1 A, Sig=270,10 Ref=off
 Correlation: 0.99997
 Residual Std. Dev.: 2.46294
 Formula: $y = mx + b$
 m: 13.38986
 b: -1.1552e-1
 x: Amount[µg/ml]
 y: Area



IMP5 at exp. RT: 2.600
 DAD1 A, Sig=270,10 Ref=off
 Correlation: 1.00000
 Residual Std. Dev.: 0.00000
 Formula: $y = mx + b$
 m: 0.00000
 b: 0.00000
 x: Amount[µg/ml]
 y: Area

Caracterización de la degradación de Sulfametazina mediante Foto-Fenton (POA's)

Batch Report: C:\CHEM32\1\DATA\080055AF-25FE09-MOSTRES\MOSTRES.B

080055AF

Batch Review Method:
C:\CHEM32\1\METHODS\SMZ-H2O.M

BATCH REVIEW

25104106

['*' ==> Run has not been reprocessed with Batch Review Method
**' ==> Run has been saved with batch file]

| Sample | DataFile | Run | IMP1 RT | IMP1 Area | IMP1 Amount | IMP2 RT | IMP2 Area | IMP2 Amount |
|--------|----------|-------------|------------|--------------|----------------|------------|--------------|----------------|
| * Fe2+ | 40 p | SMZ000002.D | 2 | 0.0 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * | A | SMZ000003.D | 3 | 1.1 | 7.98251e-1 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * | B | SMZ000004.D | 4 | 1.1 | 1.19361 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * | C | SMZ000005.D | 5 | 1.1 | 2.78075 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * | D | SMZ000006.D | 6 | 1.1 | 6.04636 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * | 02-00 | SMZ000007.D | 7 | 1.1 | 1.74740 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * | 02-01 | SMZ000008.D | 8 | 1.1 | 2.25590 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * | 02-02 | SMZ000009.D | 9 | 1.1 | 2.11220 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * | 02-03 | SMZ000010.D | 10 | 1.1 | 3.59055 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * | 02-04 | SMZ000011.D | 11 | 1.1 | 1.45176 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * | 03-00 | SMZ000012.D | 12 | 0.0 | 0.00000 | 1.5 | 3.01286 | 0.00000 |
| * | 03-01 | SMZ000013.D | 13 | 0.0 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * | 03-02 | SMZ000014.D | 14 | 0.0 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * | 03-03 | SMZ000015.D | 15 | 0.0 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * | 03-04 | SMZ000016.D | 16 | 0.0 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * | AIGUA | SMZ000017.D | 17 | 0.0 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * | 04-00 | SMZ000018.D | 18 | 0.0 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * | 04-01 | SMZ000019.D | 19 | 0.0 | 0.00000 | 1.6 | 28.97121 | 0.00000 |
| * | 04-02 | SMZ000020.D | 20 | 0.0 | 0.00000 | 1.6 | 28.46610 | 0.00000 |
| * | 04-03 | SMZ000021.D | 21 | 0.0 | 0.00000 | 1.6 | 29.06044 | 0.00000 |
| * | 04-04 | SMZ000022.D | 22 | 1.0 | 26.71599 | 1.6 | 28.59907 | 0.00000 |
| * | 05-00 | SMZ000023.D | 23 | 1.1 | 3.96274 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * | 05-01 | SMZ000024.D | 24 | 1.1 | 4.07953 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * | 05-01 | SMZ000025.D | 25 | 0.0 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * | 05-02 | SMZ000026.D | 26 | 0.0 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * | 05-03 | SMZ000027.D | 27 | 1.1 | 1.65187 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * | 05-04 | SMZ000028.D | 28 | 0.0 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * | 07-00 | SMZ000029.D | 29 | 1.1 | 3.91758 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * | 07-01 | SMZ000030.D | 30 | 1.1 | 42.86054 | 1.6 | 31.39701 | 0.00000 |
| * | 07-02 | SMZ000031.D | 31 | 1.1 | 48.00827 | 1.6 | 30.54591 | 0.00000 |
| * | 08-00 | SMZ000032.D | 32 | 1.1 | 4.06534 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * | 08-01 | SMZ000033.D | 33 | 1.1 | 1.32537 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * | AIGUA | SMZ000034.D | 34 | 0.0 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * | 08-02 | SMZ000035.D | 35 | 0.0 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * | 08-03 | SMZ000036.D | 36 | 0.0 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * | 08-04 | SMZ000037.D | 37 | 0.0 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * | 08-05 | SMZ000038.D | 38 | 1.1 | 1.70392 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * | 11-00 | SMZ000039.D | 39 | 1.2 | 3.47287 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * | 11-01 | SMZ000040.D | 40 | 1.2 | 2.76974 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * | 11-02 | SMZ000041.D | 41 | 1.2 | 2.60603 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * | AIGUA | SMZ000042.D | 42 | 0.0 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * | 11-03 | SMZ000044.D | 44 | 1.2 | 1.82675 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * | 11-04 | SMZ000045.D | 45 | 1.2 | 1.87244 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * | 11-05 | SMZ000046.D | 46 | 1.2 | 1.34904 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * | 12-00 | SMZ000047.D | 47 | 1.2 | 3.59161 | 1.6 | 2.60524 | 0.00000 |
| * | 12-01 | SMZ000048.D | 48 | 1.2 | 2.49940 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * | 12-02 | SMZ000049.D | 49 | 1.2 | 2.15607 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * | 12-03 | SMZ000050.D | 50 | 1.2 | 1.81974 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * | 12-04 | SMZ000051.D | 51 | 1.2 | 1.80140 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * | 12-05 | SMZ000052.D | 52 | 1.2 | 1.59508 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * | 13-00 | SMZ000053.D | 53 | 1.2 | 2.98688 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * | 13-01 | SMZ000054.D | 54 | 1.1 | 21.43765 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * | 13-02 | SMZ000055.D | 55 | 1.1 | 21.13839 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * | 13-03 | SMZ000056.D | 56 | 1.1 | 15.68887 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * | 13-04 | SMZ000057.D | 57 | 1.1 | 10.54337 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * | 13-05 | SMZ000058.D | 58 | 1.1 | 4.99878 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |

Batch Report: C:\CHEM32\1\DATA\080055AF-25FE08-NCSTRES\MOSTRES.B

| Sample | DataFile | IMP3 RT | IMP3 Area | IMP3 Amount | IMP4 RT | IMP4 Area | IMP4 Amount | SMZ RT |
|-----------|-------------|------------|--------------|----------------|------------|--------------|----------------|-----------|
| Fe2+ 40 p | SMZ000002.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 |
| A | SMZ000003.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 |
| B | SMZ000004.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 2.2 |
| C | SMZ000005.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 2.2 |
| D | SMZ000006.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 2.2 |
| 02-00 | SMZ000007.D | 2.0 | 8.49905 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 2.2 |
| 02-01 | SMZ000008.D | 2.0 | 9.00472 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 2.2 |
| 02-02 | SMZ000009.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 2.2 |
| 02-03 | SMZ000010.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 2.0 | 7.72943 | 0.00000 | 2.2 |
| 02-04 | SMZ000011.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 2.0 | 18.95700 | 0.00000 | 2.2 |
| 03-00 | SMZ000012.D | 1.9 | 1.27635 | 0.00000 | 2.0 | 8.45213 | 0.00000 | 2.2 |
| 03-01 | SMZ000013.D | 1.9 | 1.25065 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 2.2 |
| 03-02 | SMZ000014.D | 1.9 | 1.66766 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 2.2 |
| 03-03 | SMZ000015.D | 1.9 | 1.49903 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 2.2 |
| 03-04 | SMZ000016.D | 1.9 | 1.24454 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 2.2 |
| AIGUA | SMZ000017.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 2.3 |
| 04-00 | SMZ000018.D | 1.9 | 1.46049 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 |
| 04-01 | SMZ000019.D | 2.0 | 2.21855e-1 | 0.00000 | 2.0 | 8.66644e-1 | 0.00000 | 2.3 |
| 04-02 | SMZ000020.D | 2.0 | 4.02746e-1 | 0.00000 | 2.0 | 1.01751 | 0.00000 | 2.3 |
| 04-03 | SMZ000021.D | 2.0 | 4.13853e-1 | 0.00000 | 2.0 | 6.41017e-1 | 0.00000 | 2.3 |
| 04-04 | SMZ000022.D | 2.0 | 2.73170e-1 | 0.00000 | 2.0 | 1.25342 | 0.00000 | 2.3 |
| 05-00 | SMZ000023.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 2.0 | 7.02831 | 0.00000 | 2.3 |
| 05-01 | SMZ000024.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 2.0 | 6.39654 | 0.00000 | 2.3 |
| 06-01 | SMZ000025.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 |
| 06-02 | SMZ000026.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 |
| 06-03 | SMZ000027.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 |
| 06-04 | SMZ000028.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 |
| 07-00 | SMZ000029.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 2.1 | 7.16896e-1 | 0.00000 | 2.2 |
| 07-01 | SMZ000030.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 2.0 | 1.14699 | 0.00000 | 2.2 |
| 07-02 | SMZ000031.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 2.0 | 1.56971 | 0.00000 | 2.2 |
| 08-00 | SMZ000032.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 2.0 | 7.04450 | 0.00000 | 2.2 |
| 08-01 | SMZ000033.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 2.0 | 9.66835e-1 | 0.00000 | 0.0 |
| AIGUA | SMZ000034.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 |
| 08-02 | SMZ000035.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 |
| 08-03 | SMZ000036.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 |
| 08-04 | SMZ000037.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 |
| 09-00 | SMZ000038.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 |
| 11-00 | SMZ000039.D | 1.9 | 1.57260 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 |
| 11-01 | SMZ000040.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 2.2 |
| 11-02 | SMZ000041.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 |
| AIGUA | SMZ000043.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 |
| 11-03 | SMZ000044.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 |
| 11-04 | SMZ000045.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 |
| 11-05 | SMZ000046.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 |
| 12-00 | SMZ000047.D | 1.9 | 1.85978 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 |
| 12-01 | SMZ000048.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 2.0 | 1.85318 | 0.00000 | 0.0 |
| 12-02 | SMZ000049.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 |
| 12-03 | SMZ000050.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 |
| 12-04 | SMZ000051.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 |
| 12-05 | SMZ000052.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 |
| 13-00 | SMZ000053.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 |
| 13-01 | SMZ000054.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 2.2 |
| 13-02 | SMZ000055.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 |
| 13-03 | SMZ000056.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 |
| 13-04 | SMZ000057.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 |
| 13-05 | SMZ000058.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 |

| Sample | DataFile | SMZ Area | SMZ Amount | IMP5 RT | IMP5 Area | IMP5 Amount |
|-----------|-------------|-------------|---------------|------------|--------------|----------------|
| Fe2+ 40 p | SMZ000002.D | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| A | SMZ000003.D | 66.19011 | 5.08680 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| B | SMZ000004.D | 130.59950 | 9.99821 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| C | SMZ000005.D | 326.06393 | 24.86262 | 2.6 | 2.06885e-1 | 0.00000 |
| D | SMZ000006.D | 657.21344 | 50.06237 | 2.6 | 4.05361e-1 | 0.00000 |
| 02-00 | SMZ000007.D | 541.73657 | 41.27483 | 2.6 | 6.45447e-1 | 0.00000 |
| 02-01 | SMZ000008.D | 522.24463 | 39.79154 | 2.7 | 6.90294e-1 | 0.00000 |

Caracterización de la degradación de Sulfametazina mediante Foto-Fenton (POA's)

main report: C:\CHEM\J2\1\DATA\080058AF-25FE08-MOSTRES\MOSTRES.B

| Sample | DataFile | SMZ Area | SMZ Amount | IMPS RT | IMPS Area | IMPS Amount |
|---------|-------------|-----------|------------|---------|------------|-------------|
| * 02-02 | SMZ000009.D | 484.48599 | 36.91919 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 02-03 | SMZ000010.D | 907.39294 | 69.10047 | 2.6 | 1.04902 | 0.00000 |
| * 02-04 | SMZ000011.D | 565.75366 | 43.10248 | 2.7 | 8.19726e-1 | 0.00000 |
| * 03-00 | SMZ000012.D | 622.62146 | 47.42999 | 3.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 03-01 | SMZ000013.D | 613.46851 | 46.73347 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 03-02 | SMZ000014.D | 620.39355 | 47.26045 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 03-03 | SMZ000015.D | 618.29260 | 47.10058 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 03-04 | SMZ000016.D | 628.07867 | 47.84528 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * AGUA | SMZ000017.D | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 04-00 | SMZ000018.D | 613.26662 | 46.71765 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 04-01 | SMZ000019.D | 436.37109 | 33.25675 | 2.5 | 5.24832 | 0.00000 |
| * 04-02 | SMZ000020.D | 437.00214 | 33.30477 | 2.5 | 2.92274 | 0.00000 |
| * 04-03 | SMZ000021.D | 473.11572 | 36.05294 | 2.5 | 2.96833 | 0.00000 |
| * 04-04 | SMZ000022.D | 427.64148 | 32.59245 | 2.6 | 19.27205 | 0.00000 |
| * 05-00 | SMZ000023.D | 523.42737 | 39.88154 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 05-01 | SMZ000024.D | 470.74597 | 35.87261 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 06-01 | SMZ000025.D | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 06-02 | SMZ000026.D | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 06-03 | SMZ000027.D | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 06-04 | SMZ000028.D | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 07-00 | SMZ000029.D | 566.62683 | 43.16893 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 07-01 | SMZ000030.D | 298.84186 | 22.79108 | 2.6 | 12.22179 | 0.00000 |
| * 07-02 | SMZ000031.D | 276.35544 | 21.07992 | 2.6 | 13.07952 | 0.00000 |
| * 08-00 | SMZ000032.D | 528.50977 | 40.26830 | 2.6 | 2.95984e-1 | 0.00000 |
| * 08-01 | SMZ000033.D | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * AGUA | SMZ000034.D | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 09-02 | SMZ000035.D | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 09-03 | SMZ000036.D | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 09-04 | SMZ000037.D | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 06-05 | SMZ000038.D | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 11-00 | SMZ000039.D | 638.18219 | 48.61413 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 11-01 | SMZ000040.D | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 11-02 | SMZ000041.D | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * AGUA | SMZ000043.D | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 11-03 | SMZ000044.D | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 11-04 | SMZ000045.D | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 11-05 | SMZ000046.D | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 12-00 | SMZ000047.D | 653.34863 | 52.81217 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 12-01 | SMZ000048.D | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 12-02 | SMZ000049.D | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 12-03 | SMZ000050.D | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 12-04 | SMZ000051.D | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 12-05 | SMZ000052.D | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 13-00 | SMZ000053.D | 624.21649 | 47.55137 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 13-01 | SMZ000054.D | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 13-02 | SMZ000055.D | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 13-03 | SMZ000056.D | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 13-04 | SMZ000057.D | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 13-05 | SMZ000058.D | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |

