

CNEA AC 30/75

COMISION NACIONAL DE ENERGIA ATOMICA
DEPENDIENTE DE LA PRESIDENCIA DE LA NACION

CENTRAL NUCLEAR EN ATUCHA

CONCENTRACION DE AGUA PESADA EN UNA MEZCLA
MODOS DE EXPRESARLA

E. Díaz

CONCENTRACION DE AGUA PESADA EN UNA MEZCLA. MODOS DE EXPRESARLA.

La concentración se expresa generalmente como la relación molar:

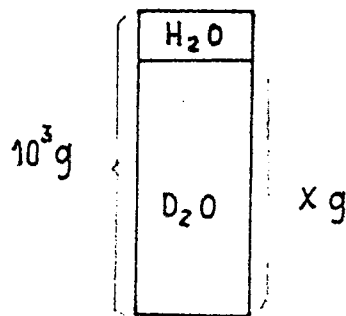


Fig. 1

$$\frac{D \text{ (mol)}}{D \text{ (mol)} + H \text{ (mol)}} \cdot 100 \quad 1)$$

numéricamente es igual a la relación molar:

$$\frac{D_2O \text{ (mol)}}{D_2O \text{ (mol)} + H_2O \text{ (mol)}} \cdot 100 \quad 2)$$

y resulta ser la mitad de las relaciones molares:

$$\frac{HD}{HD + H_2} \cdot 100 \quad 3) \quad \text{o} \quad \frac{HDO}{HDO + H_2O} \cdot 100 \quad 4)$$

Para altas concentraciones de agua pesada la especie predominante es D_2O por lo que se utiliza la 2).

Si en una mezcla se encuentran por ejemplo 20 moles de D_2O y 1 mol de H_2O , la concentración molar será:

$$m = \frac{20}{20 + 1} \cdot 100 = 95,23 \%$$

Sin embargo, a veces se conoce el peso del D_2O en la mezcla y se expresa la concentración como % en peso. En este caso la concentración (fig. 1) está dada por:

$$W = \frac{x}{1000} \cdot 100 = \frac{x}{10} \%$$

para 1 kilogramo de mezcla o'

$$w = \frac{x}{x + y} \cdot 100$$

siendo x [g] = cantidad en peso de D_2O
 y [g] = cantidad en peso de H_2O

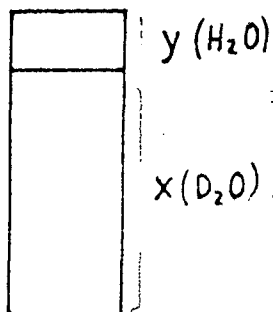
Así si una mezcla posee 100 gr de D_2O y 2 gr de H_2O :

$$x = 100 \quad y = 2$$

$$W = \frac{100}{100 + 2} = 98,03 \% \text{ (en peso)}$$

Cuando se quiere pasar de una concentración expresada en % en peso ($W\%$) a % molar ($m\%$) es necesario conocer la expresión que vincula a ambas. Si se toma en cuenta la figura 2, que representa una mezcla que contiene x gramos de D_2O e y gramos de H_2O se tiene:

$$W \% = \frac{x}{x + y} \cdot 100 \quad 5)$$



$$m \% = \frac{x/20}{x/20 + y/18} \cdot 100 \quad 6)$$

$x(D_2O)$ 20 representa un mol de D_2O y 18 un mol de H_2O .

Despejando x de la expresión 5):

$$x = \frac{y \cdot w}{100 - w}$$

reemplazando este valor en la 6):

$$m\% = \frac{\frac{y \cdot w}{100 - w}}{\frac{y \cdot w}{20(100 - w)} + \frac{y}{18}} \cdot 100$$

operando:

$$m \% = \frac{w \%}{w \% + 1,111 (100 - w \%)} \cdot 100 \quad 7)$$

puede despejarse w%:

$$w\% = \frac{111,1 \text{ m}\%}{100 + 0,111 \text{ m}\%} \quad 8)$$

En la tabla I se encuentran calculadas las equivalencias dadas por las expresiones 7) y 8).

