

Cómo evaluar ambientalmente procesos químicos. Estudio de un caso: degradación del colorante Procion Red H-E7B.

Resumen: La Química Verde es una disciplina reciente de la química cuyo objetivo es diseñar compuestos y procesos químicos que reduzcan o eliminen la generación de sustancias peligrosas para la salud humana y el medio ambiente, haciendo un uso sostenible de los recursos. Para cuantificar ambientalmente las mejoras introducidas en una reacción química de acuerdo con estrategias de Química Verde, o bien para comparar distintas alternativas, se requiere realizar balances de cargas ambientales y valorar éstas. En este artículo se presenta un modo de llevar a cabo esta valoración ambiental en el caso de la comparación de distintas alternativas. **Palabras Clave:** Química verde, procesos avanzados de oxidación, evaluación ambiental.

Introducción

El relativamente elevado impacto ambiental asociado a la producción y uso de compuestos químicos en una variada gama de aplicaciones, ha conllevado a la actual percepción negativa que la sociedad tiene en general de la química. Ello ha propiciado el desarrollo de acciones desde distintos ámbitos relacionados con la química, como la industria química con acuerdos voluntarios de fomento de prácticas ambientalmente correctas, como por ejemplo el programa internacional Compromiso de Progreso (Responsible Care) o la más reciente Plataforma Tecnológica Española de Química Sostenible (PETEQUS), o bien desde la administración, como es el caso de la iniciativa REACH (Registration, Evaluation and Authorisation of Chemicals) propiciada por la CE y recientemente aprobada y destinada a la protección de la salud humana y del medio ambiente, mediante un adecuado control y registro de los compuestos químicos y formulaciones que se comercializan.

En la misma línea de reducción y, sobre todo, prevención de impactos ambientales asociados a los procesos químicos, se enmarca la Química Verde. Este ámbito de la Química, que empezó a desarrollarse en la década de los años 90, tiene como objetivo *el diseño de compuestos y procesos químicos que reduzcan o eliminen la generación de sustancias peligrosas para la salud humana y el medio ambiente, haciendo un uso sostenible de los recursos.*^[1] Para ello, se intenta incidir en mejoras a nivel molecular a lo largo del proceso químico propiciando, entre otras cosas, el uso de catalizadores, el ahorro de recursos a través de la economía de átomos, intentando que el producto incorpore el mayor número de átomos de reactivos o evitando en lo posible el consumo de productos auxiliares y de compuestos tóxicos, la utilización eficiente de la energía por medio de técnicas que optimizan su consumo, y en lo posible, utilizar recursos renovables, tanto materiales como energéticos.^[2]

La Química Verde incide, pues, en la prevención ambiental, ya que se centra en evitar los impactos a lo largo de todo el proceso químico mediante un uso adecuado de los recursos a disposición del químico. Gracias a este interés e inquietud creciente, se han ido desarrollando a lo largo de la última



De izq. a dcha. José A. Ayllón^a, Nilbia Ruiz^a, José Peral^a, Xavier Domènech^a, Julia García-Montaño^a, Francesc Torrades^b e Iván Muñoz (falta foto)

década, procedimientos y técnicas destinadas a la mejora ambiental de reacciones y procesos químicos, siendo una muestra de este desarrollo, el otorgamiento del premio Nobel del año 2005 a los investigadores Yves Chauvin, Robert H. Grubbs y Richard R. Schrock, por sus trabajos relacionados con las reacciones de metátesis para síntesis orgánica.

Herramientas de evaluación ambiental. El Análisis del Ciclo de Vida

Ya más recientemente, además de la investigación y del desarrollo de procedimientos ambientalmente más benignos, el interés en el campo de la Química Verde, se centra en la cuantificación de los impactos ambientales asociados al proceso químico. Gracias a ello, es posible elegir entre distintos diseños para la obtención de un compuesto químico, o bien la cuantificación del impacto ambiental de las distintas etapas constitutivas del proceso químico global.^[3] En este sentido, se han propuesto diferentes técnicas para cuantificar el grado de benignidad ambiental de una reacción química, ya sea a partir de la utilización de indicadores basados en el consumo de materiales o de energía^[3,4], o bien a partir del uso de indicadores ambientales, tales como el efecto invernadero, la lluvia ácida, etc...^[5,6] Otro tipo de metodologías están basadas en la consideración de las cadenas productivas, en concreto en el ciclo de vida de productos y procesos, como es el caso de la herramienta Intensidad Material Por Servicio (IMPS), basado en el cómputo del consumo de materiales a lo largo del ciclo de vida^[7]; el Índice de Sostenibilidad de Procesos (ISP), basado en el grado de utilización de recursos renovables a lo largo de la cadena de producción^[8]; o el Análisis de Flujo de Sustancias (AFS), en el que se realiza un análisis de las entradas y salidas de un elemento o sustancia en particular en un sistema determinado, ya sea geográfico o que implique una instalación industrial concreta.^[9]

Entre las herramientas de evaluación ambiental basadas en el análisis de la cadena productiva, quizás la más aceptada y desarrollada en su metodología es el Análisis del Ciclo de Vida (ACV). En esta herramienta, se tienen en cuenta las cargas ambientales asociadas a lo largo de todo el ciclo de vida del producto o proceso que se analiza (extracción de recursos primarios, procesado, distribución, uso y gestión de residuos), y se evalúan dichas cargas en función de distintos impactos sobre el medio ambiente. Estas herramientas de estudio ambiental de los productos tienen como objetivo analizar de forma objetiva, metódica, sistemática y científica

^aDepartament de Química. Universitat Autònoma de Barcelona. 08123 Bellaterra

^bDepartament d'Enginyeria Química. ETSEIAT. Universitat Politècnica de Catalunya

C-e: xavier.domenech@uab.es

Recibido 02/04/2006. Aceptado 27/06/2006

el impacto ambiental ocasionado por éstos, desde su origen en las materias primas a partir de las cuales se han fabricado, hasta que se convierten en residuo una vez utilizados.

La realización de un ACV debe ceñirse a una metodología consistente en cuatro fases^[10]:

1. *Definición de objetivos y alcance del estudio.* En esta fase se enmarca el estudio, definiéndose su propósito y especificándose la unidad funcional, los límites del sistema, los impactos ambientales que se consideran, la calidad de los datos utilizados, criterios de asignación de las cargas ambientales, etc.

