Base teórica de Geoquímica Isotópica

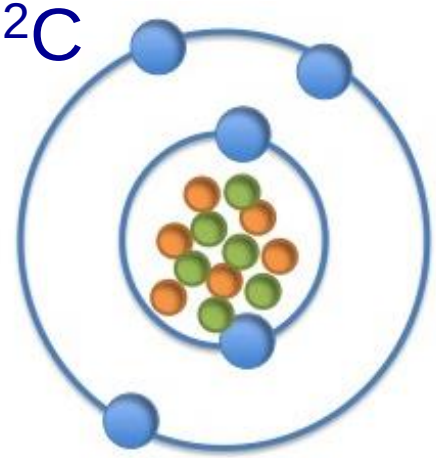
Albert Soler Gil
Director del grupo de Mineralogia Aplicada y Medioambiente

Grup de Mineralogia Aplicada i Medi Ambent (MAiMA)
Departament de Mineralogia, Petrologia i Geologia Aplicada
Facultat de Ciències de la Terra, Universitat de Barcelona
http://www.ub.edu/minegeo

Los isótopos de un elemento son átomos con igual número atómico pero distinta masa atómica.

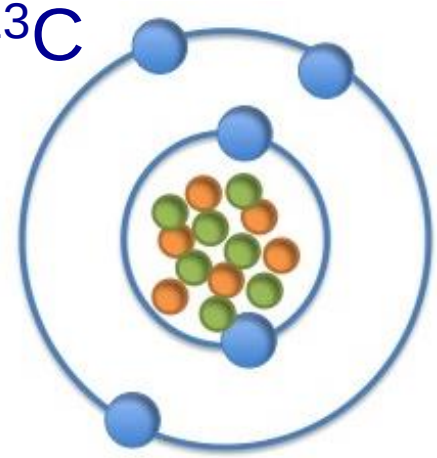
Ejemplo carbono:

^{12}C



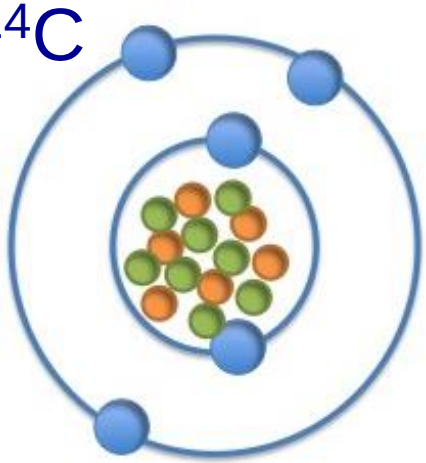
Carbono
6 protones
6 neutrones
Número atómico = 6
Masa = 6+6 = 12

^{13}C



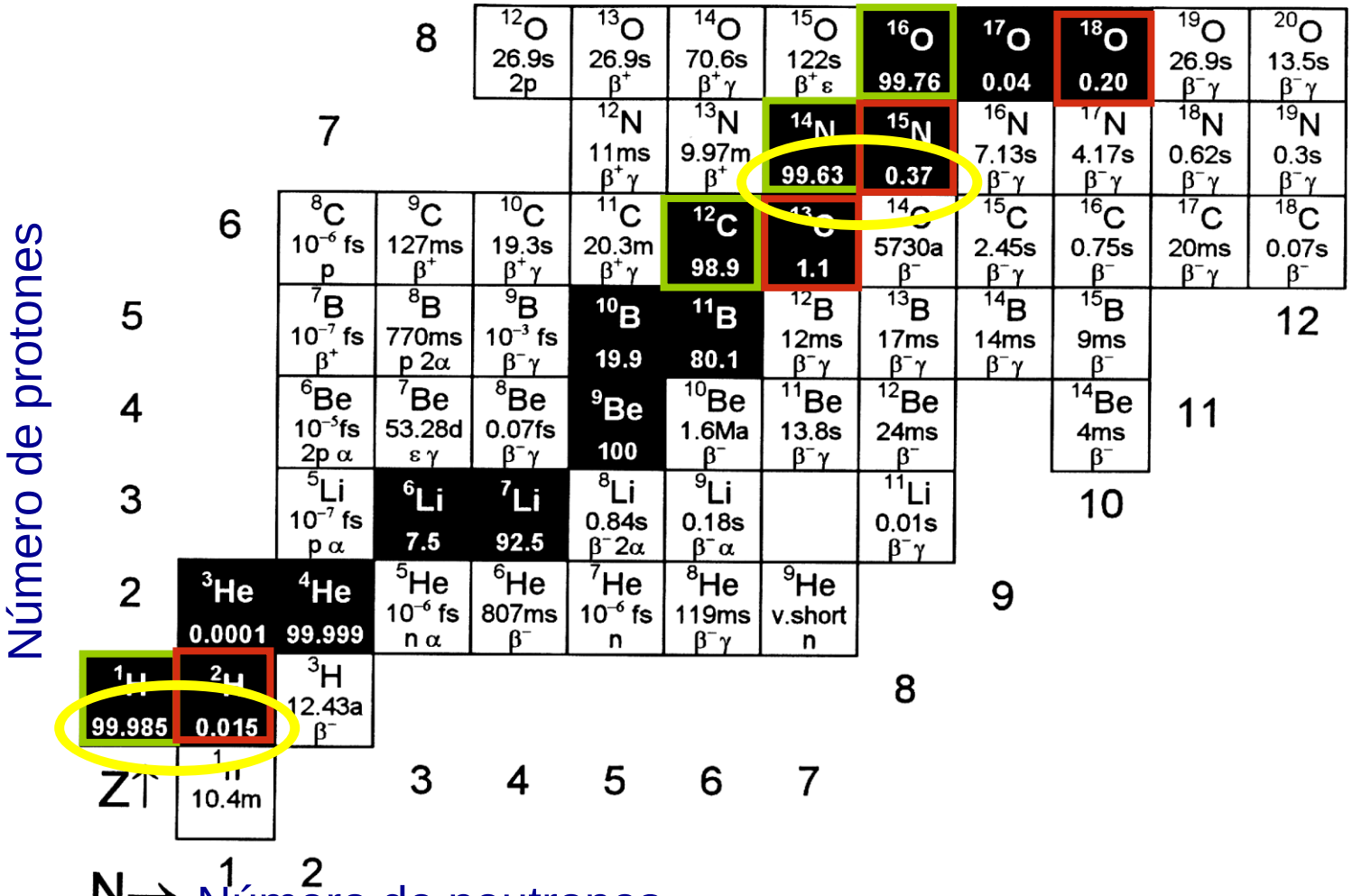
Carbono
6 protones
7 neutrones
Número atómico = 6
Masa = 6+7 = 13