Otra forma en que se suele expresar la concentración de agua pesada es en volumen por ciento.

$$\text{Vol}\% \text{ D}_2\text{O} = \frac{\text{Vol D}_2\text{O}}{\text{Vol D}_2\text{O} + \text{Vol H}_2\text{O}} \cdot 100 \quad 9)$$

si se busca la relación entre volumen por ciento (Vol% D₂O) y Mol% D₂O conviene reemplazar en la 9):

$$\text{Vol D}_2\text{O} = V_2 N_2 = \frac{M_2}{d_2} \cdot N_2$$

$$\text{Vol H}_2\text{O} = V_1 N_1 = \frac{M_1}{d_1} \cdot N_1$$

$$V_2 \left[\frac{\text{ml}}{\text{mol}} \right] : \text{volumen molecular del D}_2\text{O}$$

$$V_1 \left[\frac{\text{ml}}{\text{mol}} \right] : \text{volumen molecular del H}_2\text{O}$$

$$M_2 \left[\frac{\text{g}}{\text{mol}} \right] : \text{peso molecular del D}_2\text{O}$$

$$M_1 \left[\frac{\text{g}}{\text{mol}} \right] : \text{peso molecular del H}_2\text{O}$$

$$N_2 \left[- \right] : \text{fracción molar de D}_2\text{O en la mezcla}$$

$$N_1 \left[- \right] : \text{fracción molar de H}_2\text{O en la mezcla}$$

$d_2 \left[\frac{\text{g}}{\text{ml}} \right]$: densidad del D_2O

$d_1 \left[\frac{\text{g}}{\text{ml}} \right]$: densidad del H_2O

$$\text{Adem\'as } N_1 + N_2 = 1 \therefore N_2 = 1 - N_1$$

$$N_1 = 1 - N_2$$

$$\text{Vol\% } \text{D}_2\text{O} = \frac{\frac{M_2}{d_2} \cdot N_2 \cdot (100)}{\frac{M_2}{d_2} \cdot N_2 + \frac{M_1}{d_1} \cdot N_1} =$$

$\text{Vol\% } \text{D}_2\text{O} = \frac{\frac{M_2}{d_2} \cdot N_2}{\frac{M_2}{d_2} \cdot N_2 + \frac{M_1(1-N_2)}{d_1}} \cdot 100$	10)
---	-----

Reemplazando por valores a 25°C

$$M_2 = 20,02836 \text{ g/mol}$$

$$d_2 = 1,10451 \text{ g/ml}$$

$$M_1 = 18,01571 \text{ g/mol}$$

$$d_1 = 0,997058 \text{ g/ml}$$

$$\frac{M_2}{d_2} = 18,1332 \text{ ml/mol}$$

$$\frac{M_1}{d_1} = 18,0688 \text{ ml/mol}$$

La 10) queda:

$$\text{Vol\% D}_2\text{O} = \frac{18,1332 N_2}{18,1332 N_2 + 18,0688 (1-N_2)} \cdot 100 \quad 11)$$

operando:

$$\text{Vol\%} = \frac{1}{1 - K \left(1 - \frac{1}{N_2}\right)} \cdot 100 \quad 12)$$

$$\text{con } K = \frac{18,0688}{18,1332} = 0,9964$$

Teniendo en cuenta además:

$$m\% = N_2 \cdot 100$$

$$\text{Vol\% D}_2\text{O} = \frac{m\%}{\frac{m\%}{100} (1-K) + K} \quad 13)$$

Inversamente

$$m\% \text{ D}_2\text{O} = \frac{K V\%}{100 + V\% (K-1)} \cdot 100 \quad 14)$$

En la tabla II se encuentran calculados los valores dados por la 13) y el error que se comete al expresar Vol% en lugar de mol%. Puede observarse que en concentraciones elevadas el error es muy pequeño y es prácticamente igual hablar de mol% ó Vol%.