2. *Análisis de inventario.* Consiste en la obtención de los datos correspondientes a las entradas y salidas del sistema, tanto referidos al consumo de materias primas y energía, como a las emisiones al medio ambiente, a lo largo de todo el ciclo de vida del producto o proceso.

3. *Evaluación de impactos.* Esta fase incide en la interpretación de los datos inventariados, mediante su adecuada gestión, de tal manera que sea posible dar una idea del impacto ambiental asociado al producto o proceso que se analiza. En concreto, en esta fase se distribuyen las cargas ambientales en distintas categorías de impacto consideradas (*clasificación*) y se cuantifican (*caracterización*), dando lugar a la obtención de un perfil ambiental, consistente en la valoración del daño ambiental para las distintas categorías de impacto.

4. *Interpretación.* Esta etapa del ACV corresponde a la interpretación de los resultados obtenidos en el estudio. El objetivo de esta fase es combinar la información obtenida en el inventario con la obtenida en la evaluación de los impactos, llegando a formular conclusiones y recomendaciones.

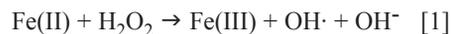
La consideración de todas las etapas del ciclo de vida y la evaluación ambiental teniendo en cuenta múltiples categorías de impacto, han hecho del ACV una herramienta de referencia en los análisis ambientales. En particular el ACV se ha introducido como herramienta adecuada para el análisis ambiental de procesos químicos, para evaluar cuáles son los reactivos más impactantes o la etapa del proceso global que más incide en el coste ambiental, así como también resulta útil para comparar distintos diseños desde el punto de vista ambiental.^[11,12,13]

Evaluación ambiental de la degradación oxidativa del colorante Proción-Red

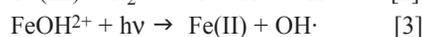
A continuación, y con el fin de mostrar el uso de esta herramienta, se desarrolla la aplicación del ACV a un proceso químico como es la degradación de la molécula Proción Red H-E7B (C.I.141) (ver Figura 1), un colorante comercial habitualmente presente en efluentes contaminados de la industria textil. El proceso de degradación que se va a evaluar desde el punto de vista ambiental es la reacción de foto-Fenton. Esta reacción, en la que se consumen como reactivos agua oxigenada y una sal de Fe(II), se encuadra dentro de la tipología de los Procesos Avanzados de Oxidación (PAO), caracterizados por la generación *in situ* de radicales OH.^[14] Esta especie es

un reactivo muy oxidante (2,8 V vs ENH), capaces de degradar compuestos orgánicos recalcitrantes, fundamentalmente por medio de reacciones de abstracción de hidrógeno y por adición a dobles enlaces.^[15]

La reacción de foto-Fenton es un proceso catalítico con respecto al Fe(II), que se inicia con la reacción de Fenton:



Esta reacción genera radicales OH, que inician la degradación del compuesto orgánico. No obstante, a un pH próximo a 3 el Fe(III) producido por la reacción [1] se hidroliza (proceso [2]) y, en presencia de luz de longitudes de onda inferiores a 410 nm, el hidroxocomplejo formado se fotoliza (proceso [3]) para generar más radicales OH y formar Fe(II), el cual vuelve a alimentar el proceso [1]:



La reacción de foto-Fenton es un proceso químico que reúne varios de los requerimientos de la Química Verde^[2]:

1. Es un proceso que genera un potente oxidante (los radicales OH) en condiciones suaves (a presión y temperatura ambientales);
2. Utiliza recursos renovables: oxígeno como materia prima y luz solar para la activación del proceso;
3. Consume reactivos inocuos;
4. Uno de los reactivos (Fe(II)) es catalítico.

No obstante, el agua oxigenada es un reactivo que se consume durante la reacción y, aunque su descomposición da lugar a productos inocuos, su producción requiere un cierto gasto de energía y de productos químicos, que deben considerarse para evaluar el impacto ambiental del proceso. Además, dependiendo del tipo de aplicación, se requiere la utilización intensiva de la reacción de foto-Fenton, lo cual precisa llevar a cabo el proceso en condiciones de iluminación artificial, lo cual supone un consumo extra de electricidad.

Desde un punto de vista económico, y siempre que es posible, se prefiere realizar la depuración por medio de una etapa biológica, utilizando microorganismos capaces de degradar el contaminante. No obstante, no siempre los efluentes a tratar son biodegradables. Lo que puede plantearse, pues, para disminuir el coste de la operación es realizar: a) una etapa química (foto-Fenton), para conseguir un efluente biodegradable y b) una etapa biológica que finalice la depuración del efluente. No obstante, lo que debería preguntarse es si la alternativa de acoplamiento etapa química/etapa biológica para el tratamiento de un efluente contaminado es ambientalmente mejor que solamente aplicar el tratamiento químico. Dentro de este marco conceptual, se presenta en este trabajo y a modo de ejemplo la evaluación ambiental de la depuración de una disolución de un colorante no biodegradable, tal como el

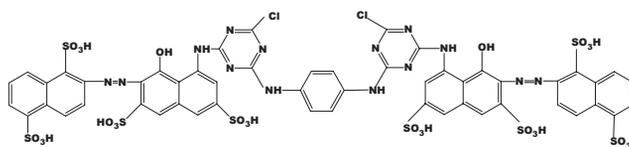


Figura 1. Fórmula molecular del colorante Proción Red H-E7B.

Procion Red, utilizado por la industria textil. La presencia de este colorante en los efluentes residuales, además de impartir una intensa coloración en el medio receptor, da lugar a problemas de toxicidad, con lo que se precisa aplicar métodos de depuración a los efluentes de salida. En este trabajo se comparan distintos métodos posibles de tratamiento para este tipo de efluentes. La aplicación de dichos métodos, se ha llevado a cabo a escala de laboratorio y están todavía en desarrollo, con lo que no corresponden a procesos comerciales.