*** End of Report ***

Batch Report: C:\CHEM32\1\DATA\080055AF-26F008-MOSTRES\MOSTRES.E

080055AF

Batch Review Method:
C:\CHEM32\1\METHODS\SM2-H2O.M

BATCH REPORT
26/02/08

[!] ==> Run has not been reprocessed with Batch Review Method
[*] ==> Run has been saved with batch file]

| Sample # | DataFile | Run | IMP1 RT | IMP1 Area | IMP1 Amount | IMP2 RT | IMP2 Area | IMP2 Amount |
|----------|-------------|-----|---------|-----------|-------------|---------|------------|-------------|
| * A | SM2000001.D | 1 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * B | SM2000002.D | 2 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * C | SM2000003.D | 3 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * D | SM2000004.D | 4 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 14-00 | SM2000005.D | 5 | 1.1 | 4.45993 | 0.00000 | 1.6 | 1.85492 | 0.00000 |
| * 14-01 | SM2000006.D | 6 | 1.1 | 15.91081 | 0.00000 | 1.6 | 2.11180 | 0.00000 |
| * 14-02 | SM2000007.D | 7 | 1.1 | 11.66051 | 0.00000 | 1.6 | 2.16466 | 0.00000 |
| * 14-03 | SM2000008.D | 8 | 1.1 | 7.35179 | 0.00000 | 1.6 | 1.78057 | 0.00000 |
| * 14-04 | SM2000009.D | 9 | 1.1 | 4.67145 | 0.00000 | 1.6 | 1.79101 | 0.00000 |
| * 14-05 | SM2000010.D | 10 | 1.1 | 1.91854 | 0.00000 | 1.6 | 2.11100 | 0.00000 |
| * 15-00 | SM2000011.D | 11 | 1.2 | 2.39470 | 0.00000 | 1.6 | 1.76287 | 0.00000 |
| * 15-01 | SM2000012.D | 12 | 1.2 | 3.48467 | 0.00000 | 1.6 | 4.47892 | 0.00000 |
| * 15-02 | SM2000013.D | 13 | 1.2 | 3.82096 | 0.00000 | 1.6 | 3.31166 | 0.00000 |
| * 15-03 | SM2000014.D | 14 | 1.2 | 2.75663 | 0.00000 | 1.6 | 3.97702 | 0.00000 |
| * 15-04 | SM2000015.D | 15 | 1.2 | 2.49479 | 0.00000 | 1.6 | 2.35539 | 0.00000 |
| * 15-05 | SM2000016.D | 16 | 1.2 | 1.60313 | 0.00000 | 1.6 | 1.46043 | 0.00000 |
| * 16-00 | SM2000017.D | 17 | 1.2 | 3.27386 | 0.00000 | 1.6 | 2.02097 | 0.00000 |
| * 16-01 | SM2000018.D | 18 | 1.2 | 2.40764 | 0.00000 | 1.6 | 1.90736 | 0.00000 |
| * 16-02 | SM2000019.D | 19 | 1.2 | 1.95392 | 0.00000 | 1.6 | 1.85501 | 0.00000 |
| * 16-03 | SM2000020.D | 20 | 1.2 | 1.89532 | 0.00000 | 1.6 | 1.56082 | 0.00000 |
| * 16-04 | SM2000021.D | 21 | 1.2 | 1.55192 | 0.00000 | 1.6 | 1.46326 | 0.00000 |
| * 16-05 | SM2000022.D | 22 | 1.2 | 1.22224 | 0.00000 | 1.6 | 1.31269 | 0.00000 |
| * 17-00 | SM2000023.D | 23 | 1.2 | 2.57189 | 0.00000 | 1.6 | 1.13348 | 0.00000 |
| * 17-01 | SM2000024.D | 24 | 1.2 | 3.04487 | 0.00000 | 1.6 | 1.27034 | 0.00000 |
| * 17-02 | SM2000025.D | 25 | 1.2 | 2.27240 | 0.00000 | 1.6 | 1.10375 | 0.00000 |
| * A | SM2000026.D | 26 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * B | SM2000027.D | 27 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * C | SM2000028.D | 28 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * D | SM2000029.D | 29 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 17-03 | SM2000030.D | 30 | 1.2 | 1.94024 | 0.00000 | 1.6 | 9.39683e-1 | 0.00000 |
| * 17-04 | SM2000031.D | 31 | 1.2 | 2.61896 | 0.00000 | 1.6 | 7.64585e-1 | 0.00000 |
| * 17-05 | SM2000032.D | 32 | 1.2 | 1.84000 | 0.00000 | 1.6 | 6.60873e-1 | 0.00000 |
| * 18-00 | SM2000033.D | 33 | 1.2 | 3.38624 | 0.00000 | 1.6 | 1.58731 | 0.00000 |
| * 18-01 | SM2000034.D | 34 | 1.2 | 2.57981 | 0.00000 | 1.6 | 1.04497 | 0.00000 |
| * 18-02 | SM2000035.D | 35 | 1.2 | 2.41018 | 0.00000 | 1.6 | 1.03018 | 0.00000 |
| * 18-03 | SM2000036.D | 36 | 1.2 | 1.98061 | 0.00000 | 1.6 | 1.07669 | 0.00000 |
| * 18-04 | SM2000037.D | 37 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 1.6 | 7.67215 | 0.00000 |
| * 18-05 | SM2000038.D | 38 | 1.2 | 1.37235 | 0.00000 | 1.6 | 5.15197e-1 | 0.00000 |
| * 19-00 | SM2000039.D | 39 | 1.2 | 2.92114 | 0.00000 | 1.6 | 1.71899 | 0.00000 |
| * 19-01 | SM2000040.D | 40 | 1.2 | 1.70724 | 0.00000 | 1.6 | 2.71721 | 0.00000 |
| * 19-02 | SM2000041.D | 41 | 1.2 | 5.87625 | 0.00000 | 1.6 | 2.43061 | 0.00000 |
| * 19-03 | SM2000042.D | 42 | 1.2 | 1.61730 | 0.00000 | 1.6 | 2.78654 | 0.00000 |
| * 19-04 | SM2000043.D | 43 | 1.2 | 1.20451 | 0.00000 | 1.6 | 6.52755e-1 | 0.00000 |
| * 19-05 | SM2000044.D | 44 | 1.2 | 1.40854 | 0.00000 | 1.6 | 3.01798 | 0.00000 |
| * 20-00 | SM2000045.D | 45 | 1.2 | 3.24260 | 0.00000 | 1.6 | 1.85590 | 0.00000 |
| * 20-01 | SM2000046.D | 46 | 1.2 | 2.42226 | 0.00000 | 1.6 | 2.49730 | 0.00000 |
| * 20-02 | SM2000047.D | 47 | 1.2 | 1.84151 | 0.00000 | 1.6 | 2.94728 | 0.00000 |
| * 20-03 | SM2000048.D | 48 | 1.2 | 1.78224 | 0.00000 | 1.6 | 3.31616 | 0.00000 |
| * 20-04 | SM2000049.D | 49 | 1.2 | 1.70061 | 0.00000 | 1.6 | 3.22639 | 0.00000 |
| * 20-05 | SM2000050.D | 50 | 1.2 | 1.34995 | 0.00000 | 1.6 | 3.44404 | 0.00000 |
| * 21-00 | SM2000051.D | 51 | 1.2 | 3.04087 | 0.00000 | 1.6 | 1.65350 | 0.00000 |
| * 21-01 | SM2000052.D | 52 | 1.2 | 3.19676 | 0.00000 | 1.6 | 2.33713 | 0.00000 |
| * 21-02 | SM2000053.D | 53 | 1.2 | 3.14605 | 0.00000 | 1.6 | 2.33576 | 0.00000 |
| * 21-03 | SM2000054.D | 54 | 1.2 | 2.70697 | 0.00000 | 1.6 | 2.73680 | 0.00000 |
| * 21-04 | SM2000055.D | 55 | 1.2 | 2.51168 | 0.00000 | 1.6 | 2.83107 | 0.00000 |
| * 21-05 | SM2000056.D | 56 | 1.2 | 3.07793 | 0.00000 | 1.6 | 3.00854 | 0.00000 |

Caracterización de la degradación de Sulfametazina mediante Foto-Fenton (POA's)

Batch Report: C:\CHEM32\1\DATA\08005GAP-26FE06-MOSTRES\MOSTRES.D

| Sample # | DataFile | IMP3 RT | IMP3 Area | IMP3 Amount | IMP4 RT | IMP4 Area | IMP4 Amount | SMZ RT |
|----------|----------|-------------|-----------|-------------|---------|-----------|-------------|--------|
| * | A | SMZ000001.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 2.2 |
| * | B | SMZ000002.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 2.2 |
| * | C | SMZ000003.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 2.2 |
| * | D | SMZ000004.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 2.2 |
| * | 14-00 | SMZ000005.D | 1.9 | 5.98445e-1 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 2.2 |
| * | 14-01 | SMZ000006.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.0 |
| * | 14-02 | SMZ000007.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.0 |
| * | 14-03 | SMZ000008.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.0 |
| * | 14-04 | SMZ000009.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.0 |
| * | 14-05 | SMZ000010.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.0 |
| * | 15-00 | SMZ000011.D | 1.9 | 0.07085e-1 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 2.2 |
| * | 15-01 | SMZ000012.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.0 |
| * | 15-02 | SMZ000013.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.0 |
| * | 15-03 | SMZ000014.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.0 |
| * | 15-04 | SMZ000015.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.0 |
| * | 15-05 | SMZ000016.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.0 |
| * | 16-00 | SMZ000017.D | 1.9 | 1.22695 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 2.2 |
| * | 16-01 | SMZ000018.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.0 |
| * | 16-02 | SMZ000019.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.0 |
| * | 16-03 | SMZ000020.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.0 |
| * | 16-04 | SMZ000021.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.0 |
| * | 16-05 | SMZ000022.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.0 |
| * | 17-00 | SMZ000023.D | 1.9 | 1.55041 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 2.2 |
| * | 17-01 | SMZ000024.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.0 |
| * | 17-02 | SMZ000025.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.0 |
| * | A | SMZ000026.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 2.2 |
| * | B | SMZ000027.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 2.2 |
| * | C | SMZ000028.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 2.2 |
| * | D | SMZ000029.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 2.2 |
| * | 17-03 | SMZ000030.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.0 |
| * | 17-04 | SMZ000031.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.0 |
| * | 17-05 | SMZ000032.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 2.2 |
| * | 18-00 | SMZ000033.D | 1.9 | 1.32027 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 2.2 |
| * | 18-01 | SMZ000034.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.0 |
| * | 18-02 | SMZ000035.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.0 |
| * | 18-03 | SMZ000036.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.0 |
| * | 18-04 | SMZ000037.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 2.2 |
| * | 18-05 | SMZ000038.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.0 |
| * | 19-00 | SMZ000039.D | 1.9 | 1.96549 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 2.2 |
| * | 19-01 | SMZ000040.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.0 |
| * | 19-02 | SMZ000041.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 2.2 |
| * | 19-03 | SMZ000042.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.0 |
| * | 19-04 | SMZ000043.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.0 |
| * | 19-05 | SMZ000044.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.0 |
| * | 20-00 | SMZ000045.D | 1.9 | 2.33034 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 2.2 |
| * | 20-01 | SMZ000046.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.0 |
| * | 20-02 | SMZ000047.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.0 |
| * | 20-03 | SMZ000048.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.0 |
| * | 20-04 | SMZ000049.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.0 |
| * | 20-05 | SMZ000050.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.0 |
| * | 21-00 | SMZ000051.D | 1.9 | 2.35251 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 2.2 |
| * | 21-01 | SMZ000052.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.0 |
| * | 21-02 | SMZ000053.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.0 |
| * | 21-03 | SMZ000054.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.0 |
| * | 21-04 | SMZ000055.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 2.2 |
| * | 21-05 | SMZ000056.D | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 2.2 |

| Sample # | DataFile | SMZ Area | SMZ Amount | IMP5 RT | IMP5 Area | IMP5 Amount |
|----------|----------|-------------|------------|----------|-----------|-------------|
| * | A | SMZ000001.D | 67.86357 | 5.07691 | 0.0 | 0.00000 |
| * | B | SMZ000002.D | 134.49844 | 10.05343 | 0.0 | 0.00000 |
| * | C | SMZ000003.D | 331.63272 | 24.77608 | 0.0 | 0.00000 |
| * | D | SMZ000004.D | 670.63062 | 50.09358 | 0.0 | 0.00000 |
| * | 14-00 | SMZ000005.D | 636.72034 | 47.56105 | 2.6 | 1.09455e-1 |
| * | 14-01 | SMZ000006.D | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 |
| * | 14-02 | SMZ000007.D | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 |

Batch Report: C:\CHEM32\1\DATA\08C05SAE-26F208-MOSTRES\MOSTRES.3

| Sample | DataFile | SMZ Area | SMZ Amount | IMP5 RT | IMP5 Area | IMP5 Amount |
|---------|-------------|------------|------------|---------|-----------|-------------|
| * 14-03 | SMZ000008.D | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 14-04 | SMZ000009.D | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 14-05 | SMZ000010.D | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 15-00 | SMZ000011.D | 638.67511 | 47.70704 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 15-01 | SMZ000012.D | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 15-02 | SMZ000013.D | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 15-03 | SMZ000014.D | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 15-04 | SMZ000015.D | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 15-05 | SMZ000016.D | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 16-00 | SMZ000017.D | 786.54608 | 58.69991 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 16-01 | SMZ000018.D | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 16-02 | SMZ000019.D | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 16-03 | SMZ000020.D | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 16-04 | SMZ000021.D | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 16-05 | SMZ000022.D | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 17-00 | SMZ000023.D | 659.03149 | 49.22732 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 17-01 | SMZ000024.D | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 17-02 | SMZ000025.D | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * A | SMZ000026.D | 66.74742 | 4.99355 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * B | SMZ000027.D | 132.57623 | 9.90987 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * C | SMZ000028.D | 330.64404 | 24.70224 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * D | SMZ000029.D | 666.04211 | 49.75090 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 17-03 | SMZ000030.D | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 17-04 | SMZ000031.D | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 17-05 | SMZ000032.D | 5.27302e-1 | 4.80106e-2 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 18-00 | SMZ000033.D | 735.89994 | 54.97559 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 18-01 | SMZ000034.D | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 18-02 | SMZ000035.D | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 18-03 | SMZ000036.D | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 18-04 | SMZ000037.D | 2.92730 | 2.27250e-1 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 18-05 | SMZ000038.D | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 19-00 | SMZ000039.D | 620.73236 | 46.36701 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 19-01 | SMZ000040.D | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 19-02 | SMZ000041.D | 1.47461 | 1.10759e-1 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 19-03 | SMZ000042.D | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 19-04 | SMZ000043.D | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 19-05 | SMZ000044.D | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 20-00 | SMZ000045.D | 768.59436 | 57.40985 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 20-01 | SMZ000046.D | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 20-02 | SMZ000047.D | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 20-03 | SMZ000048.D | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 20-04 | SMZ000049.D | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 20-05 | SMZ000050.D | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 21-00 | SMZ000051.D | 527.92535 | 39.43587 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 21-01 | SMZ000052.D | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 21-02 | SMZ000053.D | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 21-03 | SMZ000054.D | 0.00000 | 0.00000 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 21-04 | SMZ000055.D | 2.05774e-1 | 2.39977e-2 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |
| * 21-05 | SMZ000056.D | 1.01392 | 8.43530e-2 | 0.0 | 0.00000 | 0.00000 |

*** End of Report ***

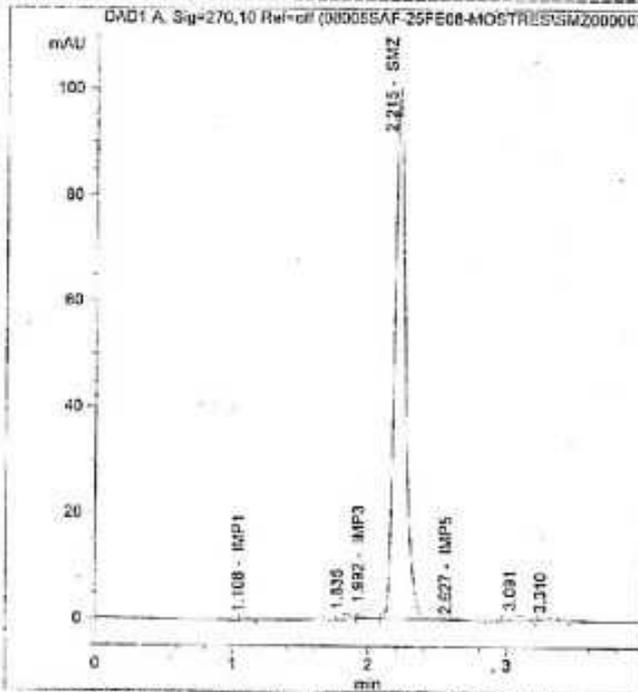
TITULO DEL ESTUDIO: Cuantificación de sulfametacina en muestras de agua

Fase: Análisis de las muestras

Código del estudio: 08005SAF

```

-----
Sample Name      : 02-00
Data file       : C:\CHEM32\1\DATA\08005SAF-25FE08-MOSTRES\SMZ000007.D
Acq. Method     : SMZ-H2O.M
Analysis Method : C:\CHEM32\1\METHODS\SMZ-H2O.M
Last Changed    : Thu, 6. Mar. 2008, 02:12:23 pm
Vial No.        : 1
Inj. No.        : 1
Method Inj. Volume: 5 µl
Actual Inj. Volume: 5.0
Amount units: µg/ml
Sample temperature: 4 °C
Seq Line       : 7
Injection time  : 15:54:53
Injection Date  : Mon, 25. Feb. 2008
-----
    
```



Calib. Data Modified: Thu, 6. Mar. 2008, 02:14:28 pm

```

-----
Signal 1: DAD1 A, Sig=270,10 Ref=off
-----
Peak # .Ret. Time . Compound Name . Height . Area . Amount .
-----
1 . 1.108 .IMP1 . 0.536 . 1.74740 . 0.000 .
2 . 0.000 .IMP2 . 0.000 . 0.00000 . 0.000 .
3 . 1.835 . . 0.952 . 4.47805 . 0.000 .
4 . 1.992 .IMP3 . 1.809 . 8.45905 . 0.000 .
5 . 0.000 .IMP4 . 0.000 . 0.00000 . 0.000 .
6 . 2.215 .SMZ . 100.281 . 541.73657 . 41.275 .
7 . 2.627 .IMP5 . 0.110 . 0.64545 . 0.000 .
8 . 3.091 . . 0.978 . 5.89573 . 0.000 .
9 . 3.310 . . 0.490 . 3.61423 . 0.000 .
-----
    
```

*** End of Report ***

Software: HP CHEM Rev. B.01.03 [204] Copyright © Agilent Technologies

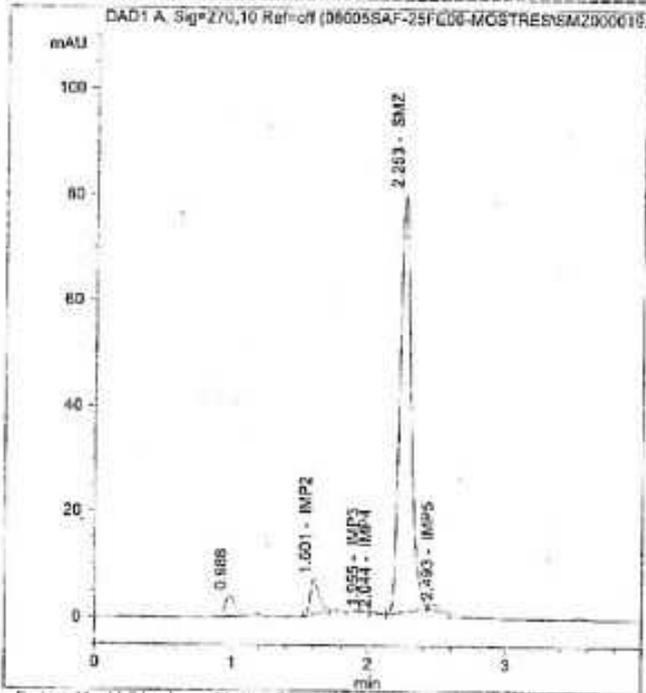
TÍTULO DEL ESTUDIO: Cuantificación de sulfametacina en muestras de agua