^{14}C



Carbono
6 protones
8 neutrones
Número atómico = 6
Masa = 6+8 = 14

Los isótopos estables son aquellos que no sufren un decaimiento radioactivo



(modificado de Clark and Fritz, 1997)

Isótopos ambientales

ISÓTOPOS RADIOACTIVOS

↓

Se desintegran emitiendo partículas α, β, γ

Ejemplos: ^{3}H (Tritio), ^{14}C

↓

Usados para determinar la edad (datación)

ISÓTOPOS ESTABLES

↓

No se desintegran de forma espontánea

Ejemplos: ^{18}O, ^{2}H, ^{13}C, ^{34}S, ^{15}N,

↓

Uso como trazadores del origen de los solutos y procesos

$$R = {}^{18}O/{}^{16}O$$

se expresa por convención respecto a un estándar de referencia

Se conoce como desviación isotópica "δ" → $\delta^{18}O_{H2O}$ muestra ‰

$$\delta^{18}O_{H2O}\ \text{muestra} = \left[\frac{({}^{18}O/{}^{16}O)_{muestra} - ({}^{18}O/{}^{16}O)_{estándar}}{({}^{18}O/{}^{16}O)_{estándar}}\right] X10^3$$

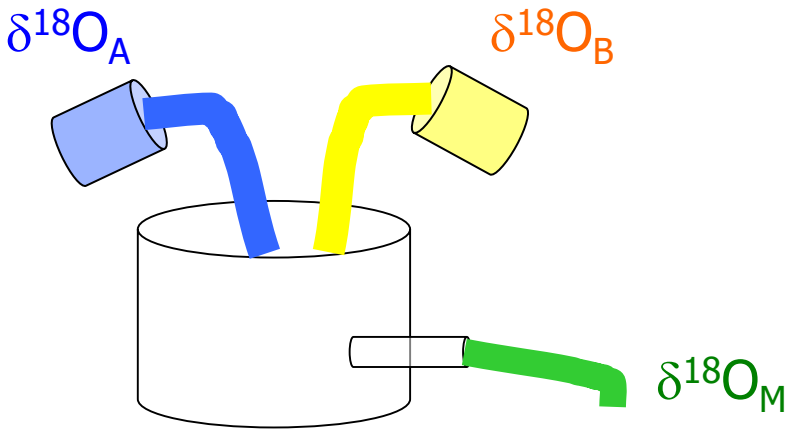
δ^2H → VSMOW: Viena Standard Mean Ocean Water
$\delta^{18}O$ → VSMOW: Viena Standard Mean Ocean Water
$\delta^{13}C$ → VPDB: Viena Pee Dee Belemnite
$\delta^{34}S$ → VCDT: Viena Cañon Diablo Troilite (FeS)
$\delta^{15}N$ → : Aire

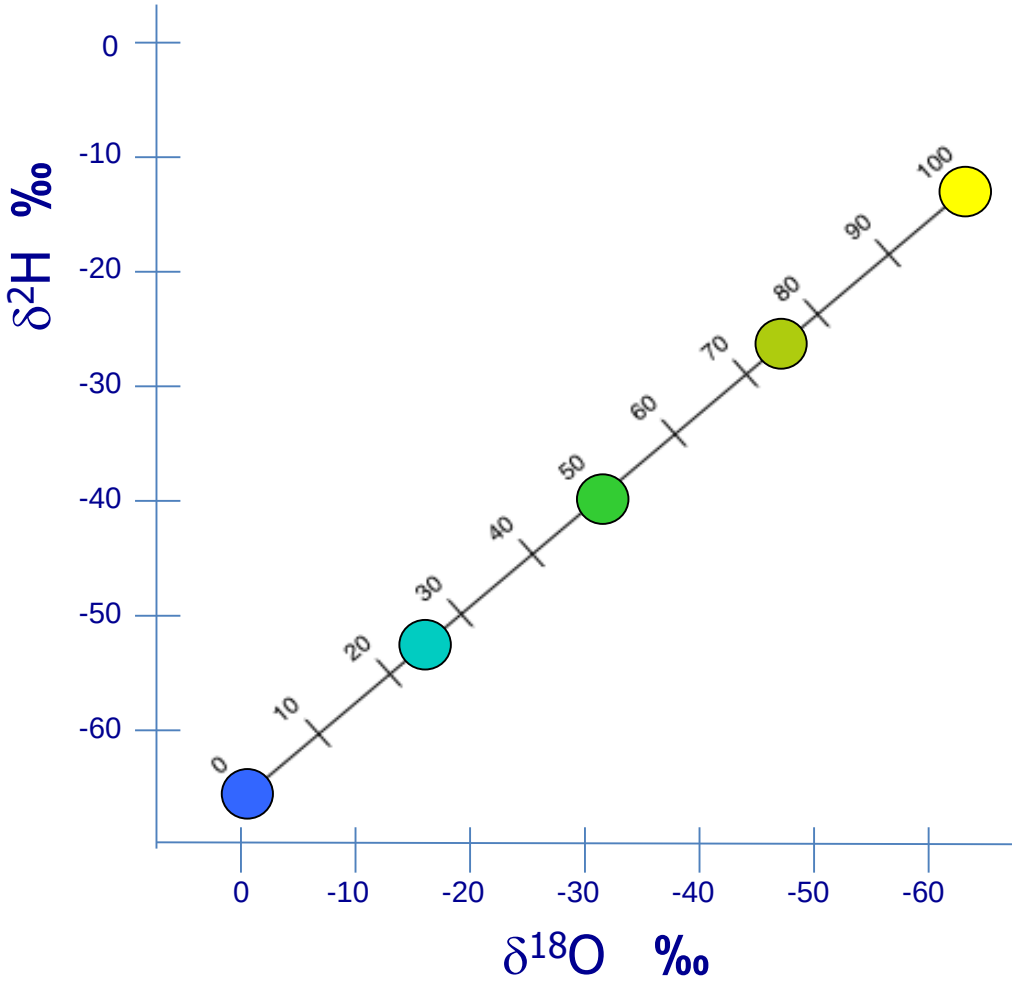
$\delta^{18}O_{H2O}$ muestra > 0 → la muestra esta enriquecida en ^{18}O