Definición de los escenarios y de la unidad funcional

La degradación del colorante en medio acuoso se ha llevado a cabo en nuestro laboratorio, obteniéndose las condiciones óptimas de mineralización por medio del proceso de foto-Fenton.^[16] En concreto, la utilización de 10 mg L⁻¹ de Fe(II) y 250 mg L⁻¹ de H₂O₂, conduce a la rápida mineralización de una disolución inicial de 250 mg L⁻¹ de colorante, cuando el sistema se irradia con luz UVA. Por otra parte, se han rebajado las condiciones iniciales de consumo de H₂O₂ y de Fe(II) por medio de sendos experimentos utilizando 10 mg L⁻¹ de Fe(II) y 125 g L⁻¹ de H₂O₂ y 5 mg L⁻¹ de Fe(II) y 125 g L⁻¹ de H₂O₂, respectivamente. Con estas condiciones, se ha tratado la disolución de colorante con foto-Fenton hasta convertirla en biodegradable, momento en que el efluente se transfiere en un biorreactor para llevar a cabo la mineralización. Los datos de estos dos procedimientos, también han sido obtenidos en nuestro laboratorio.^[16]

Así pues, en el presente estudio ambiental se consideran tres escenarios:

Escenario 1. Consiste en llevar a cabo la mineralización del colorante por medio de una etapa química consistente en un proceso de foto-Fenton. Las condiciones experimentales son las siguientes: se emplea un fotoreactor cilíndrico de 0,3 L de capacidad y 78,5 cm² de superficie, que es iluminado por la parte superior por medio de una fuente de luz que emite radiación UVA con una intensidad de 0,6 mW cm⁻² durante un tiempo de 40 min, logrando una disminución del Carbono Orgánico Disuelto (COD) de un 43% a partir de una disolución inicial de colorante de concentración 250 mg L⁻¹ y que contiene 10 mg L⁻¹ de Fe(II) y 250 mg L⁻¹ de H₂O₂ a un pH de 3.

Escenario 2. Consiste en realizar una etapa química, con el mismo dispositivo experimental y concentración inicial de colorante que en el escenario 1, pero utilizando como reactivos 10 mg L⁻¹ de Fe(II) y 125 mg L⁻¹ de H₂O₂. La etapa química se lleva a cabo durante 30 min, hasta que la reducción del COD es de 33,8% que corresponde al punto en que el efluente se hace biodegradable.^[16] Acto seguido, el efluente se somete a un tratamiento biológico en un reactor secuencial en discontinuo de 2 L de capacidad, hasta conseguir la misma tasa de mineralización que en el escenario 1, es decir, un 43% de reducción del COD. En este escenario, se asume que los fangos producidos en exceso por el tratamiento biológico son estabilizados y enviados a un vertedero.

Escenario 3. Este escenario es similar al anterior, es decir, etapa química que reduce el COD (un 33,7%), obteniéndose un efluente biodegradable, seguida de otra biológica hasta alcanzar una reducción del COD en un 43%, aplicando los mismos dispositivos y condiciones experimentales. La única

diferencia con el escenario 2, es la utilización de una menor concentración de Fe(II), que en este caso es de 5 mg L⁻¹. El tiempo de tratamiento en la etapa química, 60 min, es mayor que el requerido en el escenario 2.

Para realizar la comparación ambiental entre los tres escenarios, se considera la siguiente *unidad funcional*: "eliminación del 43% del COD de 1,95 L de una disolución de 250 mg L⁻¹ de Procion Red H-E7B". Esta unidad funcional, es a la que van referidas las cargas ambientales inventariadas.

En la Figura 2, se muestran los sistemas correspondientes a los tres escenarios, con los distintos procesos considerados. Los subsistemas considerados en la recogida de datos ambientales son: 1) etapa química de foto-Fenton (todos los escenarios), 2) etapa biológica acoplada a la química (escenarios 2 y 3) tratamiento de fangos (escenarios 2 y 3) y disposición final de los fangos (escenarios 2 y 3).

Contabilidad de las cargas ambientales

En el inventario de las cargas ambientales se ha considerado el consumo de energía eléctrica utilizada en el proceso de foto-Fenton en los tres escenarios y en el tratamiento biológico y en la gestión de los fangos generados de los escenarios 2 y 3. Para contabilizar las cargas ambientales debidas a la producción (extracción y procesado del recurso primario, y transportes asociados) y al uso de la electricidad, se ha considerado el perfil eléctrico español, cuyas fuentes son carbón (30,4%), gas natural (9,7%), hidráulica (16,5%), nuclear (27%), fuel oil (10,4%) y fuentes renovables (6%).^[17] También se consideran las cargas asociadas a la producción de los reactivos químicos consumidos (extracción del mineral, procesado y distribución) en: a) el proceso de foto-Fenton, b) en el tratamiento biológico, c) en la estabilización de los fangos y d) en la depuración de los lixiviados que se producen en el vertedero a causa del depósito de los fangos. En la Tabla 1, se detalla la procedencia de las fuentes de datos utilizadas para realizar el inventario, junto con la antigüedad y alcance geográfico de éstas.

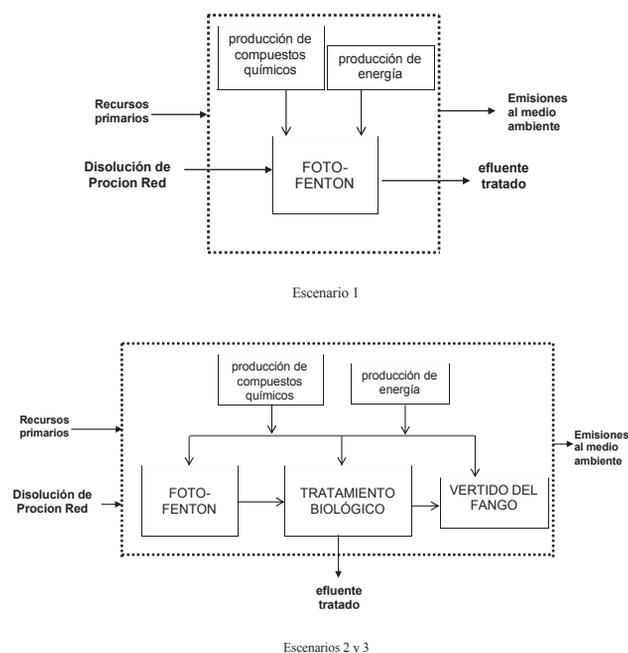


Figura 2. Diagrama de flujo de los sistemas correspondientes a los distintos escenarios

Tabla 1. Resumen de fuentes y calidad de los datos utilizados en el estudio ambiental