Fase: Análisis de las muestras

Código del estudio: 08005SAF

 Sample Name : 04-01
 Data file: C:\CHEM32\1\DATA\08005SAF-25FE08-MOSTRES\SM2000019.D

 Acq. Method : SM2-H2O.M
 Analysis Method : C:\CHEM32\1\METHODS\SM2-H2O.M
 Last Changed : Thu, 6. Mar. 2008, 02:12:23 pm
 Vial No. : 12
 Inj. No. : 1
 Method Inj. Volume: 5 µl Sample temperature: 6 °C
 Actual Inj. Volume: 5.0 µl Seq Line : 19
 Amount units: µg/ml Injection time: 16:56:33
 Injection Date: Mon, 25. Feb. 2008



Calib. Data Modified: Thu, 6. Mar. 2008, 02:18:35 pm

Signal 1:DAD1 A, Sig=270,10 Ref=off

| Peak # | Ret. Time | Compound Name | Height | Area | Amount |
|--------|-----------|---------------|--------|-----------|--------|
| 1 | 0.988 | | 4.066 | 21.48131 | 0.000 |
| 2 | 0.000 | IMP1 | 0.000 | 0.00000 | 0.000 |
| 3 | 1.601 | IMP2 | 6.647 | 29.97121 | 0.000 |
| 4 | 1.955 | IMP3 | 0.094 | 0.22185 | 0.000 |
| 5 | 2.044 | IMP4 | 0.181 | 0.85684 | 0.000 |
| 6 | 2.253 | SM2 | 79.543 | 436.37109 | 33.257 |
| 7 | 2.493 | IMP5 | 1.067 | 5.24832 | 0.000 |

*** End of Report ***

Software: HP CHEM Rev. B.01.03 [204] Copyright © Agilent Technologies

Caracterización de la degradación de Sulfametazina mediante Foto-Fenton (POA's)

| DIA 25/02/08 | MÁS POLARES QUE SMT | | | | | | MENOS POLARES QUE SMT | | | | | |
|-----------------------------|---------------------|---------------|----------------|----------------|------------|---------------|-----------------------|--------------|---------------|------------|---------------|------------|
| | IMP0 Area | IMP1' Area | IMP1 Area | IMP2 Area | IMP3 Area | IMP4 Area | SMT Area | SMT Amount | IMP5 Area | IMP6 Area | IMP7 Area | IMP8 Area |
| H2O2 600 ppm Fe2+ 40 ppm | 0,505 0,642 | | 1,553 0,548 | 5,022 2,761 | | | 0,000 0,000 | 0,00 0,00 | | | | |
| A | 0,569 | | 0,558 | 2,782 | | | 66,190 | 5,09 | | | | |
| B | 0,536 | | 0,933 | 2,781 | | | 130,600 | 9,99 | | | | |
| C | 0,521 | | 2,858 | 2,746 | 0,213 | | 326,064 | 24,86 | 0,209 | 0,203 | | |
| D | 0,573 | | 5,780 | 4,050 | 0,463 | | 657,510 | 50,07 | 0,426 | 0,479 | | |
| 02-00 | 0,795 | | 1,982 | 3,558 | 4,146 | 8,372 | 541,737 | 41,26 | 0,884 | | 5,896 | 3,790 |
| 02-01 | 0,732 | | 2,360 | 3,547 | 4,733 | 9,000 | 521,900 | 39,75 | 0,739 | | 1,454 | 1,240 |
| 02-02 | 0,836 | | 3,097 | 3,437 | 4,566 | 7,739 | 484,486 | 36,91 | | | 11,585 | 7,035 |
| 02-03 | 0,364 | | 3,435 | 2,882 | 8,234 | 18,994 | 907,945 | 69,11 | 1,245 | | 6,636 | 4,015 |
| 02-04 | 0,469 | | 1,414 | 2,887 | 5,121 | 8,487 | 565,754 | 43,09 | 0,719 | | 5,716 | 3,731 |
| 03-00 | 0,823 | 0,528 | 0,493 | 2,031 | 4,291 | | 622,802 | 47,43 | | | | |
| 03-01 | 0,769 | 0,618 | 0,515 | 2,201 | 1,526 | | 613,656 | 46,73 | | 0,440 | | |
| 03-02 | 0,550 | 0,800 | 1,235 | 1,502 | 1,514 | | 620,539 | 47,25 | | | | |
| 03-03 | 0,525 | 0,903 | 1,508 | 3,269 | 2,070 | | 618,373 | 47,09 | | 0,349 | | |
| 03-04 | 0,865 | 1,035 | 2,782 | 4,113 | 2,230 | | 628,050 | 47,82 | | 0,529 | | |
| 04-00 | 0,643 | 1,342 | 2,719 | 3,839 | 2,254 | | 613,485 | 46,72 | | 0,245 | | |
| 04-01 | 0,471 | 20,763 | 1,148 | 28,637 | 0,554 | 0,867 | 436,420 | 33,25 | | | | |
| 04-02 | 0,475 | 22,290 | 0,647 | 28,742 | 0,456 | 1,045 | 436,542 | 33,26 | 2,913 | | | |
| 04-03 | 0,385 | 21,146 | 1,447 | 28,573 | 2,386 | 0,642 | 473,116 | 36,04 | 2,561 | | | |
| 04-04 | 0,687 | 26,213 | | 28,088 | 2,071 | 1,259 | 427,641 | 32,58 | 19,071 | | | |
| 05-00 | 0,794 | 0,221 | 4,453 | 3,867 | 5,106 | 6,833 | 523,362 | 39,86 | | | 1,410 | 1,248 |
| 05-01 | 0,908 | | 5,185 | 3,116 | 4,762 | 6,395 | 470,536 | 35,84 | | | 1,354 | 1,136 |
| 06-01 | 0,960 | 0,251 | | 3,884 | 2,231 | | | | | | | |
| 06-02 | 1,388 | 0,348 | 0,770 | 4,792 | | | | | | | | |
| 06-03 | 0,769 | | 2,134 | 4,274 | | | 0,351 | | | | | |
| 06-04 | 1,477 | 0,254 | 0,977 | 4,533 | | | | | | | | |
| 07-00 | 0,961 | | 3,578 | 2,685 | 1,652 | 0,712 | 566,613 | 43,15 | | | | |
| 07-01 | 0,796 | | 42,740 | 32,104 | 4,701 | 1,159 | 298,774 | 22,78 | 12,294 | | | |
| 07-02 | 1,197 | | 48,031 | 30,054 | 4,687 | 1,927 | 276,355 | 21,07 | 13,054 | 1,346 | | |
| 08-00 | 1,003 | | 2,872 | 2,291 | 4,922 | 7,007 | 528,510 | 40,25 | 0,279 | | 1,859 | 1,643 |
| 08-01 | 1,010 | | 1,419 | 4,101 | 1,633 | 0,825 | | | | | | |
| 08-02 | 1,283 | 0,280 | 0,714 | 4,326 | | | | | | | | |
| 08-03 | 1,092 | 0,206 | 0,533 | 4,519 | | | | | | | | |
| 08-04 | 1,118 | 0,158 | 0,577 | 4,415 | | | | | | | | |
| 08-05 | 0,882 | 0,094 | 1,996 | 4,109 | 0,300 | | | | | | | |
| 11-00 | 0,765 | | 3,930 | 2,188 | 1,597 | 0,048 | 638,711 | 48,64 | | | | 1,190 |
| 11-01 | 1,274 | 0,090 | 2,961 | 3,267 | | | | | | | | |
| 11-02 | 1,306 | | 2,287 | 3,362 | | | | | | | | |
| 11-03 | 1,515 | 0,233 | 1,876 | 4,103 | 0,542 | | | | | | | 0,114 |
| 11-04 | 1,627 | 0,152 | 1,854 | 4,443 | | | | | | | | |
| 11-05 | 1,558 | 0,128 | 1,602 | 4,742 | | | | | | | | |
| 12-00 | 1,174 | | 3,859 | 2,545 | 2,542 | | 686,240 | 52,25 | | | | |
| 12-01 | 1,245 | 0,154 | 3,094 | 4,483 | | 2,525 | | | | | | |
| 12-02 | 1,406 | 0,238 | 2,234 | 4,802 | | | | | | | | |
| 12-03 | 1,355 | 0,310 | 2,302 | 4,882 | | | | | | | | |
| 12-04 | 1,277 | 0,242 | 2,376 | 4,983 | | | | | | | | |
| 12-05 | 1,525 | | 1,901 | 5,199 | | | | | | | | |
| 13-00 | 0,981 | | 3,499 | 2,439 | 4,015 | | 624,519 | 47,56 | | | | |
| 13-01 | 0,913 | | 24,080 | 3,850 | 2,443 | 0,061 | 0,162 | | 0,169 | 0,598 | | |
| 13-02 | 1,088 | | 23,243 | 3,910 | 2,230 | 0,104 | 0,068 | | 0,151 | 0,489 | | |
| 13-03 | 0,947 | | 16,561 | 5,645 | 1,915 | 0,102 | | | 0,091 | 0,399 | | |
| 13-04 | 0,915 | | 12,747 | 6,226 | 1,778 | 0,056 | | | 0,032 | 0,125 | | |
| 13-05 | 1,079 | | 5,128 | 6,351 | 0,000 | | | | | | | |
| A | 0,751 | | | 2,991 | 0,853 | | 65,732 | 5,06 | | | | |
| B | 0,941 | 0,504 | | 3,190 | 0,136 | | 129,959 | 9,94 | | | | |
| C | 0,933 | | 1,166 | 3,306 | 0,392 | | 323,806 | 24,68 | | 0,187 | | |
| D | 0,856 | | 2,015 | 3,827 | 0,544 | | 649,077 | 49,42 | | 0,371 | | |

| DIA 26/02/08 | MÁS POLARES QUE SMT | | | | | | MENOS POLARES QUE SMT | | | | | | |
|--------------|------------------------|-------------|---------------|---------------|-------------|-------------|-----------------------|------------|--------------|-------------|-------------|-------------|-------------|
| | IDENTIFICACIÓN MUESTRA | IMP0 Area | IMP1 Area | IMP1 Area | IMP2 Area | IMP3 Area | IMP4 Area | SMT Area | SMT Amount | IMP5 Area | IMP6 Area | IMP7 Area | IMP8 Area |
| A | 0,680 | 1,602 | | 1,789 | | | 67,864 | 5,08 | | | | | |
| B | 0,540 | 0,683 | | 1,786 | | | 134,498 | 10,05 | | | | | |
| C | | | 0,710 | 2,224 | | | 331,633 | 24,78 | | | | | |
| D | | | 4,872 | 4,117 | 0,613 | | 670,631 | 50,09 | | | | | |
| 14-00 | | | 4,460 | 3,181 | 0,598 | | 636,720 | 47,56 | 0,109 | | | | |
| 14-01 | 0,493 | 0,226 | 15,911 | 3,239 | 0,410 | | | | | | | | |
| 14-02 | 0,429 | 0,203 | 11,581 | 3,241 | 0,573 | | | | 0,339 | | | | |
| 14-03 | 0,625 | | 7,352 | 3,205 | 0,663 | | | | | | | | |
| 14-04 | 0,912 | | 4,671 | 3,192 | 0,596 | | | | | | | | |
| 14-05 | 0,409 | | 2,631 | 3,119 | 0,685 | | | | | | | | |
| 15-00 | 0,638 | | 2,395 | 2,723 | 1,612 | | 638,675 | 47,71 | | | | 1,161 | |
| 15-01 | 0,642 | | 3,485 | 4,479 | 1,042 | | | | | | | | |
| 15-02 | 0,828 | | 3,821 | 4,409 | 0,691 | | | | | | | | |
| 15-03 | 0,675 | | 2,757 | 5,229 | 0,412 | | | | | | | | |
| 15-04 | 0,414 | | 2,495 | 3,905 | 0,506 | | | | | | | | |
| 15-05 | 0,848 | | 1,603 | 3,137 | 0,855 | | | | | | | | |
| 16-00 | 0,762 | | 3,274 | 3,195 | 1,227 | | 764,807 | 57,13 | | | | 0,765 | |
| 16-01 | 0,590 | | 2,408 | 2,987 | | | | | | | | | |
| 16-02 | 0,523 | | 1,954 | 3,353 | | | | | | | | | |
| 16-03 | 0,709 | | 1,895 | 2,967 | | | | | | | | | |
| 16-04 | 0,724 | | 1,552 | 2,699 | | | | | | | | | |
| 16-05 | 0,819 | | 1,222 | 2,417 | | | | | | | | | |
| 17-00 | 0,819 | | 2,572 | 2,229 | 1,550 | | 656,981 | 49,07 | | | | | |
| 17-01 | 0,485 | 0,219 | 3,045 | 2,643 | 0,426 | | | | | | | | |
| 17-02 | 0,863 | | 2,272 | 2,200 | 0,412 | | | | | | | | |
| 17-03 | 0,915 | 0,165 | 1,940 | 2,398 | 0,000 | | | | | | | | |
| 17-04 | 1,009 | | 2,019 | 1,976 | 0,385 | | | | | | | | |
| 17-05 | 1,013 | | 1,840 | 1,927 | 0,881 | | 0,527 | | | | | | |
| A | | | 0,520 | 3,153 | 0,661 | | 66,747 | 4,99 | | | | | |
| B | | | 0,523 | 3,317 | 0,691 | | 132,576 | 9,91 | | | | | |
| C | | | 0,976 | 3,111 | 1,471 | | 330,644 | 24,70 | | | | | |
| D | | | 1,834 | 3,761 | 3,124 | | 666,042 | 49,75 | | | 0,415 | | |
| 18-00 | 0,828 | | 3,386 | 2,896 | 2,098 | | 730,260 | 54,55 | | | | | 1,546 |
| 18-01 | 1,250 | | 2,580 | 2,552 | | | | | | | | | |
| 18-02 | 0,535 | | 2,410 | 2,703 | 0,473 | | | | | | | | |
| 18-03 | 0,369 | | 1,981 | 2,433 | 0,453 | | | | | | | | |
| 18-04 | 0,773 | | | 10,220 | 3,307 | | 2,927 | | | | | | |
| 18-05 | 0,613 | | 1,372 | 1,879 | 0,865 | | | | | | | | |
| 19-00 | 0,396 | | 2,921 | 2,749 | 1,986 | | 620,732 | 46,37 | | | | | |
| 19-01 | 0,896 | 0,167 | 1,707 | 2,734 | 0,469 | | | | | | 0,270 | | 1,126 |
| 19-02 | 0,727 | | 5,876 | 4,464 | 1,704 | | 1,091 | | | | | | |
| 19-03 | 0,839 | | 1,617 | 4,762 | 0,471 | | | | | | | | |
| 19-04 | 0,912 | | 1,205 | 2,758 | 0,601 | | | | | | | | |
| 19-05 | 1,008 | | 1,409 | 2,521 | 0,572 | | | | | | | | |
| 20-00 | 0,655 | | 3,243 | 2,863 | 2,330 | | 768,594 | 57,41 | | | | | 1,079 |
| 20-01 | 0,472 | | 2,422 | 2,738 | 0,448 | | | | | | | | |
| 20-02 | 0,502 | | 1,842 | 3,179 | 0,457 | | | | | | | | |
| 20-03 | 0,387 | | 1,782 | 2,671 | 0,438 | | | | | | | | |
| 20-04 | 1,007 | | 1,701 | 2,611 | 0,460 | | | | | | | | |
| 20-05 | 0,364 | | 1,350 | 2,362 | 0,542 | | | | | | | | |
| 21-00 | 0,000 | | 3,041 | 2,424 | 2,353 | | 527,925 | 39,44 | | | 0,839 | | |
| 21-01 | 0,822 | 0,189 | 3,199 | 2,436 | 0,384 | | | | | | | | |
| 21-02 | 0,499 | | 3,146 | 2,665 | 0,480 | | | | | | | | |
| 21-03 | 0,418 | 0,313 | 2,707 | 2,618 | 0,872 | | | | | | | | |
| 21-04 | 0,548 | | 2,512 | 2,225 | 0,850 | | 0,146 | | | | | | |
| 21-05 | 0,624 | | 3,208 | 2,152 | 0,453 | | 1,014 | | | | | | |