$\delta^{18}O_{H2O}$ muestra < 0 → la muestra esta empobrecida en ^{18}O

La composición isotópica puede variar debido a distintos procesos:

1.- Mezcla entre compuestos con diferente composición isotópica.





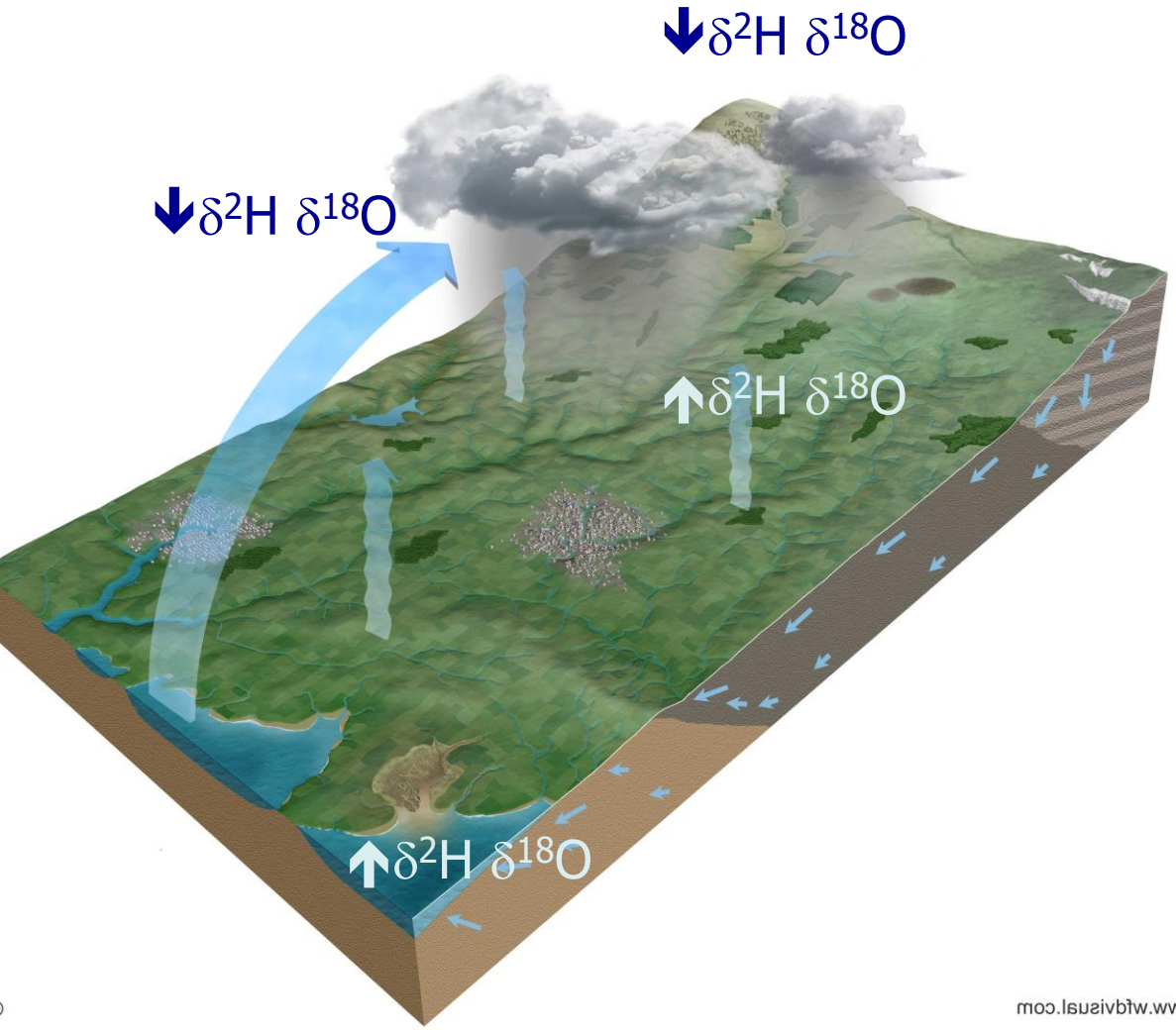
$$\delta^{18}O_M = \delta^{18}O_A.X_A + \delta^{18}O_B.X_B$$

La composición isotópica puede variar debido a:

2.- Reparto de los diferentes isótopos a lo largo de procesos **físicos**

↓

Fraccionamiento isotópico.