TÓPICO	FUENTES	GEOGRAFÍA	ANTIGÜEDAD
ENERGÍA			
Electricidad (España)	Datos locales concernientes a la contribución de las diferentes tecnologías de producción de electricidad en España (carbón, gas, nuclear, hidráulica, fuel-oil) de la base de datos ECOINVENT 2005 versión 1.1.[18]	Local	≤ 2
Energía consumida por AOP Foto-Fenton	Datos experimentales.[17]	Local	≤ 1
PRODUCTOS QUÍMICOS			
H₂O₂	Datos de ECOINVENT 2005 versión 1.1.	Europa	≤ 2
FeSO₄, Ca(OH)₂, polielectrolito, diesel	Datos de ECOINVENT 2005 versión 1.1.	Europa	≤ 2
Diesel	Datos de BUWAL 250.[19]	Europa	≤ 2
Productos químicos consumidos por Foto-Fenton y acoplamiento biológico	Datos experimentales.[16]	Local	≤ 1
Datos sobre el pre y post tratamiento de fangos y tratamiento de lixiviados	Datos bibliográficos.[20,21,22]	Europa	≤ 10
TRANSPORTES			
Camión 16 toneladas	Consumo y emisiones de combustible de la base de datos ECOINVENT 2005, versión 1.1.	Europa	7

Escenario 1

Los datos ambientales se han obtenido considerando que se consumen íntegramente los reactivos adicionados a la disolución de colorante. Así el agua oxigenada se descompone totalmente para generar el oxidante (OH·) y se considera que las especies de hierro son vertidas a la hidrosfera junto al efluente tratado. La concentración máxima de hierro disuelto vertida es en todos los escenarios inferior al límite de descarga permitido por la legislación española (Real Decreto 606/2003). Las únicas emisiones que se consideran en el inventario, son las atmosféricas correspondientes al CO₂ debidas a la mineralización del colorante y las emisiones a la hidrosfera correspondientes a la DQO y al COD del efluente tratado.

El consumo de energía se debe a la electricidad necesaria para el funcionamiento de la lámpara durante los 40 min. de irradiación que se precisan para conseguir la reducción del 43% del COD de la disolución, de acuerdo con la definición de la unidad funcional realizada anteriormente. Por otro lado, se ha considerado una distancia media de 50 km. para el transporte de los reactivos desde la planta de producción hasta el lugar de consumo. Los consumos de reactivos por unidad funcional son los siguientes: H₂O₂ = 483 mg y FeSO₄·7H₂O =

0,0520 g, mientras que el consumo de electricidad es de 2,69 x 10⁻⁴ kWh.

Escenarios 2 y 3

Al igual que en el escenario 1, en la etapa química se asume que se consumen íntegramente los reactivos añadidos al inicio del proceso. El tipo de cargas ambientales en esta etapa química es el mismo que en el escenario anterior, habiendo como diferencia un menor consumo de H₂O₂ y de electricidad; se asumen las mismas hipótesis que en el escenario 1. No obstante, hay que añadir en el inventario los consumos y las emisiones correspondientes a la etapa biológica posterior y la gestión de los fangos generados durante este proceso (post-tratamiento y disposición).

La etapa biológica corresponde a un proceso aeróbico, cuyo único consumo energético proviene de la aireación por agitación mecánica, que aporta 1,5 kg de O₂ por kWh.[20] La concentración de la demanda química de oxígeno (DQO) eliminada durante el proceso biológico fue de 42 mg L⁻¹. [16] El oxígeno consumido se ha determinado a partir de la DQO eliminada durante el proceso biológico y obtenida de la diferencia entre los valores de DQO experimentales de entrada y

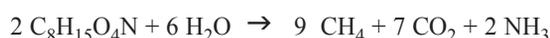
salida del biorreactor. Hay que tener en cuenta que debe descontarse de este balance la DQO asimilada por la biomasa en exceso, es decir, la que se ha generado de más durante el proceso aeróbico. A partir de datos bibliográficos, se estima que por cada mg de DQO que se elimina, 0,78 mg son asimilados por la biomasa en exceso.^[23] El CO₂ correspondiente a la mineralización biológica del colorante se ha estimado a partir de los requerimientos de oxígeno, asumiendo que fundamentalmente el oxígeno se consume en formar dióxido de carbono.^[23]

Por otra parte, en el biorreactor se genera un fango, estimándose una producción de 0,72 mg de fango por mg de DQO eliminada.^[23] Este fango generado en exceso debe gestionarse de manera adecuada. Antes de la disposición de los fangos, éstos deben de someterse a una operación de espesamiento con adición de pequeñas cantidades de polielectrolito, lo cual requiere la adición de 9 kg de polímero por cada tonelada de fango gestionado,^[21] y después una estabilización por tratamiento con Ca(OH)₂: 200 kg de producto por tonelada de fango.^[22] Estas operaciones dan lugar a la obtención de un fango que contiene un 31% de sólidos secos.^[21,24] Para estas operaciones se requiere un consumo energético estimado en 95 kWh por tonelada de fango, que también incluye el bombeo y mezclado de fangos.

Una vez tratado el fango, éste se transporta a un vertedero

(distancia considerada: 50 km), en el cual se deposita; para ello se consume energía debido a las operaciones de extendido y compactado del residuo. Se ha estimado un consumo de gasoil de 1,8 L por tonelada de residuo.^[25]

Una vez depositado, el fango sufre un proceso anaeróbico con generación de CH₄, CO₂ y NH₃. Se asume que el 99% del carbono orgánico escapa a la fase gas (biogás) y el restante 1% se incorpora en el lixiviado; por contra, el 89% del nitrógeno se transfiere a la fase acuosa en forma de ión NH₄⁺, un 9% a la fase gas y solamente un 1% permanece en la fase sólida del vertedero.^[26] Para la cuantificación de las emisiones, se ha considerado que el fango está caracterizado por la siguiente fórmula empírica: C₈H₁₅O₄N y que se transforma de acuerdo al siguiente proceso de metanación^[27]:



Se estima que, del total de biogás generado, se capta un 50%.^[28] Para realizar esta operación es necesario bombear el biogás, para lo cual se consume energía. El consumo eléctrico para el bombeo se ha estimado considerando un gasto de 1,35 kWh por tonelada de residuo que se biodegrada^[20]; asumiendo una producción de 200 m³ de biogás por tonelada de residuo^[25], del cual como se ha mencionado se capta un 50%, resulta un consumo por m³ captado de 0,013 kWh. El

Tabla 2. Tabla de inventario de consumo de reactivos y energía correspondiente a los escenarios 2 y 3.