Caracterización de la degradación de Sulfametazina mediante Foto-Fenton (POA's)

| DIA 13/05/08 | MÁS POLARES QUE SMT | | | | | | | MENOS POLARES QUE SMT | | | | | |
|--|------------------------|-------------|-------------------------|-------------------------|-------------|-------------|-------------|-----------------------|--------------|-------------|-------------|-------------|-------------|
| | IDENTIFICACIÓN MUESTRA | IMP0 Area | IMP1' Area | IMP1 Area | IMP2 Area | IMP3 Area | IMP4 Area | SMZ Area | SMZ Amount | IMP5 Area | IMP6 Area | IMP7 Area | IMP8 Area |
| H2O2 600 ppm Fe2+ 40 ppm ANILINA | 0,718 0,492 | | 2,866 0,612 1,669 | 2,661 2,556 3,243 | | | | | | | | 193,262 | 2,291 |
| A | 0,179 | 0,632 | 1,734 | 2,295 | | | 56,224 | 4,533 | | 0,234 | | | |
| B | | | 1,947 | 2,421 | | 3,077 | 136,942 | 10,466 | | | | | |
| C | 0,533 | | 2,121 | 2,506 | | 3,626 | 335,948 | 25,093 | | | | 0,183 | |
| D | | | 3,586 | 2,572 | | 4,517 | 673,538 | 49,907 | | | | 0,556 | |
| 24-00 | 0,456 | | 3,495 | 1,920 | | 4,914 | 656,039 | 48,620 | | 0,544 | | | |
| 24-01 | 0,482 | | 4,224 | 3,844 | | | | | | | | | |
| 24-02 | 0,811 | | 4,857 | 5,246 | | | | | | | | | |
| 24-03 | 0,998 | | 5,150 | 3,079 | | | | | | | | | |
| 24-04 | 0,546 | | 5,246 | 5,139 | | | | | | | | | |
| 24-05 | 0,558 | | 4,861 | 2,874 | | | | | | | | | |
| 24-06 | 0,746 | | 4,392 | 4,455 | | | | | | | | | |
| 24-07 | 0,656 | | 4,796 | 3,271 | | | | | | | | | |
| 24-08 | 0,594 | | 4,474 | 4,248 | | | | | | | | | |
| 24-09 | 0,514 | | 4,455 | 3,288 | | | | | | | | | |
| 24-10 | 0,516 | | 3,518 | 4,821 | | | | | | | | | |
| 24-11 | 0,747 | | 3,613 | 4,872 | | | | | | | | | |
| A | 0,640 | | 0,944 | 2,195 | | | 56,794 | 4,575 | | | | | |
| B | 0,455 | | 0,815 | 2,341 | | 3,326 | 136,771 | 10,454 | | | | | |
| C | 0,608 | | 2,131 | 2,619 | | 3,845 | 335,706 | 25,076 | | | | 0,265 | |
| D | 0,443 | | 3,931 | 2,603 | | 2,193 | 671,885 | 49,785 | | | | 0,598 | |
| 25-00 | 0,643 | | 4,792 | 2,043 | | 4,772 | 646,712 | 47,935 | | | | | |
| 25-01 | 0,739 | | 4,572 | 4,665 | | | | | | | | | |
| 25-02 | 0,547 | | 4,906 | 4,752 | | | | | | | | | |
| 25-03 | 0,514 | | 12,327 | 23,310 | | | | | | | | | |
| 25-04 | 0,718 | | 4,053 | 4,837 | | | | | | | | | |
| 25-05 | 0,717 | | 4,041 | 4,671 | | | | | | | | | |
| 25-06 | 0,539 | | 3,927 | 4,805 | | | | | | | | | |
| 25-07 | 0,674 | | 3,781 | 5,005 | | | | | | | | | |
| 25-08 | 0,533 | | 3,710 | 4,872 | | | | | | | | | |
| 25-09 | 0,504 | | 3,722 | 4,152 | | | | | | | | | |
| 23-00 | 0,741 | | 5,762 | 3,949 | | 3,399 | 0,826 | 0,462 | | | | | |
| 23-01 | 0,703 | | 4,323 | 1,961 | | | | | | | | | |
| 23-02 | 0,679 | | 3,921 | 4,506 | | | | | | | | | |
| 23-03 | 0,465 | | 3,577 | 4,357 | | | | | | | | | |
| A | 0,703 | | 0,837 | 2,314 | | | 56,525 | 4,556 | | 0,145 | | | |
| B | 0,608 | | 0,768 | 2,407 | | 3,090 | 136,592 | 10,441 | | | | | |
| C | 0,422 | | 1,793 | 2,436 | | 3,389 | 334,967 | 25,021 | | | | 0,244 | |
| D | 0,430 | | 3,302 | 2,397 | | 4,598 | 671,230 | 49,737 | | | | 0,625 | |
| 30-00 | 0,469 | | 13,795 | 2,572 | | 3,789 | 553,072 | 41,052 | | | | 0,187 | |
| 30-01 | 0,905 | | 15,935 | 330,796 | | | 1,372 | 0,502 | | | | | |
| 30-02 | 0,443 | | 10,589 | 258,883 | | | 0,695 | 0,452 | | | | | |
| 30-03 | 0,802 | | 19,197 | 319,091 | | | 1,895 | 0,540 | | | | | |
| 30-04 | 0,507 | | 21,408 | 475,644 | | | 2,568 | 0,590 | | | | | |

Anexo VII: Estudio estadístico

The model based on the Hoerl equation is proposed as a combined product for all the variables contributing to the system response:

$$f(\mathbf{x}) = \prod_i a_i x_i^{b_i} e^{c_i x_i} = A \prod_i x_i^{b_i} e^{c_i x_i} \quad (3)$$

Table. Coefficients of the Hoerl function for different reaction times of the 4-chlorophenol degradation under Fenton reagent enhanced with light radiation. (b1 y c1 son los coeficientes del peróxido y b2 y c2 del hierro).

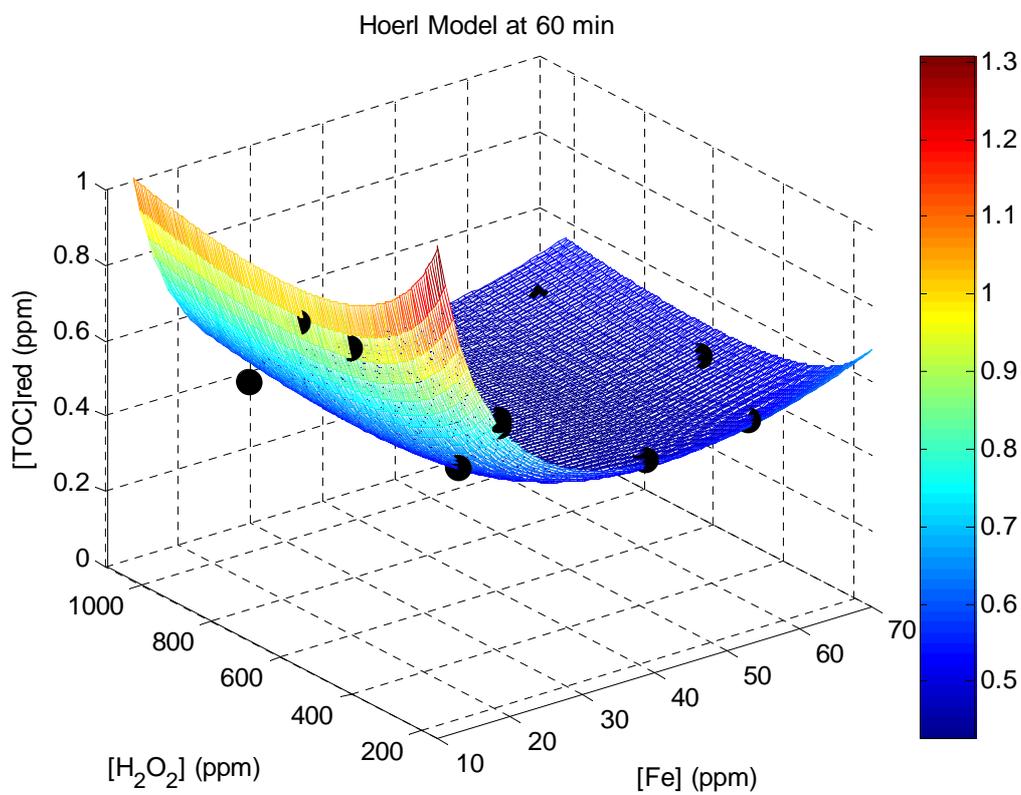
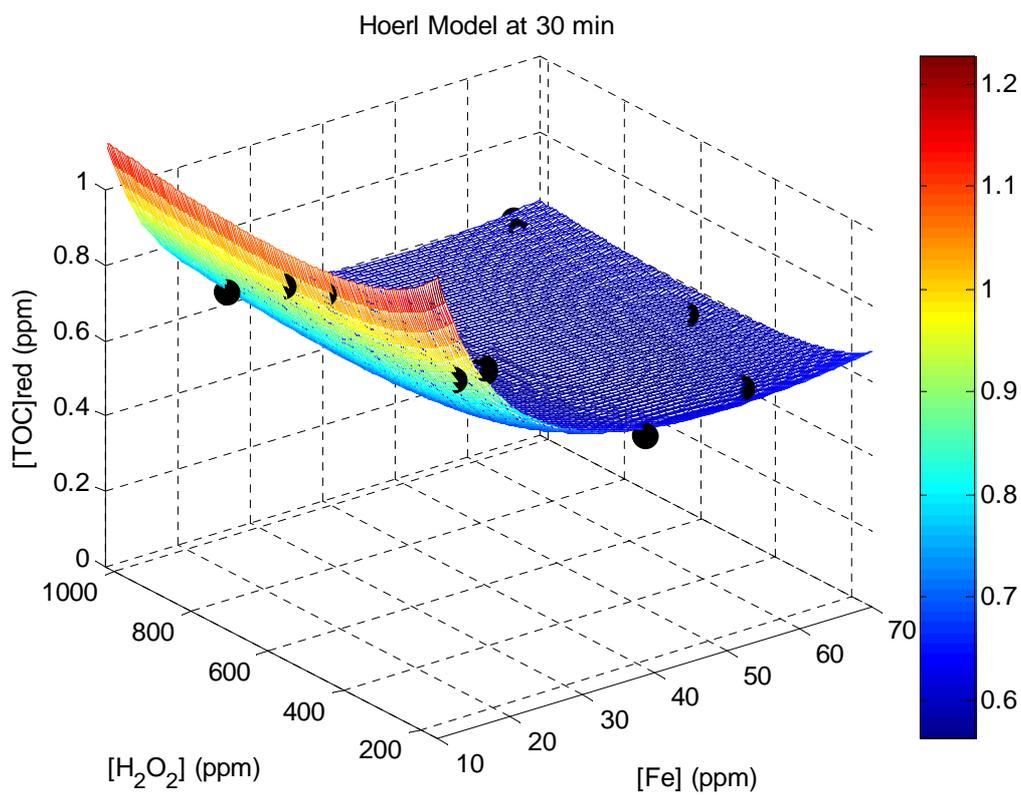
| Reaction time (min) | A | b1 | c1 | b2 | c2 |
|---------------------|--------|-----------------------|---------------------|-------|----------------------|
| 5 | 2.82 | -0.13 | $2.1 \cdot 10^{-4}$ | -0.15 | $2.75 \cdot 10^{-3}$ |
| 10 | 2.82 | $-6.71 \cdot 10^{-2}$ | $1.6 \cdot 10^{-4}$ | -0.31 | $5.24 \cdot 10^{-3}$ |
| 20 | 13.10 | -0.22 | $4.2 \cdot 10^{-4}$ | -0.64 | $1.26 \cdot 10^{-2}$ |
| 30 | 18.56 | -0.22 | $3.8 \cdot 10^{-4}$ | -0.8 | $1.60 \cdot 10^{-2}$ |
| 60 | 127.96 | -0.42 | $6.8 \cdot 10^{-4}$ | -1.26 | $3.00 \cdot 10^{-2}$ |

Once again, there is no trend in the coefficients' values obtained for each reaction time, which is also to be attributed to their lack of physicochemical meaning. On this basis, the models proposed are both empirical and acceptable only on regard of the degree of adjustment quantitatively given by the following statistical indexes.

| Statistics | Reaction 30 minutes | Reaction 60 minutes |
|-----------------|---------------------|---------------------|
| Residual Values | 0.022 | 0.012 |
| R2 | 0.879 | 0.927 |
| Adjusted R2 | 0.8 | 0.9 |

Quadratic:

| Statistics | Reaction 30 minutes | Reaction 60 minutes |
|-------------------------|---------------------|---------------------|
| Residual Values | 0,070 | 0,086 |
| R ² | 0,612 | 0,482 |
| Adjusted R ² | 0,22316359 | 0,0 |

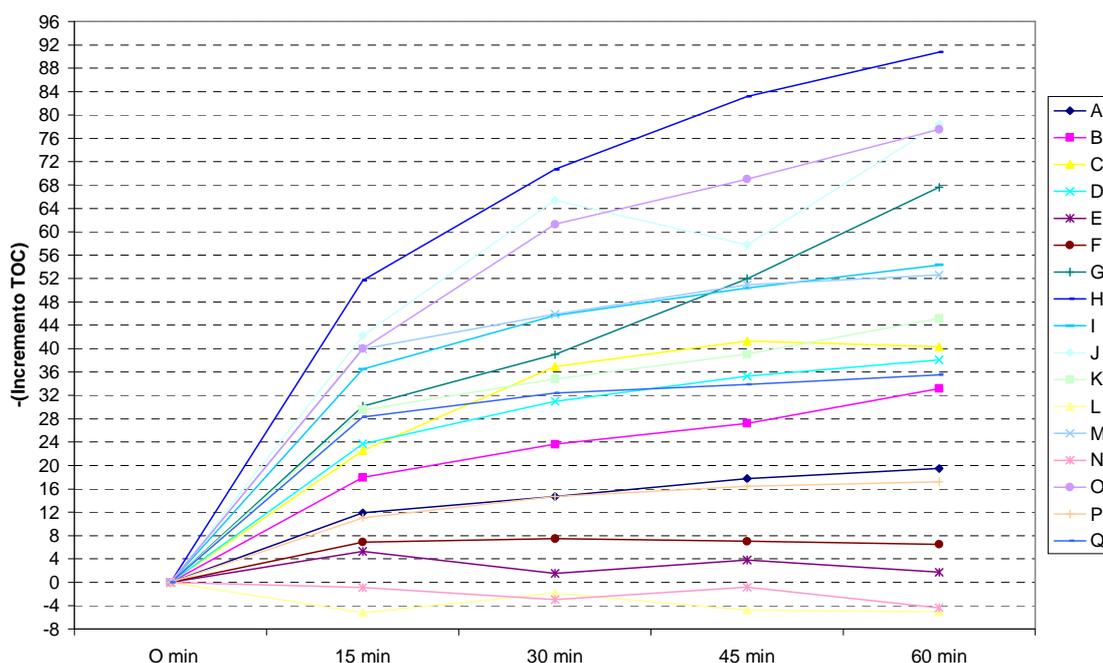


Anexo VIII: Estudios previos al PFC-1

ANÁLISIS DE LOS DATOS EXPERIMENTALES DE UN PROYECTO ANTERIOR DEL PROCESO FOTO-FENTON APLICADO AL 4-CLOROFENOL.