TABLA I
Mol % vs w %
(98 Mol % a 99.9 Mol %)

Mol %	.00	.01	.02	.03	.04	.05	.06	.07	.08	.09
98.0	98.20	98.21	98.22	98.22	98.23	98.24	98.25	98.26	98.27	98.28
98.1	98.29	98.30	98.31	98.31	98.32	98.33	98.34	98.35	98.36	98.37
98.2	98.38	98.39	98.40	98.41	98.41	98.42	98.43	98.44	98.45	98.46
98.3	98.47	98.48	98.49	98.50	98.50	98.51	98.52	98.53	98.54	98.55
98.4	98.56	98.57	98.58	98.59	98.59	98.60	98.61	98.62	98.63	98.64
98.5	98.65	98.66	98.67	98.68	98.68	98.69	98.70	98.71	98.72	98.73
98.6	98.74	98.75	98.76	98.77	98.77	98.78	98.79	98.80	98.81	98.82
98.7	98.83	98.84	98.85	98.86	98.87	98.87	98.88	98.89	98.90	98.91
98.8	98.92	98.93	98.94	98.95	98.96	98.96	98.97	98.98	98.99	99.00
98.9	99.01	99.02	99.03	99.04	99.05	99.05	99.06	99.07	99.08	99.09
99.0	99.10	99.11	99.12	99.13	99.14	99.14	99.15	99.16	99.17	99.18
99.1	99.19	99.20	99.21	99.22	99.23	99.23	99.24	99.25	99.26	99.27
99.2	99.28	99.29	99.30	99.31	99.32	99.32	99.33	99.34	99.35	99.36
99.3	99.37	99.38	99.39	99.40	99.41	99.41	99.42	99.43	99.44	99.45
99.4	99.46	99.47	99.48	99.49	99.50	99.50	99.51	99.52	99.53	99.54
99.5	99.55	99.56	99.57	99.58	99.59	99.60	99.60	99.61	99.62	99.63
99.6	99.64	99.65	99.66	99.67	99.68	99.69	99.69	99.70	99.71	99.72
99.7	99.73	99.74	99.75	99.76	99.77	99.78	99.78	99.79	99.80	99.81
99.8	99.82	99.83	99.84	99.85	99.86	99.87	99.87	99.88	99.89	99.90
99.9	99.91	99.92	99.93	99.94	99.95	99.96	99.96	99.97	99.98	99.989

TABLA I
Mol % vs w %
(0 Mol % a 100 Mol %)

Mol %	w %
0	0,00
1	1,109
10	10,98
20	21,73
30	32,25
40	42,55
50	52,62
60	62,49
70	72,16
80	81,63
90	90,90
100	100,00

TABLA II

m_2	N_2	$V \%$	$\epsilon \% = \frac{V \% - m_2}{m_2} \cdot 100$
0,01	0,0001	0,010036	0,3612
0,5	0,005	0,50179	0,3580
1,0	0,01	1,00357	0,357
10,0	0,1	10,0325	0,325
20,0	0,2	20,0577	0,2885
30,0	0,3	30,0757	0,2523
40,0	0,4	40,0865	0,21625
50,0	0,5	50,0901	0,182
60,0	0,6	60,0865	0,1441
70,0	0,7	70,0756	0,108
80,0	0,8	80,0576	0,072
90,0	0,9	90,0324	0,036
95,0	0,95	95,0171	0,018
99,75	0,9975	99,7509	0,0009
100,0	1,000	100,00	0