ENTRADAS	ESCENARIO 2	ESCENARIO 3
Pre-tratamiento Foto-Fenton		
H ₂ O ₂	241,3 mg	241,3 mg
transporte de H ₂ O ₂	50 km	50 km
FeSO ₄	0,052 g	0,026 g
transporte FeSO ₄	50 km	50 km
energía necesaria para lograr una relación de biodegradabilidad de DBO ₅ /DQO = 0,3.	2,03 10 ⁻⁴ kWh	4,07 10 ⁻⁴ kWh
	1,95 litros	1,95 litros
Acoplamiento biológico		
energía necesaria para la biodegradación biológica	1,19 10 ⁻⁵ kWh	1,25 10 ⁻⁵ kWh
Post-tratamiento:		
Acondicionamiento y estabilización de fangos		
fangos producidos en el reactor	5,95 10 ⁻⁸ t	6,24 10 ⁻⁸ t
Ca(OH) ₂	1,19 10 ⁻⁵ kg	1,25 10 ⁻⁵ kg
polielectrolito	5,36 10 ⁻⁷ kg	5,61 10 ⁻⁷ kg
transporte de Ca(OH) ₂	50 km	50 km
transporte de polielectrolito	50 km	50 km
energía para la estabilización y acondicionamiento de los fangos.	5,66 10 ⁻⁶ kWh	5,93 10 ⁻⁶ kWh
Disposición y Tratamiento de los Fangos en Vertedero		
fangos después del acondicionamiento y estabilización	2,32 10 ⁻⁷ t	2,43 10 ⁻⁷ t
Diesel, para el transporte de los fangos al vertedero	4,18 10 ⁻⁷ kg	4,38 10 ⁻⁷ kg
transporte de los fangos al vertedero	50 km	50 km
energía eléctrica necesaria en el vertedero para el bombeo del biogás y la depuración de los lixiviados.	2,86 10 ⁻⁶ kWh	2,96 10 ⁻⁶ kWh

biogás captado se quema en una antorcha produciéndose la total conversión del CH_4 a CO_2 . Durante la combustión se produce óxidos de nitrógeno (NO_x), estimándose en 7,5 g de óxidos en forma de NO_2 por kg de carbono orgánico volátil quemado.^[26] El restante biogás que no es captado, fluye hacia la superficie del vertedero, donde en parte es oxidado a CO_2 . Se estima en un 10% el metano oxidado, mientras que el resto escapa a la atmósfera.^[26]

Con relación al lixiviado, se considera que un 90% es captado por el sistema de drenado.^[29] Estos lixiviados son tratados *in situ* en una planta de tratamiento antes de ser liberados al medio. Se ha considerado que para el tratamiento de los lixiviados se ha aplicado una depuración biológica, en la que se produce la eliminación del 90% de la demanda bioquímica de oxígeno (DBO) del 80% del NH_4^+ , el cual se transforma a nitrato.^[26,29] Se considera que en la etapa de desnitrificación, se transforma a nitrógeno molecular la mitad de los nitratos formados.^[28]

La tipología de cargas ambientales asociadas al escenario 3 es la misma que la correspondiente al 2, puesto que ambos escenarios transcurren por las mismas etapas. La diferencia estriba en el menor consumo de sal de Fe(II) en la etapa química, lo cual incide en un mayor tiempo de tratamiento fotoquímico para hacer biodegradable la disolución de colorante, traduciéndose en un mayor consumo de electricidad. Al final de la etapa química, el efluente que se obtiene es de composición muy similar al correspondiente al escenario 2, con lo que las cargas ambientales de las etapas posteriores son también similares. La DQO eliminada durante el tratamiento biológico, que es la variable que se precisa para determinar el consumo energético y la producción de fangos, es de 41 mg L^{-1} . En la Tabla 2, se indican los datos de inventario correspondientes a los escenarios 2 y 3.

Evaluación de los impactos ambientales

A partir del consumo de materiales y de energía para los tres escenarios y que se recogen en la Tabla 2, junto con la utilización de las bases de datos que se citan en la Tabla 1, que permiten contabilizar las cargas ambientales "aguas arriba" que se generan en la producción de los reactivos y materiales que se necesitan a lo largo del ciclo de vida de los procesos en cada uno de los escenarios, se obtienen los flujos elementales, es decir, las entradas y salidas al medio ambiente de recursos primarios y emisiones que ya no sufren transformación por parte del hombre (por ejemplo, carbón, bauxita, SiO_2 , NH_3 , SO_2 , petróleo, etc...). Las tablas de flujos elementales de los tres escenarios no se recogen en el presente artículo, puesto que incluyen centenares de datos.

El siguiente paso en el ACV consiste en clasificar estos flujos elementales en diferentes categorías de impacto. En el presente trabajo se han considerado las siguientes categorías: Potencial de Calentamiento Global (PCG), Potencial de Agotamiento de Ozono (PAO), Potencial de Eutrofización Acuática (PEA), Potencial de Acidificación (PA), Potencial de Toxicidad Humana (PTH), Potencial de Ecotoxicidad en Agua Dulce (PEcA), Potencial de Ecotoxicidad Terrestre (PEcT), Potencial de Ecotoxicidad Marina (PEcM), Potencial de Oxidación Fotoquímica (POF), Potencial de Agotamiento de los Recursos Abióticos (PARA).

Una vez clasificadas las cargas ambientales inventariadas y correspondientes al ciclo de vida de los procesos incluidos en los escenarios 1, 2 y 3, se aplican los factores de caracterización y que son índices que cuantifican la intensidad del impacto de cada flujo elemental con respecto a un flujo de referencia. Las tablas 3, 4 y 5, corresponden a la caracterización de los distintos impactos ambientales referidos a los escenarios 1, 2 y 3, respectivamente. Los datos se recogen en función de los distintos subsistemas: para el escenario 1 se incluyen, la producción y uso de H_2O_2 , la producción y uso de FeSO_4 y la producción y uso de electricidad; para los escenarios 2 y 3, además de los anteriores subsistemas, se considera el tratamiento biológico, que incluye todo lo relativo a la etapa biológica como al tratamiento posterior de los fangos generados. Para todos los escenarios, se consideran además todos los transportes asociados al ciclo de vida, los cuales se incluyen en el subsistema "transporte"; también se recogen los datos de caracterización del proceso de mineralización del colorante en las etapas química y biológica. Las unidades para cada categoría de impacto son distintas, puesto que también lo son las respectivas unidades de referencia.