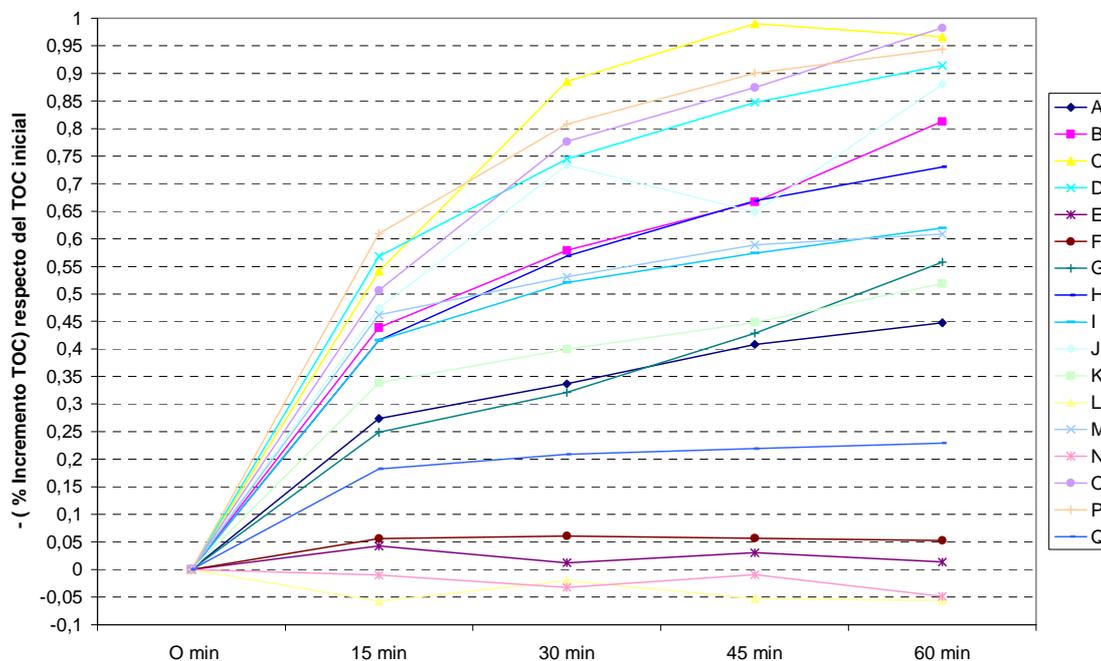
| num. exp. | ppm Fe (II) | ppm H2O2 | ppm contaminant | %reducció TOC (ppm) | | | O2 (ppm) | | | Predox (mV) | | | pH | | | | | | | | | | |
|-----------|-------------|----------|-----------------|---------------------|------------|------------|------------|------------|------------|-------------|------------|------------|------------|------------|------------|-----|-----|------|------|------|------|------|------|
| | | | | als 15 min | als 30 min | als 45 min | als 15 min | als 30 min | als 45 min | als 15 min | als 30 min | als 45 min | als 15 min | als 30 min | als 45 min | | | | | | | | |
| A | 10,0 | 200,0 | 74,0 | 31,62 | 28,86 | 25,76 | 24,05 | 0,54 | 0,3 | 0,81 | 0,64 | 0,76 | 166 | 71 | 82 | 99 | 120 | 5,67 | 1,92 | 2,03 | 2,08 | 2,13 | |
| B | 50,0 | 200,0 | 74,0 | 22,9 | 17,19 | 13,62 | 7,642 | 0,99 | 0,51 | 1,79 | 1,01 | 0,66 | 195 | 150 | 62 | 84 | 141 | 4,98 | 2,04 | 2,28 | 2,44 | 2,56 | |
| C | 10,0 | 800,0 | 74,0 | 41,7 | 19,14 | 4,788 | 0,415 | 1,404 | 1,51 | 0,62 | 0,67 | 0,7 | 134 | 391 | 453 | 456 | 460 | 5,48 | 2,19 | 2,53 | 2,5 | 2,49 | |
| D | 50,0 | 800,0 | 74,0 | 41,98 | 18 | 10,66 | 6,379 | 3,576 | 0,26 | 0,52 | 0,54 | 0,56 | 279 | 461 | 384 | 369 | 372 | 5,57 | 2,16 | 2,15 | 2,19 | 2,21 | |
| E | 10,0 | 200,0 | 222,0 | 123,3 | 118 | 121,8 | 119,5 | 121,6 | 0,43 | 0,47 | 0,52 | 0,57 | 159 | 123 | 94 | 65 | 66 | 4,89 | 2,12 | 2,09 | 2,09 | 2,06 | |
| F | 50,0 | 200,0 | 222,0 | 123,4 | 116,5 | 115,9 | 116,4 | 116,9 | 0,67 | 0,66 | 0,69 | 0,72 | 108 | 73 | 45 | 44 | 55 | 5,75 | 1,83 | 1,8 | 1,77 | 1,76 | |
| G | 10,0 | 800,0 | 222,0 | 121,2 | 91,04 | 82,23 | 69,23 | 53,57 | 0,41 | 0,51 | 0,56 | 0,72 | 175 | 340 | 350 | 357 | 363 | 5,1 | 1,56 | 1,56 | 1,57 | 1,62 | |
| H | 50,0 | 800,0 | 222,0 | 124,3 | 72,59 | 53,61 | 41,15 | 33,53 | 2,83 | 1,1,21 | 9,69 | 3,83 | 2,5 | 313 | 331 | 99 | 47 | 25 | 5,1 | 1,22 | 1,43 | 1,54 | 1,59 |
| I | 30,0 | 500,0 | 148,0 | 87,74 | 51,27 | 42,06 | 37,35 | 33,39 | 7,1 | 0,45 | 0,33 | 0,25 | 120 | 303 | 53 | 28 | 42 | 4,73 | 1,48 | 1,6 | 1,65 | 1,67 | |
| J | 30,0 | 500,0 | 148,0 | 89,11 | 46,86 | 23,74 | 31,32 | 10,68 | 0,98 | 1,4 | 0,85 | 0,63 | 244 | 388 | 325 | 161 | 324 | 4,56 | 1,37 | 1,56 | 1,7 | 1,94 | |
| K | 30,0 | 500,0 | 148,0 | 87,09 | 57,56 | 52,28 | 48,03 | 41,91 | 2,16 | 0,36 | 0,42 | 0,44 | 241 | 284 | 93 | 54 | 60 | 5,24 | 1,35 | 1,43 | 1,49 | 1,53 | |
| L | -3,6 | 500,0 | 148,0 | 90,6 | 95,78 | 92,44 | 95,35 | 95,66 | 1,28 | 3,71 | 2,61 | 2,32 | 306 | 291 | 292 | 297 | 295 | 4,69 | 4,52 | 4,31 | 4,07 | 3,84 | |
| M | 63,6 | 500,0 | 148,0 | 86,48 | 46,52 | 40,6 | 35,52 | 33,87 | 5,97 | 1,12 | 0,11 | 0,09 | 238 | 82 | 20 | 12 | 1 | 5,51 | 1,44 | 1,6 | 1,64 | 1,66 | |
| N | 30,0 | 500,0 | 148,0 | 89,51 | 90,41 | 92,43 | 90,33 | 93,86 | 1,82 | 0,39 | 0,33 | 0,34 | 169 | 160 | 151 | 147 | 153 | 5,3 | 4,03 | 3,75 | 3,6 | 3,53 | |
| O | 30,0 | 1004,0 | 148,0 | 78,91 | 38,92 | 17,64 | 9,906 | 1,373 | 1,89 | 0,36 | 0,37 | 0,36 | 354 | 399 | 433 | 391 | 396 | 5,4 | 1,56 | 1,78 | 2,01 | 2,13 | |
| P | 30,0 | 500,0 | 23,7 | 18,19 | 7,11 | 3,496 | 1,803 | 1,023 | 0,88 | 0,59 | 0,38 | 0,38 | 289 | 452 | 437 | 408 | 394 | 4,9 | 2,17 | 2,13 | 2,14 | 2,15 | |
| Q | 30,0 | 500,0 | 272,3 | 154,9 | 126,6 | 122,5 | 121 | 119,4 | 2,02 | 0,65 | 0,63 | 0,59 | 303 | 407 | 391 | 385 | 393 | 4,3 | 1,19 | 1,2 | 1,21 | 1,19 | |

ANÁLISIS REALIZADO EL 26/05/07 RESPECTO A LOS RESULTADOS TOC:



- Los experimentos A, B, C y D partían de la misma cantidad de contaminante 74 ppm, pero las medidas iniciales de TOC no eran iguales: 43,53; 40,83; 41,7; 41,68. Viendo esta variación se deduce que hay incertidumbre de ± 3 en la medida de TOC. Si la diferencia entre dos muestras consecutivas en el valor de TOC no es superior a ± 3 no se debería considerar que el parámetro ha variado. Esto podría dificultar mucho el próximo experimento si se escoge el producto TRICLOSAN porque se tendría que trabajar con muy pocas ppm por su baja solubilidad.
- Observando la gráfica anterior también se deduce que hay experimentos que a los 60 minutos no han alcanzado todavía el equilibrio de la reacción (Exp: G, H, O, etc). Otros, en cambio, lo alcanzan a los 30 minutos ó a los 15 minutos (Exp: F, E, P, etc.). Es interesante ver como va descendiendo el TOC. Si se alcanzase el equilibrio en cada experimento se podría predecir la cantidad de materia orgánica presente una vez finalizada la reacción.
- Haciendo algunos pequeños cálculos adicionales se observa una tendencia muy clara. Todos los experimentos en los que el ratio (H_2O_2 /Contaminante) era menor que 3,4 (Exp: A, B, E, F, N, Q) fueron muy poco efectivos en rapidez y disminución de TOC. En cambio, en los experimentos en los que el ratio (H_2O_2 /Contaminante) era mayor que 3,4 (Exp: C, D, G, H, O, P) fueron efectivos en rapidez y disminución del TOC. Los de ratio justo igual a 3,4 ni buenos ni malos.
- El experimento P es singular porque tiene el ratio (H_2O_2 /Contaminante) mayor de todos (21) y según la gráfica parece que su velocidad es baja. Esto se debe a que la cantidad de

contaminante inicial era la más pequeña (¡Sólo 23 ppm!) y es muy probable que si se hubiese tomado una muestra antes de los 15 minutos nos hubiese dado la mayor pendiente de todas). Realizando una gráfica con valores relativos se observa como cobra importancia el experimento P.



En esta gráfica se podrían considerar experimentos buenos los siguientes: P, D, C, O, J, M, B y H.

Escogiendo la intersección de los experimentos buenos según las tendencias de ambas gráficas y ordenándolos de mayor a menor pendiente respecto a la gráfica relativo, tenemos el siguiente orden: P > D > C > O > H.

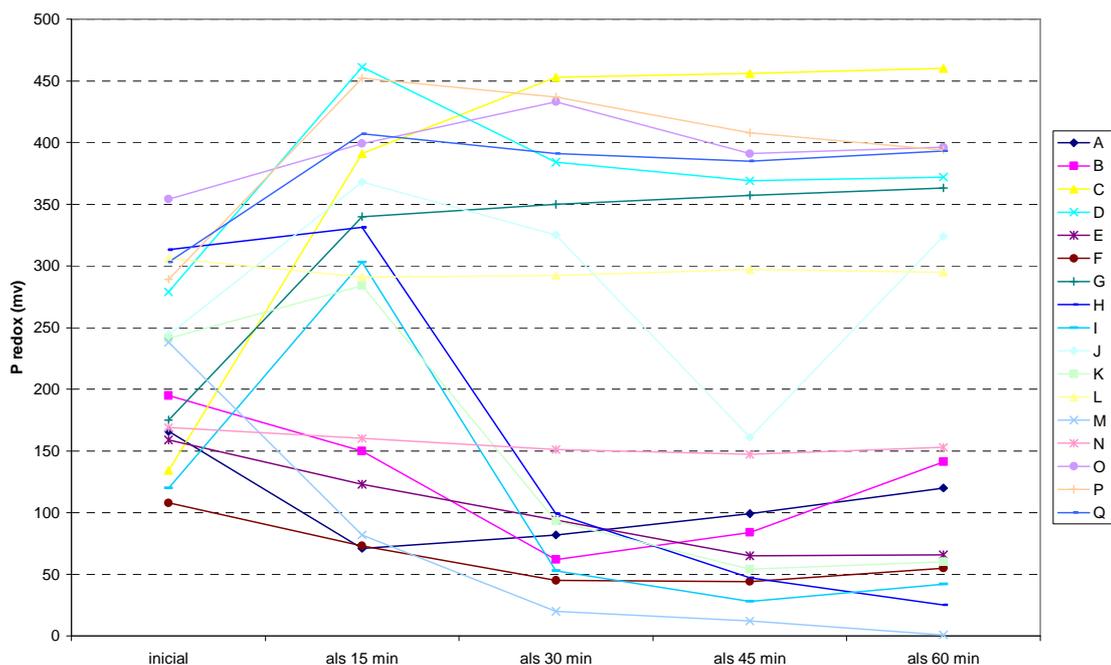
Analizando los ratios en estos experimentos tenemos que:

| EXPERIMENTO | P | D | C | O | H |
|---|------|------|------|------|-----|
| Ratio en ppm de H ₂ O ₂ /Contaminante | 21 | 10,5 | 10,8 | 6,8 | 3,6 |
| Ratio en ppm de Contaminante/Fe(II) | 0,8 | 1,5 | 7,4 | 4,9 | 4,4 |
| Ratio en ppm de H ₂ O ₂ /Fe(II) | 16,7 | 16 | 80 | 33,5 | 16 |

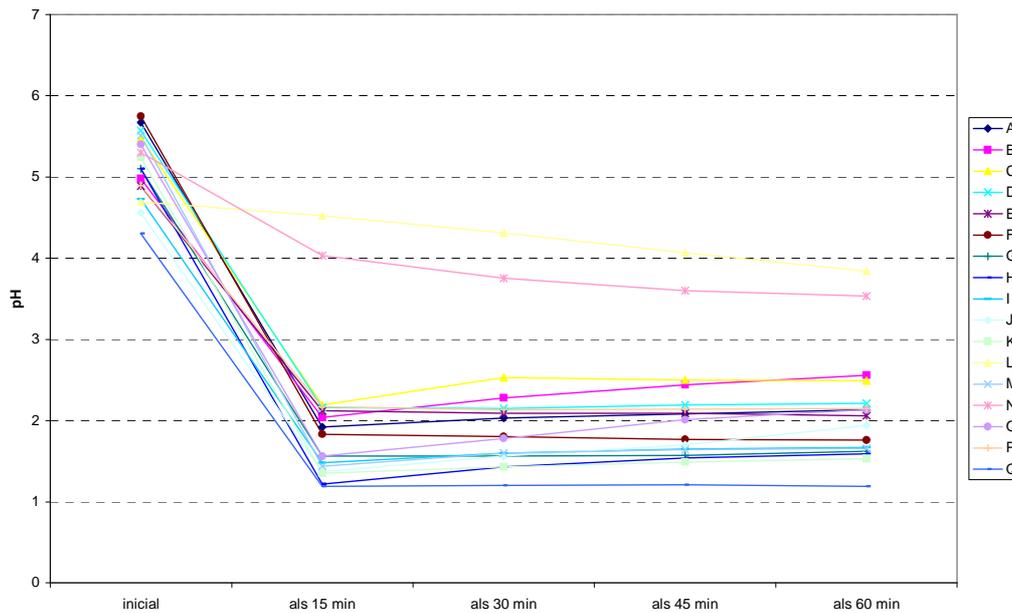
- Por el experimento L se evidencia que si no hay Fe^{2+} no se produce degradación aunque haya una buena cantidad de peróxido.
- Por el experimento N se evidencia que si no hay peróxido tampoco se produce degradación aunque se añadan sales de hierro.
- **¿por qué no experimentar con valores fijos de contaminante hasta llegar al equilibrio para averiguar el ratio (H_2O_2 /contaminante) óptimo y la cantidad mínima de catalizador necesaria y repetir después el mismo diseño de experimentos con otros valores de contaminante inicial para ver si hay diferencias en cuanto a la disminución de TOC y en cuanto a la velocidad?.**

ANÁLISIS REALIZADO EL 27/05/07 RESPECTO A OTRAS VARIABLES QUE PUEDAN SERVIR PARA EL SEGUIMIENTO DE LA REACCIÓN:

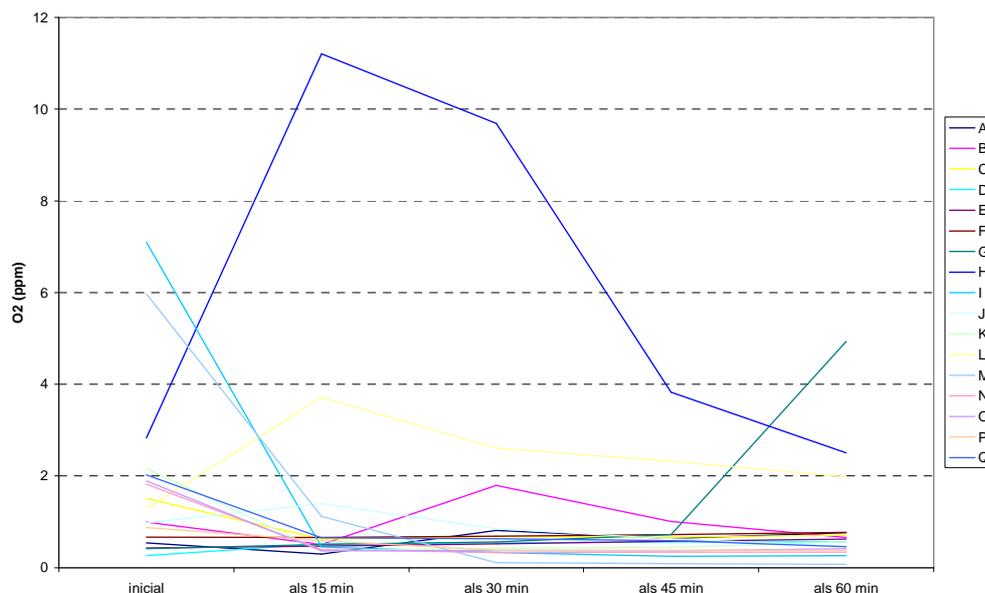
Observando la gráfica de los potenciales redox se puede decir que no es de mucha utilidad para poder decidir si se ha llegado al equilibrio de la reacción, evitando así la necesidad de tener que analizar el TOC periódicamente. Sin embargo, **hay una cosa muy curiosa: "Los experimentos que en el análisis de ayer se catalogaron como buenos (C, D, G, H, O, P) aparecen en esta gráfica con tendencias de aumento del potencial redox, dando un potencial redox final superior a 350 mV" y los experimento catalogados como malos aparecen con tendencias de disminución del potencial redox, dando potenciales finales redox inferiores a 200 mV. (EUREKA!, UNA COINCIDENCIA!).** Supongo que aumenta el P redox porque disminuye el poder de oxidación del reactivo peróxido al haber reaccionado y desaparecido de la mezcla).