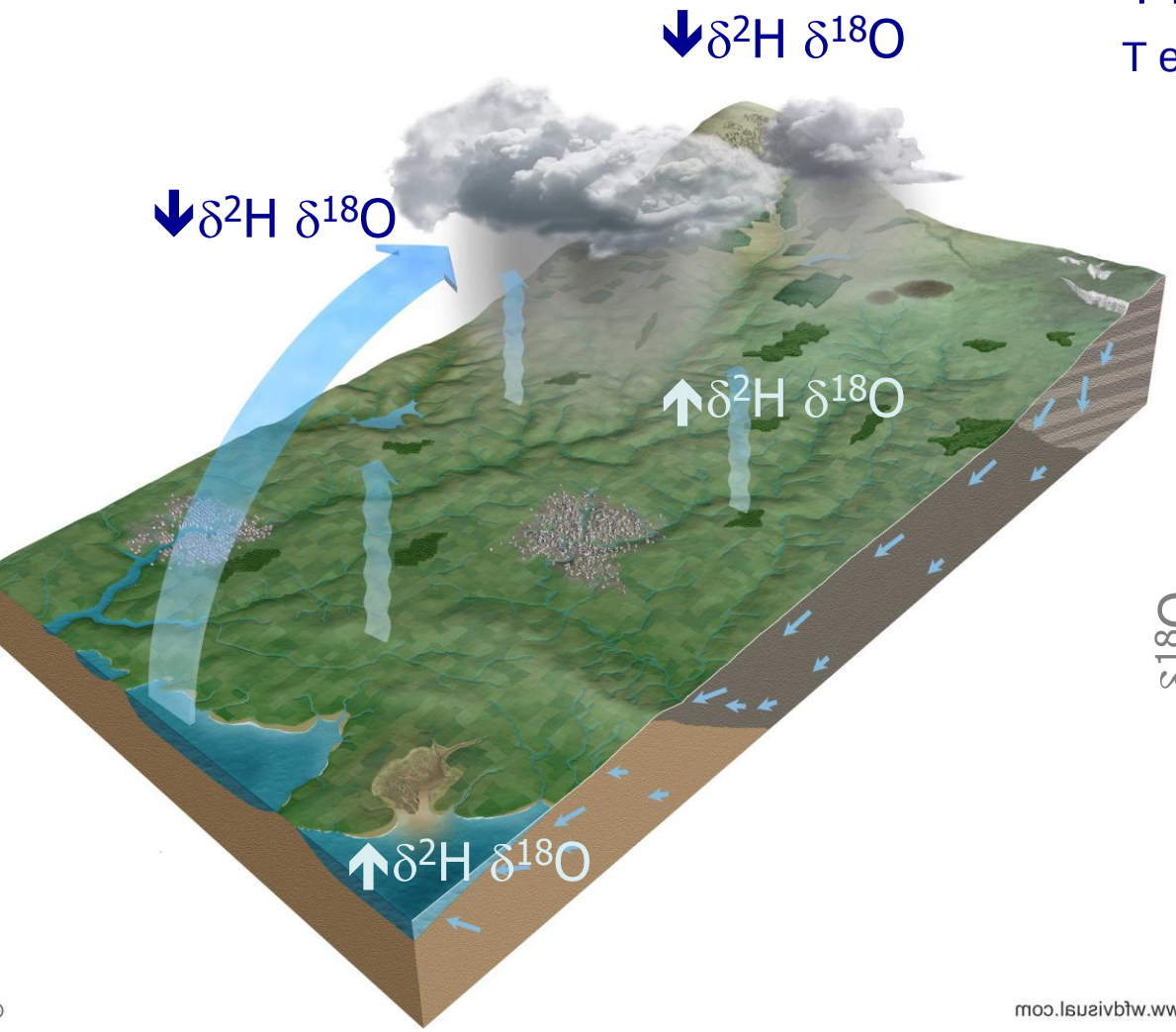
FRACCIONAMIENTO ISOTÓPICO

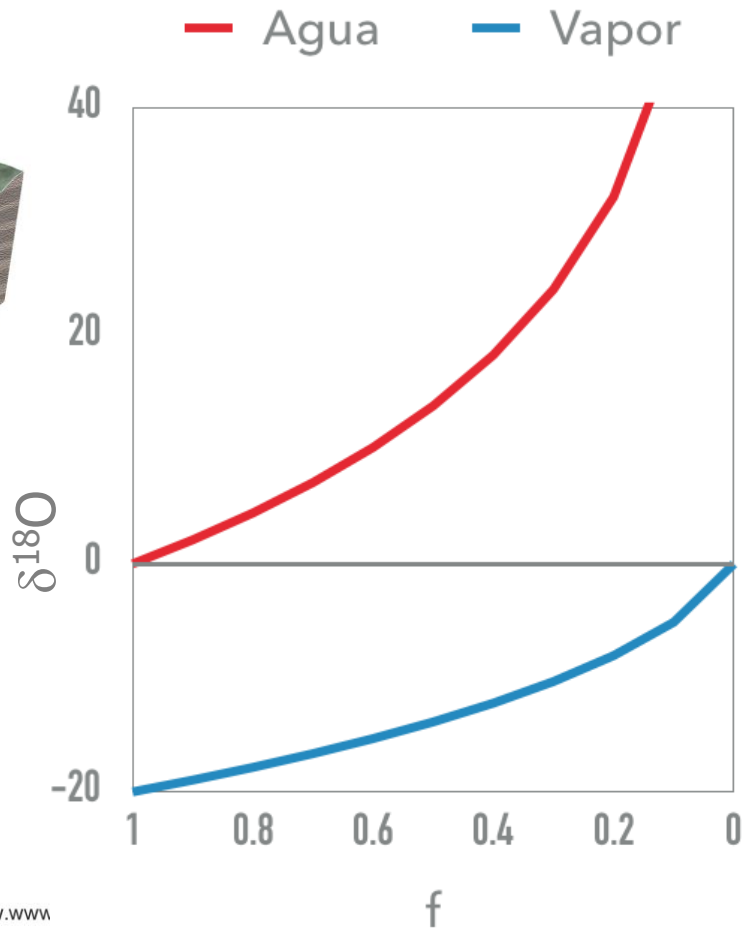
La fuerza de enlace es función de la masa del isótopo