De acuerdo con los valores de caracterización asociados al escenario 1 (Tabla 3), el principal impacto ambiental proviene del agua oxigenada utilizada como reactivo, la cual es la que obtiene mayores impactos ambientales en todas las categorías de impacto, salvo en el potencial de eutrofización; en este último caso el subsistema más impactante es el correspondiente a la mineralización del colorante, que da lugar a la liberación de nitrógeno inorgánico al medio; también es relevante la contribución de este subsistema al potencial de calentamiento global, debido a la transformación de carbono orgánico en inorgánico.

Cabe señalar también como un importante impacto ambiental la producción y uso de la electricidad necesaria para llevar a cabo el proceso fotoquímico; debe tenerse en cuenta que en este trabajo se ha considerado un escenario óptimo, en el que se asume que todos los fotones que irradia la lámpara inciden directamente en el fotorreactor, no habiendo pérdidas de radiación. Por otro lado, cabría la posibilidad de realizar el proceso con aprovechamiento de la luz solar, en este caso no habría contribución relativa a consumo de electricidad.

Un aspecto relevante del presente análisis concierne al bajo impacto ambiental del subsistema producción y uso de la sal de hierro (II), lo cual es debido a que esta sal es un subproducto de la fabricación del dióxido de titanio y, consecuentemente, solamente se le asocian las cargas ambientales correspondientes al consumo de energía debido a su purificación.

Con relación a los escenarios 2 y 3, los subsistemas H_2O_2 y electricidad son los que más contribuyen al impacto ambiental. En el escenario 2, y al igual con lo que sucede en el escenario 1, el H_2O_2 es el más relevante en cuanto al impacto en todas las categorías de impacto, excepto en el potencial de eutrofización en el que casi exclusivamente contribuye la mineralización del colorante. En el escenario 3, la contribución de la electricidad al impacto ambiental es mayor que en el 2, a causa del mayor consumo energético en la etapa química, de tal manera que este subsistema es el que contribuye más a los potenciales de ecotoxicidad marina y terrestre, oxidación fotoquímica y acidificación. Cabe destacar por otra parte, el relativo bajo impacto del subsistema correspondiente al tratamiento biológico, que sólo presenta contribuciones re-

levantes en los potenciales de calentamiento global y de oxidación fotoquímica.

Finalmente, en la Figura 3, se comparan los tres escenarios conjuntamente. En esta figura se representa el perfil ambien-

tal (valores para cada impacto ambiental) de los tres escenarios en términos relativos: en cada categoría de impacto se adjudica el valor 100 para el escenario con un valor mayor, relativizándose los valores de los dos restantes escenarios.

Tabla 3. Contribución a las categorías de impacto ambiental de los distintos sub-sistemas del escenario 1.

Categoría de Impacto	Unidad	H ₂ O ₂	FeSO ₄	Electricidad	Transporte	Mineraliz. colorante	Total
PARA	kg Sb eq	4,5 10 ⁻⁶	5,6 10 ⁻⁸	1,0 10 ⁻⁶	1,1 10 ⁻⁷	-	5,7 10 ⁻⁶
PCG	kg CO ₂ eq	5,4 10 ⁻⁴	7,9 10 ⁻⁶	1,4 10 ⁻⁴	1,5 10 ⁻⁵	1,3 10 ⁻⁴	8,4 10 ⁻⁴
PAO	kg CFC-11 eq	5,0 10 ⁻¹¹	3,6 10 ⁻¹³	6,0 10 ⁻¹²	2,4 10 ⁻¹²	-	5,9 10 ⁻¹¹
PTH	kg 1,4-DB* eq	0,0018	9,5 10 ⁻⁶	4,9 10 ⁻⁵	3,3 10 ⁻⁶	-	0,0018
PEcA	kg 1,4-DB eq	1,2 10 ⁻⁴	1,9 10 ⁻⁶	9,3 10 ⁻⁶	1,0 10 ⁻⁶	-	1,3 10 ⁻⁴
PEcM	kg 1,4-DB eq	0,21	0,0062	0,096	1,9 10 ⁻³	-	0,32
PEcT	kg 1,4-DB eq	3,8 10 ⁻⁶	5,4 10 ⁻⁸	2,7 10 ⁻⁶	3,0 10 ⁻⁸	-	6,6 10 ⁻⁶
POF	kg C ₂ H ₄	8,2 10 ⁻⁸	1,9 10 ⁻⁹	3,2 10 ⁻⁸	3,0 10 ⁻⁹	-	1,2 10 ⁻⁷
PA	kg SO ₂ eq	1,8 10 ⁻⁶	4,4 10 ⁻⁸	8,0 10 ⁻⁷	8,4 10 ⁻⁸	-	2,8 10 ⁻⁶
PEA	kg PO ₄ eq	1,7 10 ⁻⁷	2,8 10 ⁻⁹	3,9 10 ⁻⁸	1,8 10 ⁻⁸	1,8 10 ⁻⁶	2,1 10 ⁻⁶

Tabla 4. Contribución a las categorías de impacto ambiental de los distintos sub-sistemas del escenario 2.