En cuanto al pH tampoco nos sirve para predecir si se ha terminado o no la reacción. Se observa no obstante que en todos los experimentos (el L y el N no cuentan porque uno es sin catalizador y el otro sin peróxido) hay una disminución del pH en los 15 primeros minutos hasta valores de 1,5-2,5 aproximadamente y luego se mantiene estable. Según la bibliografía el pH óptimo es el de 3,5. (Supongo que al formarse el catión Fe^{3+} queda más estabilizado a $pH < 3$ que a $pH > 3$ por lo que quizás no vuelve a la forma reducida que interesa Fe^{2+} y entonces se requiere más catalizador de lo necesario). Se podría añadir un poco de base después de iniciar la reacción para intentar estabilizar el pH a 3-4.



En cuanto al seguimiento del O_2 , parece ser, según la gráfica, que es el parámetro de menos interés porque no se observan tendencias salvo 2 ó 3 casos muy diferentes.



PROPUESTAS PARA NUESTRO PRÓXIMO PFC SOBRE FOTO-FENTON APLICADO A LA SMT

Concentración del contaminante

El estudio sobre la oxidación fotocatalítica de la SMT se ha realizado con una carga contaminante de 50 ppm.

Se propone partir de la misma concentración (50 ppm) para comparar la velocidad y el tanto por ciento de degradación entre el foto-fenton y la oxidación fotocatalítica.

Dado que la solubilidad de la SMT es de 202 mg/L, se podrían hacer experimentos adicionales para comparar los resultados obtenidos a 50 ppm con concentraciones superiores (100 ppm, 150 ppm y 200 ppm).

Estudios a realizar

Se propone un estudio de optimización de 2 variables para la depuración de una carga contaminante de 50 ppm, en función de la cantidad del catalizador ferroso y la cantidad de reactivo peróxido.

Diseño de experimentos de 2 variables con la obtención de una superficie de respuesta. El diseño de experimentos sería competencia de la directora del proyecto Montserrat Pérez con la colaboración de Pablo Buen Estado para la obtención de la superficie de respuesta mediante algún programa o software informático específico (Ejemplo: MINITAB).

Para la elección del parámetro de respuesta podemos escoger los siguientes:

- En la oxidación fotocatalítica se produce una desulfuración total, que indica una degradación total de la SMT, pero esto no implica que haya desaparecido toda la carga orgánica porque quedan en

disolución compuestos orgánicos nitrogenados de menor peso molecular. **Si los compuestos formados tras la degradación de la SMT son biodegradables, el parámetro de respuesta escogido podría ser el % de incremento de SO_4^{2-} en disolución. (Podría ser interesante comprobar el parámetro de los sulfatos con el seguimiento de HPLC de la SMT porque el análisis SO_4^{2-} nos podría llevar a las mismas conclusiones y es un análisis más rápido y económico.** (Colaboración de Lucho en el estudio de biodegradabilidad inicial, tras la degradación de la SMT y tras la máxima degradación orgánica alcanzada).

- **Si los compuestos formados tras la degradación de la SMT no son biodegradables, el parámetro de respuesta escogido podría ser el % de disminución de TOC una vez alcanzado el equilibrio de la reacción (máxima degradación alcanzada).**

Se propone utilizar los mismos parámetros optimizados con concentraciones superiores de la SMT (100, 150 ppm) para confirmar las conclusiones. Además puede comprobarse el efecto en la velocidad de la reacción un aumento de la concentración del contaminante.

Parámetros a analizar:

Análisis como control de Calidad.

- Valoración redox (permanganometría) del peróxido dado que es un reactivo inestable que se descompone fácilmente.
- No se considera necesario el control de calidad del catalizador de hierro

Análisis del seguimiento de la reacción:

Para no tener una sobrecarga de parámetros a analizar se proponen los siguientes:

- HPLC para el seguimiento de la degradación de la SMT (Colaboración exterior).
- TOC para el seguimiento de la degradación total.
- Sulfatos para el seguimiento de la degradación de la SMT.
- Temperatura para el seguimiento de la reacción exotérmica.
- pH. No se pretende controlar el pH sino sólo establecer de que pH se parte y a que pH se llega. Sin embargo sería interesante tomar una muestra final de cada experimento y averiguar cuanta sosa se debe añadir para alcanzar un pH determinado con objeto de poder reproducir un experimento dado añadiendo la cantidad de sosa inicial adecuada para que el pH final sea el diseñado.

- Potencial redox para el seguimiento de la eficacia de la reacción (un aumento del potencial redox nos indica una disminución del poder de oxidación por haber reaccionado el peróxido)

Se descartan los parámetros:

- DQO porque tiene una equivalencia en significado con el TOC y para analizar la DQO se tarda más de 1 hora. Sin embargo una vez optimizado el proceso se puede analizar la DQO inicial y final dado que los reglamentos y límites sobre aguas residuales se establecen normalmente con la DQO.
- DBO: En nuestro caso no tiene sentido porque partimos de una carga contaminante orgánica que no se trata de bacterias.
- Nitratos: La degradación de la SMT da lugar a nitratos, compuestos inorgánicos de amonio y compuestos orgánicos nitrogenados.

PROPUESTAS PARA OTROS ESTUDIOS

Si los blancos de SMT dan problemas se propone trabajar con el Ácido acetilsalicílico o bien con algún compuesto fenólico del que ya se han realizado estudios en el EUETIB.

**Anexo IX:
Comunicación
enviada al congreso
CHISA**

Characterization of the degradation performance of wastewaters with antibiotics via AOPs

M. Pérez-Moya, J. Amigó, E. Ortega, G. Buhigas and M. Graells
 Universitat Politècnica de Catalunya, UPC, Departament d'Enginyeria Química,
 EUETIB, c/Comte d'Urgell 187, 08036Barcelona, Spain, tel. +34 4137275, fax. +34
 413 7401 email:montserrat.perez-moya@upc.edu

Introduction

AOPs may be considered a pre-treatment for certain pharmaceutical wastewaters, since the presence of biological inhibitors may seriously affect the performance of usual biological treatments. However, AOPs higher costs pose a trade-off between the extent of this expensive pre-treatment and the biodegradability condition required by standard biotreatments. High electrical energy demand and large consumption of chemical reagents are common problems among all Advanced Oxidation Process (AOP) [1]. However, combining Fenton reagent with a light source results in a low-cost process for wastewater treatment [2]. Since a photo-Fenton reaction can use photons with a wavelength close to 400 nm, and given that mixtures of Fe(III) and H₂O₂ (known as Fenton-like reactions [3]) have shown photon absorption up to 550 nm [4-5], the photo-Fenton process can also be run under solar irradiation [6-7].

The generally accepted Fenton reaction mechanism assumes that hydroxyl radicals OH• are produced by interaction of H₂O₂ with ferrous salts (Equation 1). Additionally, Fe(III) can react with H₂O₂ in the so-called Fenton-like reaction (Equations 2-3), regenerating Fe(II) and thus supporting the Fenton process [3]:



The degradation rate of the organic pollutants by the Fenton reaction may increase when an irradiation source is present. The positive effect of irradiation on the degradation rate is due to the photoreduction of Fe(III) to Fe(II) ions, a step that produces new OH• radicals and regenerates Fe(II) ions, which in turn can further react with more H₂O₂ molecules. The photoreduction of Fe(III) follows equation (4)



with Fe(OH)₂⁺ being the dominant Fe(III) species in solution at pH 2-3. Recently, it has been proven that the irradiation of Fe(III)+H₂O₂, also called Fenton-like reaction, enhances the reaction rate of oxidant production through the involvement of high valence Fe intermediates responsible for the direct attack to organic matter [5,8]. Absorption of visible light by the complex formed by Fe(III) and H₂O₂ seems to be the cause of the formation of such high valence Fe-based oxidants.

Pharmaceuticals have been consumed for many decades. Recently, active compounds such as analgesics, antibiotics, steroids, hormones, etc. have been detected in several public water systems in European countries, as well as in USA and Australia [9]. However, only few studies on their environmental and health effects have been conducted.

Among pharmaceutically active compounds, antibiotics alter the normal flora, contributing to increased susceptibility to bacterial infection. Moreover, antibiotic abuse may help the development of antibiotic-resistant bacteria [10], and several of them are resistant to conventional chemical and biological treatment methods.

Removing these compounds is of increasing interest. As Fenton reagent photochemically enhanced have revealed effective in mineralization of refractory contaminants, they can be considered as a good alternative to conventional methods [11-12].

The present study addresses the application of advanced oxidation processes (AOPs), specifically the Fenton and Photo-Fenton reactions, for the degradation of sulfamethazine (SMT). This antibiotic belongs to the group of heterocyclic sulfonamides and it is widely used as antibacterial drug in medicine and veterinary.

Design of experiments (DOE) was used to plan the characterization of the degree of degradation attained (in term of total organic carbon, TOC) as well as the evolution of residual hydrogen peroxide.

Experimental

Analytical grade sulfamethazine was purchased from Sigma-Aldrich and was diluted to $1.88 \cdot 10^{-4}$ M. Analytical grade hydrogen peroxide and heptahydrated ferrous sulfate were purchased from Panreac and Sigma-Aldrich, respectively, and were used as received. The rest of the chemicals used were, at least, of reagent grade. Solutions were prepared with deionized water obtained from a Millipore Mili-Q system.

Experiments were conducted in a thermostatic cylindrical 1000 mL Pyrex cell. The reaction mixture inside the cell, consisting of 500 mL of sulfamethazine solution and the given amount of Fenton reagent, was continuously stirred with a magnetic bar. Temperature was maintained at $18 \pm 1^\circ\text{C}$. Sulfamethazine solution pH is 3 after adding heptahydrated ferrous sulfate and hydrogen peroxide. Temperature and pH were on-line measured to ensure they kept constant along all the reaction time.

The experiments were carried out with a sunlight lamp (Ultra-Vitalux®, Osram, 300 W). The Ultra-Vitalux®, sunlamp consists of a quartz burner and a tungsten filament which are blended in such a way that the radiation emitted is practically the same as natural sun radiation. The spectral radiation presents wavelengths close to 400 nm (appropriate for photo-Fenton reaction) and up to 550 nm (useful for the Fenton-like reaction). The reactor was irradiated from the top and there were 15 cm between the lamp and the liquid surface as shown in Figure 1.

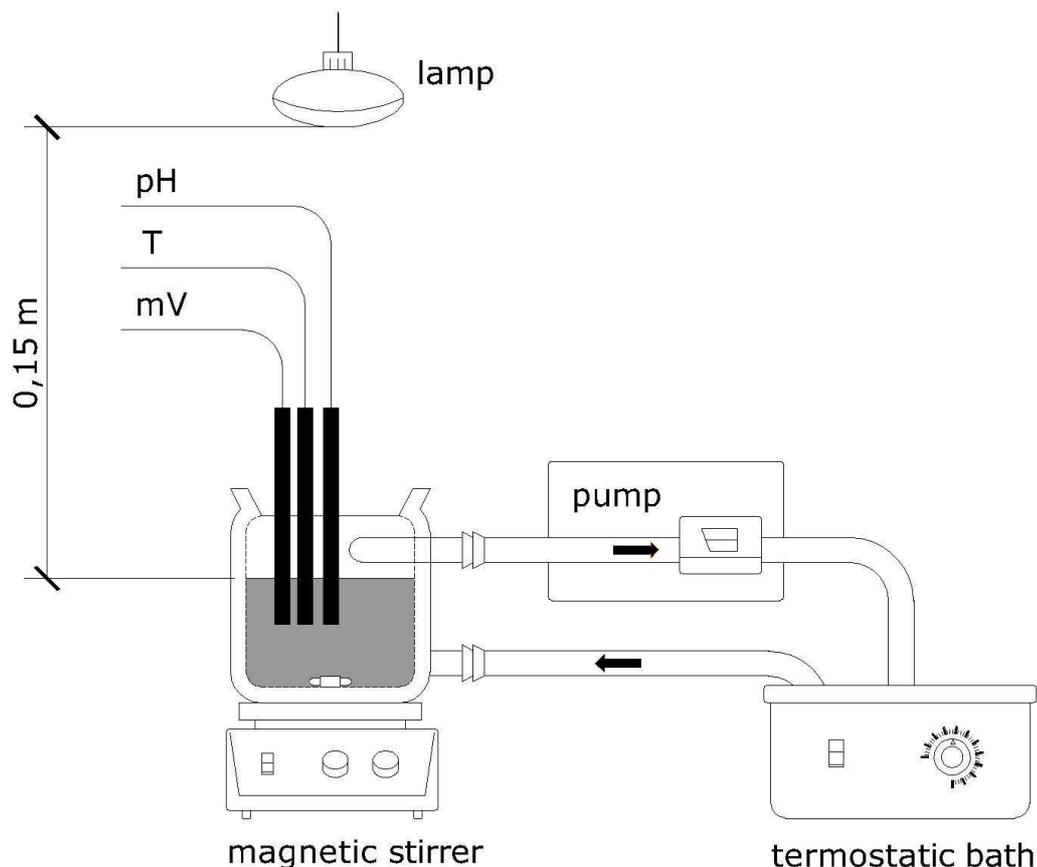


Figure 1. Schematic representation of the experimental set up.

Total organic carbon (TOC) of samples was determined with a Shimadzu 5000 TOC analyzer. The residual hydrogen peroxide concentration was determined spectrophotometrically after reaction with ammonium metavanadate [13].

The HPLC-UV/DAD method was used to determine Sulphametazine concentration, using an Agilent 1100 series chromatographic system (Darmstadt, Germany) equipped with an on-line mobile phase degasser, a quaternary pump, an auto-sampler with Peltier sample thermostat, a column oven and a UV-diode array detector. The chromatographic conditions and data analysis were performed using the Agilent Chem-Station (rev.B.01.03) software. The chromatographic conditions were a 5 μm 0.46x25 cm C18 Spherisorb ODS analytical column (Waters, Milford, USA), maintained at 15 °C, and the diode array detector set at 270 nm. Samples, injected by the auto-sampler, were eluted by a water (milli Q grade)/acetonitrile (J.T. Baker ultragradient HPLC grade, part no 9017) 55/45 mixture, at a flow rate of 1.5 ml/min. The retention time of sulphametazine under these conditions was 2.2 min.

For the sulphametazine quantification, a duplicate four level calibration curve (range 5 ppm-50 ppm) was used. The calibration curve was performed from working solutions prepared at 5, 10, 25 and 50 ppm of sulphametazine standard (Sigma-Aldrich, part no S-6256), and injected in the chromatographic system. The calibration curve was constructed plotting the SMZ chromatographic peak area versus the spiked

concentration of the calibration sample. A linear least-square regression line was calculated. In order to assess the linearity, a linear-regression analysis (ANOVA with a statistical significance of 0.05), including a lack-of-fit (LOF) test (statistical significance of 0.1) was performed, using the SPSS 15.0.1 software (SPSS Inc., 1989-2006). The value of the determination coefficient (r^2) was 0.9999, and the p-value for ANOVA and LOF test was <0.05 and 0.758, respectively. The intraday and interday coefficients of variation, as well as the accuracy (percent error of the spiked concentration), were found to be less than 10%.

DOE is used in this work to plan the measurements for evaluating the influence of Fenton reagents on the degradation of organic matter, determined as total organic carbon (TOC).

Central composite design with star points was applied to determine the influence of Fenton reagent loads (Fe (II), H_2O_2) in the TOC evolution. Certainly, other experimental conditions, mainly wavelength and net radiative flux, also have an effect on the degradation performance. The inclusion of these conditions as variables in the DOE would increase the demand of experimental data. The present research takes these conditions as a pre-established experimental setting aimed at addressing the study of the influence of chemical reactants in an affordable way.

Each variable assumes two levels (low and high), which correspond to the concentration range of every variable specified in Table 1, including three central points for statistical validity and star points at -1.41 to +1.41. Hence, the associated system response is given by the TOC concentration of the system after different reaction times.

Results and Discussion

Several blank experiments were first performed aimed at establishing that the treatment effectiveness is due to Fenton reagent enhanced with the appropriate light radiation. In figure 2, TOC evolution was plotted as a function of reaction time, under different experimental conditions. In all the cases the initial condition were 50 mg l⁻¹ SMT, pH = 3,0 ± 0.5, Temperature = 18 - 19 °C. When the specific experiment requires Fenton reactive the loads used were [H_2O_2] = 600 ppm, [Fe (II)] = 50 ppm and the appropriate light radiation to enhance Fenton reactive system.

Clearly, Fenton reaction without light or just photolysis is less successful than the photo-Fenton process.

A recent work addressing photocatalytic degradation of SMT reports the complete degradation of 450 mL of a solution (50 mg l⁻¹) of this organic compound after 4 h [9]. In the preliminary photo-Fenton experiments, HPLC analysis reveals no presence of SMT after 2 minutes of reaction. Similar results are reached without light irradiation. Thus, Fenton reagents are fast attacking the SMT structure. However, the HPLC analysis of blank experiments lacking one of the Fenton reagents (H_2O_2 , Fe) indicates the presence of SMT along all the reaction span, thus revealing no significant degradation.