→ ligeras diferencias entre las propiedades físicas y químicas

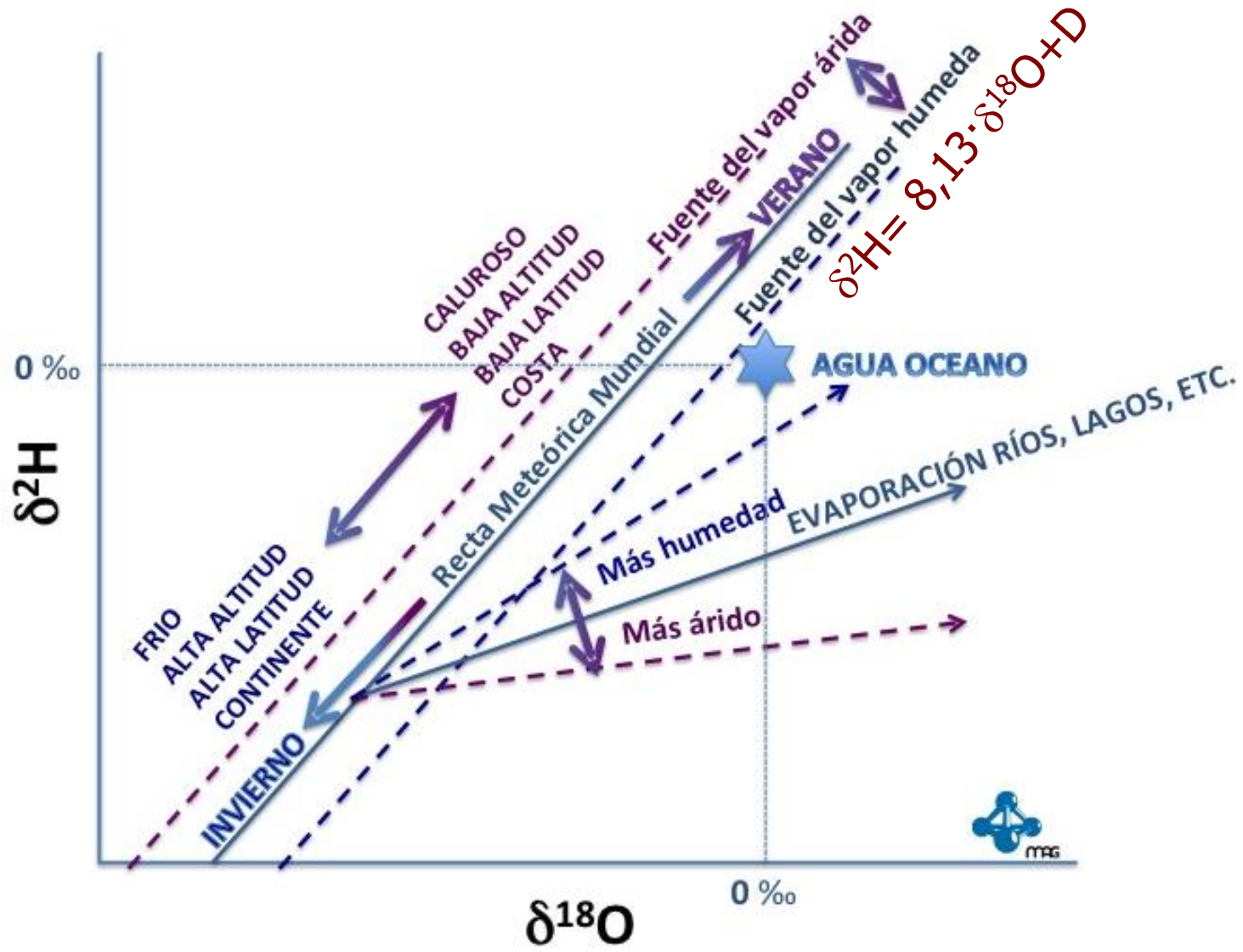
→ FRACCIONAMIENTO ISOTÓPICO en el ciclo del agua.