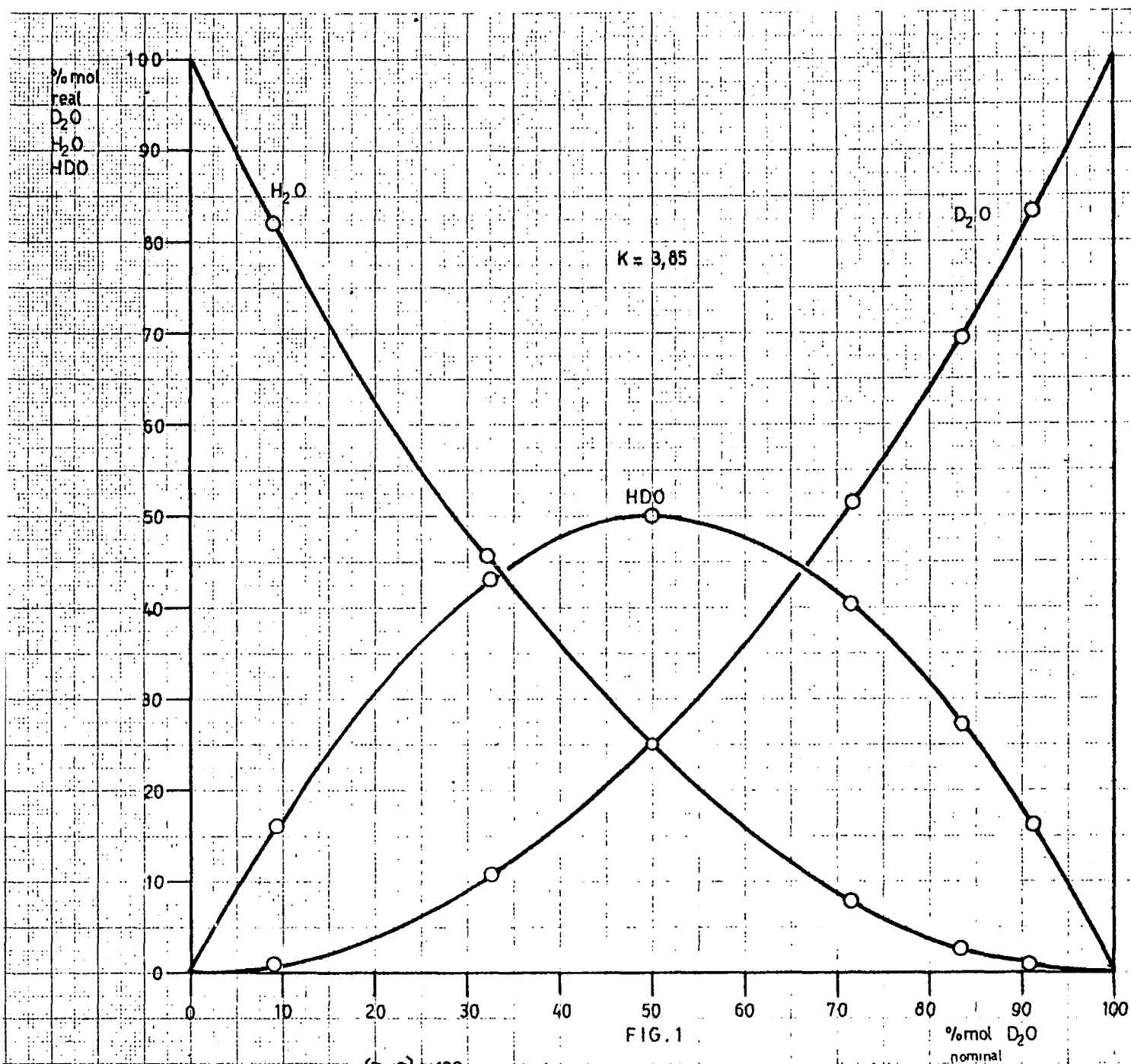


FIG. 1

$$\% \text{ mol real } D_2O = \frac{(D_2O) \cdot 100}{(D_2O) + (H_2O) + (HDO)}$$

$$\% \text{ mol real } H_2O = \frac{(H_2O) \cdot 100}{(D_2O) + (H_2O) + (HDO)}$$

$$\% \text{ mol real } HDO = \frac{HDO \cdot 100}{D_2O + H_2O + HDO}$$

$$\% \text{ mol nominal } D_2O = \frac{(D_2O) \cdot 100}{(D_2O) + (H_2O)}$$

(antes de la mezcla)