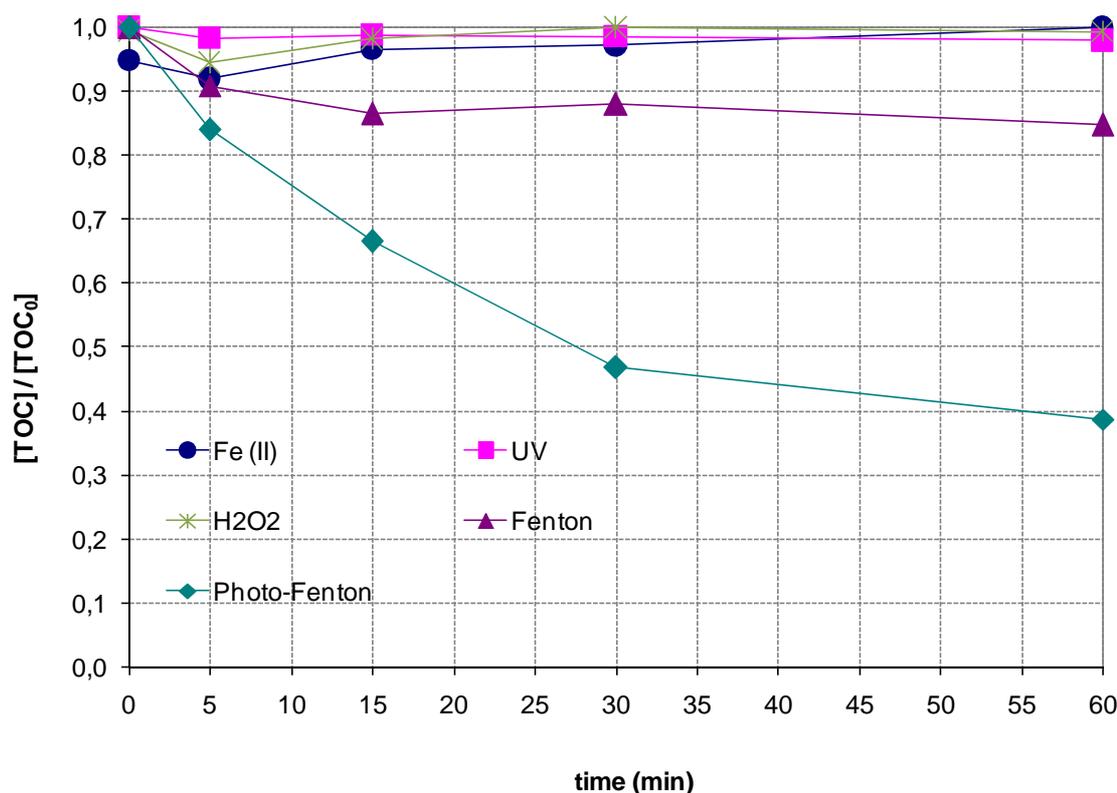


Figure 2. TOC evolution as function of reaction time for several blank experiments.

Figure 3 shows the evolution of TOC and H_2O_2 concentration along the Fenton and the Photo-Fenton treatments investigated in this work. Simultaneous Fenton, Fenton-like and photo-Fenton reactions were performed on 50 mg L^{-1} SMT ($\text{TOC} = 30 \pm 2$ ppm; $\text{pH} = 3,0 \pm 0,5$, Temperature = $18 - 19$ °C). The Fenton reagent loads were: $[\text{H}_2\text{O}_2] = 600$ ppm and $[\text{Fe}(\text{II})] = 50$ ppm. In both cases

In both experiments SMT elimination is complete in just few minutes. In contrast, 1 hour reaction time does not ensure the total organic carbon (TOC) removal in any of the studied treatments. Thus, the residual TOC may be attributed to the organic intermediates produced, and it is important to study their implication in the system. Figure 3 also shows that the residual hydrogen peroxide decrease is especially fast for short reaction times. The residual H_2O_2 is also closely related with a proper degradation evolution.

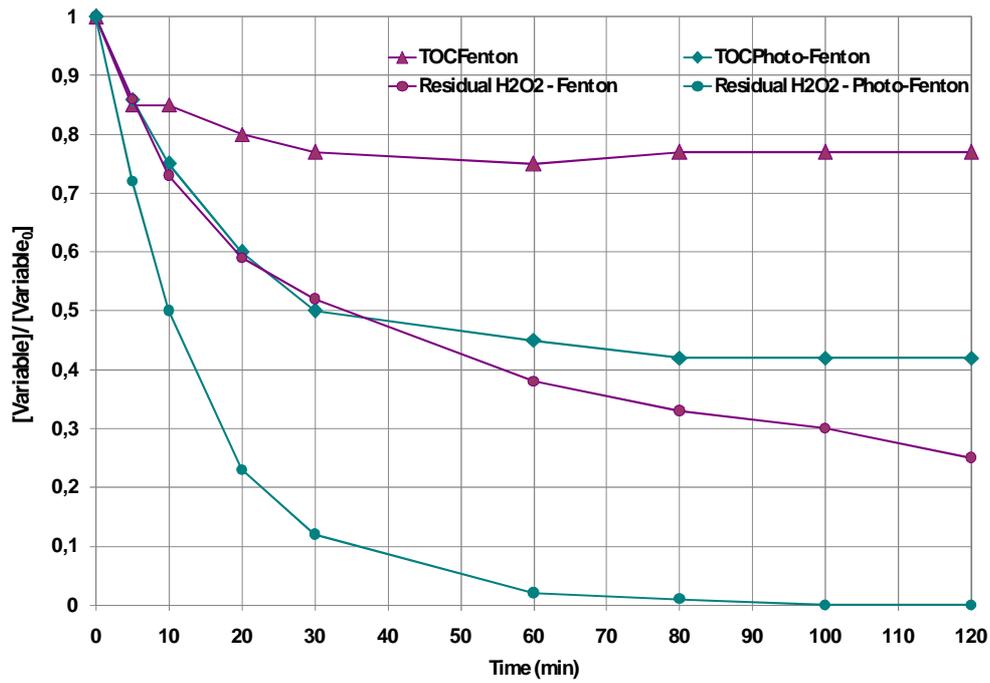


Figure 3. TOC and H₂O₂ evolution along the reaction systems.

Table 1 summarizes the different assays with the associated TOC concentration of the system after different reaction times.

Table 1. Factorial experimental design of SMT treated by Fenton reagent and enhanced with light radiation.

| Assays | Codified values | | Variable levels | | % TOC reduction after | |
|--------|----------------------------------|----------|---|-------------------|-----------------------|-----------|
| | [H ₂ O ₂] | [Fe(II)] | [H ₂ O ₂] (ppm) | [Fe(II)] (ppm) | 30 min | 60 min |
| A | -1 | -1 | 300 | 20 | 18 | 41 |
| B | 1 | -1 | 900 | 20 | 26 | 47 |
| C | -1 | 1 | 300 | 60 | 44 | 51 |
| D | 1 | 1 | 900 | 60 | 31 | 45 |
| E | 0 | 0 | 600 | 40 | 44 | 56 |
| F | 0 | 0 | 600 | 40 | 44 | 56 |
| G | 0 | 0 | 600 | 40 | 42 | 55 |
| H | -1.41 | 0 | 176 | 40 | 38 | 45 |
| I | 1.41 | 0 | 1024 | 40 | 45 | 56 |
| J | 0 | -1.41 | 600 | 12 | 0,4 | 12 |
| K | 0 | 1.41 | 600 | 68 | 44 | 54 |

The complex degradation mechanism is studied at its initial stage, far from the equilibrium, and is assumed to follow a pseudo-first order kinetics regarding only the SMT, TOC and H₂O₂ disappearance. Figure 4 shows the plot of negative log ([variable]/[variable₀]) versus time in order to calculate the first order rate constant k. The constant value, k, is providing an idea of the degradation velocity related with the selected experimental condition.

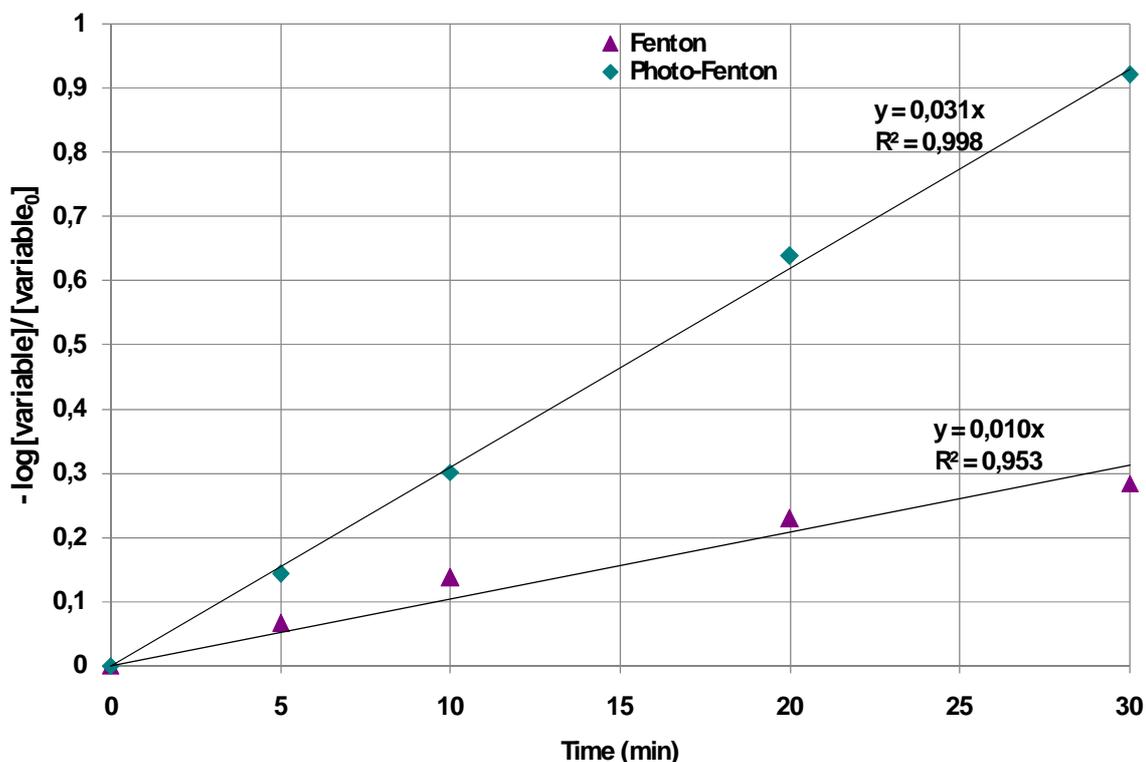


Figure 4. Residual hydrogen peroxide evolution for different degradation systems.

The rate constant k for Photo-Fenton reaction system is three times the value obtained for the Fenton system. Thus, the light irradiation is tripling the efficiency of the treatment for the same reagent load.

Using the same approach to the reality, assuming first order kinetic during the first 30 minutes of reaction is possible to analyze the effect of the iron load. Figure 5 shows the k values for different experimental conditions. In all the assays the hydrogen peroxide load was 600 ppm and the only modified condition was the iron load: 12, 40, 50 and 60 ppm.

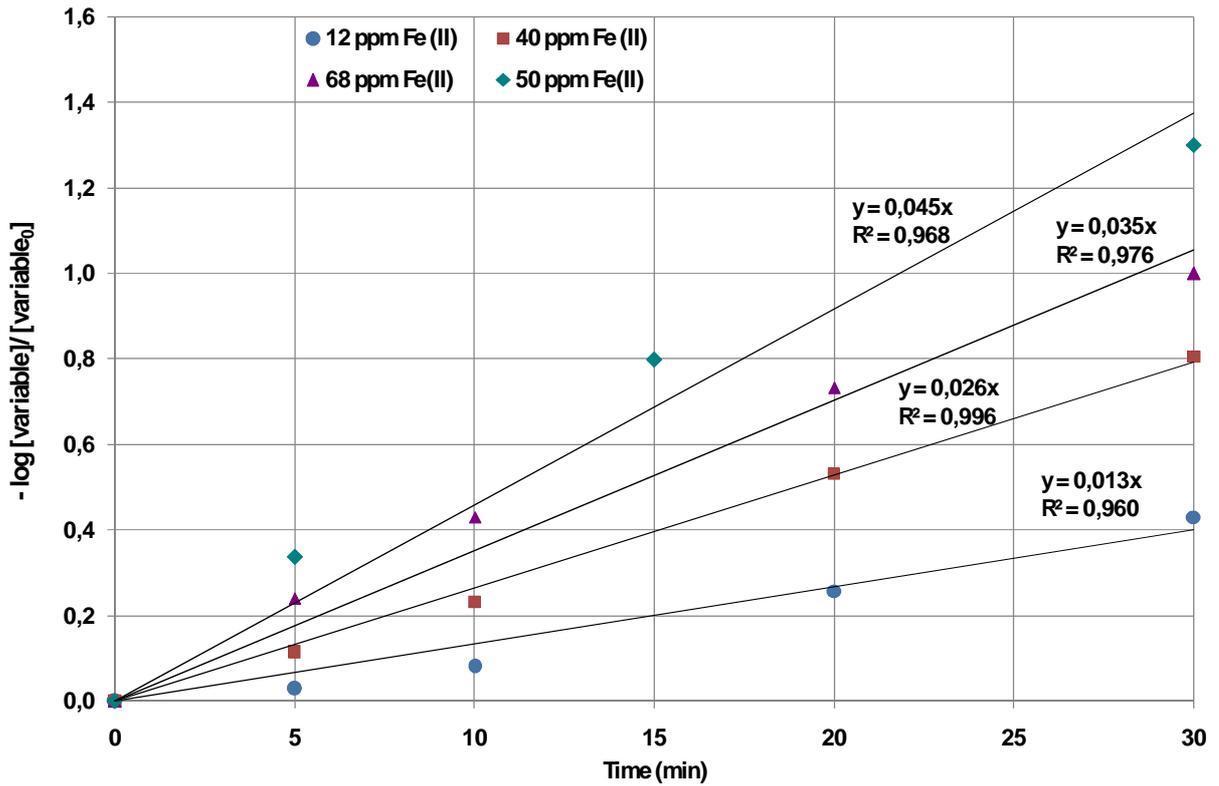


Figure 5. Residual hydrogen peroxide evolution for different Photo-Fenton degradation processes studied. $[\text{variable}_0] = [\text{H}_2\text{O}_2]_0 = 600$ ppm.

For the studied span $[\text{Fe(II)}] = 50$ ppm leads to a higher k value, which implies fast velocity of TOC reduction during the first 30 minutes reaction. High iron concentration does not increase the reaction velocity as clearly show the minor k value associated to the experiment where $[\text{Fe(II)}] = 68$ ppm.

The role of hydrogen peroxide was also analyzed, in figure 6 illustrates experiments with the same iron load, 40 ppm, for different hydrogen peroxide loads: 176 ppm, 600 ppm, 1024 ppm.

Hydrogen peroxide minimum value, 176 ppm, leads to highest reaction velocity. As other studies confirm and excess of hydrogen peroxide load decrease the efficiency of the system. The detrimental effect of large H_2O_2 concentrations, is based on the fact that hydrogen peroxide could react with the OH radicals as show the following equation (Equation 5)



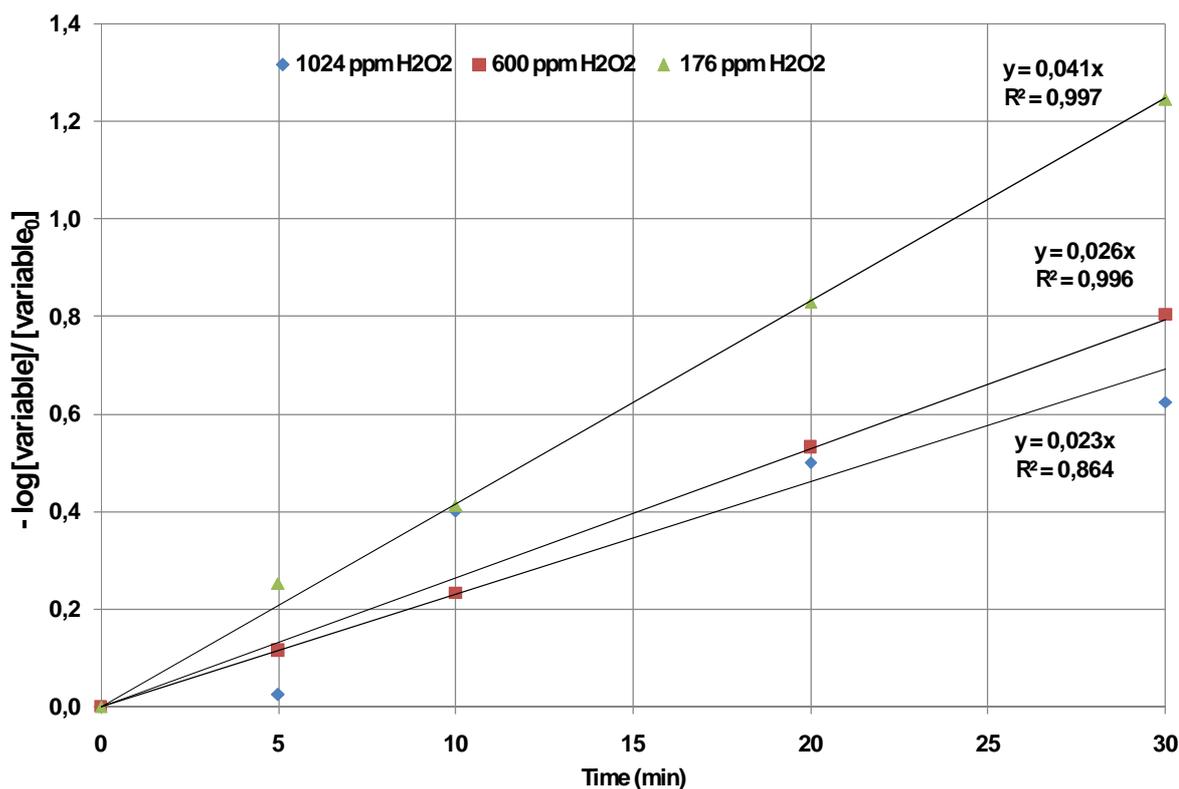


Figure 6. The studied variable is the residual hydrogen peroxide for different Photo-Fenton degradation processes studied with $[\text{Fe(II)}] = 40 \text{ ppm}$.