Propiedades	$^{1}H_2{}^{16}O$	$^{2}H_2{}^{16}O$
T ebullición (° C)	100.00	101.42





La composición isotópica del agua refleja su origen y procesos sufridos

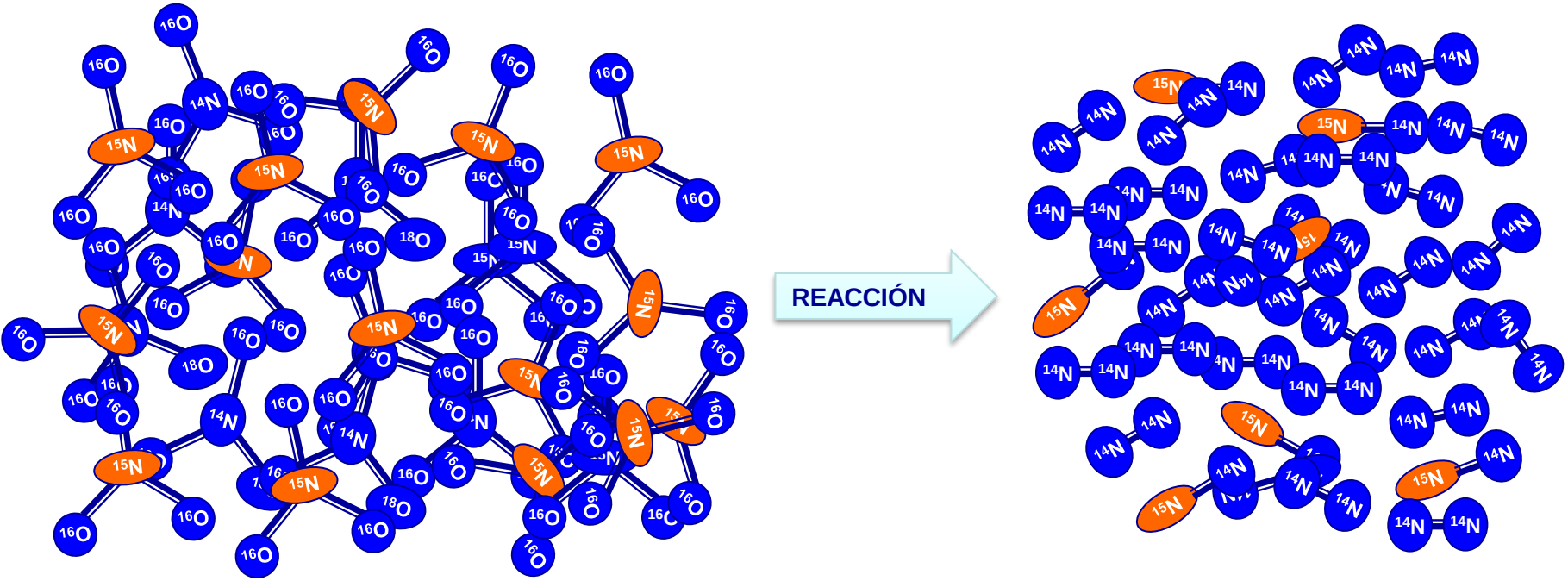


La composición isotópica puede variar debido a:

Reparto de los diferentes isótopos en distintos compuestos a lo largo de procesos **químicos** → Fraccionamiento isotópico.

Ej. Reacción de desnitrificación:

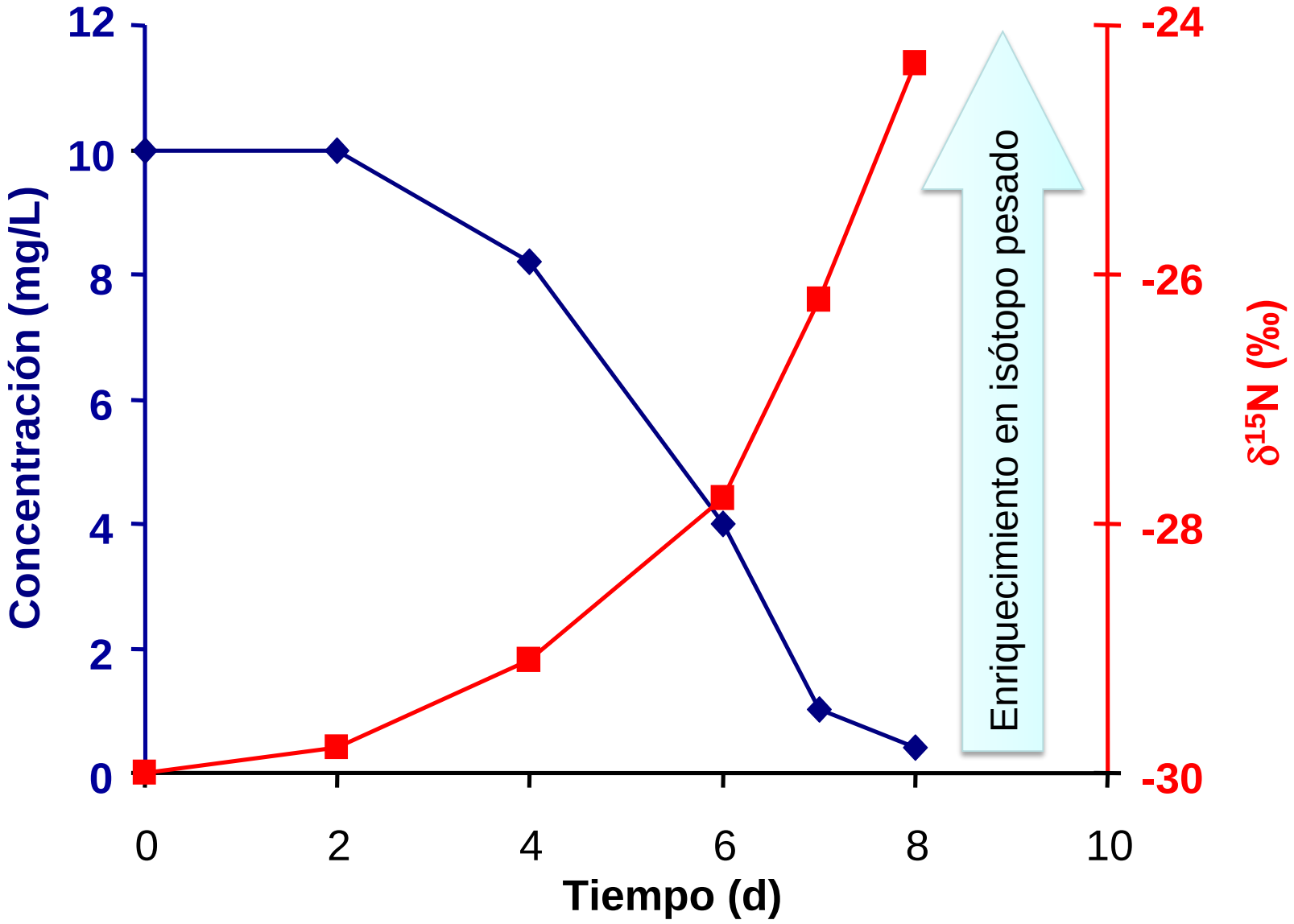
$$4NO_3^- + 5CH_2O + 4H^+ \rightarrow 2N_2 + 5HCO_3^- + 7H_2O$$