Categoría de Impacto	Unidad	H ₂ O ₂	FeSO ₄	Electricidad	Transporte	Trat. Biológ.	Mineraliz. colorante	Total
PARA	kg Sb eq	2,2 10 ⁻⁶	5,6 10 ⁻⁸	7,0 10 ⁻⁷	5,4 10 ⁻⁸	1,4 10 ⁻⁷	-	3,3 10 ⁻⁶
PCG	kg CO ₂ eq	2,7 10 ⁻⁴	7,9 10 ⁻⁶	9,7 10 ⁻⁵	7,7 10 ⁻⁶	8,5 10 ⁻⁵	6,6 10 ⁻⁵	5,5 10 ⁻⁴
PAO	kg CFC-11 eq	2,5 10 ⁻¹¹	3,6 10 ⁻¹³	4,0 10 ⁻¹²	1,2 10 ⁻¹²	3,0 10 ⁻¹²	-	3,4 10 ⁻¹¹
PTH	kg 1,4-DB* eq	8,8 10 ⁻⁴	9,5 10 ⁻⁶	3,3 10 ⁻⁵	1,7 10 ⁻⁶	5,2 10 ⁻⁶	-	9,4 10 ⁻⁴
PEcA	kg 1,4-DB eq	5,9 10 ⁻⁵	1,9 10 ⁻⁶	6,2 10 ⁻⁶	5,0 10 ⁻⁷	1,1 10 ⁻⁶	-	6,9 10 ⁻⁵
PEcM	kg 1,4-DB eq	0,11	0,0062	0,064	9,5 10 ⁻⁴	0,0081	-	0,19
PEcT	kg 1,4-DB eq	1,9 10 ⁻⁶	5,4 10 ⁻⁰⁸	1,8 10 ⁻⁶	1,5 10 ⁻⁸	2,2 10 ⁷	-	4,2 10 ⁻⁶
POF	kg C ₂ H ₄	4,1 10 ⁻⁸	1,9 10 ⁻⁹	2,2 10 ⁻⁸	1,5 10 ⁻⁹	1,6 10 ⁻⁸	-	8,4 10 ⁻⁸
PA	kg SO ₂ eq	9,1 10 ⁻⁷	4,4 10 ⁻⁸	5,4 10 ⁻⁷	4,2 10 ⁻⁸	1,4 10 ⁻⁷	-	1,75 10 ⁻⁶
PEA	kg PO ₄ eq	8,6 10 ⁻⁸	2,8 10 ⁻⁹	2,6 10 ⁻⁸	8,9 10 ⁻⁹	2,4 10 ⁻⁷	1,8 10 ⁻⁶	2,1 10 ⁻⁶

Tabla 5. Contribución a las categorías de impacto ambiental de los distintos sub-sistemas del escenario 3.

Categoría de Impacto	Unidad	H ₂ O ₂	FeSO ₄	Electricidad	Transporte	Trat. Biológ.	Mineraliz. colorante	Total
PARA	kg Sb eq	2,2 10 ⁻⁶	3,2 10 ⁻⁹	1,6 10 ⁻⁶	5,4 10 ⁻⁸	1,7 10 ⁻⁷	-	4,0 10 ⁻⁶
PCG	kg CO ₂ eq	2,7 10 ⁻⁴	4,5 10 ⁻⁷	2,1 10 ⁻⁴	7,7 10 ⁻⁶	9,2 10 ⁻⁵	5,8 10 ⁻⁵	6,5 10 ⁻⁴
PAO	kg CFC-11 eq	2,5 10 ⁻¹¹	2,1 10 ⁻¹⁴	9,0 10 ⁻¹²	1,2 10 ⁻¹²	3,1 10 ⁻¹²	-	3,8 10 ⁻¹¹
PTH	kg 1,4-DB* eq	8,8 10 ⁻⁴	5,5 10 ⁻⁷	7,4 10 ⁻⁵	1,7 10 ⁻⁶	5,5 10 ⁻⁶	-	9,6 10 ⁻⁴
PEcA	kg 1,4-DB eq	5,9 10 ⁻⁵	1,1 10 ⁻⁷	1,4 10 ⁻⁵	5,0 10 ⁻⁷	1,1 10 ⁻⁶	-	7,4 10 ⁻⁵
PEcM	kg 1,4-DB eq	0,11	3,6 10 ⁻⁴	0,15	9,5 10 ⁻⁴	0,0085	-	0,26
PEcT	kg 1,4-DB eq	1,9 10 ⁻⁶	3,1 10 ⁻⁹	4,1 10 ⁻⁶	1,5 10 ⁻⁸	2,3 10 ⁻⁷	-	6,3 10 ⁻⁶
POF	kg C ₂ H ₄	4,1 10 ⁻⁸	1,1 10 ⁻¹⁰	4,8 10 ⁻⁸	1,5 10 ⁻⁹	1,8 10 ⁻⁸	-	1,1 10 ⁻⁷
PA	kg SO ₂ eq	9,1 10 ⁻⁷	2,6 10 ⁻⁹	1,2 10 ⁻⁶	4,2 10 ⁻⁸	1,6 10 ⁻⁷	-	2,3 10 ⁻⁶
PEA	kg PO ₄ eq	8,6 10 ⁻⁸	1,6 10 ⁻¹⁰	5,9 10 ⁻⁸	8,9 10 ⁻⁹	2,6 10 ⁻⁷	1,9 10 ⁻⁶	2,2 10 ⁻⁶

*1,4-Diclorobenceno

Los resultados representados en la Figura 3, muestran claramente que el escenario 1, es decir, mineralización del colorante por medio de la reacción de foto-Fenton es la que causa mayores impactos ambientales en todas las categorías de impacto que cualquiera de los escenarios 2 y 3, que corresponden a llevar a cabo la mineralización del colorante utilizando el acoplamiento etapa química con tratamiento biológico. Por otra parte, la comparación entre los escenarios 2 y 3 indica que la disminución en el consumo de sal de Fe(II) (escenario 3), conduce a un mayor tiempo de tratamiento químico y, en consecuencia, a un mayor gasto eléctrico. Esto se traduce en un significativo mayor impacto ambiental en todas las categorías de impacto, salvo en los potenciales de toxicidad humana y eutrofización para los que se obtienen valores muy similares. En consecuencia, el escenario que obtiene mejores resultados desde el punto de vista ambiental es el 2.