Conclusions

The Fenton photo-assisted treatment process has demonstrated to be effective in the degradation of sulfamethazine (SMT). The experimental data has been obtained for a series of conditions arranged under a design of experiments scheme and practical operational conclusions have been obtained.

For the SMT concentration studied results appropriate reagent load of: which have been obtained producing TOC reduction rates of 60 % when the treatment was allowed to proceed during 45 minutes. After two minutes reaction time the system clearly evolved to total SMT remediation, HPLC analysis do not detect SMT neither for Fenton and for Fenton, Fenton-like and Photo-Fenton reaction system.

Iron loads around 50 ppm lead to faster TOC degradation in the studied span.

The approach to a first-order kinetic at early reaction times of the studied degradation process has been undertaken just in order to study the efficiency of the Photo-Fenton to reduce SMT load and to estimate proper Fenton reagents. However, the approach is not useful for situations close to the equilibrium.

Even results show that SMT is in a few minutes given its by products, detailed toxicity studies are required for guaranteeing the biodegradability of partially treated wastewaters with antibiotics, unless total mineralization will be achieved.

Acknowledgements

The authors would like to thank the Spanish Ministerio de Educación y Ciencia for supporting the present research, which is part of the activities developed under the Project DPI2006-0567.

References

- [1] Bauer R.; and Fallmann, H. *Res.Chem. Intermed.* 23 (1997) 341.
- [2] Pérez, M.; Torrades, F.; Domènech X. and Peral, J. *J. Chem. Technol. Biotechnol.*, 77/5 (2002) 525.
- [3] Pignatello, J.J. *Environ. Sci. Technol.* 26 (1992) 944.
- [4] Sun, Y.; Pignatello, J.J. *Environ. Sci. Technol.* 27(1993) 304.
- [5] Pignatello, J.J.; Liu, D. and Huston, P. *Environ. Sci. Technol.* 33 (1999) 1832.
- [6] Safarzadeh-Amiri, A.; Bolton, J.R.; and Cater, S.R. *J. Adv. Oxid.Technol.* 1 (1996) 18.
- [7] Pérez, M.; Torrades, F.; García Hortal, J.A.; Domènech, X.; and Peral, J.; *Appl. Catal. B:Environ.*, 36 (2002) 63.
- [8] Bossmann, S.H.; Oliveros, E.; Göb, S.; Siegwart, S.; Dahlen, E.P.; Payawan, L.; Straub, M.; Wörner, M. and Braun, A.M. *J. Phys. Chem.* 102 (1998) 5542.
- [9] Kaniou, S., Pitarakis, K., Barlagianni, I., Poullos, I, *Chemosphere*, 60 (2005), 372-380.
- [10] Palominos, R., Freer, J. Mondaca M.A. and Mansilla H.D., *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry*, 193, Issues 2-3, 2008, 139-145.
- [11] Pera-Titus, M.; García-Molina, V.; Baños, M.A.; Jiménez, J.; Esplugas, S. *Appl. Catal. B:Environ.*, 2004, 47, 219-256.
- [12] Raja, P.; Bozzi, A.; Jardim, W.F.; Mascolo, G.; Renganathan, R.; Kiwi, J. *Appl. Catal. B:Environ.*, 2005, 59, 249-257.
- [13] Nogueira, R.F.P.; Oliveira, M.C.; and Paterlini, W.C. *Talanta*, 66 (2005). 86.

**Anexo X:
Comunicación
enviada al congreso
Mediterráneo**

MODELLING APPROACH TO SULFAMETHAZINE DEGRADATION BY PHOTO-FENTON PROCESS

M. Pérez-Moya^{1*}, M. Graells¹, P. Buenestado², J. Amigó¹, E. Ortega¹, G. Buhigas¹ and H.D. Mansilla³

¹ Departament d'Enginyeria Química, ² Departament de Matemàtica Aplicada III,

EUETI de Barcelona, UPC, c/Comte d'Urgell, 187, 08036 Barcelona, Spain

³ Departamento de Química Orgánica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad de Concepción, Concepción, Chile

* corresponding author: phone:+34 93 413 72 75, fax:+34 413 74 01 and email: montserrat.perez-moya@upc.edu,

Scientific topic: Advanced Techniques for Waste Treatment

The simultaneous Fenton, Fenton-Like and Photo-Fenton reactions were found to be very efficient in the mineralization of the antibiotic Sulfamethazine (SMT) in aqueous solutions (1000 mL, 50 mg·L⁻¹). The degradation process was monitored by the removal of total organic carbon (TOC).

Several blank experiments were performed to ensure that the treatment effectiveness is due to Fenton reagent enhanced with the appropriate light radiation. Clearly, Fenton reaction without light or just photolysis is less successful than the photo-Fenton process.

Hence, a factorial experimental design (2²) was applied to evaluate the effect of the Fenton reagent concentrations in the SMT antibiotic degradation. Variables studied were the iron and hydrogen peroxide concentrations, varying in the ranges 20-60 mg·L⁻¹ and 300-900 mg·L⁻¹ respectively.

So as to describe this behavior, two models were fit to degradation data, which are later compared and discussed. As previews studies show, a second order polynomial model, equation 1, may be a questionable approach an alternative model [1]. For this reason, Hoerl equation is proposed and validated aimed at a better empirical fitting to the performance of the system. The classical Hoerl model, equation 2, was designed for a maximum fitting flexibility, while preserving the chance of linearization [2].

$$f(\mathbf{x}) = a + \sum b_i x_i + \sum c_i x_i^2 + \sum \sum d_{ij} x_i x_j \quad (1)$$

$$f(\mathbf{x}) = \prod_i a_i x_i^{b_i} e^{c_i x_i} = A \prod_i x_i^{b_i} e^{c_i x_i} \quad (2)$$

being $x_1 \square [\text{H}_2\text{O}_2]$; $x_2 \square [\text{Fe(II)}]$; $f(\mathbf{x}) \square [\text{TOC}]$

Table 1. Coefficients of the models for different reaction times of the SMT degradation under Fenton reagent enhanced with light radiation and corresponding statistical indexes (Sum of Squares Error, R² and Adj-R²).

| | Time (min) | A | b₁ | c₁ | b₂ | c₂ | d₁₂ | SSE | R² | Adj- R² |
|--------------|-----------------------|----------|-----------------------|------------------------|----------------------|-------------------------|-----------------------|------------|----------------------|-------------------------------|
| Quadratic | 30 | 1.07 | -2.4·10 ⁻⁴ | -1.4·10 ⁻⁷ | - 0,01 | 4.4·10 ⁻⁵ | 7.2·10 ⁻⁶ | 0.070 | 0.612 | 0.22 |
| model (1) | 60 | 0.88 | -3.2·10 ⁻⁴ | 9.6 · 10 ⁻⁸ | - 0,01 | 5.1·10 ⁻⁵ | 2.4·10 ⁻⁶ | 0.086 | 0.482 | - |
| Hoerl | 30 | 18.56 | -0.22 | 3.8 · 10 ⁻⁴ | - 0.80 | 1.60 · 10 ⁻² | - | 0.022 | 0.879 | 0.80 |
| model (2) | 60 | 127.96 | -0.42 | 6.8 · 10 ⁻⁴ | - 1.26 | 3.00 · 10 ⁻² | - | 0.012 | 0.927 | 0.90 |

Results in Table 1 show that the model based on the Hoerl equation produces a much better fitting to the experimental data than the usual quadratic model. This is certain under an absolute criterion such as the residual values as well as a relative measure such as the adjusted coefficient of multiple determination (Adj-R²).

[1] M. Pérez-Moya, M. Graells, P. Buenestado, H.D. Mansilla, *Appl. Catal. B: Environ.* 2008, In Press.

[2] Daniel, Cuthbert. *Fitting equations to data; Computer analysis of multifactor data*; John Wiley and sons: New York, 2nd ed. 1980.

**Anexo XI:
Comunicación
enviada al congreso
SPEA5**

Characterization of the Degradation Performance of the Sulfamethazine Antibiotic by Photo-Fenton Process

M. Pérez-Moya,^{a*} M. Graells,^a G. Castells^b, J. Amigó,^a E. Ortega,^a G. Buhigas,^a H. Mansilla^c

^a Departament d'Enginyeria Química, EUETIB, Universitat Politècnica de Catalunya, c/Comte d'Urgell 187, 08036 Barcelona, Spain (email:montserrat.perez-moya@upc.edu)

^b Departament de Farmacologia, Terapèutica i Toxicologia, Facultat de Veterinària, Universitat Autònoma de Barcelona, 08193 Bellaterra, Spain.

^c Facultad de Ciencias Químicas, Universidad de Concepción, Concepción, Chile.

Advanced Oxidation Processes (AOPs) have demonstrated to be effective for contamination remediation of wastewater involving pharmaceutically active compounds¹⁻³

The recent concern about the degradation of pharmaceutical compounds, which have been consumed for many decades, is due to their presence in several public water systems in Europe, USA and Australia¹. Specifically, the presence of active antibiotics in water alters the normal flora and allows the development of antibiotic-resistant bacteria². Thus, the mineralization of these contaminants with conventional methods may not be effective. Conversely, pre or post AOP treatments may usually result in an interesting alternative to efficiently remediate the water contamination.

Sulfamethazine (SMT) is an antibiotic that belongs to the group of heterocyclic sulfonamides and it is widely used as antibacterial drug in medicine and veterinary. A recent work addressing photocatalytic degradation of SMT reports a quantitative degradation of 50 mg l⁻¹ solution of this organic compound after 4 h¹. In the preliminary experiments performed the photo-Fenton reaction achieves the total elimination of the same solution in less than 5 minutes, as the HPLC analysis reveals in figure 1.

Figure 1 shows the evolution of SMT, TOC and H₂O₂ concentration along the Photo-Fenton treatment investigated in this work. Simultaneous Fenton, Fenton-like and photo-Fenton reactions were performed on 50 mg l⁻¹ SMT (TOC = 30 ± 2 ppm; pH = 3,0 ± 0.5, Temperature = 18 - 19 °C). The Fenton reagent loads were: [H₂O₂] = 600 ppm and [Fe (II)] = 50 ppm.

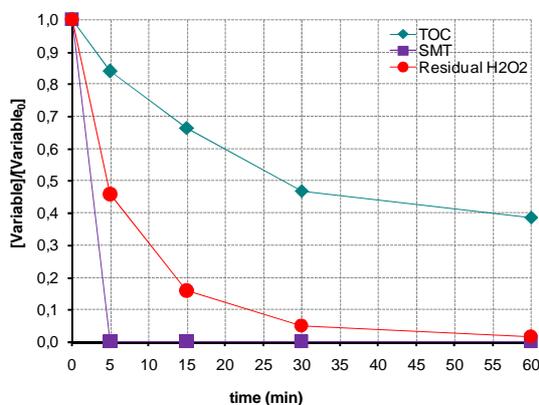


Figure 1. sulfamethazine, TOC and H₂O₂ evolution.

Figure 1 also shows that SMT elimination is complete in just few minutes. In contrast, 1 hour reaction time does not ensure the total organic carbon (TOC) removal. Thus, the residual TOC may be attributed to the organic intermediates produced, and it is important to study their implication in the system. Figure 1 also shows that the residual hydrogen peroxide decrease is especially fast for short reaction times. The residual H_2O_2 was also determined to ensure its residual value would not interfere in the biological tests performed.

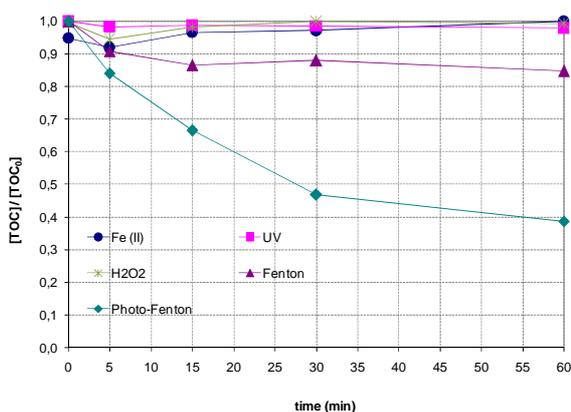


Figure 2. TOC evolution as function of reaction time.

Several blank experiments were performed aimed at establishing that the treatment effectiveness is due to Fenton reagent enhanced with the appropriate light radiation. In figure 2, TOC evolution was plotted as a function of reaction time, under different experimental conditions. In all the cases the initial condition were 50 mg l^{-1} SMT, $\text{pH} = 3,0 \pm 0,5$, Temperature = $18 - 19 \text{ }^\circ\text{C}$. When the specific experiment requires Fenton reactive the loads used were $[\text{H}_2\text{O}_2] = 600 \text{ ppm}$, $[\text{Fe (II)}] = 50 \text{ ppm}$ and the appropriate light radiation to enhance Fenton reactive system.

Clearly, Fenton reaction without light or just photolysis is less successful than the photo-Fenton process.

Subsequently, it is necessary to study the proper experimental condition in Photo-Fenton system to reduce SMT antibiotic and its byproducts. With the goal to evaluate the effect of the Fenton reagent concentrations in the SMT antibiotic degradation, a factorial experimental design (2^2) was applied. Variables studied were the iron and hydrogen peroxide concentrations, varying in the ranges $20\text{-}60 \text{ mg}\cdot\text{L}^{-1}$ and $300\text{-}900 \text{ mg}\cdot\text{L}^{-1}$ respectively. The different operating conditions are summarized in table 1.

Table 1 Factorial experimental design of SMT treated by Fenton and Photo-Fenton reactions.

| Assays | Codified values | | Variable levels | | % TOC reduction after | |
|--------|----------------------------------|----------|---|-------------------|-----------------------|-----------|
| | [H ₂ O ₂] | [Fe(II)] | [H ₂ O ₂] (ppm) | [Fe(II)] (ppm) | 30 min | 60 min |
| A | -1 | -1 | 300 | 20 | 18 | 41 |
| B | 1 | -1 | 900 | 20 | 26 | 47 |
| C | -1 | 1 | 300 | 60 | 44 | 51 |
| D | 1 | 1 | 900 | 60 | 31 | 45 |
| E | 0 | 0 | 600 | 40 | 44 | 56 |
| F | 0 | 0 | 600 | 40 | 44 | 56 |
| G | 0 | 0 | 600 | 40 | 42 | 55 |
| H | -1.41 | 0 | 176 | 40 | 38 | 45 |
| I | 1.41 | 0 | 1024 | 40 | 45 | 56 |
| J | 0 | -1.41 | 600 | 12 | 0,4 | 12 |
| K | 0 | 1.41 | 600 | 68 | 44 | 54 |

The Design of experiments (DOE) was used to plan the characterization of the degree of degradation attained (in terms of total organic carbon, TOC) as well as the SMT elimination levels. Under all the experimental conditions HPLC analysis reveals total elimination of SMT after a short reaction time. In contrast, the influence of a right Fenton reagent ratio is evident in terms of TOC degradation. It seems clear the existence of different reaction pathways in relation with the Fenton reagent ratios. HPLC also ensure diverse byproducts as function of the experimental conditions.

HPLC results may help to study a possible kinetic model for the degradation process. The study of the antibacterial activity of the intermediates related to the antibiotic activity of the studied sample is also required to complete this study.

If the only target is to remove the sulfamethazine antibiotic the Fenton reaction without light enhancement of the process is revealed successful enough. However, almost all of the TOC concentration is kept unchanged and the toxicity of the sample is not abated.

Once again, the chemical and biological test results of the samples are clearly dependent on the Fenton reagent ratios employed. Thus, the treatment goal will ascertain the more appropriate reaction conditions.

Results show that the selection of the correct Fenton reagent load is an important aspect that should be considered during the treatment process. This decision should be made regarding the goal of the process: total antibiotic mineralization, total toxicity abatement, or just guaranteeing of the biodegradability of partially treated wastewaters with antibiotics.

Acknowledgements

The authors would like to thank the Spanish Ministerio de Educación y Ciencia for supporting the present research, which is part of the activities developed under the Project DPI2006-0567.

Bibliography

- [1] S. Kaniou, K. Pitarakis, I. Barlagianni, I. Poulis, *Chemosphere*, 60 (2005), 372-380.
- [2] R. A. Palominos, A. Mora, M. A. Mondaca, M. Pérez-Moya, H. D. Mansilla, *J. of Hazard. Mater.* (2007), doi:10.1016/j.jhazmat.2008.01.117
- [3] P. Raja, A. Bozzi, W.F. Jardim, G. Mascolo, R. Renganathan, J. Kiwi, *Appl. Catal. B: Environ.*, 2005, 59, 249-257.