$\delta^{15}N$ = 0 per mil → + 4 ‰

$\delta^{15}N$ = - 4 ‰

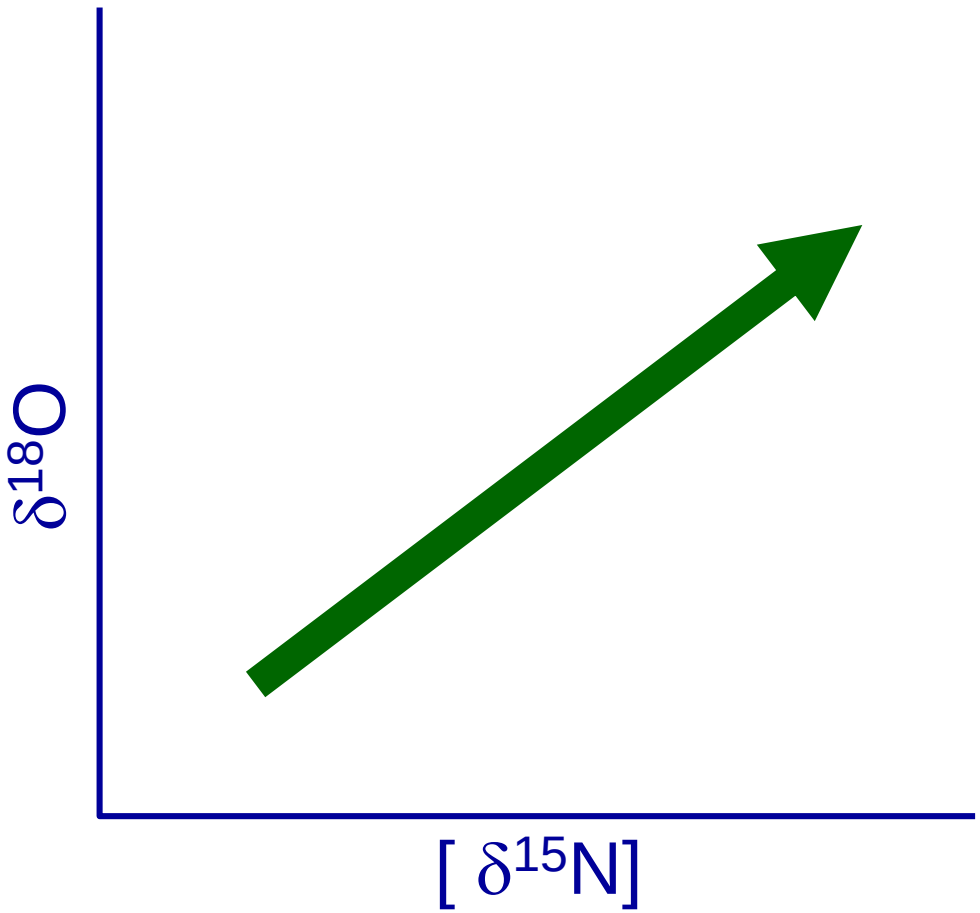
FRACCIONAMIENTO ISOTÓPICO



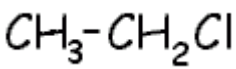
Fraccionamiento isotópico.

Ej. Reacción de desnitrificación:

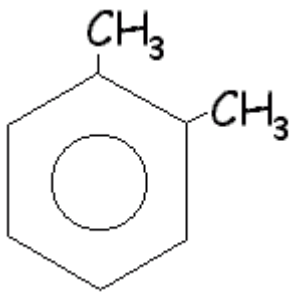
$$4NO_3^- + 5CH_2O + 4H^+ \rightarrow 2N_2 + 5HCO_3^- + 7H_2O$$



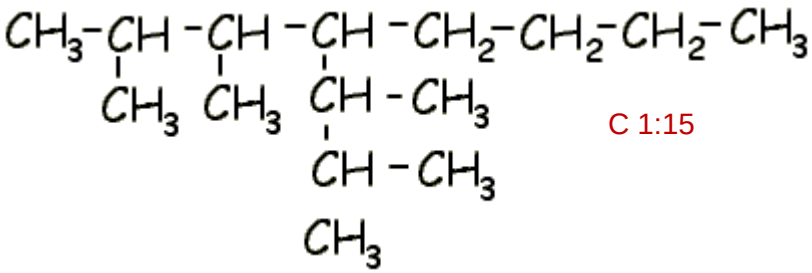
El fraccionamiento isotópico es diluido por el número de átomos de la molécula → disminuyendo con el número de átomos de la molécula.