Conclusiones

Se ha realizado la evaluación ambiental del proceso de degradación por foto-Fenton del colorante Procion Red, por medio de la aplicación del Análisis del Ciclo de Vida. Los resultados obtenidos muestran de forma clara, que el mayor impacto ambiental de dicho proceso se debe al consumo de agua oxigenada. Una alternativa de menor impacto, corresponde al acoplamiento del proceso de foto-Fenton con un tratamiento biológico, con ello se logra reducir el consumo de oxidante, así como también el consumo energético al disminuir el tiempo de exposición a la luz UVA

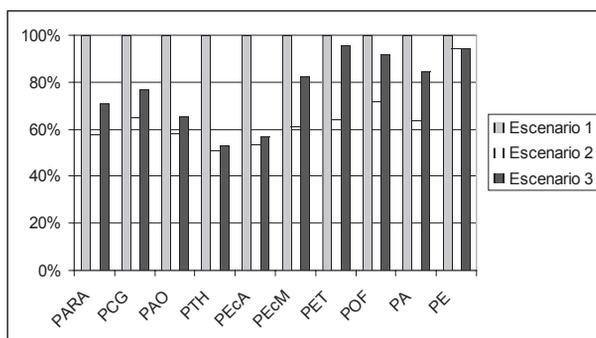


Figura 3. Comparación ambiental de los tres escenarios.

utilizada en el proceso de foto-Fenton. Los resultados de la aplicación del ACV a este nuevo escenario confirman la disminución del impacto ambiental a través de una reducción en el valor obtenido en todas las categorías de impacto analizadas. En este sentido, cabe señalar el bajo impacto que presenta el tratamiento biológico en las diferentes categorías de impacto consideradas. Finalmente, se ha valorado la posibilidad de disminuir la concentración de catalizador (Fe(II)) en el acoplamiento foto-Fenton-tratamiento biológico. Esta reducción trae como consecuencia un aumento del tiempo de tratamiento químico para lograr un efluente biodegradable al cual se pueda aplicar el tratamiento biológico, y como consecuencia de ello, se produce un mayor impacto ambiental.

Agradecimientos

El presente trabajo ha sido realizado en el marco del proyecto CTQ 2005-02808, financiado por el Ministerio de Educación y Ciencia.

Bibliografía

[1] P. Anastas, J. Warner, *Green Chemistry Theory and Practice*. Oxford University Press. Oxford. **1998**.
 [2] X. Domènech, *Química Verde*, Ed. Rubes, Barcelona. **2005**.
 [3] J. C. Constable, A. D. Curzons, V. L. Cunningham, *Green Chemistry*, **2002**, 4, 521-527.
 [4] A. D. Curzons, D. J. C. Constable, D. N. Mortimer, V. L. Cunningham, 2001. *Green Chemistry*, **2001**, 3, 1-6.
 [5] M. Eissen, J. O. Metzger. *Chemistry - A European Journal*, **2002**, 8, 3580-3585.
 [6] IChemE. 2002. The sustainability metrics. Sustainable development progress metrics. Institution of Chemical Engineers. www.icheme.org/sustainability/
 [7] V. H. Hoffmann, K. Hungerbühler, G. J. Mc Rae. *Ind. Eng. Chem. Res.*, **2001**, 40, 2513-4524.
 [8] M. Narodowski, C. Krottscheck *Waste Management*, **2000**, 20, 599-603.

[9] C. Peele, *Substance Flow Analysis and Material Flow Accounts*. Workshop "Framing a Future Chemicals Policy". Chemicals Policy Initiative of the Lowell Center for Sustainable production. Boston, april 28-29, **2005**.
 [10] ISO 14.040: Environmental management -Life cycle assessment-Principles and Framework, Switzerland, **1997**.
 [11] X. Domènech, J. A. Ayllón, J. Peral, J. Rieradevall, *Env. Sci. Technol.* **2002**, 36, 5517-5520.
 [12] I. Muñoz, J. Rieradevall, F. Torrades, J. Peral, X. Domènech, *Solar Energy*, **2005**, 79, 369-375.
 [13] I. Muñoz, J. Rieradevall, F. Torrades, J. Peral, X. Domènech, *Chemosphere*, **2006**, 62, 9-16.
 [14] R. Andreozzi, V. Caprio, A. Insola, R. Marotta. *Catalysis Today*, **1999**, 53, 51-59.
 [15] J. A. Pignatello, E. Oliveros, A. Mackay, *Critical Reviews in Env.Sci. and Technol.*, **2006**, 36, 1-84.
 [16] J. García-Montaña, F. Torrades, J. A. García-Hortal, X. Domènech, J. Peral, *J. Haz. Mat.*, **2006**, 134, 220-229.
 [17] IDAE, Boletín IDAE: Eficiencia energética y energías renovables. Ministerio de Ciencia y Tecnología, Madrid, **2002**.
 [18] Ecoinvent www.ecoinvent.ch. Base de datos del programa SIMAPRO 6.0, **2005**.
 [19] K. Habersatter, Koiventare für verpackungen. Bundesamt für umwelt, Wald, und Landschaft. Schriftenreihe Umwelt. Bern, **1996**.
 [20] Metcalf-Eddy Inc., Ingeniería de aguas residuales: tratamiento, vertido y reutilización. 3º ed., Madrid. McGraw Hill., **1995**.
 [21] OTV., Traiter et valoriser les boues. Infinités Communication, Rennemoule, France, **1997**.
 [22] BUWAL (Swiss Federal Environmental Protection agency) Inventaires écologiques relatifs aux emballages- Cahier de l'environnement 250. Vol 2, Bern, Switzerland, **1998**.
 [23] C. Jiménez-González, R.M. Overcash, A. Curzons, *J. Chem. Technol. Biotechnol.*, **2001**, 70, 707-716.
 [24] G. Houillon, O. Jolliet, *J. Cleaner Prod.*, **2005**, 13, 287-299.
 [25] X. Domènech, J. Rieradevall, P. Fullana, Application of LCA to landfilling, *Int. J. LCA*, **1997**, 2, 141-144.
 [26] K. Mingarini, System analysis of organic waste with emphasis on modelling of the incineration and the landfilling process. PhD thesis. Dept. of Environmental Technology and Work Science, KTH. Stocholm, **1996**.
 [27] G. Tchobanoglous, H. Theisen, S. Vigil, Integrated solid waste management: engineering principles and management issues. McGraw-Hill. Singapore., **1993**.
 [28] P. Nielsen, M. Hauschild, Product specific emissions from municipal solid waste landfills. Part I: Landfill model, *Int. J. LCA*, **1998**, 3, 158-168.
 [29] J. Bez, G. Goldhan, M. Heyde, Waste treatment in product specific life cycle inventories. An approach of material-related modelling. Part II: sanitary landfill. *Int. J. LCA*, **1998**, 3, 100-105.