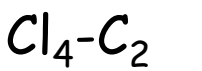
C 1:2



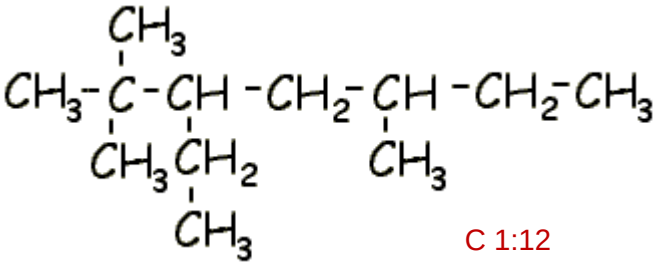
C 1:8



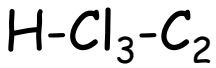
C 1:15



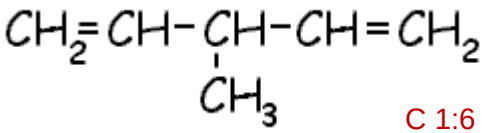
C 1:1



C 1:12



C 1:1

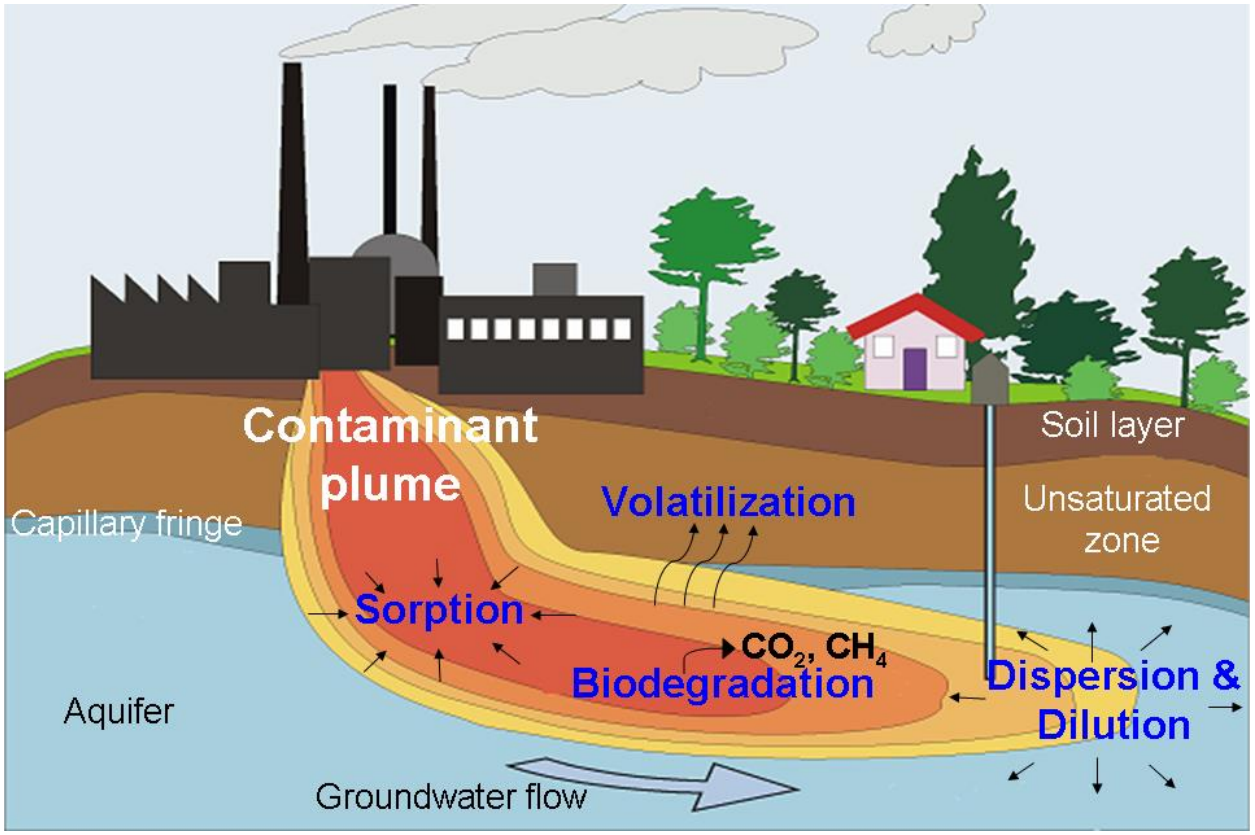


C 1:6

Disminución fraccionamiento observable → fraccionamiento no detectable

Algunos procesos no comportan fraccionamiento isotópico (negligible): Disolución, Dispersión, Sorción, Dilución, etc.

La concentración del contaminante "in situ" → $$B[\%] = \left(1 - \frac{C_t}{C_0}\right) \times 100$$



Solo la **degradación** representa una disminución de la masa de contaminante.

La concentración del contaminante “in situ” es influenciada por diversos procesos

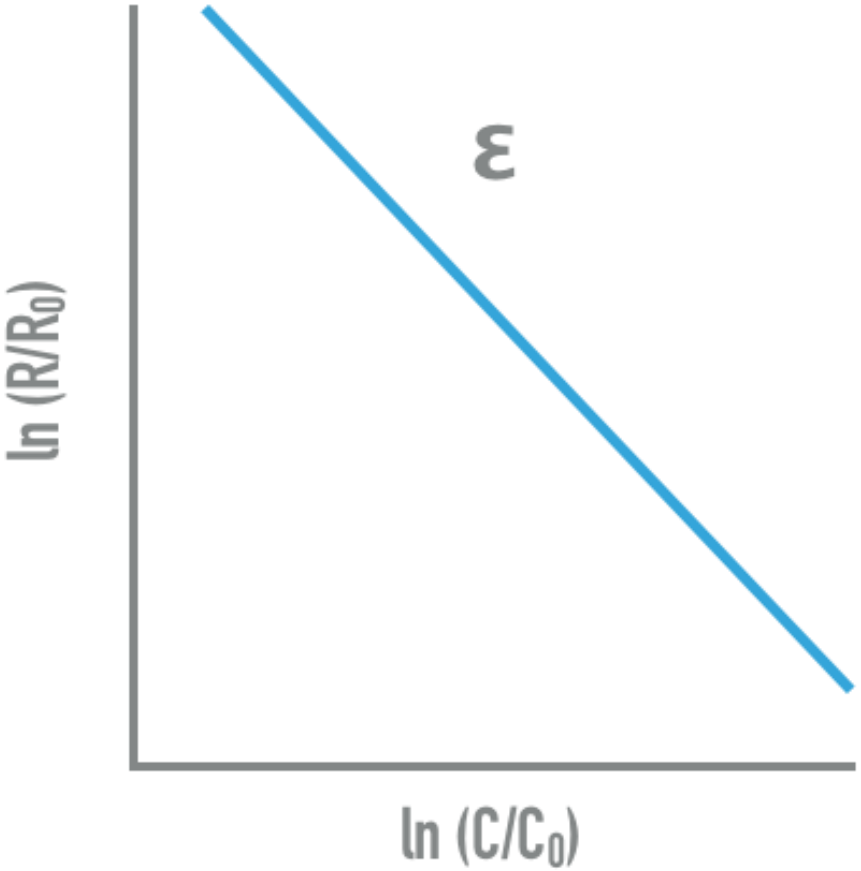
Cálculo de eficiencia de descontaminación

$$B[\%] = \left(1 - \frac{C_t}{C_0}\right) \times 100$$

$$B[\%] = \left[1 - \left(\frac{R_t}{R_0}\right)^{\left(\frac{1000}{\varepsilon}\right)}\right] \times 100$$

Sustitución de las concentraciones por las relaciones isotópicas mediante la ecuación de Rayleigh

A partir de experimentos en sistema cerrado se puede calcular el valor del fraccionamiento, en aquellos casos en que no sea conocido.



UNIVERSITAT DE BARCELONA

Bosch i Gimpera
UNIVERSITAT DE BARCELONA

MAiMA

¡Gracias!

Jornada de Transferencia I+D+I
El uso de los isótopos en la resolución de problemas de contaminación ambiental

En colaboración con

Agència Catalana de l'Aigua

Agència de Residus de Catalunya

Generalitat de Catalunya